Errata

勘误表

* 勘误表配合《矩阵力量》纸质版图书。勘误表不断更新，请大家注意下载最新版本。

Preface

前言

感谢

首先感谢大家的信任。

作者仅仅是在学习应用数学科学和机器学习算法时，多读了几本数学书，多做了些思考和知识整理而已。知者不言，言者不知。知者不博，博者不知。水平有限，把自己有限所学所思斗胆和大家分享，作者权当无知者无畏。希望大家在 B 站视频下方和 Github 多提意见，让这套书成为作者和读者共同参与创作的优质作品。

特别感谢清华大学出版社的栾大成老师。从选题策划、内容创作、装帧设计，栾老师事无巨细、一路陪伴。每次和栾老师交流，我都能感受到他对优质作品的追求、对知识分享的热情。

出来混总是要还的

曾几何时，考试是我们学习数学的唯一动力。考试是头悬梁的绳，是锥刺股的锥。我们中的绝大多数人从小到大为各种考试埋头题海，数学味同嚼蜡，甚至让人恨之入骨。

数学给我们带来了无尽的折磨。我们憎恨数学，恐惧数学，恨不得一走出校门就把数学抛之脑后、老死不相往来。

可悲可笑的是，我们其中很多人可能会在毕业的五年或十年以后，因为工作需要，不得不重新学习微积分、线性代数、概率统计，悔恨当初没有学好数学、走了很多弯路、没能学以致用，从而迁怒于教材和老师。

这一切不能都怪数学，值得反思的是我们学习数学的方法、目的。

再给自己一个学数学的理由

为考试而学数学，是被逼无奈的举动。而为数学而数学，则又太过高尚而遥不可及。

相信对于绝大部分的我们来说，数学是工具、是谋生手段，而不是目的。我们主动学数学，是想用数学工具解决具体问题。

现在，这套书给大家一个“学数学、用数学”的全新动力——数据科学、机器学习。

数据科学和机器学习已经深度融合到我们生活的方方面面，而数学正是开启未来大门的钥匙。不是所有人生来都握有一副好牌，但是掌握“数学 + 编程 + 机器学习”绝对是王牌。这次，学习数学不再是为了考试、分数、升学，而是投资时间、自我实现、面向未来。

未来已来，你来不来？

本套丛书如何帮到你

为了让大家学数学、用数学，甚至爱上数学，作者可谓颇费心机。在创作这套书时，作者尽量克服传统数学教材的各种弊端，让大家学习时有兴趣、看得懂、有思考、更自信、用得着。

为此，丛书在内容创作上突出以下几个特点：

- **数学 + 艺术**——全彩图解，极致可视化，让数学思想跃然纸上、生动有趣、一看就懂，同时提高大家的数据思维、几何想象力、艺术感；
- **零基础**——从零开始学习 Python 编程，从写第一行代码到搭建数据科学和机器学习应用；
- **知识网络**——打破数学板块之间的壁垒，让大家看到数学代数、几何、线性代数、微积分、概率统计等板块之间的联系，编织一张绵密的数学知识网络；
- **动手**——授人以鱼不如授人以渔，和大家一起写代码、用 Streamlit 创作数学动画、交互 App；
- **学习生态**——构造自主探究式学习生态环境“微课视频 + 纸质图书 + 电子图书 + 代码文件 + 可视化工具 + 思维导图”，提供各种优质学习资源；
- **理论 + 实践**——从加减乘除到机器学习，丛书内容安排由浅入深、螺旋上升，兼顾理论和实践；在编程中学习数学，学习数学时解决实际问题。

虽然本书标榜“从加减乘除到机器学习”，但是建议读者朋友们至少具备高中数学知识。如果读者正在学习或曾经学过大学数学 (微积分、线性代数、概率统计)，这套书就更容易读了。

聊聊数学

数学是工具。锤子是工具，剪刀是工具，数学也是工具。

数学是思想。数学是人类思想的高度抽象的结晶体。在其冷酷的外表之下，数学的内核实际上就是人类朴素的思想。学习数学时，知其然，更要知其所以然。不要死记硬背公式定理，理解背后的数学思想才是关键。如果你能画一幅图、用大白话描述清楚一个公式、一则定理，这就说明你真正理解了它。

数学是语言。就好比世界各地不同种族有自己的语言，数学则是人类共同的语言和逻辑。数学这门语言极其精准、高度抽象，放之四海而皆准。虽然我们中绝大多数人没有被数学女神选中，不能为人类的对数学认知开疆扩土；但是，这丝毫不妨碍我们使用数学这门语言。就好比，我们不会成为语言学家，我们完全可以使用母语和外语交流。

数学是体系。代数、几何、线性代数、微积分、概率统计、优化方法等等，看似一个个孤岛，实际上都是数学网络的一条条织线。建议大家学习时，特别关注不同数学板块之间的联系，见树，更要见林。

数学是基石。拿破仑曾说“数学的日臻完善和这个国强民富息息相关。”数学是科学进步的根基，是经济繁荣的支柱，是保家卫国的武器，是探索星辰大海的航船。

数学是艺术。数学和音乐、绘画、建筑一样，都是人类艺术体验。通过可视化工具，我们会在看似枯燥的公式、定理、数据背后，发现数学之美。

数学是历史，是人类共同记忆体。”历史是过去，又属于现在，同时在指引未来。”数学是人类的集体学习思考，她把人的思维符号化、形式化，进而记录、积累、传播、创新、发展。从甲

骨、泥板、石板、竹简、木牍、纸草、羊皮卷、活字印刷、纸质书，到数字媒介，这一过程持续了数千年，至今绵延不息。

数学是无穷无尽的**想象力**，是人类的**好奇心**，是自我挑战的**毅力**，是一个接着一个的**问题**，是看似荒诞不经的**猜想**，是一次次胆大包天的**批判性思考**，是敢于站在前人的臂膀之上的**勇气**，是孜孜不倦地延展人类认知边界的**不懈努力**。

家园、诗、远方

诺瓦利斯曾说："哲学就是怀着一种乡愁的冲动到处去寻找家园。"

在纷繁复杂的尘世，数学纯粹的就像精神的世外桃源。数学是，一束光，一条巷，一团不灭的希望，一股磅礴的力量，一个值得寄托的避风港。

打破陈腐的锁链，把功利心暂放一边，我们一道怀揣一分乡愁、心存些许诗意、踩着艺术维度，投入数学张开的臂膀，驶入她色彩斑斓、变幻无穷的深港，感受久违的归属，一睹更美、更好的远方。

Acknowledgement
致谢

To my parents.

谨以此书献给我的母亲父亲

How to Use the Book

使用本书

丛书资源

本系列丛书提供的配套资源有以下几个：

- 纸质图书；
- PDF 文件，方便移动终端学习；请大家注意，纸质图书经过出版社五审五校修改，内容细节上会和 PDF 文件有出入。
- 每章提供思维导图，纸质书提供全书思维导图海报；
- Python 代码文件，直接下载运行，或者复制、粘贴到 Jupyter 运行；
- Python 代码中有专门用 Streamlit 开发数学动画和交互 App 的文件；
- 微课视频，强调重点、讲解难点、聊聊天。

在纸质书中为了方便大家查找不同配套资源，作者特别设计了如下几个标识。

微课视频

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：

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

微课视频是以“聊天”的方式，和大家探讨某个数学话题的重点内容，讲讲代码中可能遇到的难点，甚至侃侃历史、说说时事、聊聊生活。

本书配套的微课视频目的是引导大家自主编程实践、探究式学习，并不是“照本宣科”。

纸质图书上已经写得很清楚的内容，视频课程只会强调重点。需要说明的是，图书内容不是视频的“逐字稿”。

代码文件

本系列丛书的 Python 代码文件下载地址为：

- https://github.com/Visualize-ML

Python 代码文件会不定期修改，请大家注意更新。图书配套的 PDF 文件和勘误也会上传到这个 GitHub 账户。因此，建议大家注册 GitHub 账户，给书稿文件夹标星 (star) 或分支克隆 (fork)。

考虑再三，作者还是决定不把代码全文印在纸质书中，以便减少篇幅，节约用纸。

本书编程实践例子中主要使用“鸢尾花数据集”，数据来源是 Scikit-learn 库、Seaborn 库。此外，系列丛书封面设计致敬梵高《鸢尾花》，要是给本系列丛书起个昵称的话，作者乐见“鸢尾花书”。

App 开发

本书几乎每一章都至少有一个用 Streamlit 开发的 App，用来展示数学动画、数据分析、机器学习算法。

Streamlit 是个开源的 Python 库，能够方便快捷搭建、部署交互型网页 App。Streamlit 非常简单易用、很受欢迎。Streamlit 兼容目前主流的 Python 数据分析库，比如 NumPy、Pandas、Scikit-learn、PyTorch、TensorFlow 等等。Streamlit 还支持 Plotly、Bokeh、Altair 等交互可视化库。

本书中很多 App 设计都采用 Streamlit + Plotly 方案。此外，本书专门配套教学视频手把手和大家一起做 App。

大家可以参考如下页面，更多了解 Streamlit：

- https://streamlit.io/gallery
- https://docs.streamlit.io/library/api-reference

实践平台

本书作者编写代码时采用的 IDE (integrated development environment) 是 Spyder，目的是给大家提供简洁的 Python 代码文件。

但是，建议大家采用 JupyterLab 或 Jupyter notebook 作为本系列丛书配套学习工具。

简单来说，Jupyter 集合“浏览器 + 编程 + 文档 + 绘图 + 多媒体 + 发布”众多功能与一身，非常适合探究式学习。

运行 Jupyter 无需 IDE，只需要浏览器。Jupyter 容易分块执行代码。Jupyter 支持 inline 打印结果，直接将结果图片打印在分块代码下方。Jupyter 还支持很多其他语言，比如 R 和 Julia。

使用 markdown 文档编辑功能，可以编程同时写笔记，不需要额外创建文档。Jupyter 中插入图片和视频链接都很方便。此外，还可以插入 Latex 公式。对于长文档，可以用边栏目录查找特定内容。

Jupyter 发布功能很友好，方便打印成 HTML、PDF 等格式文件。

Jupyter 也并不完美，目前尚待解决的问题有几个。Jupyter 中代码调试不方便，需要安装专门插件 (比如 debugger)。Jupyter 没有 variable explorer，要么 inline 打印数据，要么将数据写到 csv 或 Excel 文件中再打开。图像结果不具有交互性，比如不能查看某个点的值，或者旋转 3D 图形，可以考虑安装 (jupyter-matplotlib)。注意，利用 Altair 或 Plotly 绘制的图像支持交互功能。对于自定义函数，目前没有快捷键直接跳转到其定义。但是，很多开发者针对这些问题都开发了插件，请大家留意。

大家可以下载安装 Anaconda，JupyterLab、Spyder、PyCharm 等常用工具都集成在 Anaconda 中。下载 Anaconda 的地址为：

◀ https://www.anaconda.com/

学习步骤

大家可以根据自己的偏好制定学习步骤，本书推荐如下步骤。

学完每章后，大家可以在平台上发布自己的 Jupyter 笔记，进一步听取朋友们的意见，共同进步。这样做还可以提高自己学习的动力。

意见建议

欢迎大家对本系列丛书提意见和建议，丛书专属邮箱地址为：

◀ jiang.visualize.ml@gmail.com

也欢迎大家在 B 站视频下方留言互动。

Contents

目录

0 Introduction 绪论

图解 + 编程 + 实践 + 数学板块融合

0.1 本册在全套丛书的定位

本系列丛书有三大板块——编程、数学、实践。数据科学、机器学习各种算法离不开数学，本册《矩阵力量》是“数学”板块的第二本，主要介绍常用线性代数工具。任何数学工具想要从一元推广到多元，比如多元微积分、多元统计，都绕不开线性代数。

大家在学习《矩阵力量》之前，请先完成《数学要素》一册的学习。《数学要素》一册见缝插针地讲解了很多线性代数概念，特别是“鸡兔同笼三部曲”给本书主要内容埋了伏笔。《数学要素》还介绍了很多 Python 编程工具，这些都是《矩阵力量》的基础。

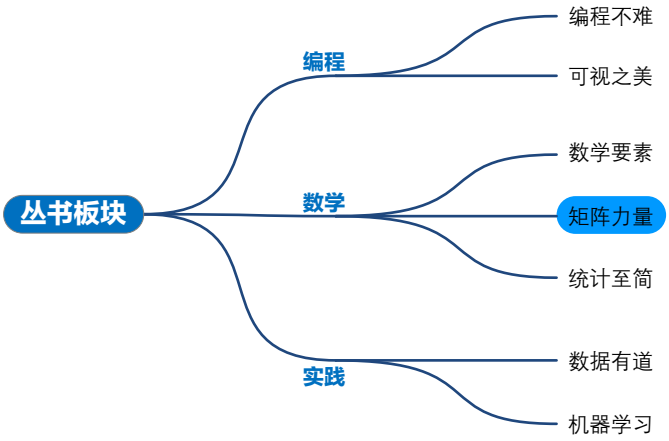


图 1. 本系列丛书板块布局

0.2 结构：7 大板块

本书可以归纳为 7 大板块——向量、矩阵、向量空间、矩阵分解、微积分、空间几何、数据。

图 2.《矩阵力量》板块布局

向量

“向量”部分首先介绍向量这个多面手在数据、矩阵、几何、统计、空间等领域扮演的角色，第 2 章讲解各种和向量相关的运算法则。

第 3 章专门讲解向量范数，向量范数无非就是一种描述向量“大小”的尺度。请大家格外注意 L^p 范数和“距离度量”、“超椭圆”等数学概念的联系。

矩阵

矩阵两个大功能：表格、映射。“矩阵”这个版块首先介绍了围绕矩阵的各种计算。各种计算中，矩阵乘法居于核心位置。请大家务必掌握矩阵乘法的两个视角。

此外，第 5 章介绍了大量矩阵乘法形态，以及它们的应用场合。希望大家一边学习本书后续内容，一边回顾第 5 章矩阵乘法形态。第 6 章介绍分块矩阵，请大家格外留意分块矩阵的乘法规则。

向量空间

“向量空间”这个版块主要有三大主题——空间、几何转换、正交投影。

第 7 章中我们用 RGB 给向量空间“涂颜色”，帮助大家理解向量空间相关概念。第 8 章讲解以线性变换为主的几何变换，大家务必掌握平移、投影、旋转、缩放这三类几何变换。鉴于其重要性，接下来用两章内容讲解正交投影。第 9 章主要从几何视角介绍正交投影，第 10 章从数据角度讲解。

第 10 章是本书的一个分水岭，这章使用了前九章大部分线性代数工具，并开启了“矩阵分解”这个版块。因此，如果大家阅读第 10 章感到吃力，请务必重温前九章内容。

矩阵分解

“矩阵分解”好比代数中的“因式分解”，矩阵分解也可以理解为特殊的矩阵乘法。矩阵分解是很多数据科学、机器学习算法的基础，因此本书分配了六章篇幅讲解矩阵分解。大家务必要掌握特征值分解 (第 13、14 章) 和奇异值分解 (第 15、16 章)。

学习这六章的“诀窍”就是——几何视角！大家要从几何视角理解不同矩阵分解。本书之后还会介绍理解矩阵分解的其他视角，比如优化视角、空间视角、数据视角等等。

微积分

有了线性代数工具，我们可以轻松把微积分从一元推广到多元。本书第 17 章主要讲解多元微分，请大家务必掌握梯度向量、方向性导数、多元泰勒展开这三个工具。

第 18 章则接力《数学要素》第 19 章，继续探讨如何用拉格朗日乘子法解决“有约束优化问题”。此外，第 18 章还提供了观察特征值分解、奇异值分解、正交投影的“优化视角”。

空间几何

第 19、20、21 三章主要介绍如何用线性代数工具解决空间几何问题。第 19 章将直线扩展到了超平面。第 20 章用线性代数工具重新分析圆锥曲线，请大家格外注意“缩放 → 旋转 → 平移”这一连串几何操作，以及它们和多元高斯分布概率密度函数的关系。第 21 章将曲面和正定性联系起来，并介绍正定性在优化问题求解中扮演的角色。

数据

本书最后四章以数据收尾。第 22 章用线性代数工具再次解释了统计中重要概念。

第 23、24、25 三章是“数据三部曲”。第 23 章从奇异值分解引出四个空间。第 24 章从数据、几何、空间、优化等视角总结了本书前文介绍的矩阵分解。第 25 章展望了数据及线性代数工具在数据科学和机器学习领域的几个应用场景。

这部分内容既是本册所有核心内容的总结，也为《统计至简》一册做了内容预告和铺垫。

0.3 特点：多重视角

《矩阵力量》一册最大特点就是，跳出传统线性“代数”的框架，从第 1 章开始就引入“多重视角”思维方式。

本书中常用的视角有：数据视角、几何视角、空间视角、优化视角、统计视角等等。“多重视角”把代数、线性代数、几何、解析几何、概率统计、微积分、优化方法等编织成一张绵密的网络。作者认为“多重视角”是掌握线性代数各种工具的最佳途径，没有之一。

本书在内容安排上会显得“瞻前顾后”、“左顾右盼”，因为线性代数虽然是“代数”，但是她的手却紧紧牵着数据、几何、微积分、优化、概率统计。因此，为了让大家看到线性代数的“伟力”，本书不厌其烦地介绍各种应用场景，在内容上读起来可能有点“磨叽”，希望大家理解。

“图解 + 编程 + 机器学习应用”是丛书的核心特点，《矩阵力量》一册也当然不例外。本书在讲解线性代数工具时，会穿插介绍其在数据科学和机器学习领域应用场景，让大家学以致用。

希望大家在学习《矩阵力量》时，能够体会到下面这几句话的意义。

有数据的地方，必有矩阵！

有矩阵的地方，更有向量！

有向量的地方，就有几何！

有几何的地方，皆有空间！

有数据的地方，定有统计！

下面开始本册学习。

1 Vector and More
不止向量

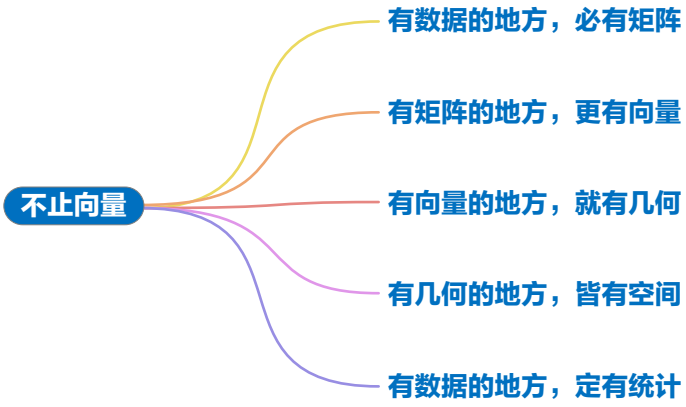
一个有关向量的故事，从鸢尾花数据讲起

科学的每一次巨大进步，都源于颠覆性的大胆想象。

Every great advance in science has issued from a new audacity of imagination.

—— 约翰·杜威 (John Dewey) | 美国著名哲学家、教育家、心理学家 | 1859 ~ 1952

- `sklearn.datasets.load_iris()` 加载鸢尾花数据
- `seaborn.heatmap()` 绘制热图



1.1 有数据的地方，必有矩阵

本章主角虽然是**向量** (vector)，但是这个有关向量的故事先从**矩阵** (matrix) 讲起。

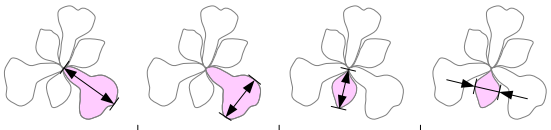
简单来说，矩阵是由若干行或若干列元素排列得到的**数组** (array)。矩阵内的元素可以是实数、虚数、符号，甚至是代数式。

从数据角度来看，矩阵就是表格！

鸢尾花数据集

数据科学、机器学习算法和模型都是“数据驱动”。没有数据，任何的算法都玩不转，数据是各种算法的绝对核心。优质数据本身就极具价值，甚至不需要借助任何模型；反之，**垃圾进，垃圾出** (Garbage in, garbage out, GIGO)。

本书使用频率最高的数据是鸢尾花卉数据集。数据集的全称为**安德森鸢尾花卉数据集** (Anderson's Iris data set)，是植物学家**埃德加·安德森** (Edgar Anderson) 在加拿大魁北克加斯帕半岛上的采集的鸢尾花样本数据。图 1 所示为鸢尾花数据集部分数据。



Index	Sepal length X_1	Sepal width X_2	Petal length X_3	Petal width X_4	Species C
1	5.1	3.5	1.4	0.2	
2	4.9	3	1.4	0.2	
3	4.7	3.2	1.3	0.2	
...	...	...	...	...	
49	5.3	3.7	1.5	0.2	Setosa C_1
50	5	3.3	1.4	0.2	
51	7	3.2	4.7	1.4	
52	6.4	3.2	4.5	1.5	
53	6.9	3.1	4.9	1.5	
...	...	...	...	...	Versicolor C_2
99	5.1	2.5	3	1.1	
100	5.7	2.8	4.1	1.3	
101	6.3	3.3	6	2.5	
102	5.8	2.7	5.1	1.9	
103	7.1	3	5.9	2.1	
...	...	...	...	...	Virginica C_3
149	6.2	3.4	5.4	2.3	
150	5.9	3	5.1	1.8	

图 1. 鸢尾花数据，数值数据单位为厘米 (cm)

图 1 给出的这些样本都归类于鸢尾属下的三个亚属，分别是**山鸢尾** (setosa)、**变色鸢尾** (versicolor) 和**维吉尼亚鸢尾** (virginica)。每一类鸢尾花收集了 50 条样本记录，共计 150 条。

鸢尾花四个特征被用作样本的定量分析，它们分别是**花萼长度** (sepal length)、**花萼宽度** (sepal width)、**花瓣长度** (petal length) 和**花瓣宽度** (petal width)。

⚠ 注意，本书用大写、粗体、斜体字母代表矩阵，比如 $\boldsymbol{X}$、$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{\Sigma}$、$\boldsymbol{\Lambda}$。特别地，本书用 $\boldsymbol{X}$ 代表样本数据矩阵，用 $\boldsymbol{\Sigma}$ 代表方差协方差矩阵 (variance covariance matrix)。本书用小写、粗体、斜体字母代表向量，比如 $\boldsymbol{x}$、$\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}^{(1)}$、$\boldsymbol{v}$。

如图 2 所示，本书常用**热图** (heatmap) 可视化矩阵。不考虑鸢尾花分类标签，鸢尾花数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 有 150 行、4 列，因此 $\boldsymbol{X}$ 也常记做 $\boldsymbol{X}_{150\times 4}$。

行向量、列向量

前文提到，矩阵可以视作由一系列行向量、列向量构造而成。

反向来看，矩阵切丝、切片可以得到行向量、列向量。如图 2 所示，$\boldsymbol{X}$ 任一行向量 ($\boldsymbol{x}^{(1)}$、$\boldsymbol{x}^{(2)}$、…、$\boldsymbol{x}^{(150)}$) 代表一朵鸢尾花样本花萼长度、花萼宽度、花瓣长度和花瓣宽度测量结果。而 $\boldsymbol{X}$ 某一列向量 ($\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}_2$、$\boldsymbol{x}_3$、$\boldsymbol{x}_4$) 为鸢尾花某个特征的样本数据。

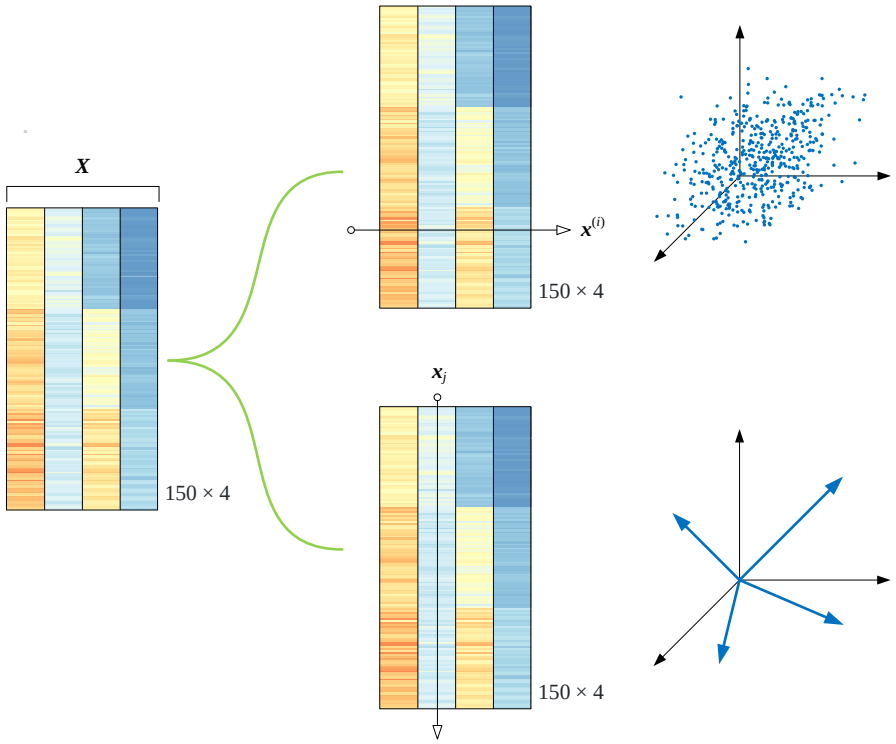


图 2. 矩阵可以分割成一系列行向量或列向量

图片

数据矩阵其实无处不在。

再举个例子，大家日常随手拍摄的照片实际上就是数据矩阵。图 3 为作者拍摄的一张鸢尾花照片。把这张照片做黑白处理后，它变成了形状为 2990 × 2714 的矩阵，即 2990 行、2714 列。

图 3 这张照片显然不是矢量图。不断放大，我们会发现照片的局部变得越来越模糊。继续放大，我们发现这张照片竟然是由一系列灰度热图构成。再进一步，提取其中图片的 4 个像素点，也就是矩阵的 4 个元素，我们得到一个 2 × 2 实数矩阵。

对于大部分机器学习应用，比如识别人脸、判断障碍物等，不需要输入彩色照片，黑白照片的数据矩阵含有的信息就足够用。

本系列丛书《数据科学》将采用主成分分析 (Principal Component Analysis, PCA) 继续深入分析图 3 这幅鸢尾花黑白照片。

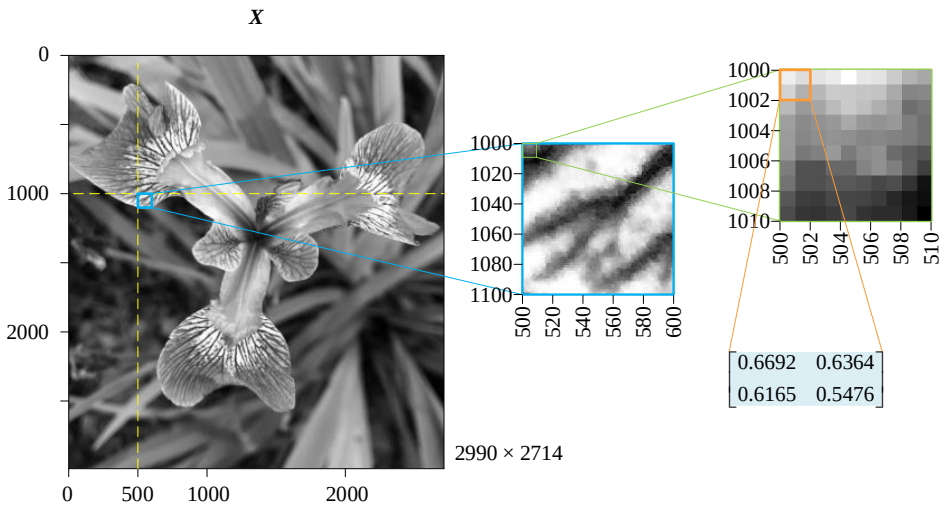


图 3. 照片也是数据矩阵

1.2 有矩阵的地方，更有向量

行向量

首先，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 可以看做是由一系列**行向量** (row vector) 上下叠加而成。

如图 4 所示，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的第 i 行可以写成行向量 $\boldsymbol{x}^{(i)}$。上标圆括号中的 i 代表序号，对于鸢尾花数据集，$i = 1 \sim 150$。

举个例子，$\boldsymbol{X}$ 的第 1 行行向量记做 $\boldsymbol{x}^{(1)}$，具体为：

$$\boldsymbol{x}^{(1)} = \begin{bmatrix} 5.1 & 3.5 & 1.4 & 0.2 \end{bmatrix}_{1\times 4} \tag{1}$$

行向量 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 代表鸢尾花数据集编号为 1 的样本。行向量 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 的四个元素依次代表**花萼长度** (sepal length)、**花萼宽度** (sepal width)、**花瓣长度** (petal length) 和**花瓣宽度** (petal width)。长、宽单位均为厘米 cm。

行向量 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 也可以视作 1 行、4 列的矩阵，即形状为 1×4。

虽然 Python 是**基于 0 编号** (zero-based indexing)，本书对矩阵行、列编号时，还是延续线性代数传统，采用**基于 1 编号** (one-based indexing)。

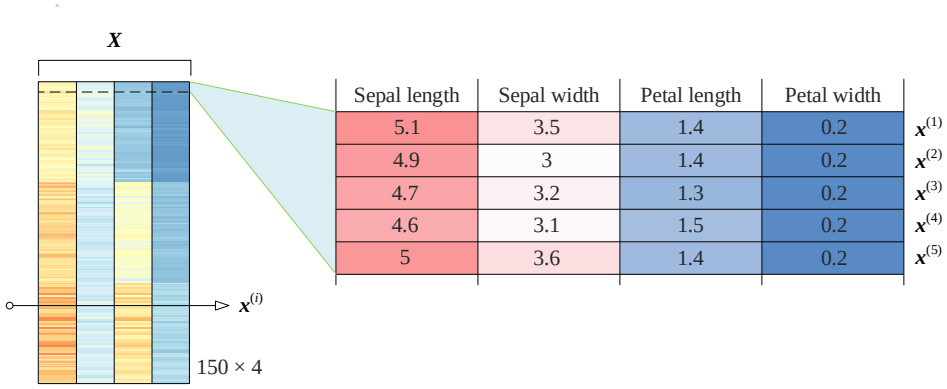


图 4. 鸢尾花数据，行向量代表样本数据点

列向量

矩阵 $\boldsymbol{X}$ 也可以视作一系列**列向量** (column vector) 左右排列而成。

如图 2 所示，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的第 j 列可以写成列向量 $\boldsymbol{x}_j$。下标 j 代表列序号，对于鸢尾花数据集，不考虑分类标签的话，$j = 1 \sim 4$。

比如，$\boldsymbol{X}$ 的第 1 列向量记做 $\boldsymbol{x}_1$，具体为：

$$\boldsymbol{x}_1 = \begin{bmatrix} 5.1 \\ 4.9 \\ \vdots \\ 5.9 \end{bmatrix}_{150\times 1} \tag{2}$$

列向量 $\boldsymbol{x}_1$ 代表鸢尾花 150 个样本数据花萼长度数值。列向量 $\boldsymbol{x}_1$ 可以视作 150 行、1 列的矩阵，即形状为 150×1。整个数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 可以写成四个列向量，即 $\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \boldsymbol{x}_4]$。

再次强调，为了区分数据矩阵中的行向量和列向量，在编号时，本书中行向量采用上标加圆括号，比如 $\boldsymbol{x}^{(1)}$。而列向量编号采用下标，比如 $\boldsymbol{x}_1$。

大家可能会问，元素数量均为 150 的 $\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}_2$、$\boldsymbol{x}_3$、$\boldsymbol{x}_4$ 这四个向量到底意味着什么？有没有什么办法可视化这四个列向量？怎么量化它们之间的关系？答案会在本书第 12 章揭晓。

此外，大家熟悉的**三原色光模式** (RGB color mode) 中每种颜色实际上也可以写成列向量，如所示图 5 的 7 个颜色。在本书第 7 章中，我们将用 RGB 解释向量空间等概念。

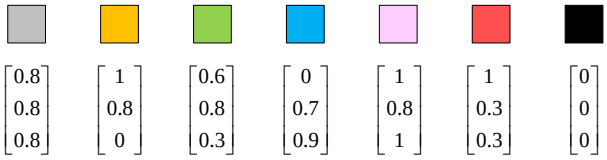


图 5. 7 个颜色对应的 RGB 颜色向量

不要被向量、矩阵这些名词吓到。矩阵就是一个表格，而这个表格可以划分成若干行、若干列，它们分别叫行向量、列向量。

1.3 有向量的地方，就有几何

数据云、投影

取出鸢尾花前两个特征——花萼长度、花萼宽度——对应的数据。把它们以坐标的形式画在平面直角坐标系 (记做 $\mathbb{R}^2$) 中，我们便得到平面散点图。如图 6 所示，这幅散点图好比样本“数据云”。

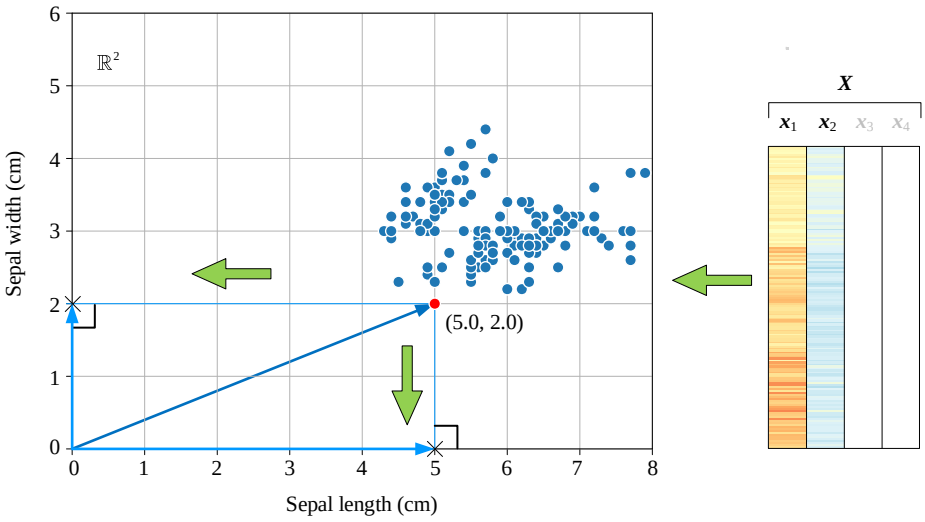


图 6. 鸢尾花前两个特征数据散点图

图 6 中数据点 (5.0, 2.0) 可以写成行向量 [5.0, 2.0]。(5.0, 2.0) 是序号为 61 的样本点，对应的行向量可以写成 $\boldsymbol{x}^{(61)}$。

从几何视角来看，[5.0, 2.0] 在横轴的**正交投影** (orthogonal projection) 结果为 5.0，代表该点的横坐标为 5.0。[5.0, 2.0] 在纵轴的正交投影结果为 2.0，代表其纵坐标为 2.0。

正交 (orthogonality) 是线性代数的概念，是垂直的推广。正交投影很好理解，即原数据点和投影点连线垂直于投影点所在直线或平面。打个比方，头顶正上方阳光将物体影子投影在地面，而阳光光线垂直于地面。不特别强调的话，本书的投影均指正交投影。

从集合视角来看，(5.0, 2.0) 属于平面 $\mathbb{R}^2$，即 $(5.0,\ 2.0) \in \mathbb{R}^2$。图 6 中整团数据云都属于 $\mathbb{R}^2$。再者，如图 6 所示，从向量角度来看，行向量 [5.0, 2.0] 在横轴上投影的向量为 [5.0, 0]，在纵轴上投影的向量为 [0, 2.0]。而 [5.0, 0] 和 [0, 2.0] 两个向量合成就是 [5.0, 2.0] = [5.0, 0] + [0, 2.0]。

再进一步，将图 6 整团数据云全部正交投影到横轴，得到图 7。图 7 中 × 代表的数据实际上就是鸢尾花数据集第一列花萼长度数据。图 7 中横轴相当于一个一维空间，即数轴 $\mathbb{R}$。

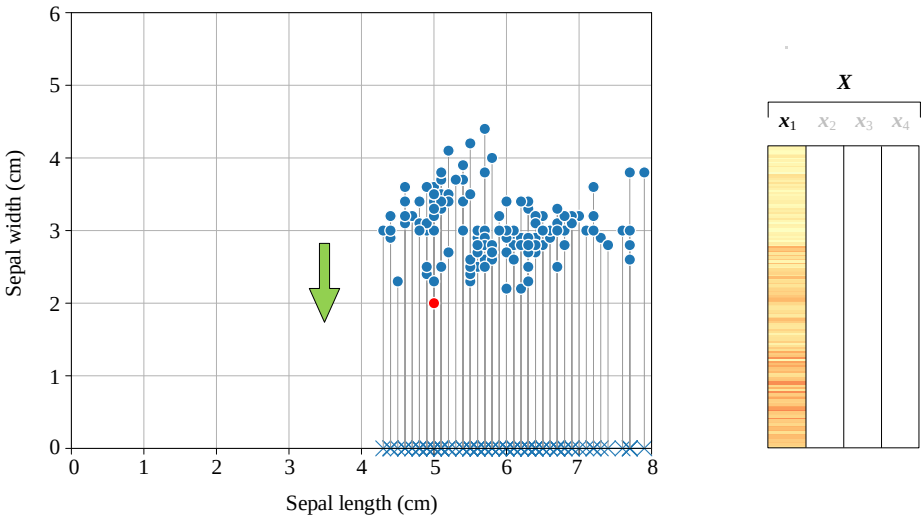


图 7. 二维散点正交投影到横轴

我们也可以把整团数据云全部投影在纵轴，得到图 8。图中的 × 是鸢尾花数据第二列花萼宽度数据。

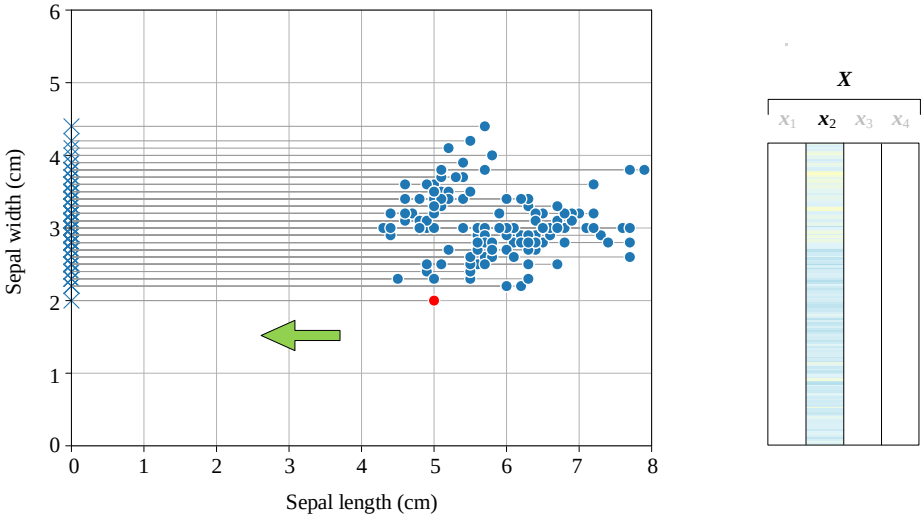


图 8. 二维散点正交投影到纵轴

投影到一条过原点的斜线

你可能会问，是否可以将图 7 中所有点投影在一条斜线上？

答案是肯定的。

如图 9 所示，鸢尾花数据投影到一条斜线上，这条斜线通过原点和横轴夹角 15°。观察图 9，我们已经发现投影点似乎是 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 的某种组合。也就是说，$\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 分别贡献 $v_1\boldsymbol{x}_1$ 和 $v_2\boldsymbol{x}_2$，两种成分合成 $v_1\boldsymbol{x}_1 + v_2\boldsymbol{x}_2$ 就是投影点坐标。$v_1\boldsymbol{x}_1 + v_2\boldsymbol{x}_2$ 也叫**线性组合** (linear combination)。

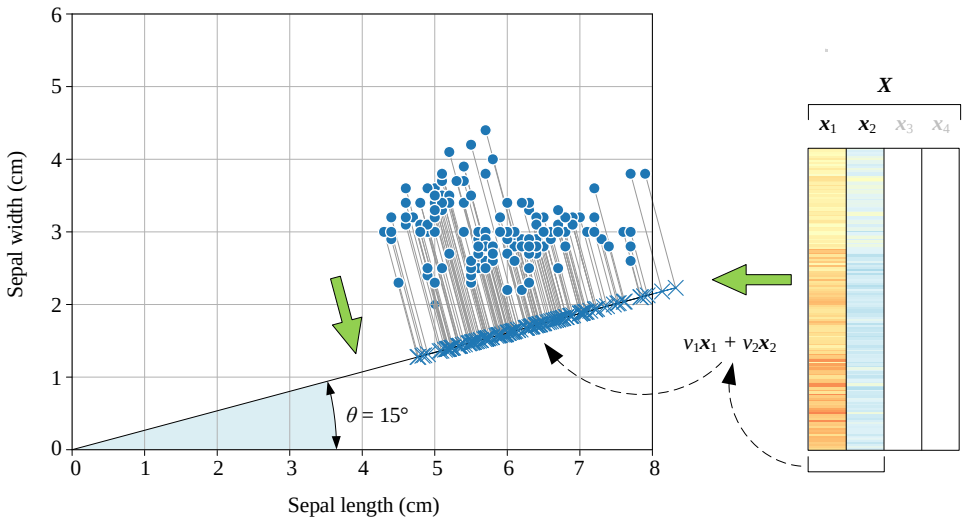


图 9. 二维散点正交投影到一条斜线

大家可能会问，怎么计算图 9 中投影点坐标？这种几何变换有何用途？这是本书第 9、10 章要回答的问题。

三维散点图、成对特征散点图

取出鸢尾花前三个特征 (花萼长度、花萼宽度、花瓣长度) 对应的数据，并在三维空间 $\mathbb{R}^3$ 绘制散点图，得到图 10。而图 6 相当于图 10 在水平面 (浅蓝色背景) 正交投影结果。

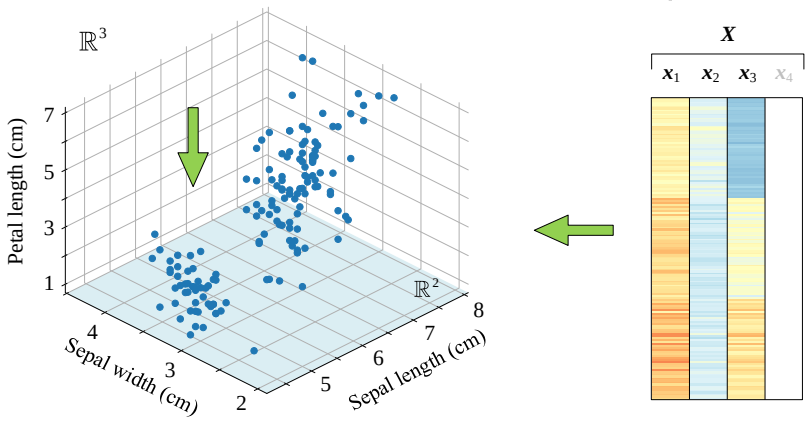


图 10. 鸢尾花前三个特征数据散点图

回顾本系列丛书《数学要素》一册介绍过的成对特征散点图，具体如图 11 所示。成对特征散点图不但可视化鸢尾花四个特征 (花萼长度、花萼宽度、花瓣长度和花瓣宽度)，通过散点颜色还可以展示鸢尾花三个类别 (山鸢尾、变色鸢尾、维吉尼亚鸢尾)。图 11 中的每一幅散点图相当于四维空间数据在不同平面上的投影结果。

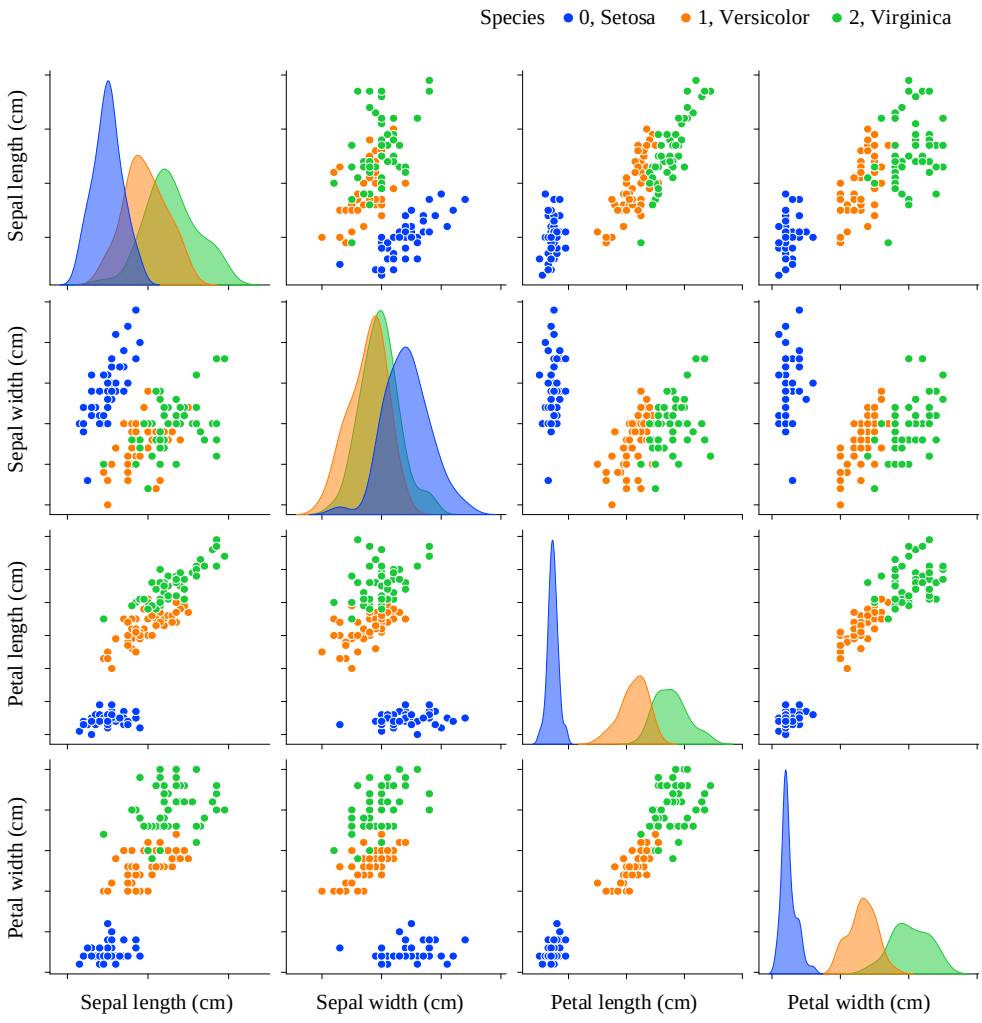


图 11. 鸢尾花数据成对特征散点图，考虑分类标签，图片来自《数学要素》

统计视角：移动向量起点

如图 12 所示，本节前文行向量的起点都是原点，即零向量 $\boldsymbol{0}$。而平面 $\mathbb{R}^2$ 这个二维空间则“装下”了这 150 个行向量。

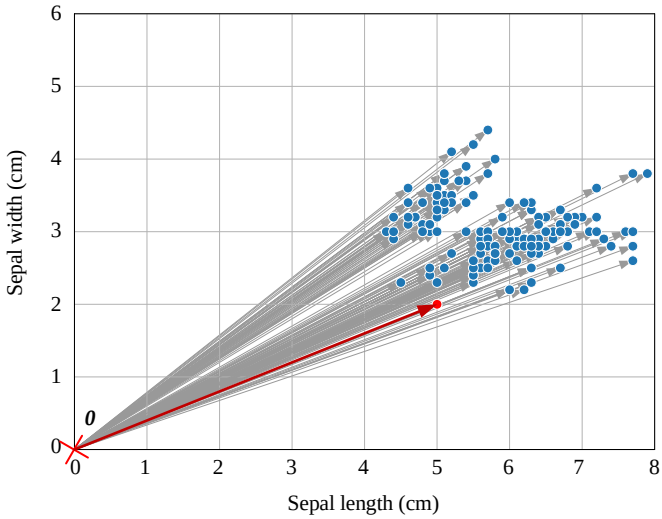


图 12. 向量起点为原点

但是，统计视角下，向量的起点移动到了数据**质心** (centroid)。所谓数据质心就是数据每一特征均值构成的向量。

这一点也不难理解，大家回想一下，我们在计算方差、均方差、协方差、相关性系数等统计度量时，都会去均值。从向量角度来看，这相当于移动向量起点。

如图 13 所示，将向量的起点移动到质心后，向量的长度、绝对角度 (比如，和坐标系横轴夹角)、相对角度 (向量两两之间的夹角) 都发生了显著变化。

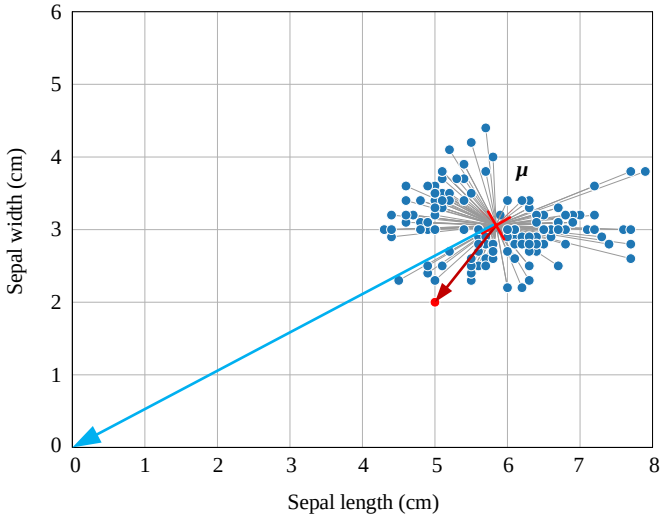


图 13. 向量起点为质心

将图 13 整团数据云质心平移到原点，这个过程就是去均值过程，结果如图 14 所示。数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 去均值化得到的数据矩阵记做 $\boldsymbol{X}_c$，显然 $\boldsymbol{X}_c$ 的质心位于原点 $\boldsymbol{0}$。去均值并不影响数据的单位，图 14 横轴、纵轴的单位还都是厘米。

观察图 11，我们发现，如果考虑数据标签的话，每一类标签样本数据都有自己质心，叫做分类质心，这是本书第 22 章要讨论的话题。此外，本书最后三章——数据三步曲——会把数据、矩阵、向量、矩阵分解、空间、优化、统计等板块联结起来。

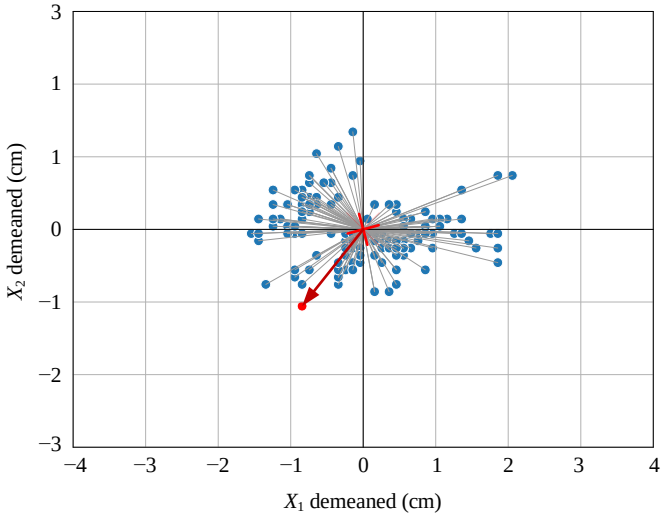


图 14. 数据去均值化

1.4 有向量的地方，皆有空间

从线性方程组说起

从代数视角来看，**矩阵乘法** (matrix multiplication) 代表**线性映射** (linear mapping)。比如，在 $\boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{x}_{n\times 1} = \boldsymbol{b}_{m\times 1}$ 中矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 扮演的角色就是完成 $\boldsymbol{x} \rightarrow \boldsymbol{b}$ 线性映射。列向量 $\boldsymbol{x}_{n\times 1}$ 在 $\mathbb{R}^n$ 中，列向量 $\boldsymbol{b}_{m\times 1}$ 在 $\mathbb{R}^m$ 中。

$\boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{x}_{n\times 1} = \boldsymbol{b}_{m\times 1}$ 也叫做**线性方程组** (system of linear equations)。在本系列丛书《数学要素》“鸡兔同笼三部曲”中，我们用线性方程组解决过鸡兔同笼问题。下面简单回顾一下。

《孙子算经》这样引出鸡兔同笼问题：“今有雉兔同笼，上有三十五头，下有九十四足，问雉兔各几何？”

将这个问题写成线性方程组：

$$\begin{cases} 1\cdot x_1 + 1\cdot x_2 = 35 \\ 2\cdot x_1 + 4\cdot x_2 = 94 \end{cases} \Rightarrow \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}}_{A} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}_{x} = \begin{bmatrix} 35 \\ 94 \end{bmatrix}_{b} \tag{3}$$

即：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{4}$$

未知变量构成的列向量 $\boldsymbol{x}$ 可以利用下式求解：

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 35 \\ 94 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & -0.5 \\ -1 & 0.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 35 \\ 94 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 23 \\ 12 \end{bmatrix} \tag{5}$$

逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 则完成 $\boldsymbol{b} \rightarrow \boldsymbol{x}$ 线性映射。

(5) 用到了矩阵乘法 (matrix multiplication)、矩阵逆 (matrix inverse)。本书第 4、5、6 三章将介绍矩阵相关运算，居于核心的运算当然是矩阵乘法。

几何视角

从几何视角来看，(3) 中矩阵 $\boldsymbol{A}$ 完成的是**线性变换** (linear transformation)。如图 15 所示，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 把方方正正的方格，变成平行四边形网格，对应的计算为：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}}_{e_1} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}}_{a_1}, \quad \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}}_{e_2} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 4 \end{bmatrix}}_{a_2} \tag{6}$$

而上式结果恰好是矩阵 $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2]$ 的两个列向量 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$。

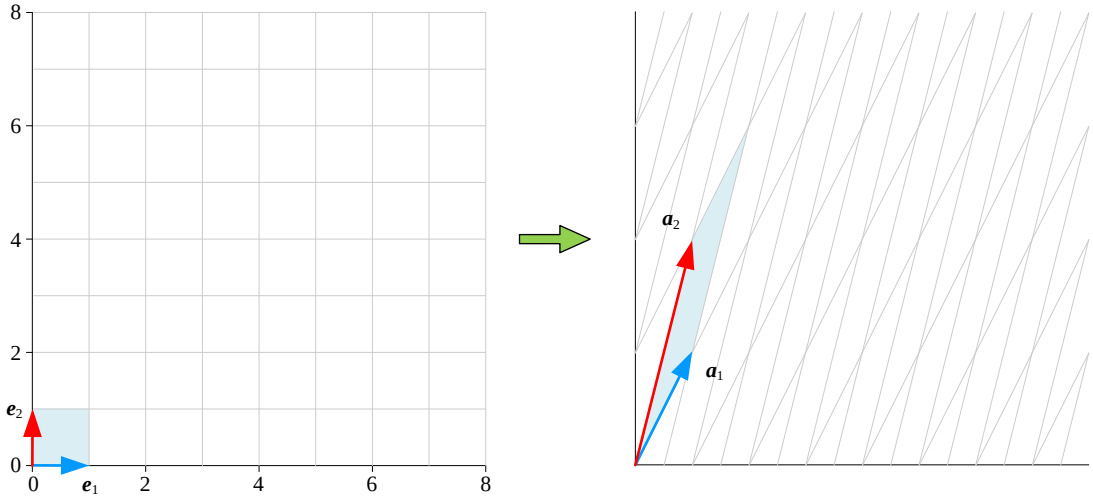


图 15. 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 完成的线性变换

观察图 15 左图，整个直角坐标系整个方方正正的网格由 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 张成，就好比 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 是撑起这个二维空间的“骨架”。再看图 15 右图，$[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2]$ 同样张成了整个直角坐标系，不同的是网格为平行四边形。$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 和 $[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2]$ 都叫做空间 $\mathbb{R}^2$ 的**基底** (base)。

将 $\boldsymbol{A}$ 写成 $[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2]$，展开 (4) 得到：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = x_1\boldsymbol{a}_1 + x_2\boldsymbol{a}_2 = \boldsymbol{b} \tag{7}$$

上式代表基底 $[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2]$ 中两个基底向量的线性组合。

本书将在第 7 章专门讲解基底、线性组合等向量空间概念。

从正圆到旋转椭圆

圆锥曲线，特别是椭圆，在本系列丛书扮演重要角色，这一切都源于多元高斯分布概率密度函数。而线性变换和椭圆又有千丝万缕的联系。

如图 16 所示，同样利用 (3) 中矩阵 $\boldsymbol{A}$，我们可以把一个单位圆转化为旋转椭圆。图 16 中，任意向量 $\boldsymbol{x}$ 起点为原点，终点落在单位圆上，经过 $\boldsymbol{A}$ 的线性变换变成 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$。

图 16 旋转椭圆的半长轴长度约为 4.67，半短轴长度约为 0.43，半短轴和横轴夹角约为-16.85°。要获得这些椭圆信息，我们需要一个线性代数利器——**特征值分解** (eigen decomposition)。

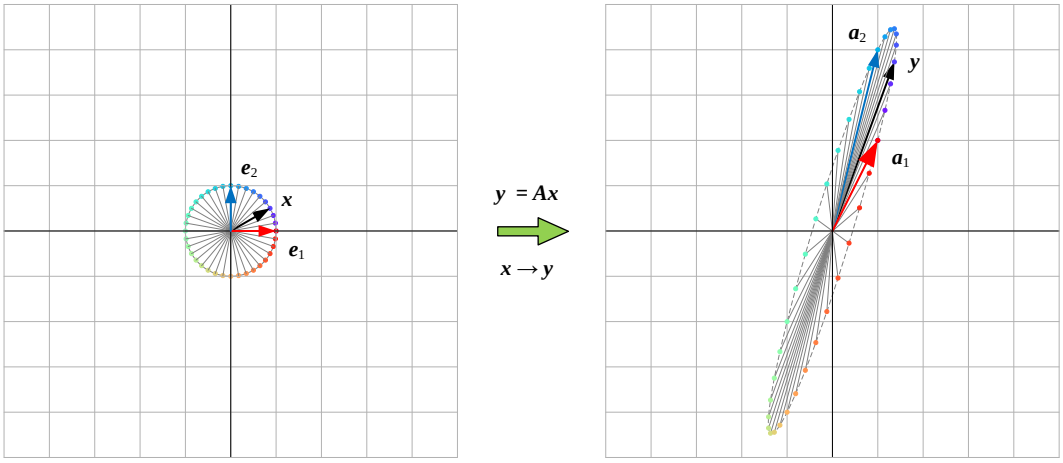


图 16. 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 将单位圆转化为旋转椭圆

特征值分解

本书读者对特征值分解并不陌生。如图 17 所示，我们在本系列丛书《数学要素》鸡兔同笼三部“鸡兔互变”中简单聊过特征值分解，大家如果忘记了，建议回顾一下。

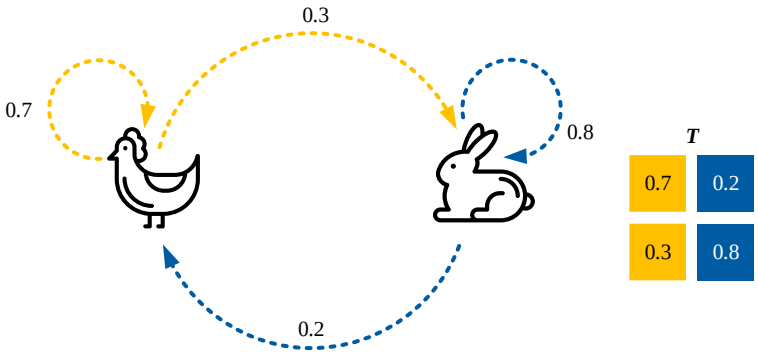


图 17. 鸡兔同笼三部曲中“鸡兔互变”，图片来自本系列丛书《数学要素》第 25 章

剧透一下，鸢尾花数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 本身并不能完成特征值分解。但是图 21 中的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 可以完成特征值分解，分解过程如图 18 所示。请大家特别注意图 18 中的矩阵 $\boldsymbol{V}$。正如图 15 右图中 $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2]$ 张成了一个平面，矩阵 $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3, \boldsymbol{v}_4]$ 则张成了一个 4 维空间 $\mathbb{R}^4$！

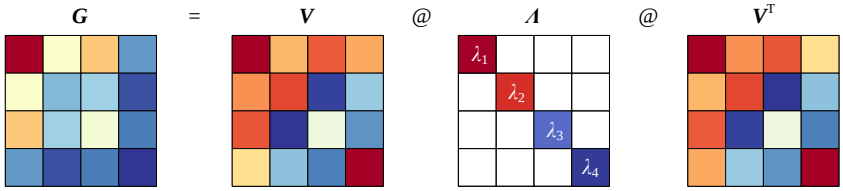


图 18. 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的格拉姆矩阵的特征值分解

本书第 13、14 章专门探讨特征值分解。此外，本书将在第 20、21 章利用线性代数工具分析圆锥曲线和二次曲面。

奇异值分解

在**矩阵分解** (matrix decomposition) 这个工具库中，最全能的工具叫**奇异值分解** (Singular Value Decomposition, SVD)。因为不管形状如何，任何实数矩阵都可以完成奇异值分解。

图 19 所示为对鸢尾花数据矩阵的 SVD 分解，这幅图中的 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 都各自张成不同的空间。

本书第 15、16 章专门讲解奇异值分解，第 23 章则利用 SVD 分解引出四个空间。

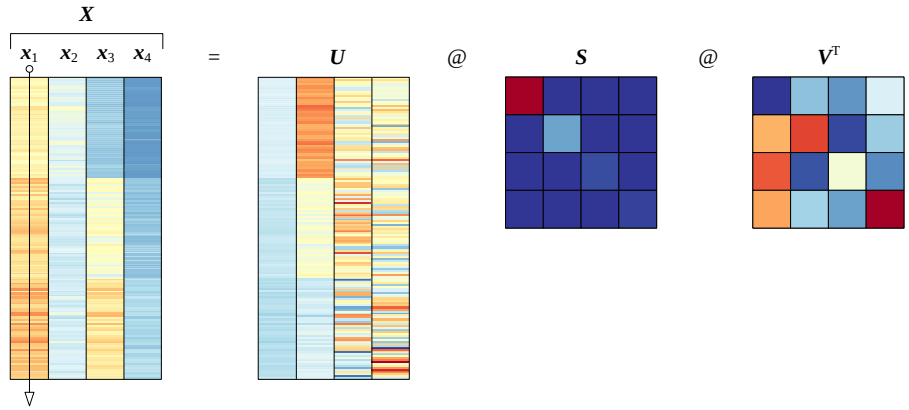


图 19. 对矩阵 $\boldsymbol{X}$ 进行 SVD 分解

1.5 有数据的地方，定有统计

前文提到，图 20 所示鸢尾花数据每一列代表鸢尾花的一个特征，比如花萼长度 (第 1 列，列向量 $\boldsymbol{x}_1$)、花萼宽度 (第 2 列，列向量 $\boldsymbol{x}_2$)、花瓣长度 (第 3 列，列向量 $\boldsymbol{x}_3$) 和花瓣宽度 (第 4 列，列向量 $\boldsymbol{x}_4$)。这些列向量可以看成是 X_1、X_2、X_3、X_4 四个随机变量的样本值集合。

从统计视角来看，我们可以计算样本数据各个特征的均值 (μ_j)，计算不同特征上样本数据的均方差 (σ_j)。图 20 中四幅子图中的曲线代表各个特征样本数据的**概率密度估计** (probability density estimation) 曲线。有必要的话，我们还可以在图中标出 μ_j、$\mu_j \pm \sigma_j$、$\mu_j \pm 2\sigma_j$ 对应的位置。

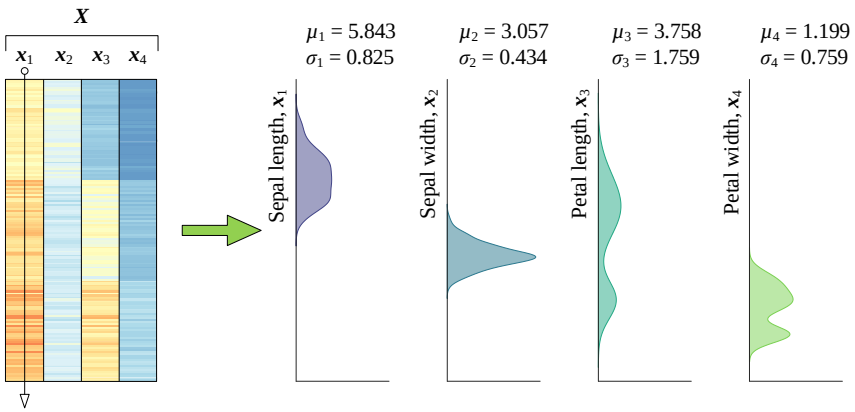


图 20. 鸢尾花数据每个特征的基本统计描述

实际应用时，我们还会对原始数据进行处理，常见的操作有**去均值** (demean)、**标准化** (standardization) 等。

对于多个特征之间的关系，我们可以采用**格拉姆矩阵** (Gram matrix)、**协方差矩阵** (covariance matrix)、**相关性系数矩阵** (correlation matrix) 等矩阵来描述。

图 21 所示为本书后续要用到的鸢尾花数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 衍生得到的几种矩阵。注意，图 2 和图 21 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 热图采用不同的色谱值。

本书第 22 章将介绍如何获得图 21 所示这些矩阵，本书第 24 章将探讨图 21 主要矩阵和各种矩阵分解 (matrix decomposition) 之间有趣关系。

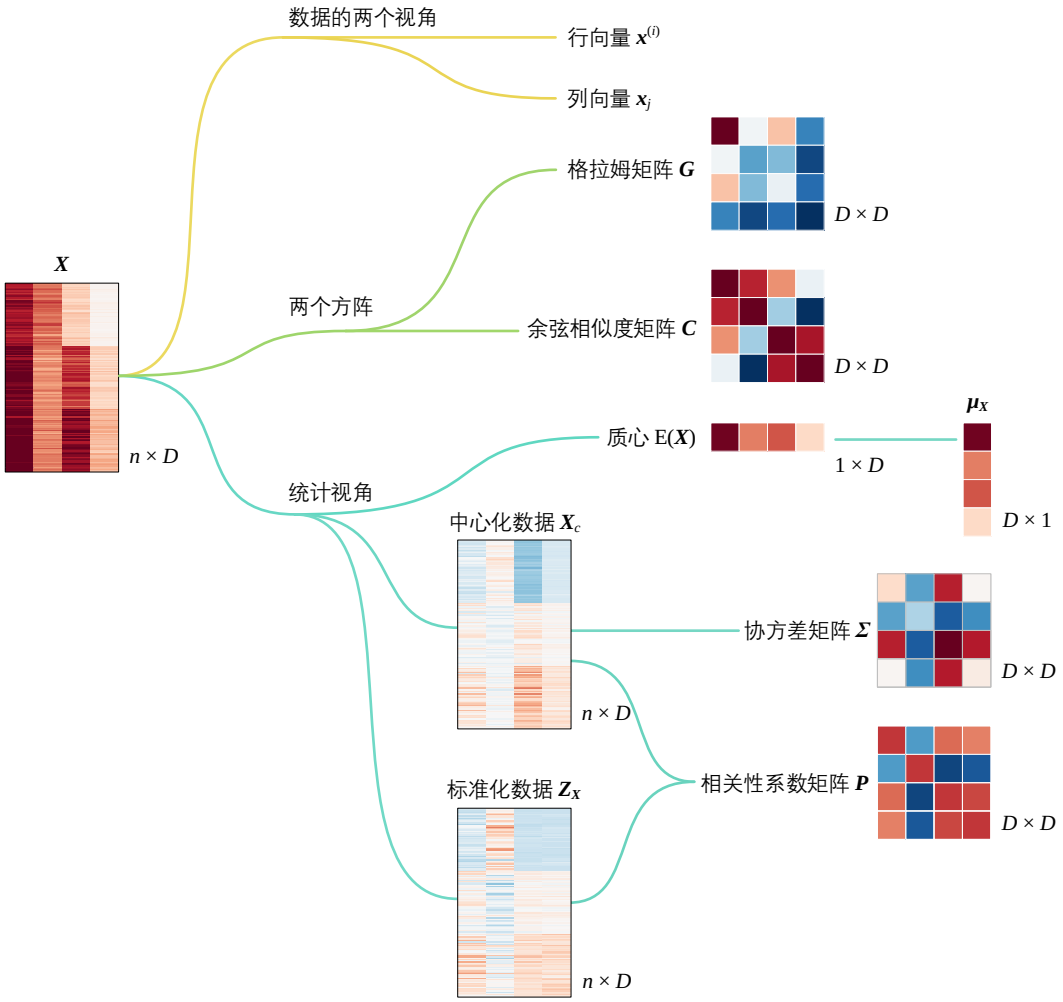
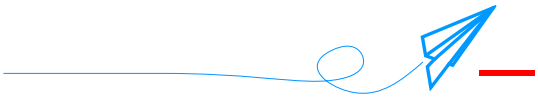


图 21. 鸢尾花数据衍生得到的几个矩阵，图片来自本书第 24 章

本章只配套一个代码文件，Streamlit_Bk4_Ch1_01.py。这段代码中，我们用 Streamlit 和 Plotly 分别绘制了鸢尾花数据集的热图、平面散点图、三维散点图、成对特征散点图。这四幅图都是可交互图像。



本章以向量为主线，回顾了《数学要素》“鸡兔同笼三部曲”的主要内容，预告了本书核心话题。目前不需要大家理解本章提到所有术语，只希望大家记住以下几句话：

有数据的地方，必有矩阵！

有矩阵的地方，更有向量！

有向量的地方，就有几何！

有几何的地方，皆有空间！

有数据的地方，定有统计！

对线性代数概念感到困惑的读者，推荐大家看看 3Blue1Brown 制作的视频。很多视频网站上都可以找到译制视频。如下为 3Blue1Brown 线性代数部分网页入口：

https://www.3blue1brown.com/topics/linear-algebra

2 Vector Calculations
向量运算
从几何和数据角度解释

几何——指向真理之乡，创造哲学之魂。

Geometry will draw the soul toward truth and create the spirit of philosophy.

—— 柏拉图 (Plato) | 古希腊哲学家 | 424/423 ~ 348/347 BC

- matplotlib.pyplot.quiver() 绘制箭头图
- numpy.add() 向量/矩阵加法
- numpy.arccos() 计算反余弦
- numpy.array([[4,3]]) 构造行向量，注意双重方括号
- numpy.array([[4,3]]).T 行向量转置得到列向量，注意双重方括号
- numpy.array([[4], [3]]) 构造列向量，注意双重方括号
- numpy.array([4, 3])[:, None] 构造列向量
- numpy.array([4, 3])[:, numpy.newaxis] 构造列向量
- numpy.array([4, 3])[None, :] 构造行向量
- numpy.array([4, 3])[numpy.newaxis, :] 构造行向量
- numpy.array([4,3]) 构造一维数组，严格来说不是行向量
- numpy.array([4,3]).reshape((-1, 1)) 构造列向量
- numpy.array([4,3]).reshape((1, -1)) 构造行向量
- numpy.array([4,3], ndmin=2) 构造行向量
- numpy.cross() 计算列向量或行向量的向量积
- numpy.dot() 计算向量内积。值得注意的是，如果输入为一维数组，numpy.dot() 输出结果为向量内积；如果输入为矩阵，numpy.dot() 输出结果为矩阵乘积，相当于矩阵运算符@
- numpy.linalg.norm() 默认计算 L2 范数
- numpy.multiply() 计算向量逐项积
- numpy.ones() 生成全 1 向量/矩阵
- numpy.outer() 计算张量积
- numpy.r_[] 将一系列数组合并；'r' 设定结果以行向量 （默认） 展示，比如 numpy.r_[numpy.array([1,2]), 0, 0, numpy.array([4,5])] 默认产生行向量
- numpy.r_['c', [4,3]] 构造列向量
- numpy.subtract() 向量/矩阵减法
- numpy.vdot() 计算两个向量的向量内积。如果输入是矩阵，矩阵会按照先行、后列顺序展开成向量之后，再计算向量内积
- numpy.zeros() 生成全 0 向量/矩阵
- scipy.spatial.distance.cosine() 计算余弦距离
- zip(*) 用于将可迭代的对象作为参数，将对象中对应的元素打包成一个个元组，然后返回由这些元组组成的列表。*代表解包，返回的每一个都是元祖类型，而并非是原来的数据类型

2.1 向量：多面手

几何视角

如图 1 所示，平面上，向量是**有方向的线段** (directed line segment)。**线段的长度代表向量的大小** (the length of the line segment represents the magnitude of the vector)。**箭头代表向量的方向** (the direction of the arrowhead indicates the direction of the vector)。

再次强调，本书中向量符号采用加粗、斜体、小写字母，比如 $\boldsymbol{a}$；矩阵符号则采用加粗、斜体、大写字母，比如 $\boldsymbol{A}$。

图 1 中，向量 $\boldsymbol{a}$ 的**起点** (initial point) 是原点 O，向量的**终点** (terminal point) 是 A。如果向量的起点和终点相同，向量则为**零向量** (zero vector)，可以表示为 $\boldsymbol{0}$。

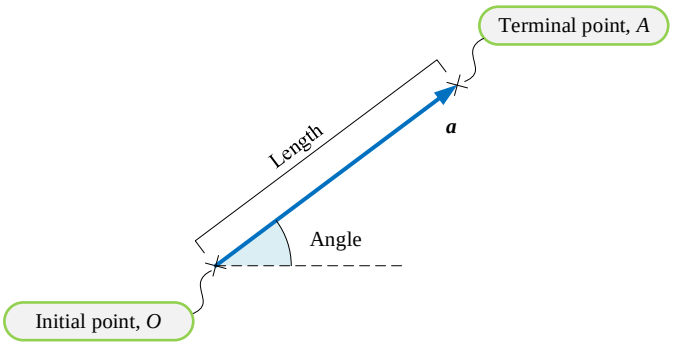


图 1. 向量起点、终点、大小和方向

图 2 给出的是几种向量的类型。

和起点无关的向量叫做**自由向量** (free vector)，如图 2 (a)。和起点有关的向量被称作，**固定向量** (fixed vector)，如图 2 (b) 和 (c)。称方向上沿着某一个特定直线的向量为**滑动向量** (sliding vector)，如图 2 (d)。

没有特别说明时，本书的向量一般是固定向量，且起点一般都在原点，除非特别说明。

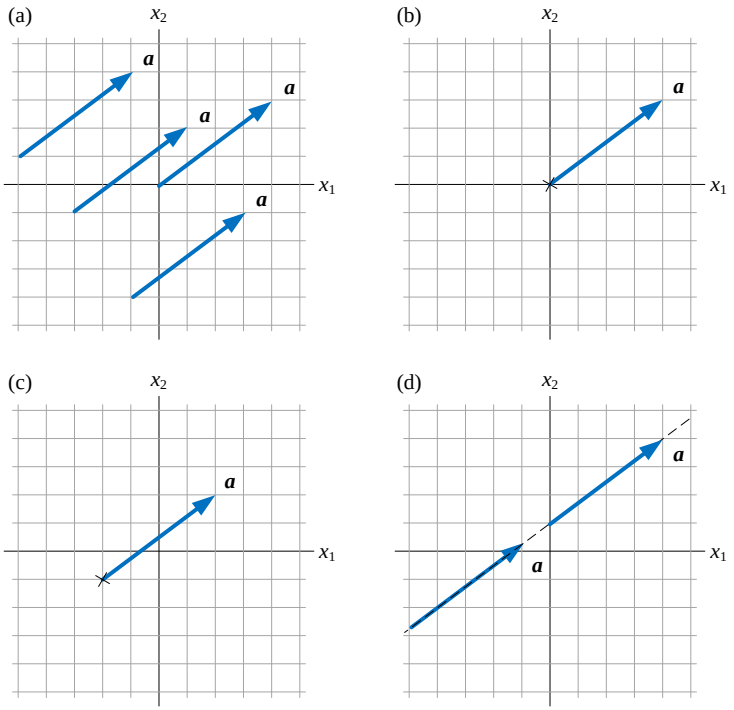


图 2. 几种向量类型

坐标点

从解析几何角度看，向量和坐标存在直接联系。

一般情况下直角坐标系中任意一点坐标可以通过**多元组** (tuple) 来表达。比如，图 3 (a) 所示平面直角坐标系上，A 点坐标为 (4, 3)，B 点坐标为 (−3, 4)。

图 3 (b) 所示，以原点 O 作为向量起点 A 为终点的向量 $\overrightarrow{OA}$ 对应向量 $\boldsymbol{a}$，而 $\overrightarrow{OB}$ 对应向量 $\boldsymbol{b}$。

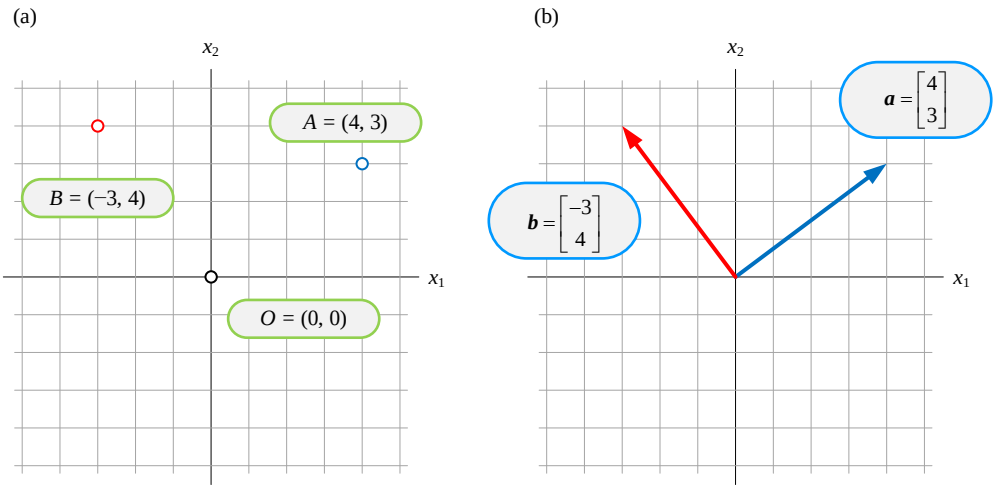
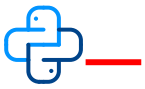


图 3. 平面坐标和向量关系

向量的元素也可以是未知量，比如 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2]^T$、$\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \ldots, x_D]^T$。



`Bk4_Ch2_01.py` 绘制图 3 (b) 所示向量。`matplotlib.pyplot.quiver()` 绘制箭头图。

继续丰富向量几何内涵

几何上，切线指的是一条刚好触碰到曲线上某一点的直线。曲线的法线则是垂直于曲线上一点的切线的直线。将向量引入切线、法线可以得到**切向量** (tangent vector) 和**法向量** (normal vector)。图 4 所示为直线和曲线某一点处的切向量和法向量，两个向量的起点都是**切点** (point of tangency)。

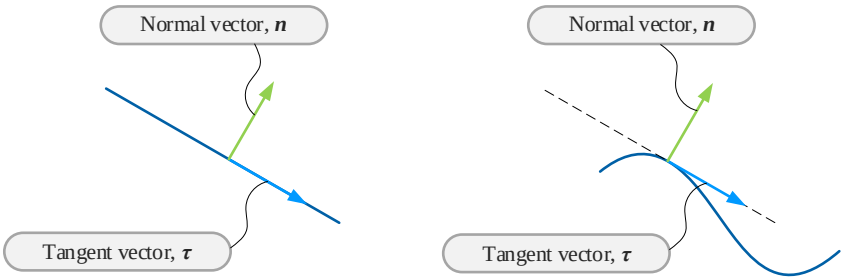


图 4. 切向量和法向量

梯度

自然界的风、水流、电磁场，在各自空间的每一个点上对应的物理量既有强度、也有方向。将这些既有大小又有方向的场抽象出来便得到**向量场** (vector field)。本书中，我们会使用向量场来描述函数在一系列排列整齐点的梯度向量。

图 5 (a) 所示为某个二元函数 $f(x_1, x_2)$ 对应的曲面。把图 5 (a) 比作一座山峰的话，在坡面上放置一个小球，松手瞬间小球运动的方向在 x_1x_2 平面上的投影就是梯度下降方向，也叫做下山方向；而它的反方向叫做**梯度向量** (gradient vector) 方向，也叫上山方向。

图 5 (b) 所示为在 x_1x_2 平面上，二元函数 $f(x_1, x_2)$ 在不同点处的平面等高线和梯度向量。坡面越陡峭，梯度向量长度越大。仔细观察，可以发现任意一点处梯度向量垂直于该点处等高线。

二元函数 $f(x_1, x_2)$ 梯度向量定义如下：

$$\text{grad}\, f(x_1, x_2) = \nabla f(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} \tag{1}$$

在 $f(x_1, x_2)$ 梯度向量中，我们看到了两个偏导数。

在求解优化问题中，梯度向量扮演重要角色。本书将在第 17 章回顾偏导数，并讲解梯度向量。

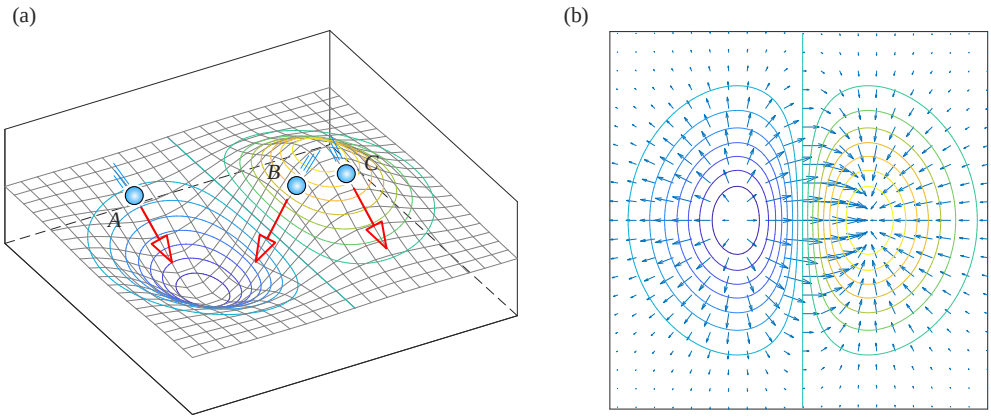


图 5. 梯度向量

2.2 行向量、列向量

上一章提到，向量要么一行多列、要么一列多行，因此向量可以看做是特殊的矩阵——**一维矩阵** (one-dimensional matrix)。一行多列的向量是**行向量** (row vector)，一列多行的向量叫**列向量** (column vector)。

一个矩阵可以视作由若干行向量或列向量整齐排列而成。如图 6 所示，数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的每一行是一个行向量，代表一个样本点；$\boldsymbol{X}$ 的每一列为一个列向量，代表某个特征上的所有样本数据。

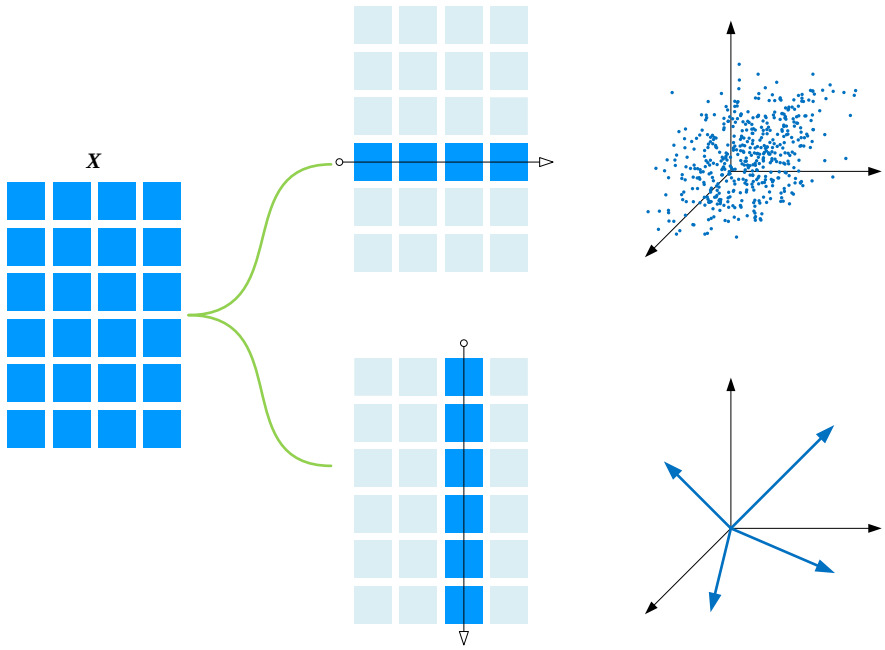


图 6. 观察数据矩阵的两个视角

行向量：一行多列，一个样本数据点

行向量将 n 个元素排成一行，形状为 $1 \times n$ (代表 1 行、n 列)。下式行向量 $\boldsymbol{a}$ 为 1 行 4 列：

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix} \tag{2}$$

如图 7 所示，行向量**转置** (transpose) 得到列向量，反之亦然。转置运算符号为正体上标 $^{\mathrm{T}}$。

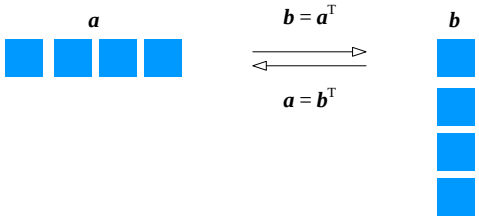


图 7. 行向量的转置是列向量

表 1 所示为利用 Numpy 构造行向量几种常见方法。可以用 `len(a)` 计算向量元素个数。

表 1. 用 Numpy 构造行向量

代码	注意事项
`a = numpy.array([4,3])`	严格地说，这种方法产生的并不是行向量；运行 `a.ndim` 发现 `a` 只有一个维度。因此，转置 `numpy.array([4,3]).T` 得到的仍然是一维数组，只不过默认展示方式为行向量。
`a = numpy.array([[4,3]])`	运行 `a.ndim` 发现 `a` 有二个维度，这个行向量转置 `a.T` 可以获得列向量。`a.T` 求 `a` 转置，等价于 `a.transpose()`。 请大家注意双重方括号。
`a = numpy.array([4,3], ndmin=2)`	`ndmin=2` 设定数据有两个维度，转置 `a.T` 可以获得列向量。
`a = numpy.r_['r', [4,3]]`	`numpy.r_[]` 将一系列数组合并；`'r'` 设定结果以行向量（默认）展示，比如 `numpy.r_[numpy.array([1,2]), 0, 0, numpy.array([4,5])]` 默认产生行向量。
`a = numpy.array([4,3]).reshape((1, -1))`	`reshape()` 按某种形式重新排列数据，`-1` 自动获取数组元素个数 `n`。
`a = numpy.array([4, 3])[None, :]`	按照 `[None, :]` 形式广播数组，`None` 代表 `numpy.newaxis`，增加新维度。
`a = numpy.array([4, 3])[numpy.newaxis, :]`	等同于上一例。

前文提过，$\boldsymbol{X}$ 的行向量序号采用“上标加括号”方式，比如 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 代表 $\boldsymbol{X}$ 的第一行行向量。

如图 8 所示，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 可以写成一组行向量上下叠放：

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)} \\ \boldsymbol{x}^{(2)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}^{(6)} \end{bmatrix} \tag{3}$$

⚠ 再次强调，数据分析偏爱用行向量表达样本点。

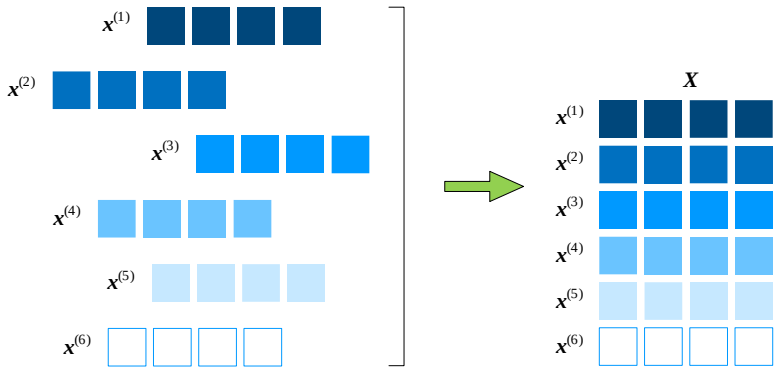


图 8. 矩阵由一系列行向量构造

列向量：一列多行，一个特征样本数据

列向量将 n 个元素排成一列，形状为 $n \times 1$ (即 n 行、1 列)。举个例子，下式中列向量 $\boldsymbol{b}$ 为 4 行 1 列：

$$\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix} \tag{4}$$

⚠ 注意，不加说明时，本书中向量一般指的是列向量。

构造 $\boldsymbol{X}$ 的列向量序号则采用下标表达，比如 $\boldsymbol{x}_1$。如图 9 所示，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 看做是 4 个等行数列向量整齐排列得到：

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{x}_3 & \boldsymbol{x}_4 \end{bmatrix} \tag{5}$$

数据分析偏爱列向量表达特征，比如 $\boldsymbol{x}_j$ 代表第 j 个特征上的样本数据构成的列向量。因此，列向量又常称作**特征向量** (feature vector)。$\boldsymbol{x}_j$ 对应概率统计的随机变量 X_j，或者代数中的变量 x_j。

⚠ 注意，此处特征向量不同于特征值分解 (eigen decomposition) 中的特征向量 (eigenvector)。

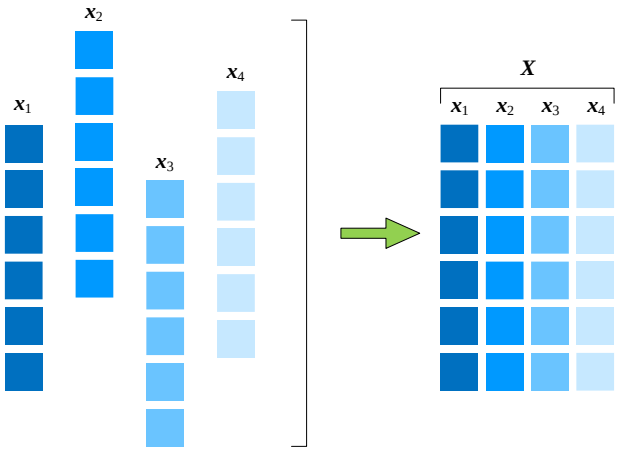


图 9. 矩阵由一排列向量构造

表 2 总结 Numpy 构造列向量几种常见方法。

表 2. 用 Numpy 构造列向量

代码	注意事项
`a = numpy.array([[4], [3]])`	运行 `a.ndim` 发现 a 有二个维度。`numpy.array([[4], [3]]).T` 获得行向量。请大家注意两层方括号。
`a = numpy.r_['c', [4,3]]`	`numpy.r_[]` 将一系列的数组合并。`'c'` 设定结果以列向量展示
`a = numpy.array([4,3]).reshape((-1, 1))`	`reshape()` 按某种形式重新排列数据；`-1` 自动获取数组元素个数 n
`a = numpy.array([4, 3])[:, None]`	按照 `[:, None]` 形式广播数组；None 代表 `numpy.newaxis`，增加新维度
`a = numpy.array([4, 3])[:, numpy.newaxis]`	等同于上一例

特殊列向量

全零列向量 (zero column vector) $\boldsymbol{0}$，是指每个元素均为 0 的列向量：

$$\boldsymbol{0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{6}$$

代码 `numpy.zeros((4,1))` 可以生成 4 × 1 全 0 列向量。多维空间中，原点也常记做零向量 $\boldsymbol{0}$。

全 1 列向量 (all-ones column vector) $\boldsymbol{1}$，是指每个元素均为 1 的列向量：

$$\boldsymbol{1} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{7}$$

代码 `numpy.ones((4,1))` 可以生成 4 × 1 全 1 列向量。

全 1 列向量 $\boldsymbol{1}$ 在矩阵乘法中有特殊的地位，本书第 5、22 章将分别从矩阵乘法和统计两个角度讲解。

2.3 向量长度：模，欧氏距离，L^2 范数

向量长度 (length of a vector) 又叫做**向量模** (vector norm)、**欧几里得距离** (Euclidean distance)、**欧几里得范数** (Euclidean norm) 或 L^2 **范数** (L2-norm)。

给定向量 $\boldsymbol{a}$：

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{8}$$

向量 $\boldsymbol{a}$ 的模为：

$$\|\boldsymbol{a}\| = \|\boldsymbol{a}\|_2 = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + \cdots a_n^2} = \left(\sum_{i=1}^{n} a_i^2\right)^{\frac{1}{2}} \tag{9}$$

观察上式，容易知道向量模非负，即 $\|\boldsymbol{a}\| \geq 0$ 。

注意，$\|\boldsymbol{a}\|_2$ 下角标 2，代表 L^2 范数。没有特殊说明，$\|\boldsymbol{a}\|$ 默认代表 L^2 范数。

L^2 范数是 L^p 范数的一种，本书第 3 章将介绍其他范数。

请大家注意如下有关 L^2 范数性质：

$$\begin{aligned} \|-\boldsymbol{a}\| &= \|\boldsymbol{a}\| \\ \|k\boldsymbol{a}\| &= |k|\|\boldsymbol{a}\| \end{aligned} \tag{10}$$

其中，k 为任意实数。

二维向量的模

特别地，对于如下二维向量 $\boldsymbol{a}$：

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{11}$$

二维向量指的是有两个元素的向量。

二维向量 $\boldsymbol{a}$ 的 L^2 范数为：

$$\|\boldsymbol{a}\| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2} \tag{12}$$

图 3 (b) 中向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的模可以这样计算得到：

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{a}\| &= \sqrt{4^2 + 3^2} = \sqrt{25} = 5 \\ \|\boldsymbol{b}\| &= \sqrt{(-3)^2 + 4^2} = \sqrt{25} = 5 \end{aligned} \tag{13}$$

二维向量 $\boldsymbol{a}$ 和横轴夹角可以通过反正切求解：

$$\theta_a = \arctan\left(\frac{a_2}{a_1}\right) \tag{14}$$

上述角度和直角坐标系直接关联，因此可以视作“绝对角度”。本章后续将介绍如何用向量内积求两个向量之间的“相对角度”。

`Bk4_Ch2_02.py` 计算图 3 (b) 中向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 模。函数 `numpy.linalg.norm()` 默认计算 L^2 范数，也可以用 `numpy.sqrt(np.sum(a**2))` 计算向量 $\boldsymbol{a}$ 的 L^2 范数。

等距线

值得一提的是，如果起点重合，和 $\|\boldsymbol{a}\|$ 长度 (模、L^2 范数) 相等的二维向量的终点位于同一个圆上，如图 10 (a) 所示。看到这里大家是否想到了本系列丛书《数学要素》第 7 章讲过的“等距线”。

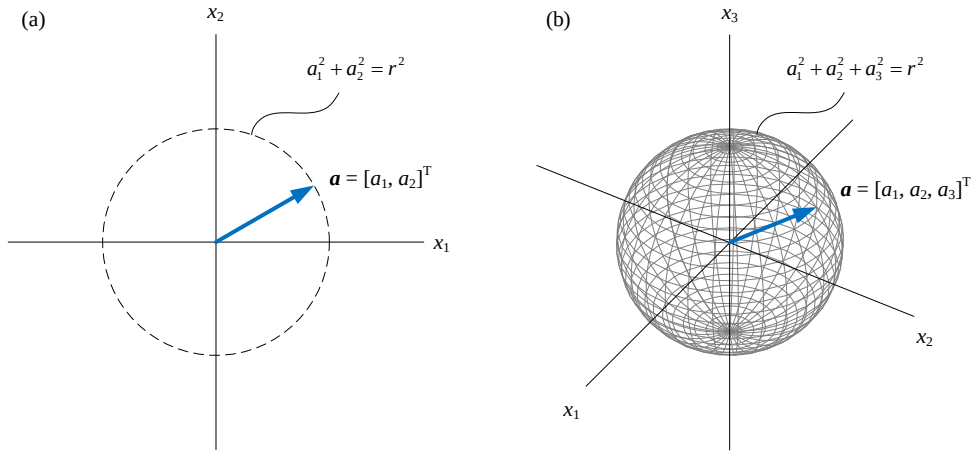


图 10. 等 L^2 范数向量

如图 11 所示，起点位于原点的二维向量 $\boldsymbol{x}$ 的模 $\|\boldsymbol{x}\|$ 取不同数值 c 时，我们可以得到一系列同心圆，对应的解析式如下：

$$\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} = c \tag{15}$$

强调一点，$\boldsymbol{x}$ 是向量，既有大小、又有方向；而 $\|\boldsymbol{x}\|$ 是标量，代表“距离”。$\|\cdot\|$这个运算符是一种“向量 → 标量”的运算规则。

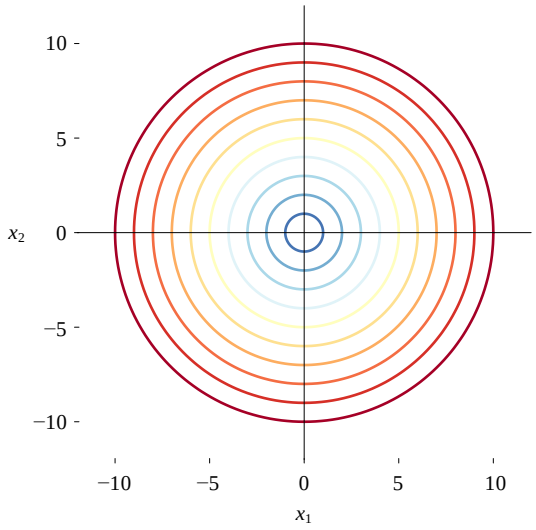


图 11. 起点为 $\boldsymbol{0}$、L^2范数相等的向量终点位于一系列同心圆上

Bk4_Ch2_03.py 绘制图 11。

三维向量的模

类似地，给定三维向量 $\boldsymbol{a}$:

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{16}$$

三维向量 $\boldsymbol{a}$ 的 L^2范数为:

$$\|\boldsymbol{a}\| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2} \tag{17}$$

如图 10 (b) 所示，起点位于原点、长度 (模、L^2范数) 相等的三维向量终点落在同一正圆球面上。

单位向量

长度为 1 的向量叫做**单位向量** (unit vector)。

非 $\boldsymbol{0}$ 向量 $\boldsymbol{a}$ 除以自身的模得到 $\boldsymbol{a}$ **方向上的单位向量** (unit vector in the direction of vector $\boldsymbol{a}$)：

$$\hat{\boldsymbol{a}} = \frac{\boldsymbol{a}}{\|\boldsymbol{a}\|} \tag{18}$$

$\hat{\boldsymbol{a}}$ 读作 “vector a hat”。`a/numpy.linalg.norm(a)` 可以计算非 $\boldsymbol{0}$ 向量 $\boldsymbol{a}$ 方向上的单位向量。

图 12 (a) 所示平面直角坐标系，起点位于原点的单位向量 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2]^T$ 终点位于**单位圆** (unit circle) 上，对应的解析式为：

$$\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} = 1 \quad \Rightarrow \quad x_1^2 + x_2^2 = 1 \tag{19}$$

这无数个单位向量 $\boldsymbol{x}$ 中，有两个单位向量最为特殊——$\boldsymbol{e}_1$ ($\boldsymbol{i}$) 和 $\boldsymbol{e}_2$ ($\boldsymbol{j}$)。如图 12 (b) 所示平面直角坐标系中，$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 分别为沿着 x_1 (水平) 和 x_2 (竖直) 方向的单位向量：

$$\boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{i} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{j} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{20}$$

显然，$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 相互垂直。

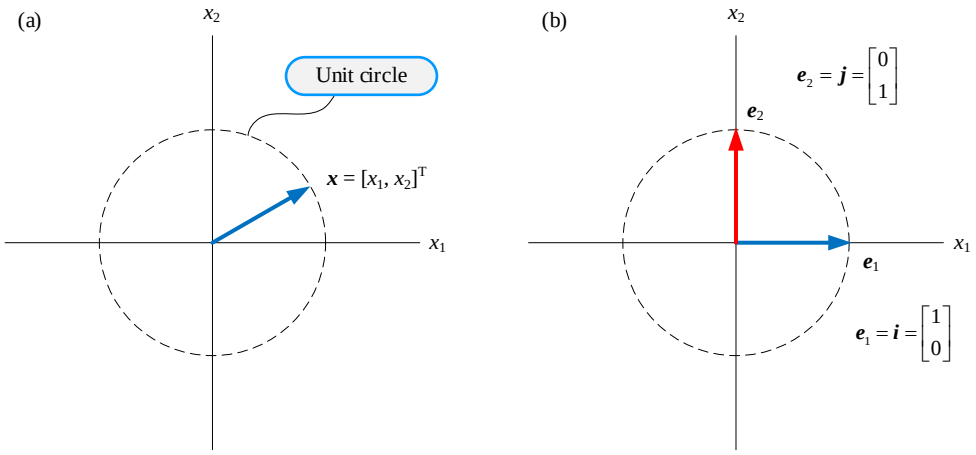


图 12. 单位向量

张成

图 3 (b) 给出向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 可以用 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 合成得到：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a} &= 4\boldsymbol{e}_1 + 3\boldsymbol{e}_2 \\ \boldsymbol{b} &= -3\boldsymbol{e}_1 + 4\boldsymbol{e}_2 \end{aligned} \tag{21}$$

(21) 用到的便是向量加减法，这是下一节要介绍的内容。

$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ **张成** (span) 图 3 (b) 整个平面。白话说，$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 好比经纬度，可以定位 $\mathbb{R}^2$ 平面任意一点。比如，$\mathbb{R}^2$ 平面上的任意一点 $\boldsymbol{x}$ 都可以写成：

$$\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2 \tag{22}$$

从集合角度来看，$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^2$。

本书第 7 章将讲解张成、向量空间等概念。

三维直角坐标系

三维直角坐标系中，$\boldsymbol{e}_1$ ($\boldsymbol{i}$)、$\boldsymbol{e}_2$ ($\boldsymbol{j}$) 和 $\boldsymbol{e}_3$ ($\boldsymbol{k}$) 代表沿着横轴、纵轴、竖轴的单位向量：

$$\boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{i} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{j} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_3 = \boldsymbol{k} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{23}$$

如图 13 所示，$\boldsymbol{e}_1$ ($\boldsymbol{i}$)、$\boldsymbol{e}_2$ ($\boldsymbol{j}$) 和 $\boldsymbol{e}_3$ ($\boldsymbol{k}$) 两两相互垂直。

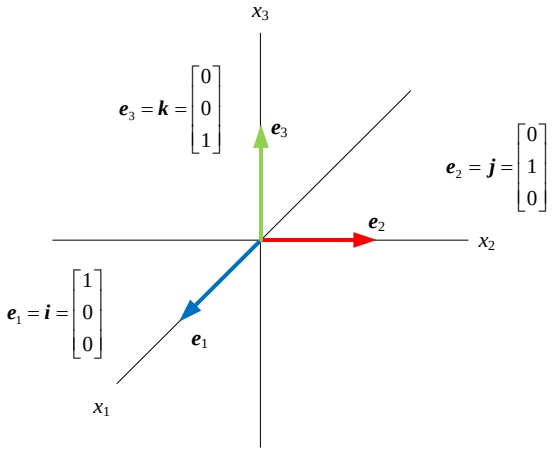


图 13. 三维空间单位向量

同理，图 13 这个三维空间是用 $\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$、$\boldsymbol{e}_3$ 张成的。白话说，$\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$、$\boldsymbol{e}_3$ 相当于经度、维度、海拔，定位能力从地表扩展到整个地球空间。

$\mathbb{R}^3$ 空间任意一点 $\boldsymbol{x}$ 可以写成：

$$\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2 + x_3\boldsymbol{e}_3 \tag{24}$$

此外，大家可能已经注意到，$\boldsymbol{e}_1$ 可以用不同的形式表达，比如：

$$\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}1\\0\\\vdots\\0\end{bmatrix} \tag{25}$$

上式中几个 $\boldsymbol{e}_1$ 虽然维度不同，但是本质上等价，它们代表不同维度空间中的 $\boldsymbol{e}_1$。这些 $\boldsymbol{e}_1$ 之间的关系是，从低维到高维或从高维到低维投影。

本书将在第 8、9、10 三章由浅入深介绍投影这一重要线性代数工具。

2.4 加减法：对应位置元素分别相加减

从数据角度看，两个等行数列向量相加，结果为对应位置元素分别相加，得到元素个数相同的列向量，比如下例：

$$\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}-2\\5\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}5\\-1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-2+5\\5-1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3\\4\end{bmatrix} \tag{26}$$

两个等行数列向量相减，则是对应元素分别相减，得到等行数列向量，比如：

$$\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}-2\\5\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}5\\-1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-2-5\\5-(-1)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-7\\6\end{bmatrix} \tag{27}$$

以上法则也适用于行向量。

几何视角

从几何角度看，**向量加法** (vector addition) 结果可以用**平行四边形法则** (parallelogram method) 或**三角形法则** (triangle method) 获得，具体如图 14 所示。

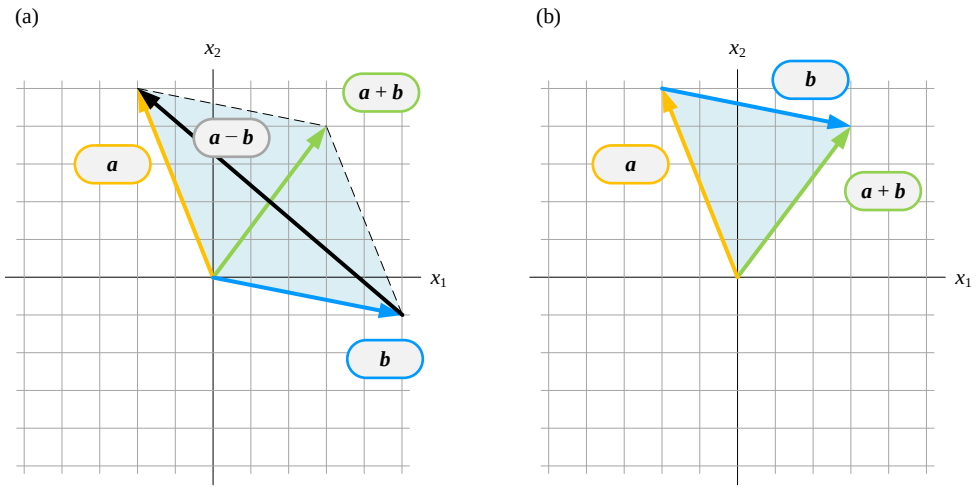


图 14. 几何角度看向量加法

向量减法 (vector subtraction) 可以写成向量加法。比如，向量 $\boldsymbol{a}$ 减去向量 $\boldsymbol{b}$，可以将向量 $\boldsymbol{b}$ 换向得到 $-\boldsymbol{b}$；然后再计算向量 $\boldsymbol{a}$ 与向量 $-\boldsymbol{b}$ 之和，即：

$$\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}+(-\boldsymbol{b})=\begin{bmatrix}-2\\5\end{bmatrix}+\underbrace{\begin{bmatrix}-5\\1\end{bmatrix}}_{-\boldsymbol{b}}=\begin{bmatrix}-7\\6\end{bmatrix} \tag{28}$$

⚠ 注意，向量 $\boldsymbol{a}$ 减去向量 $\boldsymbol{b}$，结果 $\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}$ 对应向量箭头指向 $\boldsymbol{a}$ 终点；相反，向量 $\boldsymbol{b}$ 减去向量 $\boldsymbol{a}$ 得到 $\boldsymbol{b}-\boldsymbol{a}$ 指向 $\boldsymbol{b}$ 终点。

两个向量相同，当且仅当两者大小方向均相同。如果两个向量的模 (长度) 相同但是方向相反，两者互为反向量。若两个向量方向相同或相反，则称向量平行。

请大家注意以下向量加减法性质：

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}+\boldsymbol{a}\\&(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})+\boldsymbol{c}=\boldsymbol{a}+(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c})\\&\boldsymbol{a}+(-\boldsymbol{a})=\boldsymbol{0}\end{aligned} \tag{29}$$

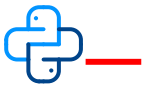
两点距离

向量差 $\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}$ 的模 (L^2 范数) $\|\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}\|$ 就是图 14 (a) 中 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 两点的欧氏距离，即：

$$\|\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}\|=\|\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}\|_2=\sqrt{(-7)^2+6^2}=\sqrt{49+36}=\sqrt{85} \tag{30}$$

$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 两点的欧氏距离的平方为：

$$\|\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}\|^2=\|\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}\|_2^2=(-7)^2+6^2=85 \tag{31}$$



Bk4_Ch2_04.py 计算本节向量加减法示例。

2.5 标量乘法：向量缩放

向量标量乘法 (scalar multiplication of vectors) 指的是标量和向量每个元素分别相乘，结果仍为向量。从几何角度来看，标量乘法将原向量按标量比例缩放，结果中向量方向同向或反向，如图 15 所示。

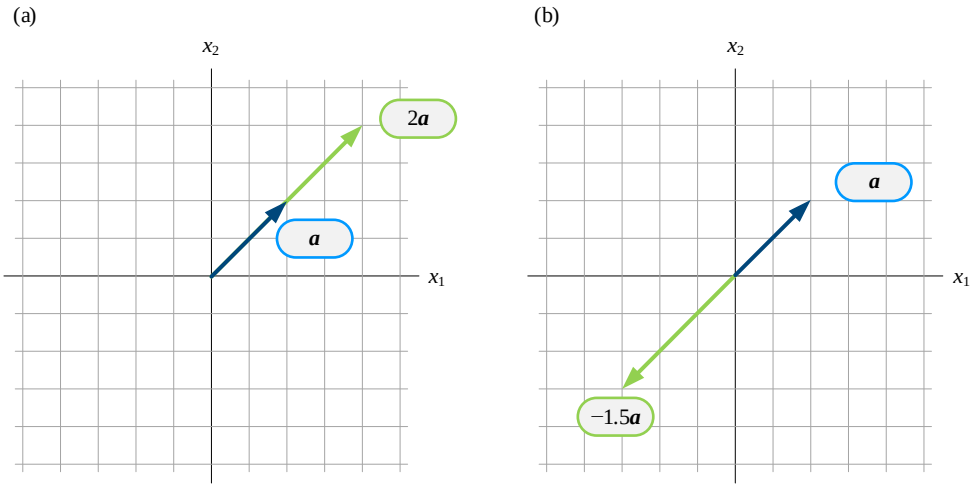
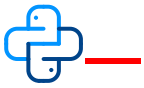


图 15. 向量标量乘法



Bk4_Ch2_05.py 完成图 15 中运算。

请大家注意以下向量标量乘法性质：

$$
\begin{aligned}
&(t+k)\boldsymbol{a} = t\boldsymbol{a} + k\boldsymbol{a} \\
&t(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}) = t\boldsymbol{a} + t\boldsymbol{b} \\
&t(k\boldsymbol{a}) = tk\boldsymbol{a} \\
&1\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a} \\
&-1\boldsymbol{a} = -\boldsymbol{a} \\
&0\boldsymbol{a} = \boldsymbol{0}
\end{aligned} \tag{32}
$$

其中，t 和 k 为标量。请大家特别注意，0 乘向量 $\boldsymbol{a}$ 结果不是 0，而是零向量 $\boldsymbol{0}$，这个零向量的形状取决于向量 $\boldsymbol{a}$。

2.6 向量内积：结果为标量

向量内积 (inner product)，又叫**标量积** (scalar product)、**点积** (dot product)、点乘。注意，向量内积的运算结果为标量，而非向量。

给定如下 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 两个等行数列向量：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{a} &= \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \\
\boldsymbol{b} &= \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}
\end{aligned} \tag{33}
$$

列向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的内积定义如下：

$$
\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \ldots + a_n b_n \tag{34}
$$

(34) 也适用于两个等列数的行向量计算内积。注意，向量内积也是一种“向量 → 标量”的运算规则。

图 16 所示的两个列向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的内积为：

$$
\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 5 \\ -2 \end{bmatrix} = 4 \times 5 + 3 \times (-2) = 14 \tag{35}
$$

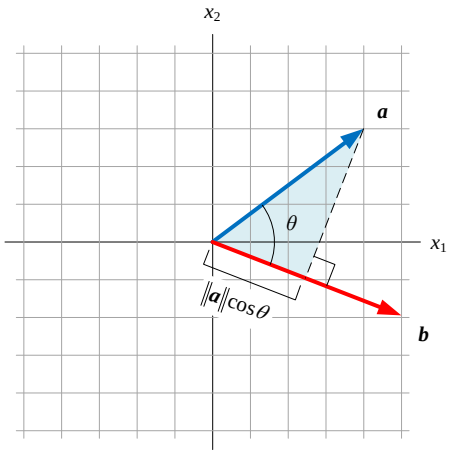


图 16. $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 两个平面向量

Bk4_Ch2_06.py 计算上述向量内积。此外，还可以用 numpy.dot() 计算向量内积。值得注意的是，如果输入为一维数组，numpy.dot() 输出结果为内积。

如果输入为矩阵，numpy.dot() 输出结果为矩阵乘积，相当于矩阵运算符@，比如 Bk4_Ch2_07.py 给出例子。

numpy.vdot() 函数也可以计算两个向量内积。如果输入是矩阵，矩阵会按照先行后列顺序展开成向量之后，再计算向量内积。Bk4_Ch2_08.py 给出示例。

常用的向量内积性质如下：

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a}\\&\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c})=\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}+\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c}\\&(k\boldsymbol{a})\cdot(t\boldsymbol{b})=kt(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})\end{aligned}\tag{36}$$

请读者格外注意以下几个向量内积运算和 Σ 求和运算的关系：

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{1}\cdot\boldsymbol{x}=x_1+x_2+\cdots x_n=\sum_{i=1}^{n}x_i\\&\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}=x_1^2+x_2^2+\cdots x_n^2=\sum_{i=1}^{n}x_i^2\\&\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}=x_1y_1+x_2y_2+\cdots x_ny_n=\sum_{i=1}^{n}x_iy_i\end{aligned}\tag{37}$$

其中，

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1 & x_2 & \cdots & x_n\end{bmatrix}^{\mathrm{T}},\quad \boldsymbol{1}=\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\end{bmatrix}^{\mathrm{T}},\quad \boldsymbol{y}=\begin{bmatrix}y_1 & y_2 & \cdots & y_n\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\tag{38}$$

本书第 5 章还会从矩阵乘法角度介绍更多求和运算。

几何视角

如图 16 所示，从几何角度看，向量内积相当于两个向量的模 (L^2 范数) 与它们之间夹角余弦值三者之积：

$$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}=\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|\cos\theta \tag{39}$$

注意，上式中 θ 代表向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的“相对夹角”。

此外，向量内积还可以从投影 (projection) 角度来解释，这是本书第 9 章要介绍的内容。

$\boldsymbol{a}$ 的 L^2 范数也可以通过向量内积求得：

$$\|\boldsymbol{a}\|_2=\|\boldsymbol{a}\|=\sqrt{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}}=\sqrt{\langle\boldsymbol{a},\boldsymbol{a}\rangle} \tag{40}$$

(40) 左右等式平方得到：

$$\|\boldsymbol{a}\|_2^2=\|\boldsymbol{a}\|^2=\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}=\langle\boldsymbol{a},\boldsymbol{a}\rangle \tag{41}$$

上式相当于“距离的平方”。

柯西-施瓦茨不等式

观察 (39)，我们可以发现 $\cos\theta$ 的取值范围为 [−1, 1]，因此 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 内积取值范围如下：

$$-\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|\le\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}\le\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\| \tag{42}$$

图 17 所示为 7 个不同向量夹角状态。

$\theta=0°$时，$\cos\theta=1$，$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 同向，此时向量内积最大；$\theta=180°$时，$\cos\theta=-1$，$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 反向，此时向量内积最小。

平面上，非零向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 垂直，$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 夹角为 90°，两者向量内积为 0：

$$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}=\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|\cos 90°=0 \tag{43}$$

多维向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 向量内积为 0，我们称 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ **正交** (orthogonal)。本书上一章提到，正交是线性代数的概念，是垂直的推广。

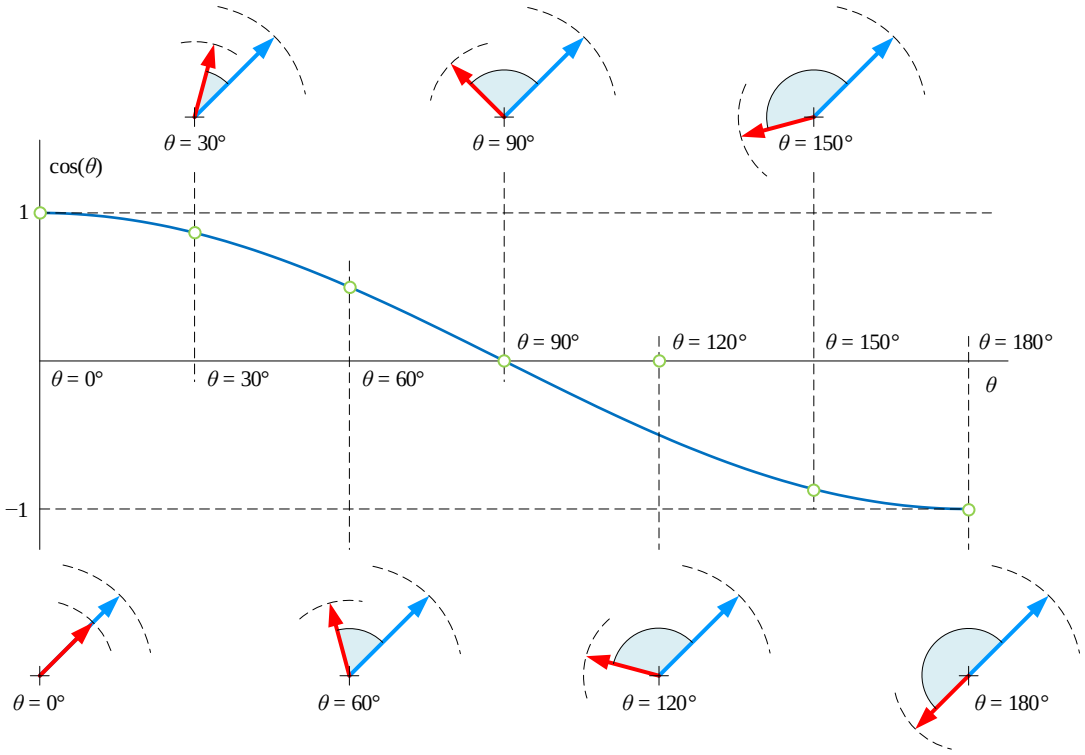


图 17. 向量夹角

有了以上分析，我们就可以引入一个重要的不等式——**柯西-施瓦茨不等式** (Cauchy–Schwarz inequality)：

$$(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})^2 \leq \|\boldsymbol{a}\|^2\|\boldsymbol{b}\|^2 \tag{44}$$

即：

$$|\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}| \leq \|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\| \tag{45}$$

$|\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}|$ 代表 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 向量内积绝对值。

用尖括号来表达向量内积，(44) 可以写成：

$$\langle \boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\rangle^2 \leq \langle \boldsymbol{a},\boldsymbol{a}\rangle\langle \boldsymbol{b},\boldsymbol{b}\rangle \tag{46}$$

即：

$$|\langle \boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\rangle| \leq \|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\| \tag{47}$$

在 $\mathbb{R}^n$ 空间中，上述不等式等价于：

$$\left(\sum_{i=1}^{n} a_i b_i\right)^2 \leq \left(\sum_{i=1}^{n} a_i^2\right)\left(\sum_{i=1}^{n} b_i^2\right) \tag{48}$$

余弦定理

回忆丛书第一本书讲解的**余弦定理** (law of cosines)：

$$c^2 = a^2 + b^2 - 2ab\cos\theta \tag{49}$$

其中，a、b 和 c 为图 18 所示三角形的三边的边长。下面，我们来用余弦定理推导 (39)。

如图 18 所示，将三角形三个边视作向量，将三个向量长度代入 (49)，可以得到：

$$\|\boldsymbol{c}\|^2 = \|\boldsymbol{a}\|^2 + \|\boldsymbol{b}\|^2 - 2\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|\cos\theta \tag{50}$$

向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 之差为向量 $\boldsymbol{c}$：

$$\boldsymbol{c} = \boldsymbol{a} - \boldsymbol{b} \tag{51}$$

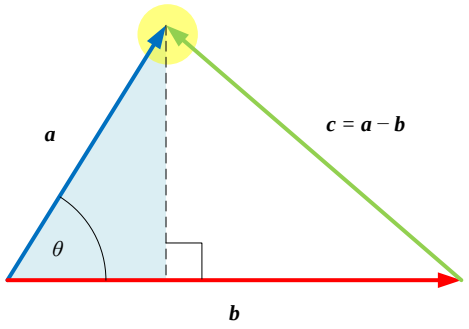


图 18. 余弦定理

(51) 等式左右分别和自身计算向量内积，得到如下等式：

$$\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{c} = (\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b})\cdot(\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}) \tag{52}$$

整理上式得到：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{c} &= (\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b})\cdot(\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}) = \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{b} - \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} - \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a} \\ &= \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{b} - 2\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}\end{aligned} \tag{53}$$

利用 (41)，(53) 可以写作：

$$\|\boldsymbol{c}\|^2 = \|\boldsymbol{a}\|^2 + \|\boldsymbol{b}\|^2 - 2\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} \tag{54}$$

比较 (50) 和 (54)，可以得到：

$$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}=\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|\cos\theta \tag{55}$$

在概率统计、数据分析、机器学习等领域，向量内积无处不在。下面举几个例子。

在多维空间中，给定 A 和 B 坐标如下：

$$A(a_1,a_2,...,a_n),\ B(b_1,b_2,...,b_n) \tag{56}$$

计算 A 和 B 两点的距离 AB：

$$\begin{aligned} AB&=\sqrt{(a_1-b_1)^2+(a_2-b_2)^2+\cdots+(a_n-b_n)^2}\\ &=\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(a_i-b_i)^2} \end{aligned} \tag{57}$$

用起点位于原点的向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 分别代表 A 和 B 点，AB 距离就是 $\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}$ 的 L^2 范数，也就是欧几里得距离：

$$AB=\|\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}\|=\sqrt{(\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b})\cdot(\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b})}=\sqrt{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{b}-2\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}} \tag{58}$$

回忆《数学要素》一册中介绍的样本方差公式，具体如下：

$$\mathrm{var}(X)=\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2 \tag{59}$$

注意，对于总体方差，上式分母中 $n-1$ 改为 n。上式还默认 X 为有 n 个相等概率值的平均分布。

令 $\boldsymbol{x}$ 为，

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1 & x_2 & \cdots & x_n\end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{60}$$

(59) 可以写成：

$$\mathrm{var}(X)=\frac{(\boldsymbol{x}-\mu)\cdot(\boldsymbol{x}-\mu)}{n-1} \tag{61}$$

根据广播原则，$\boldsymbol{x}-\mu$ 相当于向量 $\boldsymbol{x}$ 的每一个元素分别减去 μ。

回忆总样本协方差公式：

$$\mathrm{cov}(X,Y)=\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu_X)(y_i-\mu_Y) \tag{62}$$

同样，对于总体协方差，上式分母中 $n-1$ 改为 n。

同样利用向量内积运算法则，上式可以写成：

$$\operatorname{cov}(X,Y)=\frac{(\boldsymbol{x}-\mu_X)\cdot(\boldsymbol{y}-\mu_Y)}{n-1} \tag{63}$$

本书第 22 章将从线性代数角度再和大家探讨概率统计相关内容。

2.7 向量夹角：反余弦

根据 (39)，可以得到非零向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 夹角余弦值：

$$\cos\theta=\frac{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}}{\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|} \tag{64}$$

通过反余弦，可以得到向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 夹角：

$$\theta=\arccos\left(\frac{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}}{\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|}\right) \tag{65}$$

arccos() 为反余弦函数，即从余弦值获得弧度。需要时，可以进一步将弧度转化为角度。再次强调，(65) 代表向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 之间的“相对角度”。而 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{e}_1$ 的夹角可以视作“绝对夹角”。

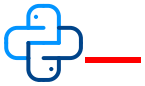


图 16 中向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 夹角弧度值和角度值可以通过 `Bk4_Ch2_09.py` 计算。

极坐标

下面，我们将向量放在极坐标中解释向量夹角余弦值。给定向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 坐标如下：

$$\boldsymbol{a}=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}b_1\\b_2\end{bmatrix} \tag{66}$$

向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 在极坐标中各自的角度为 θ_a 和 θ_b。角度 θ_a 和 θ_b 的正弦和余弦可以通过下式计算得到：

$$\begin{cases}\cos\theta_a=\dfrac{a_1}{\|\boldsymbol{a}\|},\quad \sin\theta_a=\dfrac{a_2}{\|\boldsymbol{a}\|}\\[2ex]\cos\theta_b=\dfrac{b_1}{\|\boldsymbol{b}\|},\quad \sin\theta_b=\dfrac{b_2}{\|\boldsymbol{b}\|}\end{cases} \tag{67}$$

θ_a 和 θ_b 就相当于绝对角度。

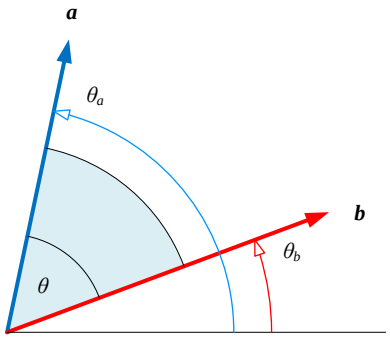


图 19. 极坐标中解释向量夹角

根据角的余弦和差恒等式，cos(θ) 可以由 θ_a 和 θ_b 正、余弦构造：

$$\begin{aligned}\cos(\theta) &= \cos(\theta_b - \theta_a) = \cos(\theta_b)\cos(\theta_a) + \sin(\theta_b)\sin(\theta_a) \\ &= \frac{a_1}{\|\boldsymbol{a}\|}\frac{b_1}{\|\boldsymbol{b}\|} + \frac{a_2}{\|\boldsymbol{a}\|}\frac{b_2}{\|\boldsymbol{b}\|} = \frac{a_1 b_1 + a_2 b_2}{\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|}\end{aligned} \tag{68}$$

将 (67) 代入 (68) 得到：

$$\cos\theta = \frac{a_1}{\|\boldsymbol{a}\|}\frac{b_1}{\|\boldsymbol{b}\|} + \frac{a_2}{\|\boldsymbol{a}\|}\frac{b_2}{\|\boldsymbol{b}\|} = \frac{\overbrace{a_1 b_1 + a_2 b_2}^{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}}}{\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|} \tag{69}$$

相信大家已经在上式分子中看到向量内积。

单位向量

本章前文介绍过某一向量方向上的单位向量这个概念，单位向量为我们提供了观察向量夹角余弦值的另外一个视角。

给定两个非 $\boldsymbol{0}$ 向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$，首先计算它们各自方向上的单位向量：

$$\hat{\boldsymbol{a}} = \frac{\boldsymbol{a}}{\|\boldsymbol{a}\|}, \quad \hat{\boldsymbol{b}} = \frac{\boldsymbol{b}}{\|\boldsymbol{b}\|} \tag{70}$$

两个单位向量的内积就是夹角的余弦值：

$$\hat{\boldsymbol{a}}\cdot\hat{\boldsymbol{b}} = \frac{\boldsymbol{a}}{\|\boldsymbol{a}\|}\cdot\frac{\boldsymbol{b}}{\|\boldsymbol{b}\|} = \cos\theta \tag{71}$$

正交单位向量

本章前文介绍的平面直角坐标系中 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 分别代表为沿着横轴、纵轴的单位向量。它们相互正交，也就是向量内积为 0：

$$\boldsymbol{e}_1 \cdot \boldsymbol{e}_2 = \langle \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2 \rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0 \tag{72}$$

在一个平面上，单位向量 $\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$ 相互垂直，它俩“张起”的方方正正的网格，就是标准直角坐标系，具体如图 20 (a) 所示。

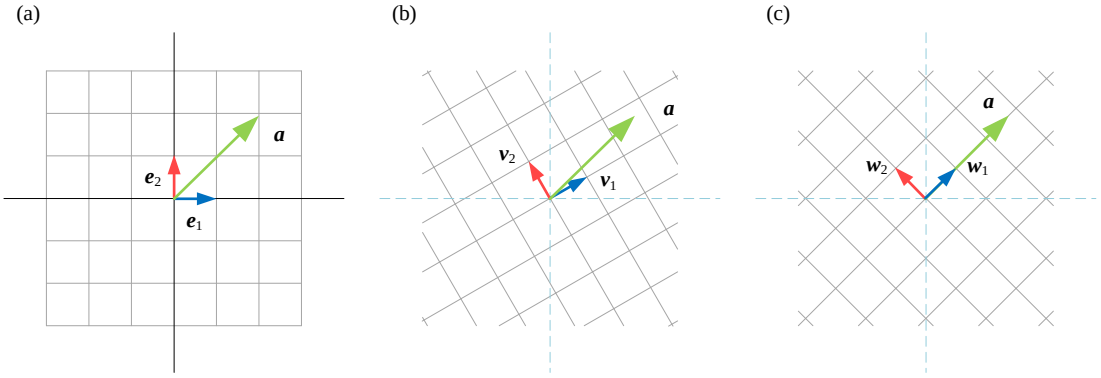


图 20. 向量 $\boldsymbol{a}$ 在三个不同的正交直角坐标系中位置

而平面上，成对正交单位向量有无数组，比如图 21 所示平面两组正交单位向量：

$$\boldsymbol{v}_1 \cdot \boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix} = 0, \quad \boldsymbol{w}_1 \cdot \boldsymbol{w}_2 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} = 0 \tag{73}$$

$\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 构造如图 20 (b) 所示直角坐标系。类似地，$\boldsymbol{w}_1$、$\boldsymbol{w}_2$ 也可以构造如图 20 (c) 所示直角坐标系。也就是一个 $\mathbb{R}^2$ 平面上可以存在无数个直角坐标系。

比较图 20 三幅子图，同一个向量 $\boldsymbol{a}$ 在三个直角坐标系中有不同的坐标值。向量 $\boldsymbol{a}$ 在图 20 (a) 所示直角坐标系的坐标值很容易确定为 (2, 2)。目前我们还没有掌握足够的数学工具来计算向量 $\boldsymbol{a}$ 在图 20 (b) 和 (c) 两个直角坐标系中的坐标值。这个问题要留到本书第 7 章来解决。

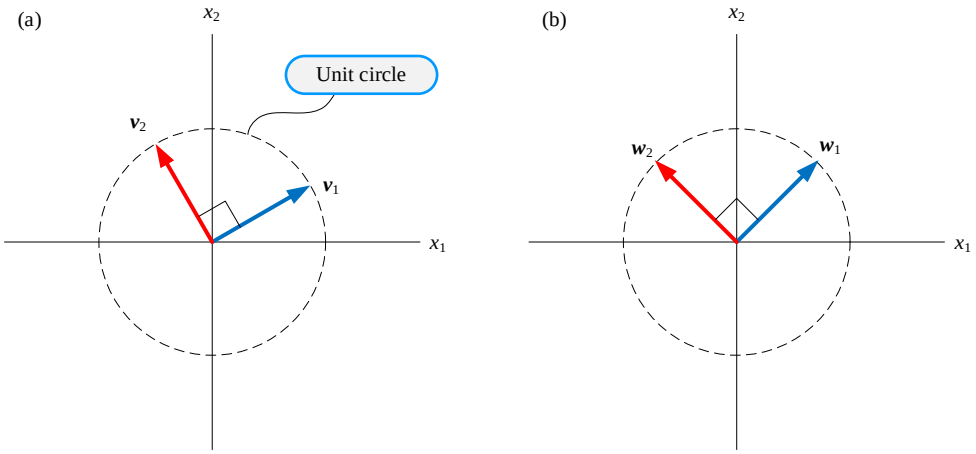


图 21. 两组正交单位向量

$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$、$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$、$[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 都叫做 $\mathbb{R}^2$ 的规范正交基 (orthonormal basis)，而 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 有自己特别的名字——标准正交基 (standard basis)。而且大家很快就会发现 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 旋转一定角度可以得到 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$、$[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$。本书第 7 章将深入介绍相关概念。

2.8 余弦相似度和余弦距离

余弦相似度

机器学习中有一个重要的概念，叫做**余弦相似度** (cosine similarity)。余弦相似度用向量夹角的余弦值度量样本数据的相似性。

用 $k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{q})$ 来表达 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 两个列向量的余弦相似度，定义如下：

$$k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = \frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{q}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{q}\|} = \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{q}\|} \tag{74}$$

上一节我们介绍过，如果两个向量方向相同，则夹角 θ 余弦值 $\cos(\theta) = 1$。若两个向量方向完全相反，夹角 θ 余弦值 $\cos(\theta) = -1$。

因此，余弦相似度取值范围在 $[-1, +1]$ 之间。此外，大家是否在余弦相似度中看到相关性系数的影子？

余弦距离

下面再介绍**余弦距离** (cosine distance)。余弦距离定义基于余弦相似度，用 $d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q})$ 来表达 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 两个列向量的余弦距离，具体定义如下：

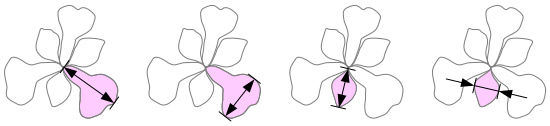
$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = 1 - k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = 1 - \frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{q}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{q}\|} \tag{75}$$

本章前文介绍的欧几里得距离，即 L^2 范数，是一种最常见的距离度量。本节介绍的余弦距离也是一种常见的距离度量。L^2 范数的取值范围为 $[0, +\infty)$，而余弦距离的取值范围为 $[0, 2]$。

本书下一章，以及《概率统计》、《机器学习》将逐步介绍常见距离度量，“距离”的内涵会不断丰富。

鸢尾花例子

图 22 给出鸢尾花四个样本数据。$\boldsymbol{x}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(2)}$ 两个样本对应的鸢尾花都是 setosa 这一亚属。$\boldsymbol{x}^{(51)}$ 样本对应的鸢尾花为 versicolor 这一亚属；$\boldsymbol{x}^{(101)}$ 样本对应的鸢尾花为 virginica 这一亚属。



	Sepal length	Sepal width	Petal length	Petal width	
$\boldsymbol{x}^{(1)}$, 1	5.1	3.5	1.4	0.2	setosa
$\boldsymbol{x}^{(2)}$, 2	4.9	3	1.4	0.2	setosa
$\boldsymbol{x}^{(51)}$, 51	7	3.2	4.7	1.4	versicolor
$\boldsymbol{x}^{(101)}$, 101	6.3	3.3	6	2.5	virginica

图 22. 鸢尾花的四个样本数据

计算 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(2)}$ 两个向量余弦距离：

$$\begin{aligned} d\left(\boldsymbol{x}^{(1)},\boldsymbol{x}^{(2)}\right) &= 1 - k\left(\boldsymbol{x}^{(1)},\boldsymbol{x}^{(2)}\right) \\ &= 1 - \frac{5.1\times4.9 + 3.5\times3 \ + \ 1.4\times1.4 \ + \ 0.2\times0.2}{\sqrt{5.1^2+3.5^2 \ + \ 1.4^2 \ + \ 0.2^2}\times\sqrt{4.9^2+3^2 \ + \ 1.4^2 \ + \ 0.2^2}} \\ &= 1 - \frac{37.49}{6.34507\times5.9169} \\ &= 1 - 0.99857 = 0.00142 \end{aligned} \tag{76}$$

同理，可以计算得到 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(51)}$，$\boldsymbol{x}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(101)}$ 两个余弦距离：

$$\begin{aligned} d\left(\boldsymbol{x}^{(1)},\boldsymbol{x}^{(51)}\right) &= 0.07161 \\ d\left(\boldsymbol{x}^{(1)},\boldsymbol{x}^{(101)}\right) &= 0.13991 \end{aligned} \tag{77}$$

可以发现，$\boldsymbol{x}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(2)}$ 两朵同属于 setosa 亚属的鸢尾花，余弦距离较近，也就是较为相似。

$\boldsymbol{x}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(101)}$ 分别属于 setota 和 virginica 亚属，余弦距离较远，也就是不相似。

大家思考以下几个问题，鸢尾花数据有 150 个数据点，任意两个数据点可以计算得到一个余弦相似度。因此成对余弦相似度有 11175 个，大家想想该怎么便捷计算、存储这些数据呢？

此外，大家可以试着先给数据去均值，如图 23 所示，将向量起点移动到原点，然后再计算余弦距离，并比较结果差异。和之前相比，去均值是否有利于区分不同类别鸢尾花？

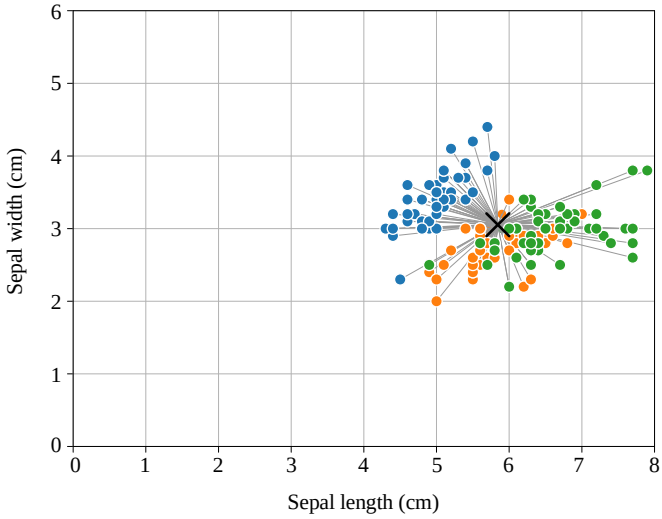


图 23. 向量起点移到鸢尾花数据质心

`Bk4_Ch2_10.py` 可以完成上述计算。感兴趣的读者可以修改代码计算 $\boldsymbol{x}^{(51)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(101)}$ 的余弦距离，并结合样本标签分析结果。

2.9 向量积：结果为向量

向量积 (vector product) 也叫**叉乘** (cross product)，向量积结果为向量。也就是说，向量积一种“向量 → 向量”的运算规则。

$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 向量积，记做 $\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$。$\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$ 作为一个向量，我们需要了解它的方向和大小两个成分。

方向

如图 24 所示，$\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$ 方向分别垂直于向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$，即 $\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$ 垂直于向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 构成平面。

向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 以及 $\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ 三者关系可以用右手法则判断，如图 25 所示。图 25 这幅图中，我们可以看到 $\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{a}$ 方向相反。

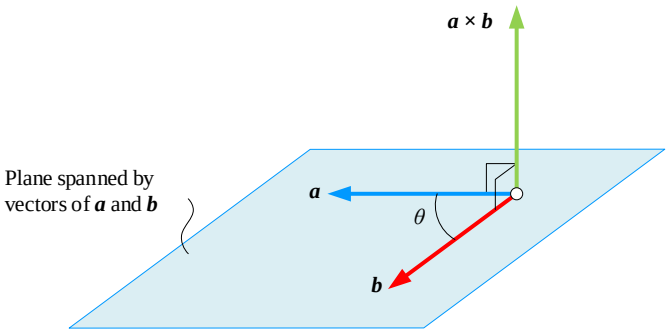


图 24. $\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ 垂直于向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 构成平面

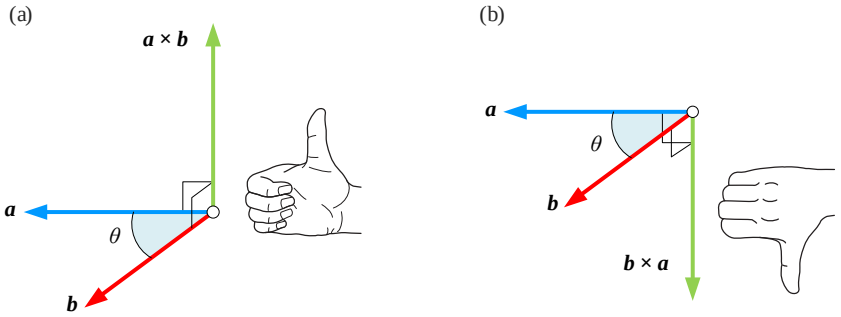


图 25. 向量叉乘右手定则

大小

$\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ 模，也就是 $\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ 向量积大小，通过下式获得：

$$\|\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}\| = \|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|\sin(\theta) \tag{78}$$

其中 θ 为向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 夹角。如图 26 所示，从几何角度，向量积的模 $\|\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}\|$ 相当于图中平行四边形的面积。

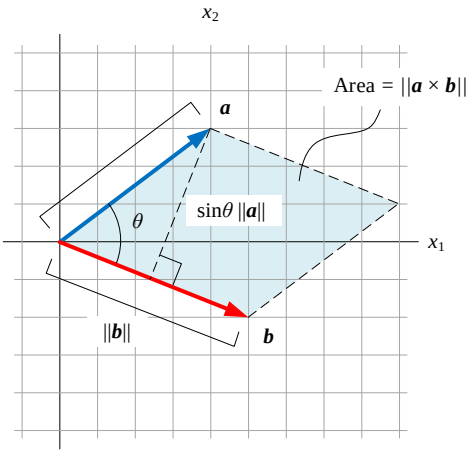


图 26. $\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$ 向量积的几何含义

正交向量之间的叉乘

如图 27 (a) 所示，空间直角坐标系中三个正交向量 $\boldsymbol{e}_1$ ($\boldsymbol{i}$) (横轴正方向)、$\boldsymbol{e}_2$ ($\boldsymbol{j}$) (纵轴正方向) 和 $\boldsymbol{e}_3$ ($\boldsymbol{k}$) (竖轴正方向) 向量叉乘关系存在如下关系：

$$\boldsymbol{i} \times \boldsymbol{j} = \boldsymbol{k}, \quad \boldsymbol{j} \times \boldsymbol{k} = \boldsymbol{i}, \quad \boldsymbol{k} \times \boldsymbol{i} = \boldsymbol{j} \tag{79}$$

图 27 (b) 展示以上三个等式中 $\boldsymbol{i}$、$\boldsymbol{j}$ 和 $\boldsymbol{k}$ 前后顺序关系。若调换 (79) 叉乘元素顺序，结果反向，对应以下三个运算式：

$$\boldsymbol{j} \times \boldsymbol{i} = -\boldsymbol{k}, \quad \boldsymbol{k} \times \boldsymbol{j} = -\boldsymbol{i}, \quad \boldsymbol{i} \times \boldsymbol{k} = -\boldsymbol{j} \tag{80}$$

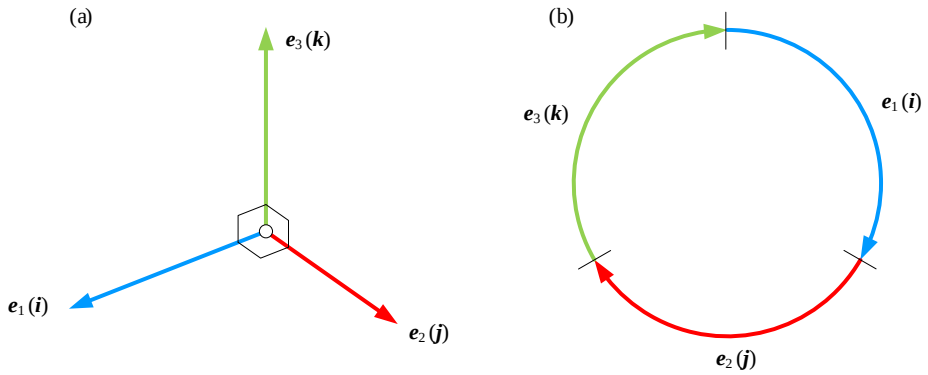


图 27. 三维空间正交单位向量基底之间关系

特别的，向量与自身叉乘等于 $\boldsymbol{0}$ 向量，比如：

$$\boldsymbol{i} \times \boldsymbol{i} = \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{j} \times \boldsymbol{j} = \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{k} \times \boldsymbol{k} = \boldsymbol{0} \tag{81}$$

下列为叉乘运算常见性质：

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{a}=\boldsymbol{0}\\
&\boldsymbol{a}\times(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c})=\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}+\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{c}\\
&(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})\times\boldsymbol{c}=\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{c}+\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}\\
&\boldsymbol{a}\times(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})\neq(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\times\boldsymbol{c}\\
&k(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})=k(\boldsymbol{a})\times\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}\times(k\boldsymbol{b})\\
&\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})=(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{c}
\end{aligned}
\tag{82}
$$

任意两个向量的叉乘

在三维直角坐标系中，用 $\boldsymbol{i}$、$\boldsymbol{j}$ 和 $\boldsymbol{k}$ 表达向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{a}&=a_1\boldsymbol{i}+a_2\boldsymbol{j}+a_3\boldsymbol{k}\\
\boldsymbol{b}&=b_1\boldsymbol{i}+b_2\boldsymbol{j}+b_3\boldsymbol{k}
\end{aligned}
\tag{83}
$$

整理向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 叉乘，如下：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}&=(a_1\boldsymbol{i}+a_2\boldsymbol{j}+a_3\boldsymbol{k})\times(b_1\boldsymbol{i}+b_2\boldsymbol{j}+b_3\boldsymbol{k})\\
&=a_1b_1(\boldsymbol{i}\times\boldsymbol{i})+a_1b_2(\boldsymbol{i}\times\boldsymbol{j})+a_1b_3(\boldsymbol{i}\times\boldsymbol{k})\\
&+a_2b_1(\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{i})+a_2b_2(\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{j})+a_2b_3(\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{k})\\
&+a_3b_1(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{i})+a_3b_2(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{j})+a_3b_3(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k})\\
&=(a_2b_3-a_3b_2)\boldsymbol{i}+(a_3b_1-a_1b_3)\boldsymbol{j}+(a_1b_2-a_2b_1)\boldsymbol{k}
\end{aligned}
\tag{84}
$$

$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 叉乘还可以通过行列式求解，我们将在本书第 4 章讲解。

举个例子

下面结合代码计算 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 两个向量叉乘：

$$
\boldsymbol{a}=\begin{bmatrix}-2\\1\\1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}1\\-2\\-1\end{bmatrix}
\tag{85}
$$

$\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ 结果如下：

$$
\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}1\\-1\\3\end{bmatrix}
\tag{86}
$$

Bk4_Ch2_11.py 计算得到 (86)。其中，numpy.cross() 函数可以用来计算列向量和行向量的向量积。

2.10 逐项积：对应元素分别相乘

元素乘积 (element-wise multiplication)，也称为**阿达玛乘积** (Hadamard product) 或**逐项积** (piecewise product)。逐项积指的是两个形状相同的矩阵，对应元素相乘得到同样形状的矩阵。向量是一种特殊矩阵，阿达玛乘积也适用于向量。图 28 给出的是从数据角度看向量逐项积运算。

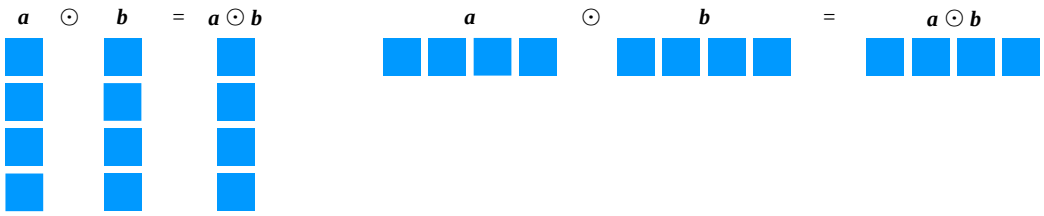


图 28. 向量逐项积运算

给定如下 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 两个等行数列向量：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a} &= \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{b} &= \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\end{aligned} \tag{87}$$

列向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的逐项积定义如下：

$$\boldsymbol{a} \odot \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} a_1 b_1 & a_2 b_2 & \cdots & a_n b_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{88}$$

逐项积是一种“向量 → 向量”的运算规则。

`Bk4_Ch2_12.py` 计算行向量逐项积。

2.11 向量张量积：张起网格面

张量积 (tensor product) 又叫**克罗内克积** (Kronecker product)，两个列向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 张量积 $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 定义如下：

$$\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}_{n\times 1}\otimes\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\\vdots\\b_m\end{bmatrix}_{m\times 1}=\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\\vdots\\b_m\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}a_1b_1 & a_1b_2 & \cdots & a_1b_m\\a_2b_1 & a_2b_2 & \cdots & a_2b_m\\\vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\a_nb_1 & a_nb_2 & \cdots & a_nb_m\end{bmatrix}_{n\times m} \tag{89}$$

向量张量积是一种“向量 → 矩阵”的运算规则。本书偶尔也管张量积叫“外积”。注意，有些教材中“外积”指的是向量积 (叉乘)。

⚠ 注意，(89) 上式中 $\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$ 为向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$ 的矩阵乘法。本书第 4、5、6 三章要从不同角度讲解矩阵乘法。

向量 $\boldsymbol{a}$ 和其自身张量积 $\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{a}$ 结果为方阵：

$$\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{a}=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}_{n\times 1}\otimes\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}_{n\times 1}=\boldsymbol{a}\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}a_1a_1 & a_1a_2 & \cdots & a_1a_n\\a_2a_1 & a_2a_2 & \cdots & a_2a_n\\\vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\a_na_1 & a_na_2 & \cdots & a_na_n\end{bmatrix} \tag{90}$$

请大家注意张量积一些常见性质：

$$\begin{aligned}
&(\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{a})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{a}\\
&(\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{a}\\
&(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})\otimes\boldsymbol{v}=\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{v}+\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{v}\\
&\boldsymbol{v}\otimes(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})=\boldsymbol{v}\otimes\boldsymbol{a}+\boldsymbol{v}\otimes\boldsymbol{b}\\
&t(\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b})=(t\boldsymbol{a})\otimes\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}\otimes(t\boldsymbol{b})\\
&(\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b})\otimes\boldsymbol{v}=\boldsymbol{a}\otimes(\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{v})
\end{aligned} \tag{91}$$

几何视角

图 29 所示为从几何图像角度解释向量的张量积。向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 相当于两个维度上的支撑框架，两者的张量积则“张起”一个网格面 $\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b}$。

当我们关注 $\boldsymbol{b}$ 方向时，网格面沿同一方向的每一条曲线都类似 $\boldsymbol{b}$，唯一的差别是高度上存在一定比例的缩放，这个缩放比例就是 a_i。a_i 是向量 $\boldsymbol{a}$ 中的某一个元素。

同理，观察 $\boldsymbol{a}$ 方向的网格面，每一条曲线都类似 $\boldsymbol{a}$。向量 $\boldsymbol{b}$ 的某一元素 b_j 提供曲线高度的缩放系数。

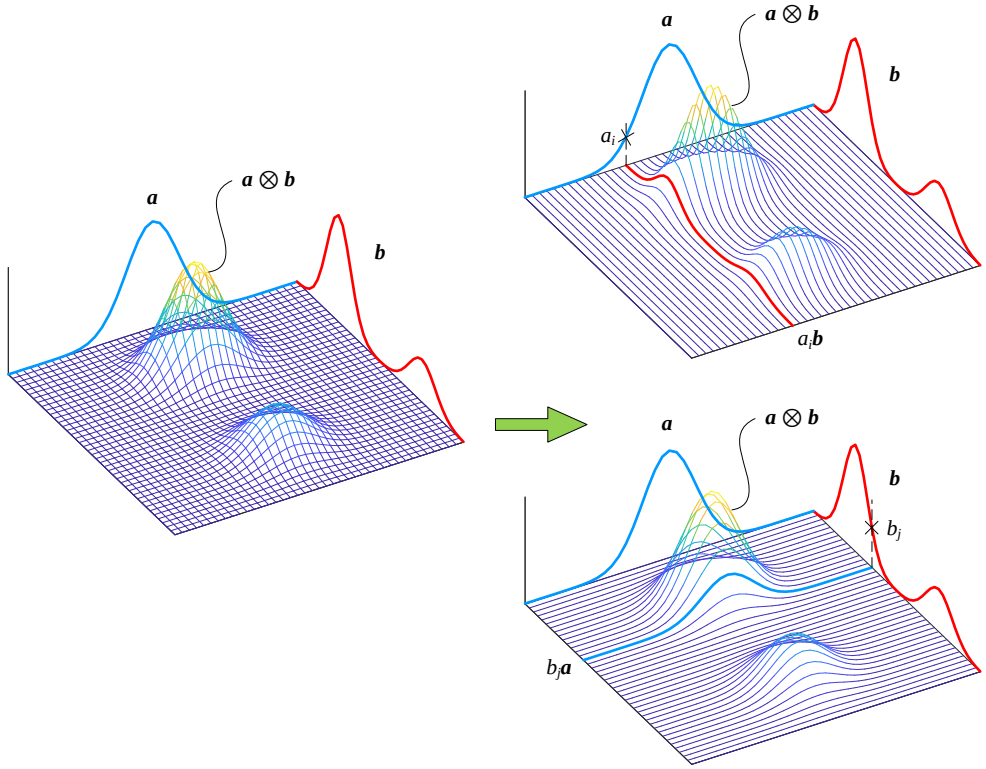


图 29. 从几何角度解释向量张量积

举个例子

给定列向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 分别为：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a} &= \begin{bmatrix} 0.5 & -0.7 & 1 & 0.25 & -0.6 & -1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{b} &= \begin{bmatrix} -0.8 & 0.5 & -0.6 & 0.9 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\end{aligned} \tag{92}$$

图 30 所示为张量积 $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 结果热图，形状为 6 × 4。

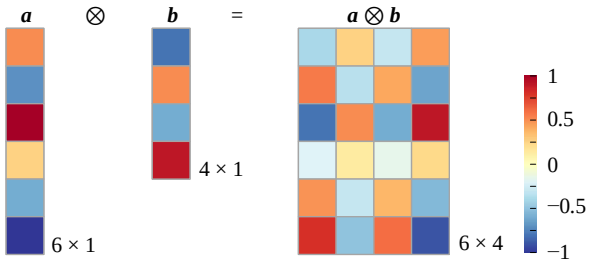


图 30. 张量积 $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 热图

观察 (89)，利用矩阵乘法展开，发现 $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 可以写成两种形式：

$$\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}b_1\boldsymbol{a} & b_2\boldsymbol{a} & \cdots & b_1\boldsymbol{a}\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}a_1\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\\ a_2\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\\ \vdots\\ a_n\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}_{n\times 1} \tag{93}$$

上式中，第一种形式相当于，$\boldsymbol{a}$ 先按不同比例 (b_j) 缩放得到 $b_j\boldsymbol{a}$，再左右排列。第二种形式相当于，$\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$ 先按不同比例 (a_i) 缩放得到 $a_i\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$，再上下叠加。如果对于 (93) 这种矩阵乘法展开方式感到陌生，请大家读完第 4 ~ 6 章后再回头看这部分内容。

如图 31 (a) 所示，$\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b}$ 的每一列都和 $\boldsymbol{a}$ 相似，也就是说它们之间呈现倍数关系。类似地，如图 31 (b) 所示，$\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b}$ 等价于 $\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$，因此 $\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b}$ 每一行都和 $\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$ 相似，也呈现倍数关系。

本书第 7 章会聊到向量的秩 (rank)，大家就会知道 $\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b}$ 的秩为 1，就是因为行、列这种“相似”。

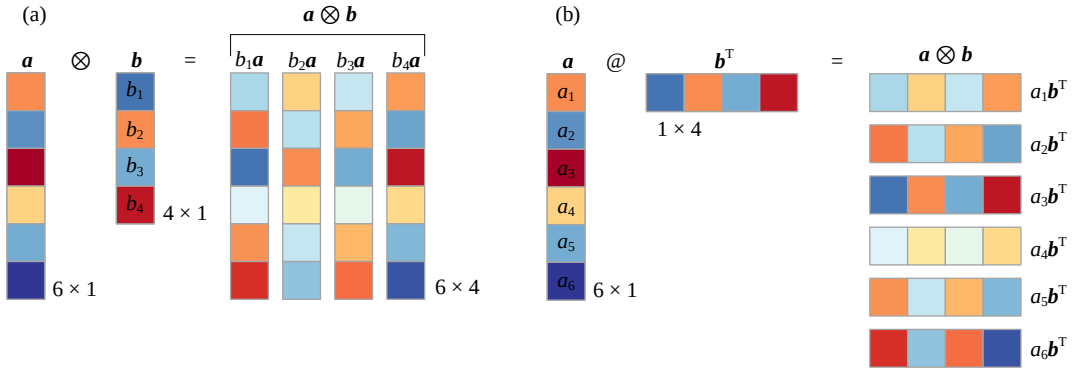


图 31. $\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b}$ 的列、行存在的相似

图 32 (a) 所示为张量积 $\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{a}$ 结果热图，形状为 6 × 6 方阵。图 32 (b) 所示为张量积 $\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{b}$ 结果热图，形状为 4 × 4 对称方阵。显然，$\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{b}$ 都是对称矩阵。

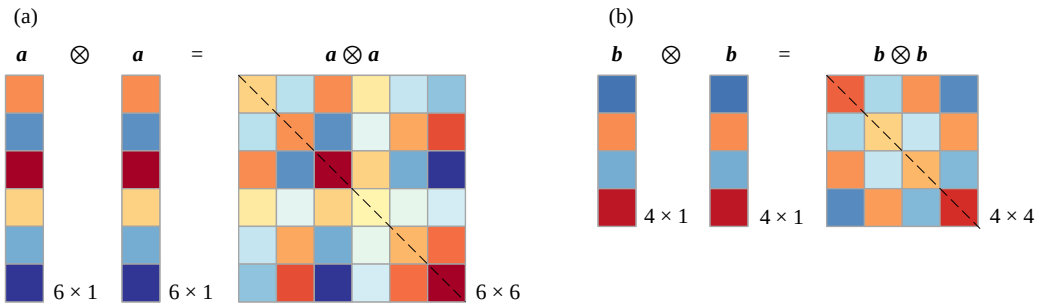


图 32. $\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{b}$ 向量张量积

`Bk4_Ch2_13.py` 绘制图 30、图 31、图 32。

在 Bk4_Ch2_13.py 的基础上，我们用 Streamlit 和 Plotly 制作了一个 App，用来展示向量张量积。App 中，大家可以改变向量元素个数。向量是由随机数发生器产生，保留小数点后一位。请大家参考 Streamlit_Bk4_Ch2_13.py。

《概率统计》将介绍，如果两个离散随机变量 X 和 Y 独立，联合概率 $p_{X,Y}(x,y)$ 等于 $p_X(x)$ 和 $p_Y(y)$ 这两个边缘概率质量函数 PMF 乘积：

$$\underbrace{p_{X,Y}(x,y)}_{\text{Joint}} = \underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}} \cdot \underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}} \tag{94}$$

如图 33 所示，$p_X(x)$ 和 $p_Y(y)$ 可以分别用火柴梗图可视化，而 $p_{X,Y}(x,y)$ 用二维火柴梗图展示。

从线性代数角度，当 x 和 y 分别取不同值时，$p_X(x)$ 和 $p_Y(y)$ 相当于两个向量，而 $p_{X,Y}(x,y)$ 相当于矩阵。X 和 Y 独立时，$p_{X,Y}(x,y)$ 值的矩阵就是 $p_Y(y)$ 和 $p_X(x)$ 两个向量的张量积。

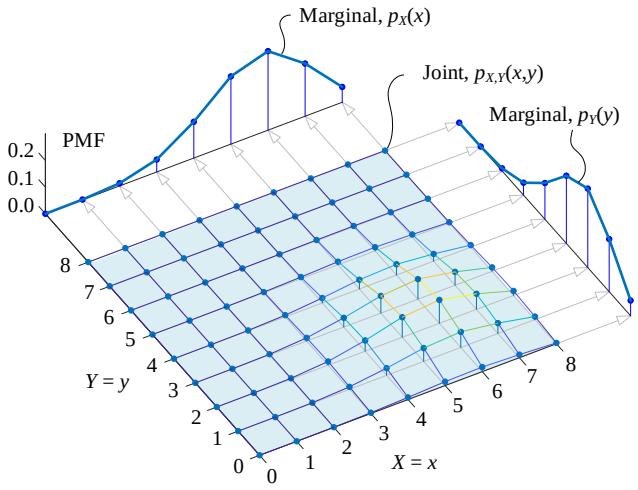


图 33. 离散随机变量独立条件下，联合概率 $p_{X,Y}(x,y)$ 等于 $p_Y(y)$ 和 $p_X(x)$ 乘积

本章聊了聊向量常见运算。学完本章，希望大家看到任何向量和向量运算，可以试着从几何、数据两个角度来思考。

从几何角度，向量是既有长度又有方向的量。从数据角度，表格数据就是矩阵。而矩阵的每一行向量是一个样本点，每一列向量代表一个特征。

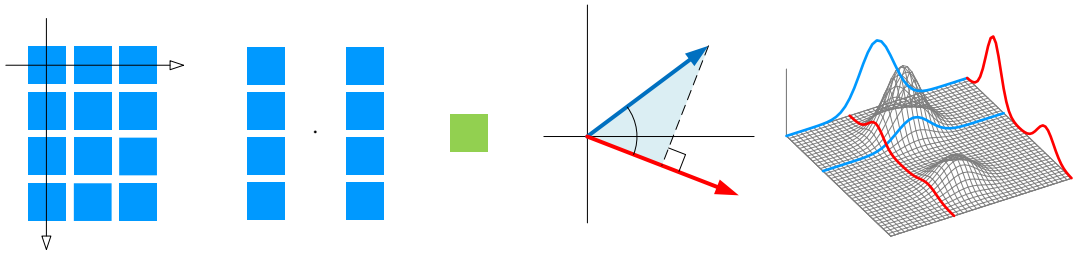


图 34. 总结本章重要内容的四幅图

向量有两个元素——长度和方向。向量的长度就是向量的模，向量之间的相对角度可以用向量内积来求解。

提到向量模、L^2 范数、欧几里得距离，希望大家能够联想到正圆、正圆球。本书第 3 章还要介绍更多范数以及它们对应的几何图像。

向量内积的结果是个标量，请大家格外注意向量内积和矩阵乘法联系，以及和 Σ 求和运算之间的关系。

从几何视角看向量内积特别重要，请大家格外关注向量夹角余弦值、余弦定理、余弦相似度、余弦距离，以及本书后续要讲的标量投影、向量投影、协方差、相关性系数等数学概念之间的关系。

向量的叉乘结果还是个向量，这个向量垂直于原来两个向量构成的平面。

几何视角下，张量积像是张起一个网格面。张量积在机器学习和数据科学算法中应用特别广泛，有关这个运算的性质我们会慢慢展开讲解。

对于习惯 MATLAB 或 R 语言的读者，如果转用 Python 感到不适应的话，推荐大家参考：

http://mathesaurus.sourceforge.net/

网站整理了常用 MATLAB-R-Python 命令、函数之间关系。

3 Vector Norm
向量范数

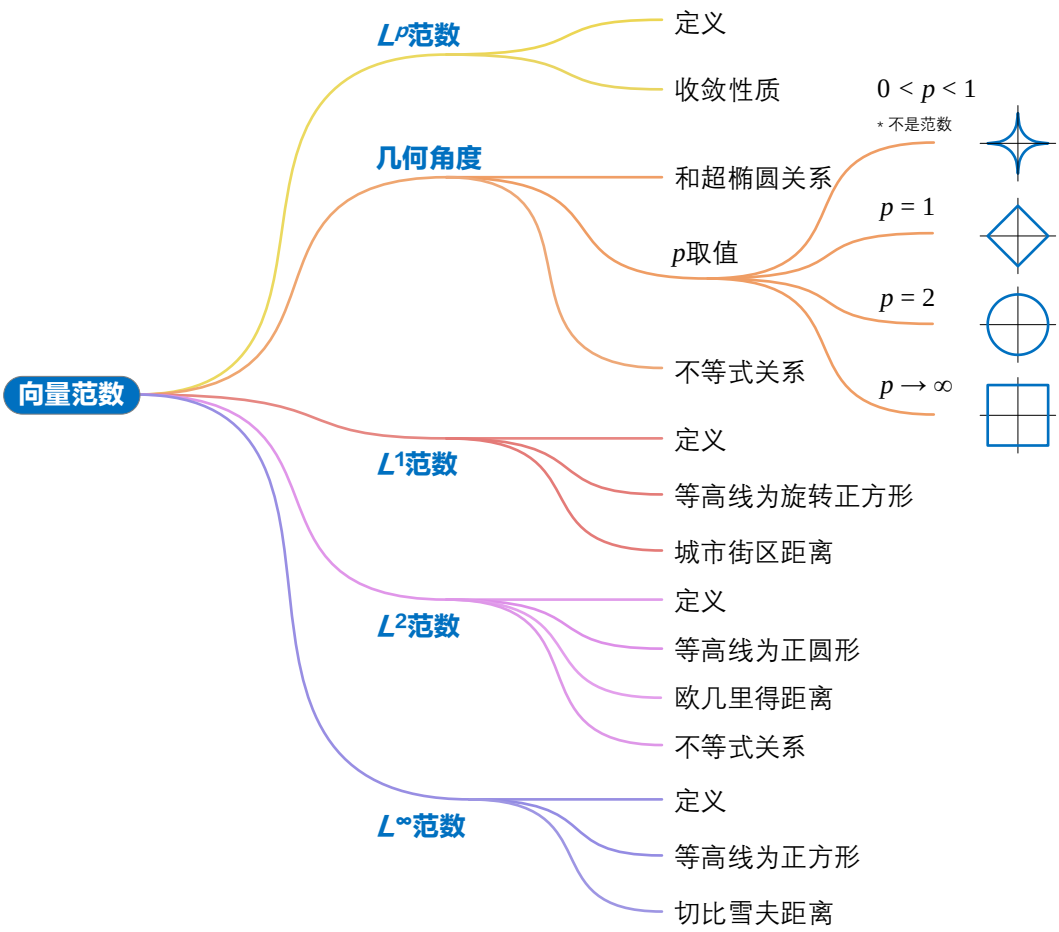
欧几里得距离的延伸

数学领域，遇到理解不了的概念别怕，用习惯就好了。

In mathematics, you don't understand things. You just get used to them.

—— 约翰·冯·诺伊曼 (Johann von Neumann) | 理论计算机科学与博弈论奠基者 | 1903 ~ 1957

- `matplotlib.pyplot.axhline()` 绘制水平线
- `matplotlib.pyplot.axvline()` 绘制竖直线
- `matplotlib.pyplot.contour()` 绘制等高线图
- `matplotlib.pyplot.contourf()` 绘制填充等高线图
- `numpy.abs()` 计算绝对值
- `numpy.linalg.norm()` 计算 L^p 范数，默认计算 L^2 范数
- `numpy.linsapce()` 指定的间隔内返回均匀间隔数组
- `numpy.maximum()` 计算最大值
- `numpy.meshgrid()` 生成网格化数据



3.1 L^p范数：L^2范数的推广

上一章介绍了 L^2 范数，L^2 范数代表向量的长度，也叫向量的模，等价于欧几里得距离。本章将 L^2 范数推广到 L^p 范数。

给定如下列向量 $\boldsymbol{x}$：

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_D \end{bmatrix}^T \tag{1}$$

向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^p 范数定义为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_p = \left(|x_1|^p + |x_2|^p + \cdots + |x_D|^p \right)^{1/p} = \left(\sum_{j=1}^{D} |x_j|^p \right)^{1/p} \tag{2}$$

(2) 中 $|x_j|$ 计算 x_j 的绝对值。另外，很多教材将 L^p 范数写成 Lp 范数或 p-范数。

对于 L^p 范数，$p \geq 1$。$p < 1$ 时，虽然上式有定义，但是不能称之为范数。容易判断，L^p 范数非负，即 $\|\boldsymbol{x}\|_p \geq 0$。$L^p$ 范数代表“距离”，也是一种“向量 → 标量”的运算规则。

两个特殊范数

当 $p = 2$ 时，向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^p 范数便是 **L^2 范数** (L2-norm)，也叫 2-范数，具体定义为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots x_D^2} = \left(\sum_{j=1}^{D} x_j^2 \right)^{\frac{1}{2}} \tag{3}$$

(3) 中 $\|\boldsymbol{x}\|_2$ 的下角标常被省略，也就是说 $\|\boldsymbol{x}\|$ 默认为 L^2 范数。

特别地，当 p 趋向+∞时，对应的范数记成 L^∞。L^∞范数定义为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max\left(|x_1|, |x_2|, \ldots, |x_D| \right) \tag{4}$$

即，$\|\boldsymbol{x}\|_\infty$ 为 $|x_j|$ 中的最大值。

大小关系

举个例子，如图 1 所示，给定向量 $\boldsymbol{x}$：

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix}^T \tag{5}$$

向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^1 范数是图 1 中三个坐标值的绝对值之和，也就是图 1 长方体三个临边边长之和：

$$\|\boldsymbol{x}\|_1 = |1| + |2| + |3| = 6 \tag{6}$$

L^2 范数是图 1 向量 $\boldsymbol{x}$ 的长度：

$$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \left(|1|^2 + |2|^2 + |3|^2 \right)^{1/2} = (14)^{1/2} \approx 3.742 \tag{7}$$

向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^3 范数可以通过下式求得：

$$\|\boldsymbol{x}\|_3 = \left(|1|^3 + |2|^3 + |3|^3\right)^{1/3} = 36^{1/3} \approx 3.302 \tag{8}$$

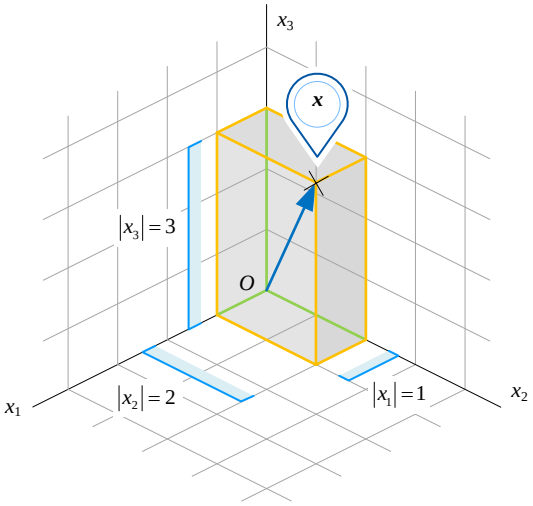


图 1. 向量 $\boldsymbol{x}$ 在三维直角坐标系的位置

类似地，计算向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^4 范数：

$$\|\boldsymbol{x}\|_4 = \left(|1|^4 + |2|^4 + |3|^4\right)^{1/4} = 98^{1/4} \approx 3.1463 \tag{9}$$

向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^∞ 范数是图 1 中 x_1、x_2、x_3 三者绝对值中最大值：

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max\left(|1|, |2|, |3|\right) = 3 \tag{10}$$

图 2 所示图像为 L^p 范数随 p 变化。对于 $\boldsymbol{x} = [1, 2, 3]^T$，$L^p$ 范数随 p 增大而减小，最后收敛于 3。

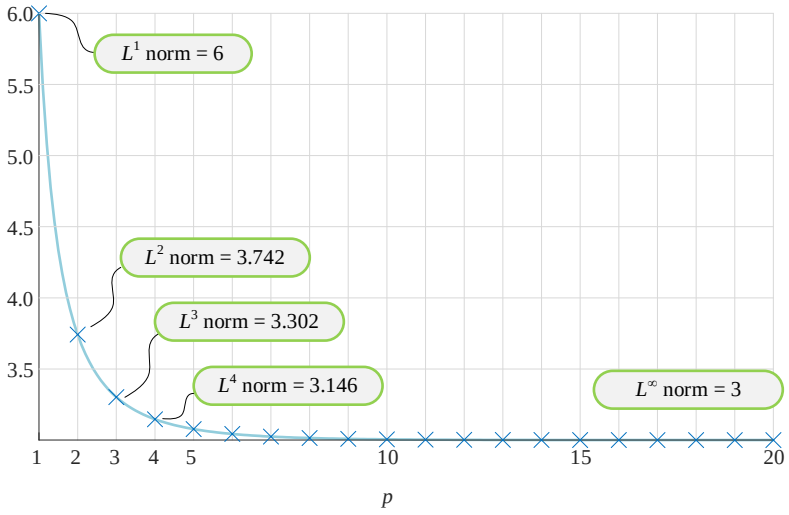


图 2. L^p 范数随 p 变化

白话说，L^p 范数丈量一个向量的“大小”。p 取值不同时，丈量的方式略有差别。比如，$p = 1$ 时，我们用向量各个元素绝对值之和代表向量“大小”。$p = 2$ 时，我们用欧氏距离代表向量“大小”。当 p 趋向+∞时，我们仅仅用向量各个元素绝对值中最大值代表向量“大小”。

在数据科学、机器学习算法中，L^p 范数扮演重要角色，比如距离度量、**正则化** (regularization)。下一节开始，我们就从几何图像入手，深入分析 L^p 范数性质。

3.2 L^p 范数和超椭圆的联系

给定列向量 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2]^T$，$\boldsymbol{x}$ 的 L^p 范数为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_p = \left(|x_1|^p + |x_2|^p\right)^{1/p} \tag{11}$$

⚠ 再次请大家注意，$0 < p < 1$ 时，(11) 不能叫范数，因为不满足次可加。

当 p 一定时，将 (11) 写成二元函数 $f(x_1, x_2)$：

$$f(x_1, x_2) = \left(|x_1|^p + |x_2|^p\right)^{1/p} \tag{12}$$

大家可能早已发现上式和《数学要素》一册讲过的超椭圆有着千丝万缕的联系。图 3 所示为 p 取不同值时，$f(x_1, x_2)$ 函数对应曲面等高线变化。图中，暖色系代表函数 $f(x_1, x_2)$ 更大数值，冷色系对应 $f(x_1, x_2)$ 较小数值。

$p = 1$ 时，$f(x_1, x_2)$ 函数的等高线为旋转正方形：

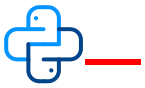
$$f(x_1, x_2) = |x_1| + |x_2| \tag{13}$$

$p = 2$ 时，$f(x_1, x_2)$ 函数等高线为正圆：

$$f(x_1, x_2) = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \tag{14}$$

$p = +\infty$时，$f(x_1, x_2)$ 函数等高线为正方形：

$$f(x_1, x_2) = \max\left(|x_1|, |x_2|\right) \tag{15}$$



`Bk4_Ch3_01.py` 绘制图 3 所示等高线。

如图 4 所示，L^p 范数取定值 c 时，即 $L^p = c$，随着 p 增大，等高线一层层包裹。

从相反角度，对于同一向量，p 增大，L^p 范数减小。请大家注意如下不等式关系：

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty \le \|\boldsymbol{x}\|_2 \le \|\boldsymbol{x}\|_1 \tag{16}$$

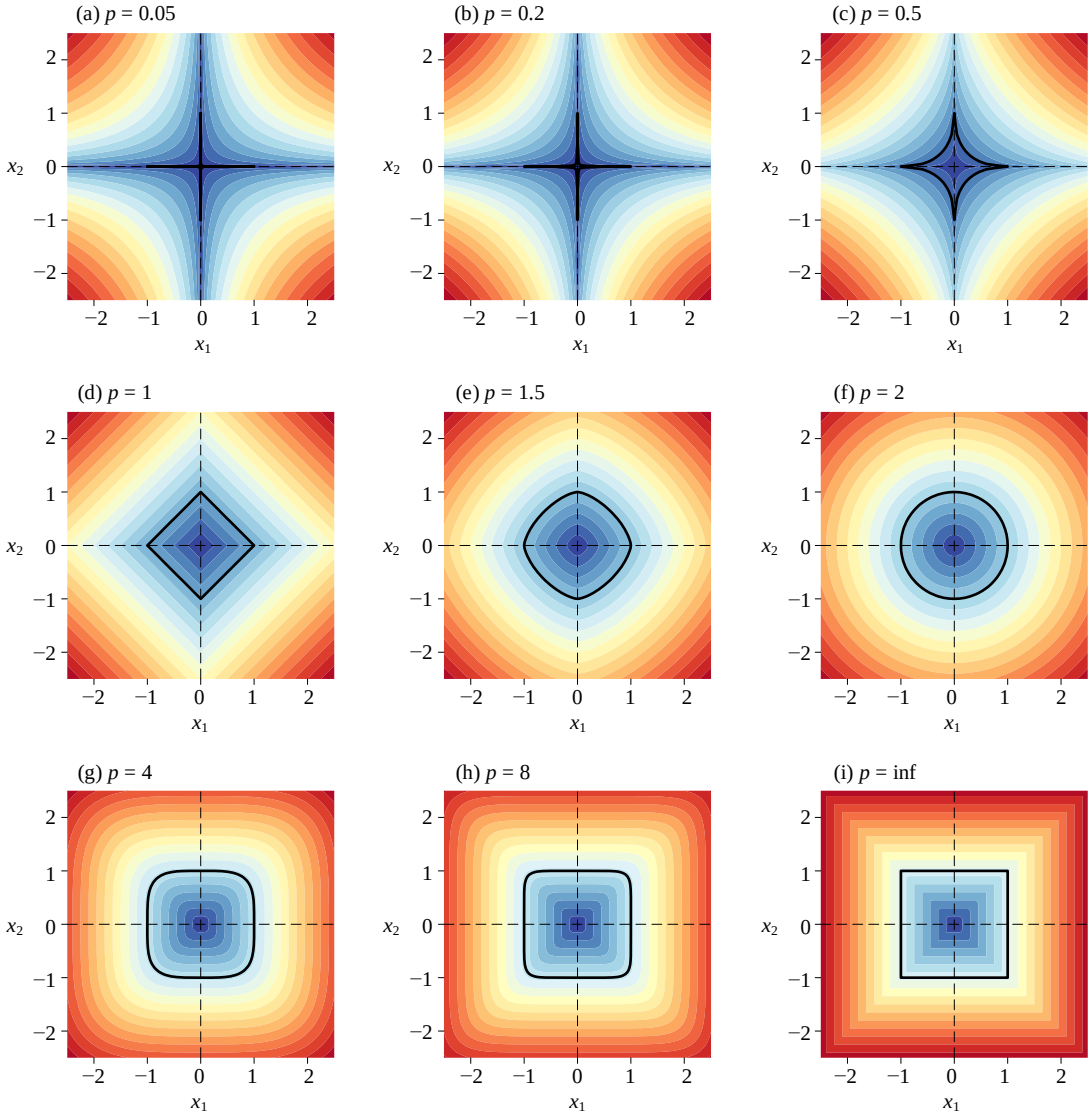


图 3. p 取不同正数时，二元函数等高线。图中 $p < 1$ 对应的等高线不是范数

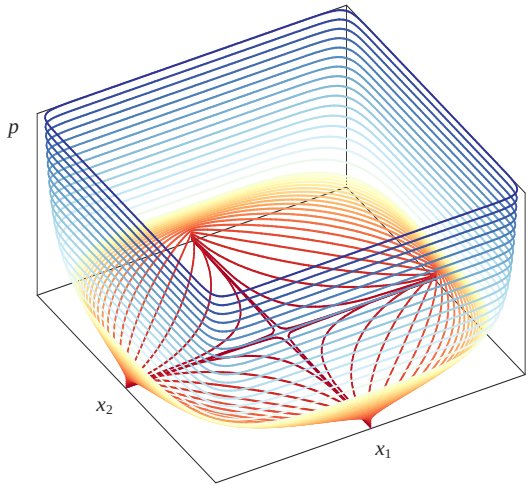


图 4. 随着 p 增大，等高线一层层包裹。图中 $p < 1$ 对应的等高线不是范数

凸凹性

$p \geq 1$ 时，L^p 范数等高线形状为**凸** (convex)。这是范数的一个重要性质——**次可加性** (subadditivity)，也叫**三角不等式** (triangle inequality)：

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|_p \leq \|\boldsymbol{x}\|_p + \|\boldsymbol{y}\|_p \tag{17}$$

上式又叫做**闵可夫斯基不等式** (Minkowski inequality)。

$0 < p < 1$ 时，(2) 对应等高线形状如图 5，它非凸也非凹。严格来说，$0 < p < 1$ 时，(2) 虽然有定义，但是不能称之为范数。这是因为，$0 < p < 1$ 时，(2) 不满足次可加性，即违反三角不等式。

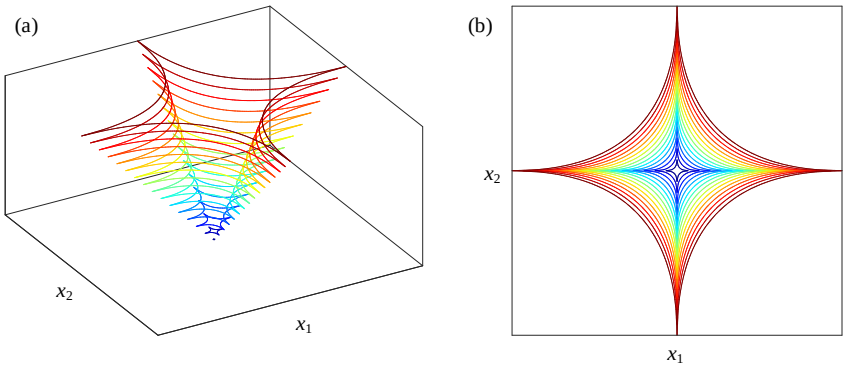


图 5. $p = 0.5$，L^p 范数等高线图像

p 为负数

p 取负数时，(12) 也有定义，但是我们不能称之为范数。图 6 所示为 p 取不同负数时，(12) 中函数等高线形状变化。

在 Bk4_Ch3_01.py 基础上，我们用 Streamlit 制作了一个应用，用 Plotly 绘制可交互平面等高线、三维曲面，展示 L^p 范数对应函数随 p 变化。请大家参考 Streamlit_Bk4_Ch3_01.py。

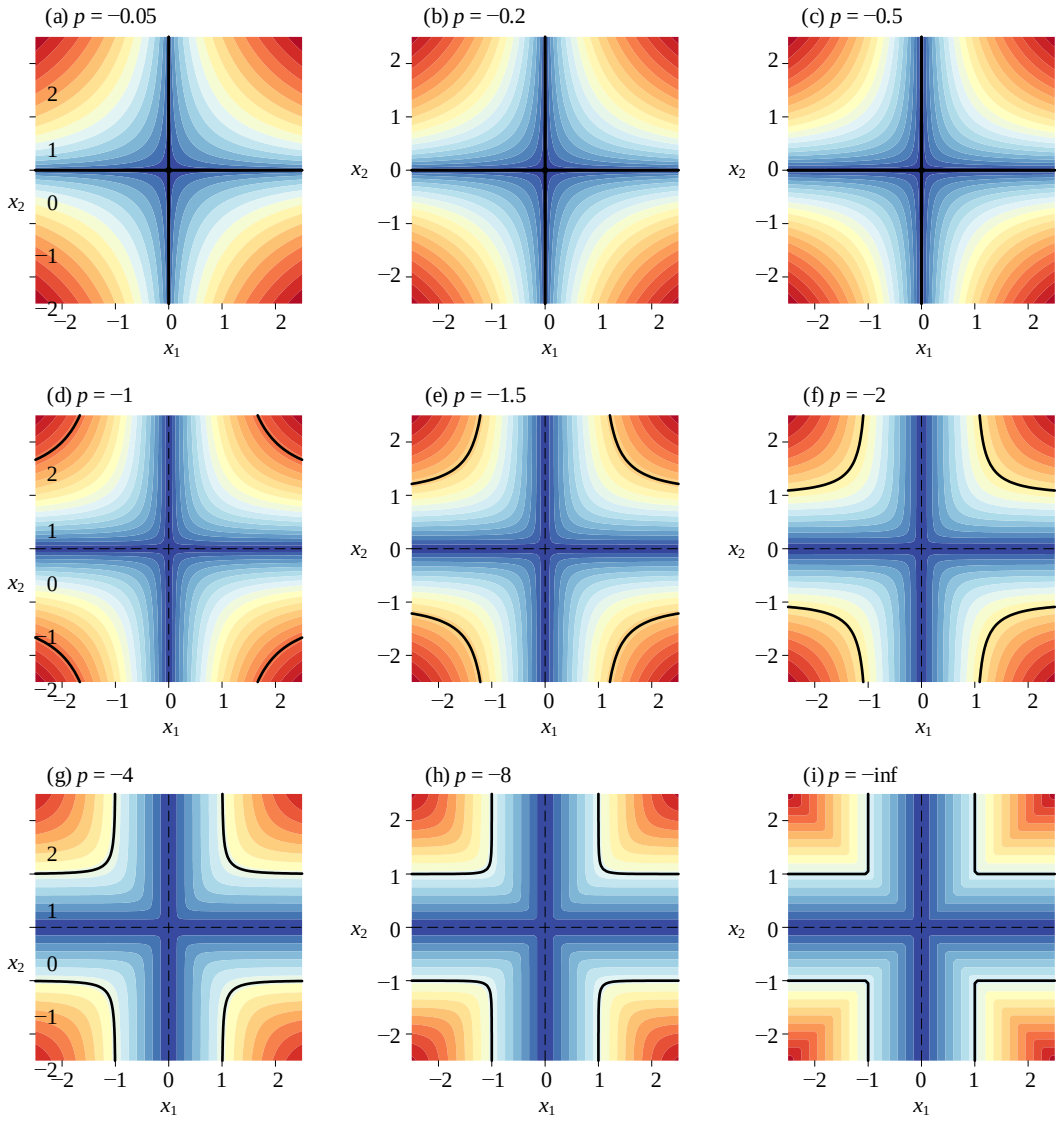


图 6. p 取不同负数时，函数等高线变化

3.3 L^1范数：旋转正方形

本节探讨 L^1 范数几何特征。向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^1 范数定义为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_1 = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_D| = \sum_{j=1}^{D} |x_j| \tag{18}$$

当 $D = 2$ 时，向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^1 范数为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_1 = |x_1| + |x_2| \tag{19}$$

(19) 中 L^1 范数等于 1 时，得到解析式：

$$|x_1|+|x_2|=1 \tag{20}$$

下面，我分成几种情况展开 (20)，并绘制图像。

几何图形

观察 (20) 可以发现，x_1 和 x_2 的取值范围均为 [−1, 1]，x_1 和 x_2 符号可正可负。为了去掉绝对值符号，分四种情况考虑，得到如下展开式：

$$\begin{cases} x_1+x_2=1 & 0\le x_1\le 1,\ 0\le x_2\le 1 \\ -x_1+x_2=1 & -1\le x_1\le 0,\ 0\le x_2\le 1 \\ x_1-x_2=1 & 0\le x_1\le 1,\ -1\le x_2\le 0 \\ -x_1-x_2=1 & -1\le x_1\le 0,\ -1\le x_2\le 0 \end{cases} \tag{21}$$

根据 (21) 定义的四个一次函数解析式，可以得到图 7 所示图形。

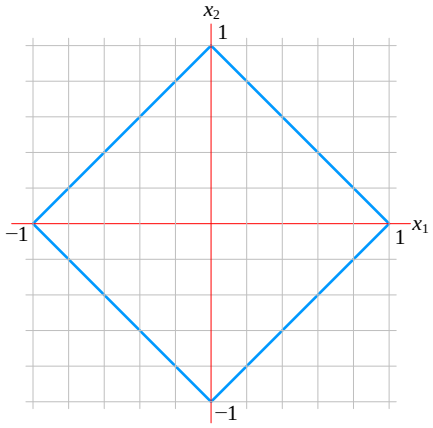


图 7. $|x_1|+|x_2|=1$ 解析式图像

图 8 所示为如下函数的等高线图像：

$$f(x_1,x_2)=|x_1|+|x_2| \tag{22}$$

图 8 (b) 中每一条等高线上的点距离原点有相同的 L^1 范数。

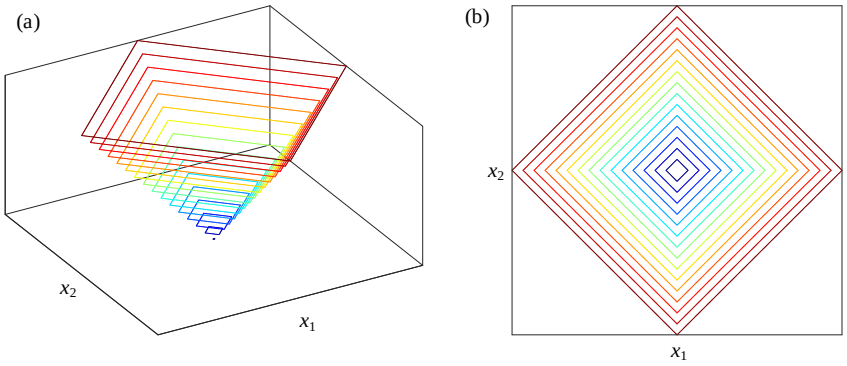


图 8. $p = 1$ 时，L^p 范数等高线图像

L^1 范数也叫**城市街区距离** (city block distance)，也称**曼哈顿距离** (Manhattan distance)。

如图 9 所示，一个城市街区布局方方正正，从 A 点到 B 点的行走距离不可能是两点的直线距离，即欧氏距离。图中给出的行走路径类似 L^1 范数。

此外，L^1 范数等高线存在“尖点”，这个尖点将会在**套索回归** (LASSO regression) 的 L1 正则项中起到重要作用。

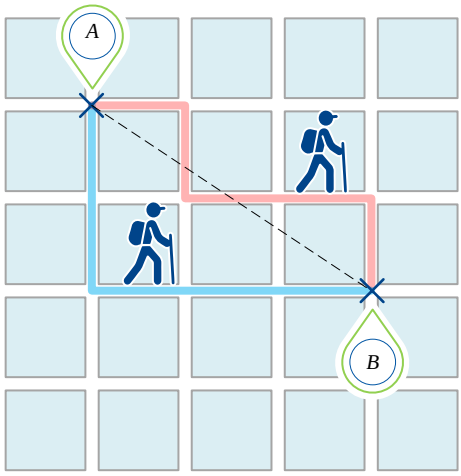


图 9. 城市街区距离

3.4 L^2 范数：正圆

本节探讨 L^2 范数形状。向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^2 范数定义为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \left(x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_D^2\right)^{1/2} = \left(\sum_{j=1}^{D} |x_j|^2\right)^{1/2} \tag{23}$$

特别地，当 $D = 2$ 时，向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^2 范数为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \tag{24}$$

从距离度量角度，L^2 范数为欧几里得距离。

几何图形

(24) 中 L^2 范数等于 1 时，对应图像为单位圆，解析式为：

$$x_1^2 + x_2^2 = 1 \tag{25}$$

图 10 所示为 (25) 图像。

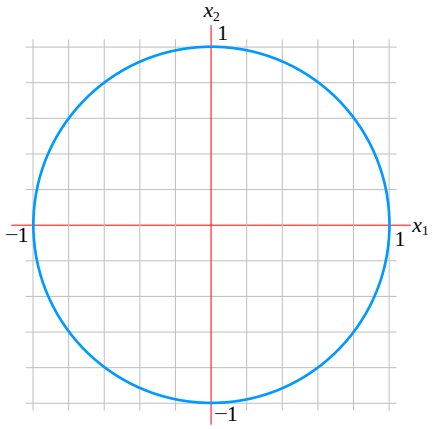


图 10. $x_1^2 + x_2^2 = 1$ 解析式图像

另外，实践中也经常使用 L^2 范数的平方，比如，

$$\|\boldsymbol{x}\|_2^2 = x_1^2 + x_2^2 \tag{26}$$

再次强调范数、向量内积、矩阵乘法关系，对于列向量 $\boldsymbol{x}$，以下运算等价，结果都是标量：

$$\|\boldsymbol{x}\|_2^2 = \|\boldsymbol{x}\|^2 = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle = \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} \tag{27}$$

图 11 所示为当 $D = 3$ 时，p 分别取 1 和 2 时，L^p 范数对应的几何体。

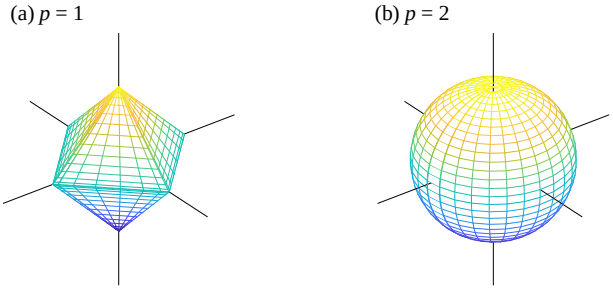


图 11. $p = 1$、2，$D = 3$ 时，L^p 范数对应的几何体

本系列丛书《数学要素》中简单讨论过向量范数在岭回归和套索回归的应用。岭回归引入的是 L^2 正则项，套索回归引入 L^1 正则项。

我们这里在介绍另外一种正则化回归——**弹性网络回归** (elastic net regression)。弹性网络回归以不同比例同时引入 L^1 和 L^2 正则项。图 12 所示，正则化曲面是 L^1 和 L^2 范数曲面按不同比例叠加。图 12 中正则化部分既有 L^1 的“尖点”，也有 L^2 的凸曲面。

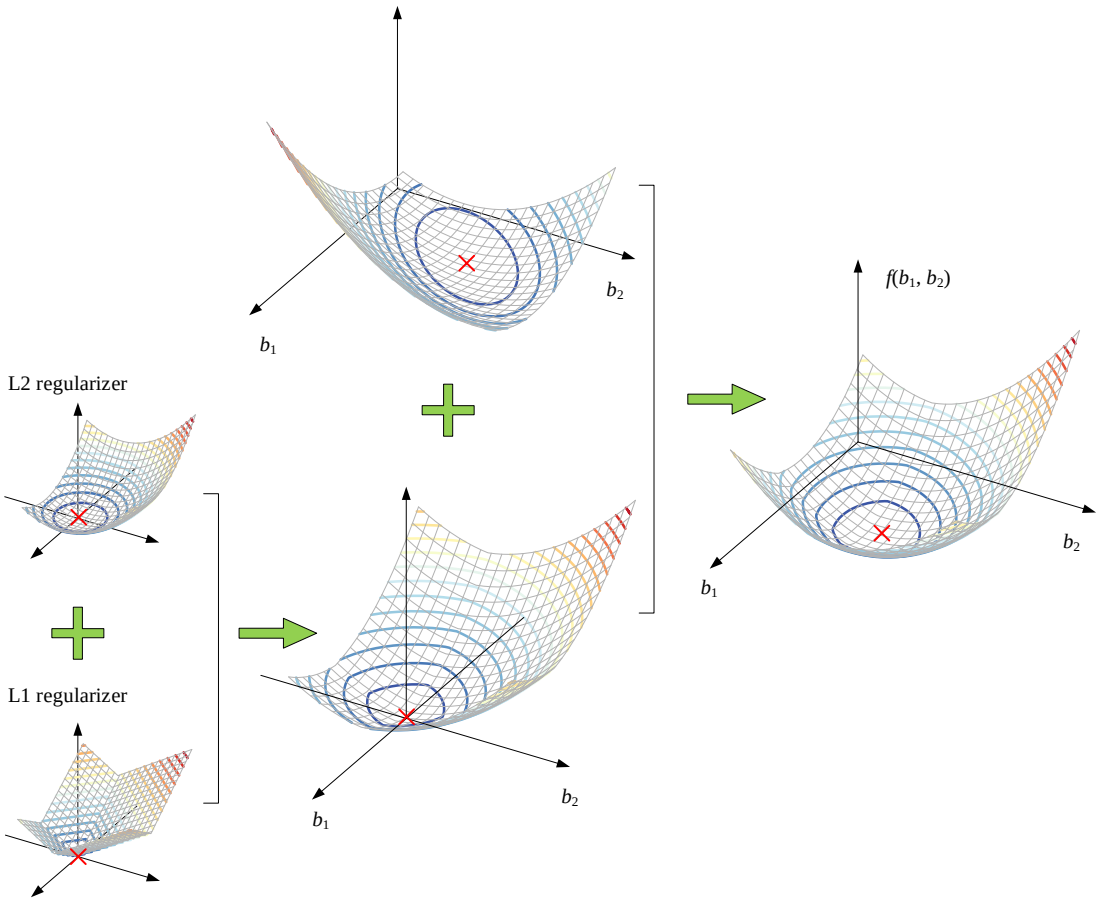


图 12. 弹性网络回归参数曲面

不等式

相信大家都知道，三角形两边之和大于第三边。应用到向量 L^2 范数，对应如下不等式：

$$\|\boldsymbol{u}\|_2 + \|\boldsymbol{v}\|_2 \geq \|\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}\|_2 \tag{28}$$

举个例子，给定向量 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$：

$$\boldsymbol{u} = \begin{bmatrix} 4 & 3 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}, \quad \boldsymbol{v} = \begin{bmatrix} -2 & 4 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{29}$$

向量 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 两者之和为：

$$\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v} = \begin{bmatrix} 4 & 3 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} + \begin{bmatrix} -2 & 4 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 2 & 7 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{30}$$

图 13 所示为向量 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 以及 $\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}$ 在平面上的关系。

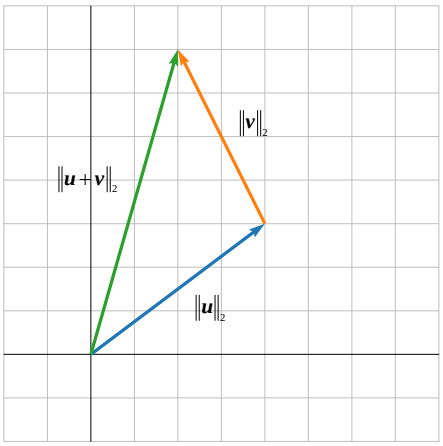


图 13. 向量 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 以及两者之和

$\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 的 L^2 范数分别为：

$$\|\boldsymbol{u}\|_2 = \sqrt{4^2+3^2} = 5, \quad \|\boldsymbol{v}\|_2 = \sqrt{(-2)^2+4^2} = \sqrt{20} \approx 4.4721 \tag{31}$$

$\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 的 L^2 范数和为：

$$\|\boldsymbol{u}\|_2 + \|\boldsymbol{v}\|_2 \approx 9.4721 \tag{32}$$

$\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}$ 的 L^2 范数为：

$$\|\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}\|_2 = \sqrt{2^2+7^2} = \sqrt{53} \approx 7.2801 \tag{33}$$

显然，(28) 成立。请大家自行验证，满足 $p \geq 1$ 时，当 p 取不同值时，L^p 范数都满足这种三角不等式关系。

Bk4_Ch3_02.py 绘制图 13 图 11。

3.5 L^∞范数：正方形

向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^∞范数的定义为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max\left(|x_1|, |x_2|, \cdots, |x_D|\right) \tag{34}$$

上式也叫做**切比雪夫距离** (Chebyshev distance)。

当特征数 $D = 2$ 时，向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^∞范数定义为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max\left(|x_1|, |x_2|\right) \tag{35}$$

当 L^∞范数等于 1 时，可以得到如下平面图形解析式：

$$\max\left\{|x_1|, \ |x_2|\right\} = 1 \tag{36}$$

借助《数学要素》第 8、9 章讲解的圆锥曲线知识，我们一起推导 (36) 解析式对应的图像。

几何图形

观察 (36) 可以发现，x_1 和 x_2 的取值范围均为 [−1, 1]，x_1 和 x_2 符号可正、可负。分情况讨论，得到解析式：

$$\begin{cases} |x_1| = 1 & |x_1| > |x_2| \\ |x_2| = 1 & |x_2| > |x_1| \end{cases} \tag{37}$$

为了进一步展开 (37)，需要分析 $|x_1|$ 和 $|x_2|$ 大小关系。如果，$|x_1| > |x_2|$，不等式两边平方，并整理得到：

$$x_1^2 - x_2^2 > 0 \tag{38}$$

当把大于号 > 换成等号 = 时，得到下式：

$$x_1^2 - x_2^2 = 0 \tag{39}$$

可以很容发现，(39) 为退化双曲线，图形为图 14 所示蓝色线。(38) 所示的不等式区域对应的是图 14 所示阴影区域。

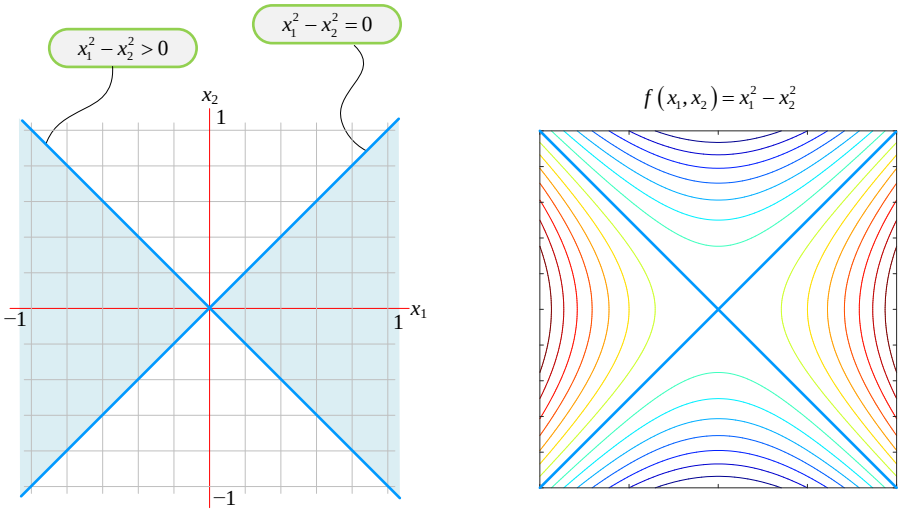


图 14. 退化双曲线及不等式区域

根据以上区域划分，改写 (37) 得到：

$$\begin{cases} x_1 = \pm 1 & x_1^2 - x_2^2 > 0 \\ x_2 = \pm 1 & x_1^2 - x_2^2 < 0 \end{cases} \tag{40}$$

由于 x_1 和 x_2 的取值范围均为 $[-1, 1]$，所以在图 14 所示阴影区域中，图像为两条竖直线段 ($x_1 = \pm 1$)；类似地，在 $x_1^2 - x_2^2 < 0$ 对应区域中，图像为两条水平线段 ($x_2 = \pm 1$)。

综合以上分析，可以得到 (36) 对应的图像，具体如图 15 所示。

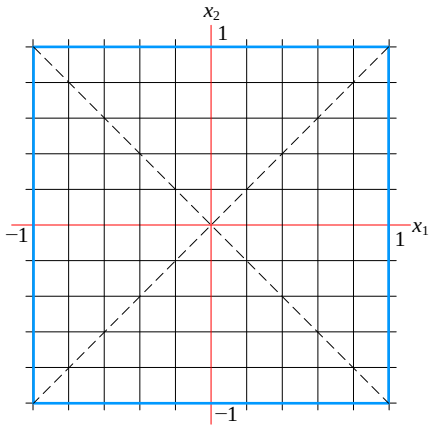


图 15. $\max\{|x_1|, |x_2|\} = 1$ 解析式图像

3.6 再谈距离度量

把 (2) 写成 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 两个列向量之差的 L^p 范数，可以得到：

$$\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\right\|_p=\left(\left|x_1-q_1\right|^p+\left|x_2-q_2\right|^p+\cdots+\left|x_D-q_D\right|^p\right)^{1/p}=\left(\sum_{j=1}^{D}\left|x_j-q_j\right|^p\right)^{1/p} \tag{41}$$

其中，$p\geq 1$，列向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 分别为：

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\x_D\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{q}=\begin{bmatrix}q_1\\q_2\\\vdots\\q_D\end{bmatrix} \tag{42}$$

$\boldsymbol{q}$ 常被称作**查询点** (query point)。

如图 16 所示，(41) 相当于 D 维空间中，$\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 两点“距离”。距离 $\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\right\|_p$ 的取值为 $[0, +\infty)$。L^p 范数的 p 取不同值时，我们得到不同的距离度量。

白话说，L^p 范数这个数学工具把向量变成了非负标量，这个标量代表“距离”远近。

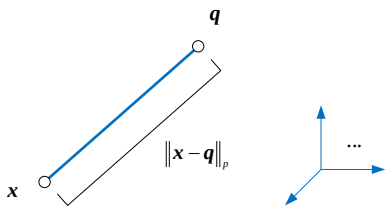


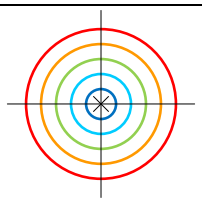
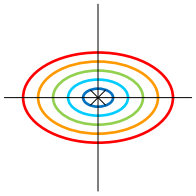
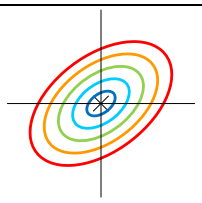
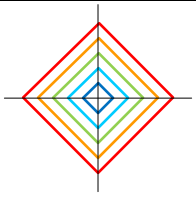
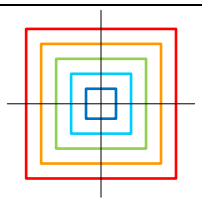
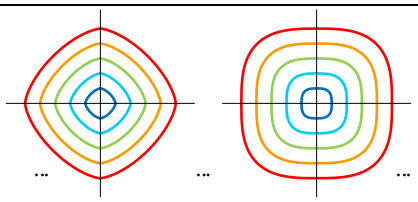
图 16. D 维空间中 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 之间的“距离”

本系列丛书《数学要素》一册第 7 章给出表 1，表格总结常见距离度量的等距线。我们又在表中加入了不同距离度量的计算式。有了本章 L^p 范数这个数学工具，大家应该能够理解表 1 中欧氏距离、城市街区距离、切比雪夫距离、闵氏距离的背后的数学思想。本书第 20 章将简要介绍马氏距离，本系列丛书《概率统计》有一章专门讲解马氏距离及其应用。标准化欧式距离可以看成是特殊的马氏距离。

我们用 Streamlit 和 Plotly 制作了一个 App，计算并可视化平面上不同点距离鸢尾花数据质心的距离。App 包含表 1 中各种距离度量。请大家参考 Streamlit_Bk4_Ch3_03.py。请大家特别注意马氏距离的等高线，本书第 20 章将介绍马氏距离的原理。

表 1. 常见距离定义及等距线形状，来自《数学要素》

距离度量	定义	平面直角坐标系中等距线

欧氏距离 (Euclidean distance)	$\sqrt{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q})}$	
标准化欧氏距离 (standardized Euclidean distance)	$\sqrt{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q})}$ $\boldsymbol{D}$ 为对角方阵，对角线上元素为每个特征的方差，即 $\boldsymbol{D}$ = diag(diag($\boldsymbol{\Sigma}$))	
马氏距离 (Mahalanobis distance)	$\sqrt{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q})}$ $\boldsymbol{\Sigma}$ 为协方差矩阵	
城市街区距离 (city block distance)	$\lVert\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\rVert_1$	
切比雪夫距离 (Chebyshev distance)	$\lVert\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\rVert_\infty$	
闵氏距离 (Minkowski distance)	$\lVert\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\rVert_p$	

高斯核函数：从距离到亲近度

在很多应用场合，我们需要把“距离”转化为“亲近度”，就好比上一章余弦距离和余弦相似度之间的关系。

为了把距离 $\lVert\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\rVert_p$ 转化成亲近度，我们需要借助复合函数这个工具。本系列丛书《数学要素》一册介绍过**高斯函数** (Gaussian function)。二元高斯函数的基本形式为：

$$f(x_1,x_2)=\exp\left(-\gamma\left(x_1^2+x_2^2\right)\right) \tag{43}$$

图 17 所示 γ 对二元高斯核函数形状影响。γ 越大坡面越陡峭。

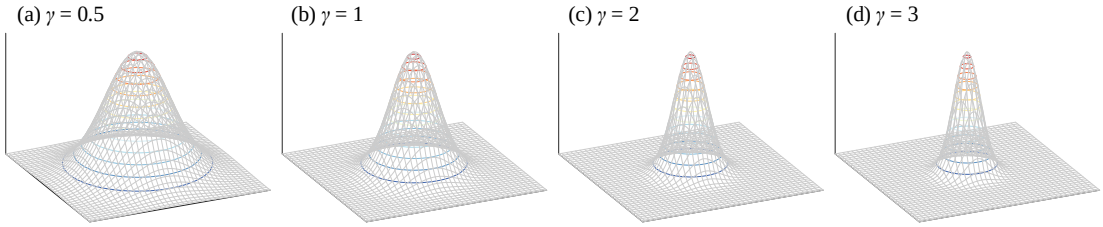


图 17. 高斯核曲面随 γ 变化

有了 L^2 范数，我们就可以定义机器学习中一个重要的函数——高斯核函数：

$$\kappa_{\text{RBF}}\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}\right)=\exp\left(-\gamma\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\right\|_2^2\right)=\exp\left(-\gamma\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\right\|^2\right) \tag{44}$$

其中，$\gamma>0$。

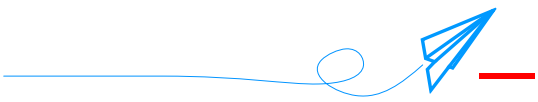
(44) 也可以写成：

$$\kappa_{\text{RBF}}\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}\right)=\exp\left(-\frac{\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\right\|^2}{2\sigma^2}\right) \tag{45}$$

高斯核函数也叫**径向基核函数** (radial basis function kernel 或 RBF kernel)。不难发现，上式函数的取值范围为 (0, 1]。当 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{q}$ 时函数值为 1；当 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 距离无穷远时，函数值无限接近 0，却不能取到 0。

(44) 中 $\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\right\|_2^2$ 是 L^2 范数平方，即 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 两点欧几里得距离平方。径向基函数把代表距离的 $\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\right\|_2^2$ 变成亲近度。也就是说，距离平方值 $\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\right\|_2^2$ 越大，径向基函数越小，代表 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 越疏远。相反，距离平方值 $\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\right\|_2^2$ 越小，径向基函数越大，代表 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 越靠近。

从 $\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\right)$ 到 $\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\right\|_2$、再到 $\exp\left(-\gamma\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\right\|_2^2\right)$ 是“向量 → 距离 (标量) → 亲近度 (标量)”的转化过程。大家将会在多元高斯分布概率密度函数中看到类似的转化。



本章从几何视角和大家聊了 L^p 范数，向量范数从不同角度度量了向量的“大小”。以下这四幅图像总结本章的主要内容。L^p 范数在本系列丛书的应用主要有两大方面：1) 距离度量；2) 正则化。请大家格外注意，只有 $p\geq 1$ 时，才叫范数。

此外，请大家注意本章内容和本系列丛书《数学要素》第 7 章的“等距线”和第 9 章的“超椭圆”这两个数学概念的联系。

矩阵也有范数，这是本书第 18 章要讨论的话题之一。

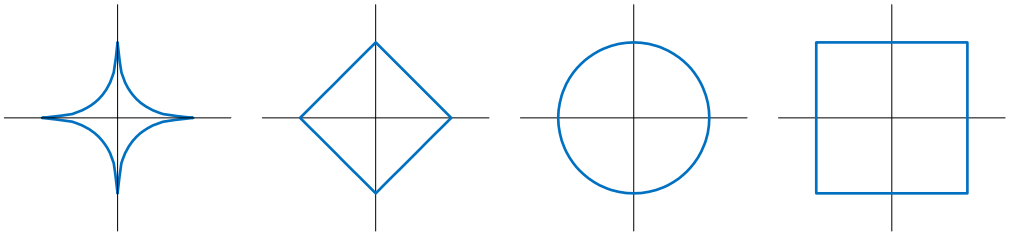


图 18. 总结本章重要内容的四幅图，第一幅子图并非范数

4 Matrix 矩阵

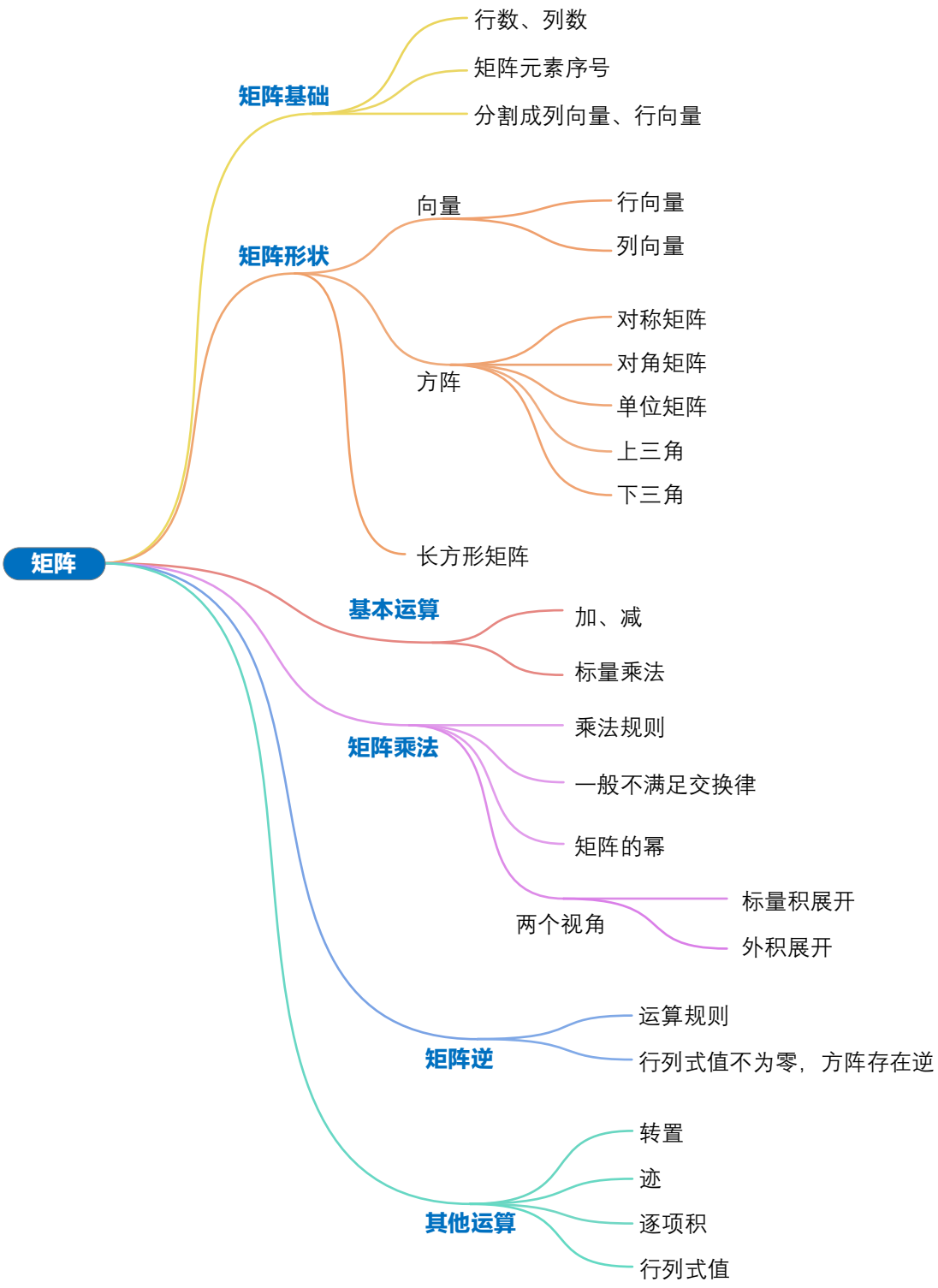
所有矩阵运算都是重要数学工具，都有应用场景

数字统治万物。

Number rules the universe.

—— 毕达哥拉斯 (Pythagoras) | 古希腊哲学家、数学家 | 570 ~ 495 BC

- `numpy.add()` 矩阵加法运算，等同于 `+`
- `numpy.array()` 构造多维矩阵/数组
- `numpy.linalg.det()` 计算行列式值
- `numpy.linalg.inv()` 计算矩阵逆
- `numpy.linalg.matrix_power()` 计算矩阵幂
- `numpy.matrix()` 构造二维矩阵，有别于 `numpy.array()`
- `numpy.multiply()` 矩阵逐项积
- `numpy.ones()` 生成全 1 矩阵，输入为矩阵形状
- `numpy.ones_like()` 用来生成和输入矩阵形状相同的全 1 矩阵
- `numpy.subtract()` 矩阵减法运算，等同于 `-`
- `numpy.trace()` 计算矩阵迹
- `numpy.zeros()` 生成零矩阵，输入为矩阵形状
- `numpy.zeros_like()` 用来生成和输入矩阵形状相同的零矩阵
- `tranpose()` 矩阵转置，比如 `A.transpose()`，等同于 `A.T`



4.1 矩阵：一个不平凡的表格

别怕，矩阵无非就是一个表格！

一般来说，矩阵是由标量组成的矩形**数组** (array)。但是，矩阵内的元素不局限于标量，也可以是虚数、符号，乃至代数式、偏导等等。

在有些语境下，更高维度的数组叫**张量** (tensor)，因此向量和矩阵可以分别看作是一维和二维的张量。严格来讲，张量是不同参考系间特定的变换法则。从这个角度来看，矩阵完成特定的**线性映射** (linear mapping)，矩阵的不平凡之处就在于此。

本书矩阵通常由粗体、斜体、大写字母表示，比如 $\boldsymbol{X}$、$\boldsymbol{V}$、$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 等。特别地，我们用 $\boldsymbol{X}$ 表达样本数据矩阵。

⚠ 注意，如果是随机变量 X_j 构成的列向量，本系列丛书会用希腊字母 $\boldsymbol{\chi}$，比如 D 维随机变量 $\boldsymbol{\chi} = [X_1, X_2, \ldots, X_D]^T$。

如图 1 所示，一个 $n \times D$ (n by capital D) 矩阵 $\boldsymbol{X}$，具体如下：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D} = \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,D} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n,1} & x_{n,2} & \cdots & x_{n,D} \end{bmatrix} \tag{1}$$

其中，n 是**矩阵行数** (number of rows in the matrix)，D 是**矩阵列数** (number of columns in the matrix)。

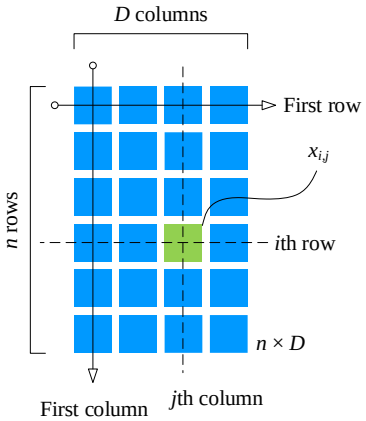


图 1. $n \times D$ 矩阵 $\boldsymbol{X}$

从数据角度，n 是样本个数，D 是样本数据特征数。比如，鸢尾花数据集，不考虑标签 (即鸢尾花三大类 setosa、versicolor、virginica)，数据集本身 $n = 150$，$D = 4$。

本系列丛书《数学要素》第 1 章专门聊过为什么会选择 n 和 D 这两个字母，这里就不再重复。

矩阵构造

矩阵 $\boldsymbol{X}$ 中，**元素** (element) $x_{i,j}$ 被称作 (i, j) 元素 (i j entry 或 i j element)。$x_{i,j}$ 出现在 i 行、j 列 (appears in row i and column j)。

注意 i 和 j 的先后次序，先说行，再说列。

重要的事情说几遍都不嫌多！如图 2 所示，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 可以看做是由一组行向量或列向量按照一定规则构造。比如，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 可以写成一组上下叠放的行向量：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)} \\ \boldsymbol{x}^{(2)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}^{(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,D} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n,1} & x_{n,2} & \cdots & x_{n,D} \end{bmatrix} \tag{2}$$

其中，行向量 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 为矩阵 $\boldsymbol{X}$ 第 i 行，具体为：

$$\boldsymbol{x}^{(i)} = \begin{bmatrix} x_{i,1} & x_{i,2} & \cdots & x_{i,D} \end{bmatrix} \tag{3}$$

以鸢尾花数据集为例，它的每一行代表一朵花。

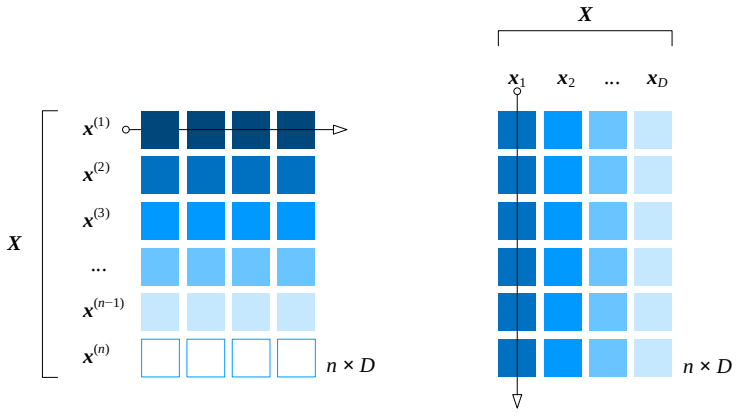


图 2. 矩阵可以看做是由行向量或列向量构造

矩阵 $\boldsymbol{X}$ 也可以写成一组左右放置的列向量：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,D}\\ x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,D}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ x_{n,1} & x_{n,2} & \cdots & x_{n,D}\end{bmatrix} \tag{4}$$

其中，列向量 $\boldsymbol{x}_j$ 为矩阵 $\boldsymbol{X}$ 第 j 列：

$$\boldsymbol{x}_j=\begin{bmatrix}x_{1,j}\\ x_{2,j}\\ \vdots\\ x_{n,j}\end{bmatrix} \tag{5}$$

还是以鸢尾花数据集为例，它的每一列代表一个特征，比如花萼长度。再次强调，一般情况，本书单独给出一个向量时默认其为列向量，除非具体说明。而在数据矩阵中，每一行行向量代表一个数据点。

实际上，图 2 思路是用纵线或横线将矩阵划分成**分块矩阵** (block matrix)。

分块矩阵有助于简化矩阵运算，本书第 6 章将深入介绍分块矩阵相关内容。

Bk4_Ch4_01.py 介绍如何用不同方式构造矩阵。注意，numpy.matrix() 和 numpy.array() 都可以构造矩阵。但是两者结果有显著区别。numpy.matrix() 产生的数据类型是严格的 2 维<class 'numpy.matrix'>；而 numpy.array()产生的数据可以是 1 维、2 维、乃至 n 维，类型统称为<class 'numpy.ndarray'>。此外，在乘法和乘幂运算时，这两种不同方式构造的矩阵也会有明显差别，本章后续将逐步介绍。

4.2 矩阵形状：每种形状都有特殊用途

矩阵形状对于矩阵运算至关重要。本书之前介绍的**行向量** (row vector) 和**列向量** (column vector) 也是特殊形状的矩阵。稍作回顾，行向量可以看做一行多列的矩阵，列向量是一列多行矩阵。

图 3 总结几种常见矩阵形状，本节逐一讲解。

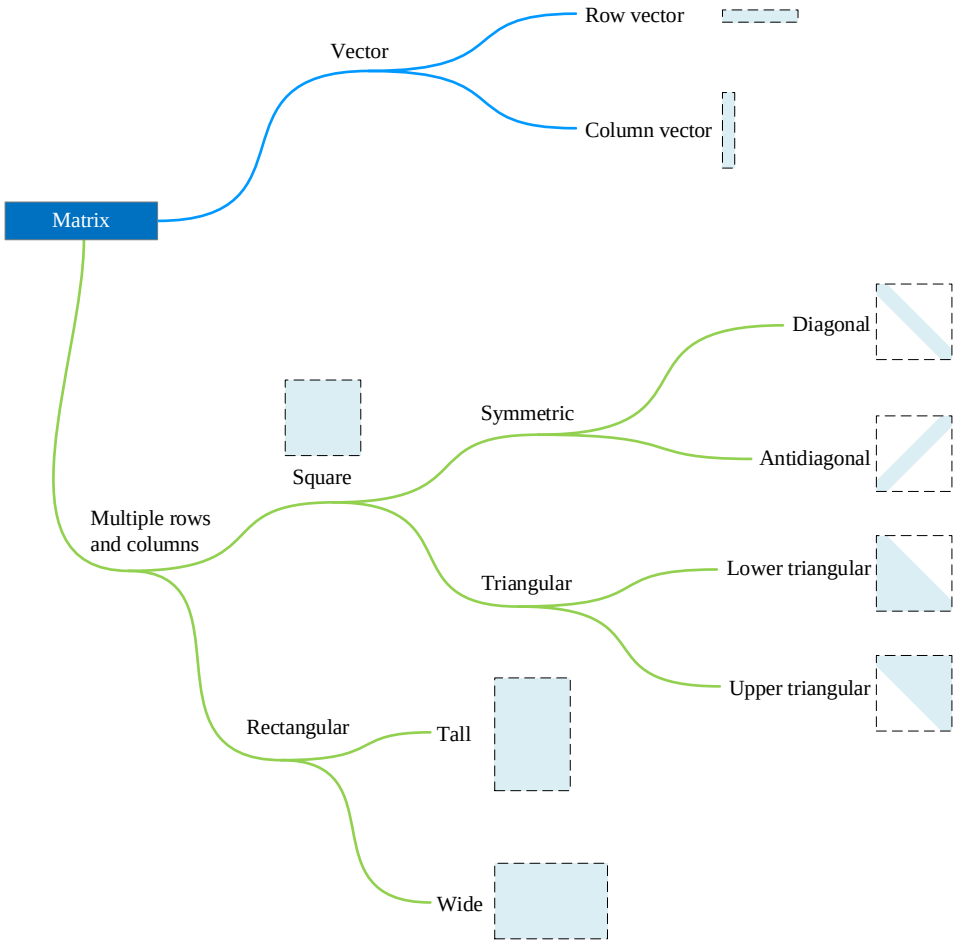


图 3. 几种常见矩阵形状

方阵

方阵 (square matrix) 指的是行、列数相等的矩阵。$n \times n$ 矩阵被称作 n **阶方阵** (n-square matrix)。

对称矩阵 (symmetric matrix) 是一种特殊方阵。对称矩阵的右上和左下方元素以**主对角线** (main diagonal) 镜像对称。主对角线和**副对角线** (antidiagonal, secondary diagonal, minor diagonal) 的位置如图 4 所示。

对称矩阵**转置** (transpose) 结果为本身。比如，满足下式的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 便是对称矩阵：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \tag{6}$$

本章后续将详细介绍转置运算。

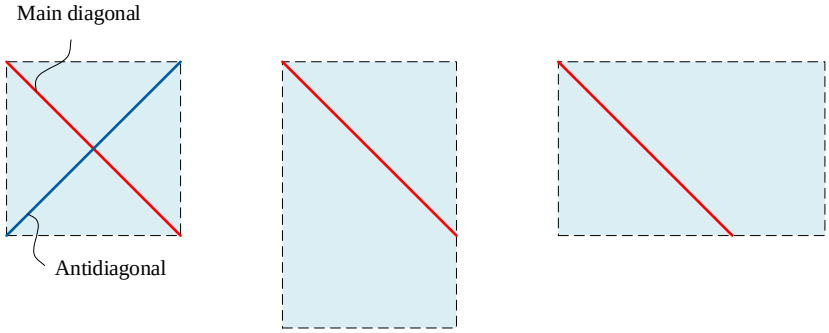


图 4. 主对角线和副对角线

对角矩阵

对角矩阵 (diagonal matrix) 是主对角线之外的元素皆为 0 (its non-diagonal entries of a square matrix are all zero) 的矩阵，比如下例：

$$\boldsymbol{\Lambda}_{n\times n}=\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n\end{bmatrix} \tag{7}$$

图 5 比较对称矩阵和对角矩阵。

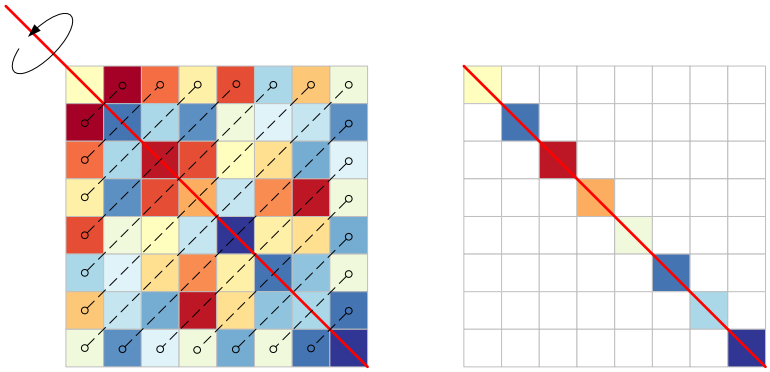


图 5. 对称矩阵和对角矩阵之间关系

但是，对角矩阵也可以是长方形矩阵，如图 6 所示。图 6 右侧两种对角矩阵可以叫做**长方形对角矩阵** (rectangular diagonal matrix)。我们将在**奇异值分解** (Singular Value Decomposition, SVD) 中看到它们的应用。

⚠ 请大家注意，不加说明时，本书中的对角矩阵都是方阵。为了方便区分，本书一般管形状为方阵的对角矩阵叫“对角方阵”。

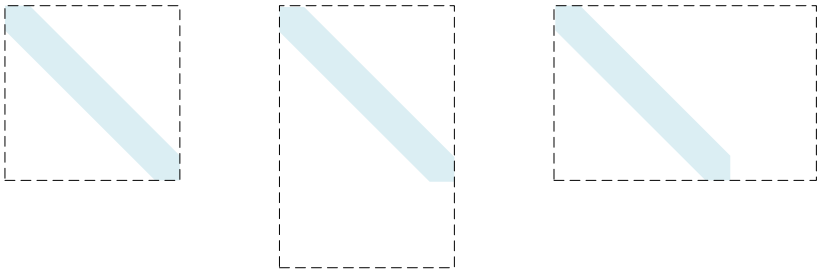


图 6. 三种对角矩阵

副对角矩阵 (anti-diagonal matrix) 是副对角线之外元素皆为 0 的矩阵。

本书还常用 diag() 函数。如图 7 所示，diag($\boldsymbol{A}$) 提取矩阵 $\boldsymbol{A}$ 主对角线元素，结果为列向量。此外，diag($\boldsymbol{a}$) 将向量 $\boldsymbol{a}$ 展成对角方阵 $\boldsymbol{D}$，$\boldsymbol{D}$ 主对角线元素依次为向量 $\boldsymbol{a}$ 元素。

Python 中，完成 diag() 函数为 `numpy.diag()`。注意，`numpy.diag(A)` 提取矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对角线元素，结果为一维数组。结果虽然形似行向量，但是严格来说它并不是行向量。

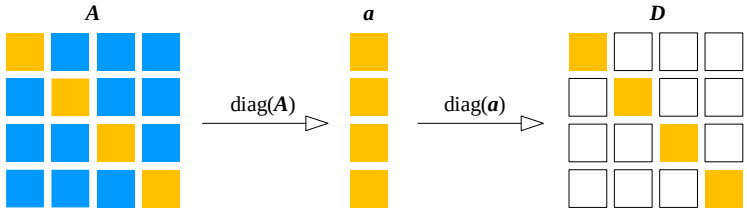


图 7. diag() 函数

`Bk4_Ch4_02.py` 展示如何使用 `numpy.diag()`。

单位矩阵

单位矩阵 (identity matrix) 是一种特殊对角矩阵。n **阶单位矩阵** (n-square identity matrix) 的特点是 $n \times n$ 方阵对角线上的元素为 1，其他为 0。本书中，单位矩阵用 $\boldsymbol{I}$ 来表达：

$$\boldsymbol{I}_{n\times n} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \tag{8}$$

也有很多文献用 $\boldsymbol{E}$ 代表单位矩阵。本书的 $\boldsymbol{E}$ 专门用来代表**标准正交基** (standard orthonormal basis)。本书第 7 章会讲解标准正交基和其他类型基底。

三角矩阵

三角矩阵 (triangular matrix) 也是特殊的方阵。如果方阵对角线以下元素均为零，这个矩阵被称作**上三角矩阵** (upper triangular matrix)：

$$\boldsymbol{U}_{n\times n}=\begin{bmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & \cdots & u_{1,n} \\ 0 & u_{2,2} & \cdots & u_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{n,n} \end{bmatrix} \tag{9}$$

如果方阵对角线以上元素均为零，这个矩阵被称作**下三角矩阵** (lower triangular matrix)：

$$\boldsymbol{L}_{n\times n}=\begin{bmatrix} l_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{2,1} & l_{2,2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n,1} & l_{n,2} & \cdots & l_{n,n} \end{bmatrix} \tag{10}$$

提一嘴，如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为**可逆矩阵** (invertible matrix, non-singular matrix)，$\boldsymbol{A}$ 可以通过 LU 分解变成一个下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$ 与一个上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的乘积。

本书第 11 ~ 16 章将介绍包括 LU 分解在内的各种常见矩阵分解。

长方形矩阵

长方形矩阵 (rectangular matrix) 是指行数和列数不相等的矩阵，可以是“细高”或“宽矮”。常见的数据矩阵几乎都是“细高”长方形矩阵，形状类似图 1。

计算时，长方形矩阵的形状并不“友好”。比如，很多矩阵分解都是针对方阵。图 8 所示为将细高数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 变成两个不同方阵的矩阵乘法运算过程。图 8 结果叫**格拉姆矩阵** (Gram matrix)，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 可以理解为 $\boldsymbol{X}$ 的“平方”。$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 还是对称矩阵，即满足 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}=(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}}$。本书后文将会在，Cholesky 分解、特征值分解、空间等话题中见到格拉姆矩阵。

多说一嘴，处理长方形矩阵有一个利器，这就是宇宙无敌的**奇异值分解** (Singular Value Decomposition)，即 SVD。SVD 分解可以说是最重要的矩阵分解，没有之一。请大家格外关注本书第 15、16 章。此外，本书最后三章“数据三部曲”，也离不开 SVD 分解。

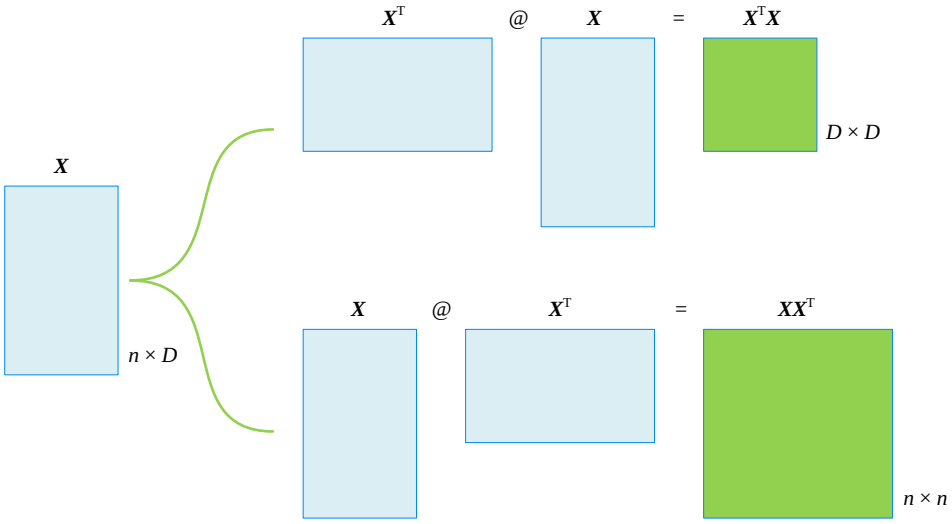


图 8. 将长方形矩阵变成方阵

4.3 基本运算：加减和标量乘法

矩阵加减

两个相同大小的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 相加，指的是把这两个矩阵对应位置元素分别相加，具体如下：

$$\boldsymbol{A}_{m\times n}+\boldsymbol{B}_{m\times n}=\begin{bmatrix} a_{1,1}+b_{1,1} & a_{1,2}+b_{1,2} & \cdots & a_{1,n}+b_{1,n} \\ a_{2,1}+b_{2,1} & a_{2,2}+b_{2,2} & \cdots & a_{2,n}+b_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1}+b_{m,1} & a_{m,2}+b_{m,2} & \cdots & a_{m,n}+b_{m,n} \end{bmatrix}_{m\times n} \tag{11}$$

矩阵**加法交换律** (commutative property) 指的是：

$$\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A} \tag{12}$$

矩阵**加法结合律** (associative property) 指的是：

$$\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}+\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}+(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{C})=(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})+\boldsymbol{C} \tag{13}$$

矩阵减法的运算规则和加法一致。

零矩阵

从书用 $\boldsymbol{O}$ 表示元素全为 0 的矩阵，即**零矩阵** (zero matrix)。

零矩阵具有以下性质：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}+\boldsymbol{O}=\boldsymbol{O}+\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{O} \end{aligned} \tag{14}$$

上式中，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{O}$ 形状相同。

⚠ 注意，零矩阵 $\boldsymbol{O}$ 参与任何矩阵运算时，请格外考察 $\boldsymbol{O}$ 的形状。

`numpy.zeros()` 用来生成零矩阵，输入为矩阵形状。`numpy.zeros_like()` 用来生成和输入矩阵形状相同的零矩阵。

类似地，`numpy.ones()` 可以生成全 1 矩阵，输入为矩阵形状。`numpy.ones_like()` 用来生成和输入矩阵形状相同的全 1 矩阵。

`Bk4_Ch4_03.py` 介绍如何完成矩阵加减法运算。

矩阵标量乘法

当矩阵乘以某一标量时，矩阵的每一个元素均乘以该标量，这种运算叫做**标量乘法** (scalar multiplication)。

标量 k 和矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的乘积 (the product of the matrix $\boldsymbol{X}$ by a scalar k) 记做 $k\boldsymbol{X}$：

$$k\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix} k\cdot x_{1,1} & k\cdot x_{1,2} & \cdots & k\cdot x_{1,D} \\ k\cdot x_{2,1} & k\cdot x_{2,2} & \cdots & k\cdot x_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k\cdot x_{n,1} & k\cdot x_{n,2} & \cdots & k\cdot x_{n,D} \end{bmatrix} \tag{15}$$

注意，标量 k 字母为小写、斜体。当 $k=0$ 时，上式的结果为零矩阵 $\boldsymbol{O}$，形状为 $n\times D$。

`Bk4_Ch4_04.py` 展示如何完成矩阵标量乘法。

4.4 广播原则

NumPy 中的矩阵加减运算常使用**广播原则** (broadcasting)。当两个数组的形状并不相同的时候，可以通过广播原则扩展数组来实现相加、相减等操作。

矩阵和标量之和

图 9 所示为，一个矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和标量 k 之和，相当于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的每一个元素加 k。比如，

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} + 2 = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1+2 & 2+2 \\ 3+2 & 4+2 \\ 5+2 & 6+2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 4 \\ 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{bmatrix} \tag{16}$$

上述运算规则也适用于减法。

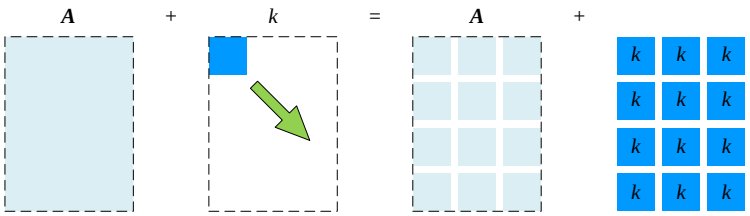


图 9. 广播原则，矩阵加标量

矩阵和列向量之和

当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 行数和列向量 $\boldsymbol{c}$ 行数相同时，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{c}$ 可以相加。

如图 10 所示，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和列向量 $\boldsymbol{c}$ 相加，相当于 $\boldsymbol{A}$ 的每一列和 $\boldsymbol{c}$ 相加。另外一个视角，列向量 $\boldsymbol{c}$ 首先自我复制，左右排列得到和 $\boldsymbol{A}$ 形状相同的矩阵，再和 $\boldsymbol{A}$ 相加。

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 2 & 2 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1+3 & 2+3 \\ 3+2 & 4+2 \\ 5+1 & 6+1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 5 \\ 5 & 6 \\ 6 & 7 \end{bmatrix} \tag{17}$$

上述规则也同样适用于减法。

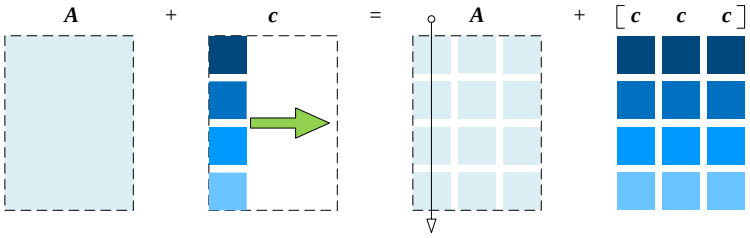


图 10. 广播原则，矩阵加列向量

矩阵和行向量之和

同理，当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 列数和行向量 $\boldsymbol{r}$ 列数相同时，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{r}$ 可以利用广播原则相加减。如图 11 所示，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和行向量 $\boldsymbol{r}$ 相加，相当于 $\boldsymbol{A}$ 的每一行和 $\boldsymbol{r}$ 分别相加。

另外一个视角，行向量 $\boldsymbol{r}$ 首先自我复制，上下叠加得到和 $\boldsymbol{A}$ 形状相同的矩阵，再和 $\boldsymbol{A}$ 相加：

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1+2 & 2+1 \\ 3+2 & 4+1 \\ 5+2 & 6+1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 5 & 5 \\ 7 & 7 \end{bmatrix} \tag{18}$$

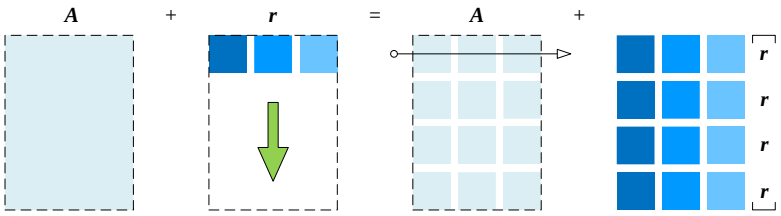


图 11. 广播原则，矩阵加行向量

列向量和行向量之和

利用广播原则，列向量可以和行向量相加。

如图 12 所示，列向量 $\boldsymbol{c}$ 自我复制，左右排列得到矩阵的列数和 $\boldsymbol{r}$ 列数一致。行向量 $\boldsymbol{r}$ 自我复制，上下叠加得到矩阵和 $\boldsymbol{c}$ 的行数一致。然后完成加法运算，比如：

$$\begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 2 & 2 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3+2 & 3+1 \\ 2+2 & 2+1 \\ 1+2 & 1+1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & 4 \\ 4 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \tag{19}$$

上式中，调转行、列向量顺序，不影响结果。

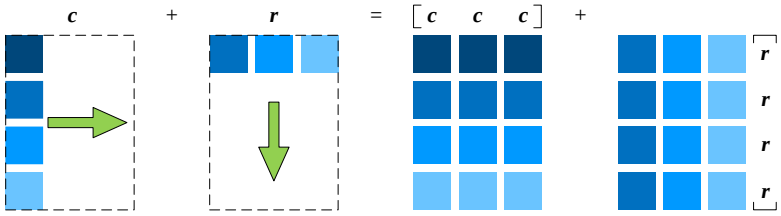


图 12. 广播原则，列向量加行向量

Bk4_Ch4_05.py 完成上述所示广播原则计算。此外，请大家把加号改成减号，验证广播原则在减法上的运算。

4.5 矩阵乘法：线性代数的运算核心

法国数学家，**雅克·菲利普·玛丽·比奈** (Jacques Philippe Marie Binet) 在 1812 年首先提出矩阵乘法运算规则。

毫不夸张地说，**矩阵乘法** (matrix multiplication) 在各种矩阵运算中居于核心地位，规则本身就是人类一项伟大创造！

大家记住，矩阵两大主要功能：1) 表格；2) 线性映射。

线性映射就体现在矩阵乘法中。比如 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 完成 $\boldsymbol{x}\rightarrow\boldsymbol{b}$ 的线性映射；反之，如果 $\boldsymbol{A}$ 可逆，$\boldsymbol{A}^{-1}$ 完成 $\boldsymbol{b}\rightarrow\boldsymbol{x}$ 的线性映射。

$$\boldsymbol{x}\underset{\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}}{\overset{\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}}{\rightleftharpoons}}\boldsymbol{b} \tag{20}$$

规则

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列数等于矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的行数，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 两个矩阵可以相乘。如果，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的形状是 $n\times D$，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的形状是 $D\times m$，两个矩阵的乘积结果 $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{AB}$ 的形状是 $n\times m$：

$$\boldsymbol{C}_{n\times m}=\boldsymbol{A}_{n\times D}\boldsymbol{B}_{D\times m}=\boldsymbol{A}_{n\times D}\text{@}\boldsymbol{B}_{D\times m}=\begin{bmatrix}c_{1,1} & c_{1,2} & \cdots & c_{1,m}\\ c_{2,1} & c_{2,2} & \cdots & c_{2,m}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ c_{n,1} & c_{n,2} & \cdots & c_{n,m}\end{bmatrix} \tag{21}$$

其中，

$$\boldsymbol{A}_{n\times D}=\begin{bmatrix}a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,D}\\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,D}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,D}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{B}_{D\times m}=\begin{bmatrix}b_{1,1} & b_{1,2} & \cdots & b_{1,m}\\ b_{2,1} & b_{2,2} & \cdots & b_{2,m}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ b_{D,1} & b_{D,2} & \cdots & b_{D,m}\end{bmatrix} \tag{22}$$

矩阵乘法是一种 “矩阵 → 矩阵” 的运算规则。注意，向量也是特殊的矩阵。为了配合 NumPy 计算，丛书也用 @ 代表矩阵乘法运算符。

矩阵乘法规则

图 13 所示为矩阵乘法规则示意图。$\boldsymbol{A}$ 第 i 行元素分别和 $\boldsymbol{B}$ 的第 j 列元素相乘，再求和，得到 $\boldsymbol{C}$ 的 (i, j) 元素：

$$c_{i,j} = a_{i,1}b_{1,j} + a_{i,2}b_{2,j} + ... + a_{i,D}b_{D,j} \tag{23}$$

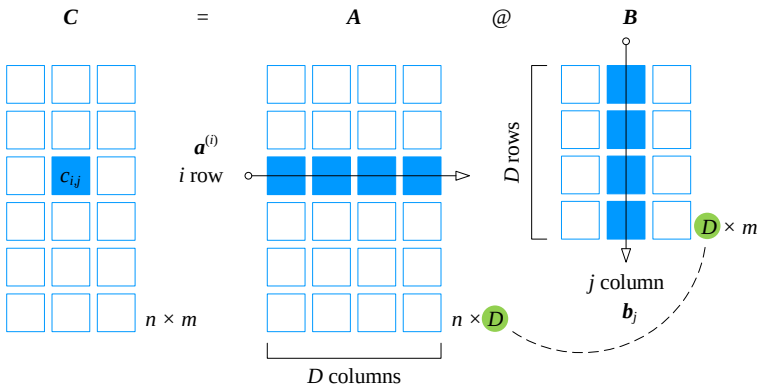


图 13. 矩阵乘法规则

用矩阵乘法来表达 (23)，即，

$$c_{i,j} = \boldsymbol{a}^{(i)}\boldsymbol{b}_j \tag{24}$$

其中，$\boldsymbol{a}^{(i)}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 第 i 行元素构成的行向量，$\boldsymbol{b}_j$ 是 $\boldsymbol{B}$ 的第 j 列元素构成的列向量。$\boldsymbol{a}^{(i)}$ 和 $\boldsymbol{b}_j$ 元素个数都是 D 个。(24) 也可以写成两个列向量的向量内积，即，

$$c_{i,j} = \boldsymbol{a}^{(i)\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{b}_j = \left\langle \boldsymbol{a}^{(i)\mathrm{T}}, \boldsymbol{b}_j \right\rangle \tag{25}$$

$\boldsymbol{a}^{(i)}$ 为行向量，转置后 $\boldsymbol{a}^{(i)\mathrm{T}}$ 为列向量。

这是理解矩阵乘法的“第一视角”，下一节我们会从两个不同视角来看矩阵乘法。

此外，本书在第 6 章讲解分块矩阵时会介绍更多矩阵乘法视角。

`Bk4_Ch4_06.py` 介绍如何借助 Numpy 完成矩阵乘法运算。值得注意的是，对于两个由 `numpy.array()` 产生的数据，使用*相乘，得到的乘积是对应元素分别相乘，广播法则有效；而两个由 `numpy.matrix()` 产生的 2 维矩阵，使用*相乘，则得到结果等同于@。如果，分别由 `numpy.array()` 和 `numpy.matrix()` 产生的数据，使用*相乘，则等同于@。请大家运行 `Bk4_Ch4_07.py` 给出的三个乘法例子，自行比较结果。

规则

一般情况，矩阵乘法不满足交换律：

$$\boldsymbol{AB} \neq \boldsymbol{BA} \tag{26}$$

另外，请大家注意以下矩阵乘法规则：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{AO} &= \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{ABC} &= \boldsymbol{A}(\boldsymbol{BC}) = (\boldsymbol{AB})\boldsymbol{C} \\ k(\boldsymbol{AB}) &= (k\boldsymbol{A})\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}(k\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{AB})k \\ \boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{C}) &= \boldsymbol{AB}+\boldsymbol{AC} \end{aligned} \tag{27}$$

矩阵和单位矩阵的乘法：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{I}_{n\times n} &= \boldsymbol{A}_{m\times n} \\ \boldsymbol{I}_{m\times m}\boldsymbol{A}_{m\times n} &= \boldsymbol{A}_{m\times n} \end{aligned} \tag{28}$$

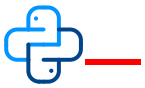
注意，上式中两个单位矩阵的形状不同。

下一章最后部分将探讨矩阵乘法常见的“雷区”，请大家留意。

矩阵的幂

n 阶方阵 (n-square matrix) $\boldsymbol{A}$ 的**矩阵的幂** (powers of matrices) 为：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}^0 &= \boldsymbol{I} \\ \boldsymbol{A}^1 &= \boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{A}^2 &= \boldsymbol{AA} \\ \boldsymbol{A}^{n+1} &= \boldsymbol{A}^n\boldsymbol{A} \end{aligned} \tag{29}$$



`Bk4_Ch4_08.py` 展示如何计算矩阵幂。乘幂运算符`**`对 `numpy.array()` 和 `numpy.matrix()` 生成的数据有不同的运算规则。`numpy.matrix()` 生成矩阵 `A`，`A**2`，是矩阵乘幂；`numpy.array()` 生成的矩阵 `B`，`B**2` 是对矩阵 `B` 元素分别平方。请大家比较 `Bk4_Ch4_09.py` 给出的两个例子。

4.6 两个视角解剖矩阵乘法

为了更好理解矩阵乘法，我们用两个 2 × 2 矩阵相乘来讲解，具体如下：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{AB} &= \boldsymbol{A} @ \boldsymbol{B} \\
&= \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{2,1} & a_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} \\ b_{2,1} & b_{2,2} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} a_{1,1}b_{1,1} + a_{1,2}b_{2,1} & a_{1,1}b_{1,2} + a_{1,2}b_{2,2} \\ a_{2,1}b_{1,1} + a_{2,2}b_{2,1} & a_{2,1}b_{1,2} + a_{2,2}b_{2,2} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{30}
$$

图 14 所示为两个 2 × 2 矩阵相乘如何得到结果的每一个元素。这部分内容虽然在本系列丛书《数学要素》一册已经讲过一遍，为了加强大家对矩阵乘法理解，请学过的大家也耐心把本节内容扫读一遍。

下面，我们从两个视角来剖析矩阵乘法。

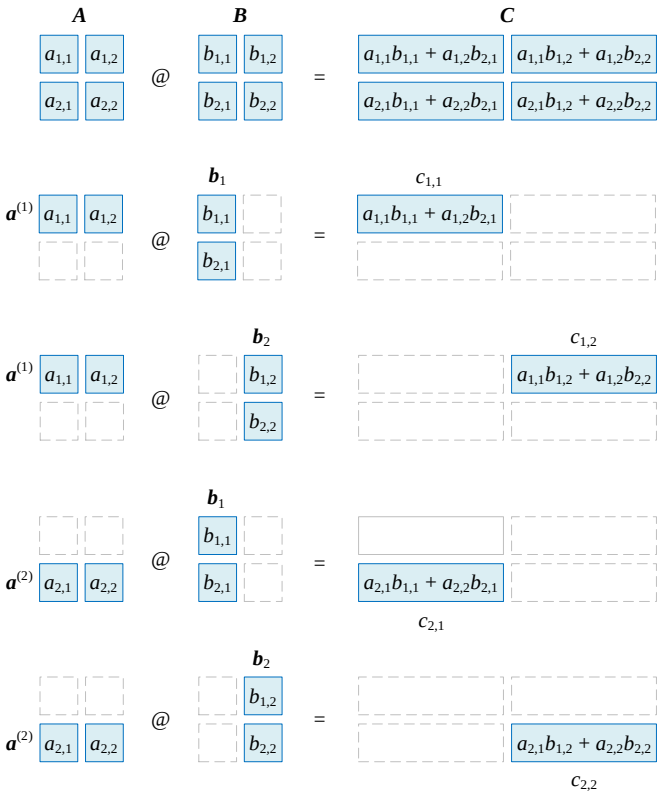


图 14. 矩阵乘法规则，两个 2 × 2 矩阵相乘为例

第一视角

第一视角是矩阵运算的常规视角，也叫做标量积展开。

如图 14 所示，矩阵乘法 $\boldsymbol{AB}$ 中，位于左侧的 $\boldsymbol{A}$ 写成一组行向量；位于右侧的 $\boldsymbol{B}$ 写成一组列向量。

$\boldsymbol{A}$ 的第 i 行 $\boldsymbol{a}^{(i)}$ 乘以 $\boldsymbol{B}$ 的第 j 列 $\boldsymbol{b}_j$，得到乘积 $\boldsymbol{C}$ 的 (i, j) 元素 $c_{i,j}$：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{A} \circledcirc \boldsymbol{B} &= \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \end{bmatrix}_{1\times 2} \\ \begin{bmatrix} a_{2,1} & a_{2,2} \end{bmatrix}_{1\times 2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{1,1} \\ b_{2,1} \end{bmatrix}_{2\times 1} & \begin{bmatrix} b_{1,2} \\ b_{2,2} \end{bmatrix}_{2\times 1} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}^{(1)} \\ \boldsymbol{a}^{(2)} \end{bmatrix}_{2\times 1} \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{b}_2 \end{bmatrix}_{1\times 2} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}^{(1)}\boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{a}^{(1)}\boldsymbol{b}_2 \\ \boldsymbol{a}^{(2)}\boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{a}^{(2)}\boldsymbol{b}_2 \end{bmatrix}_{2\times 2} \\
&= \begin{bmatrix} a_{1,1}b_{1,1} + a_{1,2}b_{2,1} & a_{1,1}b_{1,2} + a_{1,2}b_{2,2} \\ a_{2,1}b_{1,1} + a_{2,2}b_{2,1} & a_{2,1}b_{1,2} + a_{2,2}b_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{1,1} & c_{1,2} \\ c_{2,1} & c_{2,2} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{31}
$$

第二视角

矩阵乘法的第二视角叫做外积展开。

将矩阵乘法 $\boldsymbol{AB}$ 中，位于左侧的 $\boldsymbol{A}$ 写成一组列向量；位于右侧的 $\boldsymbol{B}$ 写成一组行向量。如下所示，我们把 $\boldsymbol{AB}$ 展开写成矩阵加法：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{A} \circledcirc \boldsymbol{B} &= \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{1,1} \\ a_{2,1} \end{bmatrix}_{2\times 1} & \begin{bmatrix} a_{1,2} \\ a_{2,2} \end{bmatrix}_{2\times 1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} \end{bmatrix}_{1\times 2} \\ \begin{bmatrix} b_{2,1} & b_{2,2} \end{bmatrix}_{1\times 2} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 \end{bmatrix}_{1\times 2} \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}^{(1)} \\ \boldsymbol{b}^{(2)} \end{bmatrix}_{2\times 1} = \boldsymbol{a}_1\boldsymbol{b}^{(1)} + \boldsymbol{a}_2\boldsymbol{b}^{(2)} = \begin{bmatrix} a_{1,1} \\ a_{2,1} \end{bmatrix}_{2\times 1} \circledcirc \begin{bmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} \end{bmatrix}_{1\times 2} + \begin{bmatrix} a_{1,2} \\ a_{2,2} \end{bmatrix}_{2\times 1} \circledcirc \begin{bmatrix} b_{2,1} & b_{2,2} \end{bmatrix}_{1\times 2} \\
&= \begin{bmatrix} a_{1,1}b_{1,1} & a_{1,1}b_{1,2} \\ a_{2,1}b_{1,1} & a_{2,1}b_{1,2} \end{bmatrix}_{2\times 2} + \begin{bmatrix} a_{1,2}b_{2,1} & a_{1,2}b_{2,2} \\ a_{2,2}b_{2,1} & a_{2,2}b_{2,2} \end{bmatrix}_{2\times 2} \\
&= \begin{bmatrix} a_{1,1}b_{1,1} + a_{1,2}b_{2,1} & a_{1,1}b_{1,2} + a_{1,2}b_{2,2} \\ a_{2,1}b_{1,1} + a_{2,2}b_{2,1} & a_{2,1}b_{1,2} + a_{2,2}b_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{1,1} & c_{1,2} \\ c_{2,1} & c_{2,2} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{32}
$$

矩阵乘法极其重要，本书第 5、6 章还将深入探讨矩阵乘法，并介绍更多视角。

4.7 转置：绕主对角线镜像

矩阵的行列互换得到的新矩阵的操作为**矩阵转置** (matrix transpose)。转置是一种“矩阵 → 矩阵”运算。

如图 15 所示，一个 $n \times D$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 转置得到 $D \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$，整个过程相当于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 绕主对角线镜像。矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的转置 (the transpose of a matrix $\boldsymbol{A}$) 记作 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 或 $\boldsymbol{A}'$。为了和求导记号区分，本书仅采用 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 记法。

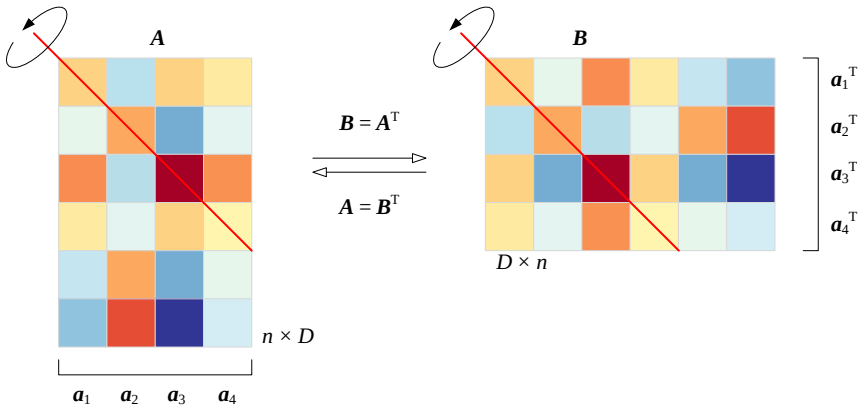


图 15. 矩阵转置

如图 15 所示，将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 写成一组列向量：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{a}_3 & \boldsymbol{a}_4\end{bmatrix} \tag{33}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 转置 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 可以展开写成：

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{a}_2^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{a}_3^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{a}_4^{\mathrm{T}}\end{bmatrix} \tag{34}$$

反之，将图 15 中矩阵 $\boldsymbol{A}$ 写成一组行向量：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}^{(1)}\\ \boldsymbol{a}^{(2)}\\ \vdots\\ \boldsymbol{a}^{(6)}\end{bmatrix} \tag{35}$$

$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 可以写成：

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}^{(1)\mathrm{T}} & \boldsymbol{a}^{(2)\mathrm{T}} & \cdots & \boldsymbol{a}^{(6)\mathrm{T}}\end{bmatrix} \tag{36}$$

如上文所述，一个 $n \times D$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 转置结果为自身，则称 $\boldsymbol{A}$ **对称** (symmetric)：

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \tag{37}$$

列向量和自身的张量积，比如 $\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{a}$，就是对称矩阵。

矩阵转置如下几个重要性质值得大家重视：

$$
\begin{aligned}
&\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}\\
&\left(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\right)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\\
&\left(k\boldsymbol{A}\right)^{\mathrm{T}}=k\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\\
&\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}\right)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\\
&\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}\boldsymbol{C}\right)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\\
&\left(\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{A}_3\cdots\boldsymbol{A}_k\right)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}_k{}^{\mathrm{T}}\cdots\boldsymbol{A}_3{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1{}^{\mathrm{T}}
\end{aligned}
\tag{38}
$$

等长列向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的标量积等价于 $\boldsymbol{a}$ 的转置乘 $\boldsymbol{b}$，或 $\boldsymbol{b}$ 的转置乘 $\boldsymbol{a}$：

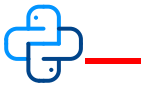
$$
\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a}=\langle\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\rangle=\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}=a_1b_1+a_2b_2+\cdots+a_nb_n \tag{39}
$$

$\boldsymbol{a}$ 的模 (L^2 范数) 也可以写成 $\boldsymbol{a}$ 转置乘自身，再开方：

$$
\|\boldsymbol{a}\|_2^2=\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}=\langle\boldsymbol{a},\boldsymbol{a}\rangle=\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}\quad\Rightarrow\quad\|\boldsymbol{a}\|=\sqrt{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}}=\sqrt{\langle\boldsymbol{a},\boldsymbol{a}\rangle}=\sqrt{\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}} \tag{40}
$$

如果 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 不是方阵，但是形状相同，下两式“相当于”$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 和的平方：

$$
\begin{aligned}
&\left(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\right)=\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\right)\left(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\right)=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\\
&\left(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\right)\left(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\right)^{\mathrm{T}}=\left(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\right)\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\right)=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}
\end{aligned}
\tag{41}
$$



Bk4_Ch4_10.py 计算矩阵转置。

4.8 矩阵逆：“相当于”除法运算

方阵 $\boldsymbol{A}$ 如果**可逆** (invertible)，仅当存在矩阵 $\boldsymbol{B}$ 使得：

$$
\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I} \tag{42}
$$

$\boldsymbol{B}$ 叫做矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**逆** (inverse)，一般记做 $\boldsymbol{A}^{-1}$。

矩阵**可逆** (invertible) 也称**非奇异** (non-singular)；否则就称矩阵**不可逆** (non-invertible)，或称**奇异** (singular)。如果 $\boldsymbol{A}$ 的逆存在，$\boldsymbol{A}$ 的逆唯一。矩阵求逆是一种“矩阵 → 矩阵”运算。

本书的 8 章将从几何视角介绍如何理解矩阵求逆。

强调一下，矩阵求逆“相当于”除法运算，但是两者有本质上的区别。矩阵的逆本质上还是矩阵乘法。

请大家注意以下和矩阵逆有关的运算规则：

$$\begin{aligned}\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\right)^{-1} &= \left(\boldsymbol{A}^{-1}\right)^{\mathrm{T}} \\ \left(\boldsymbol{AB}\right)^{-1} &= \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1} \\ \left(\boldsymbol{ABC}\right)^{-1} &= \boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1} \\ \left(k\boldsymbol{A}\right)^{-1} &= \frac{1}{k}\boldsymbol{A}^{-1}\end{aligned} \tag{43}$$

其中，假设 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$、$\boldsymbol{AB}$ 和 $\boldsymbol{ABC}$ 逆存在，$k \neq 0$。下一章最后会介绍几种矩阵乘法的雷区，其中就包括使用矩阵逆这个数学工具时要注意的事项。

如果 $\boldsymbol{A}$ 的逆存在，如下等式成立：

$$\begin{aligned}\left(\boldsymbol{A}^{-1}\right)^{-1} &= \boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{A}^{-n} = \left(\boldsymbol{A}^{-1}\right)^{n} &= \underbrace{\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1}\cdots\boldsymbol{A}^{-1}}_{n} \\ \left(\boldsymbol{A}^{n}\right)^{-1} = \boldsymbol{A}^{-n} &= \left(\boldsymbol{A}^{-1}\right)^{n}\end{aligned} \tag{44}$$

一般情况，

$$\left(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\right)^{-1} \neq \boldsymbol{A}^{-1}+\boldsymbol{B}^{-1} \tag{45}$$

特别地，对于给定 2×2 矩阵 $\boldsymbol{A}$：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \tag{46}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的逆 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 可以通过下式获得，

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{|\boldsymbol{A}|}\begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix} \tag{47}$$

其中

$$|\boldsymbol{A}| = ad - bc \tag{48}$$

$|\boldsymbol{A}|$ 被称作矩阵 $\boldsymbol{A}$ **行列式** (determinant)。

⚠ 注意，观察 (47)，我们容易发现行列式值 $|\boldsymbol{A}|$ 不为 0 时，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 才存在逆。本章后续将详细讲解行列式值计算。

若下式成立，方阵 $\boldsymbol{A}$ 是**正交矩阵** (orthogonal matrix)：

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{A}^{-1} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I} \tag{49}$$

正交矩阵在本书有很重的戏份。本书第 9、10 章将深入探讨正交矩阵的性质和应用，本节不做展开。

Bk4_Ch4_11.py 展示用 Numpy 库函数 numpy.linalg.inv() 计算矩阵逆。注意，对于 numpy.matrix() 产生的矩阵 A，可以通过 A.I 计算矩阵 A 的逆，比如 Bk4_Ch4_12.py 给出的例子。但是，这一方法不能使用在 numpy.array() 生成的矩阵。numpy.array() 生成的矩阵求逆，一般用 numpy.linalg.inv()。

4.9 迹：主对角元素之和

$n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的迹 (trace) 为其主对角线元素之和：

$$\operatorname{tr}(\boldsymbol{A}) = \sum_{i=1}^{n} a_{i,i} = a_{1,1} + a_{2,2} + \cdots + a_{n,n} \tag{50}$$

矩阵迹是一种“矩阵 → 标量”运算。

举个例子，

$$\operatorname{tr}(\boldsymbol{A}) = \operatorname{tr}\left(\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 3 & 2 & 4 \\ -2 & 0 & 3 \end{bmatrix}\right) = 1 + 2 + 3 = 6 \tag{51}$$

注意，“迹”这个运算是针对“方阵”定义的。

Bk4_Ch4_13.py 介绍如何计算矩阵的迹。

请大家注意以下有关矩阵迹的性质：

$$\begin{aligned} &\operatorname{tr}(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}) = \operatorname{tr}(\boldsymbol{A}) + \operatorname{tr}(\boldsymbol{B}) \\ &\operatorname{tr}(k\boldsymbol{A}) = k \cdot \operatorname{tr}(\boldsymbol{A}) \\ &\operatorname{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) = \operatorname{tr}(\boldsymbol{A}) \\ &\operatorname{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}) = \operatorname{tr}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}) \end{aligned} \tag{52}$$

注意，上式假设 $\boldsymbol{AB}$ 和 $\boldsymbol{BA}$ 两个乘法都存在。

如果 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 列向量行数相同，则如几个运算等价：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}=\boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{x}=\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle=\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\right)=\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{y}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\right)=\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{x}\otimes\boldsymbol{y}\right) \tag{53}$$

本书后续会介绍椭圆可以用来表达**协方差矩阵** (covariance matrix)。举个例子，给定一个协方差矩阵为：

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}2.5 & 1.5\\ 1.5 & 2.5\end{bmatrix} \tag{54}$$

图 16 左图就是代表上述协方差矩阵的旋转椭圆。

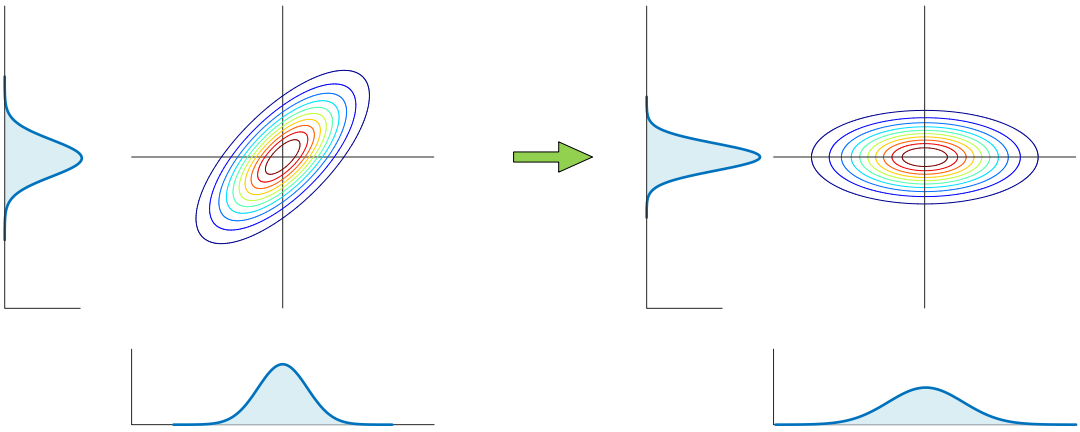


图 16. 协方差矩阵和椭圆关系

经过旋转操作，椭圆的长轴和横轴重合，得到图 16 右图正椭圆，对应的协方差矩阵为：

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\text{rotated}}=\begin{bmatrix}4 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} \tag{55}$$

相信大家已经注意到，两个协方差矩阵的迹相同，都是 5，即：

$$\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{\Sigma}\right)=2.5+2.5=\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{\Sigma}_{\text{rotated}}\right)=4+1 \tag{56}$$

这一点非常重要，本系列丛书后续会在不同板块中探讨。

大家可能会问，(54) 和 (55) 两个协方差矩阵之间有怎样的联系？或者说，如何从 (54) 计算得到 (55)？椭圆之间的旋转角度怎么确定？本书第 13、14 章介绍的特征值分解将回答这些疑问。

4.10 逐项积：对应元素相乘

在讲解向量运算时，我们介绍过**元素乘积** (element-wise multiplication)，也称为**阿达玛乘积** (Hadamard product) 或**逐项积** (piecewise product)。

逐项积也可以用在矩阵上。两个形状相同的矩阵的逐项积是矩阵对应元素相乘，结果形状不变：

$$\boldsymbol{A}_{n\times D} \odot \boldsymbol{B}_{n\times D} = \begin{bmatrix} a_{1,1}b_{1,1} & a_{1,2}b_{1,2} & \cdots & a_{1,D}b_{1,D} \\ a_{2,1}b_{2,1} & a_{2,2}b_{2,2} & \cdots & a_{2,D}b_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1}b_{n,1} & a_{n,2}b_{n,2} & \cdots & a_{n,D}b_{n,D} \end{bmatrix}_{n\times D} \tag{57}$$

图 17 所示为矩阵逐项积运算法则示意图。逐项积是一种“矩阵 → 矩阵”运算。

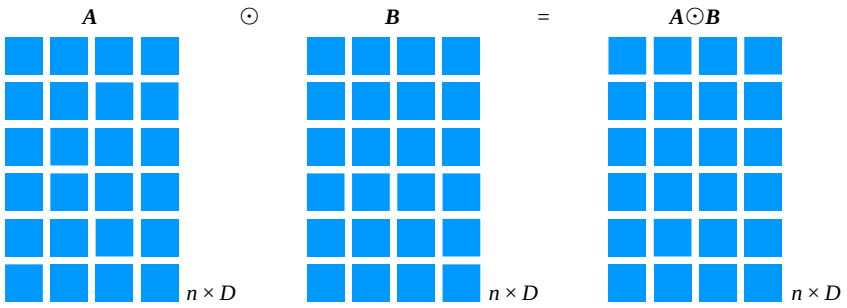
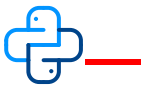


图 17. 矩阵逐项积



`Bk4_Ch4_14.py` 介绍如何计算逐项积。

4.11 行列式：将矩阵映射到标量值

每个“方阵”都有自己的**行列式** (determinant)，方阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值可以表达为 $|\boldsymbol{A}|$ 或 $\det(\boldsymbol{A})$。如果方阵的行列式值非零，方阵则称可逆或非奇异。

白话说，行列式是将一个方阵 $\boldsymbol{A}$ 根据一定的规则映射到一个标量。因此，行列式是一种“矩阵 → 标量”运算。注意，矩阵的行列式值可正可负，也可以为 0。

一阶方阵的行列式值：

$$|a_{11}| = a_{11} \tag{58}$$

二阶方阵的行列式值：

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \tag{59}$$

三阶方阵的行列式值：

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} &= \begin{vmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 & 0 & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} \\ &= a_{11}\begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} - a_{12}\begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} + a_{13}\begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} \end{aligned} \tag{60}$$

根据以上规律，可以发现 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值可以通过递归计算得到。

更多性质

特别地，对角阵的行列式值为：

$$\begin{vmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22}a_{33} \tag{61}$$

三角阵的行列式值为：

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} & a_{23} \\ 0 & 0 & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22}a_{33} \tag{62}$$

上述规则也适用于计算下三角矩阵的行列式值。

请大家注意以下行列式性质：

$$\begin{aligned} \det(\boldsymbol{AB}) &= \det(\boldsymbol{A}) \cdot \det(\boldsymbol{B}) \\ \det(c\boldsymbol{A}_{n\times n}) &= c^n \det(\boldsymbol{A}) \\ \det(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) &= \det(\boldsymbol{A}) \\ \det(\boldsymbol{A}^n) &= \det(\boldsymbol{A})^n \\ \det(\boldsymbol{A}^{-1}) &= \frac{1}{\det(\boldsymbol{A})} \end{aligned} \tag{63}$$

一般情况，

$$\det(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) \neq \det(\boldsymbol{A}) + \det(\boldsymbol{B}) \tag{64}$$

向量积

本书前文介绍的向量积也可以通过行列式计算得到，比如：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}&=\begin{vmatrix}\boldsymbol{i}&\boldsymbol{j}&\boldsymbol{k}\\a_1&a_2&a_3\\b_1&b_2&b_3\end{vmatrix}\\&=\begin{vmatrix}a_2&a_3\\b_2&b_3\end{vmatrix}\boldsymbol{i}-\begin{vmatrix}a_1&a_3\\b_1&b_3\end{vmatrix}\boldsymbol{j}+\begin{vmatrix}a_1&a_2\\b_1&b_2\end{vmatrix}\boldsymbol{k}\\&=\left(a_2b_3-a_3b_2\right)\boldsymbol{i}+\left(a_3b_1-a_1b_3\right)\boldsymbol{j}+\left(a_1b_2-a_2b_1\right)\boldsymbol{k}\end{aligned}\tag{65}$$

还用上一章的例子，给定 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 向量：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a}&=-2\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j}+\boldsymbol{k}\\\boldsymbol{b}&=\boldsymbol{i}-2\boldsymbol{j}-\boldsymbol{k}\end{aligned}\tag{66}$$

$\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ 结果如下：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}&=\begin{vmatrix}\boldsymbol{i}&\boldsymbol{j}&\boldsymbol{k}\\-2&1&1\\1&-2&-1\end{vmatrix}\\&=\begin{vmatrix}1&1\\-2&-1\end{vmatrix}\boldsymbol{i}-\begin{vmatrix}-2&1\\1&-1\end{vmatrix}\boldsymbol{j}+\begin{vmatrix}-2&1\\1&-2\end{vmatrix}\boldsymbol{k}\\&=\boldsymbol{i}-\boldsymbol{j}+3\boldsymbol{k}\end{aligned}\tag{67}$$

几何视角

给定 2 × 2 方阵 $\boldsymbol{A}$，具体为：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}a_{11}&a_{12}\\a_{21}&a_{22}\end{bmatrix}\tag{68}$$

图 18 给出的是二阶矩阵行列式的几何意义。

$\boldsymbol{A}$ 写成左右排列的两个列向量：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_1&\boldsymbol{a}_2\end{bmatrix}\tag{69}$$

即：

$$\boldsymbol{a}_1=\begin{bmatrix}a_{11}\\a_{21}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{a}_2=\begin{bmatrix}a_{12}\\a_{22}\end{bmatrix}\tag{70}$$

如图 18 所示，以 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 为两条边构造得到一个平行四边形。这个平行四边形的面积就是 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值。下面我们推导一下。

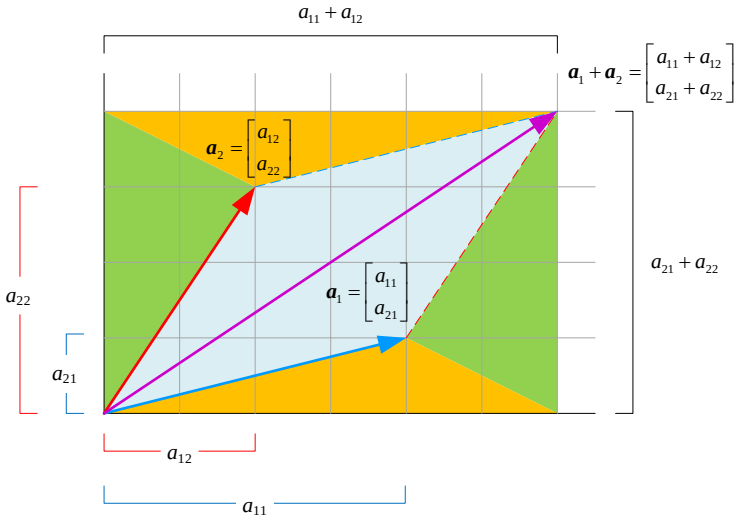


图 18. 二阶矩阵的行列式的几何意义

如图 19 所示，矩形和三角形的面积很容易计算。

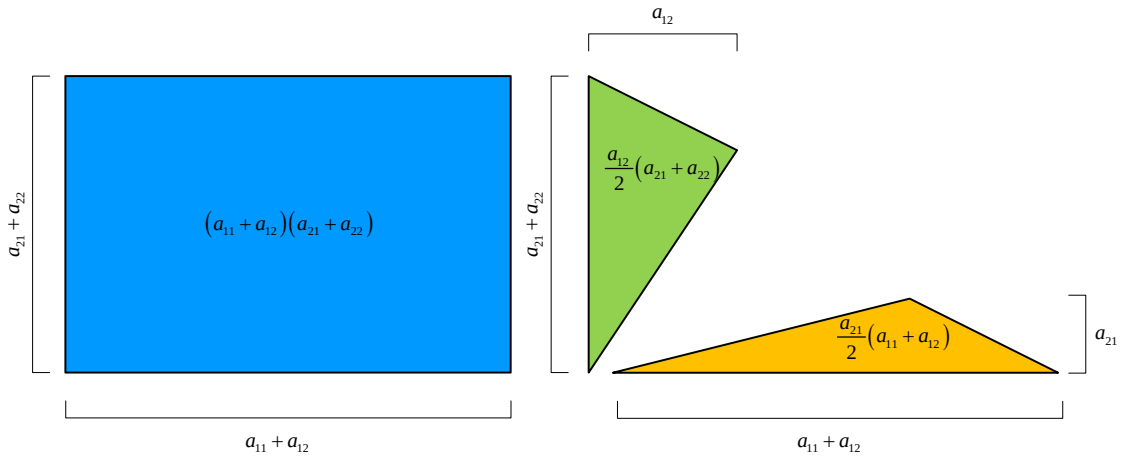


图 19. 三个几何形状的面积

如图 20 所示，平行四边形的面积，就是矩形面积减去两倍的绿色三角形面积，再减去两倍的橙色三角形面积，即：

$$\begin{aligned}\text{Area} &= (a_{11}+a_{12})(a_{21}+a_{22})-a_{12}(a_{21}+a_{22})-a_{21}(a_{11}+a_{12})\\ &= a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}\end{aligned} \tag{71}$$

这和 (59) 行列式结果一致。

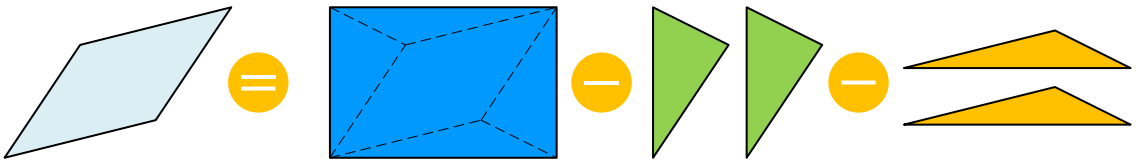
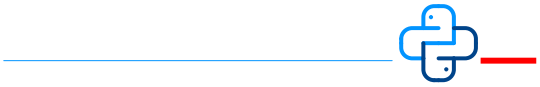


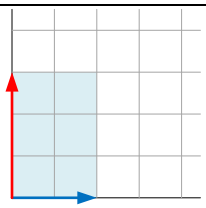
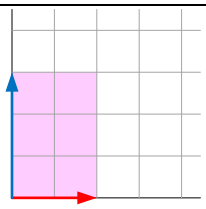
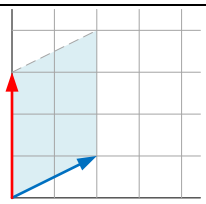
图 20. 求平行四边形面积

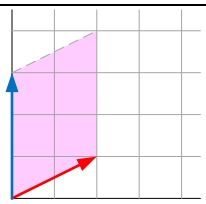
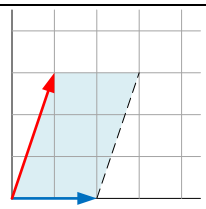
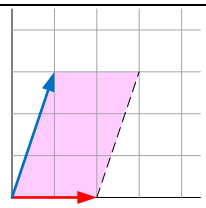
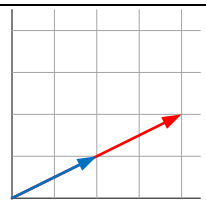


Bk4_Ch4_15.py 介绍计算行列式值。

表 1 给出了几个特殊 2 × 2 方阵的行列式值和对应的平面形状。希望大家仔细对比表中几幅图中向量 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 逆时针方向先后次序，很容发现这种次序和行列式值正、负、零之间的关系。

表 1. 几个特殊 2 × 2 方阵的行列式值

行列式值	向量	图形
$\begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{vmatrix} = 6$	$\boldsymbol{a}_1 = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{a}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \end{bmatrix}$	
$\begin{vmatrix} 0 & 2 \\ 3 & 0 \end{vmatrix} = -6$	$\boldsymbol{a}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{a}_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}$	
$\begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 3 \end{vmatrix} = 6$	$\boldsymbol{a}_1 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{a}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \end{bmatrix}$	

$\begin{vmatrix} 0 & 2 \\ 3 & 1 \end{vmatrix} = -6$	$\boldsymbol{a}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{a}_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$	
$\begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 3 \end{vmatrix} = 6$	$\boldsymbol{a}_1 = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{a}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix}$	
$\begin{vmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 0 \end{vmatrix} = -6$	$\boldsymbol{a}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{a}_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}$	
$\begin{vmatrix} 2 & 4 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} = 0$	$\boldsymbol{a}_1 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{a}_2 = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \end{bmatrix}$	

我们用 Streamlit 制作了一个应用，绘制表 1 不同平行四边形。大家可以改变矩阵 $\boldsymbol{A}$ 元素值，并让 $\boldsymbol{A}$ 作用于 $\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$，即 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{a}_2$。$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 构造的是“方格”，而 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 构造的就是“平行且等距网格”。请大家参考 Streamlit_Bk4_Ch4_16.py。此外，本书第 7、8 章会介绍“平行且等距网格”代表什么。

从面积到体积

本节前文讲解行列式值用的例子中矩阵都是 2 × 2，现在聊一聊 3 × 3 方阵的行列式值的几何意义。

我们先看一个最简单例子，给定如下 3 × 3 对角方阵：

$$\begin{bmatrix} 1 & & \\ & 2 & \\ & & 3 \end{bmatrix} \tag{72}$$

如图 21 所示，上式代表三维空间中边长分别为 1、2、3 的立方体，而行列式值为 6 则说明立方体的体积为 6。

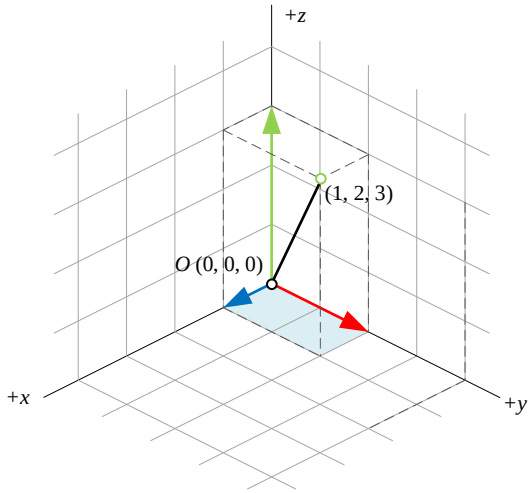


图 21. 立方体的体积为 6

对 (72) 稍作修改，将第三个对角元素值改为 0，得到矩阵：

$$\begin{bmatrix} 1 & & \\ & 2 & \\ & & 0 \end{bmatrix} \tag{73}$$

这时，矩阵的行列式值为 0。从图 21 上来看，这个立方体“趴”在 xy 平面上，对应浅蓝色阴影，显然它的体积为 0。

如图 22 (a) 所示，而对于任意 3×3 方阵 $\boldsymbol{A}$，它的行列式值的几何含义就是由其三个列向量 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 构造的平行六面体的体积。注意，这个体积值也有正负。特别地，如果 $\boldsymbol{a}_3$ 在 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$ 构造的平面中，也就是 $\boldsymbol{a}_3$ 躺在图 22 (b) 中浅蓝色平面上，平行六面体体积为 0，即方阵 $\boldsymbol{A}$ 行列式值为 0。

行列式中某行或某列全为 0，行列式值为 0。从几何角度很容易理解，因为这个平行体的某条边长为 0，因此它的体积就是 0。

再看到单位矩阵 $\boldsymbol{I}$，大家就可以把 $\boldsymbol{I}$ 看成单位正方形 (unit square)、单位正方体 (unit cube)。单位矩阵行列式 $|\boldsymbol{I}| = 1$，可以理解成单位正方形的面积为 1，或者单位正方体的体积为 1。

图 22 (b) 这种情况下，$\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 线性相关，$\boldsymbol{A}$ 的秩为 2，这是本书第 7 章要介绍的内容。此外，在线性变换中，变换矩阵的行列式值代表面积或体积缩放比例。本书第 8 章将展开讲解。

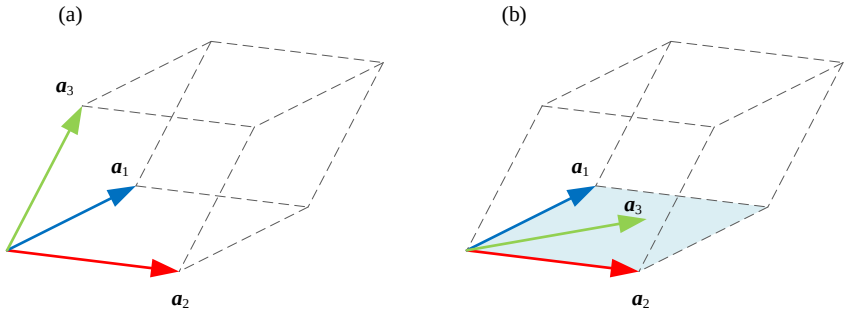


图 22. 3 × 3 方阵 $\boldsymbol{A}$ 行列式值的几何含义

多维

再进一步，给定如下 $D \times D$ 对角方阵：

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D \end{bmatrix}_{D\times D} \tag{74}$$

上式说明，在 D 维空间中，这个“长方体”的边长分别为 λ_1、λ_2、… λ_D。而这个长方体的体积就是这些值连乘。

举个例子，在多元高斯分布的概率密度函数中，我们可以在分母上看到矩阵的行列式值 $|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}$，$|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}$ 起到的作用就是体积缩放：

$$f_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x}) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right)}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} \tag{75}$$

本书第 20 章会使用各种线性代数工具解剖多元高斯分布概率密度函数。

几何变换：平行四边形 → 矩形

大家会逐渐发现，我们遇到的方阵大部分不是对角方阵，计算其面积或体积显然不容易。有没有一种办法能够将这些方阵转化成对角方阵？也就是说，把平行四边形转化成矩形，把平行六面体转化为立方体？

答案是肯定的，用到的方法就是本书后续要讲解的**特征值分解** (eigen decomposition)。注意，并不是所有的方阵都可以转化为对角方阵，能够完成对角化的矩阵叫**可对角化矩阵** (diagonalizable matrix)。这实际上告诉我们特征值分解的前提——矩阵可对角化。

举个例子，如图 23 所示，通过“特征值分解”，我们把平行四边形变成一个长方形。显然两个矩阵的行列式值相同，即两个几何形状具有相同面积。大家很快就会发现，长方形的边长——2

和 5——叫做**特征值** (eigen value)。2 和 5 是对角方阵的对角线元素。此外，值得大家注意的是图 23 中两个矩阵的迹相同，即 3 + 4 = 2 + 5。

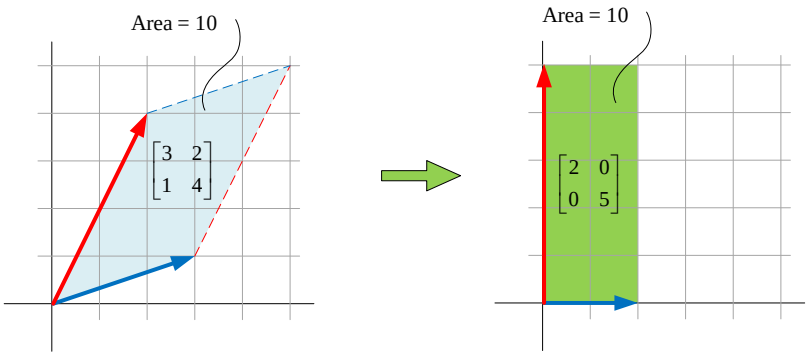


图 23. 把平行四边形变成长方形

类似地，如图 24 所示，通过神奇的“特征值分解”，我们可以把平行六面体变成长方体。特征值的奇妙用途还不止这些，请大家关注本书第 13、14 章。

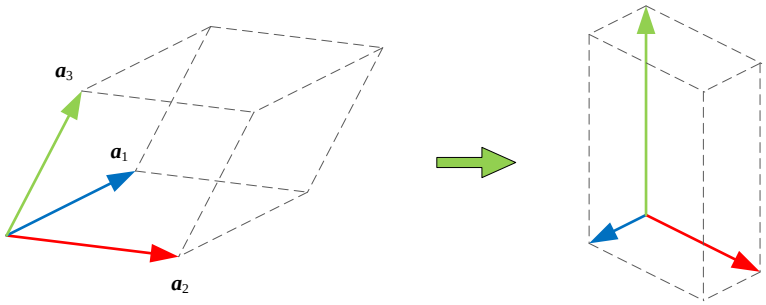


图 24. 把平行六面体变成长方体

本章走马观花地介绍几种常见矩阵运算。必须强调的是，每一种矩阵运算规则都是重要的数学工具，都有自己的应用场景。而在所有线性代数的运算法则中，矩阵乘法居于核心地位。

就像儿时背诵九九乘法表一样，矩阵乘法规则就是我们的“成人乘法表”——必须要熟练掌握！随着本书对线性代数知识抽丝剥茧，大家会由浅入深认识到矩阵乘法的伟力。

强烈推荐大家参考 *Immersive Linear Algebra*。这本书配套大量可交互动画展示线性代数概念。全册免费阅读，网址如下：

http://immersivemath.com/ila/index.html

5 Dive into Matrix Multiplication
矩阵乘法

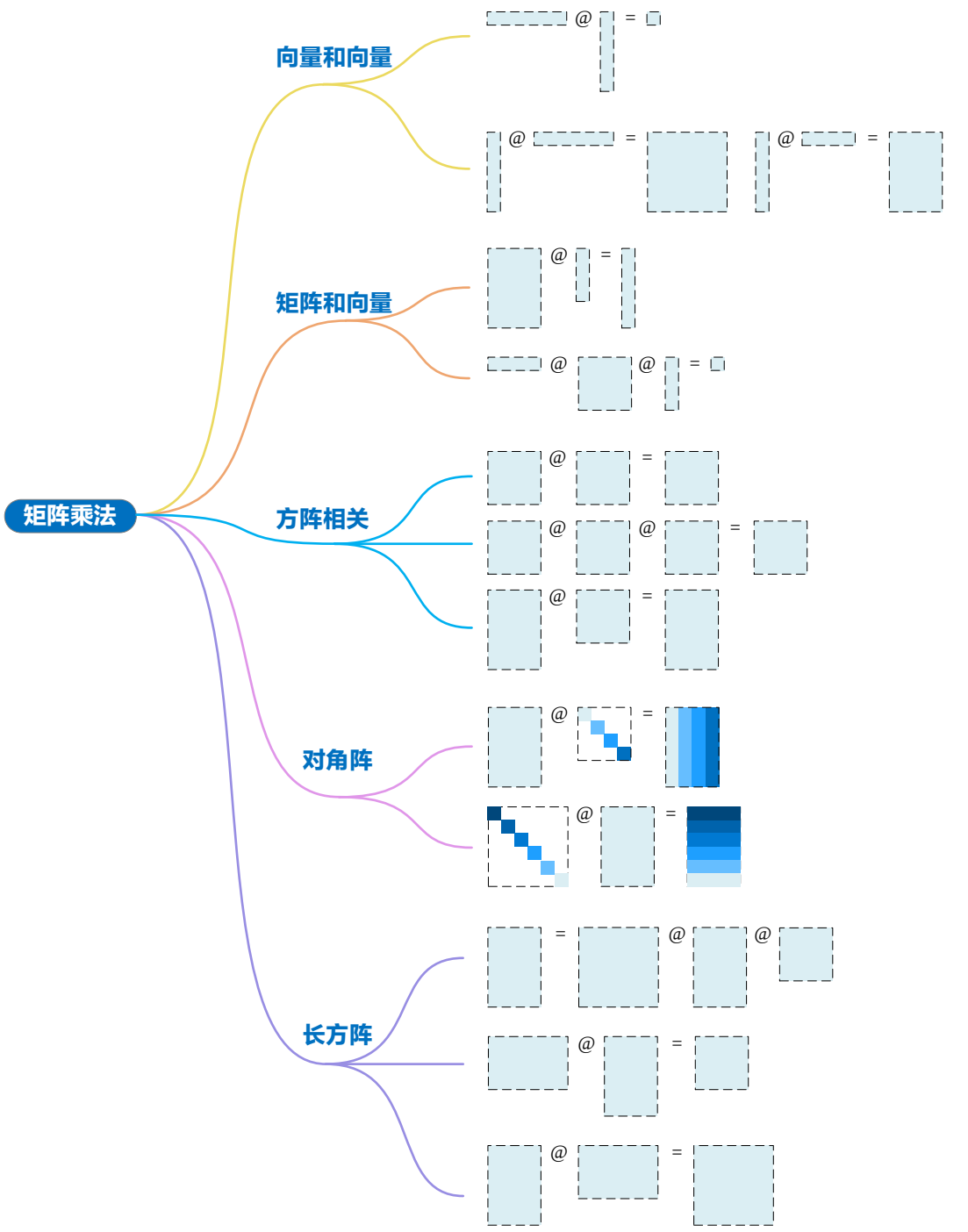
代数、几何、统计、数据交融的盛宴

只要持续进步，千万别泼冷水，哪怕蜗行牛步。

Never discourage anyone who continually makes progress, no matter how slow.

—— 柏拉图 (Plato) | 古希腊哲学家 | 424/423 ~ 348/347 BC

- `numpy.array()` 构造多维矩阵/数组
- `numpy.einsum()` 爱因斯坦求和约定
- `numpy.linalg.inv()` 求矩阵逆
- `numpy.matrix()` 构造二维矩阵
- `numpy.multiply()` 矩阵逐项积
- `numpy.random.random_integers()` 生成随机整数
- `seaborn.heatmap()` 绘制数据热图



5.1 矩阵乘法：形态丰富多样

矩阵乘法是线性映射的灵魂。因此，矩阵乘法是矩阵运算中最重要的规则，没有之一！

矩阵乘法的规则本身并不难理解；但是，横在我们面前最大的困难是——矩阵乘法的灵活性。这种灵活性主要体现在矩阵乘法不同视角、矩阵乘法形态的多样性这两方面。

本书前文和大家讨论了矩阵乘法的两个视角，本书后续还将在分块矩阵中继续探讨矩阵乘法更多视角。而本章将介绍常见矩阵乘法形态。

⚠ 注意，学习本章时，请大家多从代数、几何、数据、统计几个角度理解不同矩阵乘法形态，特别是几何和数据这两个角度。

本章的作用就是鸟瞰全景，让大家开开眼界，不需要大家关注运算细节。如果你之前曾经系统学过线性代数，这一章会让你有寻他千百度、蓦然回首的感觉！作者在学习线性代数的时候，就特别希望能找到一本书能够把常见的矩阵乘法形态和应用场景都娓娓道来。

如果你刚刚接触线性代数相关内容，不要被本章大量术语吓到，大家现在不需要记住它们。本章可以视作全书重要知识点的总结。希望大家在本书不同学习阶段时，能够不断回头翻阅本章，让自己对矩阵乘法的认识一步步加深。

下面，我们就开始“鸟瞰”各种形态的矩阵乘法。

5.2 向量和向量

给定两个等行数列向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$：

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{y}=\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \tag{1}$$

$\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 向量内积可以写成 $\boldsymbol{x}$ 转置乘 $\boldsymbol{y}$，或者 $\boldsymbol{y}$ 转置乘 $\boldsymbol{x}$：

$$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}=\boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{x}=\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\right)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=x_1y_1+x_2y_2+\cdots x_ny_n=\sum_{i=1}^{n}x_iy_i \tag{2}$$

(2) 告诉我们，$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 和 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 相当于向量元素分别相乘，再求和，结果为标量。这和向量内积的运算结果完全一致，因此我们常用矩阵乘法替代向量内积运算。

观察图 1，$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 和 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 结果均为标量，相当于 1×1 矩阵；这就是为什么 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}$。

如果 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ **正交** (orthogonal)，则两者向量内积为 0：

$$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}=\boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{x}=\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\right)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=0 \tag{3}$$

正交相当于“垂直”的推广。本书中出现“正交”最多的场合就是“正交投影(orthogonal projection)”。本书第 9、10 两章专门讲解“正交投影”。

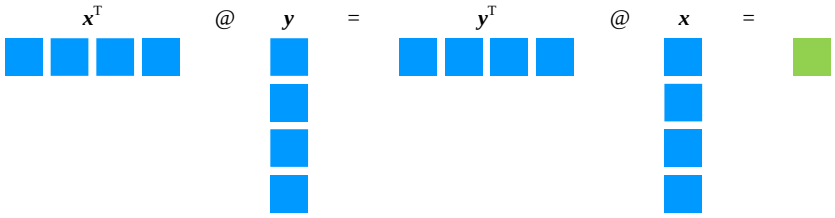


图 1. 标量积

全 1 列向量

全 1 列向量 $\boldsymbol{1}$ 是非常神奇的存在，多元统计离不开全 1 列向量。下面举几个例子。

如图 2 所示，全 1 列向量 $\boldsymbol{1}$ 乘行向量 $\boldsymbol{a}$，相当于对行向量 $\boldsymbol{a}$ 进行复制、向下叠放。$\boldsymbol{1}@\boldsymbol{a}$ 结果如下：

$$\boldsymbol{1}@\boldsymbol{a}=\begin{bmatrix}1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix}_{n\times 1}@\boldsymbol{a}_{1\times m}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}\\\boldsymbol{a}\\\vdots\\\boldsymbol{a}\end{bmatrix}_{n\times m} \tag{4}$$

上式结果为矩阵。复制的份数取决于全 1 列向量 $\boldsymbol{1}$ 的元素个数。再次强调，上式中 $\boldsymbol{a}$ 为行向量。

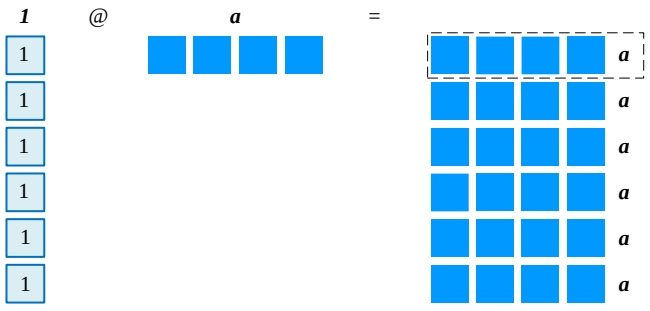


图 2. 复制行向量 $\boldsymbol{a}$

类似地，如图 3 所示，列向量 $\boldsymbol{b}$ 乘全 1 列向量 $\boldsymbol{1}$ 转置，相当于对列向量 $\boldsymbol{b}$ 复制、左右排列：

$$\boldsymbol{b}@\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{b}@\begin{bmatrix}1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{b} & \boldsymbol{b} & \cdots & \boldsymbol{b}\end{bmatrix} \tag{5}$$

上式结果为矩阵。

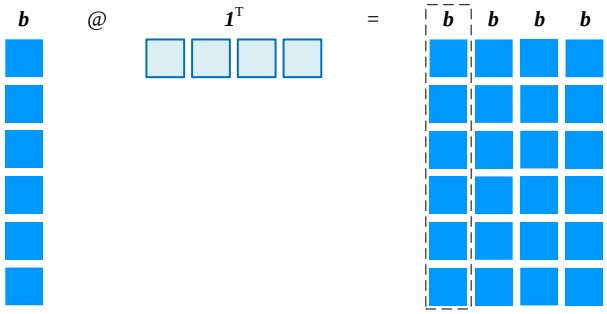


图 3. 复制列向量 $\boldsymbol{b}$

统计视角

下式为利用 $\boldsymbol{1}$ 对列向量 $\boldsymbol{x}$ 元素求和：

$$\boldsymbol{1}\cdot\boldsymbol{x}=\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}=x_1+x_2+\cdots x_n=\sum_{i=1}^{n}x_i \tag{6}$$

上式结果为标量。

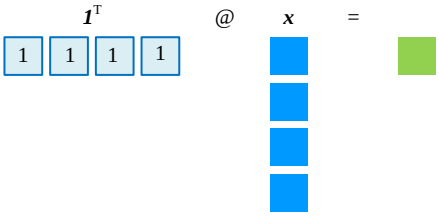


图 4. 求和运算

(6) 除以 n 便是向量 $\boldsymbol{x}$ 元素平均值：

$$\mathrm{E}(\boldsymbol{x})=\frac{x_1+x_2+\cdots x_n}{n}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i=\frac{\boldsymbol{1}\cdot\boldsymbol{x}}{n}=\frac{\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{n}=\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{n} \tag{7}$$

上式假设前提是，X 为有 n 个等概率值 $1/n$ 的平均分布。否则，我们要把 $1/n$ 替换成具体的概率值 p_i。不做特殊说明时，本章默认总体或样本都为等概率。

下式为向量 $\boldsymbol{x}$ 元素各自平方后再求和：

$$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=x_1^2+x_2^2+\cdots x_n^2=\sum_{i=1}^{n}x_i^2 \tag{8}$$

上式结果为标量。

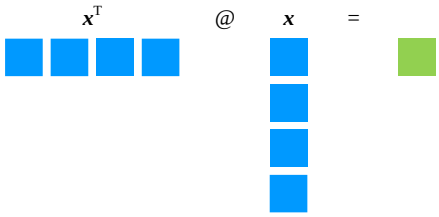


图 5. 平方和运算

计算样本方差时也用到类似 (8) 计算：

$$\mathrm{var}(X)=\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2 \tag{9}$$

上式中，随机数 X 的样本点构成列向量 $\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{x}$ 方差则为：

$$\mathrm{var}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{n-1}\left(\boldsymbol{x}-\frac{\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{n}\right)\cdot\left(\boldsymbol{x}-\frac{\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{n}\right)=\frac{1}{n-1}\left(\boldsymbol{x}-\frac{\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{n}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}-\frac{\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{n}\right) \tag{10}$$

本书第 22 章将讲解如何展开上式。

前文介绍过，在计算样本协方差时，我们用过类似 (2) 运算：

$$\mathrm{cov}(X,Y)=\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mathrm{E}(X))(y_i-\mathrm{E}(Y)) \tag{11}$$

⚠ 注意，如果计算总体方差、协方差的话，(9) 和 (11) 分母的 $n-1$ 则应该改为 n。当 n 足够大，可以不区分 $n-1$ 或 n。

上式中，随机数 X 和 Y 的样本点写成列向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$，也就是说，(11) 可以写成：

$$\mathrm{cov}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\frac{1}{n-1}\left(\boldsymbol{x}-\frac{\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{n}\right)\cdot\left(\boldsymbol{y}-\frac{\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}{n}\right)=\frac{1}{n-1}\left(\boldsymbol{x}-\frac{\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{n}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{y}-\frac{\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}{n}\right) \tag{12}$$

统计和线性代数之间有着千丝万缕的联系，本书第 22 章还会继续这一话题。

几何视角

如果 $\boldsymbol{x}$ 为 n 维单位列向量，则下两式成立：

$$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}=\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\|\boldsymbol{x}\|_2^2=1,\quad\sqrt{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}}=\sqrt{\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle}=\sqrt{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}=\|\boldsymbol{x}\|_2=1 \tag{13}$$

整理以上不同等式都得到同一等式：

$$x_1^2 + x_2^2 + \cdots x_n^2 = 1 \tag{14}$$

提醒大家注意，但凡遇到矩阵乘积结果为标量的情况，请考虑是否能从“距离”角度理解这个矩阵乘积。

几何角度，如图 6 (a) 所示，若 $n = 2$，(13) 代表平面上的**单位圆** (unit circle)。如图 6 (b) 所示，若 $n = 3$，(13) 代表三维空间的**单位球体** (unit sphere)。当 $n > 3$ 时，在多维空间中，(13) 代表 n **维单位球面** (unit n-sphere) 或**单位超球面** (unit hyper-sphere)。

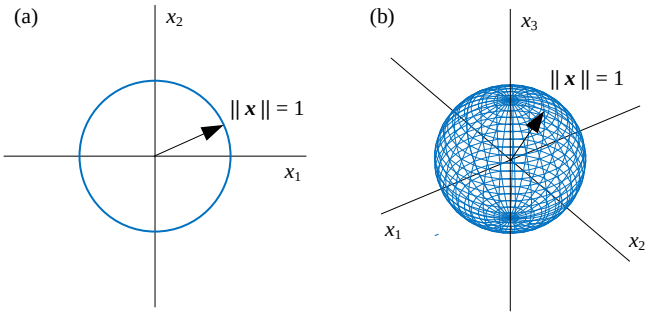


图 6. 单位圆和单位球体

单位圆、单位球、单位超球面内部的点满足：

$$\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x} = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} = \|\boldsymbol{x}\|_2^2 < 1, \quad \sqrt{\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x}} = \sqrt{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle} = \sqrt{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}} = \|\boldsymbol{x}\|_2 < 1 \tag{15}$$

即，

$$x_1^2 + x_2^2 + \cdots x_n^2 < 1 \tag{16}$$

单位圆、单位球、单位超球面外部的点满足：

$$\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x} = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} = \|\boldsymbol{x}\|_2^2 > 1, \quad \sqrt{\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x}} = \sqrt{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle} = \sqrt{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}} = \|\boldsymbol{x}\|_2 > 1 \tag{17}$$

即，

$$x_1^2 + x_2^2 + \cdots x_n^2 > 1 \tag{18}$$

张量积

列向量 $\boldsymbol{x}$ 和自身的张量积结果为方阵，相当于 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}$ 的乘积：

$$\boldsymbol{x} \otimes \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} @ \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} x_1 x_1 & x_1 x_2 & \cdots & x_1 x_n \\ x_2 x_1 & x_2 x_2 & \cdots & x_2 x_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_n x_1 & x_n x_2 & \cdots & x_n x_n \end{bmatrix} \tag{19}$$

图 7 所示为 (19) 计算过程。

图 7. 张量积运算

用两种方式展开 (19)，可以得到：

$$\boldsymbol{x} \otimes \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} x_1\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \\ x_2\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ x_n\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \tag{20}$$

$$= \boldsymbol{x}\begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1\boldsymbol{x} & x_2\boldsymbol{x} & \cdots & x_n\boldsymbol{x} \end{bmatrix}$$

本书前文提过，向量张量积的行向量、列向量都存在“倍数关系”。这实际上解释了为什么非 $\boldsymbol{0}$ 向量张量积的**秩** (rank) 为 1。本书第 7 章将介绍“秩”这个概念。另外，请大家注意如图 8 所示的两种形状的张量积和矩阵乘法关系，并注意区分结果形状。

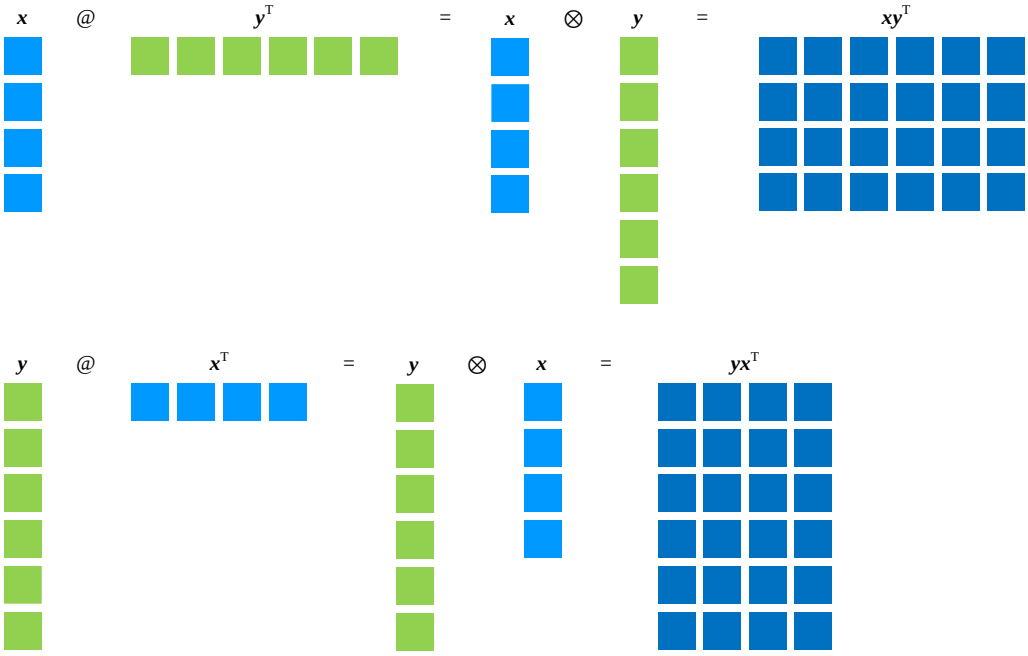


图 8. 另外两种形状的张量积

5.3 再聊全 1 列向量

本节主要介绍全 1 列向量 $\boldsymbol{1}$ 在求和方面的用途。

有关 Σ 求和，本系列丛书《数学要素》第 14 章中讲过。本节主要从矩阵乘法角度再深入探讨。

每列元素求和

如图 9 所示，全 1 列向量 $\boldsymbol{1}$ 转置左乘数据矩阵 $\boldsymbol{X}$，相当于对 $\boldsymbol{X}$ 每一列元素求和。计算结果为行向量，行向量的每个元素是 $\boldsymbol{X}$ 对应列元素之和：

$$\left(\boldsymbol{1}_{n\times 1}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\end{bmatrix}_{1\times n}\begin{bmatrix}x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,D}\\ x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,D}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ x_{n,1} & x_{n,2} & \cdots & x_{n,D}\end{bmatrix}_{n\times D}=\begin{bmatrix}\sum_{i=1}^{n}x_{i,1} & \sum_{i=1}^{n}x_{i,2} & \cdots & \sum_{i=1}^{n}x_{i,D}\end{bmatrix}_{1\times D} \tag{21}$$

请大家格外注意矩阵形状。全 1 列向量 $\boldsymbol{1}$ 的形状为 $n \times 1$，转置之后 $\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}$ 的形状为 $1 \times n$。数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的形状为 $n \times D$。矩阵乘积 $\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的结果形状为 $1 \times D$。上式就是我们在《数学要素》第 14 章中介绍的“偏求和”的一种。

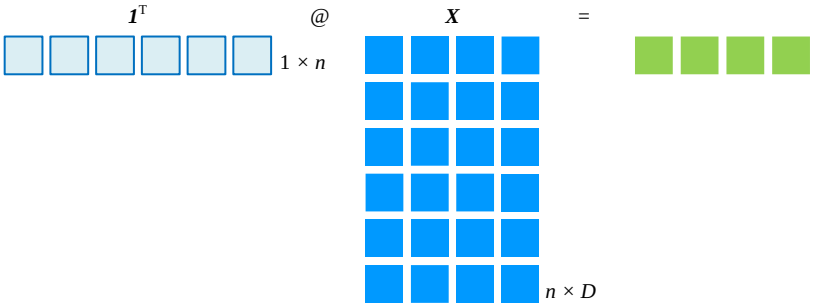


图 9. 列方向求和

(21) 左右除以 n，便得到每一列元素均值构成的行向量 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$：

$$\mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\right)=\frac{\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}}{n}=\begin{bmatrix}\frac{\sum_{i=1}^{n}x_{i,1}}{n} & \frac{\sum_{i=1}^{n}x_{i,2}}{n} & \cdots & \frac{\sum_{i=1}^{n}x_{i,D}}{n}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_D\end{bmatrix} \tag{22}$$

$\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 常被称作数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的**质心** (centroid)。我们也常用 $\boldsymbol{\mu_X}$ 表达质心。$\boldsymbol{\mu_X}$ 为列向量，是行向量 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 的转置：

$$\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}} = \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\right)^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_D \end{bmatrix} = \frac{\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{n} \tag{23}$$

⚠ 注意，本系列丛书定义 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 为行向量。而 $\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}$ 为列向量，$\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}$ 和 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 就差在转置上。$\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 一般常配合原始数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 一起出现，比如利用广播原则去均值。而 $\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}$ 多用在分布相关运算中，比如多元高斯分布。

去均值

上一节提到，全 1 列向量有复制的功能。很多应用场合需要将 (22) 复制 n 份，得到一个和原矩阵形状相同的矩阵。下式可以完成这个计算：

$$\boldsymbol{1}_{n\times 1} \circledcirc \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\right)_{1\times D} = \frac{\boldsymbol{1}_{n\times 1}\boldsymbol{1}_{n\times 1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}}{n} = \begin{bmatrix} \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_D \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_D \end{bmatrix}_{n\times D} \tag{24}$$

上式结果和数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 形状一致，都是 $n \times D$。其中，$\boldsymbol{1}_{n\times 1}\boldsymbol{1}_{n\times 1}^{\mathrm{T}}$ 相当于向量张量积 $\boldsymbol{1}_{n\times 1} \otimes \boldsymbol{1}_{n\times 1}$，结果为 $n \times n$ 全 1 方阵。利用向量张量积，(24) 可以写成：

$$\boldsymbol{1}_{n\times 1} \circledcirc \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\right)_{1\times D} = \frac{\boldsymbol{1}_{n\times 1} \otimes \boldsymbol{1}_{n\times 1}}{n}\boldsymbol{X} \tag{25}$$

上式相当于是 $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{1}$ 正交投影，这是本书第 10 章要探讨的内容。

对 $\boldsymbol{X}$ **去均值** (demean 或 centralize) 就是 $\boldsymbol{X}$ 的每个元素减去 $\boldsymbol{X}$ 对应列方向数据均值，即 $\boldsymbol{X}$ 减去 (24) 得到去均值数据矩阵 $\boldsymbol{X}_c$：

$$\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{X} - \frac{\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}}{n} = \begin{bmatrix} x_{1,1}-\mu_1 & x_{1,2}-\mu_2 & \cdots & x_{1,D}-\mu_D \\ x_{2,1}-\mu_1 & x_{2,2}-\mu_2 & \cdots & x_{2,D}-\mu_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n,1}-\mu_1 & x_{n,2}-\mu_2 & \cdots & x_{n,D}-\mu_D \end{bmatrix}_{n\times D} \tag{26}$$

上式可以整理为：

$$\boldsymbol{X} - \frac{\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}}{n} = \boldsymbol{I}\boldsymbol{X} - \frac{\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}}{n} = \left(\boldsymbol{I} - \frac{\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}}{n}\right)\boldsymbol{X} \tag{27}$$

其中，$\boldsymbol{I}$ 是单位矩阵，对角线元素都是 1，其余为 0。上式 $\boldsymbol{I}$ 形状为 $n \times n$。

有关去均值运算，本书第 22 章还要深入这一话题。

如图 10 所示，从几何视角来看，去均值相当于将数据的质心平移到原点。为了方便，我们一般利用广播原则计算去均值矩阵 $\boldsymbol{X}_c$，即 $\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X})$。

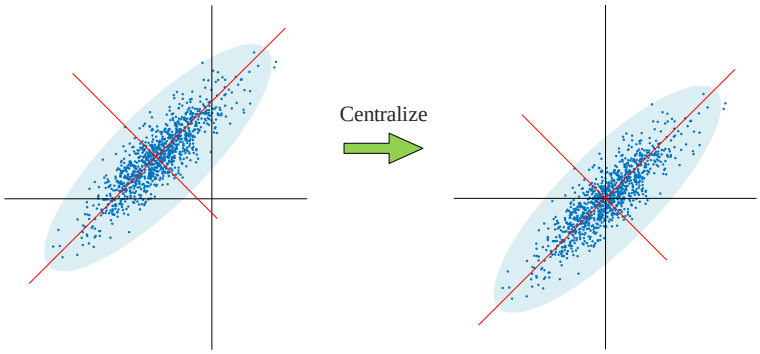


图 10. 去均值的几何视角

用张量积 $\boldsymbol{1} \otimes \boldsymbol{1}$，(26) 可以写成：

$$\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{X} - \frac{\boldsymbol{1} \otimes \boldsymbol{1}}{n} \boldsymbol{X} \tag{28}$$

前文提到，张量积 $\boldsymbol{1} \otimes \boldsymbol{1}$ 是个 $n \times n$ 方阵，矩阵的元素都是 1。张量积 $\boldsymbol{1} \otimes \boldsymbol{1}$ 再除以 n 得到的方阵每个元素都是 $1/n$。

每行元素求和

如图 11 所示，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 乘全 1 列向量 $\boldsymbol{1}$，相当于对 $\boldsymbol{X}$ 每一行元素求和，结果为列向量：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D}\boldsymbol{1}_{D\times 1} = \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,D} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n,1} & x_{n,2} & \cdots & x_{n,D} \end{bmatrix}_{n\times D} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}_{D\times 1} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{D} x_{1,j} \\ \sum_{j=1}^{D} x_{2,j} \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^{D} x_{n,j} \end{bmatrix}_{n\times 1} \tag{29}$$

⚠ 注意，(22) 和 (29) 两式中的全 $\boldsymbol{1}$ 向量长度不同。(29) 中全 1 列向量 $\boldsymbol{1}$ 形状为 $D \times 1$。

而 (29) 除以 D 结果是 $\boldsymbol{X}$ 每行元素平均值，即：

$$\frac{\boldsymbol{X}_{n\times D}\boldsymbol{1}_{D\times 1}}{D}=\begin{bmatrix}\sum_{j=1}^{D}x_{1,j}\Big/D\\ \sum_{j=1}^{D}x_{2,j}\Big/D\\ \vdots\\ \sum_{j=1}^{D}x_{n,j}\Big/D\end{bmatrix}_{n\times 1} \tag{30}$$

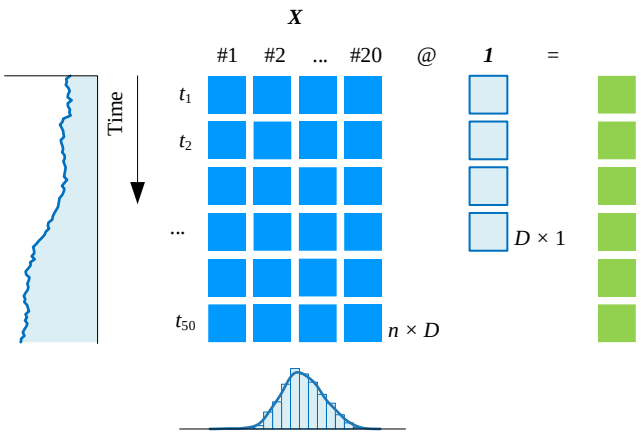


图 11. 行方向求和

大家可能会好奇，数据矩阵的列均值、行均值有怎样的应用场景？

举个例子，假设图 11 中数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 为某个班级 20 名学生一个学期不同时间 t 连续 50 次数学测验成绩。每一列的均值代表的是某个学生的平均成绩，每一行的均值则代表一个班级在某次数学测验的整体表现。采用直方图分析列均值，我们可以得到该学期学生平均成绩的分布。采用线图分析行均值，我们可以得到班级学生平均成绩随时间变化趋势。

所有元素的和

图 12 所示，数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 分别左乘 $\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}$、右乘全 $\boldsymbol{1}$ 向量，结果为 $\boldsymbol{X}$ 所有元素求和：

$$\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{1}=\begin{bmatrix}\sum_{i=1}^{n}x_{i,1} & \sum_{i=1}^{n}x_{i,2} & \cdots & \sum_{i=1}^{n}x_{i,D}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix}=\sum_{j=1}^{D}\sum_{i=1}^{n}x_{i,j} \tag{31}$$

上式结果除以 nD，得到的是整个数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 所有元素的均值。

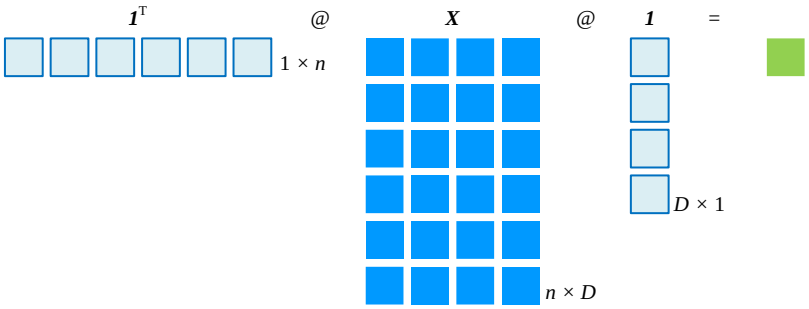


图 12. 矩阵所有元素求和

⚠ 注意，上式中两个全 $\boldsymbol{1}$ 列向量长度也不同，具体形状如图 12 所示。再强调一点，希望大家在看到代数式时，要联想可能的线性代数运算式。本章后续还会继续给出更多示例，以便强化代数和线性代数的联系。

5.4 矩阵乘向量：线性方程组

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为 n 行、D 列：

$$\boldsymbol{A}_{n\times D}=\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,D} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,D} \end{bmatrix} \tag{32}$$

$\boldsymbol{x}$ 为 D 个未知量 x_1、x_1 … x_D 构成的列向量，$\boldsymbol{b}$ 为 n 个常数 b_1、b_1 … b_n 构成的列向量：

$$\boldsymbol{x}_{D\times 1}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_D \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}_{n\times 1}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \tag{33}$$

如图 13 所示，$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 可以写成：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,D} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,D} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}_{n\times D}}\underbrace{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{x}_{D\times 1}}=\underbrace{\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{b}_{n\times 1}} \tag{34}$$

(34) 展开得到**线性方程组** (system of linear equations)：

$$\begin{cases} a_{1,1}x_1+a_{1,2}x_2+\cdots+a_{1,D}x_D=b_1 \\ a_{2,1}x_1+a_{2,2}x_2+\cdots+a_{2,D}x_D=b_2 \\ \vdots \\ a_{n,1}x_1+a_{n,2}x_2+\cdots+a_{n,D}x_D=b_n \end{cases} \tag{35}$$

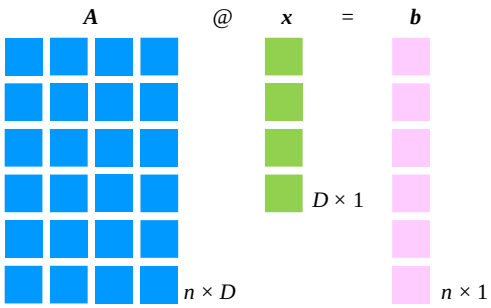


图 13. 长方阵乘列向量

解的个数

若 (34) 有唯一一组解，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可逆，即：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b} \tag{36}$$

此时称 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 为恰定方程组。

有无穷多解的方程组被称作**欠定方程组** (underdetermined system)。

解不存在的方程组被称作**超定方程组** (overdetermined system)。

特别地，如果 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 可逆，$\boldsymbol{x}$ 可以通过下式求解：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{x}=\underbrace{\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\right)^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}}_{\boldsymbol{A}^{+}}\boldsymbol{b} \tag{37}$$

$\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\right)^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 常被称作**广义逆** (generalized inverse)，或**伪逆** (pseudoinverse)。

注意，如果 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 非满秩，则 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 不可逆。这种情况，我们就需要**摩尔-彭若斯广义逆** (Moore–Penrose inverse)。函数 numpy.linalg.pinv() 计算摩尔-彭若斯广义逆。这个函数用的实际上是奇异值分解获得的摩尔-彭若斯广义逆。本书第 15、16 章将讲解奇异值分解。

本系列丛书《数学要素》一册介绍过最小二乘法 (ordinary least squares, OLS) 和广义逆之间的关系。本系列丛书《概率统计》和《数据科学》两册还会深入讲解最小二乘法回归。

线性代数本身具有“代数”属性，这也就是为什么很多教材以求解 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 为起点讲解线性代数。而本书则试图跳出“代数”的桎梏，从向量、几何、空间、数据等视角理解 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$。

线性组合视角

下面用另外一个视角看 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$。

本书前文反复提到，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可以看做由一组列向量构造而成：

$$\boldsymbol{A}_{n\times D}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \cdots & \boldsymbol{a}_D\end{bmatrix} \tag{38}$$

如图 14 所示，(34) 可以写成：

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \cdots & \boldsymbol{a}_D\end{bmatrix}_{1\times D}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\x_D\end{bmatrix}_{D\times 1}=\boldsymbol{b}_{n\times 1} \tag{39}$$

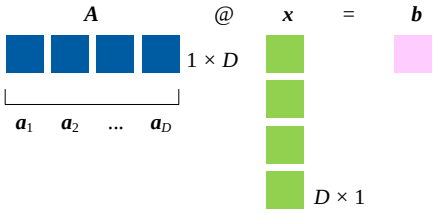


图 14. 线性组合视角看线性方程组

展开 (39) 得到：

$$x_1\boldsymbol{a}_1+x_2\boldsymbol{a}_2+\cdots+x_D\boldsymbol{a}_D=\boldsymbol{b}_{n\times 1} \tag{40}$$

即，

$$x_1\underbrace{\begin{bmatrix}a_{1,1}\\a_{2,1}\\\vdots\\a_{n,1}\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{a}_1}+x_2\underbrace{\begin{bmatrix}a_{1,2}\\a_{2,2}\\\vdots\\a_{n,2}\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{a}_2}+\cdots+x_D\underbrace{\begin{bmatrix}a_{1,D}\\a_{2,D}\\\vdots\\a_{n,D}\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{a}_D}=\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\\vdots\\b_n\end{bmatrix} \tag{41}$$

当 x_1、$x_1 \ldots x_D$ 取具体值时，上式代表**线性组合** (linear combination)。用腊八粥举个例子，上式相当于不同比例的原料混合，x_i 就是比例，$\boldsymbol{a}_i$ 就是不同的原料。而 $\boldsymbol{b}$ 就是混合得到的八宝粥。

线性组合这个概念非常重要，本书第 7 章将专门介绍。

映射视角

如图 15 所示，从**线性映射** (linear mapping) 角度来看，(34) 代表从 $\mathbb{R}^D$ 空间到 $\mathbb{R}^n$ 空间的某种特定映射。列向量 $\boldsymbol{x}_{D\times 1}$ 在 $\mathbb{R}^D$ 中，而列向量 $\boldsymbol{b}_{n\times 1}$ 在 $\mathbb{R}^n$ 中。当且仅当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可逆，可以完成从 $\mathbb{R}^n$ 空间到 $\mathbb{R}^D$ 空间的映射。这种情况下，$n = D$，也就是两个空间相同，我们管这种线性映射叫**线性变换** (linear transformation)。

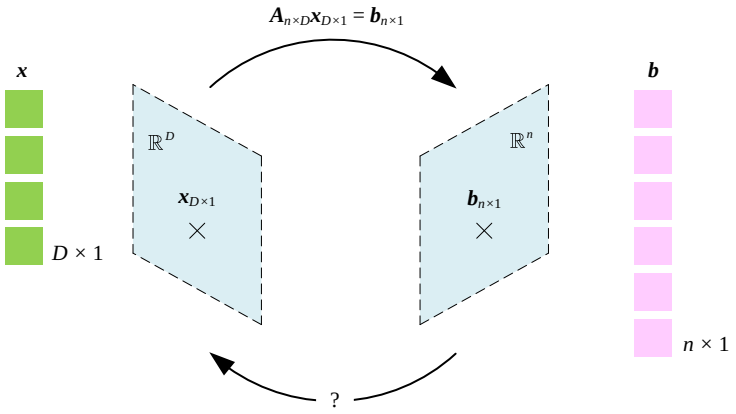


图 15. 线性映射

几何视角

如果 2 维向量 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2]^T$ 的模为 1，$\boldsymbol{x}$ 的起点位于原点，终点则位于单位圆上。给定如下矩阵 $\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{R}$：

$$\boldsymbol{S} = \begin{bmatrix} 2 & \\ & 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \tag{42}$$

利用矩阵乘法，$\boldsymbol{x}$ 分别经过 $\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{R}$ ($\boldsymbol{A} = \boldsymbol{RS}$) 映射得到 $\boldsymbol{y}$：

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{RSx} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{R}} \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & \\ & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{S}} \boldsymbol{x} \tag{43}$$

如图 16 所示，(43) 代表“缩放 → 旋转”。请大家注意几何变换的先后顺序，缩放 ($\boldsymbol{S}$) 先作用于 $\boldsymbol{x}$，对应矩阵乘法 $\boldsymbol{Sx}$；然后，旋转 ($\boldsymbol{R}$)再作用于 $\boldsymbol{Sx}$，得到 $\boldsymbol{RSx}$。准确来说，图 16 中的这两种几何变换叫做线性变换，这是本书第 8 章要探讨的话题。

也就是说，矩阵连乘代表一系列有先后顺序的几何变换。此外，以上分析还告诉我们矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可以分解为 $\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{R}$ 相乘，用到的数学工具就是第 11 章要讲的矩阵分解。

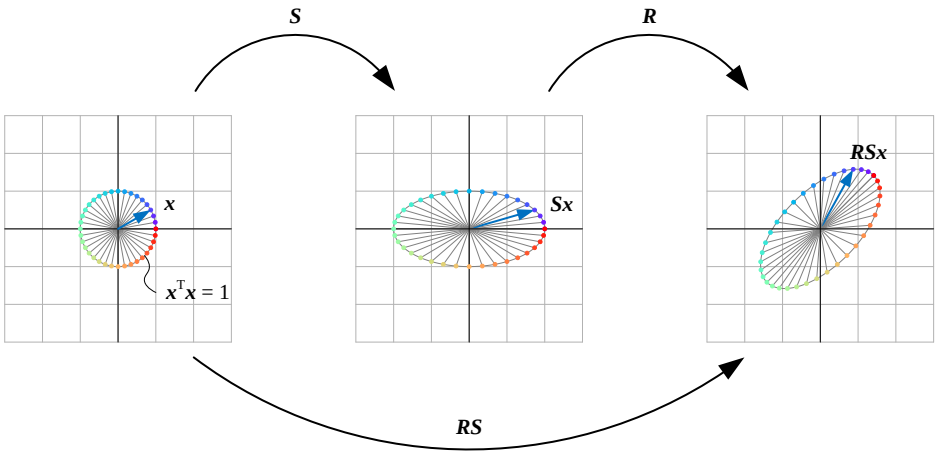


图 16. 几何变换视角

向量模

凡是向量就有自己的长度，即向量模、L^2 范数。$\boldsymbol{b}_{n\times 1}$ 的向量模、L^2 范数为：

$$\|\boldsymbol{b}\| = \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\| \tag{44}$$

注意，$\boldsymbol{b}$ 的模是标量。

利用矩阵乘法，上式可以写成：

$$\|\boldsymbol{b}\| = \sqrt{\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}} = \sqrt{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}} \tag{45}$$

$\boldsymbol{b}$ 的模的平方则为：

$$\|\boldsymbol{b}\|_2^2 = \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \tag{46}$$

$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 这种矩阵乘法的结果为非负标量，其中 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 叫做 $\boldsymbol{A}$ 的格拉姆矩阵。$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 就是下一节要介绍的二次型。

举个例子，如果向量 $\boldsymbol{x}$ 的模为 1，平面上向量 $\boldsymbol{x}$ 的终点在单位圆上。如图 17 所示，经过如下 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的线性映射得到的向量 $\boldsymbol{b}$ 终点在旋转椭圆上：

$$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1.25 & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}} \boldsymbol{x} \tag{47}$$

而矩阵 $\boldsymbol{A}$ 恰好可逆，通过如下运算，我们把旋转椭圆变换成单位圆：

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1.25 & 0.75 \\ 0.75 & 1.25 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}^{-1}} \boldsymbol{x} \tag{48}$$

大家可能会好奇，该如何计算旋转椭圆的半长轴、半短轴的长度，以及长轴旋转角度等信息？本书第 14 章将给出答案。

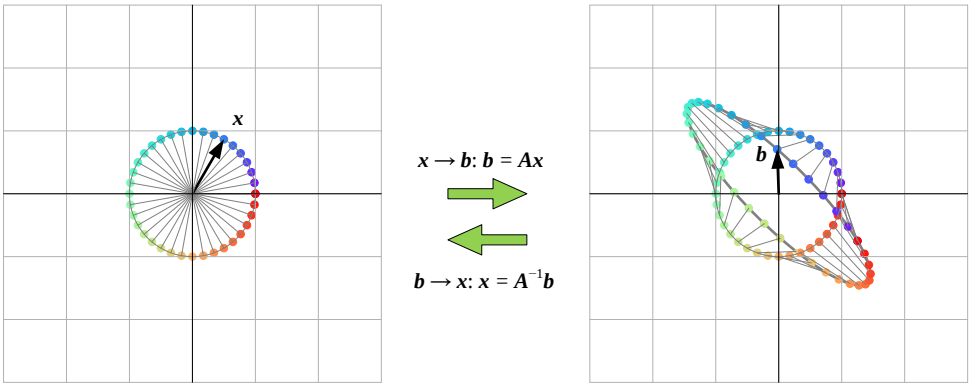


图 17. 单位圆到旋转椭圆

5.5 向量乘矩阵乘向量：二次型

二次型 (quadratic form) 的矩阵算式为：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} = q \tag{49}$$

其中，$\boldsymbol{Q}$ 为对称阵，q 为实数。$\boldsymbol{Q}$ 和 $\boldsymbol{x}$ 分别为：

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_D \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{Q} = \begin{bmatrix} q_{1,1} & q_{1,2} & \cdots & q_{1,D} \\ q_{2,1} & q_{2,2} & \cdots & q_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{D,1} & q_{D,2} & \cdots & q_{D,D} \end{bmatrix} \tag{50}$$

(49) 对应的矩阵运算过程如图 18 所示。

$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}$ 像极了 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$，也就是说 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}$ 类似 $\|\boldsymbol{x}\|_2^2$，结果都是“标量”。几何角度，$\|\boldsymbol{x}\|_2^2$ 代表向量 $\boldsymbol{x}$ 长度的平方，$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}$ 似乎也代表着某种“距离的平方”，本书后续将会专门介绍。

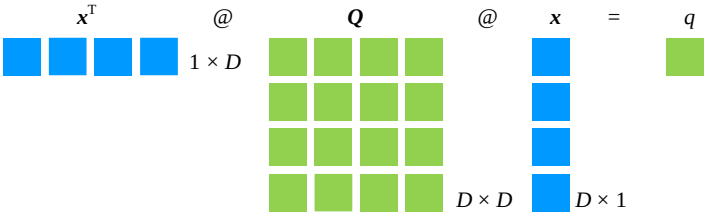


图 18. $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} = q$ 矩阵运算

将 (50) 代入 (49)，展开得到：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{D} q_{i,i}x_i^2 + \sum_{i=1}^{D}\sum_{j=1}^{D} q_{i,j}x_i x_j = q, \quad i \neq j \tag{51}$$

观察上式，发现单项式变量的最高次数为 2，这就是为什么 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}$ 叫二次型的原因。

举个例子

比如 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{Q}$ 分别为：

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{Q}=\begin{bmatrix}a & b\\c & d\end{bmatrix} \tag{52}$$

代入 (49) 得到：

$$\begin{bmatrix}x_1 & x_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a & b\\c & d\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=ax_1^2+(b+c)x_1x_2+dx_2^2=q \tag{53}$$

可以发现，(53) 对应本系列丛书中《数学要素》介绍过各种二次曲线，比如正圆、椭圆、抛物线或双曲线，具体如图 19 所示。

本书第 20 章还要用线性代数工具深入探讨这些圆锥曲线。

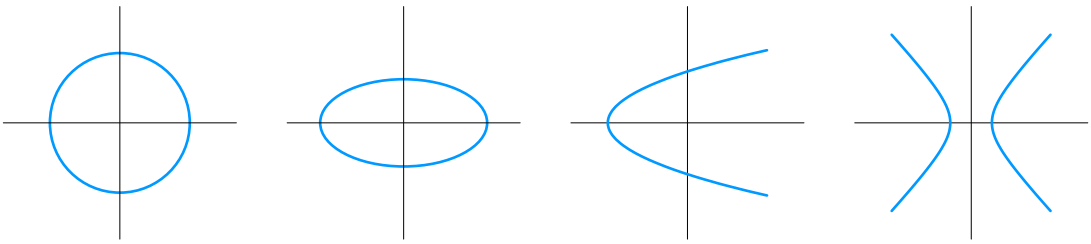


图 19. 四种二次曲线

将 (53) 写成二元函数形式 $f(x_1, x_2)$：

$$f(x_1,x_2)=\begin{bmatrix}x_1 & x_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a & b\\c & d\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=ax_1^2+(b+c)x_1x_2+dx_2^2 \tag{54}$$

(54) 对应着如图 20 所示的几种曲面。而 $f(x_1, x_2) = q$，相当于曲面某个高度的等高线。

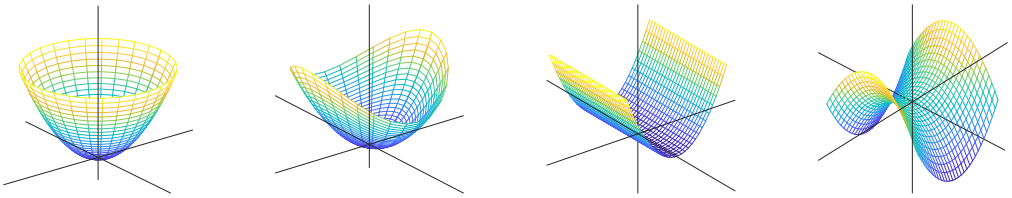


图 20. 常见二次型曲面

本书第 21 章将探讨图 20 这些曲面和正定性、极值之间的联系。

高斯分布

二次型的应用无处不在。举个例子，二元正态分布的概率密度函数解析式如下：

$$f_{X1,X2}(x_1,x_2)=\frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2\sqrt{1-\rho_{1,2}^2}}\times\exp\left(\frac{-1}{2}\left(\overbrace{\frac{1}{\left(1-\rho_{1,2}^2\right)}\left(\left(\frac{x_1-\mu_1}{\sigma_1}\right)^2-2\rho_{1,2}\left(\frac{x_1-\mu_1}{\sigma_1}\right)\left(\frac{x_2-\mu_2}{\sigma_2}\right)+\left(\frac{x_2-\mu_2}{\sigma_2}\right)^2\right)}^{\text{Ellipse}}\right)\right) \tag{55}$$

大家应该记得我们在本系列丛书《数学要素》第 9 章介绍过这种形式椭圆。

而多元正态分布的概率密度函数为：

$$f_{\chi}(\boldsymbol{x})=\frac{\exp\left(-\frac{1}{2}\overbrace{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})}^{\text{Ellipse}}\right)}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} \tag{56}$$

分子中已经明显看到类似 (49) 的矩阵乘法。本书第 20 章会继续这一话题。

比较上两式，大家也应该清楚，为什么进入多元领域，比如多元微积分、多元概率统计，我们便离不开线性代数。二元正态分布的概率密度函数解析式已经如此复杂，更不用说三元、四元，乃至 D 元。

三个方阵连乘

我们再看另外矩阵乘法一种形式，具体如下：

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V} \tag{57}$$

其中，$\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 都是 $D\times D$ 方阵，上式结果也是 $D\times D$ 方阵。特别地，实际应用中 $\boldsymbol{V}$ 多为正交矩阵，即为 $\boldsymbol{V}$ 方阵且满足 $\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}$。

将 $\boldsymbol{V}$ 写成 $\boldsymbol{V}=[\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,..,\boldsymbol{v}_D]$，展开 (57) 得到：

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_D\\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_D\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_D\end{bmatrix} \tag{58}$$

结果中，矩阵 (i, j) 元素 $\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_j$ 便是一个二次型，$\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_j$ 对应的运算示意图如图 21 所示。这说明，上式包含了 $D\times D$ 个二次型。

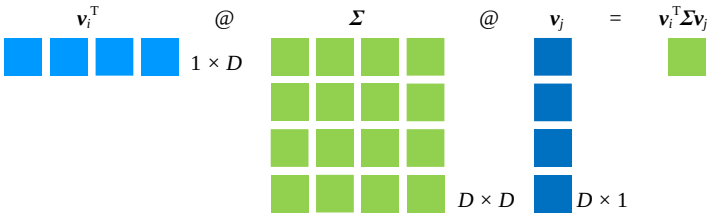


图 21. $\boldsymbol{v}_i^T\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_j$矩阵运算

二次型在多元微积分、正定性、多元正态分布、协方差矩阵、数据映射和优化方法中都有举足轻重的分量。本书后续将会深入探讨。

5.6 方阵乘方阵：矩阵分解

和方阵有关的矩阵乘法中，方阵乘方阵最为简单。图 22 所示两种方阵乘法常见于 LU 分解、Cholesky 分解、特征值分解等场合。

本节不展开讲解矩阵分解，本书第 11 ~ 16 章将专门介绍不同类别矩阵分解。

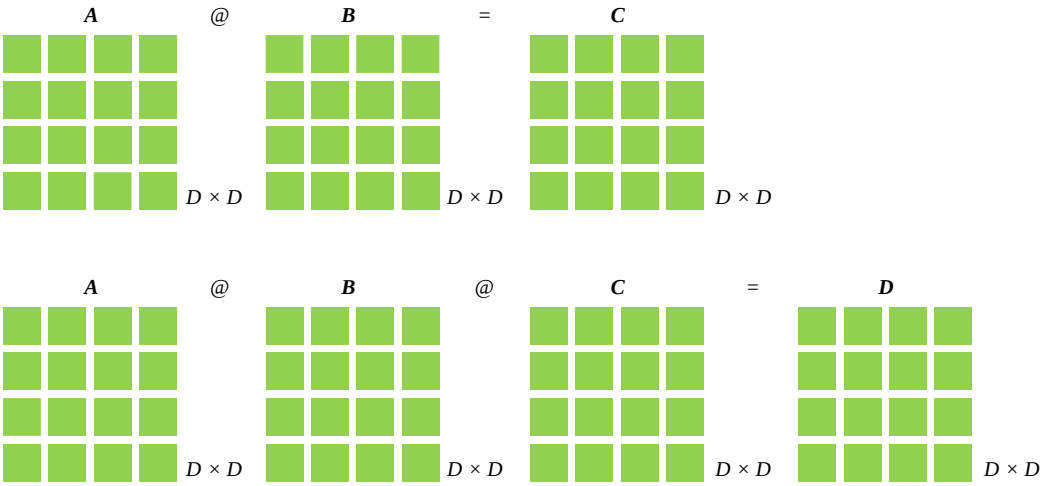


图 22. 方阵乘方阵

特别地，方阵 $\boldsymbol{A}$ 如果满足：

$$\boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{A} \tag{59}$$

则称 $\boldsymbol{A}$ 为**幂等矩阵** (idempotent matrix)。

我们会在本书统计部分和最小二乘法线性回归中再谈及幂等矩阵。此外，丛书每册均有涉及线性回归这个话题，本书采用的是线性代数和向量几何视角，《概率统计》则利用统计视角理解线性回归，而《数据科学》则是从数据分析视角介绍如何应用这个模型。

5.7 对角阵：批量缩放

如果形状相同的方阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 都为对角阵，两者乘积还是一个对角阵：

$$\boldsymbol{A}_{D\times D}\boldsymbol{B}_{D\times D}=\begin{bmatrix}a_1 & & & \\ & a_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_D\end{bmatrix}\begin{bmatrix}b_1 & & & \\ & b_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & b_D\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a_1b_1 & & & \\ & a_2b_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_Db_D\end{bmatrix} \tag{60}$$

对角阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的逆也是一个对角阵：

$$\boldsymbol{\Lambda}_{D\times D}\left(\boldsymbol{\Lambda}_{D\times D}\right)^{-1}=\begin{bmatrix}\lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1/\lambda_1 & & & \\ & 1/\lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1/\lambda_D\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1\end{bmatrix}=\boldsymbol{I}_{D\times D} \tag{61}$$

其中，$\lambda_j \neq 0$。注意，本书中经常采用 $\boldsymbol{\Lambda}$ (capital lambda) 和 $\boldsymbol{S}$ 代表对角阵。

右乘

矩阵 $\boldsymbol{X}$ 乘 $D \times D$ 对角方阵 $\boldsymbol{\Lambda}$：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{X}_{n\times D}\boldsymbol{\Lambda}_{D\times D}&=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_D\end{bmatrix}\\&=\begin{bmatrix}\lambda_1\boldsymbol{x}_1 & \lambda_2\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \lambda_D\boldsymbol{x}_D\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{62}$$

观察 (62) 发现，$\boldsymbol{\Lambda}$ 的对角线元素相当于缩放系数，分别对矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的每一列数值进行不同比例缩放。

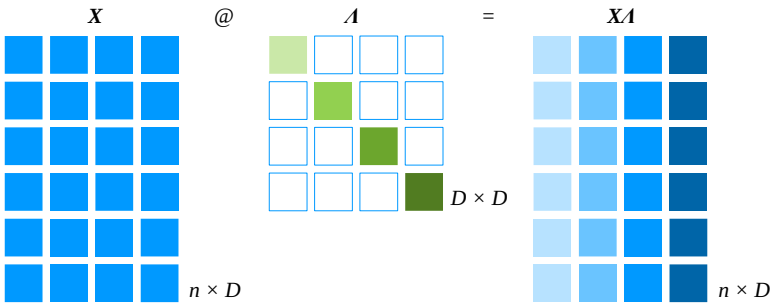


图 23. $\boldsymbol{X}$ 乘对角方阵 $\boldsymbol{\Lambda}$

左乘

$n \times n$ 对角阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 左乘矩阵 $\boldsymbol{X}$:

$$\boldsymbol{\Lambda}_{n\times n}\boldsymbol{X}_{n\times D} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}_{n\times n} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)} \\ \boldsymbol{x}^{(2)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}^{(n)} \end{bmatrix}_{n\times 1} = \begin{bmatrix} \lambda_1 \boldsymbol{x}^{(1)} \\ \lambda_2 \boldsymbol{x}^{(2)} \\ \vdots \\ \lambda_n \boldsymbol{x}^{(n)} \end{bmatrix}_{n\times 1} \tag{63}$$

观察 (63)，可以发现 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的对角线元素分别对矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的每一行数值进行批量缩放。

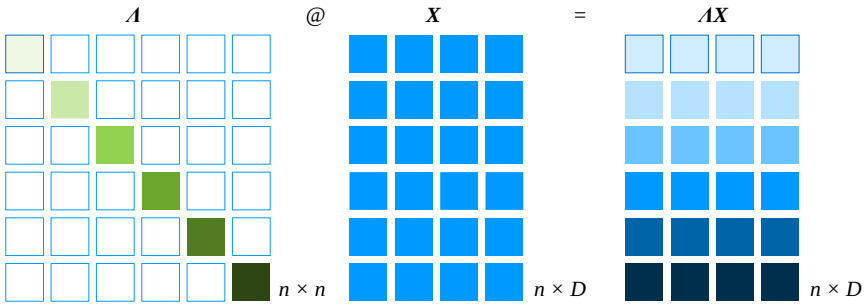


图 24. 对角阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 乘方阵 $\boldsymbol{X}$

乘行向量

特别地，行向量 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 乘 $D \times D$ 对角阵 $\boldsymbol{\Lambda}$，相当于对行向量每个元素以不同比例分别缩放:

$$\boldsymbol{x}^{(1)}\boldsymbol{\Lambda}_{D\times D} = \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_D \end{bmatrix}_{D\times D} = \begin{bmatrix} \lambda_1 x_{1,1} & \lambda_2 x_{1,2} & \cdots & \lambda_D x_{1,D} \end{bmatrix} \tag{64}$$

乘列向量

类似地，$n \times n$ 对角阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 乘列向量 $\boldsymbol{x}$，相当于对列向量每个元素以不同比例分别缩放：

$$\boldsymbol{\Lambda}_{n\times n}\boldsymbol{x}_{n\times 1}=\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n\end{bmatrix}_{n\times n}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ \vdots\\ x_n\end{bmatrix}_{n\times 1}=\begin{bmatrix}\lambda_1 x_1\\ \lambda_2 x_2\\ \vdots\\ \lambda_n x_n\end{bmatrix}_{n\times 1} \tag{65}$$

左右都乘

再看下例，$D \times D$ 对角方阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 分别左乘、右乘 $D \times D$ 方阵 $\boldsymbol{B}$：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Lambda B \Lambda}&=\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_D\end{bmatrix}\begin{bmatrix}b_{1,1} & b_{1,2} & \cdots & b_{1,D}\\ b_{2,1} & b_{2,2} & \cdots & b_{2,D}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ b_{D,1} & b_{D,2} & \cdots & b_{D,D}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_D\end{bmatrix}\\ &=\begin{bmatrix}\lambda_1\lambda_1 b_{1,1} & \lambda_1\lambda_2 b_{1,2} & \cdots & \lambda_1\lambda_D b_{1,D}\\ \lambda_2\lambda_1 b_{2,1} & \lambda_2\lambda_2 b_{2,2} & \cdots & \lambda_2\lambda_D b_{2,D}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \lambda_D\lambda_1 b_{D,1} & \lambda_D\lambda_2 b_{D,2} & \cdots & \lambda_D\lambda_D b_{D,D}\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{66}$$

看到 (66) 结果形式，大家是否想到了协方差矩阵。λ_i 相当于均方差，$b_{i,j}$ 相当于相关性系数。

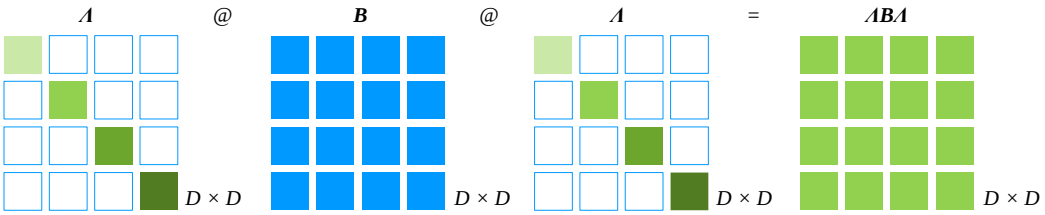


图 25. 对角阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 分别左乘、右乘方阵 $\boldsymbol{B}$

二次型特例

再看一个二次型的特例：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Lambda}_{D\times D}\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ \vdots\\ x_D\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_D\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ \vdots\\ x_D\end{bmatrix}=\lambda_1 x_1^2+\lambda_2 x_2^2+\cdots+\lambda_D x_D^2=\sum_{j=1}^{D}\lambda_j x_j^2 \tag{67}$$

图 26 所示为上述运算的示意图。

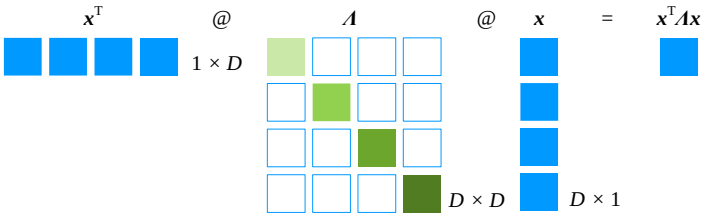


图 26. $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{x}$ 对应的矩阵运算

几何视角

看到类似 (67) 形式运算，希望大家能联想到正椭圆、正椭球、正椭圆抛物面。比如，如果 $\lambda_1 > \lambda_2 > 0$，且 $k > 0$，下式对应正椭圆：

$$\begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = k \tag{68}$$

这个椭圆的半长轴长度为 $\sqrt{k/\lambda_2}$，半短轴长度为 $\sqrt{k/\lambda_1}$。

举个例子，下式对应的正椭圆半长轴长度为 2，半短轴长度为 1：

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1/4 & \\ & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{4}x_1^2 + x_2^2 = 1 \tag{69}$$

再次强调，如果在矩阵运算时遇到对角阵，请试着从几何体缩放角度来看。

5.8 置换矩阵：调换元素顺序

行向量 $\boldsymbol{a}$ 乘副对角矩阵，如果副对角线上元素都为 1，得到左右翻转的行向量：

$$\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_D \end{bmatrix}_{1\times D} \begin{bmatrix} & & & 1 \\ & & 1 & \\ & \iddots & & \\ 1 & & & \end{bmatrix}_{D\times D} = \begin{bmatrix} a_D & a_{D-1} & \cdots & a_1 \end{bmatrix} \tag{70}$$

实际上，(70) 中完成左右翻转的方阵是**置换矩阵** (permutation matrix) 的一种特殊形式。

置换矩阵是由 0 和 1 组成的方阵。置换矩阵的每一行、每一列都恰好只有一个 1，其余元素均为 0。置换矩阵的作用是调换元素顺序。

举个例子：

$$\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & a_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} & 1 & & \\ & & & 1 \\ 1 & & & \\ & & 1 & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_3 & a_1 & a_4 & a_2 \end{bmatrix} \tag{71}$$

调整列向量顺序

置换矩阵同样可以作用于矩阵，将 (71) 中行向量元素替换成列向量，即，

$$\boldsymbol{a}_1 = \begin{bmatrix} a_{1,1} \\ a_{2,1} \\ a_{3,1} \\ a_{4,1} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{a}_2 = \begin{bmatrix} a_{1,2} \\ a_{2,2} \\ a_{3,2} \\ a_{4,2} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{a}_3 = \begin{bmatrix} a_{1,3} \\ a_{2,3} \\ a_{3,3} \\ a_{4,3} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{a}_4 = \begin{bmatrix} a_{1,4} \\ a_{2,4} \\ a_{3,4} \\ a_{4,4} \end{bmatrix} \tag{72}$$

可以得到：

$$\begin{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{1,1} \\ a_{2,1} \\ a_{3,1} \\ a_{4,1} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} a_{1,2} \\ a_{2,2} \\ a_{3,2} \\ a_{4,2} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} a_{1,3} \\ a_{2,3} \\ a_{3,3} \\ a_{4,3} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} a_{1,4} \\ a_{2,4} \\ a_{3,4} \\ a_{4,4} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} & 1 & & \\ & & & 1 \\ 1 & & & \\ & & 1 & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{1,3} \\ a_{2,3} \\ a_{3,3} \\ a_{4,3} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} a_{1,1} \\ a_{2,1} \\ a_{3,1} \\ a_{4,1} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} a_{1,4} \\ a_{2,4} \\ a_{3,4} \\ a_{4,4} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} a_{1,2} \\ a_{2,2} \\ a_{3,2} \\ a_{4,2} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \tag{73}$$

大家看到置换矩阵右乘矩阵 $\boldsymbol{A}$，让 $\boldsymbol{A}$ 的列向量顺序改变。

调整行向量顺序

这个置换矩阵左乘矩阵 $\boldsymbol{A}$，可以改变 $\boldsymbol{A}$ 的行向量的排序：

$$\begin{bmatrix} & 1 & & \\ & & & 1 \\ 1 & & & \\ & & 1 & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}^{(1)} \\ \boldsymbol{a}^{(2)} \\ \boldsymbol{a}^{(3)} \\ \boldsymbol{a}^{(4)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}^{(2)} \\ \boldsymbol{a}^{(4)} \\ \boldsymbol{a}^{(1)} \\ \boldsymbol{a}^{(3)} \end{bmatrix} \tag{74}$$

置换矩阵可以用来简化一些矩阵运算。

5.9 矩阵乘向量：映射到一维

前文提到过，任何矩阵乘法都可以从**线性映射** (linear mapping) 角度理解。本节和下一节专门从几何角度聊聊线性映射。

形状为 $n \times D$ 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 乘 $D \times 1$ 列向量 $\boldsymbol{v}$ 得到 $n \times 1$ 列向量 $\boldsymbol{z}$：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D}\boldsymbol{v}_{D\times 1}=\boldsymbol{z}_{n\times 1} \tag{75}$$

如图 27 所示，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 有 D 列，对应 D 个特征。而结果 $\boldsymbol{z}$ 只有一列，也就是一个特征。类似 (41)，(75) 也可以写成“线性组合”：

$$\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}}\underbrace{\begin{bmatrix}v_1\\ v_2\\ \vdots\\ v_D\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{v}}=v_1\boldsymbol{x}_1+v_2\boldsymbol{x}_2+\cdots+v_D\boldsymbol{x}_D=\boldsymbol{z} \tag{76}$$

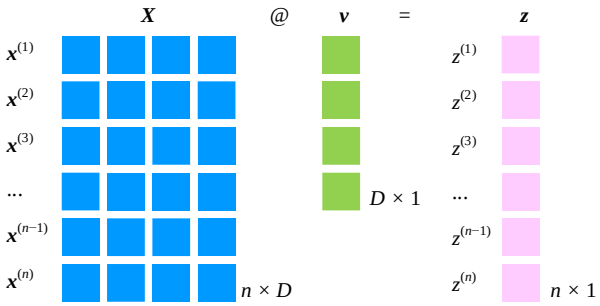


图 27. 矩阵乘法 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}=\boldsymbol{z}$

此外，$\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}=\boldsymbol{z}$ 可以展开写成：

$$\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}^{(1)}\\ \boldsymbol{x}^{(2)}\\ \vdots\\ \boldsymbol{x}^{(n)}\end{bmatrix}\boldsymbol{v}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}^{(1)}\boldsymbol{v}\\ \boldsymbol{x}^{(2)}\boldsymbol{v}\\ \vdots\\ \boldsymbol{x}^{(n)}\boldsymbol{v}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}z^{(1)}\\ z^{(2)}\\ \vdots\\ z^{(n)}\end{bmatrix} \tag{77}$$

几何视角来看，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 中任意一行 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 看做是多维坐标系的一个点，运算 $\boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{v}$ 则是点 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 在 $\boldsymbol{v}$ 方向映射，$z^{(i)}$ 则是结果在 $\boldsymbol{v}$ 上的坐标。如图 28 所示，(75) 这个矩阵乘法运算过程相当于降维。

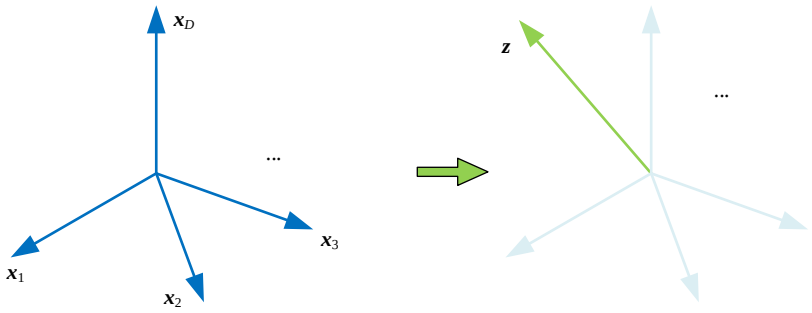


图 28. 多维到一维映射

以鸢尾花数据为例

为了方便理解，下面我们将给 $\boldsymbol{v}$ 赋予具体数值来讲解。

以鸢尾花数据为例，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的 4 列分别对应 4 个特征——花萼长度、花萼宽度、花瓣长度、花瓣宽度。$\boldsymbol{Xv} = \boldsymbol{z}$ 结果只有 1 列，相当于只有 1 个特征。

举个例子，如果 $\boldsymbol{v}$ 中第三个元素为 1，其余元素均为 0，如图 29 所示。向量乘积 $\boldsymbol{Xv}$ 的结果是从 $\boldsymbol{X}$ 中提取第 3 列 $\boldsymbol{x}_3$：

$$\boldsymbol{Xv} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{x}_3 & \boldsymbol{x}_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \boldsymbol{x}_3 \tag{78}$$

也就是说，运算结果只保留第三列花瓣长度相关数据。

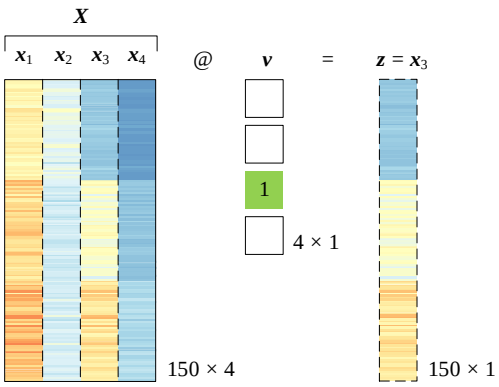


图 29. $\boldsymbol{v}$ 只有第三个元素为 1，其余均为 0

再举个例子，若我们想要计算每个样本花萼长度 ($\boldsymbol{x}_1$)、花萼宽度 ($\boldsymbol{x}_2$) 的平均值，可以通过如下运算得到：

$$\boldsymbol{Xv} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{x}_3 & \boldsymbol{x}_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{x}_2}{2} \tag{79}$$

同理，下式计算每个样本花萼长度 ($\boldsymbol{x}_1$)、花萼宽度 ($\boldsymbol{x}_2$)、花瓣长度 ($\boldsymbol{x}_3$)、花瓣宽度 ($\boldsymbol{x}_4$) 四个特征平均值：

$$\boldsymbol{Xv} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{x}_3 & \boldsymbol{x}_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{bmatrix} = \frac{\boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{x}_2 + \boldsymbol{x}_3 + \boldsymbol{x}_4}{4} \tag{80}$$

几何角度来看上式运算，(80) 相当于 4 维空间的散点，被压缩到了一条轴上，具体如图 30。图 30 中 4 维空间的散点仅仅是示意图而已。

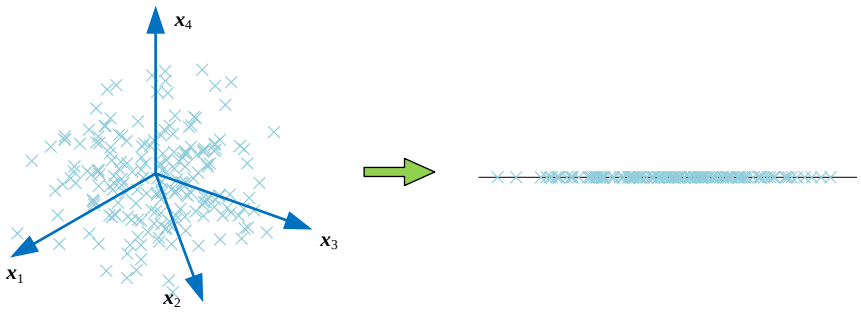


图 30. 4 维空间散点压缩到 1 维

5.10 矩阵乘矩阵：映射到多维

有了上一节内容做基础，这一节我们介绍矩阵乘法在多维映射中扮演色的角色。

两个方向映射

还是以鸢尾花数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 为例，矩阵乘法 $\boldsymbol{X}[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 代表 $\boldsymbol{X}$ 将朝着 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 两个方向映射。如果 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 的取值如图 31 所示，矩阵乘法 $\boldsymbol{X}[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 提取 $\boldsymbol{X}$ 的第 1、3 两列，并将两者顺序调换。

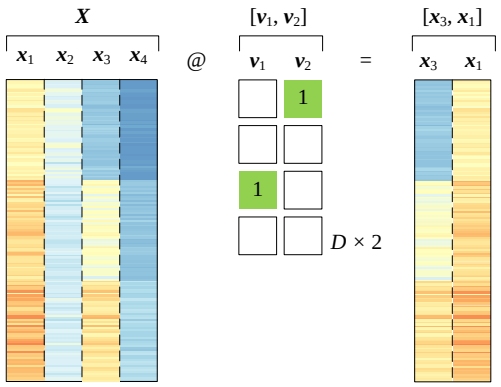


图 31. $\boldsymbol{X}$ 朝两个方向映射

想象一个由鸢尾花四个维度构造的空间 $\mathbb{R}^4$，图 31 相当于将鸢尾花数据映射在一个平面上 $\mathbb{R}^2$，得到的是平面散点图，过程如图 32 所示。

看到这里，大家是否想到了本书第 1 章的成对散点图？每幅散点图的背后实际上都有类似图 31 的矩阵乘法运算。

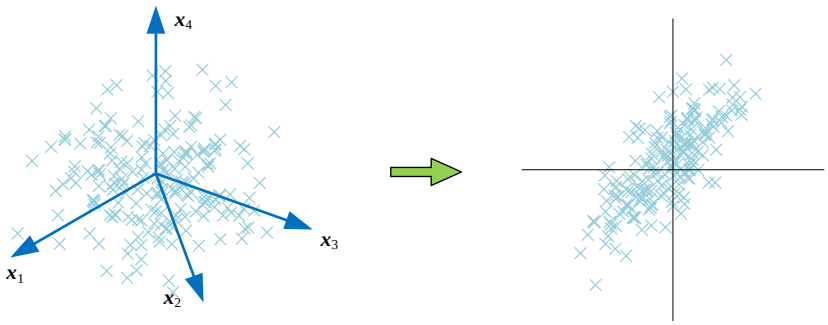


图 32. 4 维空间散点压缩到平面上

多个方向映射

矩阵 $\boldsymbol{X}$ 有 D 个维度，可以通过矩阵乘法，将 $\boldsymbol{X}$ 映射到另外一个 D 维度的空间中。

下例中，$\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$，$\boldsymbol{Z}$ 对应的每一行元素则是新坐标系的坐标值：

$$\boldsymbol{XV} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)} \\ \boldsymbol{x}^{(2)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)}\boldsymbol{v}_1 \\ \boldsymbol{x}^{(2)}\boldsymbol{v}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}^{(n)}\boldsymbol{v}_1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)}\boldsymbol{v}_2 \\ \boldsymbol{x}^{(2)}\boldsymbol{v}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}^{(n)}\boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix} & \cdots & \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)}\boldsymbol{v}_D \\ \boldsymbol{x}^{(2)}\boldsymbol{v}_D \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}^{(n)}\boldsymbol{v}_D \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \boldsymbol{Z} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{z}^{(1)} \\ \boldsymbol{z}^{(2)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{z}^{(n)} \end{bmatrix} \tag{81}$$

其中，矩阵 $\boldsymbol{V}$ 为方阵。

如果 $\boldsymbol{V}$ 可逆，$\boldsymbol{V}$ 就是 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{Z}$ 相互转化的桥梁：

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)} \\ \boldsymbol{x}^{(2)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}^{(n)} \end{bmatrix} \underset{\boldsymbol{V}^{-1}}{\overset{\boldsymbol{V}}{\rightleftharpoons}} \boldsymbol{Z} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{z}^{(1)} \\ \boldsymbol{z}^{(2)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{z}^{(n)} \end{bmatrix} \tag{82}$$

本书第 10 章还会深入讨论上式。

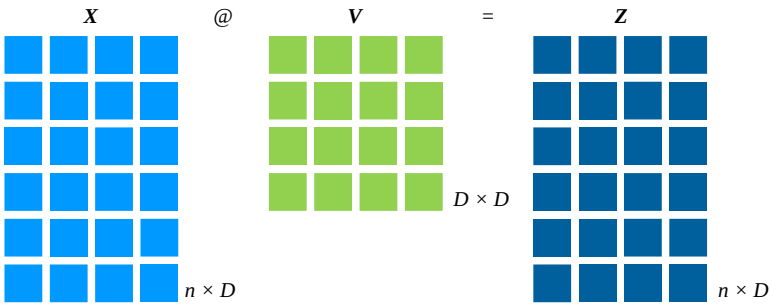


图 33. 一个 D 维度空间 $\boldsymbol{X}$ 数据映射到另一个 D 维度空间

列向量形式

大家见到如下形式时，也不用慌张。如图 34 所示，这个也是上文介绍的映射，只不过 $\boldsymbol{x}$ 为列向量：

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{z} \tag{83}$$

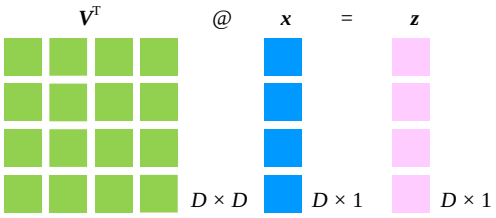


图 34. $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{z}$ 运算示意图

如图 35 所示，(83) 左右转置，便得到类似 (81) 的结构：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \tag{84}$$

约定俗成，各种线性代数工具定义偏好列向量；但是，在实际应用中，更常用行向量代表数据点。两者之间的桥梁就是——转置。

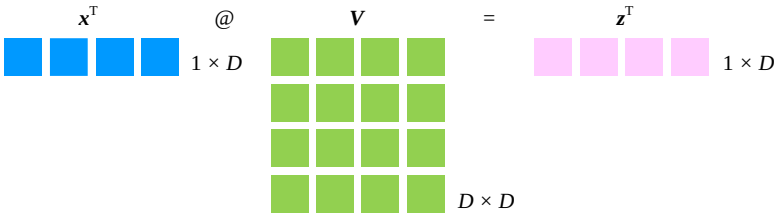


图 35. 等式 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{z}$ 左右转置

可以说，本书后续介绍的内容几乎都离不开映射，比如几何变换、正交投影、特征值分解、奇异值分解等等。

5.11 长方阵：奇异值分解、格拉姆矩阵、张量积

本节介绍和长方形矩阵有关的重要矩阵乘法。

奇异值分解

请读者格外注意图 36 所示的矩阵乘法结构。这两种形式经常出现在**奇异值分解** (singular vector decomposition, SVD) 和**主成分分析** (principal component analysis, PCA)。

⚠ 请大家注意图 36 中，D 和 p 的大小关系；不同大小关系对应着不同类型的奇异值分解。本书第 16 章将深入讲解。

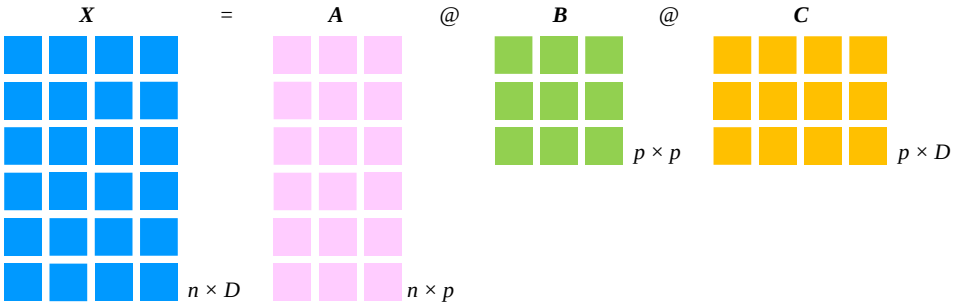


图 36. 三个矩阵相乘

格拉姆矩阵

将矩阵 $\boldsymbol{X}$ 写成一组列向量，如下：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D}=\begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,D} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n,1} & x_{n,2} & \cdots & x_{n,D} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \tag{85}$$

如图 37 所示，利用 (85)，转置 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ ($D \times n$) 乘矩阵 $\boldsymbol{X}$ ($n \times D$)，得到一个 $D \times D$ 方阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$，可以写成：

$$\boldsymbol{G}=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_D \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \tag{86}$$

上式是矩阵乘法的第一视角。

(86) 中的 $\boldsymbol{G}$ 有自己的名字——**格拉姆矩阵** (Gram matrix)。格拉姆矩阵在数据分析、机器学习算法中有重要作用。

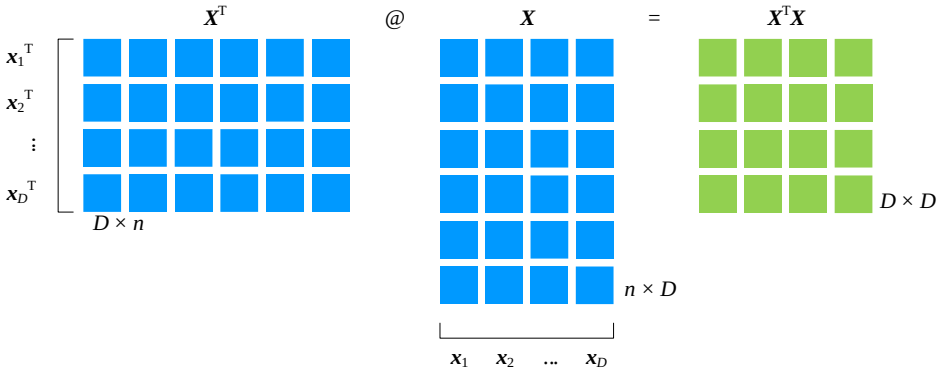


图 37. $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 运算过程

如图 38 所示，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的 (i,j) 元素是 $\boldsymbol{X}$ 中第 i 列向量转置乘以 $\boldsymbol{X}$ 的第 j 列向量：

$$\left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\right)_{i,j} = \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j \tag{87}$$

当 $i = j$ 时，$\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i$ 对应的是格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 的对角线元素，也可以写成 L^2 范数形式 $\|\boldsymbol{x}_i\|_2^2$。

再次强调，凡是看到矩阵乘积为标量的情况，要停下来思考一下，能够将矩阵乘积写成 L^2 范数形式。原因很简单，L^2 范数代表欧氏距离，这给我们提供一个几何视角。

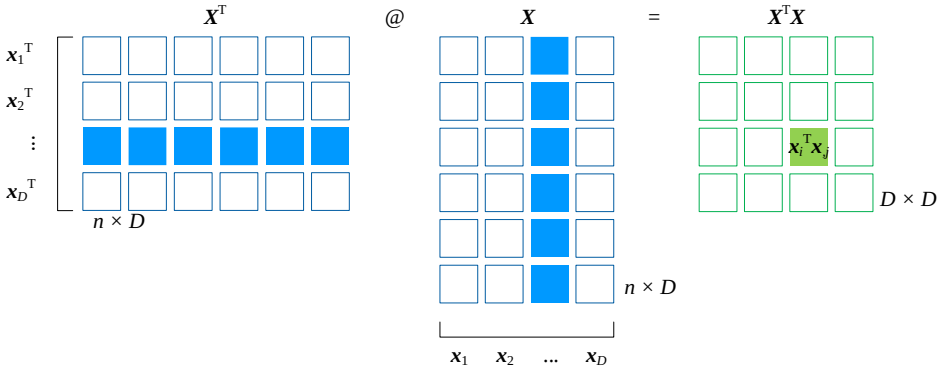


图 38. $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的 (i,j) 元素

标量积

$\boldsymbol{G}$ 还可以写成标量积：

$$\boldsymbol{G}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1\cdot\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_1\cdot\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_1\cdot\boldsymbol{x}_D\\ \boldsymbol{x}_2\cdot\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2\cdot\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_2\cdot\boldsymbol{x}_D\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{x}_D\cdot\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_D\cdot\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D\cdot\boldsymbol{x}_D\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_1\rangle & \langle\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_D\rangle\\ \langle\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_1\rangle & \langle\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_D\rangle\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \langle\boldsymbol{x}_D,\boldsymbol{x}_1\rangle & \langle\boldsymbol{x}_D,\boldsymbol{x}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{x}_D,\boldsymbol{x}_D\rangle\end{bmatrix} \tag{88}$$

任何一个单独向量，它的 L^p 范数，特别是 L^2 范数，代表它的“长度”；而几个向量之间的相对关系，则可以通过向量内积来呈现。再进一步，为了方便比较，我们可以用向量夹角余弦值作为度量向量之间相对夹角的数学工具。

格拉姆矩阵之所以重要，一方面是因为它集成了向量长度 (L^2 范数) 和相对夹角 (夹角余弦值) 两部分重要信息。另一方面，格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 为对称矩阵：

$$\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}=\left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\right)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{G} \tag{89}$$

一般情况，数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 都是“细高”长方形矩阵，矩阵运算时这种形状不够友好。比如，细高的 $\boldsymbol{X}$ 显然不存在转置。而把 $\boldsymbol{X}$ 转化为方阵 $\boldsymbol{G}$ (= $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$) 之后，很多运算都变得更加容易。

此外，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 相当于 $\boldsymbol{X}$ 的“平方”。大家需要注意 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的单位。比如，鸢尾花数据 $\boldsymbol{X}$ 单位为厘米，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 中每个元素的单位就变成了平方厘米。实践中，碰到矩阵乘法运算，要留意每个矩阵的单位。

本书第 22 章介绍协方差矩阵 (covariance matrix) 时，也将采用类似 (86) 的计算思路。

张量积

将矩阵 $\boldsymbol{X}$ 写成一系列行向量，如下：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D}=\begin{bmatrix}x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,D}\\ x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,D}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ x_{n,1} & x_{n,2} & \cdots & x_{n,D}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}^{(1)}\\ \boldsymbol{x}^{(2)}\\ \vdots\\ \boldsymbol{x}^{(n)}\end{bmatrix} \tag{90}$$

利用 (90)，格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$，可以写成一系列张量积的和：

$$\boldsymbol{G}=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}^{(1)\mathrm{T}} & \boldsymbol{x}^{(2)\mathrm{T}} & \cdots & \boldsymbol{x}^{(n)\mathrm{T}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}^{(1)}\\ \boldsymbol{x}^{(2)}\\ \vdots\\ \boldsymbol{x}^{(n)}\end{bmatrix}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{x}^{(i)\mathrm{T}}\boldsymbol{x}^{(i)}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{x}^{(i)}\otimes\boldsymbol{x}^{(i)} \tag{91}$$

上式是矩阵乘法的第二视角。

另一个格拉姆矩阵

本节前文的数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 是细高的，它转置之后得到宽矮的矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$。而 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 也有自己的格拉姆矩阵，即矩阵 $\boldsymbol{X}$ ($n \times D$) 乘其转置 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ ($D \times n$)，得到一个 $n \times n$ 格拉姆矩阵：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \\
&= \boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{x}_2\boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} + \cdots + \boldsymbol{x}_D\boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}} \\
&= \sum_{i=1}^{D} \boldsymbol{x}_i\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}
\end{aligned}
\tag{92}
$$

观察 (92)，大家是否也发现了张量积的影子？

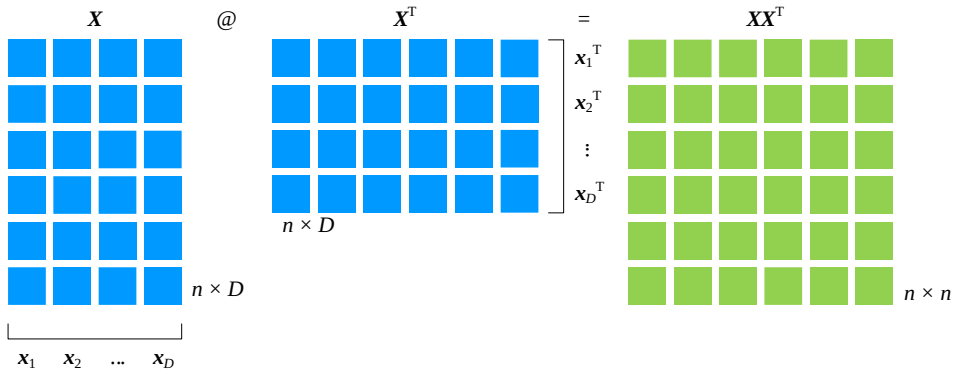


图 39. $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 运算过程

元素平方和

此外，下式可以计算得到矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的所有元素的平方和：

$$
\begin{aligned}
\operatorname{trace}\left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\right) &= \operatorname{trace}\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 \cdot \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_1 \cdot \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_1 \cdot \boldsymbol{x}_D \\ \boldsymbol{x}_2 \cdot \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 \cdot \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_2 \cdot \boldsymbol{x}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{x}_D \cdot \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_D \cdot \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \cdot \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \\
&= \boldsymbol{x}_1 \cdot \boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{x}_2 \cdot \boldsymbol{x}_2 + \cdots + \boldsymbol{x}_D \cdot \boldsymbol{x}_D \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_{i,1}^2 + \sum_{i=1}^{n} x_{i,2}^2 + \cdots + \sum_{i=1}^{n} x_{i,D}^2 = \sum_{j=1}^{D}\sum_{i=1}^{n} x_{i,j}^2
\end{aligned}
\tag{93}
$$

上一章讲解矩阵**迹** (trace) 时提到，如果 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}$ 都存在，$\operatorname{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}) = \operatorname{tr}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{A})$。也就是说，对于 (93)，下式成立：

$$
\operatorname{trace}\left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\right) = \operatorname{trace}\left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\right) = \sum_{j=1}^{D}\sum_{i=1}^{n} x_{i,j}^2 \tag{94}
$$

本书后文还会在不同位置用到 tr(***AB***) = tr(***BA***)，请大家格外注意。

此外，向量的范数度量了向量的大小。任意向量 L^2 范数的平方值，就是向量每个元素平方之和。而矩阵 ***X*** 的所有元素的平方和实际上也度量了某种矩阵“大小”。一个矩阵的所有元素平方和、再开方叫做矩阵 *F*-范数。本书第 18 章将介绍常见矩阵范数。

5.12 爱因斯坦求和约定

本书之前的所有矩阵运算都是适用于二阶情况，比如 $n \times D$ 的这种 n 行、D 列形式。在数据科学和机器学习很多实践中，我们不可避免地要处理高阶矩阵，比如图 40 所示三阶矩阵。Python 中 Xarray 专门用来存储和运算高阶矩阵。

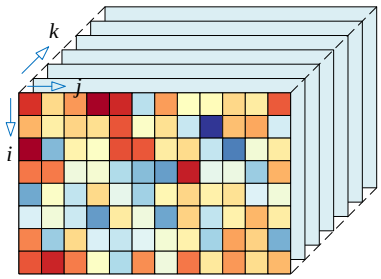


图 40. 三维数组，三阶矩阵

本节则要引出一种简洁表达高阶矩阵运算的数学工具——**爱因斯坦求和约定** (Einstein summation convention 或 Einstein notation)。本节特别介绍如何用 `numpy.einsum()` 函数完成本书前文介绍的主要线性代数运算。此外，PyTorch 中 `torch.einsum()` 函数原理和 `numpy.einsum()` 基本相同，本书不特别介绍。

使用 `numpy.einsum()` 时，大家记住一个要点——输入中重复的索引代表元素相乘，输出中消去的索引意味着相加。

举个例子，矩阵 ***A*** 和 ***B*** 相乘用 `numpy.einsum()` 函数可以写成：

```
np.einsum('ij,jk->ik', A, B)
```

“->” 之前分别为矩阵 ***A*** 和 ***B*** 的索引，它们用逗号隔开。矩阵 ***A*** 行索引为 `i`，列索引为 `j`。矩阵 ***B*** 行索引为 `j`，列索引为 `k`。`j` 为重复索引，因此在这个方向上元素相乘。

“->” 之后为输出结果的索引。输出结果索引为 `ik`，没有 `j`，因此在 `j` 索引方向上存在求和运算。

表 1 总结如何使用 `numpy.einsum()` 完成常见线性代数运算。现在不需要大家掌握 `numpy.einsum()`。希望大家在日后用到爱因斯坦求和约定时，再回过头来深入学习。

表 1. 使用 numpy.einsum() 完成常见线性代数运算

运算	使用 numpy.einsum() 完成运算
向量 $\boldsymbol{a}$ 所有元素求和 (结果为标量)	np.einsum('ij->',a) np.einsum('i->',a_1D)
等行数列向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的逐项积	np.einsum('ij,ij->ij',a,b) np.einsum('i,i->i',a_1D,b_1D)
等行数列向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的向量内积 (结果为标量)	np.einsum('ij,ij->',a,b) np.einsum('i,i->',a_1D,b_1D)
向量 $\boldsymbol{a}$ 和自身的张量积	np.einsum('ij,ji->ij',a,a) np.einsum('i,j->ij',a_1D,a_1D)
向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的张量积	np.einsum('ij,ji->ij',a,b) np.einsum('i,j->ij',a_1D,b_1D)
矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的转置	np.einsum('ji',A) np.einsum('ij->ji',A)
矩阵 $\boldsymbol{A}$ 所有元素求和 (结果为标量)	np.einsum('ij->',A)
矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对每一列元素求和	np.einsum('ij->j',A)
矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对每一行元素求和	np.einsum('ij->i',A)
提取方阵 $\boldsymbol{A}$ 的对角元素 (结果为标量)	np.einsum('ii->i',A)
计算方阵 $\boldsymbol{A}$ 的迹 trace($\boldsymbol{A}$) (结果为标量)	np.einsum('ii->',A)
计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 乘积	np.einsum('ij,jk->ik', A, B)
乘积 $\boldsymbol{AB}$ 结果所有元素求和 (结果为标量)	np.einsum('ij,jk->', A, B)
矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 相乘后再转置，即$(\boldsymbol{AB})^{\mathrm{T}}$	np.einsum('ij,jk->ki', A, B)
形状相同矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 逐项积	np.einsum('ij,ij->ij', A, B)

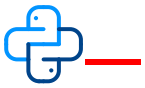


表 1 中变量定义和运算都在 Bk4_Ch5_01.py 中。

5.13 矩阵乘法的几个雷区

本章最后聊聊运用矩阵乘法时几个潜伏的雷区。

不满足交换律

代数中，乘法满足交换律，比如 $ab = ba$。

但是，一般情况，矩阵乘法不满足交换律：

$$\boldsymbol{AB} \neq \boldsymbol{BA} \tag{95}$$

本书在第 8 章将通过几何变换角度解释为什么矩阵乘法一般不满足交换律。

平方

如果方阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 满足：

$$\boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{B}^2 \tag{96}$$

不能得到：

$$\boldsymbol{A} = \pm\boldsymbol{B} \tag{97}$$

对于非方阵 $\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 或 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 相当于 $\boldsymbol{A}$ 的“平方”。

如果 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 非方阵，且满足：

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B} \tag{98}$$

上式也无法推导得到 (97)。

同理，下式也无法推导得到 (97)：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}} \tag{99}$$

和的平方

代数中，$(a + b)^2 = a^2 + 2ab + b^2$。

如果 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 为方阵，两者和的平方展开得到：

$$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^2 = (\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{A}^2 + \boldsymbol{A}\boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}^2 \tag{100}$$

上式中，$\boldsymbol{AB}$ 和 $\boldsymbol{BA}$ 不能随意合并。

如果 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 非方阵，下式相当于两者和的平方：

$$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B} \tag{101}$$

上式显然不同于下式：

$$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^{\mathrm{T}} = (\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{B}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}} \tag{102}$$

矩阵相等

如果 $a \neq 0$，$ab = ac$ 可以推导 $a(b-c) = 0$，继而得到 $b = c$。但是矩阵乘法中，如果 $\boldsymbol{A}$ 不是零矩阵，即 $\boldsymbol{A} \neq \boldsymbol{O}$，并且：

$$\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{AC} \tag{103}$$

可以推导得到：

$$\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{B}-\boldsymbol{C}\right) = \boldsymbol{O} \tag{104}$$

但是，不能直接得出 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{C}$。

举个例子，给定：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{C} = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \tag{105}$$

如下等式成立：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}} @ \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{B}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}} @ \underbrace{\begin{bmatrix} 4 & 2 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{C}} = \begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 4 & 8 \end{bmatrix} \tag{106}$$

显然 $\boldsymbol{B} \neq \boldsymbol{C}$。这是因为 (105) 给出的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 不可逆！

如果 $\boldsymbol{A}$ 可逆，我们需要“老老实实”地在等式 (103) 左右分别左乘 $\boldsymbol{A}^{-1}$，一步步推导得到：

$$\boldsymbol{A}^{-1}\left(\boldsymbol{AB}\right) = \boldsymbol{A}^{-1}\left(\boldsymbol{AC}\right) \quad \Rightarrow \quad \left(\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A}\right)\boldsymbol{B} = \left(\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A}\right)\boldsymbol{C} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{IB} = \boldsymbol{IC} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{B} = \boldsymbol{C} \tag{107}$$

如果下式对于 $\mathbb{R}^n$ 中任意 $\boldsymbol{x}$ 都成立，则 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}$：

$$\boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{x}_{n\times 1} = \boldsymbol{B}_{m\times n}\boldsymbol{x}_{n\times 1} \tag{108}$$

零矩阵

如果 $ab = 0$，可以得知 $a = 0$ 或 $b = 0$。但是，如果 $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{O}$，则无法得到 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{O}$ 或 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{O}$。

举个例子，如下 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 乘积为零矩阵，但是显然它们都不是零矩阵。

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}} @ \underbrace{\begin{bmatrix} 3 & 4 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{B}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{O}} \tag{109}$$

如果 $k\boldsymbol{A} = \boldsymbol{O}$，标量 $k = 0$ 或矩阵 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{O}$。

注意，$\boldsymbol{AO} = \boldsymbol{O}$ 中，两个零矩阵的形状很可能不一致。

注意顺序

在多个矩阵连乘展开遇到求逆或置换时，大家需要格外注意调换顺序，比如：

$$
\begin{aligned}
&(\boldsymbol{ABC})^{-1} = \boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1} \\
&(\boldsymbol{ABC})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \\
&\left((\boldsymbol{ABC})^{-1}\right)^{\mathrm{T}} = \left(\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1}\right)^{\mathrm{T}} = \left(\boldsymbol{A}^{-1}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{B}^{-1}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{C}^{-1}\right)^{\mathrm{T}} = \left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}
\end{aligned} \tag{110}
$$

其中，$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$ 均可逆。注意，$\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\right)^{-1} = \left(\boldsymbol{A}^{-1}\right)^{\mathrm{T}}$。

标量乘法

遇到标量乘法时注意：

$$
\begin{aligned}
&(k\boldsymbol{A})^{-1} = \frac{1}{k}\boldsymbol{A}^{-1} \\
&(k\boldsymbol{A})^{\mathrm{T}} = k\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}
\end{aligned} \tag{111}
$$

上式中，k 非零。此外，$\boldsymbol{A}^{-1}$ 代表矩阵的逆，不能类比成代数中的“倒数”。因此，$\boldsymbol{A}^{-1}$ 不能写成 $1/\boldsymbol{A}$ 或 $\frac{1}{\boldsymbol{A}}$，它俩在线性代数中没有定义。

结果可能是标量

矩阵的乘积结果可能是个标量。本章前文给出过几个例子，总结如下：

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{x} = \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\right)^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \\
&\boldsymbol{1}\cdot\boldsymbol{x} = \boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1} \\
&\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x} = \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \|\boldsymbol{x}\|_2^2 \\
&\sqrt{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}} = \sqrt{\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle} = \sqrt{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}} = \|\boldsymbol{x}\|_2 \\
&\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{1}, \quad \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_j
\end{aligned} \tag{112}
$$

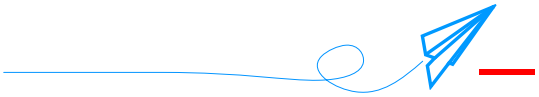
上述结果相当于是 1×1 矩阵。1×1 矩阵的转置为其本身。反复强调，遇到矩阵乘积为标量的情况，请大家考虑矩阵乘积能否看做是某种“距离”。

不能消去

当矩阵乘积为标量时，写在算式分母上就不足为奇了，比如：

$$\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}},\quad \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}},\quad \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}},\quad \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}} \tag{113}$$

如果分子、分母上都出现同一个矩阵，绝不能消去。显然，(113) 中 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{x}$ 都不能消去！最后一个分式中 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 也不能消去。



本章全景展示了常见的矩阵乘法形态。每种形态的矩阵乘法都很重要，因此也不能用四幅图来总结本章主要内容。

大家想要活用线性代数这个宝库中的各种数学工具，熟练掌握矩阵乘法规则是绕不过去的一道门槛。再强调一次，大家在学习不同的矩阵运算时，要试图从几何和数据这两个视角去理解。这也是本书要特别强化的一点。

此外，本章针对矩阵乘法运算也没有给出任何代码，因为在 Numpy 中矩阵乘法常用运算符就是 @。本章还介绍了爱因斯坦求和约定，不要求大家掌握。本章最后聊了聊矩阵乘法运算的常见雷区，希望大家格外小心。

矩阵乘法规则像是枷锁，它条条框框、冷酷无情、不容妥协；但是，在枷锁下，我们看到了矩阵乘法的另一面——无拘无束、血脉偾张、海纳百川。

希望大家一边学习本书剩余内容，一边能够不断回头看这一章内容，相信大家一定会和我一样，叹服于矩阵乘法展现出来的自由、包容，和纯粹的美。

6 Block Matrix
分块矩阵

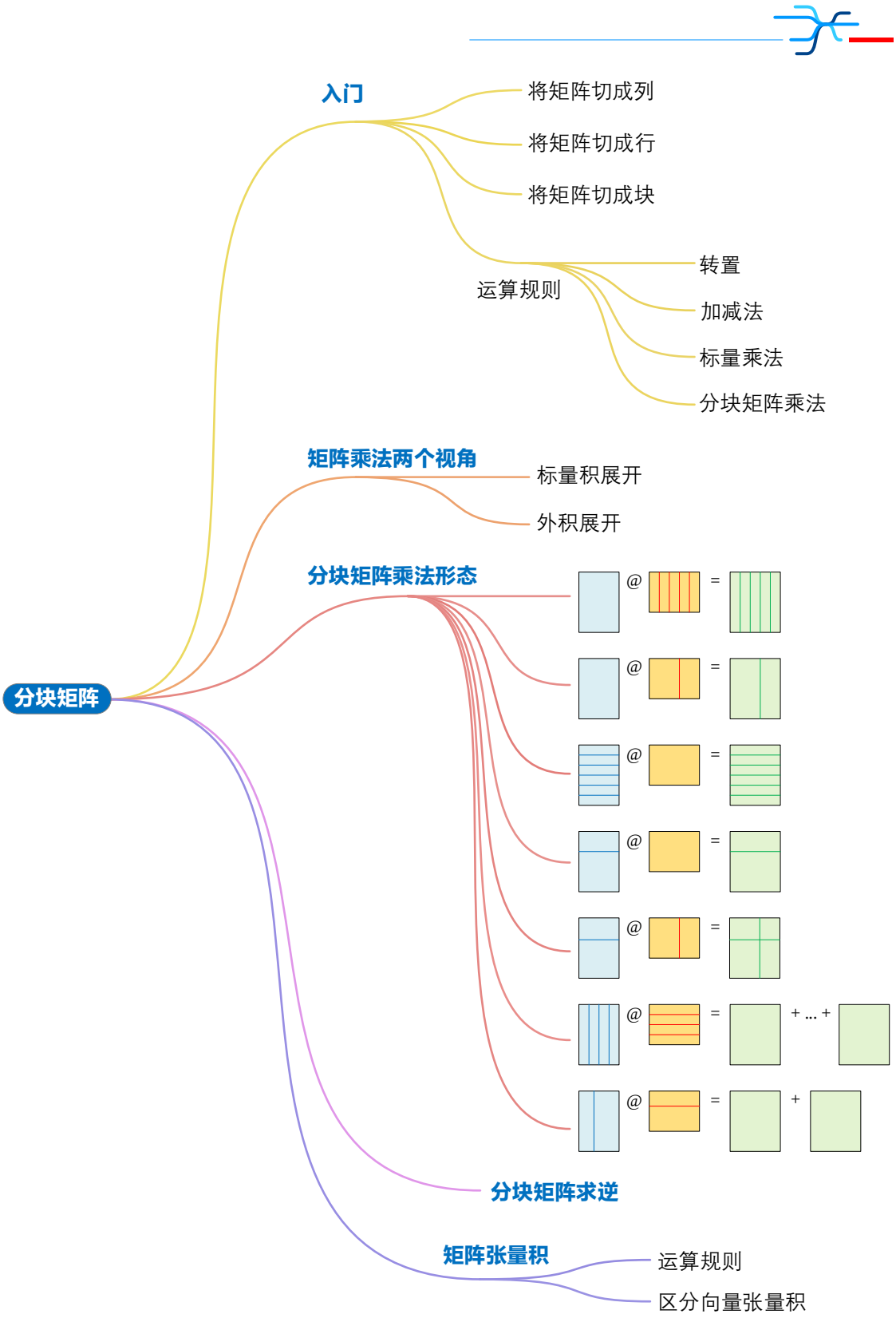
将大矩阵切成小块，简化运算

数学的精髓在于自由。

The essence of mathematics is in its freedom.

—— 格奥尔格·康托尔 (Georg Cantor) | 德国数学家 | 1845 ~ 1918

- `numpy.kron()` 计算矩阵张量积
- `numpy.random.random_integers()` 生成随机整数
- `numpy.zeros_like()` 用来生成和输入矩阵形状相同的零矩阵
- `seaborn.heatmap()` 绘制热图



6.1 分块矩阵：横平竖直切豆腐

分块矩阵 (block matrix 或 partitioned matrix) 将一个矩阵用若干条横线和竖线分割成多个**子块矩阵** (submatrices)。矩阵分块后可以简化运算，同时让运算过程变得更加清晰。

白话讲，矩阵分块好比横平竖直切豆腐；但是下刀的手法很有讲究，这是本章后文要着重探讨的内容。

切丝、切条

实际上，本书一开始就已经不知不觉地使用了分块矩阵这一重要工具。

大家已经清楚知道，如图 1 所示，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 可以看做是由一系列行向量或列向量按照一定规则构造而成。这实际上体现的就是分块矩阵的思想。

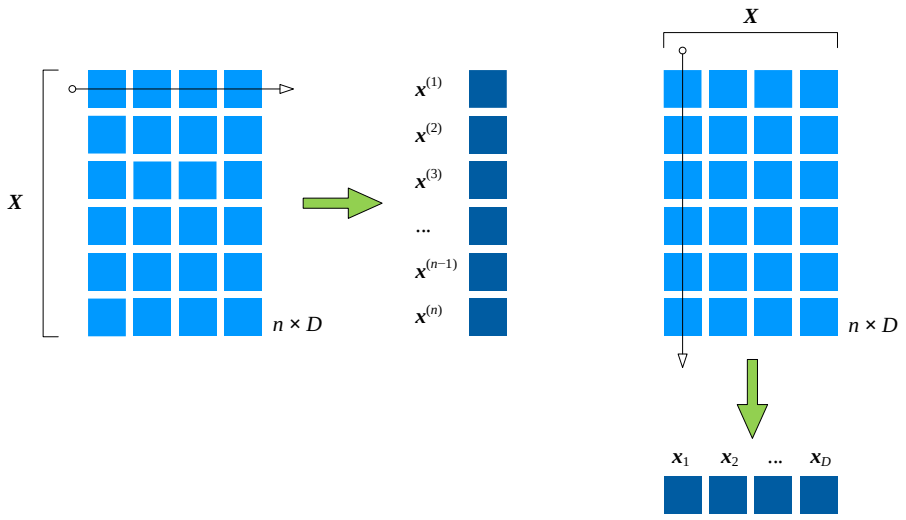


图 1. 矩阵可以写成一系列行向量或列向量

矩阵 $\boldsymbol{X}$ 每行之间切一刀，得到一组行向量：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}^{(1)}\\ \boldsymbol{x}^{(2)}\\ \vdots\\ \boldsymbol{x}^{(n)}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,D}\\ x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,D}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ x_{n,1} & x_{n,2} & \cdots & x_{n,D}\end{bmatrix} \tag{1}$$

矩阵 $\boldsymbol{X}$ 在每列之间切一刀，将 $\boldsymbol{X}$ 切成一组列向量：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,D}\\ x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,D}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ x_{n,1} & x_{n,2} & \cdots & x_{n,D}\end{bmatrix} \tag{2}$$

切块

下面介绍分块矩阵其他切法。给出如下矩阵 $\boldsymbol{A}$：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 2 & 3 & 0 & 0\\ 4 & 5 & 6 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1\end{bmatrix} \tag{3}$$

我们把矩阵 $\boldsymbol{A}$ 横竖都切一刀，得到四个子矩阵：

$$\boldsymbol{A}=\left[\begin{array}{ccc:cc}1 & 2 & 3 & 0 & 0\\ 4 & 5 & 6 & 0 & 0\\ \hdashline 0 & 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1\end{array}\right] \tag{4}$$

给每个子矩阵起个名字，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 记做：

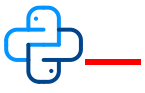
$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{1,1} & \boldsymbol{A}_{1,2}\\ \boldsymbol{A}_{2,1} & \boldsymbol{A}_{2,2}\end{bmatrix} \tag{5}$$

也就是，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}_{1,1}&=\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\ 4 & 5 & 6\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{A}_{1,2}=\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}\\ \boldsymbol{A}_{2,1}&=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{A}_{2,2}=\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{6}$$

本书后文也会用行、列数来命名分块矩阵，比如：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{X}_{r\times q} & \boldsymbol{X}_{r\times(D-q)}\\ \boldsymbol{X}_{(n-r)\times q} & \boldsymbol{X}_{(n-r)\times(D-q)}\end{bmatrix} \tag{7}$$



Numpy 中矩阵分块可以用指定行、列序数就做到。`numpy.block()` 函数可以用子块矩阵结合得到原矩阵。请大家参考 `Bk4_Ch6_01.py`。

鸢尾花数据为例

如图 2，将鸢尾花数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 上下切两刀，均匀分成三块。这三个分块矩阵的大小都是 50 × 4。本书第 1 章提到，鸢尾花数据有三个亚属，即三类标签——**山鸢尾** (setosa)、**变色鸢尾** (versicolor) 和**维吉尼亚鸢尾** (virginica)。图 2 右侧的每个分块代表一类鸢尾花的样本数据子集，每个子集各有 50 条记录。利用图 2 右侧的分块矩阵，我们可以分析某一类鸢尾花样本子集的均值、质心 (列均值构成的向量)、方差、均方差、协方差、协方差矩阵、相关性系数、相关性系数矩阵等等。

大家将会在本书第 22 章，以及本系列丛书《概率统计》和《数据科学》两册中看到图 2 这种分块方式的用途。

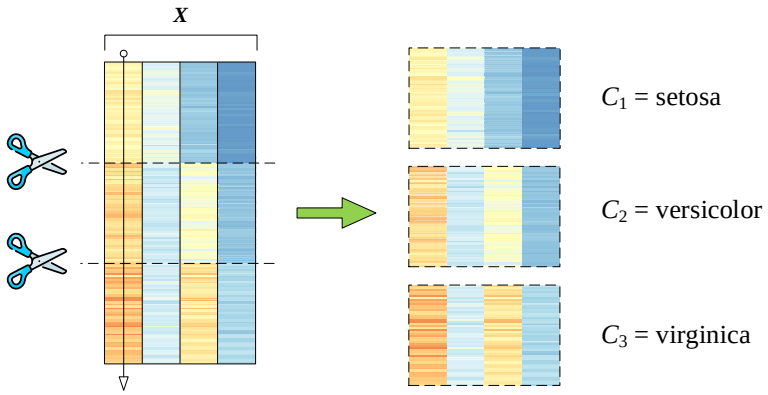


图 2. 鸢尾花数据矩阵上下切 2 刀分成 3 块

如图 3 所示，将鸢尾花数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 左右切 3 刀，得到 4 个分块矩阵，即 4 个列向量，形状都为 150 × 1。这 4 个分块矩阵分别代表**花萼长度** (sepal length)、**花萼宽度** (sepal width)、**花瓣长度** (petal length) 和**花瓣宽度** (petal width) 四个特征的样本数据。

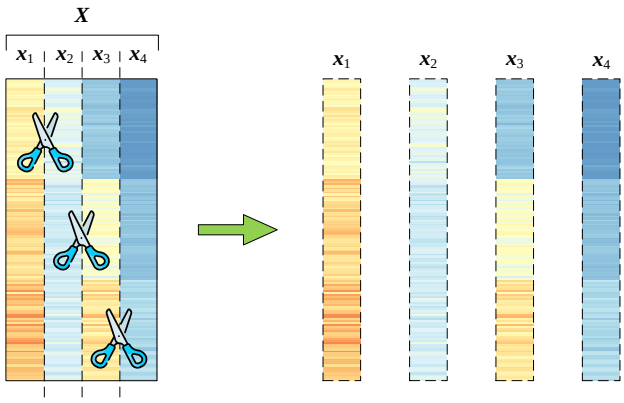


图 3. 鸢尾花数据矩阵左右切 3 刀分成 4 块

转置

一般情况，$\boldsymbol{A}_{i,j}$的行数记做 n_i，列数为 D_j；如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的形状为 $n \times D$，按 (5) 分割得到的子块矩阵的行、列数满足：

$$n_1 + n_2 = n, \quad D_1 + D_2 = D \tag{8}$$

对 (5) 中 $\boldsymbol{A}$ 求转置，得到：

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{1,1}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{A}_{2,1}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{A}_{1,2}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{A}_{2,2}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \tag{9}$$

上式相当于由两层转置运算构成。第一层把子块当成元素，进行转置；第二层是子块矩阵转置运算。代入具体值，得到：

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \left[\begin{array}{cc:cc} 1 & 4 & 0 & 0 \\ 2 & 5 & 0 & 0 \\ 3 & 6 & 0 & 0 \\ \hdashline 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right] \tag{10}$$

请大家仔细对比 (4) 和 (10)，分析转置前后子块矩阵的变化。

标量乘法

(5) 中分块矩阵标量乘法规则如下：

$$k\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} k\boldsymbol{A}_{1,1} & k\boldsymbol{A}_{1,2} \\ k\boldsymbol{A}_{2,1} & k\boldsymbol{A}_{2,2} \end{bmatrix} \tag{11}$$

加减法

给定矩阵 $\boldsymbol{B}$，它的形状和 (5) 中 $\boldsymbol{A}$ 相同，采用相同的分块法分割 $\boldsymbol{B}$，得到：

$$\boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{B}_{1,1} & \boldsymbol{B}_{1,2} \\ \boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{B}_{2,2} \end{bmatrix} \tag{12}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的相同位置的子块矩阵形状相同，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 相加为对应位置子块分别相加：

$$\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{1,1} & \boldsymbol{A}_{1,2} \\ \boldsymbol{A}_{2,1} & \boldsymbol{A}_{2,2} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \boldsymbol{B}_{1,1} & \boldsymbol{B}_{1,2} \\ \boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{B}_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{1,1} + \boldsymbol{B}_{1,1} & \boldsymbol{A}_{1,2} + \boldsymbol{B}_{1,2} \\ \boldsymbol{A}_{2,1} + \boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{A}_{2,2} + \boldsymbol{B}_{2,2} \end{bmatrix} \tag{13}$$

上述规则也适用于减法。

矩阵乘法

分块矩阵乘法规则也基于矩阵乘法规则。$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 相乘时，首先保证 $\boldsymbol{A}$ 的列数等于 $\boldsymbol{B}$ 的行数。$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 分块时，保证 $\boldsymbol{A}$ 的每一个子块矩阵的列数分别等于对应位置 $\boldsymbol{B}$ 的每个子块的行数。这样 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 相乘可以展开写成：

$$\boldsymbol{AB}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{1,1} & \boldsymbol{A}_{1,2}\\ \boldsymbol{A}_{2,1} & \boldsymbol{A}_{2,2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_{1,1} & \boldsymbol{B}_{1,2}\\ \boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{B}_{2,2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{1,1}\boldsymbol{B}_{1,1}+\boldsymbol{A}_{1,2}\boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{A}_{1,1}\boldsymbol{B}_{1,2}+\boldsymbol{A}_{1,2}\boldsymbol{B}_{2,2}\\ \boldsymbol{A}_{2,1}\boldsymbol{B}_{1,1}+\boldsymbol{A}_{2,2}\boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{A}_{2,1}\boldsymbol{B}_{1,2}+\boldsymbol{A}_{2,2}\boldsymbol{B}_{2,2}\end{bmatrix} \tag{14}$$

上式中分块矩阵的乘法有两层运算。第一层矩阵乘法将子块视作元素来完成矩阵乘法，第二层是子块矩阵之间矩阵乘法。本章后文会深入讲解不同形态的分块矩阵乘法。

6.2 矩阵乘法第一视角：标量积展开

本书前文以两个 2×2 矩阵相乘为例讲解过观察矩阵乘法的两个视角。本节和下一节回顾这两个视角的同时，进一步从分块矩阵视角理解矩阵乘法规则。

本节讨论矩阵乘法的常规视角——**标量积展开** (scalar product expansion)。

首先回顾矩阵乘法规则。

当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列数等于矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的行数时，$\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 可以相乘。比如下例中，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的形状为 n 行 D 列，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的形状为 D 行 m 列。$\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 相乘时，相当于 D 被消去。

⚠ 再次强调，一般情况，矩阵乘法不满足交换律，即 $\boldsymbol{AB}\neq\boldsymbol{BA}$。

$\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 相乘得到的矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的行数等于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行数，$\boldsymbol{C}$ 的列数等于 $\boldsymbol{B}$ 的列数，即 $\boldsymbol{AB}$ 结果的形状为 n 行 m 列：

$$\boldsymbol{C}_{n\times m}=\boldsymbol{A}_{n\times D}\boldsymbol{B}_{D\times m}=\boldsymbol{A}_{n\times D}\text{@}\boldsymbol{B}_{D\times m}=\begin{bmatrix}c_{1,1} & c_{1,2} & \cdots & c_{1,m}\\ c_{2,1} & c_{2,2} & \cdots & c_{2,m}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ c_{n,1} & c_{n,2} & \cdots & c_{n,m}\end{bmatrix} \tag{15}$$

其中，

$$\boldsymbol{A}_{n\times D}=\begin{bmatrix}a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,D}\\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,D}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,D}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{B}_{D\times m}=\begin{bmatrix}b_{1,1} & b_{1,2} & \cdots & b_{1,m}\\ b_{2,1} & b_{2,2} & \cdots & b_{2,m}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ b_{D,1} & b_{D,2} & \cdots & b_{D,m}\end{bmatrix} \tag{16}$$

将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 写成一组行向量：

$$\boldsymbol{A}_{n\times D}=\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,D} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,D} \end{bmatrix}_{n\times D}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{a}^{(1)} \\ \boldsymbol{a}^{(2)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}^{(n)} \end{bmatrix}_{n\times 1} \tag{17}$$

将矩阵 $\boldsymbol{B}$ 写成一组列向量：

$$\boldsymbol{B}_{D\times m}=\begin{bmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} & \cdots & b_{1,m} \\ b_{2,1} & b_{2,2} & \cdots & b_{2,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{D,1} & b_{D,2} & \cdots & b_{D,m} \end{bmatrix}_{D\times m}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{b}_2 & \cdots & \boldsymbol{b}_m \end{bmatrix}_{1\times m} \tag{18}$$

利用 (17) 和 (18)，矩阵乘积 $\boldsymbol{AB}$ 可以写作：

$$\boldsymbol{C}=\boldsymbol{AB}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{a}^{(1)} \\ \boldsymbol{a}^{(2)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}^{(n)} \end{bmatrix}_{n\times 1}\begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{b}_2 & \cdots & \boldsymbol{b}_m \end{bmatrix}_{1\times m}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{a}^{(1)}\boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{a}^{(1)}\boldsymbol{b}_2 & \cdots & \boldsymbol{a}^{(1)}\boldsymbol{b}_m \\ \boldsymbol{a}^{(2)}\boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{a}^{(2)}\boldsymbol{b}_2 & \cdots & \boldsymbol{a}^{(2)}\boldsymbol{b}_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{a}^{(n)}\boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{a}^{(n)}\boldsymbol{b}_2 & \cdots & \boldsymbol{a}^{(n)}\boldsymbol{b}_m \end{bmatrix}_{n\times m} \tag{19}$$

上式便是矩阵乘法的常规视角，即第一视角，规则如图 4 所示。

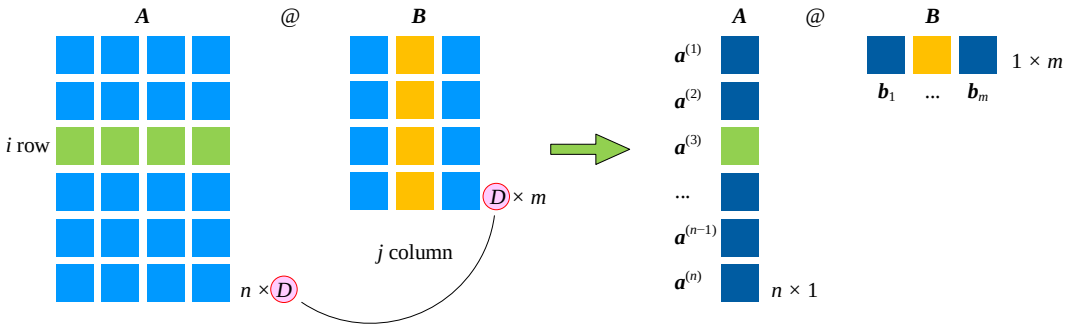


图 4. 矩阵乘法的常规视角

如图 5 所示，矩阵乘积 $\boldsymbol{C}$ 的 (i,j) 元素 $c_{i,j}$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 行行向量 $\boldsymbol{a}^{(i)}$ 和矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的第 j 列列向量 $\boldsymbol{b}_j$ 的乘积：

$$c_{i,j}=\boldsymbol{a}^{(i)}\boldsymbol{b}_j \tag{20}$$

白话说，矩阵乘法的常规视角是，左侧矩阵的每个行向量，按规则分别乘右侧矩阵每个列向量。

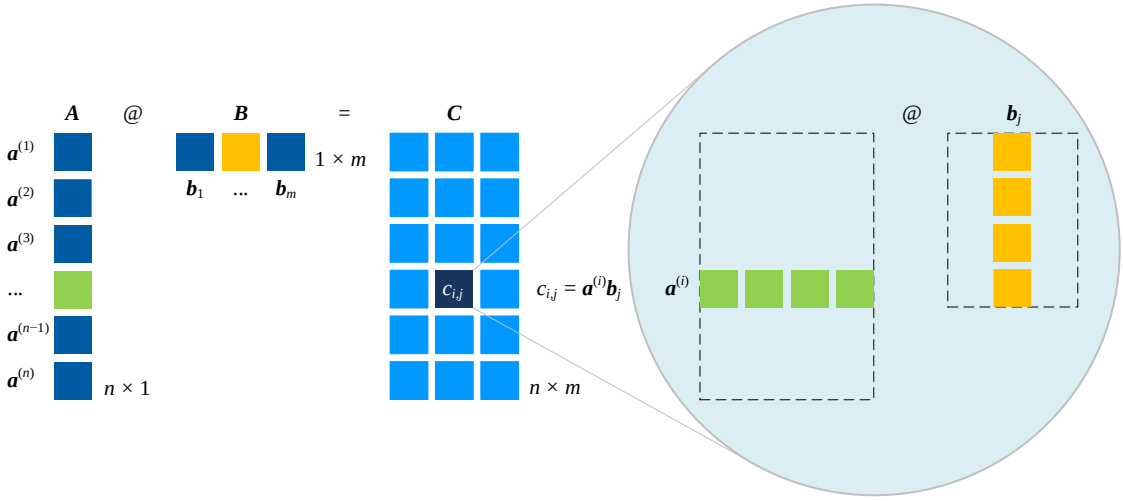


图 5. 矩阵乘法的常规视角中，矩阵乘积 $\boldsymbol{C}$ 的 (i,j) 元素

6.3 矩阵乘法第二视角：外积展开

本节回顾矩阵乘法规则的第二视角——**外积展开** (outer product expansion)。

与上一节介绍的矩阵乘法常规视角不同，我们将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 写成一组列向量：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,D} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,D} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \cdots & \boldsymbol{a}_D \end{bmatrix} \tag{21}$$

矩阵 $\boldsymbol{B}$ 则写成一组行向量：

$$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} & \cdots & b_{1,m} \\ b_{2,1} & b_{2,2} & \cdots & b_{2,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{D,1} & b_{D,2} & \cdots & b_{D,m} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{b}^{(1)} \\ \boldsymbol{b}^{(2)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{b}^{(D)} \end{bmatrix} \tag{22}$$

这样，在计算矩阵乘积 $\boldsymbol{AB}$ 时，我们便得到如图 6 所示这个全新的视角。

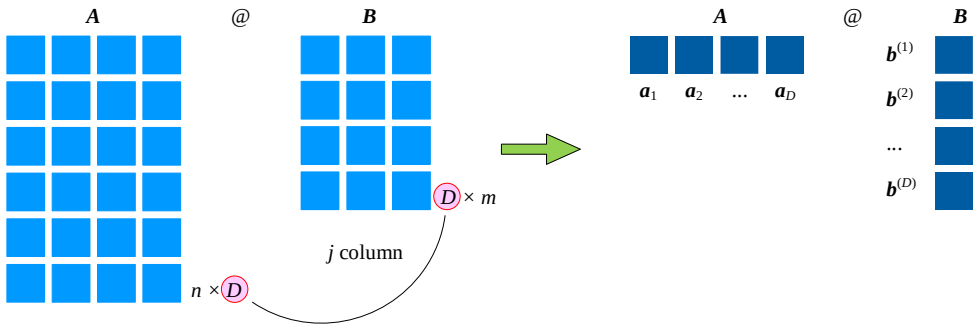


图 6. 矩阵乘法的第二视角

利用 (21) 和 (22)，矩阵乘积 $\boldsymbol{AB}$ 展开写成：

$$\boldsymbol{C}=\boldsymbol{AB}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \cdots & \boldsymbol{a}_D\end{bmatrix}_{1\times D}\begin{bmatrix}\boldsymbol{b}^{(1)}\\ \boldsymbol{b}^{(2)}\\ \vdots\\ \boldsymbol{b}^{(D)}\end{bmatrix}_{D\times 1}=\boldsymbol{a}_1\boldsymbol{b}^{(1)}+\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{b}^{(2)}+\cdots+\boldsymbol{a}_D\boldsymbol{b}^{(D)}=\sum_{i=1}^{D}\boldsymbol{a}_i\boldsymbol{b}^{(i)} \tag{23}$$

利用第二视角，矩阵乘法运算转化成求和运算。如图 7 所示，列向量 $\boldsymbol{a}_i$ 和行向量 $\boldsymbol{b}^{(i)}$ 乘积的结果的形状为 $n \times m$，即乘积 $\boldsymbol{C}$ 矩阵的形状。

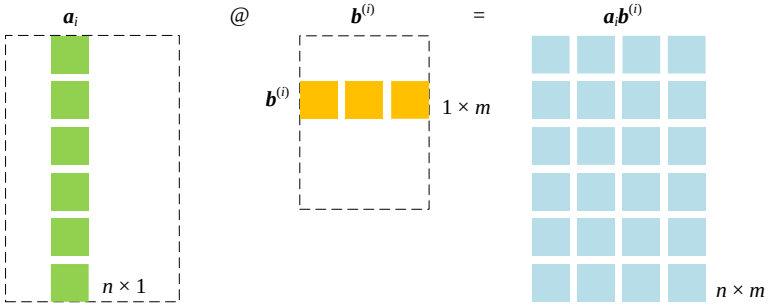


图 7. 列向量 $\boldsymbol{a}_i$ 和行向量 $\boldsymbol{b}^{(i)}$ 乘积的结果

令，

$$\boldsymbol{C}_i=\boldsymbol{a}_i\boldsymbol{b}^{(i)} \tag{24}$$

通过观察 (23)，可以发现乘积 $\boldsymbol{C}$ 矩阵相当于 D 个矩阵 $\boldsymbol{C}_i$ 叠加之和：

$$\boldsymbol{C}=\boldsymbol{C}_1+\boldsymbol{C}_2+\cdots+\boldsymbol{C}_D=\sum_{i=1}^{D}\boldsymbol{C}_i \tag{25}$$

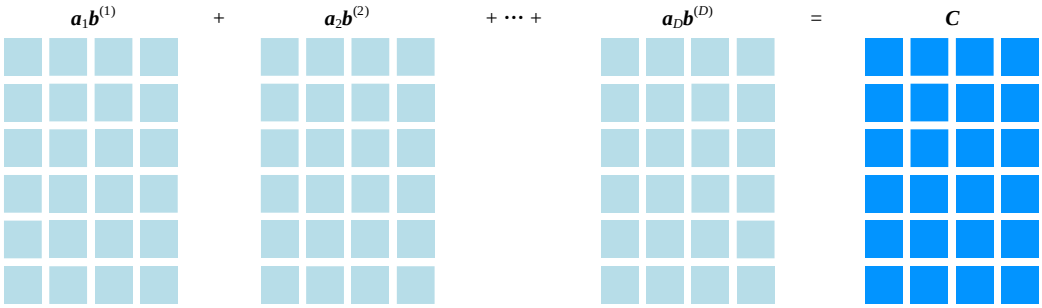


图 8. 乘积 $\boldsymbol{C}$ 矩阵相当于 D 个矩阵叠加之和

张量积

用向量张量积运算规则，把 (23) 中矩阵 $\boldsymbol{C}$ 写成一组向量张量积之和：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{C} &= \boldsymbol{a}_1 \otimes \left(\boldsymbol{b}^{(1)}\right)^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{a}_2 \otimes \left(\boldsymbol{b}^{(2)}\right)^{\mathrm{T}} + \cdots + \boldsymbol{a}_D \otimes \left(\boldsymbol{b}^{(D)}\right)^{\mathrm{T}} \\ &= \sum_{i=1}^{D} \boldsymbol{a}_i \otimes \left(\boldsymbol{b}^{(i)}\right)^{\mathrm{T}}\end{aligned} \tag{26}$$

⚠ 请大家格外注意 (26) 中的转置运算。

矩阵乘法的第二视角不仅仅是常规视角的补充。在很多数据科学和机器学习算法中，矩阵乘法第二视角扮演至关重要的角色。

热图示例

下面我们用具体数字和热图可视化矩阵乘法外积展开。

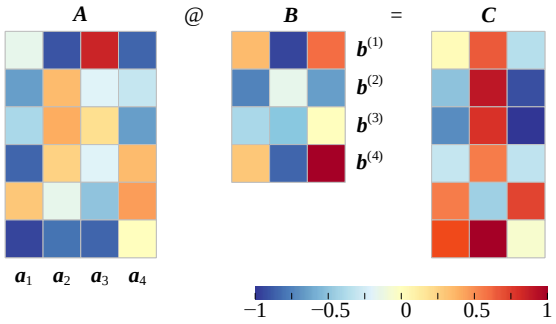


图 9. 矩阵乘法热图

图 9 所示为 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 矩阵乘法热图。将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 拆解为一组列向量，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 拆解为一组行向量。按照 (23)，得到如图 10 所示 4 幅热图。

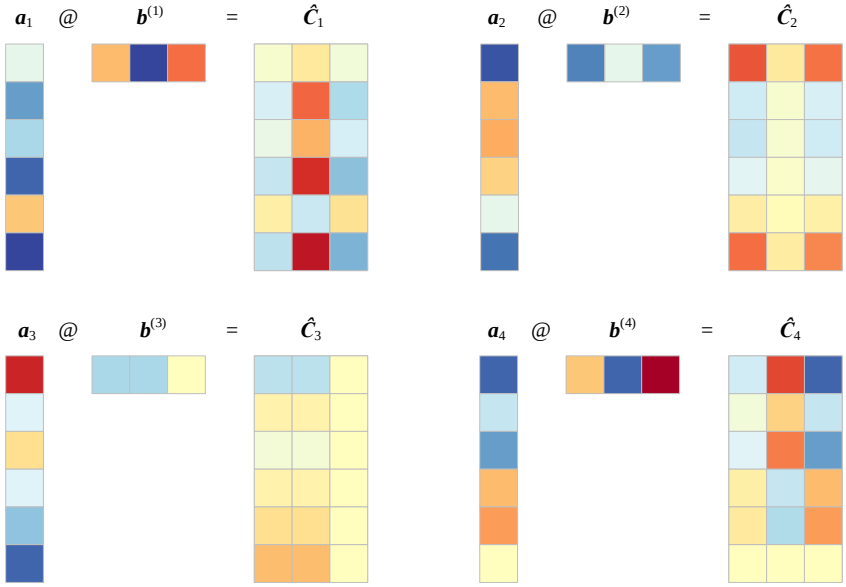


图 10. 四幅列向量乘行向量结果热图

同样，也可以用张量积来计算得到这 4 幅热图，如图 11 所示。

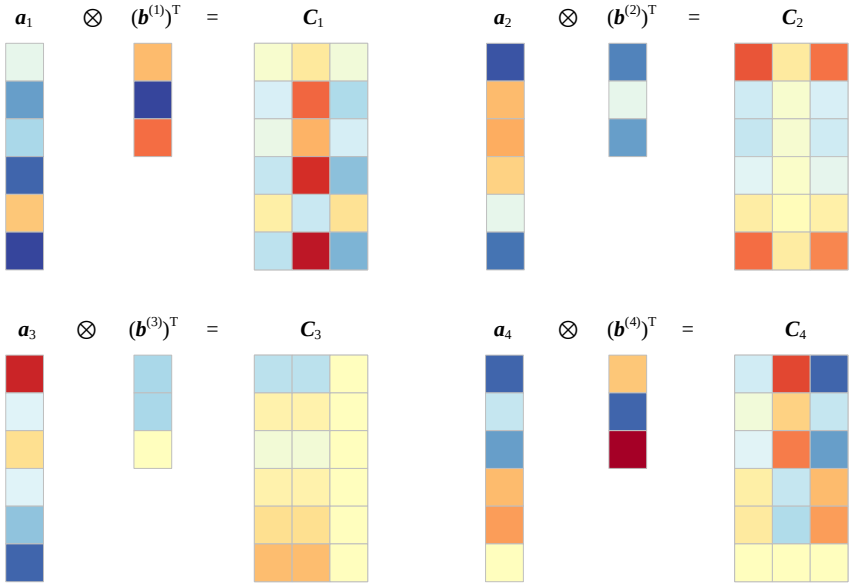


图 11. 四幅张量积热图

如图 12 所示，将这 4 幅热图叠加，我们可以得到乘积结果矩阵 $\boldsymbol{C}$。

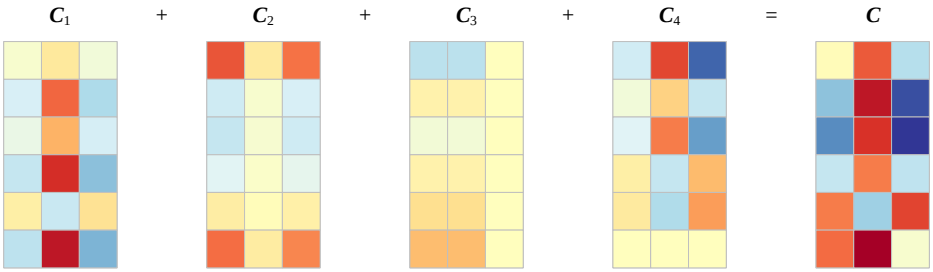


图 12. 四幅热图叠加

图 12 这个思路对于**特征值分解** (Eigen Decomposition)、**奇异值分解** (Singular Value Decomposition, SVD)、**主成分分析** (Principal Component Analysis, PCA) 非常重要。本书第 13、14 章将专门讲解特征值分解原理和应用，第 15、16 章专门介绍奇异值分解原理和应用。学好特征值分解、奇异值分解的关键就是“多视角”——数据视角、向量视角、几何视角、空间视角、统计视角等等。本书第 18 章专门介绍理解特征值分解、奇异值分解的优化视角。本书第 23 章则用奇异值分解介绍“四个空间”。

`Bk4_Ch6_02.py` 绘制图 12 的每幅热图。

6.4 矩阵乘法更多视角：分块多样化

本节介绍常见几种分块矩阵乘法形态，它们都可以视作观察矩阵乘法的不同视角。

$\boldsymbol{B}$ 切成列向量

$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 矩阵相乘时，将 $\boldsymbol{B}$ 分割成列向量，这样 $\boldsymbol{AB}$ 结果为：

$$\boldsymbol{C}=\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{A}\begin{bmatrix}\boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{b}_2 & \cdots & \boldsymbol{b}_m\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{Ab}_1 & \boldsymbol{Ab}_2 & \cdots & \boldsymbol{Ab}_m\end{bmatrix} \tag{27}$$

图 13 所示为上述运算示意图。

⚠ 请大家格外注意这个视角，本书之后的投影运算中经常见到这种展开方法。

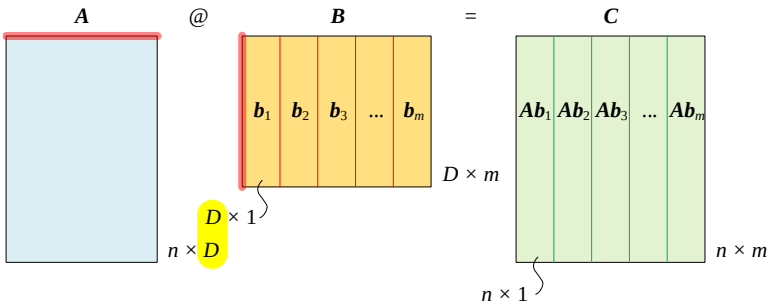


图 13. $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 矩阵相乘时，将 $\boldsymbol{B}$ 写成一组列向量

反向来看，如果存在以下一组矩阵乘法运算：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{b}_1=\boldsymbol{c}_1,\quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{b}_2=\boldsymbol{c}_2,\quad \cdots\quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{b}_m=\boldsymbol{c}_m \tag{28}$$

其中，列向量 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$ … $\boldsymbol{b}_m$ 的形状相同。(28) 中 m 个等式可以合成得到：

$$\boldsymbol{A}\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{b}_2 & \cdots & \boldsymbol{b}_m\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{B}}=\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{c}_1 & \boldsymbol{c}_2 & \cdots & \boldsymbol{c}_m\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{C}} \tag{29}$$

$\boldsymbol{B}$ 左右切一刀

$\boldsymbol{B}$ 先左右切一刀后，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 再左乘 $\boldsymbol{B}$，乘积 $\boldsymbol{AB}$ 展开写成：

$$\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{A}\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_1 & \boldsymbol{B}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}_1 & \boldsymbol{A}\boldsymbol{B}_2\end{bmatrix} \tag{30}$$

图 14 所示为上述运算示意图。

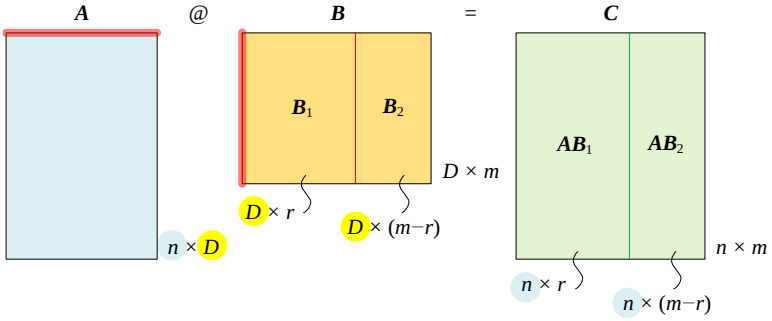


图 14. 将 $\boldsymbol{B}$ 左右切一刀再右乘 $\boldsymbol{A}$

$\boldsymbol{A}$ 切成一组行向量

$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 矩阵相乘，将 $\boldsymbol{A}$ 分割成一组行向量，乘积 $\boldsymbol{AB}$ 结果为：

$$\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}^{(1)}\\ \boldsymbol{a}^{(2)}\\ \vdots\\ \boldsymbol{a}^{(n)}\end{bmatrix}_{n\times 1}@\,\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}^{(1)}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{a}^{(2)}\boldsymbol{B}\\ \vdots\\ \boldsymbol{a}^{(n)}\boldsymbol{B}\end{bmatrix}_{n\times 1} \tag{31}$$

图 15 所示为上述运算示意图。此外，请大家也试着从“合成”角度，逆向来看上述运算。

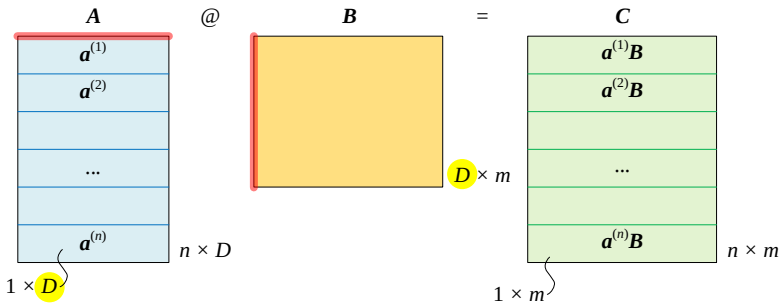


图 15. $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 矩阵相乘，将 $\boldsymbol{A}$ 分割成一组行向量

$\boldsymbol{A}$ 上下切一刀

将 $\boldsymbol{A}$ 先上下切一刀，$\boldsymbol{A}$ 再左乘 $\boldsymbol{B}$，乘积 $\boldsymbol{AB}$ 结果为：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_1\\ \boldsymbol{A}_2\end{bmatrix}\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{B}\end{bmatrix} \tag{32}$$

图 16 所示为上述运算示意图。

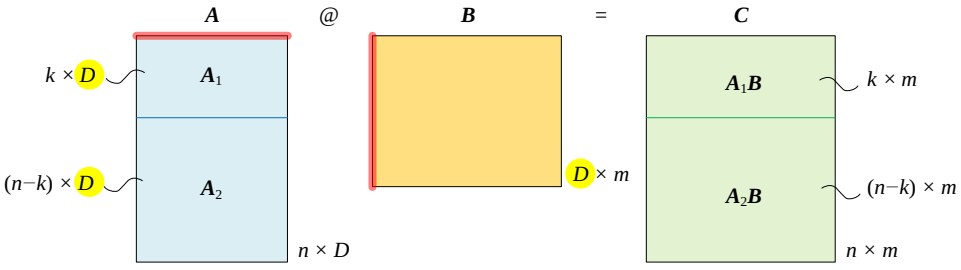


图 16. $\boldsymbol{A}$ 上下切一刀，再左乘 $\boldsymbol{B}$

$\boldsymbol{A}$ 上下切，$\boldsymbol{B}$ 左右切

上下分块的 $\boldsymbol{A}$ 乘左右分块的 $\boldsymbol{B}$，乘积 $\boldsymbol{AB}$ 结果展开为：

$$\boldsymbol{AB}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_1\\ \boldsymbol{A}_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_1 & \boldsymbol{B}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{B}_1 & \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{B}_2\\ \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{B}_1 & \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{B}_2\end{bmatrix} \tag{33}$$

如图 17 所示，$\boldsymbol{A}_1$ 和 $\boldsymbol{A}_2$ 的列数还是 D，$\boldsymbol{B}_1$ 和 $\boldsymbol{B}_2$ 的行数也是 D。我们可以把 $\boldsymbol{A}_1$ 和 $\boldsymbol{A}_2$ 视作矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的两个元素，$\boldsymbol{B}_1$ 和 $\boldsymbol{B}_2$ 看成矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的两个元素。这个视角类似矩阵乘法的第一视角。

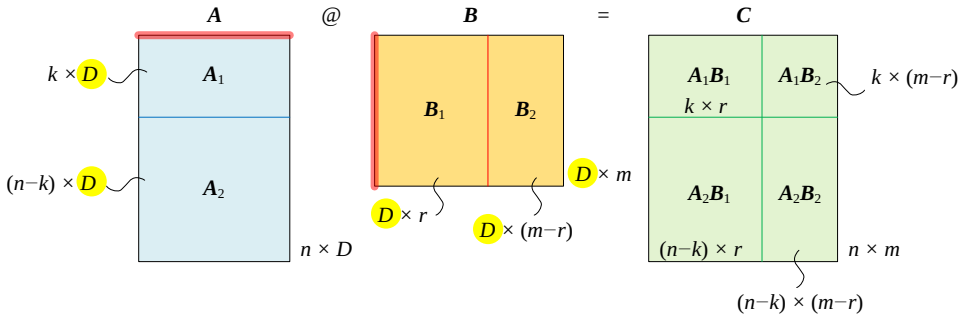


图 17. 上下分块的 $\boldsymbol{A}$ 乘左右分块的 $\boldsymbol{B}$

A 左右切，B 上下切

左右分块的 $\boldsymbol{A}$ 乘上下分块的 $\boldsymbol{B}$，乘积 $\boldsymbol{AB}$ 结果展开为：

$$\boldsymbol{AB}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{A}_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_1\\ \boldsymbol{B}_2\end{bmatrix}=\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{B}_1+\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{B}_2 \tag{34}$$

如图 18 所示，$\boldsymbol{A}_1$ 列数等于 $\boldsymbol{B}_1$ 行数，$\boldsymbol{A}_2$ 列数等于 $\boldsymbol{B}_2$ 行数。这类似前面讲到的矩阵乘法的第二视角。

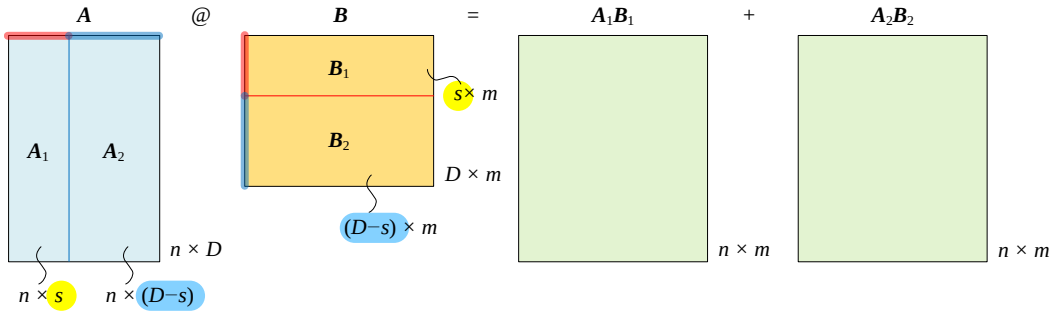


图 18. 左右分块的 $\boldsymbol{A}$ 乘以上下分块的 $\boldsymbol{B}$

A 和 B 都“大卸四块”

$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 都上下左右分块，乘积 $\boldsymbol{AB}$ 结果为：

$$\boldsymbol{AB}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{1,1} & \boldsymbol{A}_{1,2}\\ \boldsymbol{A}_{2,1} & \boldsymbol{A}_{2,2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_{1,1} & \boldsymbol{B}_{1,2}\\ \boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{B}_{2,2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{1,1}\boldsymbol{B}_{1,1}+\boldsymbol{A}_{1,2}\boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{A}_{1,1}\boldsymbol{B}_{1,2}+\boldsymbol{A}_{1,2}\boldsymbol{B}_{2,2}\\ \boldsymbol{A}_{2,1}\boldsymbol{B}_{1,1}+\boldsymbol{A}_{2,2}\boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{A}_{2,1}\boldsymbol{B}_{1,2}+\boldsymbol{A}_{2,2}\boldsymbol{B}_{2,2}\end{bmatrix} \tag{35}$$

如图 19 所示，$\boldsymbol{A}_{1,1}$、$\boldsymbol{A}_{1,2}$、$\boldsymbol{A}_{2,1}$、$\boldsymbol{A}_{2,2}$ 的列数分别等于 $\boldsymbol{B}_{1,1}$、$\boldsymbol{B}_{2,1}$、$\boldsymbol{B}_{1,2}$、$\boldsymbol{B}_{2,2}$ 的行数。图 19 中给出的分块矩阵乘法相当于两个 2×2 矩阵相乘，结果 $\boldsymbol{C}$ 还是 2×2。这也相当于矩阵乘法的第一视角。

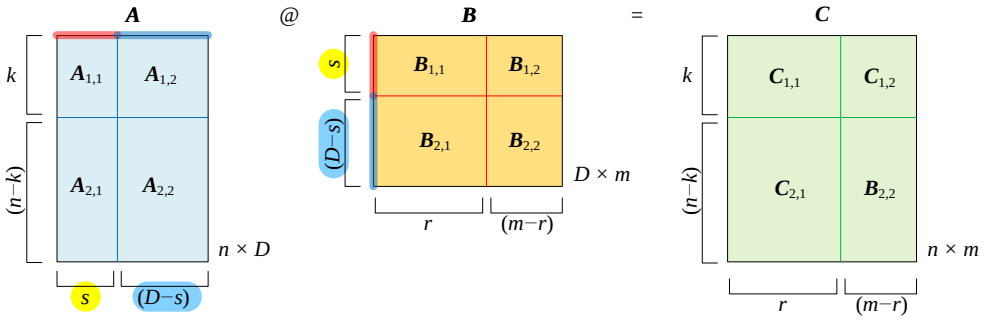


图 19. $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 都上下左右分块

矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的四个元素分别为 $\boldsymbol{C}_{1,1}$、$\boldsymbol{C}_{1,2}$、$\boldsymbol{C}_{2,1}$、$\boldsymbol{C}_{2,2}$。图 20 到图 23 分别展示如何计算 $\boldsymbol{C}_{1,1}$、$\boldsymbol{C}_{1,2}$、$\boldsymbol{C}_{2,1}$、$\boldsymbol{C}_{2,2}$。以 $\boldsymbol{C}_{1,1}$ 为例，$\boldsymbol{C}_{1,1}$ 的行数等于 $\boldsymbol{A}_{1,1}$ 的行数，$\boldsymbol{C}_{1,1}$ 的列数等于 $\boldsymbol{B}_{1,1}$ 的列数。

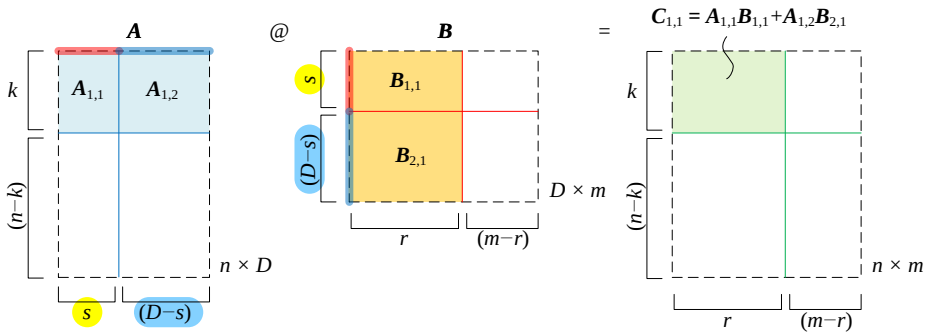


图 20. 计算 $\boldsymbol{C}_{1,1}$

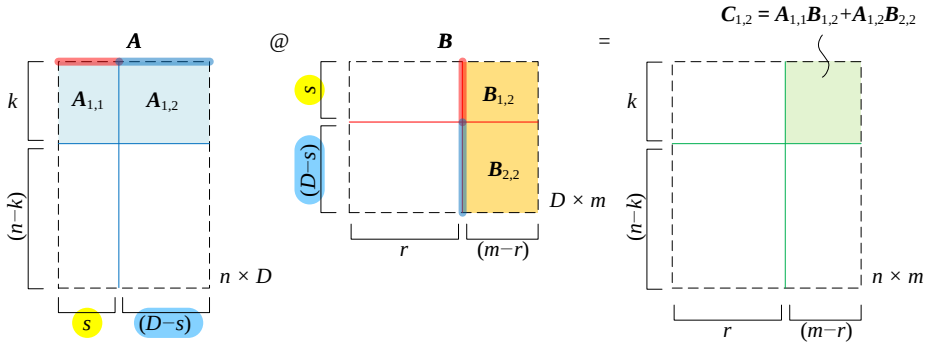


图 21. 计算 $C_{1,2}$

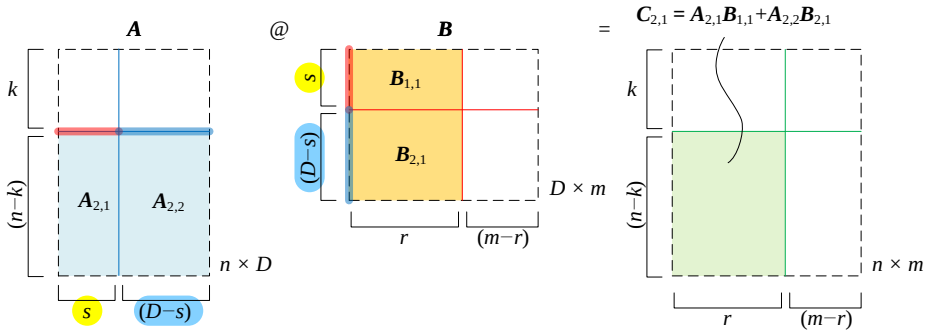


图 22. 计算 $C_{2,1}$

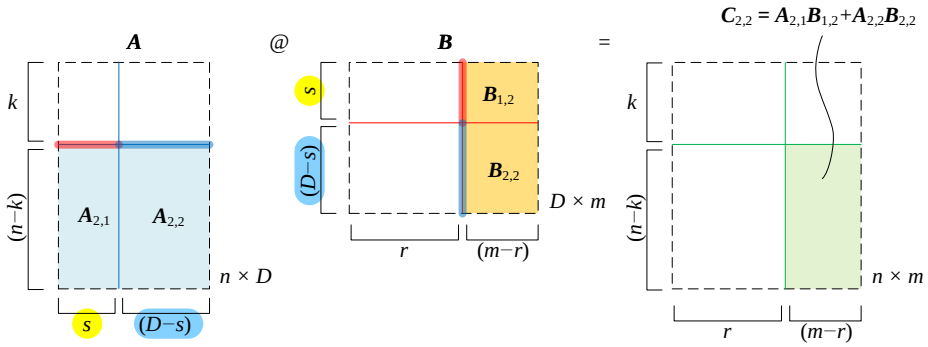


图 23. 计算 $C_{2,2}$

逐步分块

还有一个办法解释图 19 所示分块矩阵乘法——逐步分块。

首先将 $\boldsymbol{A}$ 左右分块，$\boldsymbol{B}$ 上下分块，$\boldsymbol{AB}$ 乘积的结果如 (34)，乘积 $\boldsymbol{AB}$ 结果写成 $\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{B}_1$ 和 $\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{B}_2$ 相加，具体如图 24 所示。

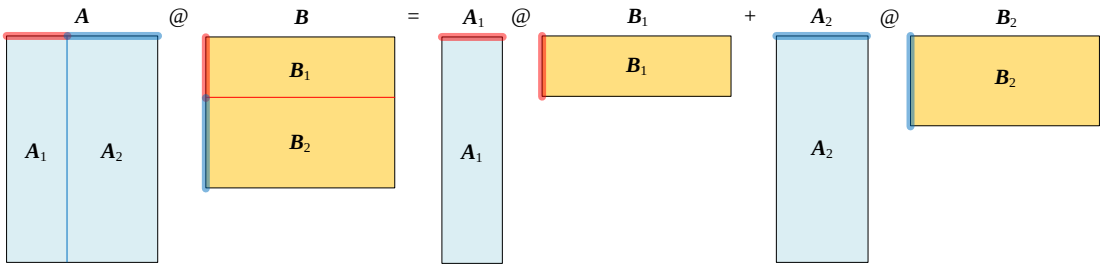


图 24. 首先将 $\boldsymbol{A}$ 左右分块，$\boldsymbol{B}$ 上下分块

然后再对 $\boldsymbol{A}_1$ 和 $\boldsymbol{A}_2$ 上下分块，$\boldsymbol{B}_1$ 和 $\boldsymbol{B}_2$ 左右分块：

$$\boldsymbol{A}_1=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{1,1}\\ \boldsymbol{A}_{2,1}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{A}_2=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{1,2}\\ \boldsymbol{A}_{2,2}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{B}_1=\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_{1,1} & \boldsymbol{B}_{1,2}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{B}_2=\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{B}_{2,2}\end{bmatrix} \tag{36}$$

如图 25 所示，$\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{B}_1$ 按如下方式计算得到：

$$\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{B}_1=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{1,1}\\ \boldsymbol{A}_{2,1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_{1,1} & \boldsymbol{B}_{1,2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{1,1}\boldsymbol{B}_{1,1} & \boldsymbol{A}_{1,1}\boldsymbol{B}_{1,2}\\ \boldsymbol{A}_{2,1}\boldsymbol{B}_{1,1} & \boldsymbol{A}_{2,1}\boldsymbol{B}_{1,2}\end{bmatrix} \tag{37}$$

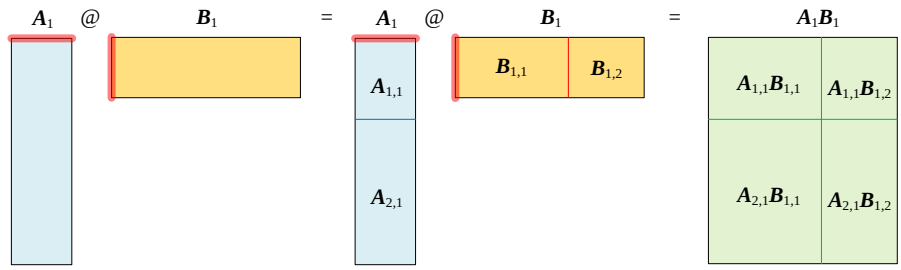


图 25. 计算 $\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{B}_1$

同理，如图 26 所示，计算 $\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{B}_2$：

$$\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{B}_2=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{1,2}\\ \boldsymbol{A}_{2,2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{B}_{2,2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{1,2}\boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{A}_{1,2}\boldsymbol{B}_{2,2}\\ \boldsymbol{A}_{2,2}\boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{A}_{2,2}\boldsymbol{B}_{2,2}\end{bmatrix} \tag{38}$$

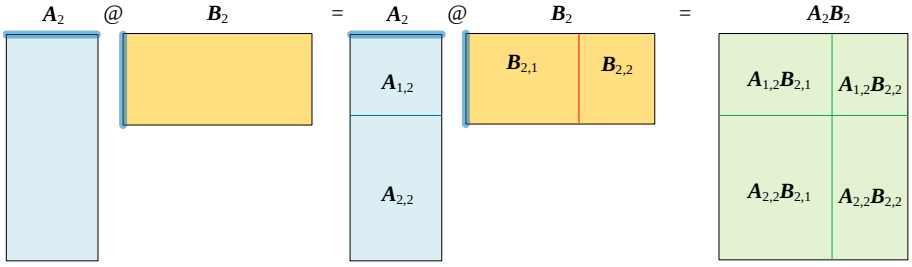


图 26. 计算 $\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{B}_2$

(37) 和 (38) 相加就可以获得 (35) 结果，即：

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{1,1}\boldsymbol{B}_{1,1} & \boldsymbol{A}_{1,1}\boldsymbol{B}_{1,2}\\ \boldsymbol{A}_{2,1}\boldsymbol{B}_{1,1} & \boldsymbol{A}_{2,1}\boldsymbol{B}_{1,2}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{1,2}\boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{A}_{1,2}\boldsymbol{B}_{2,2}\\ \boldsymbol{A}_{2,2}\boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{A}_{2,2}\boldsymbol{B}_{2,2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{1,1}\boldsymbol{B}_{1,1}+\boldsymbol{A}_{1,2}\boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{A}_{1,1}\boldsymbol{B}_{1,2}+\boldsymbol{A}_{1,2}\boldsymbol{B}_{2,2}\\ \boldsymbol{A}_{2,1}\boldsymbol{B}_{1,1}+\boldsymbol{A}_{2,2}\boldsymbol{B}_{2,1} & \boldsymbol{A}_{2,1}\boldsymbol{B}_{1,2}+\boldsymbol{A}_{2,2}\boldsymbol{B}_{2,2}\end{bmatrix} \tag{39}$$

实际上，这个思路便是矩阵乘法第二视角。

本节内容足见矩阵乘法的灵活性，以及矩阵乘法两个视角的重要性。本书第 11 章讲解 QR 分解、第 16 章讲解四种奇异值分解类型时都会用到分块矩阵乘法。

6.5 分块矩阵的逆

如图 27 所示，将一个方阵分割成四个子块矩阵 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$ 和 $\boldsymbol{D}$，其中 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{D}$ 为方阵。当原矩阵可逆时，原矩阵的逆可以通过子块矩阵运算得到：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{A} & \boldsymbol{B} \\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{D} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \left(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}\right)^{-1} & -\left(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}\right)^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}^{-1} \\ -\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}\left(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}\right)^{-1} & \boldsymbol{D}^{-1}+\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}\left(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}\right)^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}^{-1} \end{bmatrix} \tag{40}$$

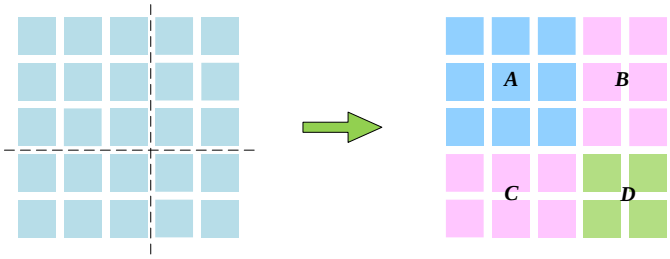


图 27. 分块矩阵求逆

令，

$$\boldsymbol{H} = \left(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}\right)^{-1} \tag{41}$$

(40) 分块矩阵的逆可以写成：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{A} & \boldsymbol{B} \\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{D} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{H} & -\boldsymbol{H}\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}^{-1} \\ -\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}\boldsymbol{H} & \boldsymbol{D}^{-1}+\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}\boldsymbol{H}\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}^{-1} \end{bmatrix} \tag{42}$$

当然，这个分块矩阵的逆还有其他表达方式，本节不一一赘述。

分块矩阵的逆将会用在协方差矩阵上，特别是在求解条件概率、多元线性回归时。本系列丛书《概率统计》一则会深入探讨这一话题。

6.6 克罗内克积：矩阵张量积

克罗内克积 (Kronecker product)，也叫矩阵张量积，是两个任意大小矩阵之间的运算，运算符为 ⊗。

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的形状为 $n \times D$，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的形状为 $p \times q$，那么 $\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B}$ 的形状为 $np \times Dq$，结果为：

$$\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,D} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,D} \end{bmatrix}\otimes\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix} a_{1,1}\boldsymbol{B} & a_{1,2}\boldsymbol{B} & \cdots & a_{1,D}\boldsymbol{B} \\ a_{2,1}\boldsymbol{B} & a_{2,2}\boldsymbol{B} & \cdots & a_{2,D}\boldsymbol{B} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1}\boldsymbol{B} & a_{n,2}\boldsymbol{B} & \cdots & a_{n,D}\boldsymbol{B} \end{bmatrix} \tag{43}$$

上式中每个 $a_{i,j}$ 可以看成是缩放系数。

比如两个 2 × 2 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的张量积为 4 × 4 矩阵：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}&=\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{2,1} & a_{2,2} \end{bmatrix}\otimes\begin{bmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} \\ b_{2,1} & b_{2,2} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} a_{1,1}\boldsymbol{B} & a_{1,2}\boldsymbol{B} \\ a_{2,1}\boldsymbol{B} & a_{2,2}\boldsymbol{B} \end{bmatrix} \\ &=\begin{bmatrix} a_{1,1}\begin{bmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} \\ b_{2,1} & b_{2,2} \end{bmatrix} & a_{1,2}\begin{bmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} \\ b_{2,1} & b_{2,2} \end{bmatrix} \\ a_{2,1}\begin{bmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} \\ b_{2,1} & b_{2,2} \end{bmatrix} & a_{2,2}\begin{bmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} \\ b_{2,1} & b_{2,2} \end{bmatrix} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} a_{1,1}b_{1,1} & a_{1,1}b_{1,2} & a_{1,2}b_{1,1} & a_{1,2}b_{1,2} \\ a_{1,1}b_{2,1} & a_{1,1}b_{2,2} & a_{1,2}b_{2,1} & a_{1,2}b_{2,2} \\ a_{2,1}b_{1,1} & a_{2,1}b_{1,2} & a_{2,2}b_{1,1} & a_{2,2}b_{1,2} \\ a_{2,1}b_{2,1} & a_{2,1}b_{2,2} & a_{2,2}b_{2,1} & a_{2,2}b_{2,2} \end{bmatrix}\end{aligned} \tag{44}$$

`numpy.kron()` 可以用来计算矩阵张量积。

克罗内克积讲究顺序，一般情况 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}\neq\boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{A}$。

请大家注意以下有关克罗内克积性质：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\otimes(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{C})&=\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{C} \\ (\boldsymbol{B}+\boldsymbol{C})\otimes\boldsymbol{A}&=\boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{A}+\boldsymbol{C}\otimes\boldsymbol{A} \\ (k\boldsymbol{A})\otimes\boldsymbol{B}&=\boldsymbol{A}\otimes(k\boldsymbol{B})=k(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}) \\ (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})\otimes\boldsymbol{C}&=\boldsymbol{A}\otimes(\boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{C}) \\ \boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{0}&=\boldsymbol{0}\otimes\boldsymbol{A}=\boldsymbol{0}\end{aligned} \tag{45}$$

和向量张量积的关系

克罗内克积相当于向量张量积的推广；反过来，向量张量积也可以看做克罗内克积的特例。

但两者稍有不同，为了方便计算，两个 2 × 1 列向量的张量积定义为 $\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$，也就是：

$$\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}\otimes\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix} a_1\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}} \\ a_2\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \tag{46}$$

请大家注意 (46) 中的转置运算。而 (43) 中不存在转置。

举个例子

$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 分别为：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 0.7 & -0.4 \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{B}=\begin{bmatrix} 0.5 & -0.6 \\ -0.8 & 0.3 \end{bmatrix} \tag{47}$$

$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的张量积 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}$ 为：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B} &= \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 0.7 & -0.4 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0.5 & -0.6 \\ -0.8 & 0.3 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -1\times\begin{bmatrix} 0.5 & -0.6 \\ -0.8 & 0.3 \end{bmatrix} & 1\times\begin{bmatrix} 0.5 & -0.6 \\ -0.8 & 0.3 \end{bmatrix} \\ 0.7\times\begin{bmatrix} 0.5 & -0.6 \\ -0.8 & 0.3 \end{bmatrix} & -0.4\times\begin{bmatrix} 0.5 & -0.6 \\ -0.8 & 0.3 \end{bmatrix} \end{bmatrix}\end{aligned} \tag{48}$$

图 28 所示为上述计算的热图。

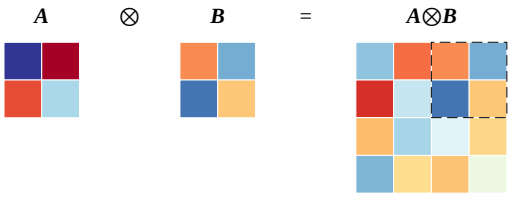


图 28. $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的张量积 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}$

再给出第三个 2 × 2 矩阵 $\boldsymbol{C}$：

$$\boldsymbol{C} = \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 0.7 & -0.4 \end{bmatrix} \tag{49}$$

在 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{C}$ 的张量积的运算如图 29 所示。也请大家尝试先计算 $\boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{C}$，再计算 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{C}$。

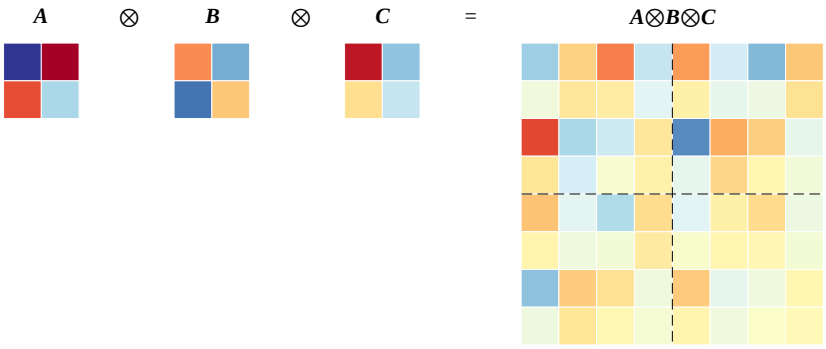
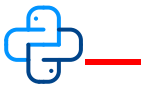
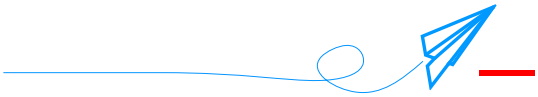


图 29. $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$ 的张量积 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{C}$



Bk4_Ch6_03.py 计算张量积并绘制图 28。请大家自行绘制图 29。



虽然分块矩阵乘法运算让人看的眼花缭乱；但是，万变不离其宗，大家关键要把握的是矩阵乘法规则，这是根本。其次，同等重要的就是，我们在本书中反复强调的——矩阵乘法两个视角。

此外，大家注意矩阵乘法的“合成”，也就是分块矩阵乘法的逆向运算。掌握这个逆向思维方式有助于理解和简化很多运算，大家将会在本书后文数据投影中看到大量实例。

7 Vector Space 向量空间

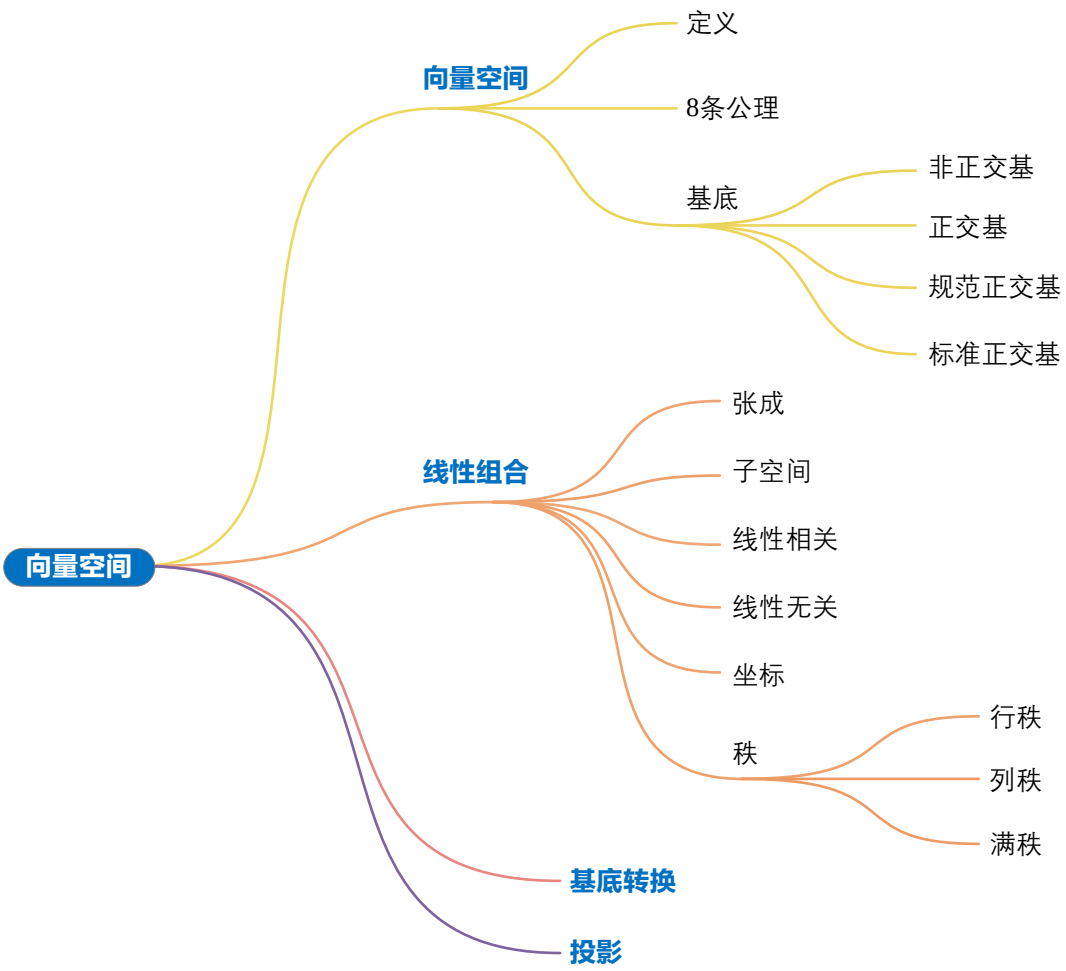
用三原色给向量空间涂颜色

数学，是神灵创造宇宙的语言。

Mathematics is the language in which God has written the universe.

—— 伽利略·伽利莱 (Galilei Galileo) | 意大利物理学家、数学家及哲学家 | 1564 ~ 1642

◀ `numpy.linalg.matrix_rank()` 计算矩阵的秩



7.1 向量空间：从直角坐标系说起

从笛卡尔坐标系说起

向量空间 (vector space) 是笛卡尔坐标系的自然延伸。图 1 给出二维和三维直角坐标系，在向量空间中，它俩就是最基本的欧几里得向量空间 $\mathbb{R}^n$ ($n = 2, 3$)。

⚠ 注意，本节很长，可能有点枯燥！但是，请坚持看完这一节，色彩斑斓的内容在本节之后。

在这两个向量空间中，我们可以完成向量加减、标量乘法等一系列运算。

在平面 $\mathbb{R}^2$ 上，坐标点 (x_1, x_2) 无死角全面覆盖平面上所有点。这就是说，从向量角度来讲，$x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2$ 代表平面 $\mathbb{R}^2$ 上所有的向量。

类似地，在三维空间 $\mathbb{R}^3$ 中，$x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2 + x_3\boldsymbol{e}_3$ 代表三维空间中所有的向量。

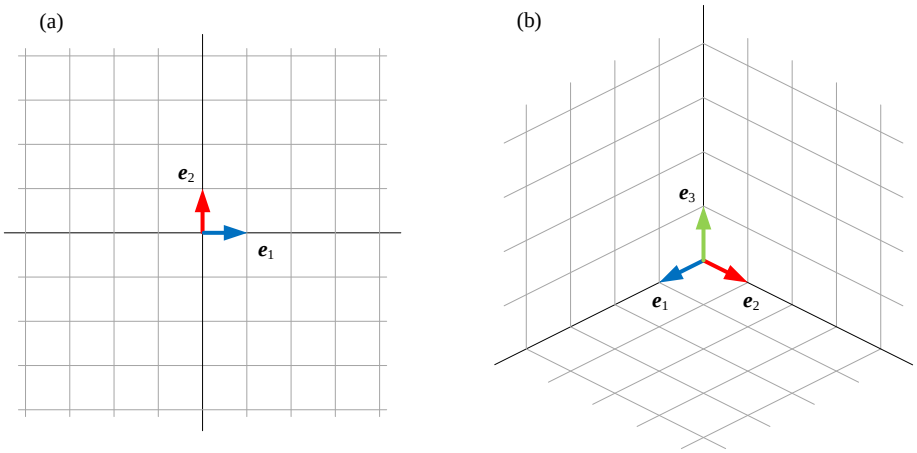


图 1. 二维和三维直角坐标系

向量空间

我们下面看一下向量空间的确切定义。

给定域 F，F 上的向量空间 V 是一个集合。集合 V 非空，且对于加法和标量乘法运算封闭。这意味着，对于 V 中的每一对元素 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$，可以唯一对应 V 中的一个元素 $\boldsymbol{u} + \boldsymbol{v}$；而且，对于 V 中的每一个元素 $\boldsymbol{v}$ 和任意一个标量 k，可以唯一对应 V 中元素 $k\boldsymbol{v}$。

如果 V 连同上述加法运算和标量乘法运算满足如下公理，则称 V 为向量空间。

公理 1：**向量加法交换律** (commutativity of vector addition)；对于 V 中任何 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$，满足：

$$\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}+\boldsymbol{u} \tag{1}$$

公理 2：**向量加法结合律** (associativity of vector addition)；对于 V 中任何 $\boldsymbol{u}$、$\boldsymbol{v}$ 和 $\boldsymbol{w}$，满足：

$$(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v})+\boldsymbol{w}=\boldsymbol{u}+(\boldsymbol{v}+\boldsymbol{w}) \tag{2}$$

公理 3：**向量加法恒等元** (addictive identity)；V 中存在零向量 $\boldsymbol{0}$，使得对于任意 V 中元素 $\boldsymbol{v}$，下式成立：

$$\boldsymbol{v}+\boldsymbol{0}=\boldsymbol{v} \tag{3}$$

公理 4：**存在向量加法逆元素** (existence of additive inverse)；对于每一个 V 中元素 $\boldsymbol{v}$，选在 V 中的另外一个元素$-\boldsymbol{v}$，满足：

$$\boldsymbol{v}+(-\boldsymbol{v})=\boldsymbol{0} \tag{4}$$

公理 5：**标量乘法对向量加法的分配率** (distributivity of vector sums)；对于任意标量 k，V 中元素 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 满足：

$$k(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v})=k\boldsymbol{u}+k\boldsymbol{v} \tag{5}$$

公理 6：**标量乘法对域加法的分配率** (distributivity of scalar sum)；对于任意标量 k 和 t，以及 V 中任意元素 $\boldsymbol{v}$，满足：

$$(k+t)\boldsymbol{v}=k\boldsymbol{v}+t\boldsymbol{v} \tag{6}$$

公理 7：**标量乘法与标量的域乘法相容** (associativity of scalar multiplication)；对于任意标量 k 和 t，以及 V 中任意元素 $\boldsymbol{v}$，满足：

$$(kt)\boldsymbol{v}=k(t\boldsymbol{v}) \tag{7}$$

公理 8：**标量乘法的单位元** (scalar multiplication identity)；V 中任意元素 $\boldsymbol{v}$，满足：

$$1\cdot\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v} \tag{8}$$

注意，以上公理不需要大家格外记忆！

线性组合

令 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ … $\boldsymbol{v}_D$ 为向量空间 V 中的向量。下式被称作向量 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ … $\boldsymbol{v}_D$ 的**线性组合** (linear combination)。

$$\alpha_1\boldsymbol{v}_1+\alpha_2\boldsymbol{v}_2+\cdots+\alpha_D\boldsymbol{v}_D \tag{9}$$

其中，α_1、α_2 … α_D 均为实数。图 2 可视化 (9) 对应的线性组合过程。

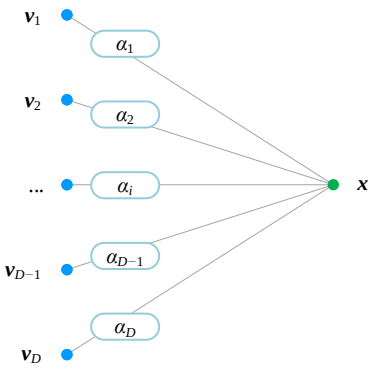


图 2. 线性组合

张成

v_1、v_2 … v_D所有线性组合的集合称作 v_1、v_2 … v_D 的**张成** (span)，记做 span(v_1, v_2 … v_D)。

线性相关和线性无关

给定向量组 $V = [v_1, v_2, ..., v_D]$，如果存在不全为零 α_1、α_2、...、α_D 使得下式成立。

$$\alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \alpha_3 v_3 + ... + \alpha_D v_D = 0 \tag{10}$$

则称向量组 V **线性相关** (linear dependence，形容词组为 linearly dependent)；否则，V **线性无关** (linear independence，形容词为 linearly independent)。

图 3 在平面上解释了线性相关和线性无关。

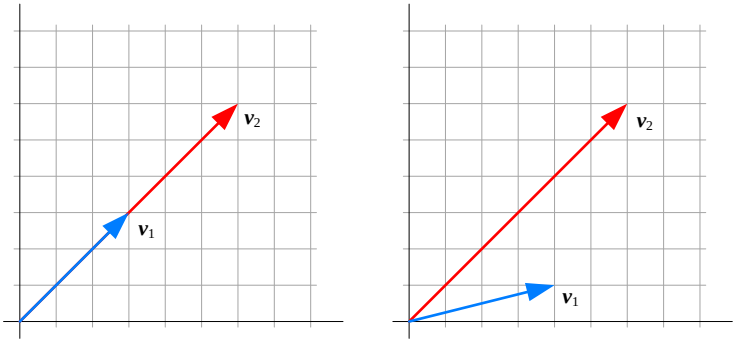


图 3. 平面上解释线性相关与线性无关

极大无关组、秩

一个矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的**列秩** (column rank) 是 $\boldsymbol{X}$ 的线性无关的列向量数量最大值。类似地，**行秩** (row rank) 是 $\boldsymbol{X}$ 的线性无关的行向量数量最大值。

以列秩为例，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 可以写成一组列向量：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \tag{11}$$

对于 $V = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D\}$，如果这些列向量线性相关，就总可以找出一个冗余向量，把它剔除。如此往复，不断剔除冗余向量，直到不再有冗余向量为止，得到 $S = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_r\}$ 线性无关。则称 $S = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_r\}$ 为 $F = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D\}$ 的**极大线性无关组** (maximal linearly independent subset)。

⚠ 注意，极大线性无关组不唯一。

极大线性无关组的元素数量 r 为 $V = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D\}$ 的秩，也称为 V 的维数或维度。

矩阵的列秩和行秩总是相等的，因此就叫它们为矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的秩 (rank)，记做 rank($\boldsymbol{X}$)。rank($\boldsymbol{X}$) 小于等于 min(D, n)，即 rank($\boldsymbol{X}$) ⩽ min(D, n)；对于“细高型”数据矩阵，rank($\boldsymbol{X}$) ⩽ D。

图 4 所示为当 rank($\boldsymbol{X}$) 的秩取不同值时，span($\boldsymbol{X}$) 所代表的空间。当然，向量空间沿着子图中给定的直线、平面、空间无限延伸。

特别地，若矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的列数为 D，当 rank($\boldsymbol{X}$) = D 时，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 列满秩，列向量 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D$ 线性无关。

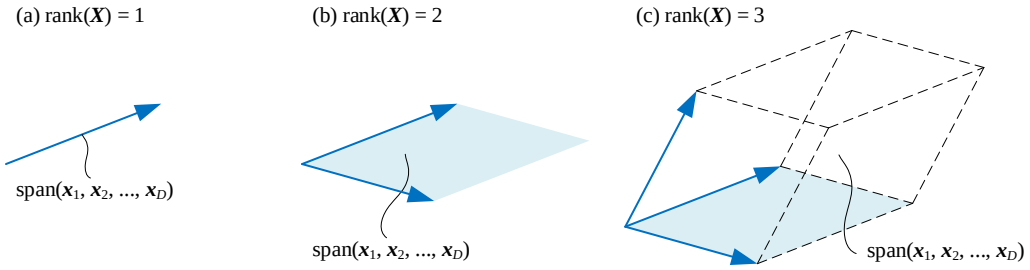


图 4. rank($\boldsymbol{X}$) 的秩和 span($\boldsymbol{X}$) 的空间

此外，不要被矩阵的形状迷惑，如下四个矩阵的秩都是 1：

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}_{10\times 1}, \quad \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix}_{10\times 4}, \quad \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix} \tag{12}$$

`numpy.linalg.matrix_rank()` 计算矩阵的秩。

如果乘积 $\boldsymbol{AB}$ 存在，$\boldsymbol{AB}$ 的秩满足：

$$\text{rank}(\boldsymbol{AB}) \leq \min\left(\text{rank}(\boldsymbol{A}), \text{rank}(\boldsymbol{B})\right) \tag{13}$$

⚠ 请大家注意，仅当方阵 $\boldsymbol{A}_{D\times D}$ 满秩，即 rank($\boldsymbol{A}$) = D，$\boldsymbol{A}$ 可逆。

对于实数矩阵 $\boldsymbol{X}$，以下几个矩阵的秩相等：

$$\text{rank}\left(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\right) = \text{rank}\left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^T\right) = \text{rank}\left(\boldsymbol{X}\right) = \text{rank}\left(\boldsymbol{X}^T\right) \tag{14}$$

基底、基底向量

一个向量空间 V 的**基底向量** (basis vector) 指 V 中线性无关的 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ ... $\boldsymbol{v}_D$，它们**张成** (span) 向量空间 V，即 V = span($\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_2$, ... , $\boldsymbol{v}_D$)。

而 [$\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_2$, ... , $\boldsymbol{v}_D$] 叫做 $\boldsymbol{V}$ 的**基底** (vector basis 或 basis)。向量空间 V 中的每一个向量都可以唯一地表示成基底 [$\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_2$, ... , $\boldsymbol{v}_D$] 中基底向量的线性组合。

白话说，基底就像是地图上的经度和纬度，起到定位作用。有了经纬度之后，地面上的任意一点都有唯一坐标。

这就是本节最开始说的，{$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$} 就是平面 $\mathbb{R}^2$ 一组基底，平面 $\mathbb{R}^2$ 上每一个向量都可以唯一地表达成 $x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2$。而 ($x_1$, x_2) 就是在基底 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$] 下的坐标。

⚠ 注意区别{$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$} 和 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$]。本书会用 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$] 表达有序基，也就是向量基底元素按“先 $\boldsymbol{e}_1$ 后 $\boldsymbol{e}_2$”顺序排列。而 {$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$} 代表集合，集合中基底向量不存在顺序。此外，有序基 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$] 构造得到矩阵 $\boldsymbol{E}$。不做特殊说明，本书中基底都默认是有序基。

维数

向量空间的**维数** (dimension) 是基底中基底向量的个数，本书采用的维数记号为 dim()。

显然，零向量 $\boldsymbol{0}$ 的张成的空间 span($\boldsymbol{0}$) 维数为 0。

图 1 (a) 中 $\mathbb{R}^2$ = span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$)，即 $\mathbb{R}^2$ 维数 dim($\mathbb{R}^2$) = 2，而 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$] 的秩也是 2。

图 1 (b) 中 $\mathbb{R}^3$ = span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$)，即 $\mathbb{R}^3$ 维数 dim($\mathbb{R}^3$) = 3，[$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$] 的秩为 3。

下面，为了理解维数这个概念，我们多看几组例子。

图 5 所示为 6 个维数为 1 的向量空间。从几何角度来看，这些向量空间都是直线。请大家特别注意，这些直线都经过原点 $\boldsymbol{0}$。也就是说 $\boldsymbol{0}$ 分别在这些向量空间中。

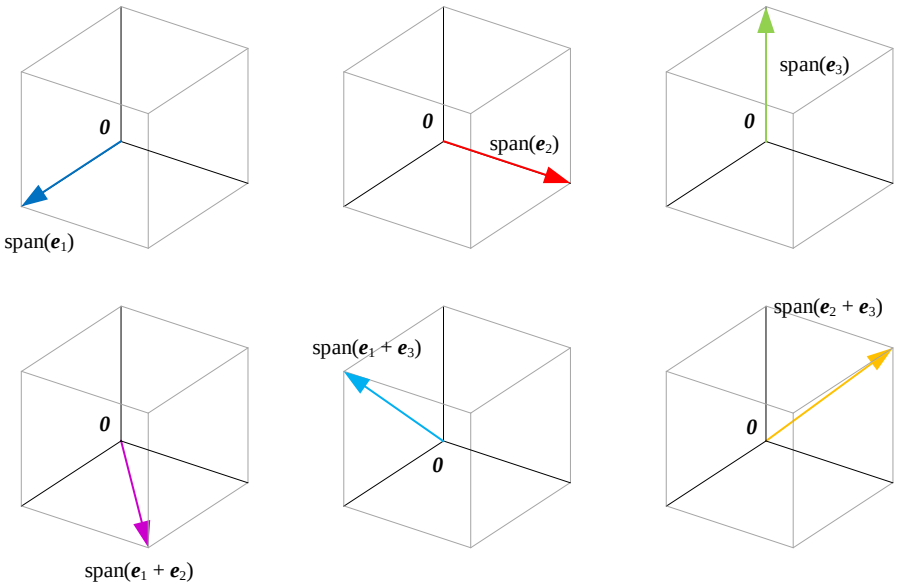


图 5. 维数为 1 的向量空间

图 6 所示为线性无关的向量张起的维数为 2 的向量空间。也就是说，图 6 每幅子图中的两个向量分别是该空间的基底向量。再次强调，基底中的基底向量必须线性无关。

从集合角度来看，$\text{span}(\boldsymbol{e}_1) \subset \text{span}(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2)$，$\text{span}(\boldsymbol{e}_2) \subset \text{span}(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2)$。

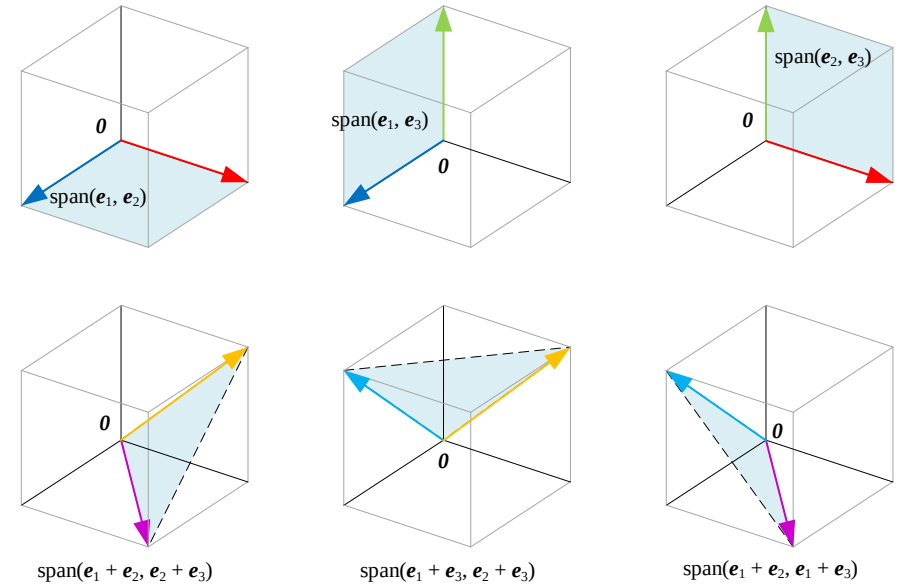


图 6. 维数为 2 的向量空间，张成空间的基底向量线性无关

图 7 所示为线性相关的向量张起的维数为 2 的空间。

举个例子，span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$) 张起的空间维数为 2，显然 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$] 中向量线性相关，因此 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$] 不能叫做基底。进一步分析可以知道 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$] 的秩为 2。

基底中的基底向量必须线性无关。剔除掉冗余向量后，[$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$]、[$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$]、[$\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$] 三组中的任意一组向量都线性无关，因此它们三者都可以选做 span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$) 空间的基底。

不同的是，[$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$] 中基底向量正交，但是 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$]、[$\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$] 这两个基底中的向量并非正交。也就是构成向量空间的基底向量可以正交，也可以非正交，这是下文马上要探讨的内容。

相信大家已经很清楚，基底中的向量之间必须线性无关，而用 span() 张成空间的向量可以线性相关，比如 span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$) = span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$) = span ($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_1 + 2\boldsymbol{e}_2$, $2\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$)。在基底 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$] 中，任意一点的坐标唯一。但是，在 span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$) 中，任意一点的坐标不定。

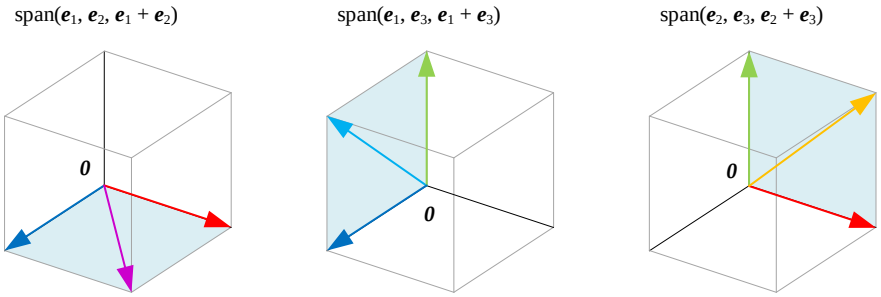


图 7. 维数为 2 的向量空间，张成空间的向量线性相关

图 8 所示为线性无关的向量张起维数为 3 的空间。注意这些空间都和 $\mathbb{R}^3$ 等价。

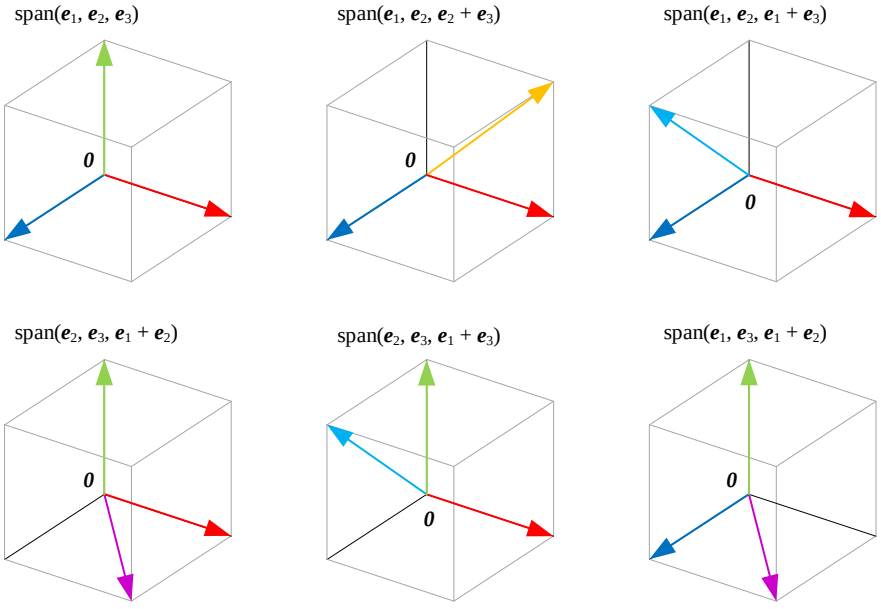


图 8. 维数为 3 的向量空间

过原点、仿射空间

“过原点”这一点对于向量空间极为重要。图 5 所示的几个一维空间 (直线) 显然过原点；也就是说，原点 $\boldsymbol{0}$ 在向量空间中。几何角度来看，图 6、图 7 所示的维数为 2 的空间是平面，这些平面都过原点。原点 $\boldsymbol{0}$ 也在图 8 所示的维数为 3 的空间中。

向量空间平移后得到的空间叫做**仿射空间** (affine space)，如图 9 所示的三个例子。图 9 所示的三个仿射空间显然都不过原点。下一章，我们将介绍几何变换，大家会接触到**仿射变换** (affine transformation)。

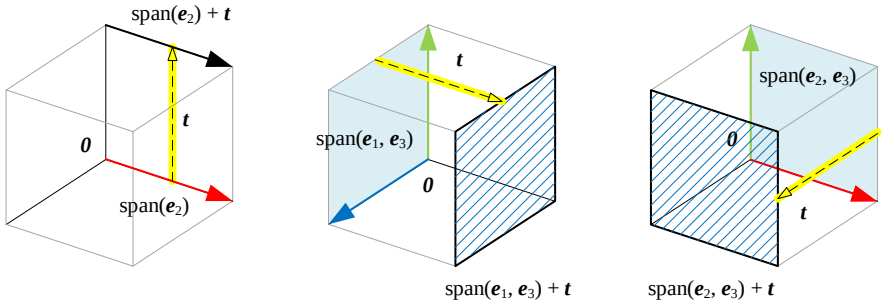


图 9. 向量空间平移得到仿射空间

基底选择并不唯一

$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 只是平面 $\mathbb{R}^2$ 无数基底中的一个。大家还记得本书前文给出图 10 的这幅图吗？

$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$、$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$、$[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 都是平面 $\mathbb{R}^2$ 基底！也就是说 $\mathbb{R}^2 = \text{span}(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2) = \text{span}(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2) = \text{span}(\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2)$。

如图 10 所示，平面 $\mathbb{R}^2$ 上的向量 $\boldsymbol{x}$ 在 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$、$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$、$[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 这三组基底中都有各自的唯一坐标。

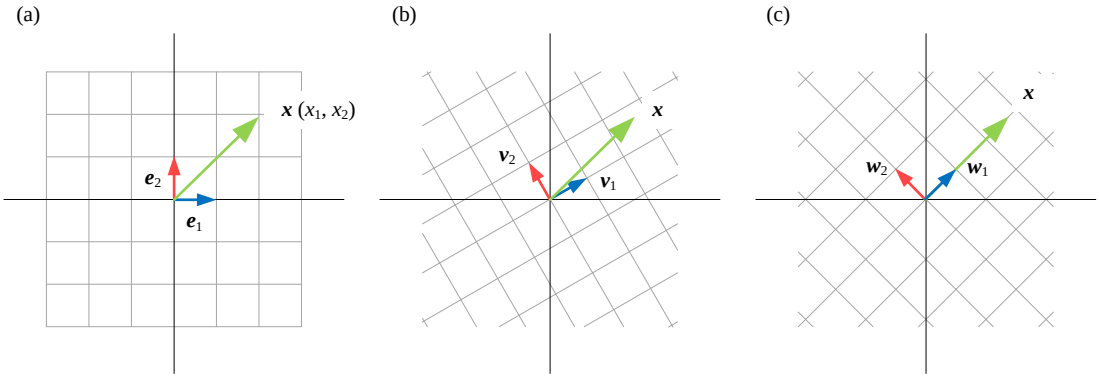


图 10. 向量 $\boldsymbol{x}$ 在三个不同的正交直角坐标系中位置

正交基、规范正交基、标准正交基

大家可能早已注意到图 10 中，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$、$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$、$[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 的每个基底向量都是单位向量，即 $\|\boldsymbol{e}_1\| = \|\boldsymbol{e}_2\| = \|\boldsymbol{v}_1\| = \|\boldsymbol{v}_2\| = \|\boldsymbol{w}_1\| = \|\boldsymbol{w}_2\| = 1$。

且每组基底内基底向量相互正交，即 $\boldsymbol{e}_1$ 垂直 $\boldsymbol{e}_2$，$\boldsymbol{v}_1$ 垂直 $\boldsymbol{v}_2$，$\boldsymbol{w}_1$ 垂直 $\boldsymbol{w}_2$。本书中，基底中基底向量若两两正交，该基底叫**正交基** (orthogonal basis)。

如果正交基中每个基底向量的模都为 1，则称该基底为**规范正交基** (orthonormal basis)。图 10 中 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$、$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$、$[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 三组基底都是规范正交基。

张成平面 $\mathbb{R}^2$ 的规范正交基有无数组。它们之间存在旋转关系，也就是说 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 绕原点旋转一定角度就可以得到 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 或 $[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$。

更特殊的是，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 叫做平面 $\mathbb{R}^2$ 的**标准正交基** (standard orthonormal basis)，或称**标准基** (standard basis)。“标准”这个字眼给了 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$，是因为用这个基底表示平面 $\mathbb{R}^2$ 最为自然。$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 也是平面直角坐标系最普遍的参考系。

显然，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3]$ 是 $\mathbb{R}^3$ 的标准正交基，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_D]$ 是 $\mathbb{R}^D$ 的标准正交基。

非正交基

平面 $\mathbb{R}^2$ 上，任何两个不平行的非零向量都可以构成平面上的一个基底。如果基底中的基底向量之间两两并非都正交，这样的基底叫做**非正交基** (non-orthogonal basis)。

图 11 所示为两组非正交基底，它们也都张起 $\mathbb{R}^2$ 平面，即 $\mathbb{R}^2 = \text{span}(\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2) = \text{span}(\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2)$。

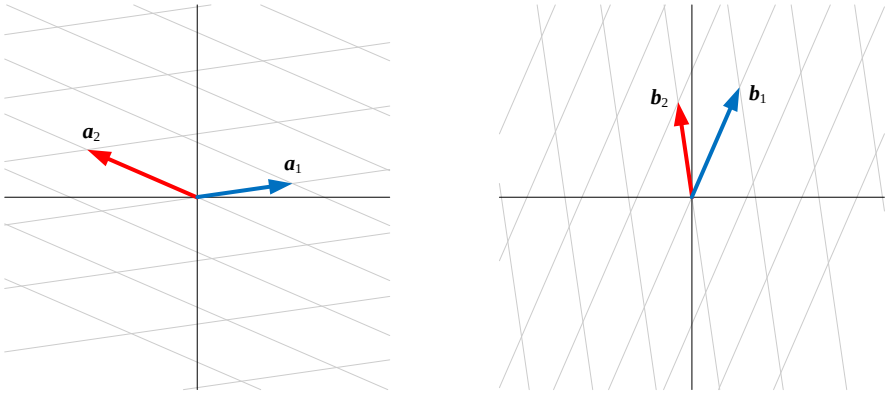


图 11. 二维平面的两个基底，非正交

图 12 总结了几种基底之间的关系。

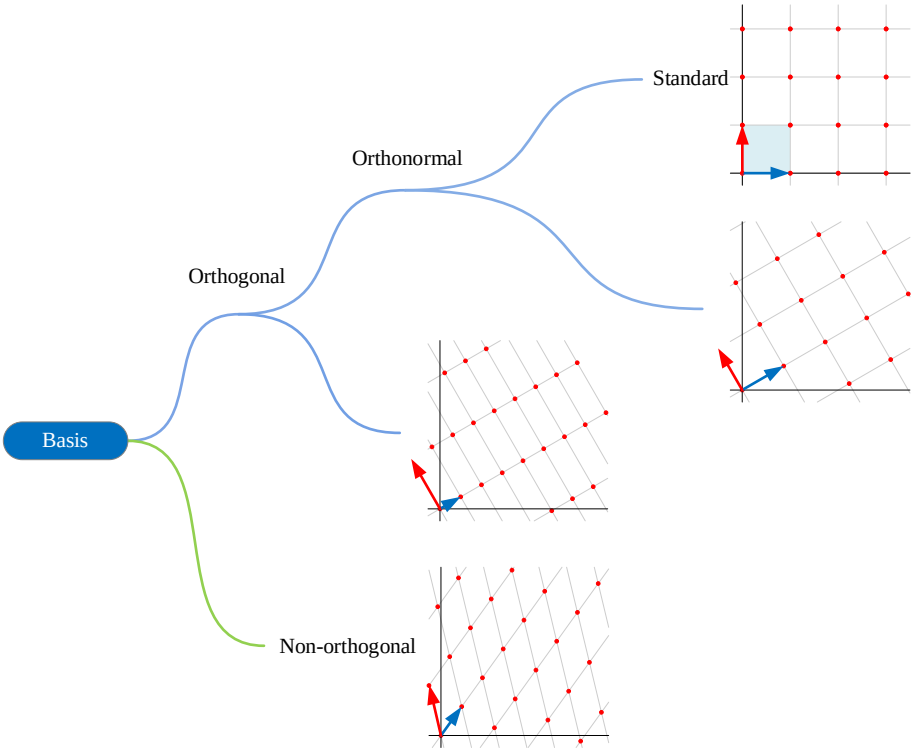


图 12. 几种基底之间的关系

基底转换

基底转换 (change of basis) 完成不同基底之间变换，而标准正交基是常用的桥梁。

举个例子，如图 13 所示，给定如下平面直角坐标系中的一个向量 $\boldsymbol{a}$，将其写成 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 的线性组合：

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} = 2\boldsymbol{e}_1 + 2\boldsymbol{e}_2 \tag{15}$$

(2, 2) 就是向量 $\boldsymbol{a}$ 在基底 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 中的坐标。

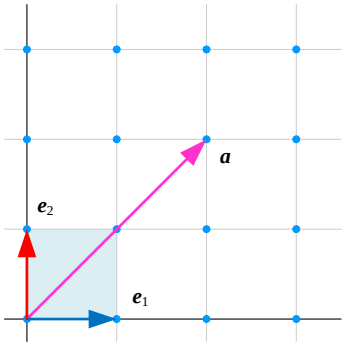


图 13. 平面直角坐标系中的一个向量 $\boldsymbol{a}$

图 14 给出的是不同基底中表达的同一个向量 $\boldsymbol{a}$。

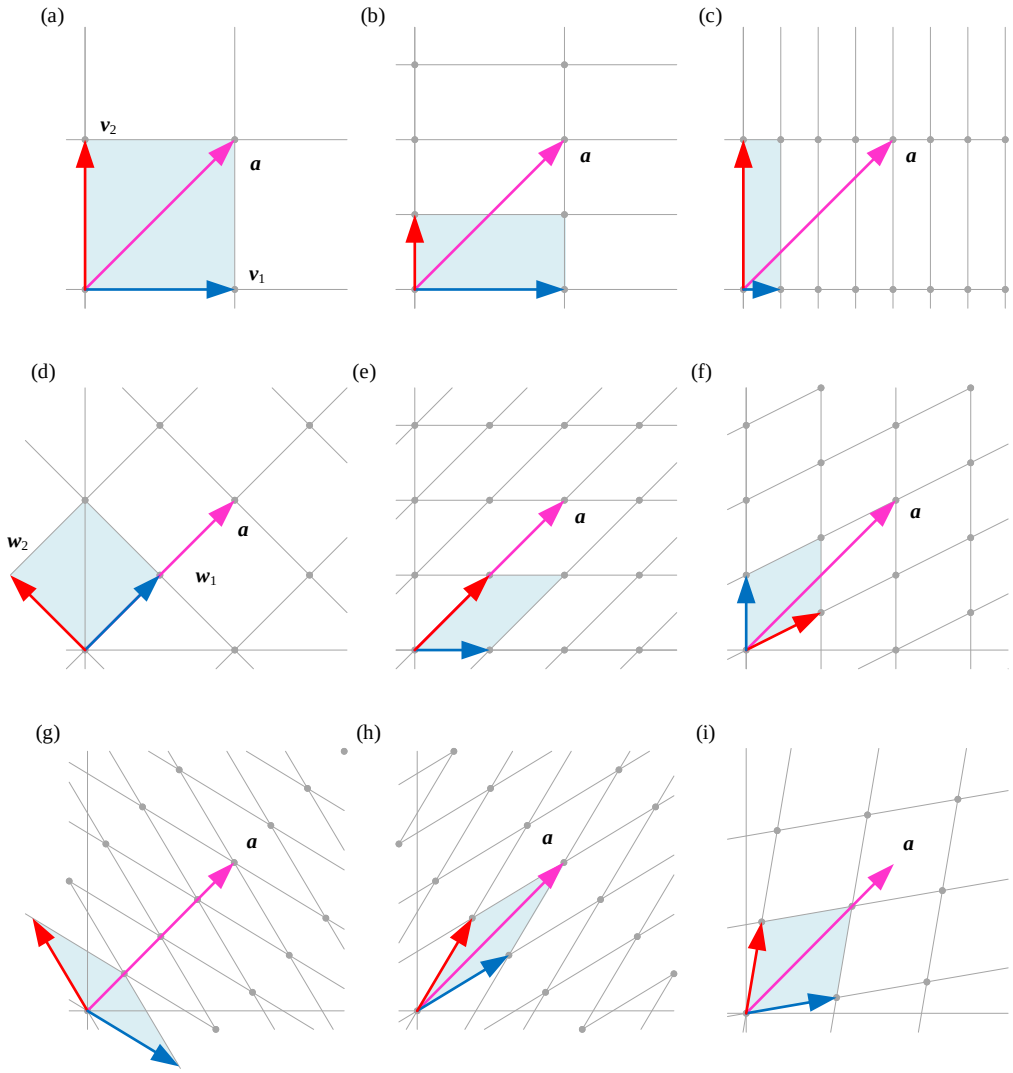


图 14. 不同基底表达同一个向量 $\boldsymbol{a}$

在图 13 这个正交标准坐标系中，任意一个向量 $\boldsymbol{x}$ 可以写成：

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{E}\boldsymbol{x} \tag{16}$$

其中，(x_1, x_2) 代表向量 $\boldsymbol{x}$ 在基底 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 中的坐标值。

假设在平面上，另外一组基底为 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$，而在这个基底中向量 $\boldsymbol{x}$ 的坐标为 (z_1, z_2)，$\boldsymbol{x}$ 可以写成 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$ 的线性组合：

$$\boldsymbol{x} = z_1\boldsymbol{v}_1 + z_2\boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}z_1 \\ z_2\end{bmatrix} \tag{17}$$

令，

$$\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2\end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{z} = \begin{bmatrix}z_1 \\ z_2\end{bmatrix} \tag{18}$$

(17) 可以写成：

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{z} \tag{19}$$

$\boldsymbol{z} = [z_1, z_2]^T$ 可以写成：

$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{x} \tag{20}$$

上式中，2×2 矩阵 $\boldsymbol{V}$ 满秩，因此 $\boldsymbol{V}$ 可逆。

以图 14 (a) 为例，$\boldsymbol{V}$ 为：

$$\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}2 & 0 \\ 0 & 2\end{bmatrix} \tag{21}$$

向量 $\boldsymbol{a}$ 在图 14 (a) $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 这个基底下的坐标为：

$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix}2 & 0 \\ 0 & 2\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}2 \\ 2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 \\ 1\end{bmatrix} \tag{22}$$

再举个例子，图 14 (d) 中 $\boldsymbol{W} = [\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 具体数值为：

$$\boldsymbol{W} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{w}_1 & \boldsymbol{w}_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & -1 \\ 1 & 1\end{bmatrix} \tag{23}$$

向量 $\boldsymbol{x}$ 在基底 $[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 可以写成：

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{y} \tag{24}$$

其中，$\boldsymbol{y}$ 为向量 $\boldsymbol{x}$ 在 $[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 中坐标。

矩阵 $\boldsymbol{W}$ 也可逆，通过下式计算得到向量 $\boldsymbol{x}$ 在图 14 (d) $[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 基底中的坐标：

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{W}^{-1}\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix}1 & -1 \\ 1 & 1\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}2 \\ 2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}2 \\ 0\end{bmatrix} \tag{25}$$

联立 (19) 和 (24)，得到：

$$\boldsymbol{V}\boldsymbol{z} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{y} \tag{26}$$

因此，从坐标 $\boldsymbol{z}$ 到坐标 $\boldsymbol{y}$ 的转换，可以通过下式完成：

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{W}^{-1}\boldsymbol{V}\boldsymbol{z} \tag{27}$$

代入具体值，得到：

$$\underbrace{\begin{bmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{z}} = \underbrace{\begin{bmatrix}0.5 & 0.5\\ -0.5 & 0.5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{y}} = \begin{bmatrix}2\\ 0\end{bmatrix} \tag{28}$$

我们用 Streamlit 制作了一个应用，绘制图 14 不同“平行且等距网格”。大家可以改变矩阵 $\boldsymbol{A}$ 元素值，并让 $\boldsymbol{A}$ 作用于 $\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$，即 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{a}_2$。$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 构造的是“方格”，而 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 构造的就是“平行且等距网格”。请大家参考 Streamlit_Bk4_Ch7_01.py。

回顾“猪引发的投影问题”

本系列丛书《数学要素》鸡兔同笼三步曲讲过向量向一个平面投影的例子。

如图 15 所示，农夫的需求 $\boldsymbol{y}$ 是 10 只兔、10 只鸡、5 只猪。$\boldsymbol{w}_1$ 代表套餐 A —— 3 鸡 1 兔；$\boldsymbol{w}_2$ 代表套餐 B —— 1 鸡 2 兔。$\boldsymbol{w}_1$ 和 $\boldsymbol{w}_2$ 张起 A-B 套餐”平面为 $H = \text{span}(\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2)$。而 $[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 便是 H 的基底。请大家自行验证基底 $[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 为非正交基。

图 15 中，$\boldsymbol{y}$ 向 H 投影结果为向量 $\boldsymbol{a}$。

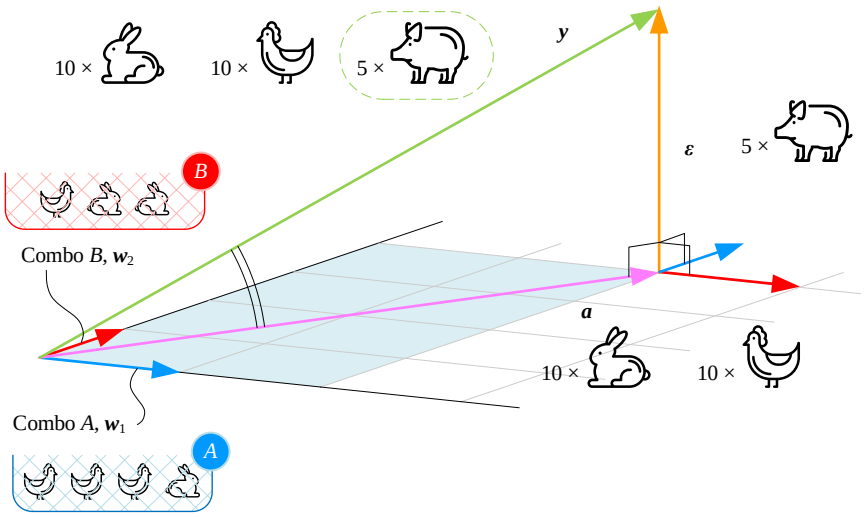


图 15. 农夫的需求和小贩提供的“A-B 套餐”平面存在 5 只猪的距离，来自本系列丛书《数学要素》

在二维平面 H 内，$\boldsymbol{a}$ 可以写成 $\boldsymbol{w}_1$ 和 $\boldsymbol{w}_2$ 的线性组合：

$$\boldsymbol{a} = \alpha_1 \boldsymbol{w}_1 + \alpha_2 \boldsymbol{w}_2 \tag{29}$$

(α_1, α_2) 则是 $\boldsymbol{a}$ 在基底 $[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 中的坐标。显然，$\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{w}_1$、$\boldsymbol{w}_2$ 线性相关。

$\boldsymbol{y}$ 明显在平面 H 之外，不能用 $\boldsymbol{w}_1$、$\boldsymbol{w}_2$ 线性组合表达，从而 $\boldsymbol{y}$、$\boldsymbol{w}_1$、$\boldsymbol{w}_2$ 线性无关。

$\boldsymbol{y}$ 中不能被 $\boldsymbol{w}_1$ 和 $\boldsymbol{w}_2$ 表达成分为 $\boldsymbol{y} - \boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{y} - \boldsymbol{a}$ 垂直于 H 平面。这一思路可以用来解释线性回归**最小二乘法** (ordinary least square, OLS)。

读完这个“巨长无比”的一节后，如果大家对于向量空间的相关概念还是云里雾里，不要怕。下面我们给这个空间涂个颜色，来进一步帮助大家理解！

7.2 给向量空间涂颜色：RGB 色卡

向量空间的“空间”二字赋予这个线性代数概念更多的可视化的潜力。本节开始就试图给向量空间涂“颜色”，让大家从色彩角度来理解向量空间。

如图 16 所示，**三原色光模式** (RGB color mode) 将**红** (Red)、**绿** (Green)、**蓝** (Blue) 三原色的色光以不同的比例叠加合成产生各种色彩光。

强调一下，红、绿、蓝不是调色盘的涂料。RGB 中，红、绿、蓝均匀调色得到白色；而在调色盘中，红、绿、蓝三色颜料均匀调色得到黑色。

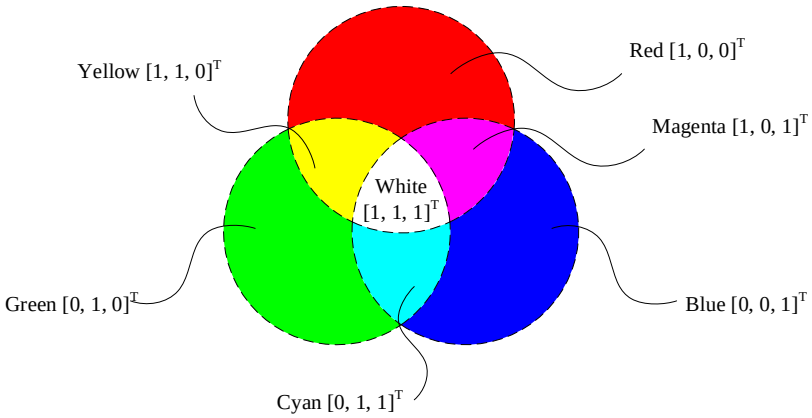


图 16. 三原色模型

如图 17 所示，在三原色模型这个空间中，任意一个颜色可以视作基底 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3]$ 中三个基底向量构成线性组合：

$$\alpha_1 \boldsymbol{e}_1 + \alpha_2 \boldsymbol{e}_2 + \alpha_3 \boldsymbol{e}_3 \tag{30}$$

其中，α_1、α_2、α_3 取值范围都是 $[0, 1]$。

$\boldsymbol{e}_1$代表红色，$\boldsymbol{e}_2$代表绿色，$\boldsymbol{e}_3$代表蓝色：

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{31}$$

注意，RGB 三原色可以用 8 进制表示，每个颜色分量为 0 ~ 255 之间整数。此外，RGB 也可以十六进制数来表达，比如如上公式背景色用的浅蓝色对应的 16 进制数为#DEEAF6。

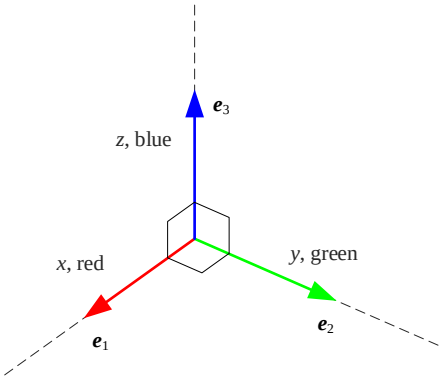


图 17. 三原色空间

$\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$和$\boldsymbol{e}_3$这三个基底向量两两正交，因此它们两两内积为 0：

$$\boldsymbol{e}_1 \cdot \boldsymbol{e}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 0, \quad \boldsymbol{e}_1 \cdot \boldsymbol{e}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0, \quad \boldsymbol{e}_2 \cdot \boldsymbol{e}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0 \tag{32}$$

而且，$\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$和$\boldsymbol{e}_3$均为单位向量：

$$\|\boldsymbol{e}_1\|_2 = 1, \quad \|\boldsymbol{e}_2\|_2 = 1, \quad \|\boldsymbol{e}_3\|_2 = 1 \tag{33}$$

因此，在三原色模型这个向量空间 V 中，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3]$ 是 V 的标准正交基。

特别强调一点，准确来说，RGB 三原色空间并不是本书前文所述的向量空间，原因就是 α_1、α_2、α_3有取值范围限制。而向量空间不存在这样的取值限制。除了零向量 $\boldsymbol{0}$ 以外，真正的向量空间都是无限延伸。

利用 $\boldsymbol{e}_1$ ($[1, 0, 0]^T$ red)、$\boldsymbol{e}_2$ ($[0, 1, 0]^T$ green) 和 $\boldsymbol{e}_3$ ($[0, 0, 1]^T$ blue) 这三个基底向量，我们可以张成一个色彩斑斓的空间。下面我们就带大家揭秘这个彩色空间。

7.3 张成空间：线性组合红、绿、蓝三原色

本节把“张成”这个概念用到 RGB 三原色上。

单色

首先，对 $\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 对逐个研究。实数 α_1 取值范围为 [0, 1]，α_1 乘 $\boldsymbol{e}_1$ 得到向量 $\boldsymbol{a}$：

$$\boldsymbol{a} = \alpha_1 \boldsymbol{e}_1 \tag{34}$$

大家试想，在这个 RGB 三原色空间，(34) 意味着什么？

图 18 已经给出答案。标量 α_1 乘向量 $\boldsymbol{e}_1$，得到不同深度的红色。$\boldsymbol{e}_1$ 张成的空间 span($\boldsymbol{e}_1$) 的维数为 1。向量空间 span($\boldsymbol{e}_1$) 是 RGB 三原色空间 V 的一个子空间。

类似地，标量 α_2 乘向量 $\boldsymbol{e}_2$，得到不同深浅的绿色。标量 α_3 乘向量 $\boldsymbol{e}_3$，得到不同深浅的蓝色。图 18 的三个空间的维数都是 1 维。

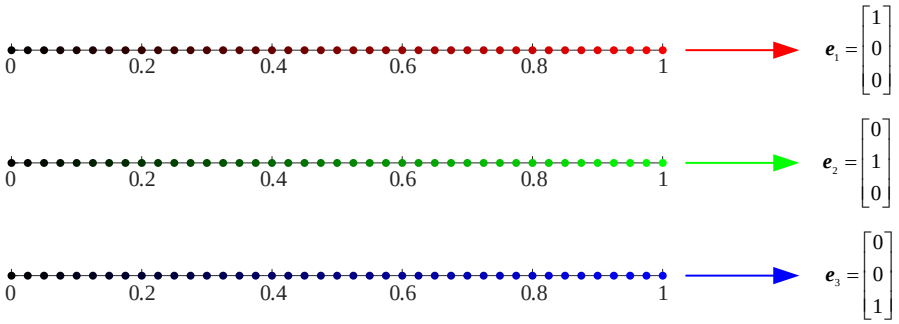


图 18. 三个基底向量和标量乘积

双色合成

再进一步，图 19 所示为 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 的张成空间 span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$)。图 19 平面上的颜色可以写成如下线性组合：

$$\boldsymbol{a} = \alpha_1 \boldsymbol{e}_1 + \alpha_2 \boldsymbol{e}_2 \tag{35}$$

span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$) 的维数为 2。基底 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$] 的秩为 2。

如图 19 所示，这个 span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$) 平面上，颜色在绿色和红色之间渐变。特别地，$\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$ 为黄色，$\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$ 在空间 span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$) 中。span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$) 也是 RGB 三原色空间 V 子空间。

虽然 $\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$、$\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$ 这三个向量线性相关，这三个向量也可张成图 19 这个二维空间。也就是说，span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$) = span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$)。

集合 {$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$} 中剔除 $\boldsymbol{e}_2$ 后 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$] 线性无关。因此，[$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$] 也可以选做图 19 这个空间的基底。也就是说，图 19 中任意颜色可以写成绿色 ($\boldsymbol{e}_1$) 和黄色 ($\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$) 唯一的线性组合。

图 20 所示为 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 的张成 span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_3$)，颜色在蓝色和红色之间渐变。[$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_3$] 是 span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_3$) 这个“红蓝”空间的基底。特别地，$\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_3$ 为品红。

图 21 所示为 $\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 的张成 span($\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$)，颜色在绿色和蓝色之间渐变。[$\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$] 是 span($\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$) 这个“蓝绿”空间的基底。注意 $\boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3$ 为青色。

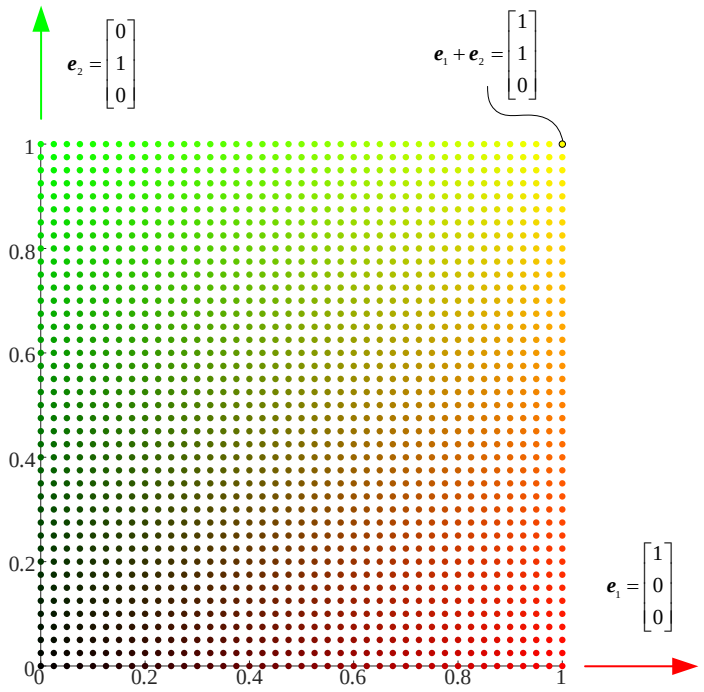


图 19. 基底向量 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 张成的空间

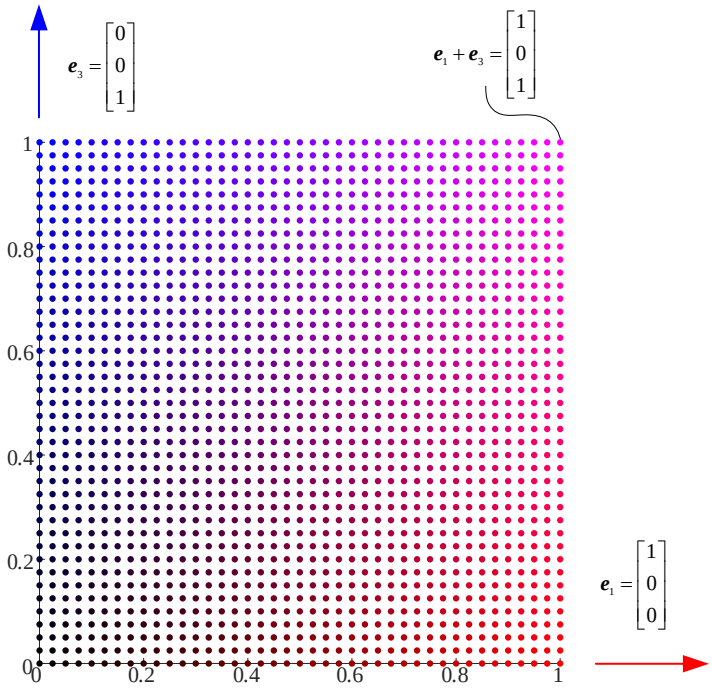


图 20. 基底向量 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 张成的空间

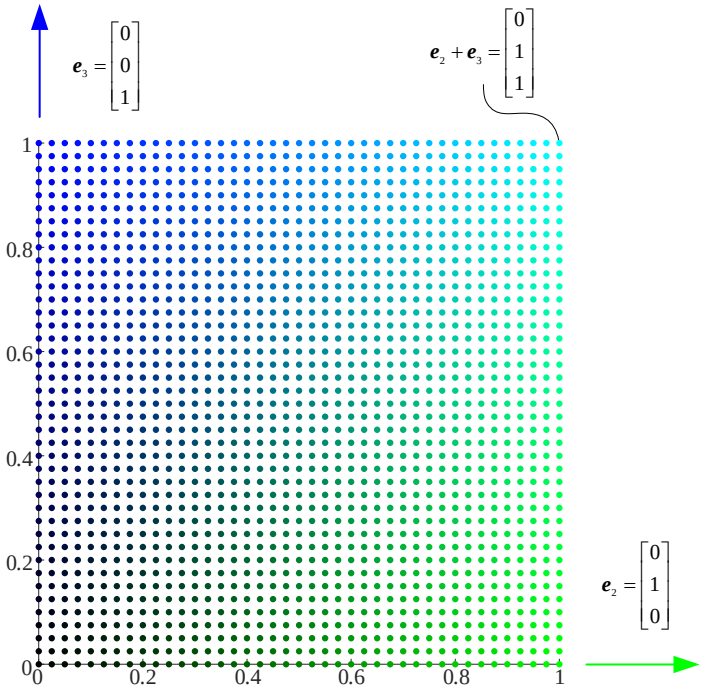


图 21. 基底向量 $\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 张成的空间

三色合成

$\boldsymbol{e}_1$ ([1, 0, 0]^T red)、$\boldsymbol{e}_2$ ([0, 1, 0]^T green) 和 $\boldsymbol{e}_3$ ([0, 0, 1]^T blue) 这三个基底向量张的空间 span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$) 如图 22 所示。span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$) 这个空间的维数为 3。基底 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$] 中每个向量都是单位向量，且两两正交，因此基底 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$] 是标准正交基。

⚠ 注意，为了方便可视化，图 22 仅仅绘制了空间边缘上色彩最鲜艳的散点。实际上，空间内部还有无数散点，代表相对较深的颜色。

一种特殊情况，$\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 这三个基底向量以均匀方式混合，得到的便是灰度：

$$\alpha\left(\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3\right) \tag{36}$$

在图 22 中，这些灰度颜色在原点 (0, 0, 0) 和 (1, 1, 1) 两点构成的线段上。

如图 23 所示，白色和黑色分别对应如下向量：

$$1\times\left(\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3\right) = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad 0\times\left(\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3\right) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{37}$$

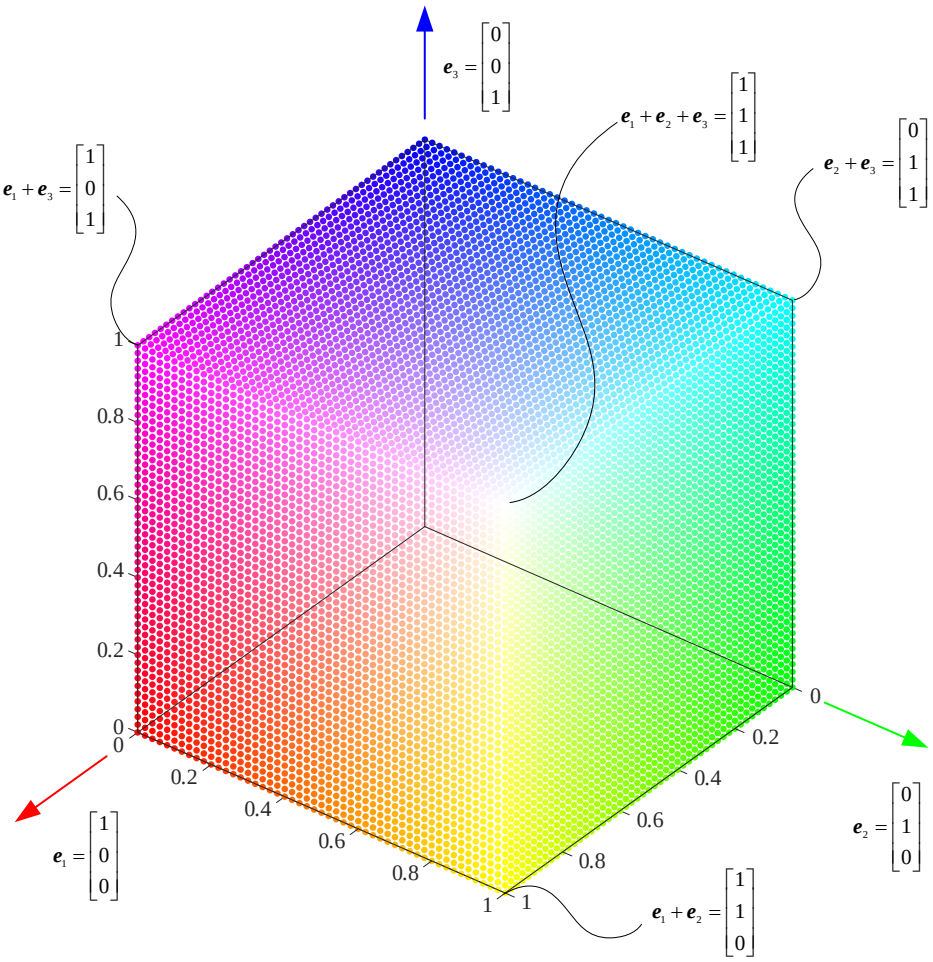


图 22. 三原色张成的彩色空间

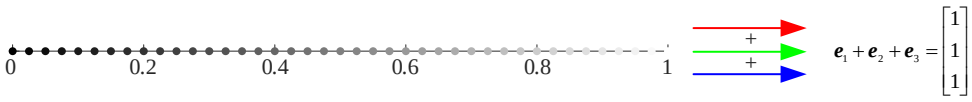


图 23. 灰度

我们用 Streamlit 制作了一个应用，其中用 Plotly 绘制类似图 22 可交互三维散点图。请大家参考 Streamlit_Bk4_Ch7_02.py。

7.4 线性无关：红色和绿色，调不出青色

下面，我们还是用三原色做例子来谈一下线性相关和线性无关。

如图 24 所示，$\boldsymbol{e}_1$ (红色) 和 $\boldsymbol{e}_2$ (绿色) 张成平面 $H_1 = \text{span}(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2)$。在 H_1 中，向量 $\hat{\boldsymbol{a}}$ 与 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 线性相关；因为，$\hat{\boldsymbol{a}}$ 可以用 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 线性组合来表达：

$$\hat{\boldsymbol{a}} = \alpha_1 \boldsymbol{e}_1 + \alpha_2 \boldsymbol{e}_2 \tag{38}$$

$\boldsymbol{e}_3$ 显然垂直 H_1，因此 $\boldsymbol{e}_3$ 和 H_1 互为**正交补** (orthogonal complement)。本书第 9 章还会深入介绍正交补这个概念。

图 24 中有一个不速之客——向量 $\boldsymbol{a}$。向量 $\boldsymbol{a}$ 跳出平面 H_1。向量 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 线性无关，因为 $\boldsymbol{a}$ 不能用 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 线性组合构造。从色彩角度来看，红光和绿光，调不出青色光。

代表青色的向量 $\boldsymbol{a}$ 在红绿色构成的平面 H_1 内的投影为 $\hat{\boldsymbol{a}}$。$\boldsymbol{a} - \hat{\boldsymbol{a}}$ 垂直 H_1。向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\hat{\boldsymbol{a}}$ 差在一束蓝光 $\boldsymbol{a} - \hat{\boldsymbol{a}}$。也就是，从光线合成角度来看，$\boldsymbol{a}$ 比 $\hat{\boldsymbol{a}}$ 多了一抹蓝光。

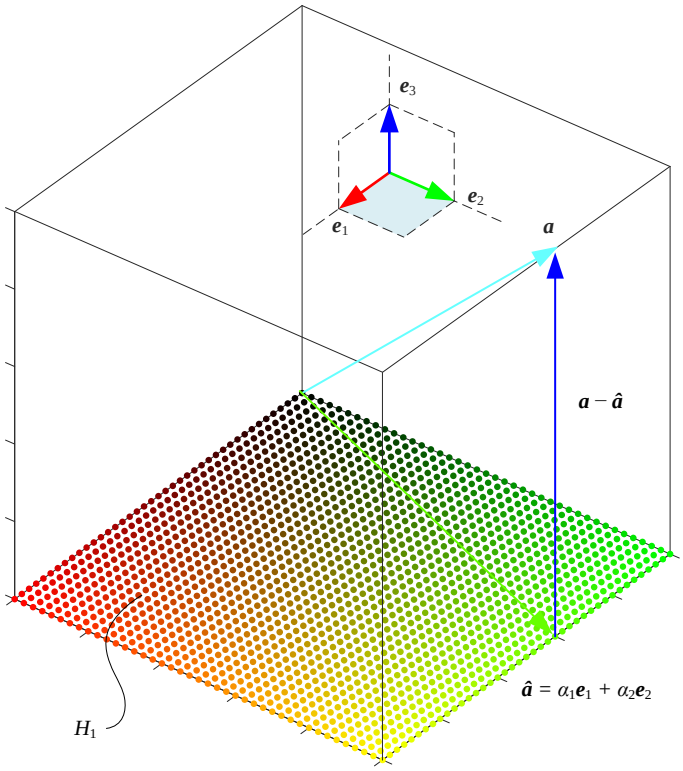


图 24. 基底向量 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 张成平面 H_1，向量 $\boldsymbol{a}$ 向 H_1 投影

图 25 所示为基底向量 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 张成平面 H_2，向量 $\boldsymbol{b}$ 向 H_2 投影得到 $\hat{\boldsymbol{b}}$。图 26 所示为基底向量 $\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 张成平面 H_3，向量 $\boldsymbol{c}$ 向 H_3 投影结果为 $\hat{\boldsymbol{c}}$。请大家自行分析这两幅图。

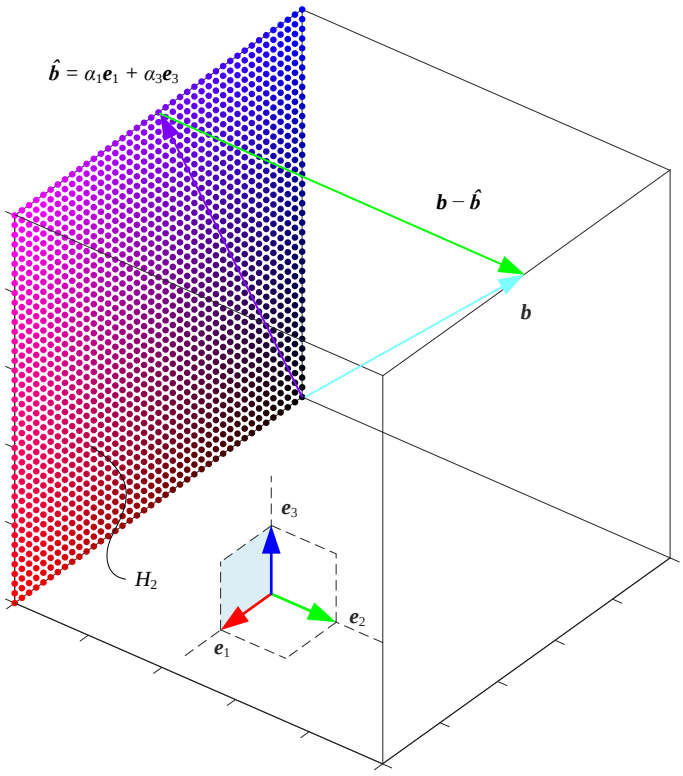


图 25. 基底向量 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 张成平面 H_2

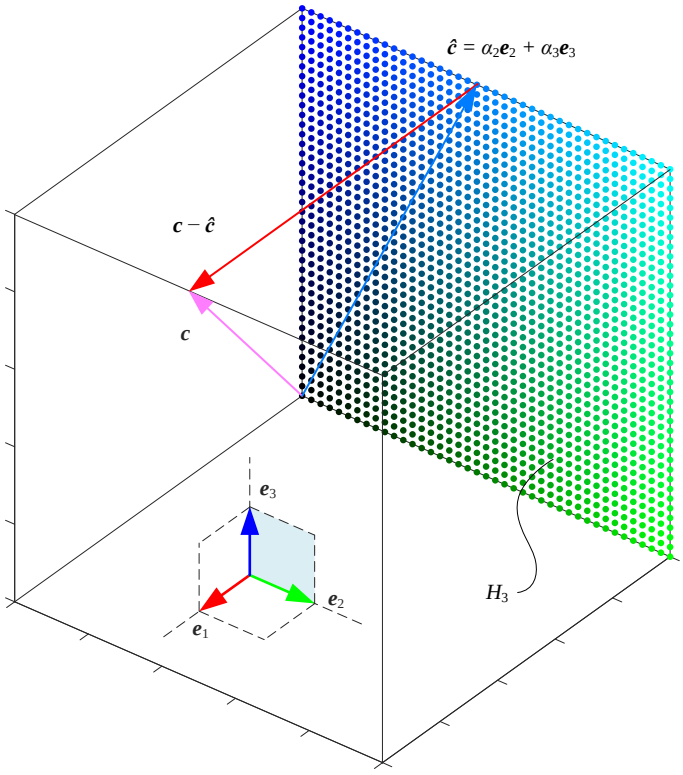


图 26. 基底向量 $\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 张成平面 H_3

7.5 非正交基底：青色、品红、黄色

$\boldsymbol{e}_1$ ($[1, 0, 0]^T$ red)、$\boldsymbol{e}_2$ ($[0, 1, 0]^T$ green) 和 $\boldsymbol{e}_3$ ($[0, 0, 1]^T$ blue) 这三个基底向量任意两个组合构造三个向量 $\boldsymbol{v}_1$ ($[0, 1, 1]^T$ cyan)、$\boldsymbol{v}_2$ ($[1, 0, 1]^T$ magenta) 和 $\boldsymbol{v}_3$ ($[1, 1, 0]^T$ yellow)：

$$\boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_2 = \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_3 = \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{39}$$

如图 27 所示，$\boldsymbol{v}_1$ 相当于 $\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 的线性组合，$\boldsymbol{v}_2$ 相当于 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 的线性组合，$\boldsymbol{v}_3$ 相当于 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 的线性组合。

$\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 和 $\boldsymbol{v}_3$ 线性无关，因此 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$ 也可以是构造三维彩色空间的基底！

印刷四分色模式 (CMYK color model) 就是基于基底 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$。CMYK 四个字母分别指的是**青色** (cyan)、**品红** (magenta)、**黄色** (yellow) 和**黑色** (black)。本节，我们只考虑三个彩色，即青色、品红和黄色。

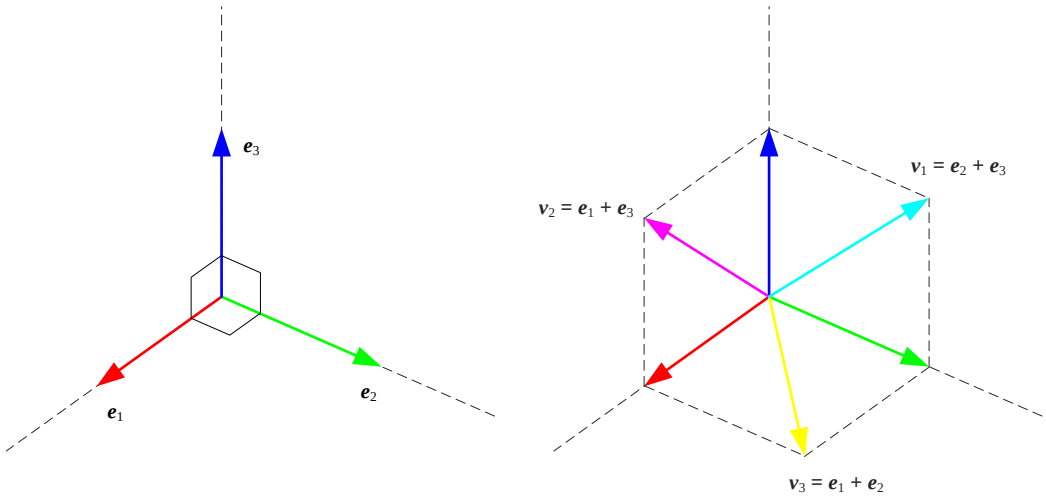


图 27. 正交基底到非正交基底

非正交基底

$\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 和 $\boldsymbol{v}_3$ 并非两两正交。经过计算可以发现 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 和 $\boldsymbol{v}_3$ 两两夹角均为 60°：

$$
\begin{aligned}
\cos\theta_{v_1,v_2} &= \frac{\boldsymbol{v}_1 \cdot \boldsymbol{v}_2}{\|\boldsymbol{v}_1\|\|\boldsymbol{v}_2\|} = \frac{1}{\sqrt{2}\times\sqrt{2}} = \frac{1}{2} \\
\cos\theta_{v_1,v_3} &= \frac{\boldsymbol{v}_1 \cdot \boldsymbol{v}_3}{\|\boldsymbol{v}_1\|\|\boldsymbol{v}_3\|} = \frac{1}{\sqrt{2}\times\sqrt{2}} = \frac{1}{2} \\
\cos\theta_{v_2,v_3} &= \frac{\boldsymbol{v}_2 \cdot \boldsymbol{v}_3}{\|\boldsymbol{v}_2\|\|\boldsymbol{v}_3\|} = \frac{1}{\sqrt{2}\times\sqrt{2}} = \frac{1}{2}
\end{aligned} \tag{40}
$$

也就是说，$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$ 为非正交基底。

单色

图 28 所示为 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 和 $\boldsymbol{v}_3$ 各自张成的空间 span($\boldsymbol{v}_1$)、span($\boldsymbol{v}_2$)、span($\boldsymbol{v}_3$)。这三个空间的维数均为 1。

观察图 28 颜色变化，可以发现 span($\boldsymbol{v}_1$)、span($\boldsymbol{v}_2$)、span($\boldsymbol{v}_3$) 分别代表着青色、品红和黄色颜色深浅变化。

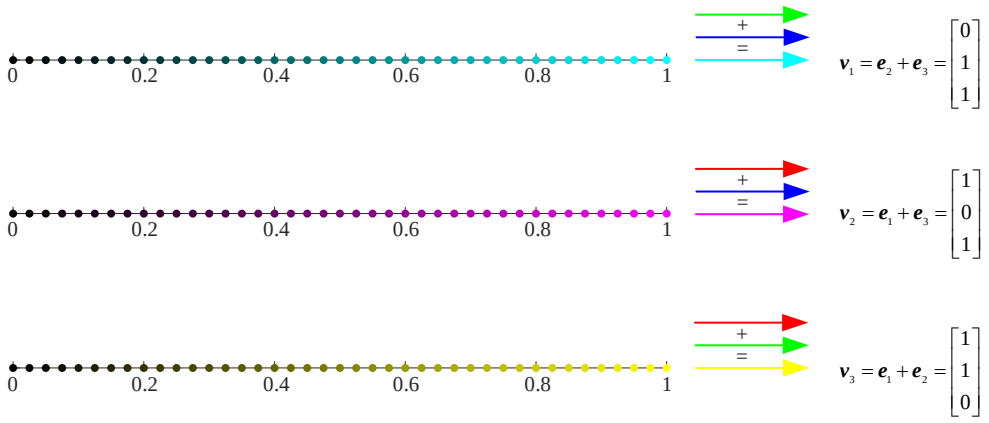


图 28. 单色子空间

双色合成

图 29 ~ 图 31 分别所示为 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 和 $\boldsymbol{v}_3$ 两两张成的三个空间 span($\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_2$)、span($\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_3$)、span($\boldsymbol{v}_2$, $\boldsymbol{v}_2$)。这三个空间的维数都是 2，它们也都是三色空间的子空间。

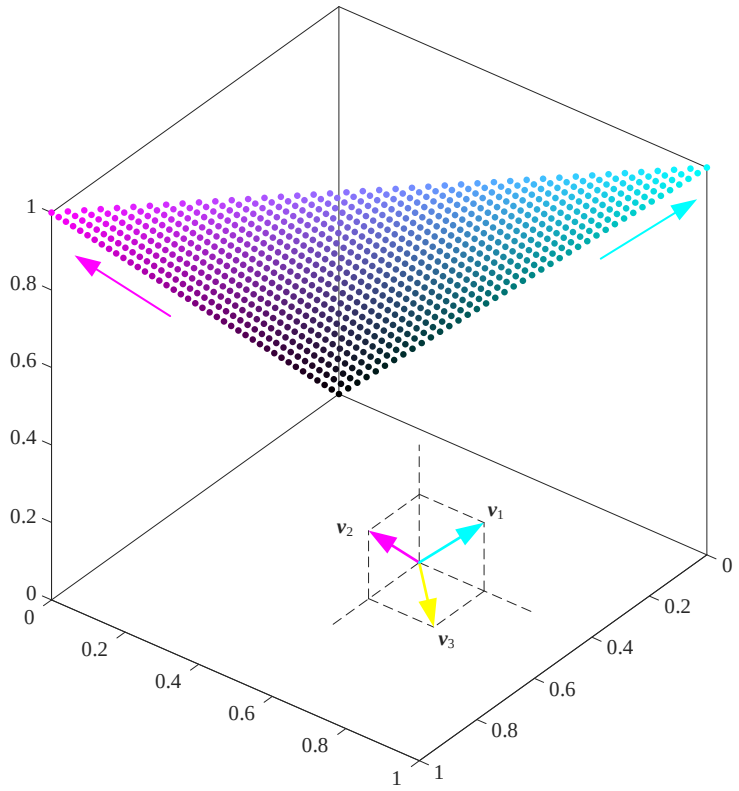


图 29. 基底向量 v_1 和 v_2 张成的子空间

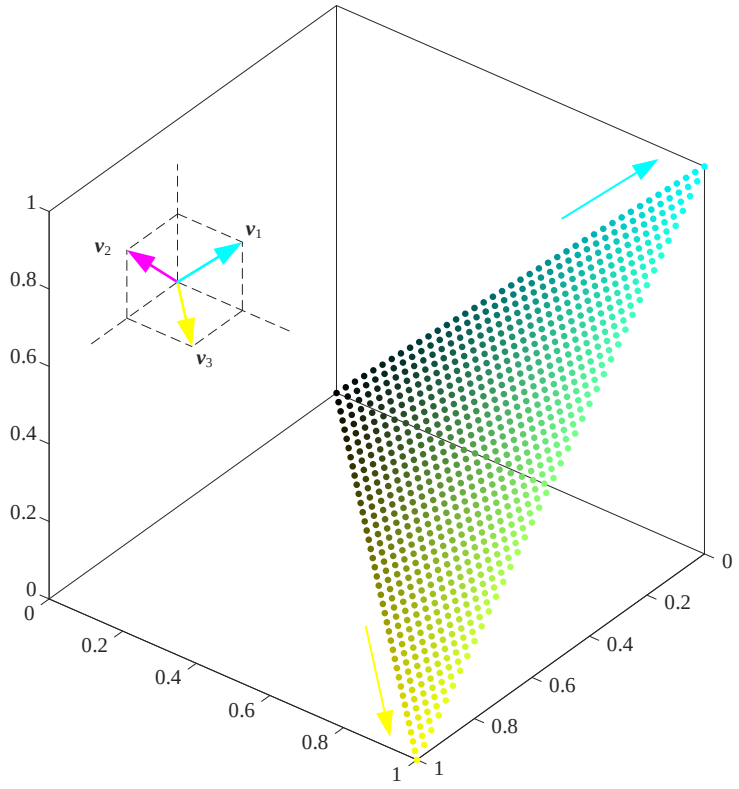


图 30. 基底向量 v_1 和 v_3 张成的子空间

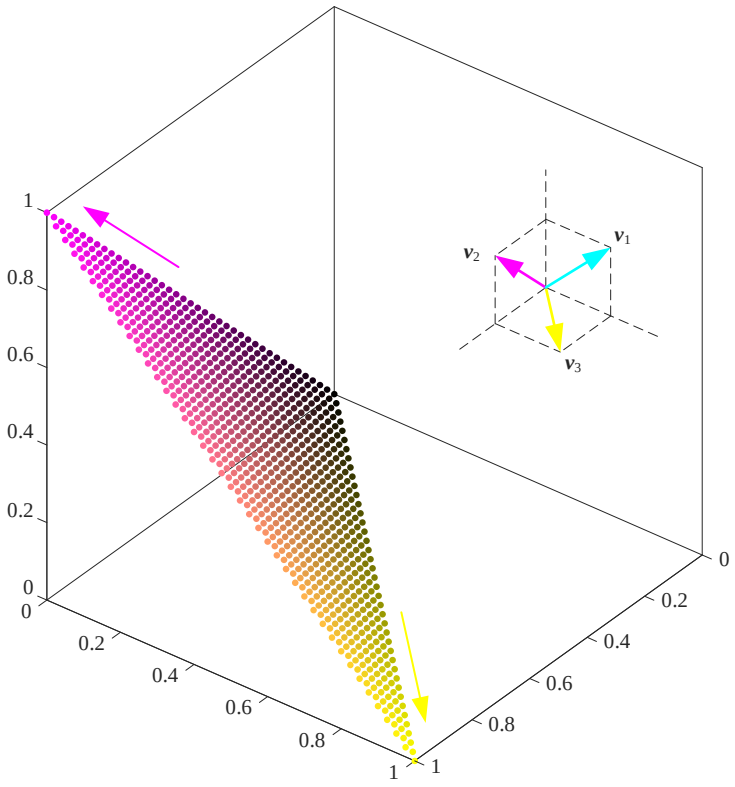


图 31. 基底向量 $\boldsymbol{v}_2$ 和 $\boldsymbol{v}_3$ 张成的子空间

7.6 基底转换：从红、绿、蓝，到青色、品红、黄色

RGB 色卡中，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3]$ 是色彩空间的标准正交基。CMYK 色卡中，$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$ 是色彩空间的非正交基。我们可以用**基底转换** (change of basis) 完成 RGB 模式向 CMYK 模式转换。

下式中，通过矩阵 $\boldsymbol{A}$，基底向量 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3]$ 转化为基底向量 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \boldsymbol{v}_3 \end{bmatrix} = \boldsymbol{A} \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{e}_3 \end{bmatrix} \tag{41}$$

$\boldsymbol{A}$ 常被称作过渡矩阵，或**转移矩阵** (transition matrix)。

将具体数值代入 (41)，得到：

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \boldsymbol{A} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{42}$$

即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0 & 1 & 1\\ 1 & 0 & 1\\ 1 & 1 & 0\end{bmatrix} \tag{43}$$

从基底 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$ 向基底 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3]$ 转换，可以通过 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 完成：

$$\boldsymbol{A}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \boldsymbol{v}_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{e}_3\end{bmatrix} \tag{44}$$

通过计算可得到 $\boldsymbol{A}^{-1}$：

$$\boldsymbol{A}^{-1}=\begin{bmatrix}-0.5 & 0.5 & 0.5\\ 0.5 & -0.5 & 0.5\\ 0.5 & 0.5 & -0.5\end{bmatrix} \tag{45}$$

图 32 所示为基底 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3]$ 和基底 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$ 之间相互转换关系。

注意，在印刷领域，真实的 RGB 和 CMYK 之间的转换要比上述转换复杂的多。

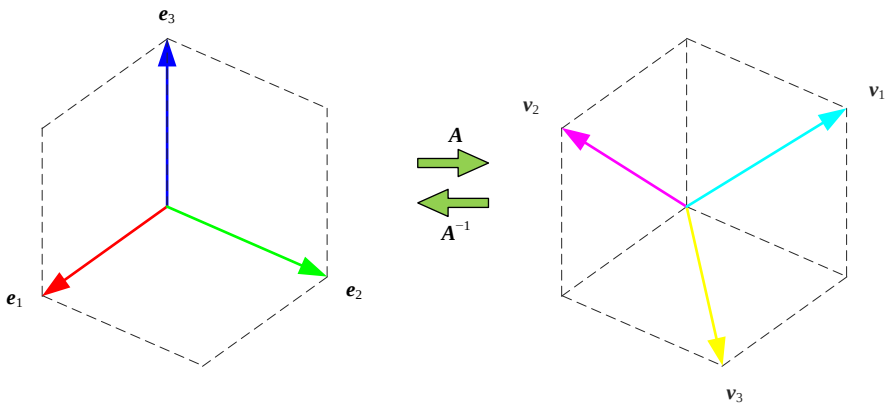


图 32. 基底 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3]$ 和基底 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$ 相互转换

线性方程组

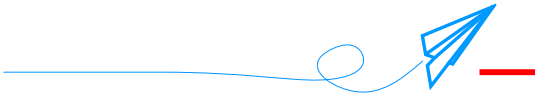
“纯红色”在基底 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$ 的坐标可以通过求解下列线性方程组得到：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b} \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix}0 & 1 & 1\\ 1 & 0 & 1\\ 1 & 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\ 0\\ 0\end{bmatrix} \tag{46}$$

而这线性方程组本身就是一个线性组合：

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \boldsymbol{v}_3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=x_1\boldsymbol{v}_1+x_2\boldsymbol{v}_2+x_3\boldsymbol{v}_3=\boldsymbol{b} \tag{47}$$

请大家自己计算“纯绿色”、“纯蓝色”在基底 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$ 中的坐标。



本章讲解的线性代数概念很多，必须承认它们都很难理解。为了帮助大家理清思路，我们用RGB三原色作例子，给向量空间涂颜色！

选出以下四幅图片总结本章主要内容。所有的基底向量中，标准正交基和规范正交基这两个概念最常用。在后续章节学习时，请大家注意规范正交基、正交矩阵、旋转这三个概念的联系。平面上，线性相关和线性无关就是看向量是否重合。此外，正交投影是本书非常重要的几何概念，我们会在本书后续内容反复用到。

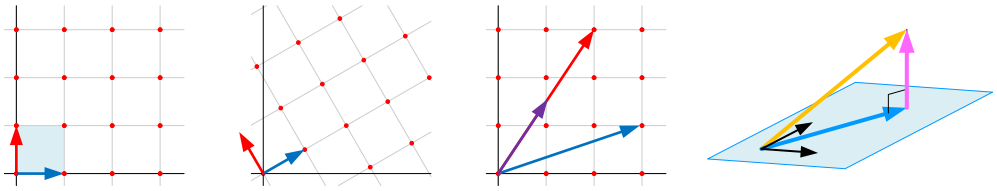


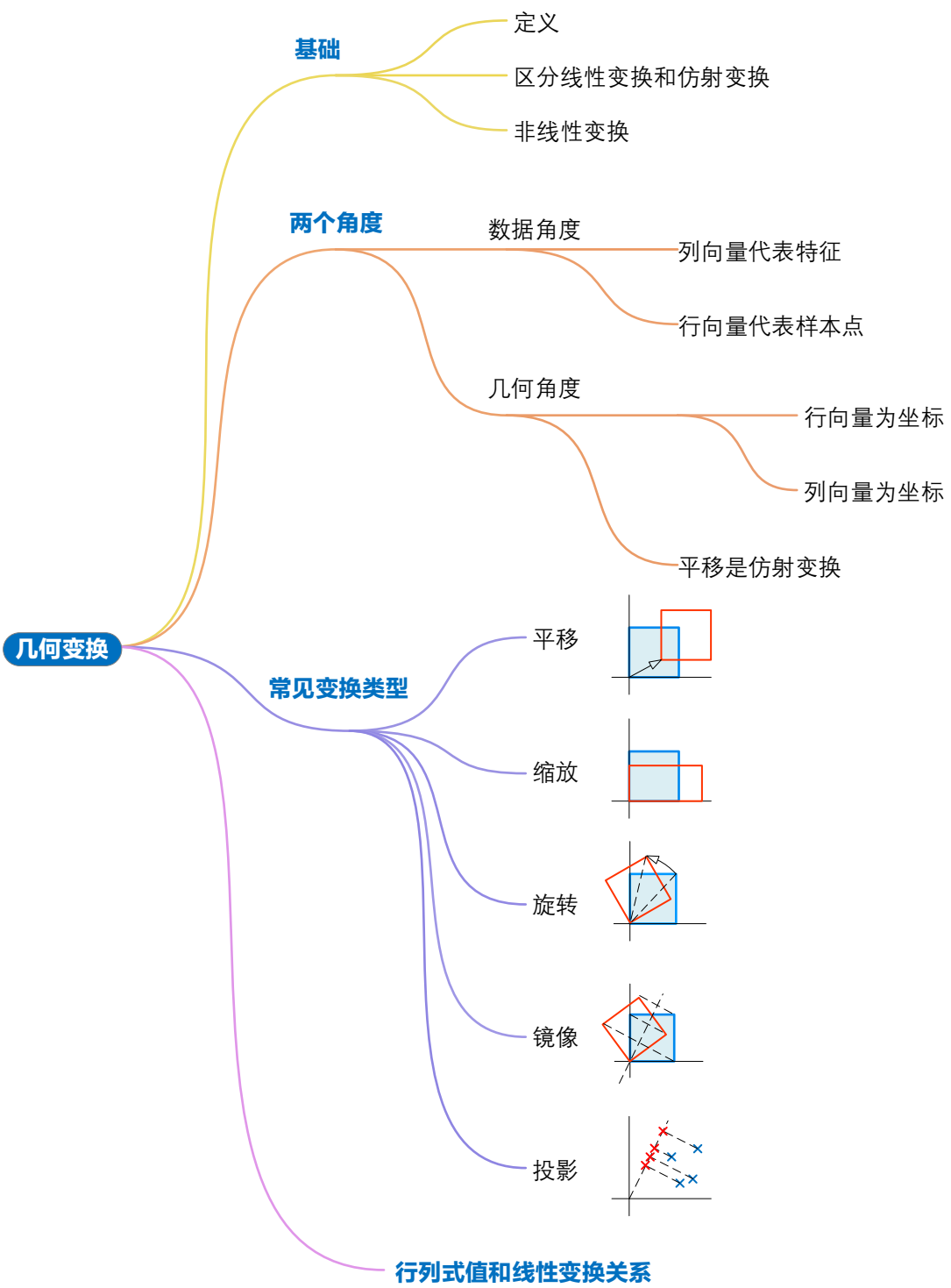
图 33. 总结本章重要内容的四幅图

8 Geometric Transformations
几何变换

线性变换的特征是原点不变、平行且等距的网格

> 矩阵向来大有所为，它们从不游手好闲。
>
> ***Matrices act. They don't just sit there.***
>
> —— 吉尔伯特·斯特朗 (Gilbert Strang) | MIT 数学教授 | 1934 ~

- `numpy.array()` 构造多维矩阵/数组
- `numpy.linalg.inv()` 矩阵逆运算
- `numpy.matrix()` 构造二维矩阵
- `numpy.multiply()` 矩阵逐项积
- `tranpose()` 矩阵转置，比如 `A.transpose()`，等同于 `A.T`



8.1 线性变换：线性空间到自身的线性映射

本章开始之前，我们先区分两个概念：**线性映射** (linear mapping) 和**线性变换** (linear transformation)。

线性映射是指从一个空间到另外一个空间的映射，且保持加法和数量乘法运算。比如，映射 L 将向量空间 V 映射到向量空间 W，对于所有的 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2 \in V$ 及所有的标量 α 和 β，满足：

$$L(\alpha\boldsymbol{v}_1+\beta\boldsymbol{v}_2)=\alpha L(\boldsymbol{v}_1)+\beta L(\boldsymbol{v}_2) \tag{1}$$

白话来说，线性映射把一个空间的点或几何形体映射到另外一个空间。比如图 1 所示的三维物体投影到一个平面上，得到这个杯子在平面上的映像。

图 1 所示的“降维”过程显然不可逆，降维过程中信息被压缩。也就是说，不能通过杯子在平面的“映像”获得杯子在三维空间形状的所有信息。

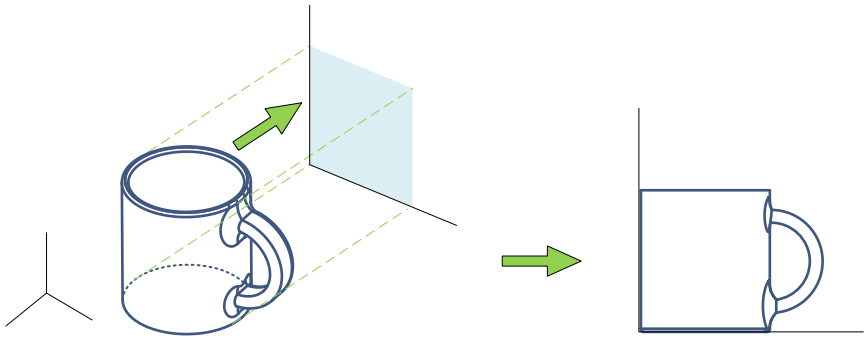


图 1. 线性映射

线性变换是线性空间到自身的线性映射，是一种特殊的线性映射。白话说，线性变换是在同一个坐标系中完成的图形变换。从几何角度来看，线性变换产生“平行且等距”的网格，并且原点保持固定，如图 2 所示。原点保持固定，这一性质很重要，因为大家马上就会看到“平移”不属于线性变换。

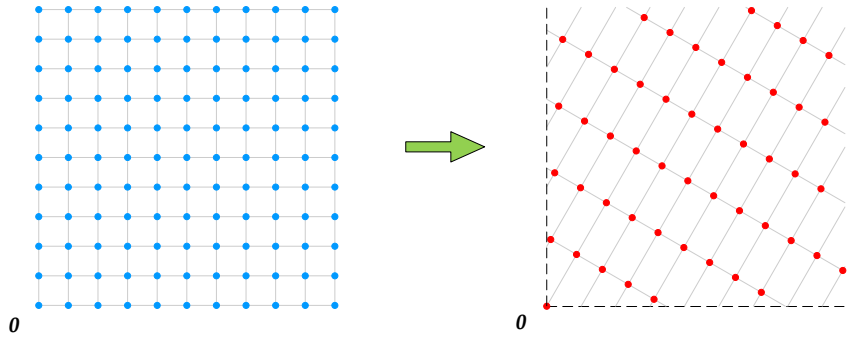


图 2. 线性变换产生平行且等距的网格

⚠请大家注意很多参考资料混用线性映射和线性变换。此外，本书把正交投影也算作是线性变换，虽然正交投影后维度降低，空间发生“压缩”。

非线性变换

与线性变换相对的是**非线性变换** (nonlinear transformation)。

图 3 和图 4 给出两个非线性变换的例子。图 3 所示为通过非线性变换产生平行但不等距网格。图 4 所示产生的网格甚至出现“扭曲”。

有了这两幅图做对比，相信读者能够更好地理解图 2 所展示的“平行且等距、原点保持固定”的网格所代表的线性变换。

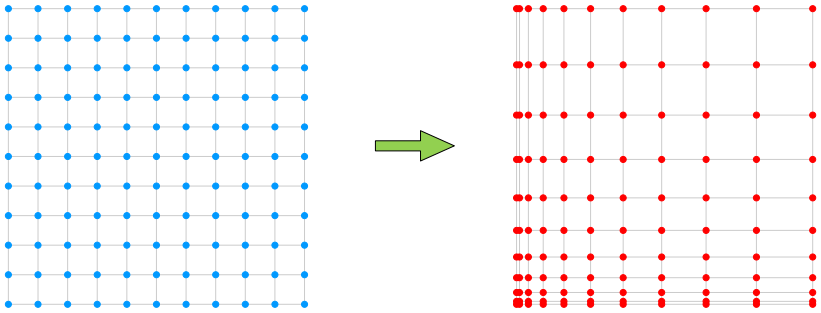


图 3. 非线性变换产生平行但不等距网格

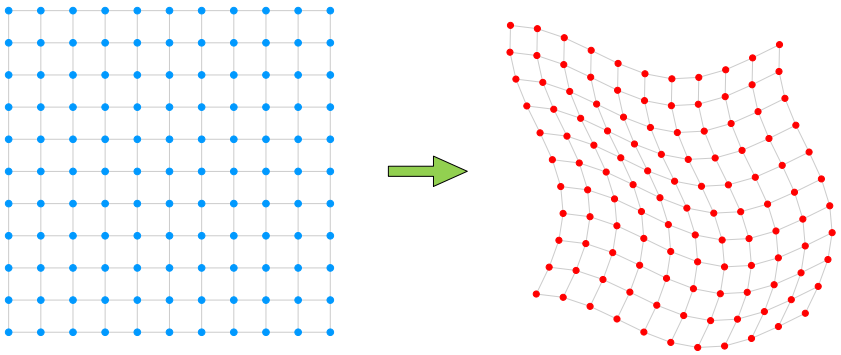


图 4. 非线性变换产生“扭曲”网格

常见平面几何变换

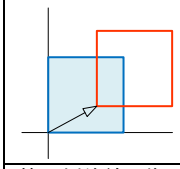
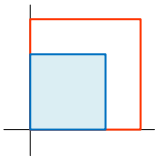
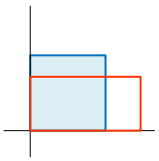
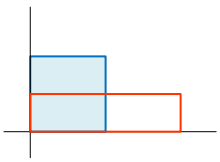
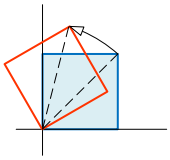
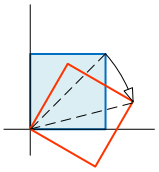
本章下一节开始就是要从线性代数运算视角讨论几何变换。表 1 总结本章将要介绍的常用二维几何变换。表中第二列以列向量形式表达坐标点，第三列以行向量形式表达坐标点。表 1 的第二列和第三列矩阵乘法互为转置关系。

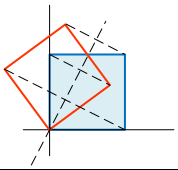
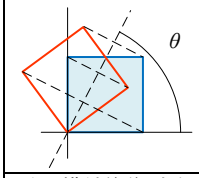
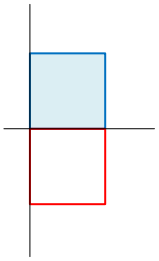
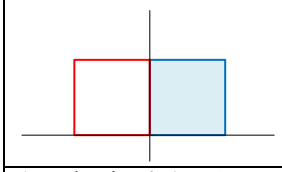
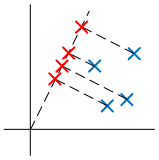
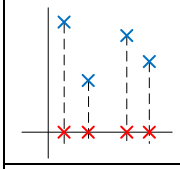
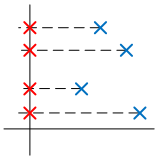
除了平移以外，表 1 中的几何变换都是从 $\mathbb{R}^2$ 到自身。准确来说，正交投影相当于降维，结果在 $\mathbb{R}^2$ 的子空间中。本章后续将展开讲解这些几何变换。

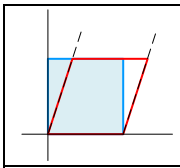
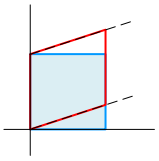
表 1 中所有操作统称几何变换，以便于将这些线性代数概念和本系列丛书《数学要素》中介绍的几何变换联系起来。这也正是本章题目叫“几何变换”的原因。

⚠ 请大家注意，平移并不是线性变换，平移是一种仿射变换 (affine transformation)，对应的运算为 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}$。几何角度来看，仿射变换是一个向量空间的线性映射 ($\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$) 叠加平移 ($\boldsymbol{b}$)，变换结果在另外一个仿射空间。$\boldsymbol{b} \neq \boldsymbol{0}$，平移导致原点位置发生变化。因此，线性变换可以看做是特殊的仿射变换。

表 1. 常用几何变换总结

几何变换	列向量坐标	行向量坐标
平移 (translation) 	$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} z_1 & z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} t_1 & t_2 \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2} + \begin{bmatrix} t_1 & t_2 \end{bmatrix}$
等比例缩放 s 倍 (scaling) 	$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = s\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s & 0 \\ 0 & s \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} z_1 & z_2 \end{bmatrix} = s\begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} s & 0 \\ 0 & s \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2}\begin{bmatrix} s & 0 \\ 0 & s \end{bmatrix}$
非等比例缩放 (unequal scaling) 	$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_1 & 0 \\ 0 & s_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} z_1 & z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} s_1 & 0 \\ 0 & s_2 \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2}\begin{bmatrix} s_1 & 0 \\ 0 & s_2 \end{bmatrix}$
挤压 s 倍 (squeeze) 	$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s & 0 \\ 0 & 1/s \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} z_1 & z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} s & 0 \\ 0 & 1/s \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2}\begin{bmatrix} s & 0 \\ 0 & 1/s \end{bmatrix}$
逆时针旋转 θ (counterclockwise rotation) 	$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} z_1 & z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2}\begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$
顺时针旋转 θ (clockwise rotation) 	$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} z_1 & z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2}\begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$

关于通过原点、切向量为 $\boldsymbol{\tau}\,[\tau_1, \tau_2]^{\mathrm{T}}$ 直线镜像 (reflection) 	$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2} \begin{bmatrix} \tau_1^2 - \tau_2^2 & 2\tau_1\tau_2 \\ 2\tau_1\tau_2 & \tau_2^2 - \tau_1^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} z_1 & z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2} \begin{bmatrix} \tau_1^2 - \tau_2^2 & 2\tau_1\tau_2 \\ 2\tau_1\tau_2 & \tau_2^2 - \tau_1^2 \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2} \frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2} \begin{bmatrix} \tau_1^2 - \tau_2^2 & 2\tau_1\tau_2 \\ 2\tau_1\tau_2 & \tau_2^2 - \tau_1^2 \end{bmatrix}$
关于通过原点、方向和水平轴夹角为 θ 直线镜像；等同于上例，切向量相当于 $(\cos\theta, \sin\theta)$ 	$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} z_1 & z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2} \begin{bmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{bmatrix}$
关于横轴镜像对称 	$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} z_1 & z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
关于纵轴镜像对称 	$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} z_1 & z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2} \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
向通过原点、切向量为 $\boldsymbol{\tau}\,[\tau_1, \tau_2]^{\mathrm{T}}$ 直线投影 (projection) 	$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2} \begin{bmatrix} \tau_1^2 & \tau_1\tau_2 \\ \tau_1\tau_2 & \tau_2^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} z_1 & z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2} \begin{bmatrix} \tau_1^2 & \tau_1\tau_2 \\ \tau_1\tau_2 & \tau_2^2 \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2} \frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2} \begin{bmatrix} \tau_1^2 & \tau_1\tau_2 \\ \tau_1\tau_2 & \tau_2^2 \end{bmatrix}$
向横轴投影 	$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} z_1 & z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$
向纵轴投影 	$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} z_1 & z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
沿水平方向剪切 (shear)，θ 为剪切角	$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \cot(\theta) \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} z_1 & z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \cot(\theta) & 1 \end{bmatrix}$

		$\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \cot(\theta) & 1 \end{bmatrix}$
沿竖直方向剪切，θ 为剪切角 	$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \cot(\theta) & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} z_1 & z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & \cot(\theta) \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ $\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2}\begin{bmatrix} 1 & \cot(\theta) \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

8.2 平移：仿射变换，原点变动

用列向量表达坐标时，平移可以写成：

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \boldsymbol{t} \tag{2}$$

其中，$\boldsymbol{t}$ 为平移向量：

$$\boldsymbol{t} = \begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \end{bmatrix} \tag{3}$$

(3) 代入 (2) 得到：

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 + t_1 \\ x_2 + t_2 \end{bmatrix} \tag{4}$$

⚠ 再次强调，平移并不是线性变换，平移是一种仿射变换，因为原点发生改变。

图 5 所示为几个平移的例子。

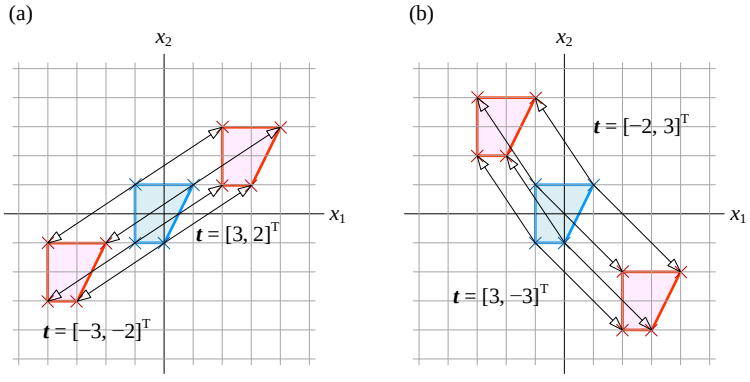


图 5. 平移

Bk4_Ch8_01.py 绘制图 5。

如图 6 所示，数据**中心化** (centralize)，也叫**去均值** (demean)，实际上就是一种平移。

对数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 去均值处理得到 $\boldsymbol{Y}$：

$$\boldsymbol{Y}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2} - \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}_{n\times 2}\right) \tag{5}$$

数据矩阵中一般用行向量表达坐标点，上式用到了广播原则。行向量 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 叫做 $\boldsymbol{X}$ 的**质心** (centroid)，它的每个元素是数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 每一列数据的均值。去均值后，$\boldsymbol{Y}$ 的质心位于原点，也就是说 $\mathrm{E}(\boldsymbol{Y}) = [0, 0]$。

将 $\boldsymbol{Y}$ 写成 $[\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2]$，展开(5) 得到：

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{y}_1 & \boldsymbol{y}_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\mathrm{E}(\boldsymbol{x}_1) & \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_2)\end{bmatrix} \tag{6}$$

(6) 对应的统计运算表达为：

$$\begin{cases} Y_1 = X_1 - \mathrm{E}(X_1) \\ Y_2 = X_2 - \mathrm{E}(X_2) \end{cases} \tag{7}$$

其中，X_1、X_2、Y_1、Y_2 为随机变量。注意，随机变量字母大写、斜体。从几何角度来看，平移运算将数据质心移动到原点，如图 6 所示。

大家应该已经注意到了图 6 中的椭圆，通过高斯二元分布可以建立随机数和椭圆的联系。从几何视角来看，椭圆/椭球可以用来代表服从多元高斯分布的随机数。这是本系列丛书《概率统计》要重点讲解的内容。

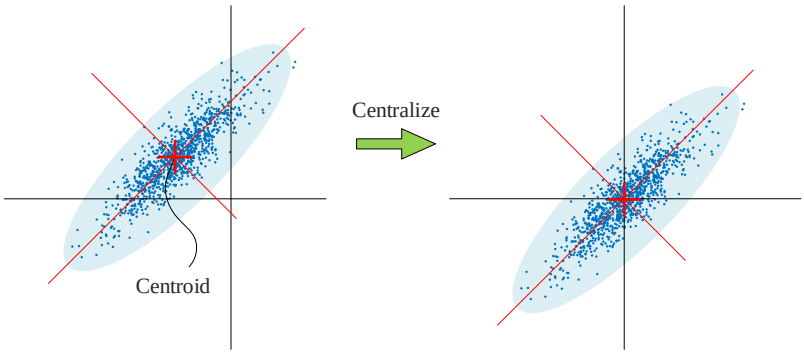


图 6. 数据中心化相当于平移

8.3 缩放：对角阵

等比例缩放 (equal scaling) 是指在缩放时各个维度采用相同缩放比例。举个例子，如图 7 所示，横、纵坐标等比例放大 2 倍，等比例缩放得到的图形和原图形相似。

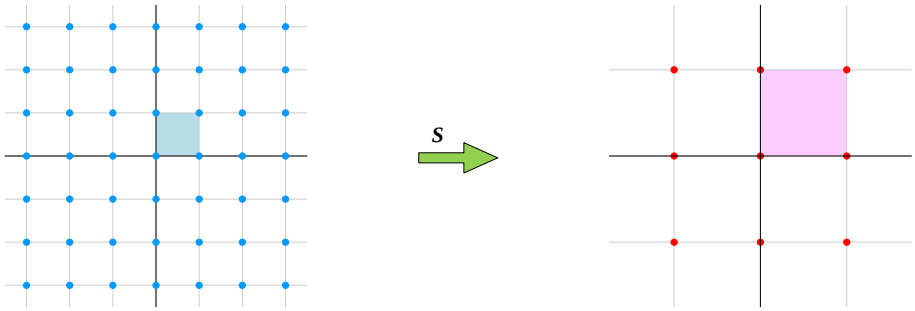


图 7. 等比例扩大 2 倍网格变化

等比例缩放对应的矩阵运算：

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} s & 0 \\ 0 & s \end{bmatrix}}_{S} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{8}$$

上式中，等比例缩放矩阵 $\boldsymbol{S}$ 为对角方阵，对角线元素相同。(8) 整理得到：

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} sx_1 \\ sx_2 \end{bmatrix} = s\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{9}$$

行列式值

计算 (8) 中转化矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的行列式值：

$$\det\begin{bmatrix} s & 0 \\ 0 & s \end{bmatrix} = s^2 \tag{10}$$

可以发现对于二维空间，等比例缩放对应图形面积变化 s^2 倍。

非等比例缩放

图 8 所示为**非等比例缩放** (unequal scaling) 的例子。

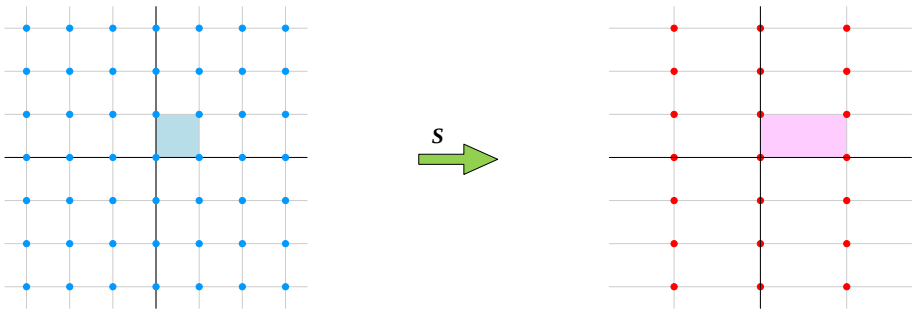


图 8. 非等比例缩放网格变化

非等比例缩放矩阵为：

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} s_1 & 0 \\ 0 & s_2 \end{bmatrix} \tag{11}$$

数据点为列向量时，非等比例缩放运算为：

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{S} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_1 & 0 \\ 0 & s_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{12}$$

数据点为行向量时，对 (12) 等式左右转置得到：

$$\begin{bmatrix} z_1 & z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \boldsymbol{S} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_1 & 0 \\ 0 & s_2 \end{bmatrix} \tag{13}$$

请大家根据图 9 两幅子图中图形缩放前后横、纵轴坐标比例变化，来推断矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的值分别是多少。

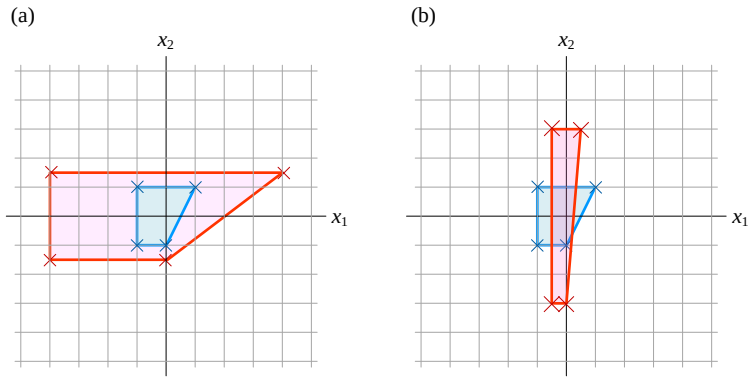


图 9. 非等比例缩放

逆矩阵

现在回过头来从几何变换角度再思考什么是矩阵的逆。

从线性变换角度，缩放矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的逆 $\boldsymbol{S}^{-1}$ 无非就是 $\boldsymbol{S}$ 对应的几何变换“逆操作”。如图 10 所示，缩放操作的逆运算就是将缩放后图形再还原成原图形。

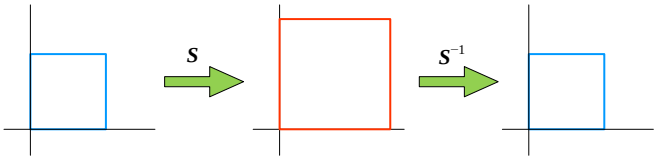


图 10. 缩放的逆运算

特别地，如果缩放时将图形“完全压扁”，比如：

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}}_{S} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{14}$$

(14) 中矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的行列式值为 0，也就是说变换矩阵不可逆。如图 11 所示，(14) 造成的形变也是不可逆的。

这样，我们从几何图形变换角度，解释为什么只有行列式值不为 0 的方阵才存在逆矩阵。本章后文还会继续介绍哪些几何操作“可逆”。

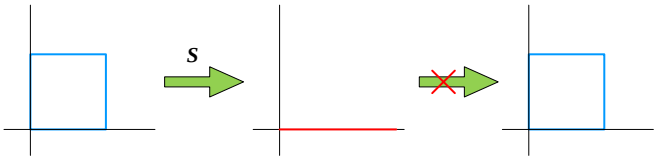


图 11. 不可逆地“压扁”

本节内容让我们联想到数据**标准化** (standardization) 这一概念。数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 标准化得到数据矩阵 $\boldsymbol{Z}$，对应运算如下：

$$\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \left(\boldsymbol{X}_{n\times 2} - \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}_{n\times 2}\right)\right)\begin{bmatrix} 1/\sigma_1 & 0 \\ 0 & 1/\sigma_2 \end{bmatrix} \tag{15}$$

实际上，数据标准化就相当于先平移，然后再用标准差进行比例缩放。每个特征采用的缩放系数为标准差的倒数。

将 $\boldsymbol{Z}$ 写成 $[\boldsymbol{z}_1, \boldsymbol{z}_2]$，展开 (15) 得到：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dfrac{\boldsymbol{x}_1 - \mathrm{E}\left(\boldsymbol{x}_1\right)}{\sigma_1} & \dfrac{\boldsymbol{x}_2 - \mathrm{E}\left(\boldsymbol{x}_2\right)}{\sigma_2} \end{bmatrix} \tag{16}$$

上式对应的统计运算则是：

$$\begin{cases} Z_1 = \dfrac{X_1 - \mathrm{E}(X_1)}{\sigma_1} \\ Z_2 = \dfrac{X_2 - \mathrm{E}(X_2)}{\sigma_2} \end{cases} \tag{17}$$

图 12 所示为数据标准化过程。数据标准化并不改变相关性系数大小。

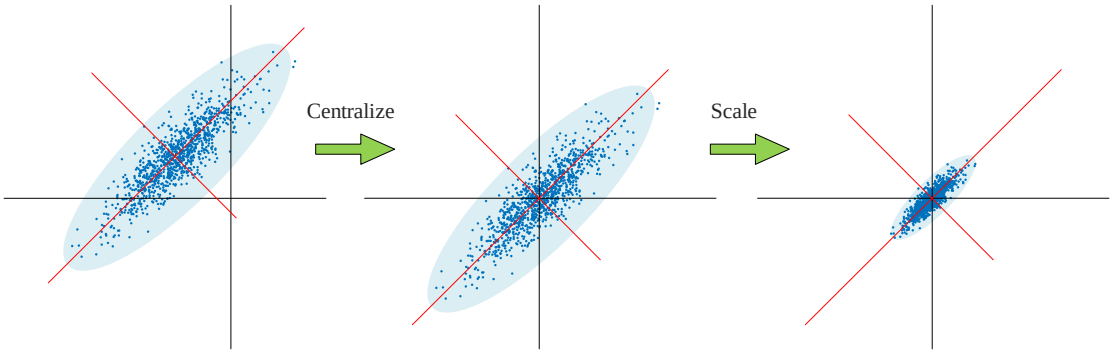


图 12. 数据标准化

挤压

还有一种特殊的缩放叫做**挤压** (squeeze)，比如竖直方向或水平方向压扁，但是面积保持不变。图 13 所示为挤压对应的网格变化。

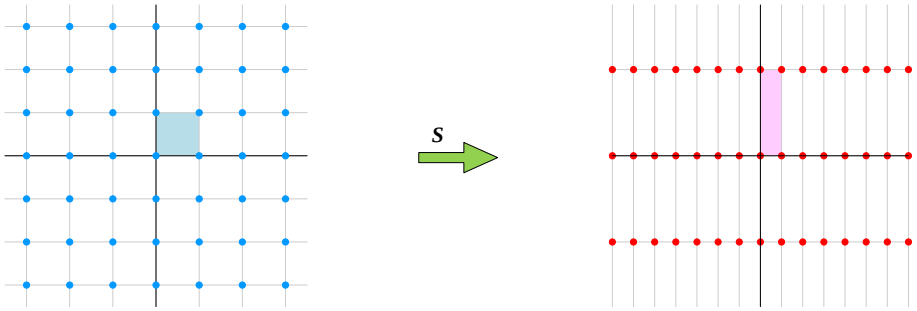


图 13. 挤压所对应的网格图变化

坐标为列向量时，挤压对应的矩阵运算为：

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} s & 0 \\ 0 & 1/s \end{bmatrix}}_{S} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{18}$$

其中，s 不为 0。计算上式方阵 $\boldsymbol{S}$ 行列式值，发现结果为 1，这说明挤压前后面积没有变化：

$$\det\begin{bmatrix} s & 0 \\ 0 & 1/s \end{bmatrix} = 1 \tag{19}$$

8.4 旋转：行列式值为 1

本节介绍旋转，如图 14 所示。旋转是非常重要的几何变换，我们会在本书后续特征值分解、奇异值分解等内容中看到旋转。

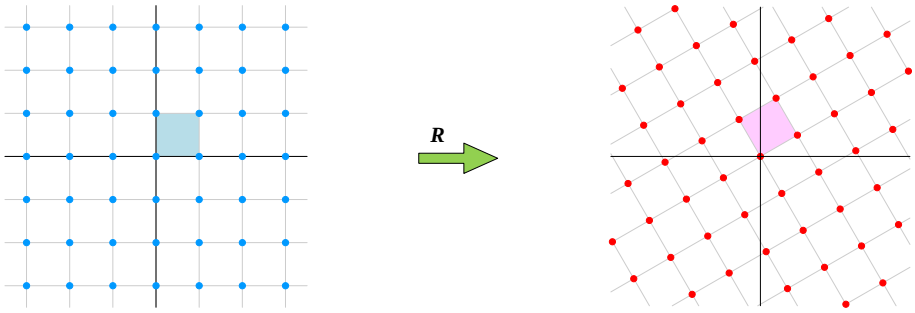


图 14. 旋转变换的网格

列向量坐标 $\boldsymbol{x}$ 逆时针旋转 θ 得到 $\boldsymbol{z}$：

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{R}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{20}$$

其中 $\boldsymbol{R}$ 为，

$$\boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \tag{21}$$

(21) 代入 (20)，得到下式：

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{22}$$

记住上式并不难，下面介绍一个小技巧。用 $\boldsymbol{R} = [\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2]$ 分别乘 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 得到 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r}_1 &= \boldsymbol{R}\boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) \\ \sin(\theta) \end{bmatrix} \\ \boldsymbol{r}_2 &= \boldsymbol{R}\boldsymbol{e}_2 = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sin(\theta) \\ \cos(\theta) \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{23}$$

几何变换过程如图 15 所示，$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 逆时针旋转 θ 分别得到 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$。图 15 告诉了我们 $\boldsymbol{R}$ 中哪些元素是 cos()、还是 sin()。此外，$\boldsymbol{R}$ 中唯一一个带负号的元素就是 $\boldsymbol{r}_2$ 的第一个元素，对应 $\boldsymbol{r}_2$ 横轴坐标。

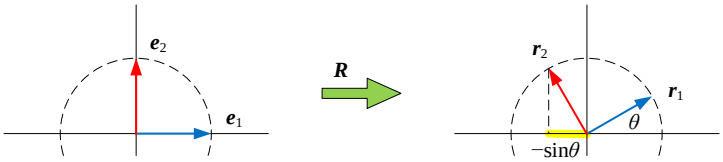


图 15. $\boldsymbol{R}$ 作用于 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$

$\boldsymbol{R}$ 的行列式值为 1，也就是说旋转前后面积不变：

$$\det\begin{bmatrix}\cos(\theta) & -\sin(\theta)\\ \sin(\theta) & \cos(\theta)\end{bmatrix} = \cos(\theta)^2 + \sin(\theta)^2 = 1 \tag{24}$$

对于数据矩阵情况，逆时针旋转 θ 的矩阵乘法如下：

$$\boldsymbol{Z}_{n\times 2} = \boldsymbol{X}_{n\times 2}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{X}_{n\times 2}\begin{bmatrix}\cos(\theta) & \sin(\theta)\\ -\sin(\theta) & \cos(\theta)\end{bmatrix} \tag{25}$$

(22) 和 (25) 两个等式的联系就是转置运算。图 16 所示为几何形状旋转操作的几个例子。

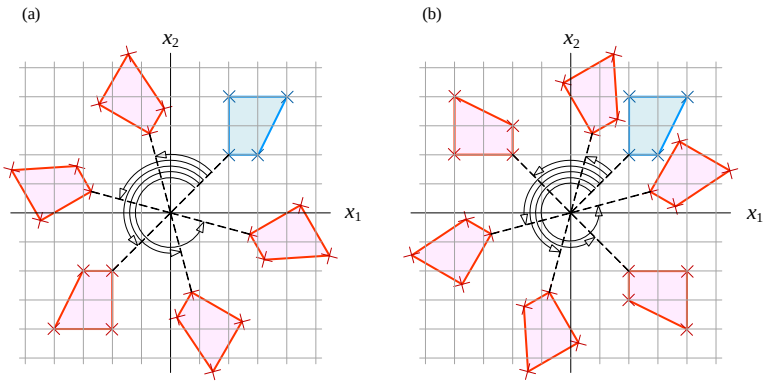
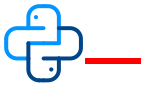


图 16. 旋转的两个例子



Bk4_Ch8_02.py 绘制图 16。

在 Bk4_Ch8_02.py 基础上，我们用 Streamlit 做了一个 App，大家可以输入不同角度，将代表标准正交基的“方方正正网格”旋转得到不同规范正交基。请大家参考 Streamlit_Bk4_Ch8_02.py。

下面采用《数学要素》一册介绍的极坐标推导本节给出的旋转变换矩阵 $\boldsymbol{R}$。

图 17 给出的是向量 $\boldsymbol{a}$ 在极坐标系坐标为 (r, α)，在正交系中向量 $\boldsymbol{a}$ 的横纵坐标为：

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r\cos\alpha \\ r\sin\alpha \end{bmatrix} \tag{26}$$

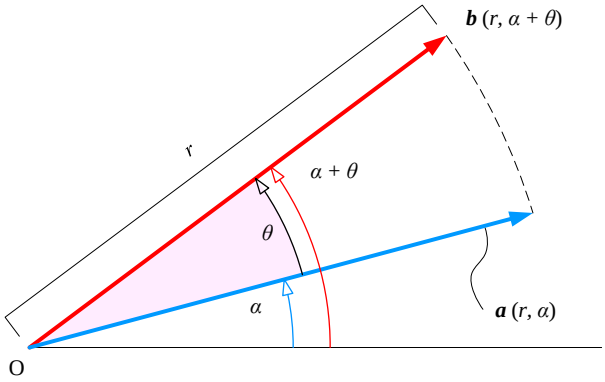


图 17. 极坐标中解释旋转

向量 $\boldsymbol{a}$ 逆时针旋转 θ 后，得到向量 $\boldsymbol{b}$。$\boldsymbol{b}$ 对应极坐标为 $(r, \alpha+\theta)$。向量 $\boldsymbol{b}$ 对应的横纵坐标为：

$$\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r\cos(\alpha+\theta) \\ r\sin(\alpha+\theta) \end{bmatrix} \tag{27}$$

(27) 展开得到：

$$\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r\cos(\alpha+\theta) \\ r\sin(\alpha+\theta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underbrace{r\cos\alpha}_{x_1}\cos\theta - \underbrace{r\sin\alpha}_{x_2}\sin\theta \\ \underbrace{r\sin\alpha}_{x_2}\cos\theta + \underbrace{r\cos\alpha}_{x_1}\sin\theta \end{bmatrix} \tag{28}$$

将 (26) 中 x_1 和 x_2 代入 (28)，得到：

$$\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1\cos\theta - x_2\sin\theta \\ x_1\sin\theta + x_2\cos\theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{29}$$

逆矩阵

旋转矩阵 $\boldsymbol{R}$ 求逆得到 $\boldsymbol{R}^{-1}$：

$$\boldsymbol{R}^{-1}=\begin{bmatrix}\cos(\theta) & -\sin(\theta)\\ \sin(\theta) & \cos(\theta)\end{bmatrix}^{-1}=\frac{1}{\cos(\theta)^2+\sin(\theta)^2}\begin{bmatrix}\cos(\theta) & \sin(\theta)\\ -\sin(\theta) & \cos(\theta)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos(-\theta) & -\sin(-\theta)\\ \sin(-\theta) & \cos(-\theta)\end{bmatrix} \tag{30}$$

如图 18 所示，几何角度来看，$\boldsymbol{R}^{-1}$ 代表朝着相反方向旋转。

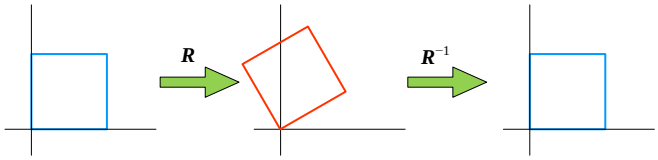


图 18. 旋转的逆运算

图 19 所示为从数据角度看旋转操作。数据完成中心化 (平移) 后，质心位于原点，即椭圆中心位于原点。然后，中心化数据按照特定的角度绕原点旋转后，让椭圆的长轴位于横轴。也就是说，旋转椭圆变成正椭圆。图 19 中正椭圆经过缩放后可以得到单位圆。单位圆意味着随机变量满足二元高斯分布 $N(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}_{2\times 2})$。

图 19 中，“旋转 → 缩放”过程是**主成分分析** (principal component analysis, PCA) 的思路。反向来看，“缩放 → 旋转”将单位圆变成旋转椭圆的过程，代表利用满足 IID $N(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}_{2\times 2})$ 二元随机数产生具有指定相关性系数、指定均方差的随机数。IID 指的是**独立同分布** (Independent and Identically Distributed)。

这些内容，我们会在《概率统计》和《数据科学》两册书中深入讲解。

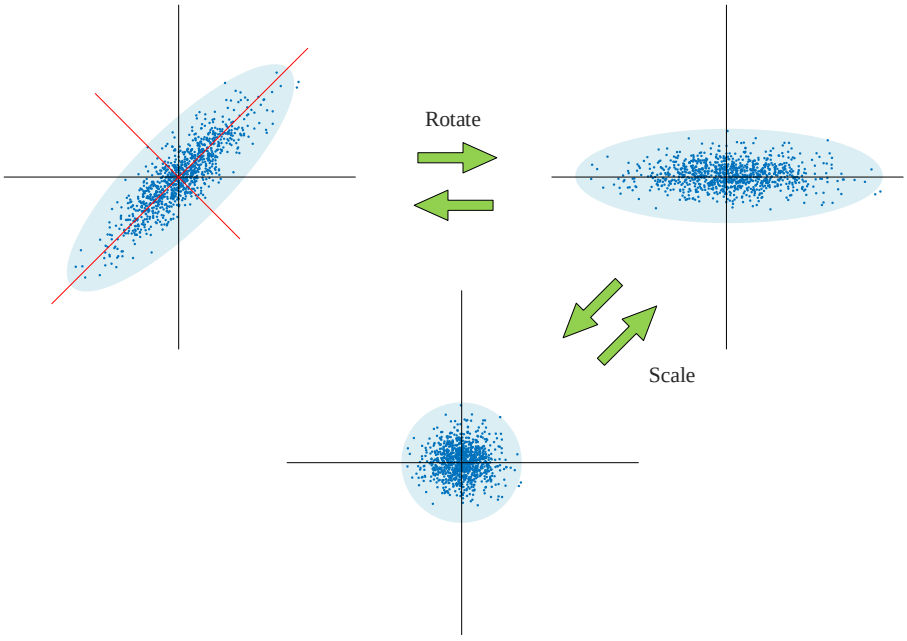


图 19. 数据视角下的旋转和缩放

矩阵乘法不满足交换律

本书第 4 章讲过，一般来说，矩阵乘法不满足交换律，即，

$$\boldsymbol{AB} \neq \boldsymbol{BA} \tag{31}$$

现在我们用图形的几何变换来说明这一点。

图 20 所示左侧方格，先经过 $\boldsymbol{S}$ 缩放，再通过 $\boldsymbol{R}$ 旋转得到右侧红色网格。图 20 红色网格显然不同于图 21。因为图 21 红色网格是先通过 $\boldsymbol{R}$ 旋转、再经过 $\boldsymbol{S}$ 缩放得到的。

再次强调，如果用列向量 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2]^T$ 代表坐标点时，矩阵乘法 $\boldsymbol{RSx}$ 代表先缩放 ($\boldsymbol{S}$)、后旋转 ($\boldsymbol{R}$)；而矩阵乘法 $\boldsymbol{SRx}$ 代表先旋转 ($\boldsymbol{R}$)、后缩放 ($\boldsymbol{S}$)。

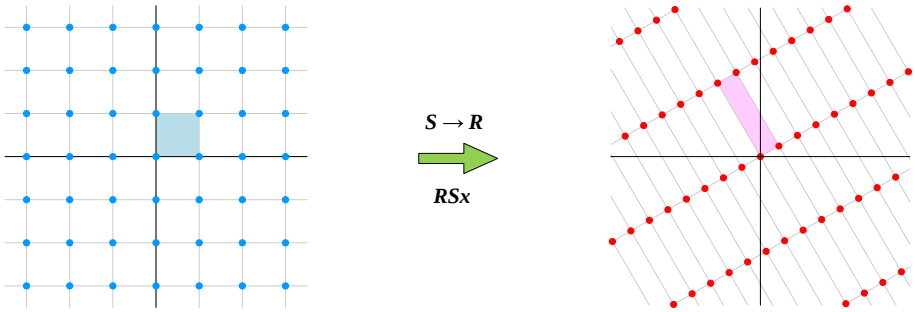


图 20. 先缩放再旋转

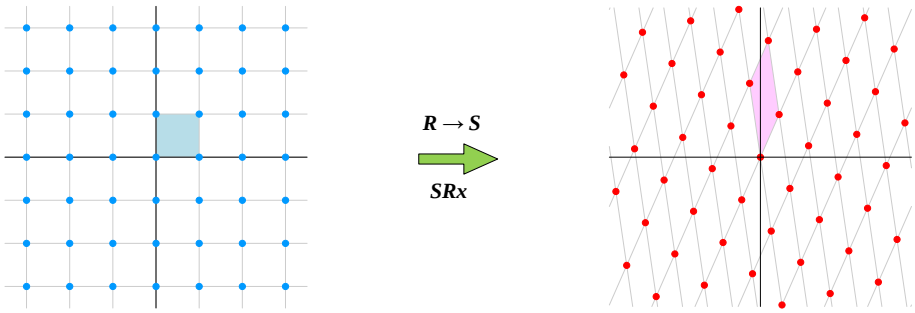


图 21. 先旋转再缩放

两个 2 × 2 缩放矩阵相乘满足交换律，因为它们都是对角阵。下式的 $\boldsymbol{S}_1$ 和 $\boldsymbol{S}_2$ 均为缩放矩阵，相乘时交换顺序不影响结果：

$$\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{S}_2 = \boldsymbol{S}_2\boldsymbol{S}_1 \tag{32}$$

其中，缩放比例都不为 0。图 22 所示为，按不同顺序先后缩放最终结果相同。

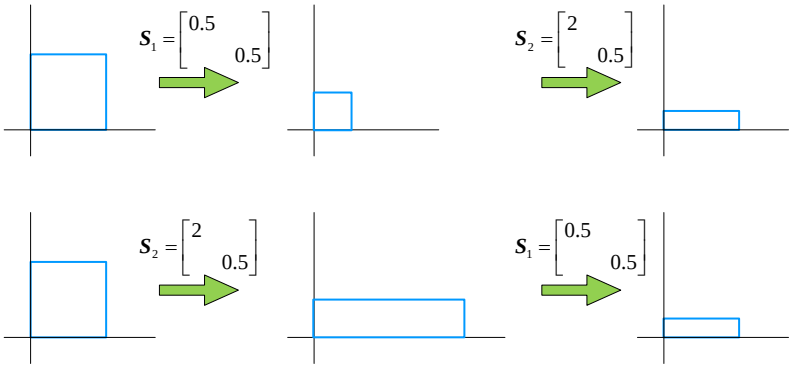


图 22. 两个 2 × 2 缩放矩阵连乘满足交换律

此外，两个形状相同的旋转矩阵相乘也满足交换律。令 $\boldsymbol{R}_1$ 和 $\boldsymbol{R}_2$ 分别为：

$$\boldsymbol{R}_1 = \begin{bmatrix} \cos(\theta_1) & -\sin(\theta_1) \\ \sin(\theta_1) & \cos(\theta_1) \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{R}_2 = \begin{bmatrix} \cos(\theta_2) & -\sin(\theta_2) \\ \sin(\theta_2) & \cos(\theta_2) \end{bmatrix} \tag{33}$$

根据三角恒等式，$\boldsymbol{R}_1$ 和 $\boldsymbol{R}_2$ 的乘积可以整理为：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{R}_1\boldsymbol{R}_2 &= \begin{bmatrix} \cos(\theta_1) & -\sin(\theta_1) \\ \sin(\theta_1) & \cos(\theta_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta_2) & -\sin(\theta_2) \\ \sin(\theta_2) & \cos(\theta_2) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta_1)\cos(\theta_2) - \sin(\theta_1)\sin(\theta_2) & -\cos(\theta_1)\sin(\theta_2) - \sin(\theta_1)\cos(\theta_2) \\ \sin(\theta_1)\cos(\theta_2) + \cos(\theta_1)\sin(\theta_2) & -\sin(\theta_1)\sin(\theta_2) + \cos(\theta_1)\cos(\theta_2) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta_1 + \theta_2) & -\sin(\theta_1 + \theta_2) \\ \sin(\theta_1 + \theta_2) & \cos(\theta_1 + \theta_2) \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{34}$$

同理，$\boldsymbol{R}_2$ 和 $\boldsymbol{R}_1$ 的乘积也可以整理为：

$$\boldsymbol{R}_2\boldsymbol{R}_1 = \begin{bmatrix} \cos(\theta_1 + \theta_2) & -\sin(\theta_1 + \theta_2) \\ \sin(\theta_1 + \theta_2) & \cos(\theta_1 + \theta_2) \end{bmatrix} \tag{35}$$

图 23 给出的例子从几何角度说明上述规律。此外，请大家注意图中原点位置不变。

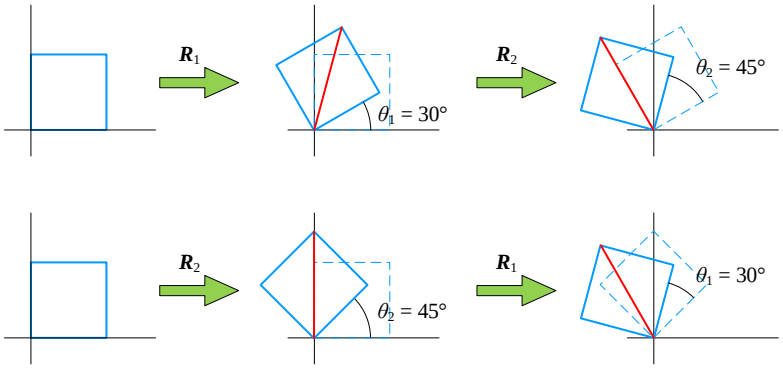


图 23. 两个 2 × 2 旋转矩阵连乘满足交换律

8.5 镜像：行列式值为负

本节介绍两种方式完成镜像计算的方法。

切向量

第一种镜像用切向量来完成。切向量 $\boldsymbol{\tau}$ 具体为：

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_1 \\ \tau_2 \end{bmatrix} \tag{36}$$

关于通过原点、切向量为 $\boldsymbol{\tau}$ 直线**镜像** (reflection) 的线性变换操作如下：

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \underbrace{\frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2}\begin{bmatrix} \tau_1^2 - \tau_2^2 & 2\tau_1\tau_2 \\ 2\tau_1\tau_2 & \tau_2^2 - \tau_1^2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{T}} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{37}$$

对 $\boldsymbol{T}$ 求行列式值：

$$\det\left(\frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2}\begin{bmatrix} \tau_1^2 - \tau_2^2 & 2\tau_1\tau_2 \\ 2\tau_1\tau_2 & \tau_2^2 - \tau_1^2 \end{bmatrix}\right) = \frac{-\left(\tau_1^2 - \tau_2^2\right)^2 - 4\tau_1^2\tau_2^2}{\|\boldsymbol{\tau}\|^4} = \frac{-\left(\tau_1^2 + \tau_2^2\right)^2}{\left(\tau_1^2 + \tau_2^2\right)^2} = -1 \tag{38}$$

$\boldsymbol{T}$ 的行列式值为负数，这说明线性变换前后图形发生翻转。图 24 给出两个镜像的例子。

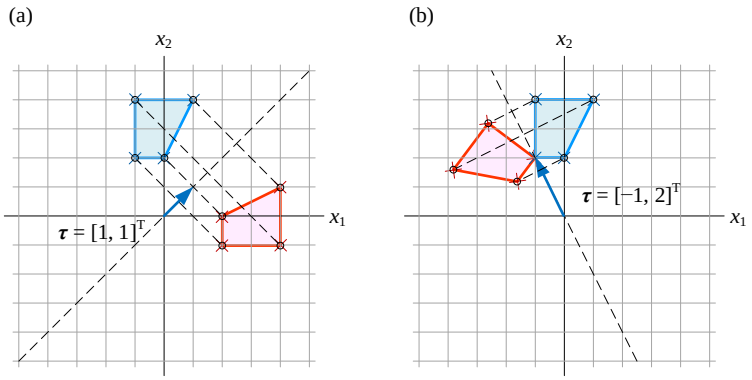


图 24. 两个镜像变换的例子

角度

第二种镜像通过角度定义。关于通过原点、方向和水平轴夹角为 θ 直线镜像，类比 (36)，直线的切向量相当于 $[\cos\theta, \sin\theta]^T$，完成镜像的运算为：

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{bmatrix}}_{T} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{39}$$

实质上，(38) 和 (39) 完全等价。下一章将利用正交投影这个工具推导 (39)。

关于横纵轴镜像

关于横轴镜像对称的矩阵运算为：

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{40}$$

关于纵轴镜像对称的矩阵运算为：

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{41}$$

请大家自行计算以上两个转化矩阵 $\boldsymbol{T}$ 的行列式值。

8.6 投影：降维操作

本节从几何角度简单介绍投影。不做特殊说明的话，本书中提到的投影都是**正交投影** (orthogonal projection)。

切向量

给定某点的坐标为 (x_1, x_2)，向通过原点、切向量为 $\boldsymbol{\tau}$ $[\tau_1, \tau_2]^T$ 直线方向**投影** (projection)，投影点坐标 (z_1, z_2) 为：

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \underbrace{\frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2} \begin{bmatrix} \tau_1^2 & \tau_1\tau_2 \\ \tau_1\tau_2 & \tau_2^2 \end{bmatrix}}_{P} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{42}$$

正交投影的特点是，(x_1, x_2) 和 (z_1, z_2) 两点连线垂直于 $\boldsymbol{\tau}$。如图 25 所示，投影是一个降维的过程，平面网格“坍塌”成一条直线。

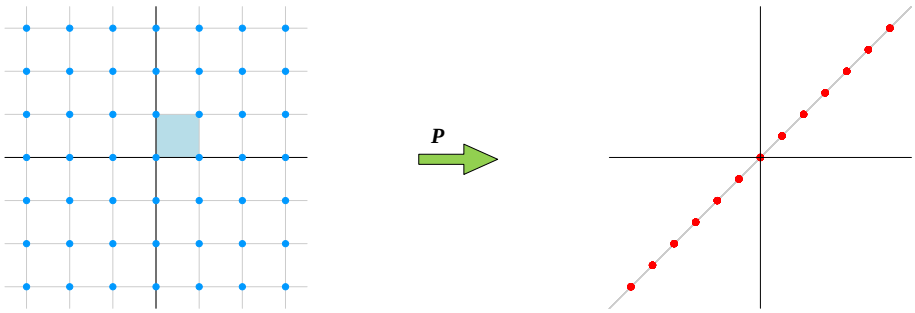


图 25. 投影网格

(42) 中矩阵 $\boldsymbol{P}$ 的行列式值为 0：

$$\det\left(\frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2}\begin{bmatrix}\tau_1^2 & \tau_1\tau_2\\ \tau_1\tau_2 & \tau_2^2\end{bmatrix}\right)=0 \tag{43}$$

横、纵轴

向横轴投影，相当于将图形压扁到横轴：

$$\begin{bmatrix}z_1\\ z_2\end{bmatrix}=\underbrace{\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{P}}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix} \tag{44}$$

向纵轴投影对应的矩阵运算为：

$$\begin{bmatrix}z_1\\ z_2\end{bmatrix}=\underbrace{\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{P}}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix} \tag{45}$$

显然 (44) 和 (45) 中两个不同矩阵 $\boldsymbol{P}$ 的行列式值都为 0。

秩

简单整理 $\boldsymbol{P}$ 得到：

$$\boldsymbol{P}=\frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2}\begin{bmatrix}\tau_1\begin{bmatrix}\tau_1\\ \tau_2\end{bmatrix} & \tau_2\begin{bmatrix}\tau_1\\ \tau_2\end{bmatrix}\end{bmatrix} \tag{46}$$

我们发现，$\boldsymbol{P}$ 的列向量之间存在倍数关系，即 $\boldsymbol{P}$ 的列向量线性相关。也就是说，$\boldsymbol{P}$ 的秩为 1，即 rank($\boldsymbol{P}$) = 1。也请大家自行计算 (44) 和 (45) 中矩阵 $\boldsymbol{P}$ 的秩。

张量积

再进一步，我们发现 (46) 可以写成：

$$\boldsymbol{P}=\frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2}\begin{bmatrix}\tau_1\begin{bmatrix}\tau_1\\\tau_2\end{bmatrix} & \tau_2\begin{bmatrix}\tau_1\\\tau_2\end{bmatrix}\end{bmatrix}=\frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2}\begin{bmatrix}\tau_1\\\tau_2\end{bmatrix}@\begin{bmatrix}\tau_1 & \tau_2\end{bmatrix}=\left(\frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|}\begin{bmatrix}\tau_1\\\tau_2\end{bmatrix}\right)@\left(\frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|}\begin{bmatrix}\tau_1\\\tau_2\end{bmatrix}\right)^{\mathrm{T}} \tag{47}$$

容易发现，上式中存在本书第 2 章讲过的向量**单位化** (vector normalization)。$\boldsymbol{\tau}$ 单位化得到**单位向量** (unit vector) $\hat{\boldsymbol{\tau}}$：

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}=\frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|}\begin{bmatrix}\tau_1\\\tau_2\end{bmatrix} \tag{48}$$

(47) 可以进一步写成张量积的形式，具体如下：

$$\boldsymbol{P}=\hat{\boldsymbol{\tau}}\hat{\boldsymbol{\tau}}^{\mathrm{T}}=\hat{\boldsymbol{\tau}}\otimes\hat{\boldsymbol{\tau}} \tag{49}$$

大家可能已经疑惑了，正交投影怎么和张量积联系起来了？卖个关子，我们把这个问题留给下两章回答。

8.7 再谈行列式值：几何视角

有了本章之前的内容，本节总结行列式值的几何意义。

对于一个 2 × 2 矩阵 $\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 代表某种几何变换，而 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值决定了变换前后面积缩放比例。

2 × 2 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 写成 $[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2]$。在 $\boldsymbol{A}$ 的作用下，$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 单位向量变成 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$：

$$\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}}\underbrace{\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{e}_1}=\boldsymbol{a}_1,\quad \underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}}\underbrace{\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{e}_2}=\boldsymbol{a}_2 \tag{50}$$

本节前文提过以 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 为边构成的平行四边形为正方形，对应的面积为 1。以 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 为边构成的一个平行四边形对应的面积就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值。

行列值为正

举个例子，给定矩阵 $\boldsymbol{A}$：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}3 & 1\\1 & 4\end{bmatrix} \tag{51}$$

把 $\boldsymbol{A}$ 写成 $[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2]$，其中：

$$\boldsymbol{a}_1=\begin{bmatrix}3\\1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{a}_2=\begin{bmatrix}1\\4\end{bmatrix} \tag{52}$$

$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 向量经过矩阵 $\boldsymbol{A}$ 线性变换分别得到 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{e}_1}=\underbrace{\begin{bmatrix} 3 \\ 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{a}_1}, \quad \underbrace{\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{e}_2}=\underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 4 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{a}_2} \tag{53}$$

如图 26 所示，$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 向量构成的正方形面积为 1。而 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 向量构成的平行四边形面积为 11，即对应 $|\boldsymbol{A}| = 11$，平面几何形状放大 11 倍。

反之，如果 $0 < |\boldsymbol{A}| < 1$，变换之后平面几何形状面积缩小。当然，行列式值可以为 0，也可以为负数。

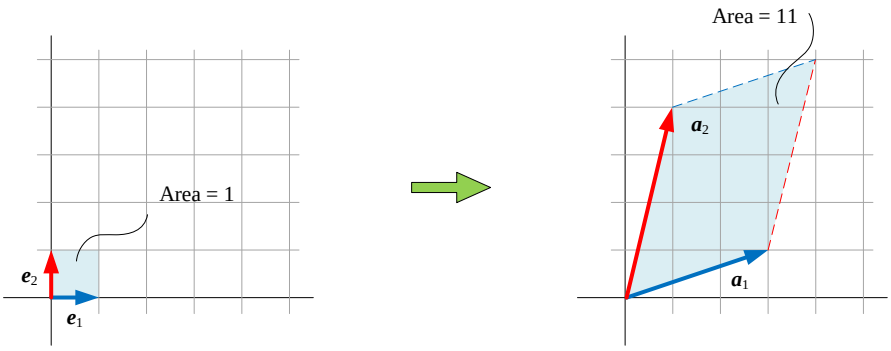


图 26. 行列式值为正

行列式值为 0

如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 行列式值为 0，从几何上来讲，$\boldsymbol{A}$ 中肯定含有“降维”变换成分。我们看下面这个例子，$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 向量经过矩阵线性变换得到 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{e}_1}=\underbrace{\begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{a}_1}, \quad \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{e}_2}=\underbrace{\begin{bmatrix} 4 \\ 4 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{a}_2} \tag{54}$$

如图 27 所示，$\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 向量共线，夹角为 0°。$\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 构成图形的面积为 0，对应 $|\boldsymbol{A}| = 0$。

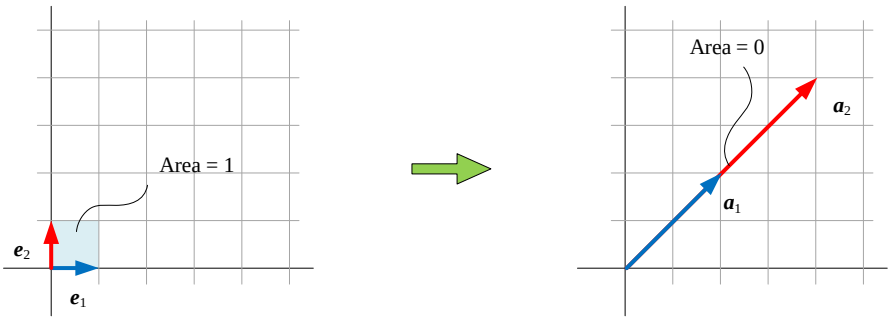


图 27. 行列式值为零

行列式值为负

如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 行列式值为负，几何上来看，图形翻转。如图 28 所示，几何变换前后，逆时针来看，蓝色箭头和红色箭头“先后次序”发生调转。

图 28 中图形几何变换后面积则放大了 10 倍 (行列式值的绝对值为 10)。请大家根据图 28 中 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 两个向量确定 $\boldsymbol{A}$ 的具体值。

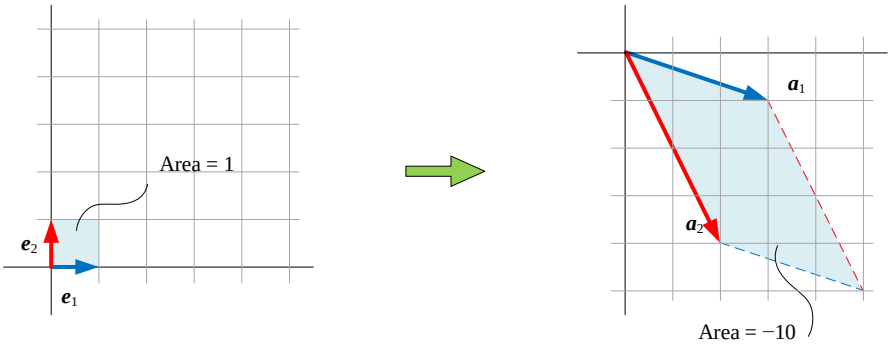
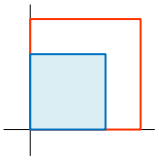
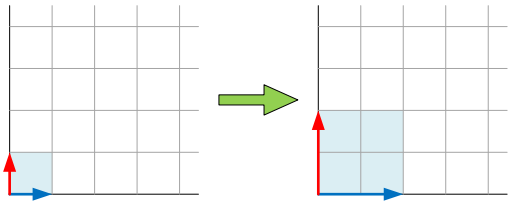
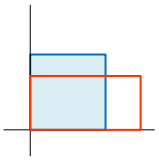
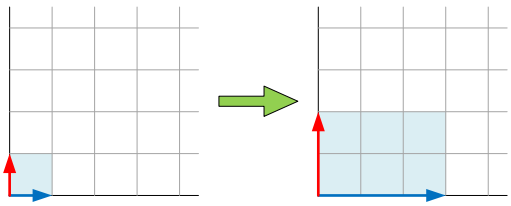
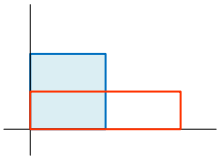
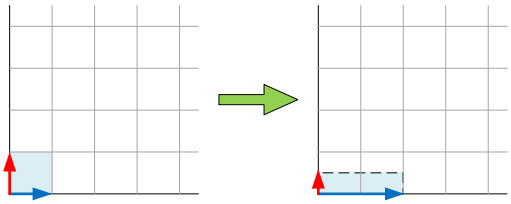
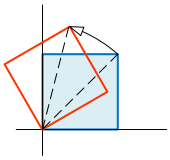
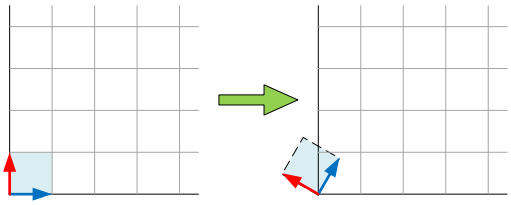
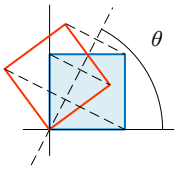
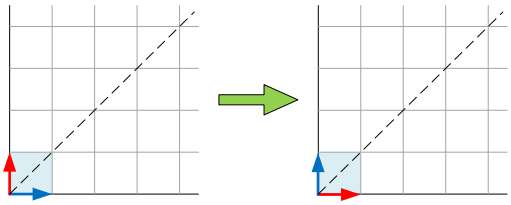
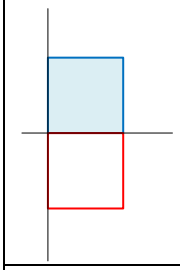
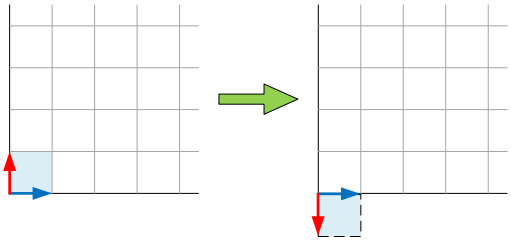
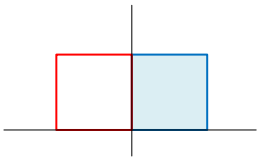
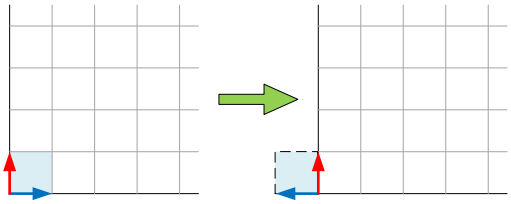
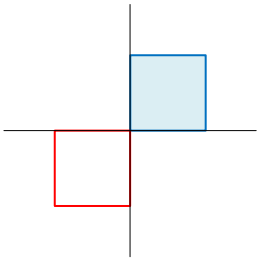
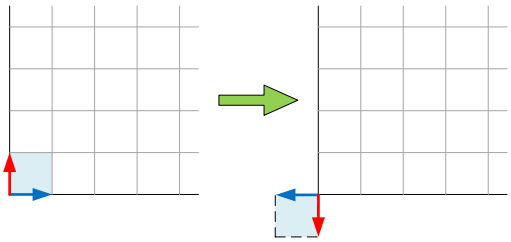


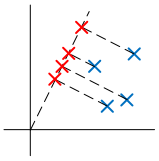
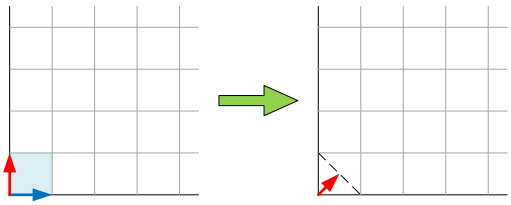
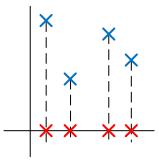
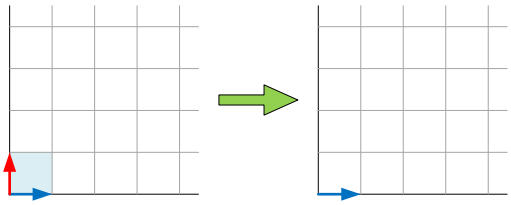
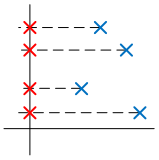
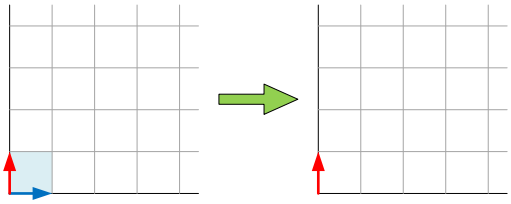
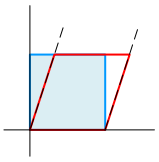
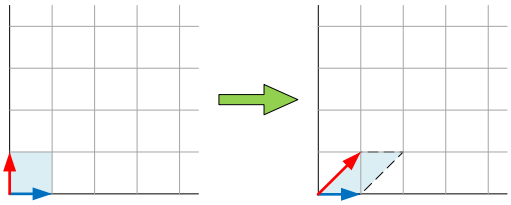
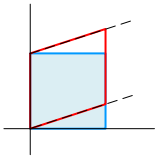
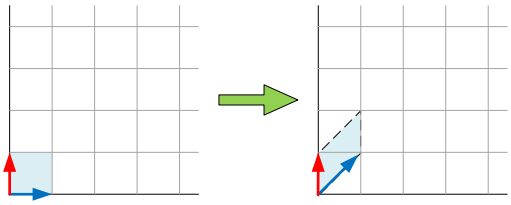
图 28. 行列式值为负

表 2 总结本章主要几何变换。表中还给出具体示例、行列式值、秩，并比较几何变换前后图形变化。

表 2. 本章主要几何变换示例

几何变换	示例、行列式值、秩	图形变化
等比例缩放 	$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}2\\ 0\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix}0\\ 2\end{bmatrix}$ $\lvert\boldsymbol{A}\rvert=4,\quad \operatorname{rank}(\boldsymbol{A})=2$	
非等比例缩放 	$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}3 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}3\\ 0\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix}0\\ 2\end{bmatrix}$ $\lvert\boldsymbol{A}\rvert=6,\quad \operatorname{rank}(\boldsymbol{A})=2$	
挤压 s 倍 	$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 0.5\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}2\\ 0\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix}0\\ 0.5\end{bmatrix}$ $\lvert\boldsymbol{A}\rvert=1,\quad \operatorname{rank}(\boldsymbol{A})=2$	

逆时针旋转 θ 	$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1/2 & -\sqrt{3}/2\\ \sqrt{3}/2 & 1/2\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}1/2\\ \sqrt{3}/2\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix}-\sqrt{3}/2\\ 1/2\end{bmatrix}$ $\lvert\boldsymbol{A}\rvert=1,\quad \operatorname{rank}(\boldsymbol{A})=2$ 逆时针旋转 60° $\boldsymbol{A}$ 是正交矩阵	
关于通过原点、方向和水平轴夹角为 θ 直线镜像 	$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}$ $\lvert\boldsymbol{A}\rvert=-1,\quad \operatorname{rank}(\boldsymbol{A})=2$ 夹角为 45° $\boldsymbol{A}$ 是正交矩阵	
关于横轴镜像对称 	$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix}0\\ -1\end{bmatrix}$ $\lvert\boldsymbol{A}\rvert=-1,\quad \operatorname{rank}(\boldsymbol{A})=2$ $\boldsymbol{A}$ 是正交矩阵	
关于纵轴镜像对称 	$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}-1\\ 0\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}$ $\lvert\boldsymbol{A}\rvert=-1,\quad \operatorname{rank}(\boldsymbol{A})=2$ $\boldsymbol{A}$ 是正交矩阵	
关于原点对称 	$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}-1\\ 0\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix}0\\ -1\end{bmatrix}$ $\lvert\boldsymbol{A}\rvert=1,\quad \operatorname{rank}(\boldsymbol{A})=2$ $\boldsymbol{A}$ 是正交矩阵	

向通过原点、切向量为 $\boldsymbol{\tau}[\tau_1, \tau_2]^T$ 直线投影 	$\boldsymbol{A}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}$ $\lvert\boldsymbol{A}\rvert=0,\quad \text{rank}(\boldsymbol{A})=1$	
向横轴投影 	$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$ $\lvert\boldsymbol{A}\rvert=0,\quad \text{rank}(\boldsymbol{A})=1$	
向纵轴投影 	$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}$ $\lvert\boldsymbol{A}\rvert=0,\quad \text{rank}(\boldsymbol{A})=1$	
沿水平方向剪切 	$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 0 & 1\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}$ $\lvert\boldsymbol{A}\rvert=1,\quad \text{rank}(\boldsymbol{A})=2$	
沿竖直方向剪切 	$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 1 & 1\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}$ $\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}$ $\lvert\boldsymbol{A}\rvert=1,\quad \text{rank}(\boldsymbol{A})=2$	

在上一章第一个 Streamlit 应用中，我们看到如何产生不同“平行且等距网格”。在此基础上，本章 Streamlit 应用增加了矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对单位圆的线性变换。请大家参考 Streamlit_Bk4_Ch8_03.py。

本章讲了很多种几何变换，请大家格外关注平移、缩放、旋转和投影。我们将会在接下来的内容中反复使用这四种几何变换。

此外，本章在讲解几何变换的同时，还和大家从几何角度回顾并探讨了矩阵可逆性、矩阵乘法不满足交换律、秩、行列式值等线性代数概念。请大家特别注意行列式值的几何视角，我们将在特征值分解中再进一步探讨。

用几何视角理解线性代数概念，是学习线性代数的唯一“捷径”。此外，数据视角会让大家看到线性代数的实用性，并直接和编程联结起来。

希望大家记住：

有数据的地方，就有向量！

有向量的地方，就有几何！

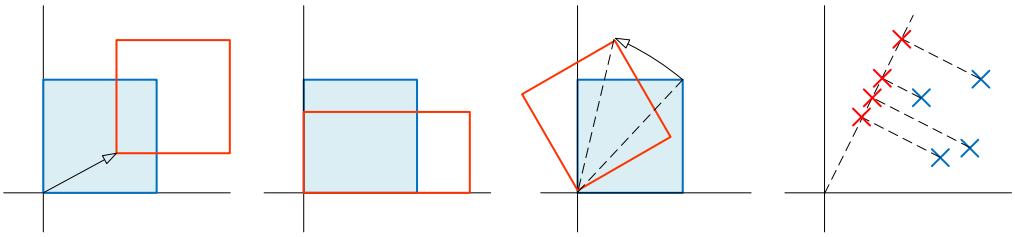


图 29. 总结本章重要内容的四幅图

9 Orthogonal Projection
正交投影

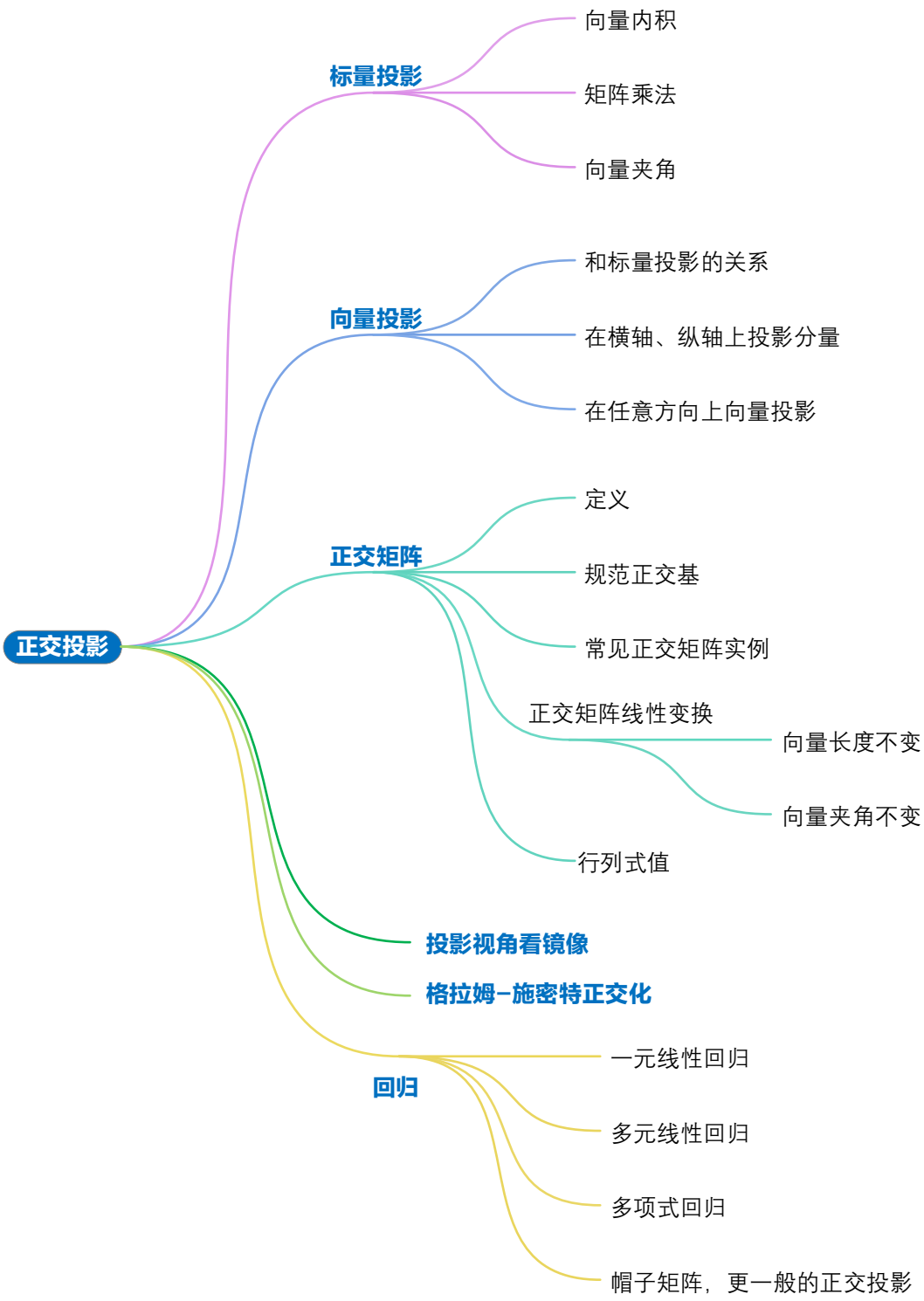
应用几乎无处不在

数学好比给了人类第六感。

Mathematics seems to endow one with something like a new sense.

—— 查尔斯·达尔文 (Charles Darwin) | 进化论之父 | 1809 ~ 1882

- `numpy.random.randn()` 生成满足正态分布的随机数
- `numpy.linalg.qr()` QR 分解
- `seaborn.heatmap()` 绘制热图



9.1 标量投影：结果为标量

正交

打个比方，**正交投影** (orthogonal projection) 类似正午头顶阳光将物体投影到地面上，如图 1 所示。此时，假设光线之间相互平行和地面垂直。

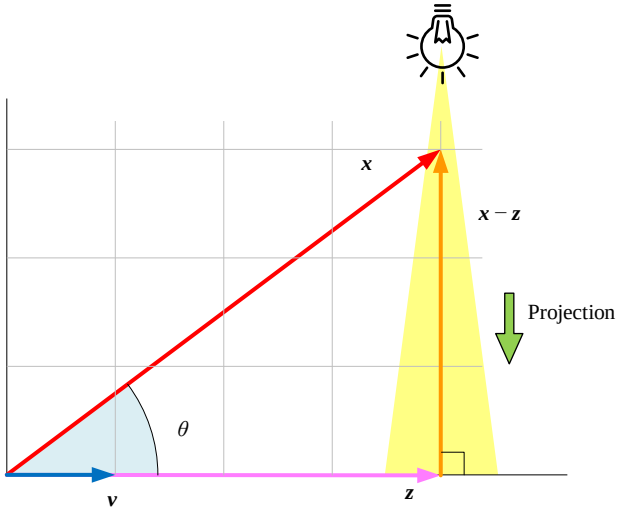


图 1. 正交投影的意义

把列向量 $\boldsymbol{x}$ 看成是一根木杆，而列向量 $\boldsymbol{v}$ 方向代表地面水平方向。$\boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{v}$ 方向上的投影结果为 $\boldsymbol{z}$。向量 $\boldsymbol{z}$ 的长度 (向量模) 就是 $\boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{v}$ 方向上的**标量投影** (scalar projection)。

令，标量 s 为向量 $\boldsymbol{z}$ 的模。

由于 $\boldsymbol{z}$ 和非零向量 $\boldsymbol{v}$ 共线，因此 $\boldsymbol{z}$ 与 $\boldsymbol{v}$ 的单位向量共线，它们之间的关系为：

$$\boldsymbol{z} = s\frac{\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{v}\|} \tag{1}$$

很明显，如图 1 所示，$\boldsymbol{x}-\boldsymbol{z}$ 垂直于 $\boldsymbol{v}$，因此两者向量内积为 0：

$$(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{z})\cdot\boldsymbol{v} = 0 \tag{2}$$

用矩阵乘法，(2) 可以写成，

$$(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{z})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v} = 0 \tag{3}$$

将 (1) 代入 (3) 得到：

$$\left(\boldsymbol{x} - s\frac{\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{v}\|} \right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{v} = 0 \tag{4}$$

(4) 经过整理，得到 s 的解析式，也就是 $\boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{v}$ 方向上的标量投影为：

$$s = \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{v}\|} \tag{5}$$

上式可以写成如下几种形式：

$$s = \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{v}\|} = \frac{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{\|\boldsymbol{v}\|} = \frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{v}\|} = \frac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{x}}{\|\boldsymbol{v}\|} = \frac{\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{v} \rangle}{\|\boldsymbol{v}\|} \tag{6}$$

⚠ 注意，$\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 为等行数列向量。

特别地，如果 $\boldsymbol{v}$ 本身就是单位向量，(6) 可以写作：

$$s = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{x} = \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{v} \rangle \tag{7}$$

本系列丛书，一般会用 $\boldsymbol{e}$、$\boldsymbol{v}$、$\boldsymbol{u}$ 等代表单位向量。

向量夹角

下面介绍如何从向量夹角入手推导标量投影。

如图 1 所示，向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 的相对夹角为 θ，这个夹角的余弦值 $\cos\theta$ 可以通过下式求解：

$$\cos\theta = \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{v}\|} = \frac{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{v}\|} = \frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{v}\|} = \frac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{x}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{v}\|} = \frac{\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{v} \rangle}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{v}\|} \tag{8}$$

而 $\boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{v}$ 方向上的标量投影 s 便是向量 $\boldsymbol{x}$ 的模乘 $\cos\theta$：

$$s = \|\boldsymbol{x}\|\cos\theta = \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{v}\|} = \frac{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{\|\boldsymbol{v}\|} = \frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{v}\|} = \frac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{x}}{\|\boldsymbol{v}\|} = \frac{\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{v} \rangle}{\|\boldsymbol{v}\|} \tag{9}$$

这样，我们便得到和 (6) 一致的结果。

9.2 向量投影：结果为向量

相对标量投影，我们更经常使用**向量投影** (vector projection)。

顾名思义，向量投影就是标量投影结果再乘上 $\boldsymbol{v}$ 的方向，即 s 乘以 $\boldsymbol{v}$ 的单位向量。因此，$\boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{v}$ 方向上的向量投影实际上就是 (1)，即：

$$\text{proj}_{\boldsymbol{v}}\left(\boldsymbol{x}\right)=s\frac{\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{v}\|}=\frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{v}}{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{v}}\boldsymbol{v}=\frac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{v}}\boldsymbol{v}=\frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{v}\|^2}\boldsymbol{v}=\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}}\boldsymbol{v}=\frac{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}}\boldsymbol{v} \tag{10}$$

用尖括号<>表达标量积，$\boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{v}$ 方向上的向量投影可以记做：

$$\text{proj}_{\boldsymbol{v}}\left(\boldsymbol{x}\right)=\frac{\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{v}\rangle}{\langle\boldsymbol{v},\boldsymbol{v}\rangle}\boldsymbol{v} \tag{11}$$

特别地，如果 $\boldsymbol{v}$ 为单位向量，$\boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{v}$ 方向上的向量投影则可以写成：

$$\text{proj}_{\boldsymbol{v}}\left(\boldsymbol{x}\right)=\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{v}\rangle\boldsymbol{v}=\left(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{v}\right)\boldsymbol{v}=\left(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{x}\right)\boldsymbol{v}=\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}\right)\boldsymbol{v}=\left(\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)\boldsymbol{v} \tag{12}$$

举个例子

实际上，获得平面上某一个向量的横、纵轴坐标，或者计算横、纵轴的向量分量，也是一个投影过程。

下面看一个实例。给定如下列向量 $\boldsymbol{x}$，

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}4\\3\end{bmatrix} \tag{13}$$

如图 2 所示，列向量 $\boldsymbol{x}$ 既可以代表平面直角坐标系上的一点，也可以代表一个起点为原点 (0, 0)、终点为 (4, 3) 的向量。

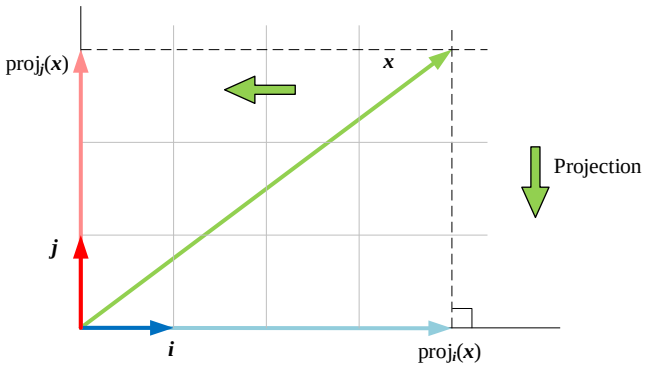


图 2. $\boldsymbol{x}$ 向 $\boldsymbol{i}$ 和 $\boldsymbol{j}$ 投影

$\boldsymbol{x}$ 向单位向量 $\boldsymbol{i}=[1,0]^{\mathrm{T}}$ 方向上投影得到的标量投影为 $\boldsymbol{x}$ 横轴坐标：

$$\boldsymbol{i}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{i}=\begin{bmatrix}4\\3\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=4 \tag{14}$$

$\boldsymbol{x}$ 向单位向量 $\boldsymbol{j}=[0,1]^{\mathrm{T}}$ 方向上投影得到的标量投影就是 $\boldsymbol{x}$ 纵轴坐标：

$$\boldsymbol{j}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{j}=\begin{bmatrix}4\\3\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}=3 \tag{15}$$

$\boldsymbol{x}$ 在单位向量 $\boldsymbol{i} = [1, 0]^T$ 方向上向量投影就是 $\boldsymbol{x}$ 在横轴上的分量：

$$\text{proj}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{i})\boldsymbol{i} = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \boldsymbol{i} = 4\boldsymbol{i} \tag{16}$$

$\boldsymbol{x}$ 在单位向量 $\boldsymbol{j} = [0, 1]^T$ 方向上向量投影就是 $\boldsymbol{x}$ 在纵轴上的分量：

$$\text{proj}_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{j})\boldsymbol{j} = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \boldsymbol{j} = 3\boldsymbol{j} \tag{17}$$

如果单位向量 $\boldsymbol{v}$ 为，

$$\boldsymbol{v} = \begin{bmatrix} 4/5 \\ 3/5 \end{bmatrix} \tag{18}$$

$\boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{v}$ 方向上投影得到的标量投影为：

$$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{v} = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 4/5 \\ 3/5 \end{bmatrix} = 5 = \|\boldsymbol{x}\| \tag{19}$$

如图 3 所示，可以发现，$\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 实际上共线，也就是夹角为 0°。这显然是个特例。

从向量空间角度来看，向量 $\boldsymbol{v}$ 张起的空间为 span($\boldsymbol{v}$)，这个向量空间维度为 1。由于 $\boldsymbol{x} = 5\boldsymbol{v}$，$\boldsymbol{x}$ 在 span($\boldsymbol{v}$) 坐标为 5。

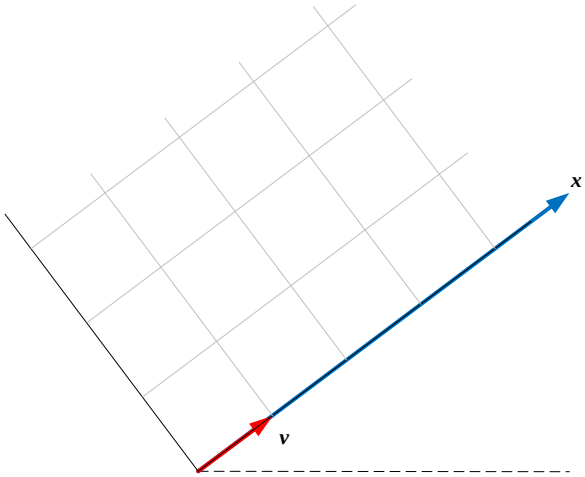


图 3. $\boldsymbol{x}$ 向 $\boldsymbol{v}$ 的投影

推导投影坐标

上一章在讲解线性变换时介绍过，点 (x_1, x_2) 在通过原点、切向量为 $\boldsymbol{\tau}$ $[\tau_1, \tau_2]^T$ 直线方向上正交投影得到点的坐标 (z_1, z_2) 为：

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2} \begin{bmatrix} \tau_1^2 & \tau_1\tau_2 \\ \tau_1\tau_2 & \tau_2^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{20}$$

下面利用本节知识简单推导 (20)。

$\boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{\tau}$ 方向上的向量投影为：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{z} &= \frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\tau}}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2}\boldsymbol{\tau} = \frac{x_1\tau_1 + x_2\tau_2}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2}\begin{bmatrix} \tau_1 \\ \tau_2 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2}\begin{bmatrix} (x_1\tau_1 + x_2\tau_2)\tau_1 \\ (x_1\tau_1 + x_2\tau_2)\tau_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2}\begin{bmatrix} \tau_1^2 x_1 + \tau_1\tau_2 x_2 \\ \tau_1\tau_2 x_1 + \tau_2^2 x_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2}\begin{bmatrix} \tau_1^2 & \tau_1\tau_2 \\ \tau_1\tau_2 & \tau_2^2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{21}$$

⚠ 注意，不做特殊说明的话，本书中“投影”都是正交投影。

图 4 所示为点 A 向一系列通过原点、方向不同直线的投影坐标。

本书第 7 章强调过，向量空间一定都通过原点。大家可能会问，空间某点朝任意直线或超平面投影时，如果直线或超平面不通过原点，该如何计算投影点的坐标？这个问题将在本书第 19 章揭晓答案。

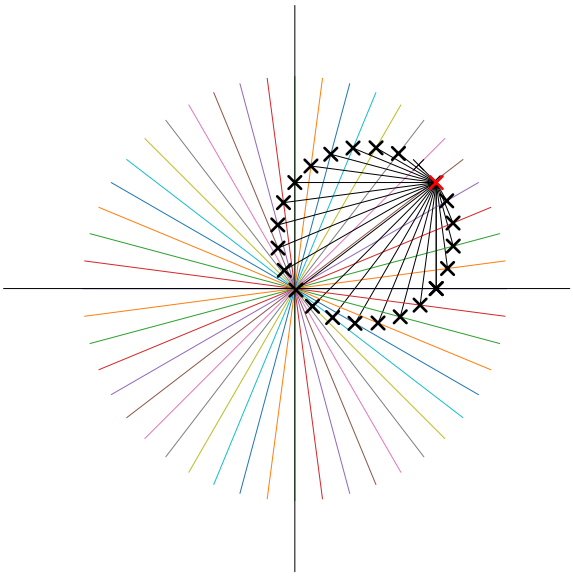


图 4. 点 A 向一系列通过原点的直线投影

`Bk4_Ch9_01.py` 绘制图 4。

向量张量积：无处不在

回过头再看 (12)，假设 $\boldsymbol{v}$ 为单位列向量，(12) 可以写成如下含有向量张量积的形式：

$$\text{proj}_{\boldsymbol{v}}\left(\boldsymbol{x}\right)=\underbrace{\left(\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)}_{\text{Scaler}}\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}\underbrace{\left(\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)}_{\text{Scaler}}=\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\left(\boldsymbol{v}\otimes\boldsymbol{v}\right)\boldsymbol{x} \tag{22}$$

我们称 $\boldsymbol{v}\otimes\boldsymbol{v}$ 为**投影矩阵** (projection matrix)。

利用向量张量积，(21) 可以写成：

$$\boldsymbol{z}=\frac{1}{\|\boldsymbol{\tau}\|^2}\left(\boldsymbol{\tau}\otimes\boldsymbol{\tau}\right)\boldsymbol{x}=\left(\frac{\boldsymbol{\tau}}{\|\boldsymbol{\tau}\|}\otimes\frac{\boldsymbol{\tau}}{\|\boldsymbol{\tau}\|}\right)\boldsymbol{x}=\left(\hat{\boldsymbol{\tau}}\otimes\hat{\boldsymbol{\tau}}\right)\boldsymbol{x} \tag{23}$$

其中，$\hat{\boldsymbol{\tau}}$ 代表 $\boldsymbol{\tau}$ 的单位向量。

一般情况，数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 中样本点的坐标值以行向量表达，$\boldsymbol{X}$ 向单位向量 $\boldsymbol{v}$ 方向投影得到的标量投影，即 $\boldsymbol{X}$ 在 span($\boldsymbol{v}$) 的坐标：

$$\boldsymbol{Z}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{v} \tag{24}$$

$\boldsymbol{X}$ 向单位向量 $\boldsymbol{v}$ 方向投影得到的向量投影坐标则为：

$$\boldsymbol{Z}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{X}\left(\boldsymbol{v}\otimes\boldsymbol{v}\right) \tag{25}$$

请大家格外注意 (25)，我们下一章还要继续这个话题。此外，(25) 也是下一章要讨论的核心运算。

9.3 正交矩阵：一个规范正交基

本章前文介绍的是朝一个向量方向投影，比如向量 $\boldsymbol{x}$ 向 $\boldsymbol{v}$ 方向投影，这可以视作 $\boldsymbol{x}$ 向 $\boldsymbol{v}$ 张起的向量空间 span($\boldsymbol{v}$) 投影。同理，向量 $\boldsymbol{x}$ 也可以向一个有序基构造的平面/超平面投影。这个有序基可以是正交基，可以是非正交基。

数据科学和机器学习实践中，最常用的基底是规范正交基。正交矩阵的本身就是规范正交基。本节主要介绍正交矩阵的性质。

正交矩阵

满足下式的方阵 $\boldsymbol{V}$ 为**正交矩阵** (orthogonal matrix)：

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{I} \tag{26}$$

强调一下，$\boldsymbol{V}$ 为方阵是前提；否则即便满足上式也不能称之为正交矩阵。比如，如下长方形矩阵 $\boldsymbol{A}$ 也满足上式，但 $\boldsymbol{A}$ 不是正交矩阵：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 & 0 \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 & 0 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}} \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & \\ & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{I}} \tag{27}$$

但是，$\boldsymbol{A}$ 的列向量为单位向量、且两两正交，所以 $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2]$ 是规范正交基。

正交矩阵基本性质：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} &= \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{I} \\ \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} &= \boldsymbol{V}^{-1} \end{aligned} \tag{28}$$

⚠(28) 中两式经常使用，必须烂熟于心。

举个实例，图 5 所示热图为一个 4 × 4 正交矩阵 $\boldsymbol{V}$ 和自己转置 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 乘积为单位阵 $\boldsymbol{I}$。

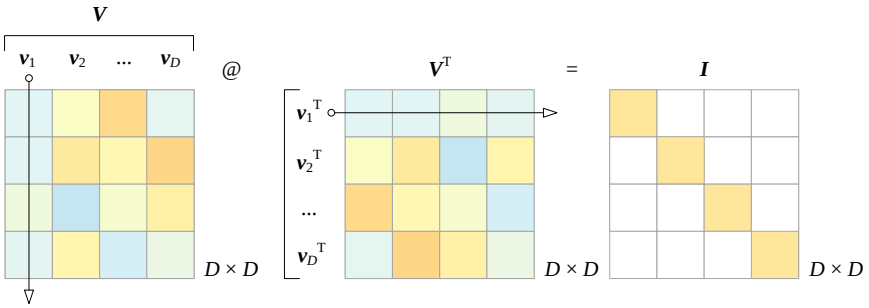


图 5. 正交阵 $\boldsymbol{V}$ 和自己转置 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 乘积为单位阵 $\boldsymbol{I}$

前文的例子

其实我们已经接触过几种正交矩阵。本书前文提到的如下两个矩阵都是正交矩阵：

$$\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{W} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{w}_1 & \boldsymbol{w}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \tag{29}$$

(29) 中 $\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{W}$ 都满足方阵和自身转置乘积为单位阵，即：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V} &= \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\ \boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W} &= \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{30}$$

本书上一章讲过的矩阵 $\boldsymbol{R}$、$\boldsymbol{T}$ 和 $\boldsymbol{P}$ 都是正交矩阵：

$$\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{T}=\begin{bmatrix}\cos 2\theta & \sin 2\theta\\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}&&&1\\1&&&\\&&1&\\&1&&\end{bmatrix} \tag{31}$$

其中，$\boldsymbol{R}$ 代表旋转，$\boldsymbol{T}$ 代表镜像，$\boldsymbol{P}$ 是置换矩阵。也就是说，正交矩阵的几何操作可能对应“旋转”、“镜像”、“置换”，或者它们的组合，比如“旋转 + 镜像”。

矩阵乘法第一视角展开

将 (26) 中矩阵 $\boldsymbol{V}$ 写成一排列向量：

$$\boldsymbol{V}_{D\times D}=\begin{bmatrix}v_{1,1} & v_{1,2} & \cdots & v_{1,D}\\ v_{2,1} & v_{2,2} & \cdots & v_{2,D}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ v_{D,1} & v_{D,2} & \cdots & v_{D,D}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D\end{bmatrix} \tag{32}$$

(26) 左侧可以写成：

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D\end{bmatrix} \tag{33}$$

(33) 展开得到：

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_D\\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_D\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_D\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 1 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & 1\end{bmatrix} \tag{34}$$

大家应该已经意识到，(34) 就是 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}$ 矩阵乘法的第一视角。

$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}$ 主对角线结果为 1，即，

$$\boldsymbol{v}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_j=\boldsymbol{v}_j\cdot\boldsymbol{v}_j=\left\|\boldsymbol{v}_j\right\|^2=1\quad j=1,2,...,D \tag{35}$$

也就是说，矩阵 $\boldsymbol{V}$ 的每个列向量 $\boldsymbol{v}_j$ 为单位向量。

(34) 主对角线以外元素均为 0：

$$\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_j=0,\quad i\neq j \tag{36}$$

即 $\boldsymbol{V}$ 中任意两个列向量两两正交，即垂直。

至此，可以判定 $\{\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D\}$ 为规范正交基。写成有序基形式，就是矩阵 $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$。$\boldsymbol{V}$ 张起一个 D 维向量空间 $\text{span}(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D)$，$\mathbb{R}^D = \text{span}(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D)$。也就是说，$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 是张起 $\mathbb{R}^D$ 无数规范正交基的一组。

顺便提一嘴，由于 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}$，$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 本身也是一个规范正交基。$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 可以展开写成 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = [\boldsymbol{v}^{(1)\mathrm{T}}, \boldsymbol{v}^{(2)\mathrm{T}}, \ldots, \boldsymbol{v}^{(j)\mathrm{T}}]$。

批量化计算向量模和夹角

此外，(34) 告诉我们“批量”计算一系列向量模和两两夹角的方式——**格拉姆矩阵** (Gram matrix)！

$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}$ 相当于 $\boldsymbol{V}$ 的格拉姆矩阵，通过对 (34) 的分析，我们知道格拉姆矩阵包含原矩阵的所有向量模、向量两两夹角这两类信息。

再举个例子，给定矩阵 $\boldsymbol{X}$，将其写成一组列向量 $\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D]$。$\boldsymbol{X}$ 的格拉姆矩阵为：

$$\boldsymbol{G} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 \cdot \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_1 \cdot \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_1 \cdot \boldsymbol{x}_D \\ \boldsymbol{x}_2 \cdot \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 \cdot \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_2 \cdot \boldsymbol{x}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{x}_D \cdot \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_D \cdot \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \cdot \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_D \rangle \\ \langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_D \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \boldsymbol{x}_D, \boldsymbol{x}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{x}_D, \boldsymbol{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{x}_D, \boldsymbol{x}_D \rangle \end{bmatrix} \tag{37}$$

借助向量夹角余弦展开 $\boldsymbol{G}$ 中向量积：

$$\boldsymbol{G} = \begin{bmatrix} \|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_1\|\cos\theta_{1,1} & \|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_2\|\cos\theta_{1,2} & \cdots & \|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_D\|\cos\theta_{1,D} \\ \|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_1\|\cos\theta_{2,1} & \|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_2\|\cos\theta_{2,2} & \cdots & \|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_D\|\cos\theta_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_1\|\cos\theta_{D,1} & \|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_2\|\cos\theta_{D,2} & \cdots & \|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_D\|\cos\theta_{D,D} \end{bmatrix} \tag{38}$$

观察矩阵 $\boldsymbol{G}$，它包含了数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 中列向量的两个重要信息——模 $\|\boldsymbol{x}_i\|$、方向 (向量两两夹角 $\cos\theta_{i,j}$)。再次强调，$\theta_{i,j}$ 为相对角度。

我们将会在本书第 12 章讲解 Cholesky 分解时继续深入探讨这一话题。

矩阵乘法第二视角展开

有了第一视角，大家自然会想到矩阵乘法的第二视角。

还是将 $\boldsymbol{V}$ 写成 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$，$\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 则可以按如下方式展开：

$$\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} = \boldsymbol{v}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{v}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} + \cdots \boldsymbol{v}_D\boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}_{D\times D} \tag{39}$$

(39) 可以写成一系列张量积之和：

$$\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1 + \boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2 + \cdots \boldsymbol{v}_D \otimes \boldsymbol{v}_D = \boldsymbol{I}_{D\times D} \tag{40}$$

上一节 (25) 对应数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向单位向量 $\boldsymbol{v}$ 向量投影。如果 $\boldsymbol{X}$ 向规范正交基 $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 张起的 D 维空间投影，得到的标量投影就是 $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{V}$，而向量投影结果为：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{X}_{n\times D}\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} &= \boldsymbol{X}\left(\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1 + \boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2 + \cdots + \boldsymbol{v}_D \otimes \boldsymbol{v}_D\right) \\ &= \underbrace{\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1}_{\boldsymbol{z}_1} \otimes \boldsymbol{v}_1 + \underbrace{\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2}_{\boldsymbol{z}_2} \otimes \boldsymbol{v}_2 + \cdots + \underbrace{\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_D}_{\boldsymbol{z}_D} \otimes \boldsymbol{v}_D \\ &= \boldsymbol{X}_{n\times D}\boldsymbol{I}_{D\times D} \\ &= \boldsymbol{X}_{n\times D} \end{aligned} \tag{41}$$

大家可能已经糊涂了，上式折腾了半天，最后得到的还是原数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 本身！

(41) 已经非常接近本书第 15、16 章要讲解的奇异值分解的思路。下一章我们一起搞清楚 (41) 背后的数学思想。

再进一步，如图 6 所示，下式代表一个规范正交基对单位矩阵的分解：

$$\boldsymbol{I}_{D\times D} = \boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1 + \boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2 + \cdots + \boldsymbol{v}_D \otimes \boldsymbol{v}_D = \sum_{j=1}^{D} \boldsymbol{v}_j \otimes \boldsymbol{v}_j \tag{42}$$

其中，每个 $\boldsymbol{v}_j \otimes \boldsymbol{v}_j$ 都是一个特定方向的**投影矩阵** (projection matrix)。这个视角同样重要，本章和下一章还将继续深入讨论。

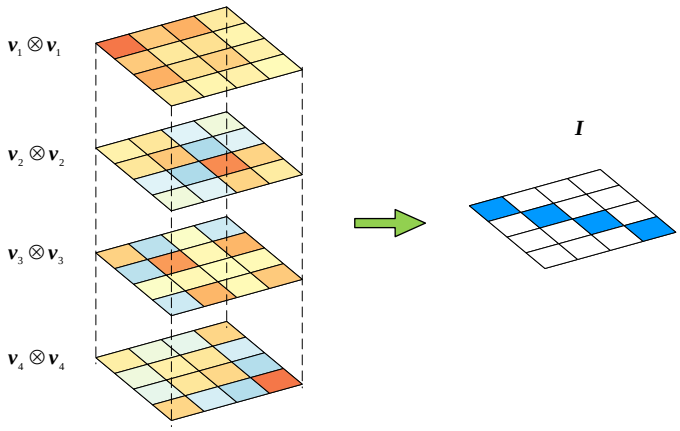


图 6. 对单位矩阵的分解

9.4 规范正交基性质

本节以 (29) 中矩阵 $\boldsymbol{V}$ 为例介绍更多规范正交基的性质。

坐标

将 $\boldsymbol{V}$ 分解成两个列向量，

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix} \tag{43}$$

这两个向量长度为 1，都是单位向量。

显然，$\boldsymbol{V}$ 的转置和 $\boldsymbol{V}$ 本身乘积是一个 2×2 单位矩阵。用矩阵乘法第一视角展开 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}$ 得到：

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_2 \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \boldsymbol{I} \tag{44}$$

给定列向量 $\boldsymbol{x} = [4, 3]^{\mathrm{T}}$。如图 7 (a) 所示，$\boldsymbol{x}$ 在标准正交基 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 中的坐标为 (4, 3)。

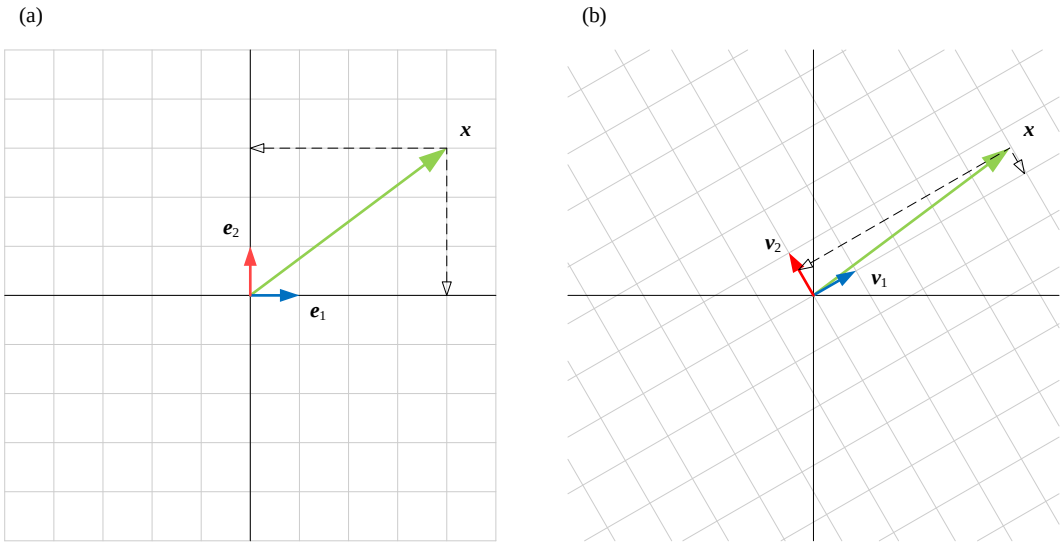


图 7. $\boldsymbol{x}$ 在不同规范正交系中的坐标

如图 7 (b) 所示，将 $\boldsymbol{x}$ 投影到 $\boldsymbol{V}$ 这个规范正交系中，得到的结果就是在 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 这个规范正交系的坐标：

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathrm{proj}_{\boldsymbol{v}_1}(\boldsymbol{x}) \\ \mathrm{proj}_{\boldsymbol{v}_2}(\boldsymbol{x}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4.964 \\ 0.598 \end{bmatrix} \tag{45}$$

这说明，向量 $\boldsymbol{x}$ 在规范正交系 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 中的坐标为 (4.964, 0.598)。

向量长度不变

经过正交矩阵 $\boldsymbol{V}$ 线性变换后，向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^2 范数，即向量模，没有变化：

$$\begin{aligned}\left\|\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right\|_2^2 &= \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\boldsymbol{x} \\ &= \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{I}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x} = \left\|\boldsymbol{x}\right\|_2^2\end{aligned} \tag{46}$$

比较图 7 (a) 和 (b) 可以发现，不同规范正交系中 $\boldsymbol{x}$ 的长度确实没有变化。向量 $\boldsymbol{x}$ 在 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 中坐标为 (4.964, 0.598)，计算其向量模：

$$\sqrt{4.964^2 + 0.598^2} = \sqrt{4^2 + 3^2} = 5 \tag{47}$$

图 8 所示为平面上给定向量在不同规范正交基中的投影结果。

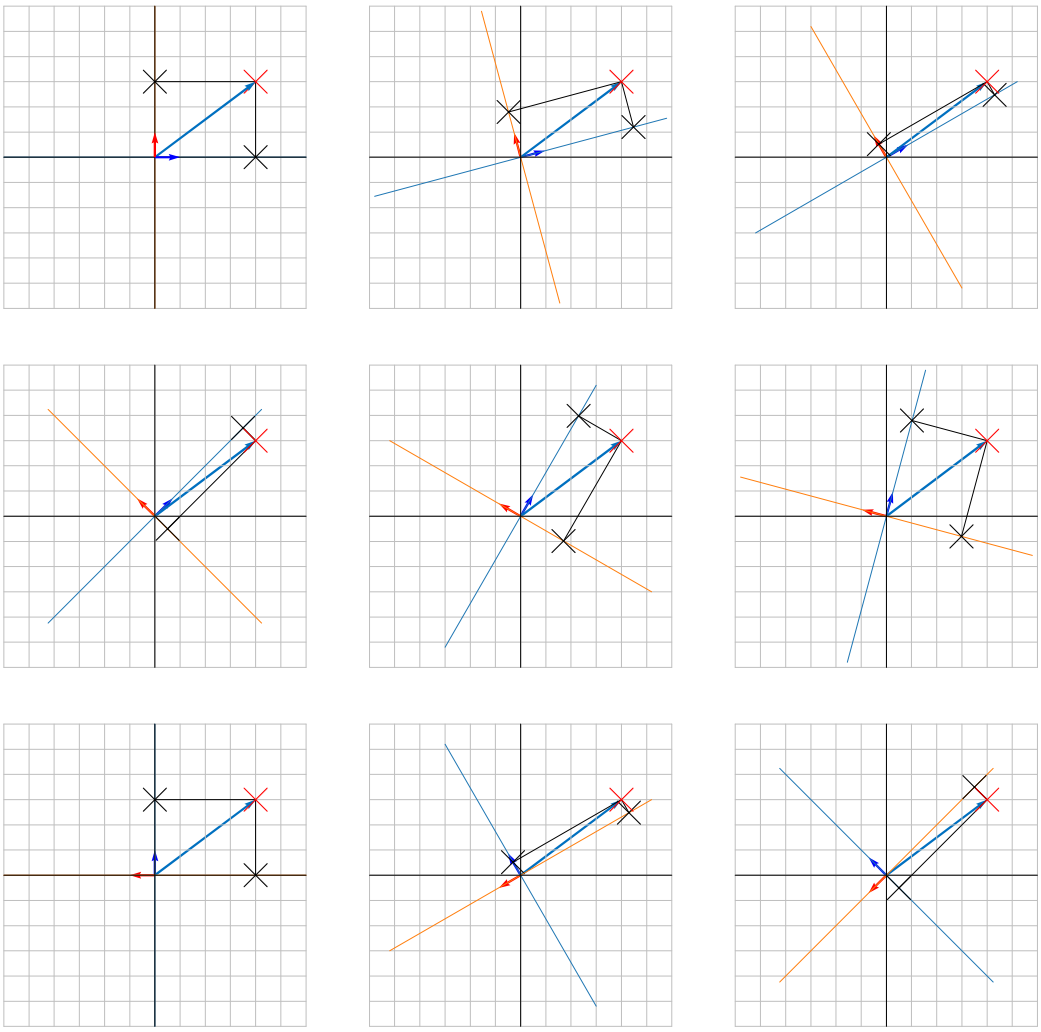


图 8. 平面中向量在不同坐标系的投影

Bk4_Ch9_02.py 绘制图 8。

夹角不变

$\boldsymbol{x}_i$ 和 $\boldsymbol{x}_j$ 经过正交矩阵 $\boldsymbol{V}$ 线性转化得到 $\boldsymbol{z}_i$ 和 $\boldsymbol{z}_j$。$\boldsymbol{z}_i$ 和 $\boldsymbol{z}_j$ 夹角等同于 $\boldsymbol{x}_i$ 和 $\boldsymbol{x}_j$ 夹角：

$$\frac{\boldsymbol{z}_i \cdot \boldsymbol{z}_j}{\|\boldsymbol{z}_i\|\|\boldsymbol{z}_j\|} = \frac{\boldsymbol{z}_i \cdot \boldsymbol{z}_j}{\|\boldsymbol{x}_i\|\|\boldsymbol{x}_j\|} = \frac{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i \cdot \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j}{\|\boldsymbol{x}_i\|\|\boldsymbol{x}_j\|} = \frac{\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j}{\|\boldsymbol{x}_i\|\|\boldsymbol{x}_j\|} = \frac{\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j}{\|\boldsymbol{x}_i\|\|\boldsymbol{x}_j\|} = \frac{\boldsymbol{x}_i \cdot \boldsymbol{x}_j}{\|\boldsymbol{x}_i\|\|\boldsymbol{x}_j\|} \tag{48}$$

如图 9 所示，经过正交矩阵 $\boldsymbol{V}$ 线性变换后，$\boldsymbol{x}_i$ 和 $\boldsymbol{x}_j$ 两者相对角度等同于 $\boldsymbol{z}_i$ 和 $\boldsymbol{z}_j$ 相对角度。这也不难理解，变化前后，向量都还在 $\mathbb{R}^2$ 中，只不过是坐标参考系发生了旋转，而 $\boldsymbol{x}_i$ 和 $\boldsymbol{x}_j$ 之间的"相对角度"完全没有发生改变。

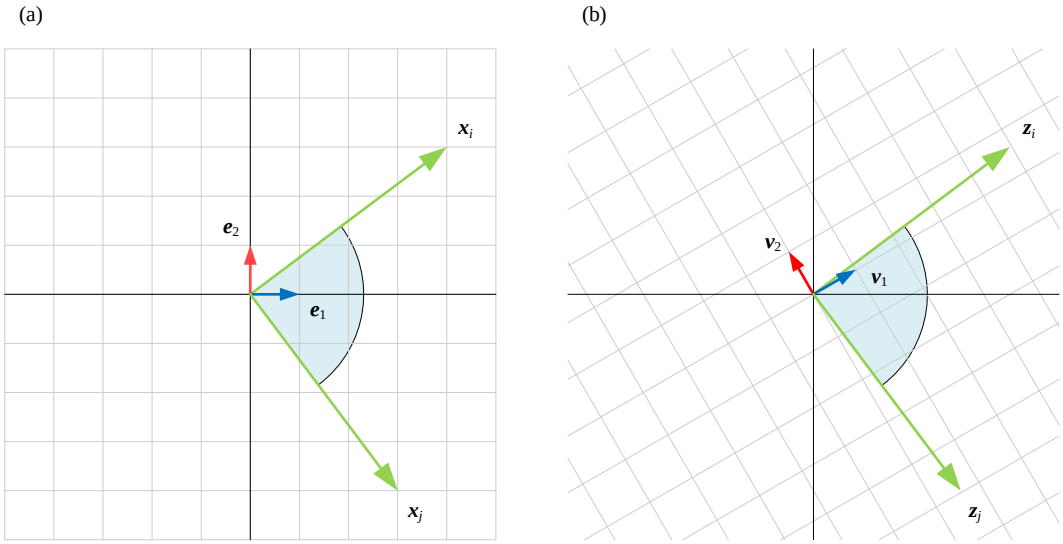


图 9. 不同规范正交系中，$\boldsymbol{x}_i$ 和 $\boldsymbol{x}_j$ 的夹角不变

行列式值

正交矩阵 $\boldsymbol{V}$ 还有一个有趣性质，$\boldsymbol{V}$ 行列式值为 1 或−1：

$$\left(\det\left(\boldsymbol{V}\right)\right)^2 = \det\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)\det\left(\boldsymbol{V}\right) = \det\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\right) = \det\left(\boldsymbol{I}\right) = 1 \tag{49}$$

也就是说，经过 2 × 2 方阵 $\boldsymbol{V}$ 线性变换后，图形面积不变。当 $\det(\boldsymbol{V}) = -1$ 时，图形会发生翻转。

9.5 再谈镜像：从投影视角

上一章聊几何变换时，我们介绍了镜像，并且直接给出完成镜像操作转换矩阵 $\boldsymbol{T}$ 的一种形式，具体如下：

$$\boldsymbol{T}=\begin{bmatrix}\cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta\end{bmatrix} \tag{50}$$

本节用正交投影推导 (50)。

如图 10 所示，镜像对称轴 l 这条直线通过原点，直线切向量 $\boldsymbol{\tau}$ 为：

$$\boldsymbol{\tau}=\begin{bmatrix}\cos\theta \\ \sin\theta\end{bmatrix} \tag{51}$$

向量 $\boldsymbol{x}$ 关于对称轴 l 镜像得到 $\boldsymbol{z}$。

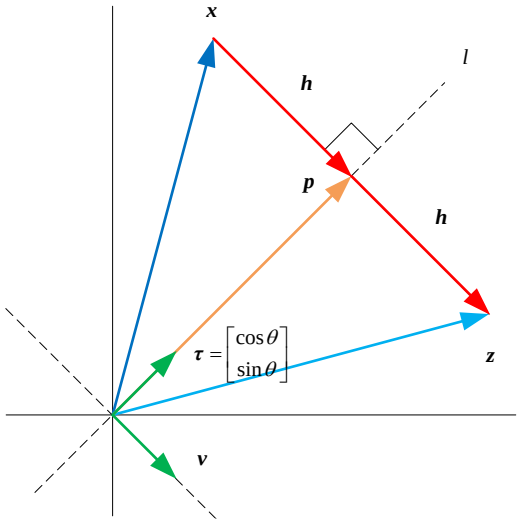


图 10. 投影视角看镜像

从投影角度来看，向量 $\boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{\tau}$ 方向投影为向量 $\boldsymbol{p}$。利用张量积 (投影矩阵) 形式，向量 $\boldsymbol{p}$ 可以写成：

$$\boldsymbol{p}=\left(\boldsymbol{\tau}\otimes\boldsymbol{\tau}\right)\boldsymbol{x} \tag{52}$$

将 (51) 代入 (52)，整理得到：

$$\boldsymbol{p}=\left(\boldsymbol{\tau}\otimes\boldsymbol{\tau}\right)\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}\cos\theta\cos\theta & \cos\theta\sin\theta \\ \cos\theta\sin\theta & \sin\theta\sin\theta\end{bmatrix}\boldsymbol{x} \tag{53}$$

利用三角恒等式，上式可以整理为：

$$\boldsymbol{p}=\begin{bmatrix}(\cos 2\theta+1)/2 & \sin 2\theta/2\\ \sin 2\theta/2 & (1-\cos 2\theta)/2\end{bmatrix}\boldsymbol{x} \tag{54}$$

令，向量 $\boldsymbol{h}$ 为 $\boldsymbol{p}$、$\boldsymbol{x}$ 之差，即：

$$\boldsymbol{h}=\boldsymbol{p}-\boldsymbol{x} \tag{55}$$

根据正交投影，$\boldsymbol{h}$ 显然垂直 $\boldsymbol{p}$。观察图 10，由于 $\boldsymbol{z}$ 和 $\boldsymbol{x}$ 为镜像关系，因此两者之差为 $2\boldsymbol{h}$，也就是下式成立：

$$\boldsymbol{z}=\boldsymbol{x}+2\boldsymbol{h} \tag{56}$$

将 (55) 代入 (56) 整理得到：

$$\boldsymbol{z}=2\boldsymbol{p}-\boldsymbol{x} \tag{57}$$

从另外一个角度来看，$\boldsymbol{x}+\boldsymbol{z}=2\boldsymbol{p}$。

将 (54) 代入 (57) 得到：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{z}&=2\begin{bmatrix}(\cos 2\theta+1)/2 & \sin 2\theta/2\\ \sin 2\theta/2 & (1-\cos 2\theta)/2\end{bmatrix}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{I}\boldsymbol{x}\\ &=\begin{bmatrix}2\times(\cos 2\theta+1)/2-1 & 2\times\sin 2\theta/2\\ 2\times\sin 2\theta/2 & 2\times(1-\cos 2\theta)/2-1\end{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ &=\begin{bmatrix}\cos 2\theta & \sin 2\theta\\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta\end{bmatrix}\boldsymbol{x}\end{aligned} \tag{58}$$

这样，我们便用投影视角推导得到 (50) 结果。

豪斯霍尔德矩阵

此外，将 (52) 代入 (57)，整理得到：

$$\boldsymbol{z}=2(\boldsymbol{\tau}\otimes\boldsymbol{\tau})\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}=(2\boldsymbol{\tau}\otimes\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{I})\boldsymbol{x} \tag{59}$$

在图 10 中，定义单位向量 $\boldsymbol{v}$ 垂直于切向量 $\boldsymbol{\tau}$，$[\boldsymbol{\tau},\boldsymbol{v}]$ 为规范正交基，满足：

$$\boldsymbol{\tau}\otimes\boldsymbol{\tau}+\boldsymbol{v}\otimes\boldsymbol{v}=\boldsymbol{I} \tag{60}$$

$\boldsymbol{\tau}\otimes\boldsymbol{\tau}$ 可以写成：

$$\boldsymbol{\tau}\otimes\boldsymbol{\tau}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{v}\otimes\boldsymbol{v} \tag{61}$$

将 (61) 代入 (59) 得到：

$$\boldsymbol{z}=\underbrace{(\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{v}\otimes\boldsymbol{v})}_{\boldsymbol{H}}\boldsymbol{x} \tag{62}$$

令 $\boldsymbol{H}$ 为：

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{I} - 2\boldsymbol{v} \otimes \boldsymbol{v} \tag{63}$$

矩阵 $\boldsymbol{H}$ 有自己的名字——**豪斯霍尔德矩阵** (Householder matrix)。矩阵 $\boldsymbol{H}$ 完成的转换叫做**豪斯霍尔德反射** (Householder reflection)，也叫初等反射。图 10 中向量 $\boldsymbol{v}$ 的方向就是反射面所在方向。

9.6 格拉姆–施密特正交化

格拉姆-施密特正交化 (Gram-Schmidt orthogonalization) 是求解规范正交基的一种方法。整个过程用到核心数学工具就是正交投影。

给定非正交 D 个线性不相关的向量 $[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \ldots, \boldsymbol{x}_D]$，通过格拉姆-施密特正交化，可以得到 D 个单位正交向量 $\{\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3, \ldots, \boldsymbol{q}_D\}$，它们可以构造一个规范正交基 $[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3, \ldots, \boldsymbol{q}_D]$。

正交化过程

格拉姆-施密特正交化过程如下所示：

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\eta}_1 &= \boldsymbol{x}_1 \\
\boldsymbol{\eta}_2 &= \boldsymbol{x}_2 - \text{proj}_{\boldsymbol{\eta}_1}\left(\boldsymbol{x}_2\right) \\
\boldsymbol{\eta}_3 &= \boldsymbol{x}_3 - \text{proj}_{\boldsymbol{\eta}_1}\left(\boldsymbol{x}_3\right) - \text{proj}_{\boldsymbol{\eta}_2}\left(\boldsymbol{x}_3\right) \\
&\ldots \\
\boldsymbol{\eta}_D &= \boldsymbol{x}_D - \sum_{j=1}^{D-1} \text{proj}_{\boldsymbol{\eta}_j}\left(\boldsymbol{x}_D\right)
\end{aligned} \tag{64}$$

前两步

图 11 所示为格拉姆-施密特正交化前两步。

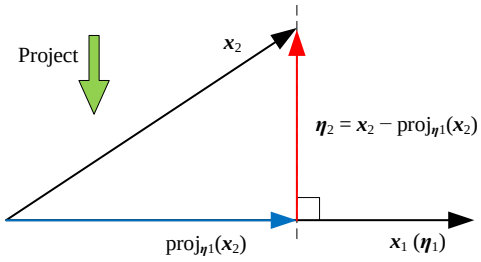


图 11. 格拉姆-施密特正交化前两步

获得 $\boldsymbol{\eta}_1$ 很容易，只需要 $\boldsymbol{\eta}_1 = \boldsymbol{x}_1$。

求解 $\boldsymbol{\eta}_2$ 需要利用 $\boldsymbol{\eta}_2$ 垂直于 $\boldsymbol{\eta}_1$ 这一条件，即：

$$\left(\boldsymbol{\eta}_1\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\eta}_2=0 \tag{65}$$

如图 11 所示，$\boldsymbol{x}_2$ 在 $\boldsymbol{\eta}_1$ 方向上向量投影为 $\mathrm{proj}_{\boldsymbol{\eta}_1}(\boldsymbol{x}_2)$，剩余的向量分量垂直于 $\boldsymbol{x}_1$ ($\boldsymbol{\eta}_1$)，这个分量就是 $\boldsymbol{\eta}_2$：

$$\boldsymbol{\eta}_2=\boldsymbol{x}_2-\mathrm{proj}_{\boldsymbol{\eta}_1}\left(\boldsymbol{x}_2\right)=\boldsymbol{x}_2-\frac{\boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\eta}_1}{\boldsymbol{\eta}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\eta}_1}\boldsymbol{\eta}_1 \tag{66}$$

$\boldsymbol{\eta}_2$ 也有自己的名字，叫 $\boldsymbol{\eta}_1$ 的**正交补** (orthogonal complement)。也可以说，$\boldsymbol{\eta}_1$ 和 $\boldsymbol{\eta}_2$ 互为正交补。下面验证 $\boldsymbol{\eta}_1$ 和 $\boldsymbol{\eta}_2$ 相互垂直：

$$\begin{aligned}\left(\boldsymbol{\eta}_1\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\eta}_2&=\left(\boldsymbol{x}_1\right)^{\mathrm{T}}\underbrace{\left(\boldsymbol{x}_2-\frac{\boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\eta}_1}{\boldsymbol{\eta}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\eta}_1}\boldsymbol{\eta}_1\right)}_{\text{Scalar}}\\&=\boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2-\underbrace{\frac{\boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1}{\boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1}}_{\text{Scalar}}=\boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1=0\end{aligned} \tag{67}$$

第三步

如图 12 所示，第三步是 $\boldsymbol{x}_3$ 向 $[\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2]$ 张成的平面投影。令 $\boldsymbol{\eta}_3$ 为 $\boldsymbol{x}_3$ 中不在 $[\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2]$ 平面上的向量分量，即：

$$\boldsymbol{\eta}_3=\boldsymbol{x}_3-\mathrm{proj}_{\boldsymbol{\eta}_1}\left(\boldsymbol{x}_3\right)-\mathrm{proj}_{\boldsymbol{\eta}_2}\left(\boldsymbol{x}_3\right) \tag{68}$$

显然，$\boldsymbol{\eta}_3$ 垂直 $\mathrm{span}(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2)$，也就是说 $\boldsymbol{\eta}_3$ 分别垂直 $\boldsymbol{\eta}_1$ 和 $\boldsymbol{\eta}_2$。$\boldsymbol{\eta}_3$ 和 $\mathrm{span}(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2)$ 互为正交补。

按此思路，不断反复投影直至得到所有正交向量 $\{\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \boldsymbol{\eta}_3, \ldots, \boldsymbol{\eta}_D\}$。

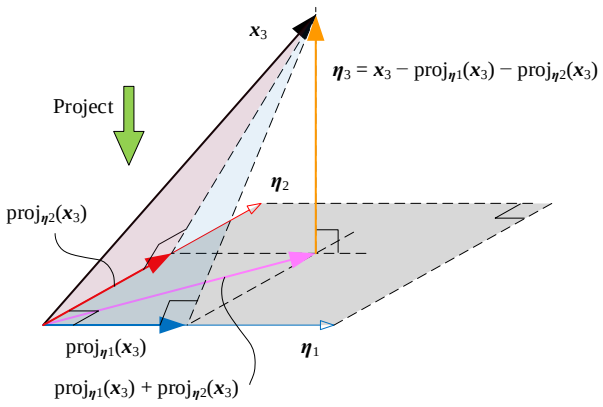


图 12. 格拉姆-施密特正交化第三步

单位化

最后单位化，获得单位正交向量 $\{\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3, \ldots, \boldsymbol{q}_D\}$：

$$\boldsymbol{q}_1 = \frac{\boldsymbol{\eta}_1}{\|\boldsymbol{\eta}_1\|}, \quad \boldsymbol{q}_2 = \frac{\boldsymbol{\eta}_2}{\|\boldsymbol{\eta}_2\|}, \quad \boldsymbol{q}_3 = \frac{\boldsymbol{\eta}_3}{\|\boldsymbol{\eta}_3\|}, \quad \cdots, \quad \boldsymbol{q}_D = \frac{\boldsymbol{\eta}_D}{\|\boldsymbol{\eta}_D\|} \tag{69}$$

值得强调的是，规范正交基 $[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3, \ldots, \boldsymbol{q}_D]$ 的特别之处在于 $\boldsymbol{q}_1$ 平行 $\boldsymbol{x}_1$。本书后续还会介绍其他获得规范正交基的算法，请大家注意比对。

举个实例

给定 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 两个向量，利用格拉姆-施密特正交化获得两个正交向量：

$$\boldsymbol{x}_1 = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix} \tag{70}$$

$\boldsymbol{\eta}_1$ 就是 $\boldsymbol{x}_1$，即，

$$\boldsymbol{\eta}_1 = \boldsymbol{x}_1 = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{71}$$

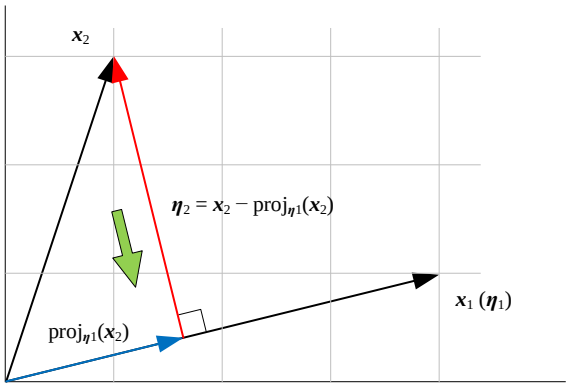


图 13. 格拉姆-施密特正交化第三步

$\boldsymbol{x}_2$ 在 $\boldsymbol{\eta}_1$ ($\boldsymbol{x}_1$) 方向上投影，得到向量投影：

$$\text{proj}_{\boldsymbol{\eta}_1}(\boldsymbol{x}_2) = \frac{\boldsymbol{x}_2 \cdot \boldsymbol{\eta}_1}{\boldsymbol{\eta}_1 \cdot \boldsymbol{\eta}_1} \boldsymbol{\eta}_1 = \frac{4\times1+1\times3}{4\times4+1\times1} \times \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{7}{17} \times \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{72}$$

计算 $\boldsymbol{\eta}_2$：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\eta}_2 &= \boldsymbol{x}_2 - \text{proj}_{\boldsymbol{\eta}_1}\left(\boldsymbol{x}_2\right) \\ &= \begin{bmatrix}1\\3\end{bmatrix} - \frac{7}{17}\times\begin{bmatrix}4\\1\end{bmatrix} = \frac{1}{17}\times\begin{bmatrix}-11\\44\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{73}$$

最后对 $\boldsymbol{\eta}_1$ 和 $\boldsymbol{\eta}_2$ 单位化，得到 $\boldsymbol{q}_1$ 和 $\boldsymbol{q}_2$：

$$\begin{cases}\boldsymbol{q}_1 = \dfrac{\boldsymbol{\eta}_1}{\|\boldsymbol{\eta}_1\|} = \dfrac{1}{\sqrt{17}}\begin{bmatrix}4\\1\end{bmatrix} \\ \boldsymbol{q}_2 = \dfrac{\boldsymbol{\eta}_2}{\|\boldsymbol{\eta}_2\|} = \dfrac{1}{\sqrt{17}}\begin{bmatrix}-1\\4\end{bmatrix}\end{cases} \tag{74}$$

格拉姆-施密特正交化可以通过 QR 分解完成，这是第 11 章矩阵分解要讲解的内容之一。

9.7 投影视角看回归

本系列丛书《数学要素》鸡兔同笼三部曲中简单介绍过如何通过投影视角理解线性回归。本节在此基础上展开讲解。

一元线性回归

列向量 $\boldsymbol{y}$ 在 $\boldsymbol{x}$ 方向上正交投影得到向量 $\hat{\boldsymbol{y}}$。向量差 $\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}}$ 垂直于 $\boldsymbol{x}$。据此构造如下等式：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}}\right)=0 \tag{75}$$

显然 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 和 $\boldsymbol{x}$ 共线，因此下式成立：

$$\hat{\boldsymbol{y}} = b\boldsymbol{x} \tag{76}$$

其中，b 为实数系数。大家在上式中是否已经看到线性回归的影子？

从向量空间角度来看，span($\boldsymbol{x}$) 张起的向量空间维度为 1。$\hat{\boldsymbol{y}}$ 在 span($\boldsymbol{x}$) 中，$\hat{\boldsymbol{y}}$ 和 $\boldsymbol{x}$ 线性相关。

从数据角度思考，$\boldsymbol{x}$ 为自变量，$\boldsymbol{y}$ 为因变量。数据 $\boldsymbol{x}$ 方向能够解释 $\boldsymbol{y}$ 的一部分，即 $\hat{\boldsymbol{y}}$。不能解释的部分就是**残差** (residuals)，即 $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}}$。$\boldsymbol{\varepsilon}$ 和 $\boldsymbol{x}$ 互为正交补。

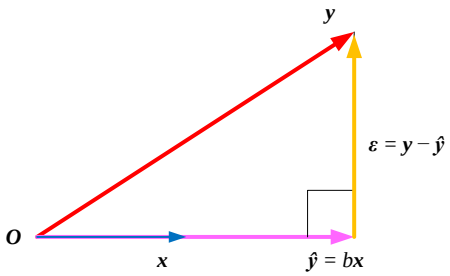


图 14. 向量 $\boldsymbol{y}$ 向 $\boldsymbol{x}$ 正交投影得到向量投影 $\hat{\boldsymbol{y}}$

将 (76) 代入 (75)，得到：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{y}-b\boldsymbol{x}\right)=0 \tag{77}$$

容易求得系数 b 为：

$$b=\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)^{-1}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{78}$$

从而，$\hat{\boldsymbol{y}}$ 为：

$$\hat{\boldsymbol{y}}=\boldsymbol{x}\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)^{-1}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{79}$$

这样，利用向量投影这个数学工具，我们解释了一元线性回归。

⚠ 注意，在上述分析中，我们没有考虑常数项。也就是说，上述线性回归模型为比例函数，截距为 0。从图像上来看，比例函数过原点。

二元线性回归

下面我们聊一下二元线性回归。

如图 15 所示，两个线性无关向量 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 张成一个平面 span($\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2$)。向量 $\boldsymbol{y}$ 向该平面投影得到向量 $\hat{\boldsymbol{y}}$。向量 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 是 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 线性组合：

$$\hat{\boldsymbol{y}}=b_1\boldsymbol{x}_1+b_2\boldsymbol{x}_2=\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}}\underbrace{\begin{bmatrix}b_1\\ b_2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{b}}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} \tag{80}$$

其中，b_1 和 b_2 为系数。span($\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2$) 和 $\boldsymbol{\varepsilon}=\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}}$ 互为正交补。

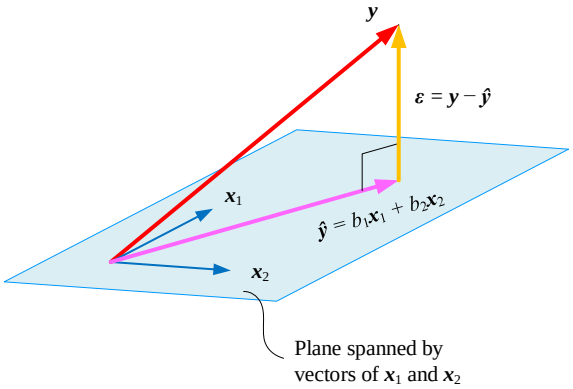


图 15. 向量 $\boldsymbol{y}$ 向平面 span($\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2$) 投影

$\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}}$ 垂直于 $\boldsymbol{X}=[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2]$，也就是说 $\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}}$ 分别垂直 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$，据此构造如下两个等式：

$$\begin{cases} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}})=0 \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}})=0 \end{cases} \Rightarrow \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}})=\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{81}$$

注意，并不要求 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 相互正交。

整理 (81) 得到：

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}})=\boldsymbol{0} \tag{82}$$

将 (80) 代入 (82) 得到：

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{b})=\boldsymbol{0} \tag{83}$$

从而推导得到 $\boldsymbol{b}$ 的解析式：

$$\boldsymbol{b}=(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{84}$$

(84) 代入 (80)，可以得到：

$$\hat{\boldsymbol{y}}=\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{85}$$

上式中，$\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 常被称作**帽子矩阵** (hat matrix)。必须强调一点，只有 $\boldsymbol{X}$ 为列满秩时，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 才存在逆。

$\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 是我们在本书第 5 章提到的**幂等矩阵** (idempotent matrix)，即下式成立：

$$\left(\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\right)^2=\boldsymbol{X}\underbrace{(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}}_{\boldsymbol{I}}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} \tag{86}$$

多元线性回归

以上结论也可以推广到如图 16 所示多元线性回归情形。D 个向量 $\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}_2$、...、$\boldsymbol{x}_D$ 张成超平面 $H=\mathrm{span}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D)$，向量 $\boldsymbol{y}$ 在超平面 H 上投影结果为 $\hat{\boldsymbol{y}}$，即，

$$\hat{\boldsymbol{y}}=b_1\boldsymbol{x}_1+b_2\boldsymbol{x}_2+\cdots+b_D\boldsymbol{x}_D \tag{87}$$

误差 $\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}}$ 垂直垂直于 $H=\mathrm{span}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D)$，也就是说 $\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}}$ 分别垂直于 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D$，即：

$$\begin{cases} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}})=0 \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}})=0 \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}})=0 \end{cases} \Rightarrow \underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}}(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}})=\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \tag{88}$$

$\mathrm{span}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D)$ 和 $\boldsymbol{\varepsilon}=\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}}$ 互为正交补。

用之前的推导思路，我们也可以得到 (85)。

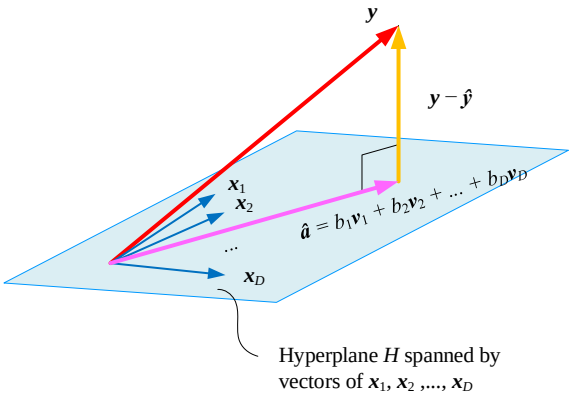


图 16. 向量 $\boldsymbol{y}$ 向超平面 span($\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2$, …, $\boldsymbol{x}_D$) 投影

考虑常数项

而考虑常数项 b_0，无非就是在 (87) 中加入一个全 1 列向量 $\boldsymbol{1}$，即，

$$\hat{\boldsymbol{y}} = b_0\boldsymbol{1} + b_1\boldsymbol{x}_1 + b_2\boldsymbol{x}_2 + \cdots + b_D\boldsymbol{x}_D \tag{89}$$

而 D + 1 个向量 $\boldsymbol{1}$、$\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}_2$、...、$\boldsymbol{x}_D$ 张成一个全新超平面 span($\boldsymbol{1}$, $\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2$, …, $\boldsymbol{x}_D$)。而 $\boldsymbol{1}$ 经常写成 $\boldsymbol{x}_0$，新的 $\boldsymbol{X}$ 则为 [$\boldsymbol{x}_0$, $\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2$, …, $\boldsymbol{x}_D$]。按照本节前文思路，我们同样可以得到 (85)。

在多元线性回归中，$\boldsymbol{X}$ 也叫**设计矩阵** (design matrix)。

数据角度来看，$\boldsymbol{x}_0$, $\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2$, …, $\boldsymbol{x}_D$ 是一列列数值，但是几何视角下它们又是什么？本书第 12 章就试图回答这个问题。

多项式回归

有些应用场合，自变量和因变量之间存在明显的非线性关系，线性回归不足以描述这种关系。这种情况，我们需要借助非线性回归模型，比如**多项式回归** (polynomial regression)。

举个例子，一元三次多项式回归模型可以写成：

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3 \tag{90}$$

这时，设计矩阵 $\boldsymbol{X}$ 为：

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & x_n^3 \end{bmatrix}_{n\times 4} \tag{91}$$

举个例子，$\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 取值图 17 所示。

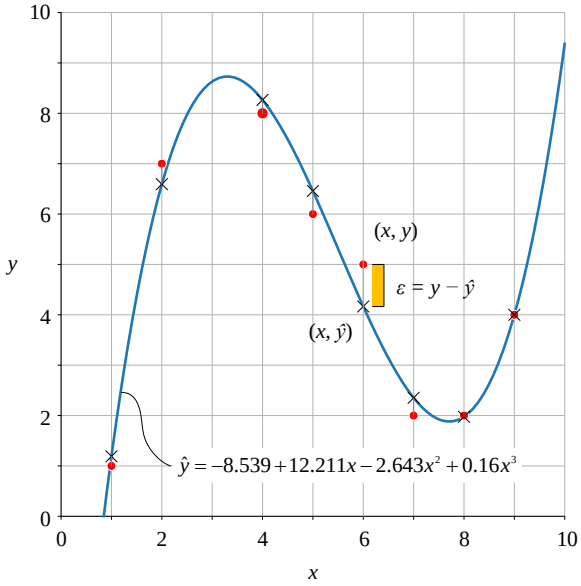


图 17. 一元三次多项式回归

一元三次多项式回归模型的自变量 $\boldsymbol{x}$、因变量 $\boldsymbol{y}$、设计矩阵 $\boldsymbol{X}$ 分别为：

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \\ 8 \\ 9 \end{bmatrix}_{8\times 1}, \quad \boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ 7 \\ 8 \\ 6 \\ 5 \\ 2 \\ 2 \\ 4 \end{bmatrix}_{8\times 1}, \quad \boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 8 \\ 1 & 4 & 16 & 64 \\ 1 & 5 & 25 & 125 \\ 1 & 6 & 36 & 216 \\ 1 & 7 & 49 & 343 \\ 1 & 8 & 64 & 512 \\ 1 & 9 & 81 & 729 \end{bmatrix}_{8\times 4} \tag{92}$$

利用 (84) 计算得到系数向量 $\boldsymbol{b}$：

$$\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} = \left(\underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 42 & 276 & 1998 \\ 42 & 276 & 1998 & 15252 \\ 276 & 1998 & 15252 & 120582 \\ 1998 & 15252 & 120582 & 977676 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}} \right)^{-1} \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \approx \begin{bmatrix} -8.539 \\ 12.211 \\ -2.643 \\ 0.160 \end{bmatrix} \tag{93}$$

三次一元多项式回归模型可以写成：

$$\hat{y} = -8.539 + 12.211x - 2.643x^2 + 0.16x^3 \tag{94}$$

对于给定的因变量 $\boldsymbol{y}$，因变量预测值为 $\hat{\boldsymbol{y}}$，误差为 $\boldsymbol{\varepsilon}$，它们的具体值如下：

$$\boldsymbol{y}=\begin{bmatrix}1\\7\\8\\6\\5\\2\\2\\4\end{bmatrix}_{8\times 1},\quad \hat{\boldsymbol{y}}=\begin{bmatrix}1.189\\6.592\\8.266\\6.457\\4.165\\2.351\\1.976\\4.001\end{bmatrix}_{8\times 1},\quad \boldsymbol{\varepsilon}=\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}}=\begin{bmatrix}-0.189\\0.408\\-0.266\\-0.457\\0.835\\-0.351\\0.024\\-0.001\end{bmatrix}_{8\times 1} \tag{95}$$

更具一般性的正交投影

最后再回过头来看 (85)，我们可以发现这个式子实际上代表了更具一般性的正交投影。

数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{n\times D}$ 的列向量 $[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, ..., \boldsymbol{x}_D]$ 张成超平面 $H = \text{span}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D)$。即便 $[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, ..., \boldsymbol{x}_D]$ 之间并非两两正交，向量 $\boldsymbol{y}$ 依然可以在超平面 H 上正交投影，得到 $\hat{\boldsymbol{y}}$。

特殊地，如果假设 $\boldsymbol{X}$ 的列向量 $[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, ..., \boldsymbol{x}_D]$ 两两正交，且列向量本身都是单位向量，可以得到：

$$\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}}\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_D\\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_D\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_D\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 1 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & 1\end{bmatrix} \tag{96}$$

即：

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{I} \tag{97}$$

显然，$\boldsymbol{X}_{n\times D}$ 不能叫做正交矩阵，这是因为 $\boldsymbol{X}_{n\times D}$ 的形状为 $n \times D$，不是方阵。

将 (97) 代入 (85) 得到：

$$\hat{\boldsymbol{y}}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{98}$$

将 $\boldsymbol{X}$ 写成 $[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, ..., \boldsymbol{x}_D]$，并展开上式得到：

$$\hat{\boldsymbol{y}}=\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}}\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}}\boldsymbol{y}=\left(\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{x}_2\boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}+\cdots\boldsymbol{x}_D\boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}}\right)\boldsymbol{y} \tag{99}$$

进一步，使用向量张量积将上式写成：

$$\hat{\boldsymbol{y}}=\left(\boldsymbol{x}_1\otimes\boldsymbol{x}_1+\boldsymbol{x}_2\otimes\boldsymbol{x}_2+\cdots\boldsymbol{x}_D\otimes\boldsymbol{x}_D\right)\boldsymbol{y} \tag{100}$$

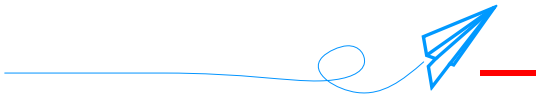
再次强调，上式成立的前提是——$\boldsymbol{X}$ 的列向量 $[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, ..., \boldsymbol{x}_D]$ 两两正交，且列向量本身都是单位向量。

这从另外一个侧面解释了我们为什么需要格拉姆-施密特正交化！也就是说，通过格拉姆-施密特正交化，$\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, ..., \boldsymbol{x}_D]$ 变成 $\boldsymbol{Q} = [\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, ..., \boldsymbol{q}_D]$。而 $[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, ..., \boldsymbol{q}_D]$ 两两正交，且列向量都是单位向量，即满足下式：

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q} = \underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{q}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{q}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{q}_D^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}} \underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{q}_1 & \boldsymbol{q}_2 & \cdots & \boldsymbol{q}_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{Q}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \tag{101}$$

从 $\boldsymbol{X}$ 到 $\boldsymbol{Q}$，本章利用的是格拉姆-施密特正交化，而本书第 11 章将用 QR 分解。此外，本书最后一章将介绍如何用矩阵分解结果计算线性回归系数。

到目前为止，相信大家已经领略到了矩阵乘法的伟力所在！本章前前后后用的无非就是矩阵乘法的各种变形、各种视角。强烈建议大家回过头来再读一遍本书第 5 章，相信你会有一番新的收获。



本章从几何角度讲解正交投影及其应用，以下四幅图总结本书重要内容。

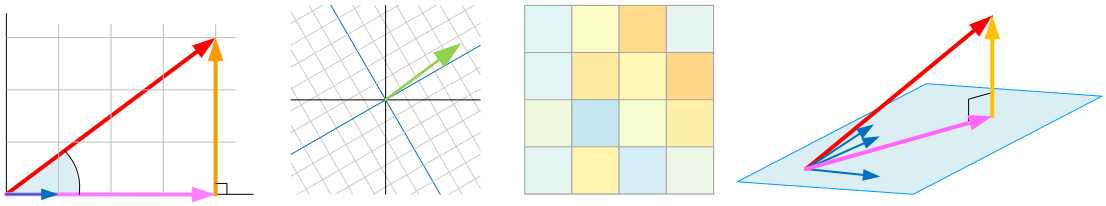


图 18. 总结本章重要内容的四幅图

本书后续内容离不开投影这个线性代数工具！大家务必熟练掌握标量/向量投影，不管是用向量内积、矩阵乘法，还是张量积。

正交矩阵本身就是规范正交基。我们将会在数据投影、矩阵分解、数据空间等一系列话题中，反复用到正交矩阵。请大家务必注意正交矩阵的性质，以及两个展开视角。

手算格拉姆-施密特正交化没有意义，大家理解这个正交化思想就好。本书后续还会介绍其他正交化方法，重要的是大家能从几何、空间、数据视角区分不同正交化方法得到结果差异。

重要的事情，强调多少遍都不为过。有向量的地方，就有几何！几何视角是理解线性回归的最佳途径，本系列丛书《概率统计》、《数据科学》还会从不同角度展开讲解线性回归。

下一章以数据为视角，和大家聊聊正交投影如何帮助我们解密数据。

10 Data Projection
数据投影

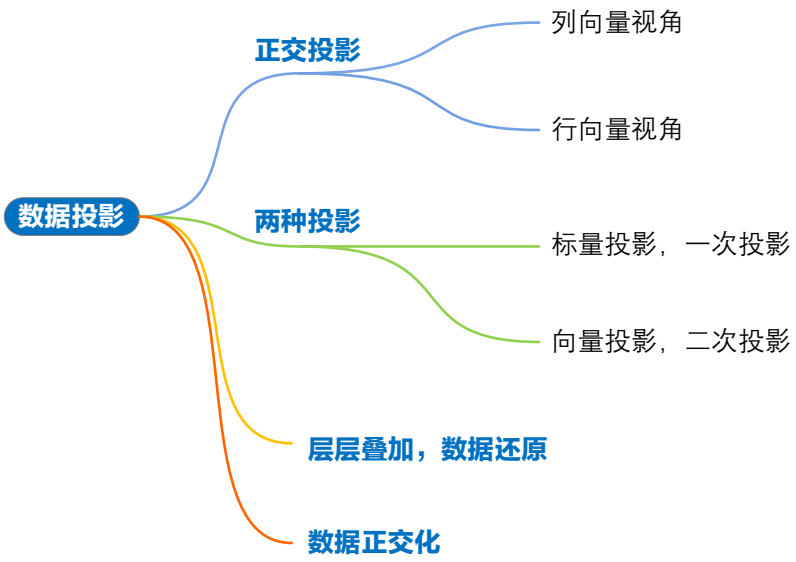
以鸢尾花数据集为例，二次投影 + 层层叠加

人生就像骑自行车。为了保持平衡，你必须不断移动。

Life is like riding a bicycle. To keep your balance, you must keep moving .

—— 阿尔伯特·爱因斯坦 (Albert Einstein) | 理论物理学家 | 1879 ~ 1955

- `numpy.linalg.eig()` 特征值分解
- `seaborn.heatmap()` 绘制热图



10.1 从一个矩阵乘法运算说起

有数据的地方，就有矩阵！

有矩阵的地方，就有向量！

有向量的地方，就有几何！

本章承前启后，结合数据、矩阵、向量、几何四个元素总结本书前九章主要内容，并开启本书下一个重要板块——矩阵分解。

本节和下一节内容会稍微枯燥，请大家耐心读完。之后，本章会用鸢尾花数据集作为例子，给大家展开讲解这两节内容。

正交投影

本章从一个矩阵乘法运算说起：

$$\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{V} \tag{1}$$

$\boldsymbol{X}$ 是数据矩阵，形状为 $n \times D$，即 n 行、D 列。大家很清楚，以鸢尾花数据集为例，$\boldsymbol{X}$ 每一行代表一个数据点，每一列代表一个特征。

$\boldsymbol{V}$ 是正交矩阵，即满足 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}$。这意味着 $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 是 $\mathbb{R}^D$ 空间的一组规范正交基。

如图 1 所示，几何视角下，矩阵乘积 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{V}$ 完成的是 $\boldsymbol{X}$ 向规范正交基 $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 投影，乘积 $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{V}$ 代表 $\boldsymbol{X}$ 在新的规范正交基下的坐标。矩阵乘法 $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{V}$ 也是一个线性映射过程。

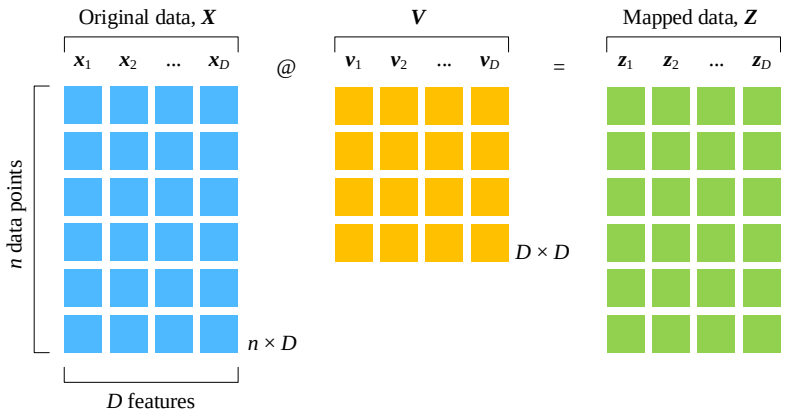


图 1. 数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 到 $\boldsymbol{Z}$ 线性变换

本书前文反复提到，一个矩阵可以看成由一系列行向量或列向量构造得到。下面，我们分别从这两个视角来分析 (1)。

列向量

将 $\boldsymbol{Z}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 分别写成各自列向量，(1) 可以展开写成：

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix}\boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_2 & \cdots & \boldsymbol{z}_D\end{bmatrix} &= \boldsymbol{X}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D\end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_D\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{2}$$

(2) 这个视角是数据列向量 (即特征) 之间的转换。(2) 采用的工具是本书第 6 章介绍的分块矩阵乘法。

提取 (2) 等式左右第 j 列，得到 $\boldsymbol{Z}$ 矩阵的第 j 列向量 $\boldsymbol{z}_j$ 的计算式：

$$\boldsymbol{z}_j = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_j \tag{3}$$

如图 2 所示，(3) 相当于 $\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}_2$ …、$\boldsymbol{x}_D$ 通过线性组合得到 $\boldsymbol{z}_j$，即：

$$\boldsymbol{z}_j = \underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}} \underbrace{\begin{bmatrix}v_{1,j} \\ v_{2,j} \\ \vdots \\ v_{D,j}\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{v}_j} = v_{1,j}\boldsymbol{x}_1 + v_{2,j}\boldsymbol{x}_2 + \cdots v_{D,j}\boldsymbol{x}_D \tag{4}$$

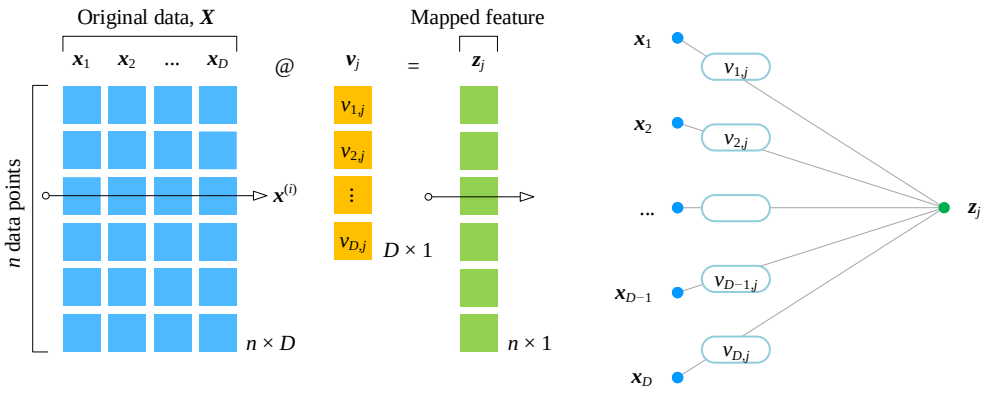


图 2. $\boldsymbol{Z}$ 第 j 列向量 $\boldsymbol{z}_j$ 的计算过程

行向量：点坐标

数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的任意行向量 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 代表一个样本点在 $\mathbb{R}^D$ 标准正交基中坐标。将 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{Z}$ 写成行向量形式，(1) 可以写作：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{z}^{(1)} \\ \boldsymbol{z}^{(2)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{z}^{(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)}\boldsymbol{V} \\ \boldsymbol{x}^{(2)}\boldsymbol{V} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}^{(n)}\boldsymbol{V} \end{bmatrix} \tag{5}$$

如图 3 所示，(5) 代表每一行样本点之间的转换关系。即，$\boldsymbol{x}^{(i)}$ 投影得到 $\boldsymbol{Z}$ 的第 i 行向量 $\boldsymbol{z}^{(i)}$：

$$\boldsymbol{z}^{(i)} = \boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{V} \tag{6}$$

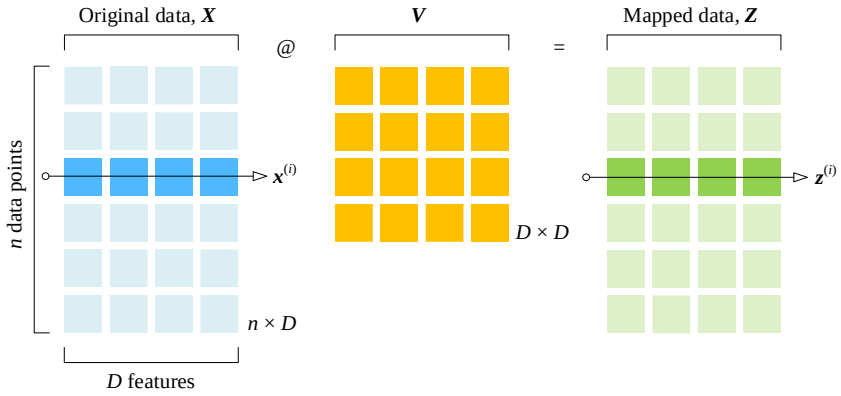


图 3. 每一行数据点之间的转换关系

进一步将 (6) 中 $\boldsymbol{V}$ 写成 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$，(6) 可以展开得到：

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} z_{i,1} & z_{i,2} & \cdots & z_{i,D} \end{bmatrix} &= \boldsymbol{x}^{(i)} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{v}_D \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{7}$$

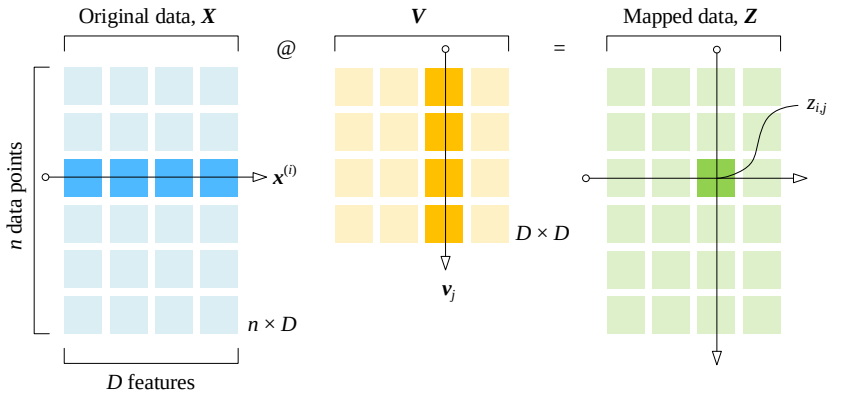


图 4. 每一行数据点向 $\boldsymbol{v}_j$ 投影

取出 (7) 中向量 $\boldsymbol{z}^{(i)}$ 第 j 列元素 $z_{i,j}$，对应的运算为：

$$z_{i,j} = \boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{v}_j \tag{8}$$

图 4 对应 (8) 运算。

从空间视角来看，如图 5 所示，行向量 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 位于 $\mathbb{R}^D$ 空间，而 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 正交投影到 $\mathbb{R}^D$ **子空间** (subspace) span($\boldsymbol{v}_j$) 对应的坐标点就是 $z_{i,j}$。换句话说，$z_{i,j}$ 是 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 在 span($\boldsymbol{v}_j$) 的**像** (image)。$\boldsymbol{x}^{(i)}$ 在 $\mathbb{R}^D$ 空间是 D 维，在 span($\boldsymbol{v}_j$) 仅是 1 维。图 5 中，从左边 $\mathbb{R}^D$ 空间到右侧 span($\boldsymbol{v}_j$) 投影是个降维过程，数据发生压缩。

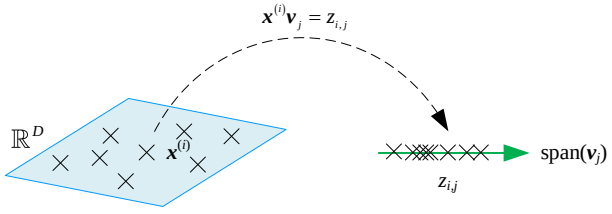


图 5. $\mathbb{R}^D$ 空间数据点投影到 span($\boldsymbol{v}_j$)

10.2 二次投影 + 层层叠加

本书上一章给出下面这个看似莫明其妙的矩阵乘法：

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{I} = \boldsymbol{X}\underbrace{\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}}_{\boldsymbol{I}} = \boldsymbol{X} \tag{9}$$

数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 乘以单位阵 $\boldsymbol{I}$，结果为 $\boldsymbol{X}$ 其本身！这个显而易见的等式，有何意义？

其实，这个看似再简单不过的矩阵运算背后实际藏着“二次投影”和“层层叠加”这两重几何操作！下面，我们就解密这两个几何操作。

层层叠加

将 $\boldsymbol{V}$ 写成 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$，代入 (9) 得到：

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{X}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\end{bmatrix} = \underbrace{\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}}_{\boldsymbol{X}_1} + \underbrace{\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}}_{\boldsymbol{X}_2} + \cdots + \underbrace{\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_D\boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}}_{\boldsymbol{X}_D} \tag{10}$$

令，

$$\boldsymbol{X}_j = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{v}_j^{\mathrm{T}} \tag{11}$$

图 6 所示为上述运算，$\boldsymbol{X}_j$ 的形状和原数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 完全相同。我们称图 6 为二次投影，一会儿解释原因。

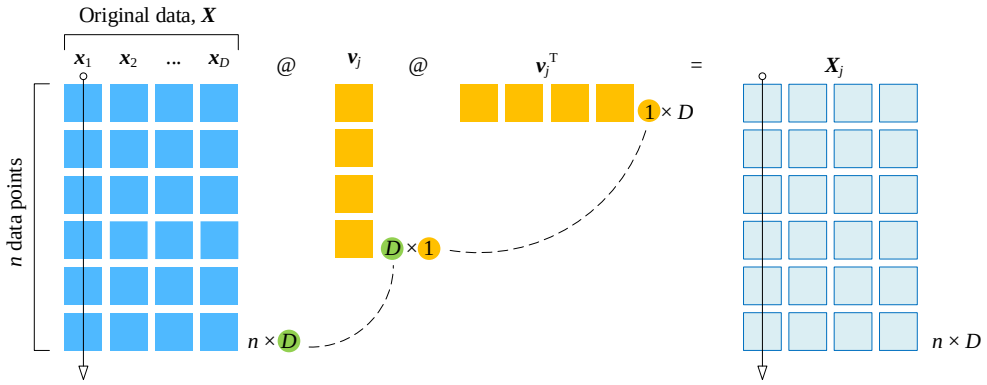


图 6. 二次投影

(10) 可以写成：

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}_1 + \boldsymbol{X}_2 + \cdots + \boldsymbol{X}_D \tag{12}$$

上式就是“层层叠加”。如图 7 所示，D 个形状完全相同的数据，层层叠加还原原始数据 $\boldsymbol{X}$。这本质上是矩阵乘法的第二视角。

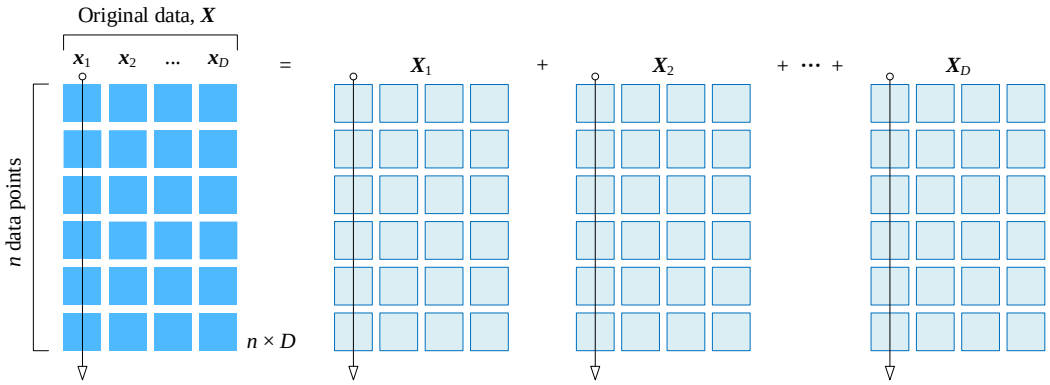


图 7. 层层叠加

二次投影

下面，我们专门聊聊“二次投影”。

取出 (11) $\boldsymbol{X}_j$ 中第 i 行行向量 $\boldsymbol{x}_j^{(i)}$，$\boldsymbol{x}_j^{(i)}$ 对应的运算为：

$$\boldsymbol{x}_j^{(i)} = \boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{v}_j^{\mathrm{T}} = \underbrace{z_{i,j}}_{z_{i,j}}\boldsymbol{v}_j^{\mathrm{T}} \tag{13}$$

如 (8) 所示，上式中 $z_{i,j}$ 就是 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 正交投影到子空间 span($\boldsymbol{v}_j$) 对应的坐标点，这是第一次投影，具体过程如图 5 所示。

而 $z_{i,j}\boldsymbol{v}_j^{\mathrm{T}}$ 得到的是 $z_{i,j}$ 在 $\mathbb{R}^D$ 的坐标点，这便是第二次投影。

上述两次投影合并，得到所谓“二次投影”。整个二次投影的过程如图 8 所示。可以这样理解，$\boldsymbol{x}^{(i)} \rightarrow z_{i,j}$ 代表“标量投影”；$\boldsymbol{x}^{(i)} \rightarrow \boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{v}_j^{\mathrm{T}}$ 则是“向量投影”。图 8 这个过程显然不可逆，方阵 $\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{v}_j^{\mathrm{T}}$ 的秩为 1，因此不可逆。

⚠ 注意，图 8 中 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 和 $z_{i,j}\boldsymbol{v}_j^{\mathrm{T}}$ 都用行向量表达坐标点。这和本书第 23 章要介绍的行空间有直接联系。

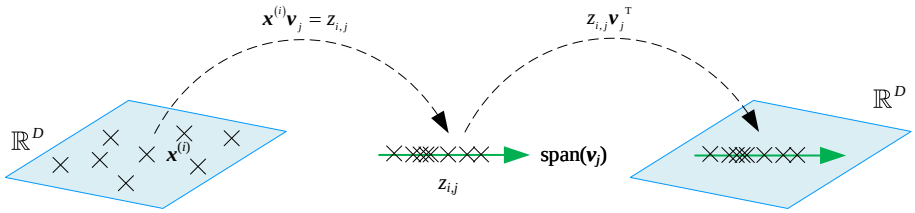


图 8. $\mathbb{R}^D$ 空间数据点先投影到 span($\boldsymbol{v}_j$)，再投影回到 $\mathbb{R}^D$

向量投影：张量积

将 (11) 写成张量积的形式：

$$\boldsymbol{X}_j = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_j \otimes \boldsymbol{v}_j \tag{14}$$

$\boldsymbol{X}_j$ 就是 $\boldsymbol{X}$ 经过“降维”到子空间 span($\boldsymbol{v}_j$) 后，再投影到 $\mathbb{R}^D$ 中得到的“像”。$\boldsymbol{X}_j$ 也是 $\boldsymbol{X}$ 在 $\boldsymbol{v}_j$ 上的向量投影。张量积 $\boldsymbol{v}_j \otimes \boldsymbol{v}_j$ 就是我们上一章提到的**投影矩阵** (projection matrix)。

张量积 $\boldsymbol{v}_j \otimes \boldsymbol{v}_j$ 本身完成 “多维 → 一维” + “一维 → 多维” 这两步映射。很显然，对于非 $\boldsymbol{O}$ 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 来说，

$$\operatorname{rank}\left(\boldsymbol{v}_j \otimes \boldsymbol{v}_j\right) = 1 \quad \Rightarrow \quad \operatorname{rank}\left(\boldsymbol{X}_j\right) = 1 \tag{15}$$

所以，在 $\mathbb{R}^D$ 空间中，$\boldsymbol{X}_j$ 所有数据点在一条通过原点的直线上，直线和 $\boldsymbol{v}_j$ 平行。也就是说，虽然 $\boldsymbol{X}_j$ 表面上来看在 D 维空间 $\mathbb{R}^D$ 中，$\boldsymbol{X}_j$ 实际上只有 1 个维度，rank($\boldsymbol{X}_j$) = 1。

利用张量积，(10) 可以写成：

$$\boldsymbol{X} = \underbrace{\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1}_{\boldsymbol{X}_1} + \underbrace{\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2}_{\boldsymbol{X}_2} + \cdots + \underbrace{\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_D \otimes \boldsymbol{v}_D}_{\boldsymbol{X}_D} \tag{16}$$

可以这样理解上式，$\boldsymbol{X}$ 分别二次投影 (向量投影) 到规范正交基 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 每个列向量 $\boldsymbol{v}_j$ 所代表的子空间 span($\boldsymbol{v}_j$) 中，获得 $\boldsymbol{X}_1$、$\boldsymbol{X}_2 \ldots \boldsymbol{X}_D$。而 $\boldsymbol{X}_1$、$\boldsymbol{X}_2 \ldots \boldsymbol{X}_D$ 层层叠加还原原始数据 $\boldsymbol{X}$。

再进一步，根据 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{I}$，我们知道：

$$\boldsymbol{I} = \boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1 + \boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2 + \cdots + \boldsymbol{v}_D \otimes \boldsymbol{v}_D \tag{17}$$

也就是说，$\boldsymbol{v}_j \otimes \boldsymbol{v}_j$ 层层叠加得到单位阵 $\boldsymbol{I}$。

此外，$i \neq j$ 时，$\boldsymbol{v}_i \otimes \boldsymbol{v}_i$ 和 $\boldsymbol{v}_j \otimes \boldsymbol{v}_j$ 这两个张量积的矩阵乘积为零矩阵 $\boldsymbol{O}$：

$$\left(\boldsymbol{v}_i \otimes \boldsymbol{v}_i\right) @ \left(\boldsymbol{v}_j \otimes \boldsymbol{v}_j\right) = \boldsymbol{v}_i \underbrace{\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{v}_j}_{0} \boldsymbol{v}_j^{\mathrm{T}} = 0 \boldsymbol{v}_i \boldsymbol{v}_j^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{O} \tag{18}$$

标准正交基：便于理解

标准正交基是特殊的规范正交基。为了方便理解，我们用标准正交基 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_D]$ 替换 (16) 中的 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$，得到：

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_2 + \cdots + \boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_D \otimes \boldsymbol{e}_D \tag{19}$$

展开 (19) 中等式右侧第一项得到：

$$\boldsymbol{X}_1 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{X}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \tag{20}$$

$\boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_1$ 得到的是 $\boldsymbol{X}$ 的每一行在 span($\boldsymbol{e}_1$) 这个子空间的坐标，即 $\boldsymbol{x}_1$。而 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1$ 告诉我们的是 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_1$ 在 D 维空间 $\mathbb{R}^D$ 中坐标值。

因此 (19) 右侧每一项 $\boldsymbol{X}_j$ 可以写成：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{X}_1 &= \boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \\ \boldsymbol{X}_2 &= \boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \\ &\vdots \\ \boldsymbol{X}_D &= \boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_D \otimes \boldsymbol{e}_D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{21}$$

也就是说，$\boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_j \otimes \boldsymbol{e}_j$ 仅保留 $\boldsymbol{X}$ 的第 j 列 $\boldsymbol{x}_j$，其他位置元素置 0。

因此，(19) 可以写成：

$$\boldsymbol{X} = \underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}_1} + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & 0 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}_2} + \cdots + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}_D} \tag{22}$$

图 9 所示为上式“二次投影”与“层层叠加”过程。

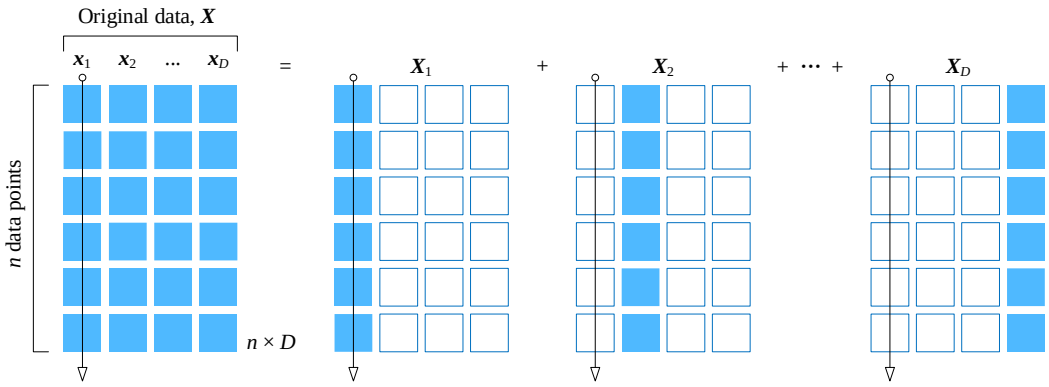


图 9. 标准正交基 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, …, $\boldsymbol{e}_D$] 中二次投影与叠加

回过头再看 (9)，我们知道这个运算过程代表先从标准正交基 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, …, $\boldsymbol{e}_D$] 到规范正交基 [$\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_2$, …, $\boldsymbol{v}_D$] 的投影，然后再投影回到标准正交基 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, …, $\boldsymbol{e}_D$]：

$$\underset{}{\boldsymbol{X}} \underset{\boldsymbol{V}}{\rightarrow} \underset{\boldsymbol{XV}}{\boldsymbol{Z}} \underset{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}}{\rightarrow} \underset{\boldsymbol{XVV}^{\mathrm{T}}}{\boldsymbol{X}} \tag{23}$$

其中，$\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵，因此 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{V}^{-1}$。上式还告诉我们，$\boldsymbol{V}$ 是个规范正交基，$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 也是个规范正交基。从几何角度来看，$\boldsymbol{V}$ 代表在 D 维空间的旋转。通过 $\boldsymbol{V}$，$\boldsymbol{X}$ 旋转得到 $\boldsymbol{Z}$；利用 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{Z}$ 逆向旋转得到 $\boldsymbol{X}$。

看到这里，有些读者怕是已经晕头转向。下面利用鸢尾花数据集做例子，帮大家更直观理解本节内容。

10.3 二特征数据投影：标准正交基

本节以二特征矩阵为例讲解何谓“二次投影”和“层层叠加”。数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 选取鸢尾花数据集前两列——花萼长度、花萼宽度，这样数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 的形状为 150 × 2。投影的方向为标准正交基 [$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$]。

水平方向投影

如图 10 所示，$\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向水平方向标量投影，即 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向 $\boldsymbol{e}_1$ 投影。以图中红点 A 为例，A 的坐标为 (5, 2)，它在 $\boldsymbol{e}_1$ 方向上的标量投影对应 A 在横轴坐标：

$$\underset{}{\begin{bmatrix}5 & 2\end{bmatrix}}\underset{\boldsymbol{e}_1}{\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}} = 5 \tag{24}$$

⚠ 注意，5 代表的是 A 在 span($\boldsymbol{e}_1$) 空间中的坐标值，而 span($\boldsymbol{e}_1$) 显然为一维空间。

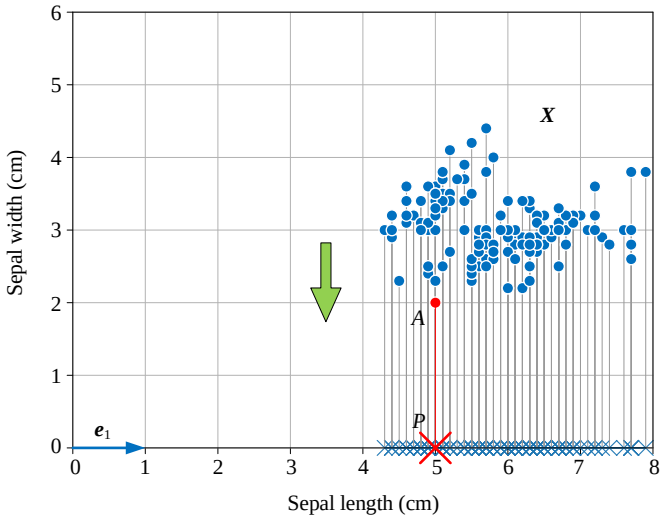


图 10. 二特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向 $\boldsymbol{e}_1$ 投影，一次投影

如图 11 热图所示，$\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向 $\boldsymbol{e}_1$ 投影结果为列向量 $\boldsymbol{x}_1$，相当于保留了 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 第一列数据：

$$\boldsymbol{z}_1 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{x}_1 \tag{25}$$

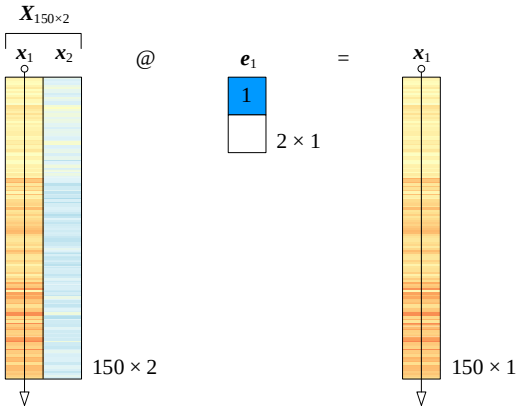


图 11. 数据热图，二特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向 $\boldsymbol{e}_1$ 投影，一次投影 (标量投影)

大家可能会好奇，既然图 10 中 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向水平方向投影结果都可以画在图 10 直角坐标系中，在二维空间 $\mathbb{R}^2 = \text{span}(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2)$ 中，这些投影点一定有其二维坐标值。

很明显，以 A 为例，A 在横轴投影点 P 在 $\mathbb{R}^2 = \text{span}(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2)$ 的坐标值为 (5, 0)。这个结果是怎么得到的？

这就用到了本章前文讲到的“二次投影”，相当于在 (24) 基础上再次投影。第二次投影相当于“升维”，从一维升到二维。

以点 A 为例，“二次投影”对应的计算为：

$$\begin{bmatrix}5 & 2\end{bmatrix}\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix}5 & 2\end{bmatrix}\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_1^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix}5 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}5 & 0\end{bmatrix} \tag{26}$$

上式对应的计算如图 12 所示。

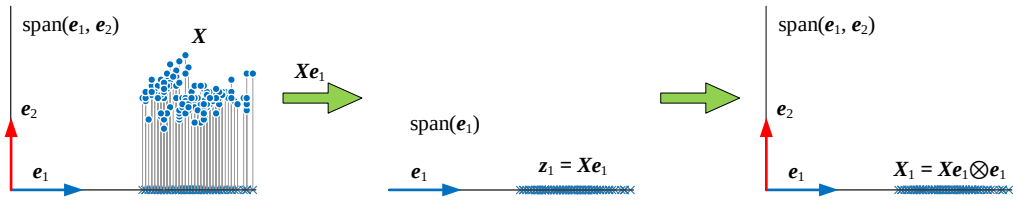


图 12. 二特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{e}_1$ 投影，二次投影

$\boldsymbol{X}$ 在 $\boldsymbol{e}_1$ 二次投影对应 $\mathbb{R}^2 = \text{span}(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2)$ 坐标值为 $\boldsymbol{X}_1$：

$$\boldsymbol{X}_1 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_1^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{X}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{0}\end{bmatrix} \tag{27}$$

图 13 所示为上述运算对应热图。

很容易判断，(27) 上式中 $\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1$ 的行列式值为 0，即 $\det(\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1) = 0$。也就是说这个映射过程存在降维，映射矩阵 $\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1$ 不存在逆，即几何操作不可逆。

⚠ 值得注意的是，从 $\boldsymbol{x}_1$ 到 $\boldsymbol{X}_1 = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{0}]$ 这种“升维”只是名义上的维度提高，不代表数据信息增多。显然，上式中 $\boldsymbol{X}_1$ 的秩仍为 1，即 $\text{rank}(\boldsymbol{X}_1)$。举个形象点的例子，我们给桌面上马克杯拍了张照片，再把照片平放在桌面上。马克杯本身就是 $\boldsymbol{X}$，桌面上的照片就是 $\boldsymbol{X}_1$。

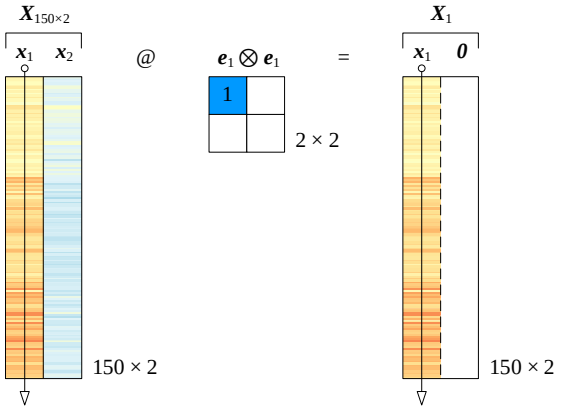


图 13. 数据热图，二特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向 $\boldsymbol{e}_1$ 投影，二次投影

竖直方向投影

如图 14 所示，$\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向竖直方向投影，即 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向 $\boldsymbol{e}_2$ 投影。还是以 A 点为例，A (5, 2) 在 $\boldsymbol{e}_2$ 方向上的标量投影为：

$$\begin{bmatrix}5 & 2\end{bmatrix}\underbrace{\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{e}_2}=2 \tag{28}$$

2 代表的是 A 在 span($\boldsymbol{e}_2$) 空间中的坐标值，span($\boldsymbol{e}_2$) 同样为一维空间。图 15 为上述运算的热图。

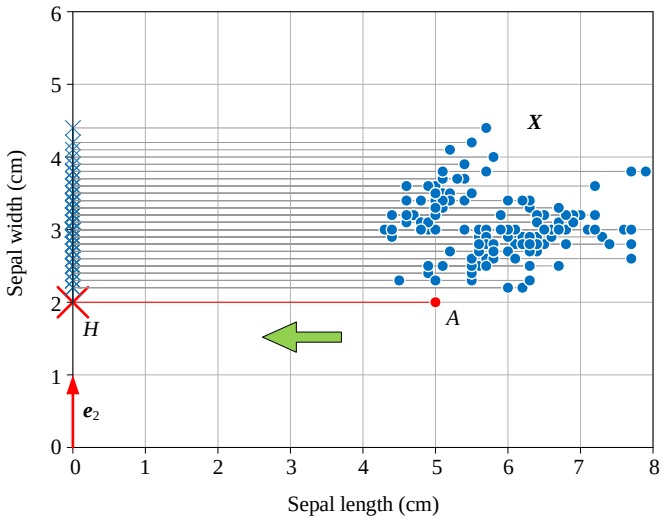


图 14. 二特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向 $\boldsymbol{e}_2$ 方向标量投影，一次投影

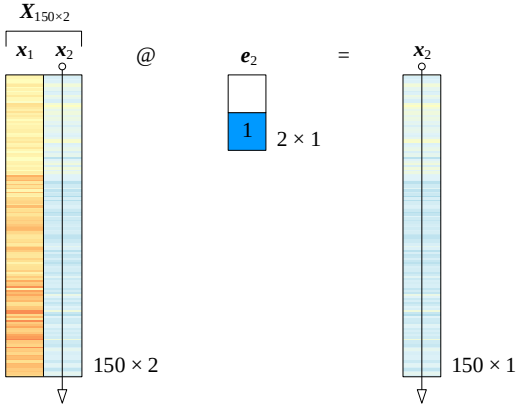


图 15. 数据热图，二特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向 $\boldsymbol{e}_2$ 投影，一次投影

同样利用“二次投影”，得到 A 在竖直方向投影点 H 在 span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$) 的坐标值为 (0, 2)：

$$\begin{bmatrix}5 & 2\end{bmatrix}\boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_2 = \begin{bmatrix}5 & 2\end{bmatrix}\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{e}_2^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix}5 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0 & 2\end{bmatrix} \tag{29}$$

上式对应的计算如图 16 所示。

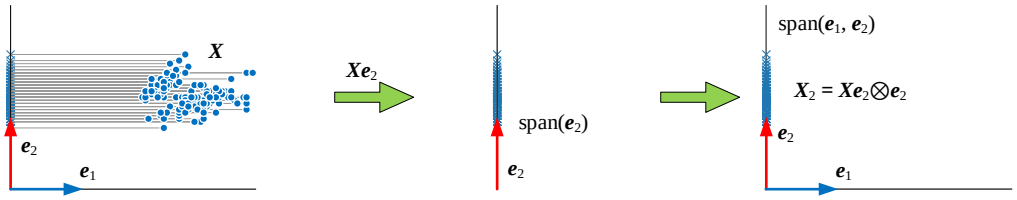


图 16. 二特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向 $\boldsymbol{e}_2$ 方向标量投影，二次投影

$\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 在 $\boldsymbol{e}_2$ 二次投影得到矩阵 $\boldsymbol{X}_2$：

$$\boldsymbol{X}_2 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{e}_2^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{X}\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} \tag{30}$$

上式对应的热图运算为图 17。$\boldsymbol{X}_2$ 第一列向量为 $\boldsymbol{0}$，第二列向量为 $\boldsymbol{x}_2$。

(30) 中 $\boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_2$ 的行列式值为 0，即 $\det(\boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_2) = 0$ 。

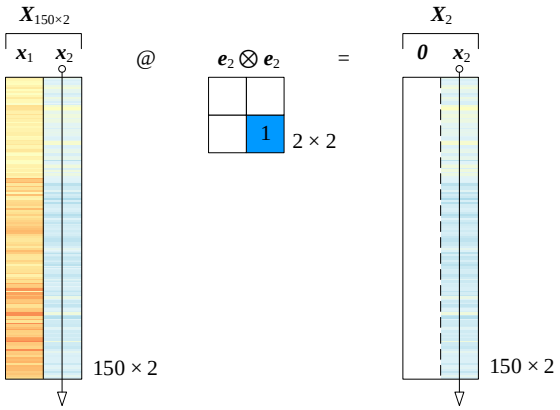


图 17. 数据热图，二特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向 $\boldsymbol{e}_2$ 投影，二次投影

叠加

如图 18 所示，以 A 为例，P (5, 0) 和 H (0, 2) 叠加得到点 A 坐标 (5, 2)。这相当于两个向量合成，即：

$$\begin{bmatrix}5\\ 0\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}0\\ 2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}5\\ 2\end{bmatrix} \tag{31}$$

或者以行向量来表示，

$$\begin{bmatrix}5 & 0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0 & 2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}5 & 2\end{bmatrix} \tag{32}$$

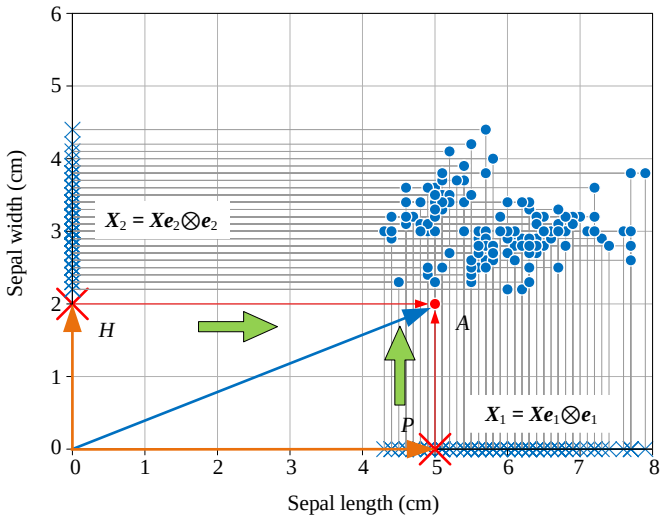


图 18. 数据叠加还原散点图

如图 19 所示，$\boldsymbol{X}_1$ 和 $\boldsymbol{X}_2$ 叠加还原 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{X}_{150\times 2} &= \boldsymbol{X}_1 + \boldsymbol{X}_2 \\ &= \boldsymbol{X}\left(\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_2\right) \\ &= \boldsymbol{X}\left(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{e}_2\boldsymbol{e}_2^{\mathrm{T}}\right) \\ &= \boldsymbol{X}\left(\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\right) = \boldsymbol{X}\boldsymbol{I}\end{aligned} \tag{33}$$

图 20 所示为上述运算对应的热图。

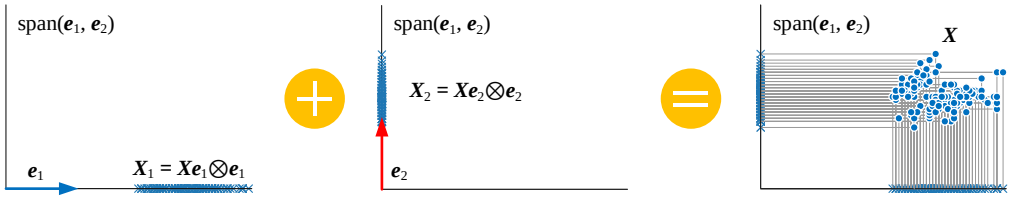


图 19. 数据叠加还原 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$

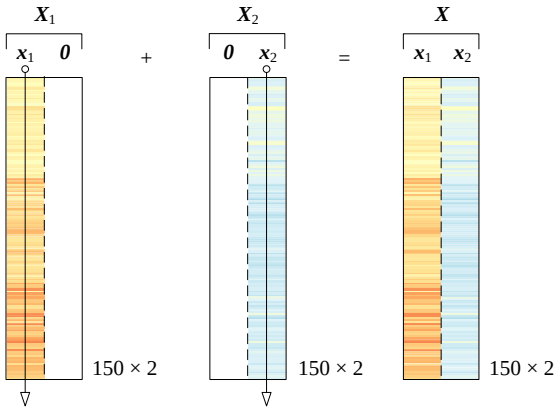


图 20. 数据热图，叠加还原 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$

10.4 二特征数据投影：规范正交基

本节分析 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 在三个不同规范正交基投影情况。

第一个规范正交基

给定如下规范正交基 $\boldsymbol{V}=[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$：

$$\boldsymbol{V}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sqrt{3}/2 & -1/2\\ 1/2 & \sqrt{3}/2\end{bmatrix} \tag{34}$$

从几何变换角度来看，$\boldsymbol{V}$ 就是一个旋转矩阵。请大家自行验证 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{I}$。此外，很容易计算得到 $\boldsymbol{V}$ 的行列式值为 1，即 $\det(\boldsymbol{V})=1$。也就是说，旋转不改变面积。

$\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$ 也相当于是 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 的线性组合，即：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{v}_1&=\sqrt{3}/2\boldsymbol{e}_1+1/2\boldsymbol{e}_2\\ \boldsymbol{v}_2&=-1/2\boldsymbol{e}_1+\sqrt{3}/2\boldsymbol{e}_2\end{aligned} \tag{35}$$

如图 21 所示，同样以点 A (5, 2) 为例，A 在 $\boldsymbol{v}_1$ 方向标量投影为：

$$\begin{bmatrix}5 & 2\end{bmatrix}\underbrace{\begin{bmatrix}\sqrt{3}/2\\ 1/2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{v}_1}\approx 5.33 \tag{36}$$

也就是说，A 在 span($\boldsymbol{v}_1$) 投影点 H 的坐标值为 5.33，对应向量可以写成 $5.33\boldsymbol{v}_1$。

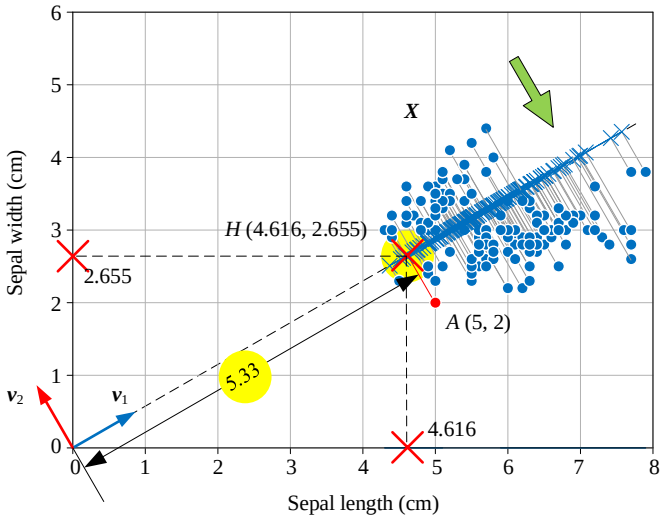


图 21. 二特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向 $\boldsymbol{v}_1$ 投影

通过二次投影获得 H 在 span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$) 坐标值：

$$\begin{bmatrix}5 & 2\end{bmatrix}\boldsymbol{v}_1\otimes\boldsymbol{v}_1=\begin{bmatrix}5 & 2\end{bmatrix}\boldsymbol{v}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}5 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}3/4 & \sqrt{3}/4\\ \sqrt{3}/4 & 1/4\end{bmatrix}\approx\begin{bmatrix}4.616 & 2.665\end{bmatrix} \tag{37}$$

这就是 H 在图 21 中坐标值。很容易计算，(37) 中 $\boldsymbol{v}_1\otimes\boldsymbol{v}_1$ 的行列式值为 0，即 $\det(\boldsymbol{v}_1\otimes\boldsymbol{v}_1)=0$。

数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 在 $\boldsymbol{v}_1$ 投影 $\boldsymbol{z}_1$ 为：

$$\boldsymbol{z}_1=\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1=\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}}\underbrace{\begin{bmatrix}\sqrt{3}/2\\ 1/2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{v}_1}\approx 0.866\boldsymbol{x}_1+0.5\boldsymbol{x}_2 \tag{38}$$

观察上式发现，$\boldsymbol{z}_1$ 相当于 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 的线性组合。请大家关注一下单位，$\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 的单位均为厘米，因此上式线性组合结果的单位还是厘米。

如果，$\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 的分别代表身高、体重数据，单位为米、公斤。这种情况，$\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 线性组合结果的单位就“尴尬”。因此，对于单位不统一的矩阵，可以考虑先通过标准化“去单位”。

$\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 在 $\boldsymbol{v}_1$ 二次投影结果 $\boldsymbol{X}_1$ 为：

$$\boldsymbol{X}_1=\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1\otimes\boldsymbol{v}_1=\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\approx\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}}\begin{bmatrix}0.750 & 0.433\\ 0.433 & 0.250\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.750\boldsymbol{x}_1+0.433\boldsymbol{x}_2 & 0.433\boldsymbol{x}_1+0.250\boldsymbol{x}_2\end{bmatrix} \tag{39}$$

而 $\boldsymbol{X}_1$ 的两个列向量都存在如下倍数关系，因此 $\boldsymbol{X}_1$ 的秩为 1：

$$\boldsymbol{X}_1\approx\begin{bmatrix}0.866\times(0.866\boldsymbol{x}_1+0.5\boldsymbol{x}_2) & 0.5\times(0.866\boldsymbol{x}_1+0.5\boldsymbol{x}_2)\end{bmatrix} \tag{40}$$

如图 21 所示，$\boldsymbol{X}_1$ 所有点在一条通过原点的直线上。这条直线等价于 span($\boldsymbol{v}_1$)。

如图 22 所示，同样以点 A (5, 2) 为例，A 在 $\boldsymbol{v}_2$ 方向标量投影结果为：

$$\begin{bmatrix} 5 & 2 \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} -1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{v}_2} \approx -0.7679 \tag{41}$$

即 A 在 span($\boldsymbol{v}_2$) 投影点的坐标值为−0.7679，对应向量可以写成$-0.7679\boldsymbol{v}_2$。通过二次投影获得投影点坐标值 (图 22 中 ×)：

$$\begin{bmatrix} 5 & 2 \end{bmatrix} \boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} 5 & 2 \end{bmatrix} \boldsymbol{v}_2 \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 5 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/4 & -\sqrt{3}/4 \\ -\sqrt{3}/4 & 3/4 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 0.384 & -0.665 \end{bmatrix} \tag{42}$$

(42) 中 $\boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2$ 的行列式值为 0，即 $\det(\boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2) = 0$ 。

(37) 和 (42) 之和还原 A 坐标值 (5, 2)：

$$\begin{bmatrix} 5 & 2 \end{bmatrix} (\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1 + \boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2) = \begin{bmatrix} 5 & 2 \end{bmatrix} \left\{ \begin{bmatrix} 3/4 & \sqrt{3}/4 \\ \sqrt{3}/4 & 1/4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1/4 & -\sqrt{3}/4 \\ -\sqrt{3}/4 & 3/4 \end{bmatrix} \right\} = \begin{bmatrix} 5 & 2 \end{bmatrix} \tag{43}$$

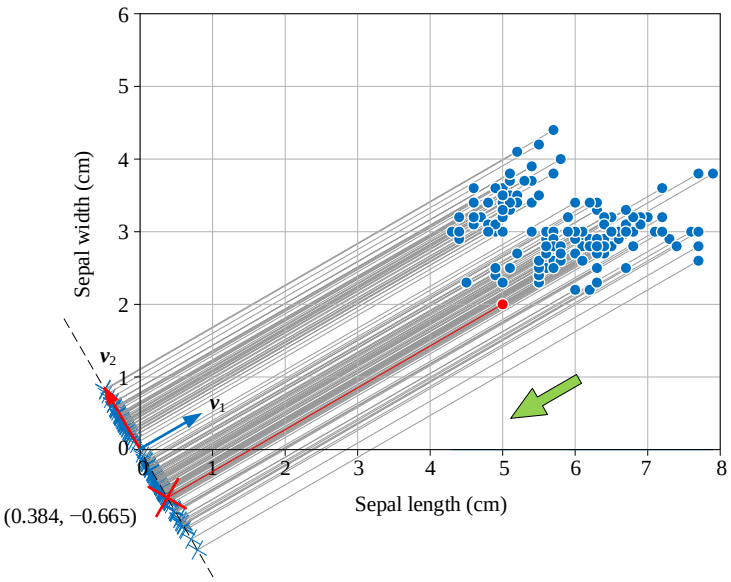


图 22. 二特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times2}$ 向 $\boldsymbol{v}_2$ 投影

$\boldsymbol{X}_{150\times2}$ 在 $\boldsymbol{v}_2$ 投影 $\boldsymbol{z}_2$ 为：

$$\boldsymbol{z}_2 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2 = \underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}} \underbrace{\begin{bmatrix} -1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{v}_2} \approx -0.5\boldsymbol{x}_1 + 0.866\boldsymbol{x}_2 \tag{44}$$

$\boldsymbol{z}_2$ 也是 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 的线性组合。

$\boldsymbol{X}_{150\times2}$ 在 $\boldsymbol{v}_2$ 二次投影 $\boldsymbol{X}_2$ 为：

$$\boldsymbol{X}_2 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} \approx \underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}} \begin{bmatrix}0.250 & -0.433\\ -0.433 & 0.750\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0.250\boldsymbol{x}_1 - 0.433\boldsymbol{x}_2 & -0.433\boldsymbol{x}_1 + 0.750\boldsymbol{x}_2\end{bmatrix} \quad (45)$$

$\boldsymbol{X}_2$ 的秩也为 1。如图 22 所示，$\boldsymbol{X}_2$ 对应的坐标也在一条通过原点的直线上。

(39) 和 (45) 叠加还原 $\boldsymbol{X}$:

$$\boldsymbol{X}_1 + \boldsymbol{X}_2 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1 + \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2 = \boldsymbol{X}\left\{\begin{bmatrix}0.750 & 0.433\\ 0.433 & 0.250\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}0.250 & -0.433\\ -0.433 & 0.750\end{bmatrix}\right\} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{I} = \boldsymbol{X} \quad (46)$$

顺便提一嘴，对于 2 × 2 方阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$，$\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}$ 行列式值存在如下关系:

$$\det(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) = \det(\boldsymbol{A}) + \det(\boldsymbol{B}) + \mathrm{tr}(\boldsymbol{A})\mathrm{tr}(\boldsymbol{B}) - \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}) \quad (47)$$

请大家将 $\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2$ 代入上式验证。

第二个规范正交基

给定如下规范正交基 $\boldsymbol{W} = [\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$:

$$\boldsymbol{W} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{w}_1 & \boldsymbol{w}_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix} \quad (48)$$

图 23 和图 24 所示为二特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向 $\boldsymbol{w}_1$ 和 $\boldsymbol{w}_2$ 投影。请按照本节之前分析 $\boldsymbol{V}$ 的逻辑，自行分析数据在 $\boldsymbol{W}$ 中的投影，并计算 $\boldsymbol{W}$ 的行列式值。

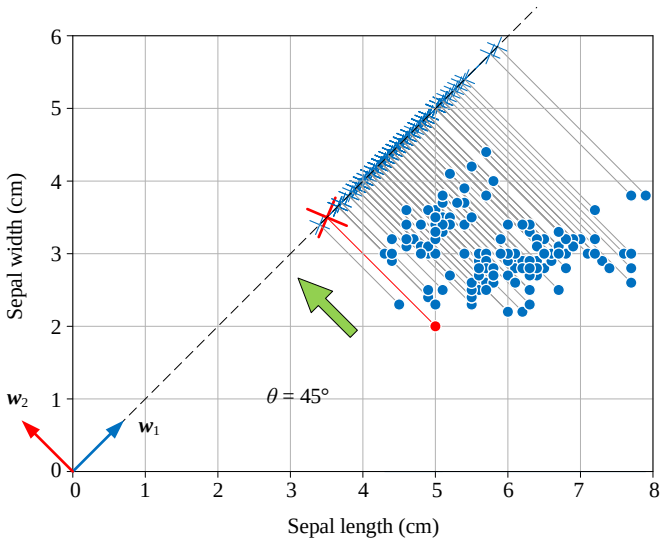


图 23. 二特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向 $\boldsymbol{w}_1$ 投影

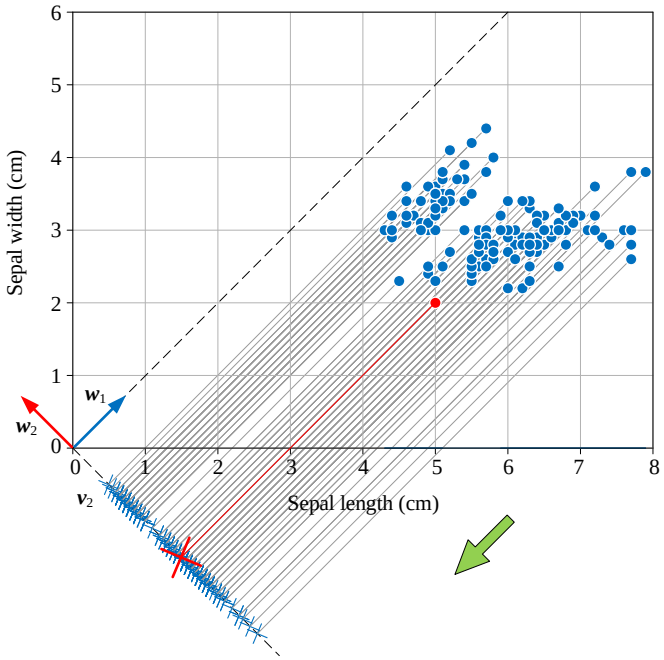


图 24. 二特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向 $\boldsymbol{w}_2$ 投影

第三个规范正交基

给定如下规范正交基 $\boldsymbol{U}=[\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2]$：

$$\boldsymbol{U}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{u}_1 & \boldsymbol{u}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1/2 & -\sqrt{3}/2\\ \sqrt{3}/2 & 1/2\end{bmatrix} \tag{49}$$

图 25 和图 26 所示为二特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向 $\boldsymbol{u}_1$ 和 $\boldsymbol{u}_2$ 投影。请大家分析数据在 $\boldsymbol{U}$ 中的投影，并计算 $\boldsymbol{U}$ 的行列式值。

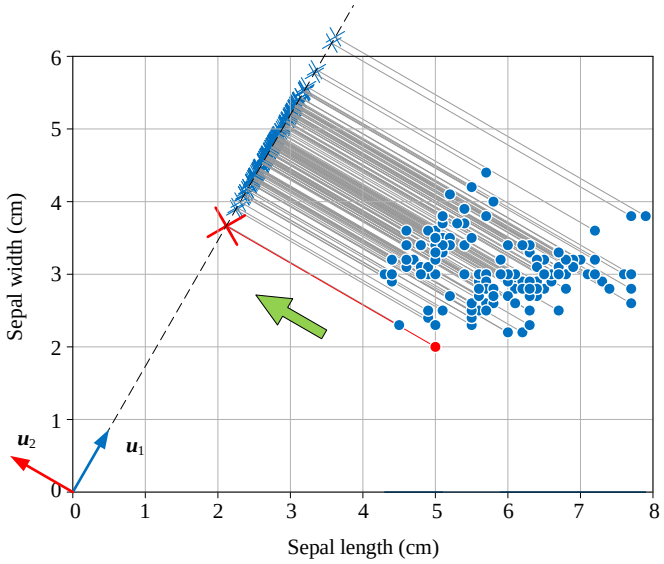


图 25. 二特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$ 向 $\boldsymbol{u}_1$ 投影

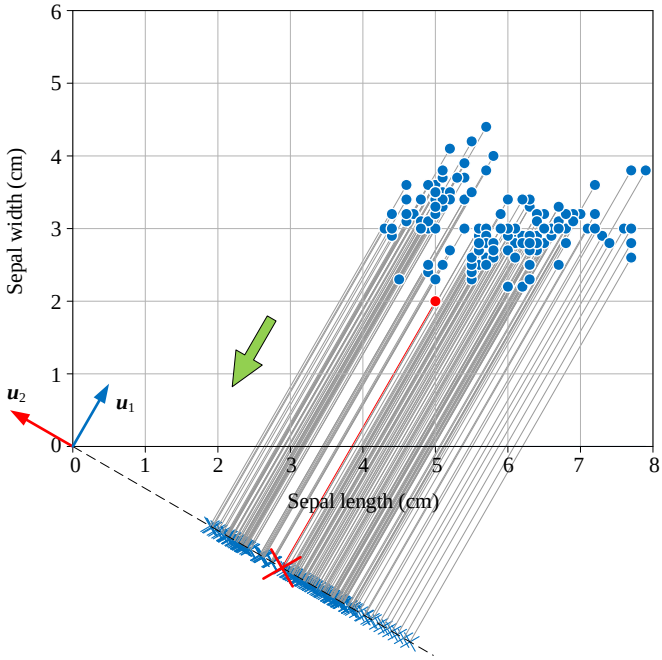


图 26. 二特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times2}$ 向 $\boldsymbol{u}_2$ 投影

旋转角度连续变化

前文提过，在 $\mathbb{R}^2$ 中不同规范正交基之间仅差在旋转角度上。比较图 21 ~ 图 26 这六幅图，当旋转角度连续变化时，投影结果 $\boldsymbol{z}_1$ 和 $\boldsymbol{z}_2$ 也会连续变化。给出如下更具一般性的矩阵 $\boldsymbol{V}$：

$$\boldsymbol{V}=\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix} \tag{50}$$

其中，θ 代表逆时针旋转角度。$\boldsymbol{Z}=\boldsymbol{XV}$ 可以展开写成：

$$\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{Z}}=\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}}\underbrace{\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}}=\begin{bmatrix}\cos\theta\boldsymbol{x}_1-\sin\theta\boldsymbol{x}_2 & \sin\theta\boldsymbol{x}_1+\cos\theta\boldsymbol{x}_2\end{bmatrix} \tag{51}$$

对于上式中 $\boldsymbol{z}_1$ 和 $\boldsymbol{z}_2$，我们可以分析它们各自的向量模，也可以计算 $\boldsymbol{z}_1$ 和 $\boldsymbol{z}_2$ 之间的向量夹角余弦值、夹角弧度、角度等。

从统计视角来看，$\boldsymbol{z}_1$ 和 $\boldsymbol{z}_2$ 代表两列数值，我们可以分析它们各自的均值、方差、标准差，也可以计算 $\boldsymbol{z}_1$ 和 $\boldsymbol{z}_2$ 的协方差、相关性系数。

而上述这些量值都随着 θ 变化而连续变化。有变化就有最大值、最小值，就有优化问题。本书后续介绍的特征值分解和奇异值分解背后都离不开优化视角。这是本书第 18 章要讨论的话题。

10.5 四特征数据投影：标准正交基

本章最后两节以四特征数据矩阵为例，扩展前文分析案例。本节先从最简单的标准正交基 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_D]$ 入手。

一次投影：标量投影

前文提到过，一次投影实际上就是“标量投影”。图 27 (a) 所示为鸢尾花数据集矩阵 $\boldsymbol{X}$ 在 $\boldsymbol{e}_1$ 方向上标量投影的运算热图。

从行向量角度来看，$\boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{e}_1 \rightarrow x_{i,1}$ 代表 $\mathbb{R}^D$ 空间坐标值 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 投影到 $\text{span}(\boldsymbol{e}_1)$ 这个子空间后，坐标值为 $x_{i,1}$。

⚠ 再次强调，向量空间 $\text{span}(\boldsymbol{e}_1)$ 维度为 1。$x_{i,1}$ 是 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 在 $\text{span}(\boldsymbol{e}_1)$ 的坐标值。

从列向量角度来看，$[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \boldsymbol{x}_4]\boldsymbol{e}_1 \rightarrow \boldsymbol{x}_1$，是一个线性组合过程。而 $\boldsymbol{e}_1 = [1, 0, 0, 0]^{\mathrm{T}}$，线性组合结果只保留了鸢尾花数据集第一列 $\boldsymbol{x}_1$，即花萼长度。

请大家按照这个思路分析图 27 (b)、(c)、(d)三幅热图运算。请大家思考，要是想计算鸢尾花花萼长度和花萼宽度之和，用矩阵乘法怎样完成？

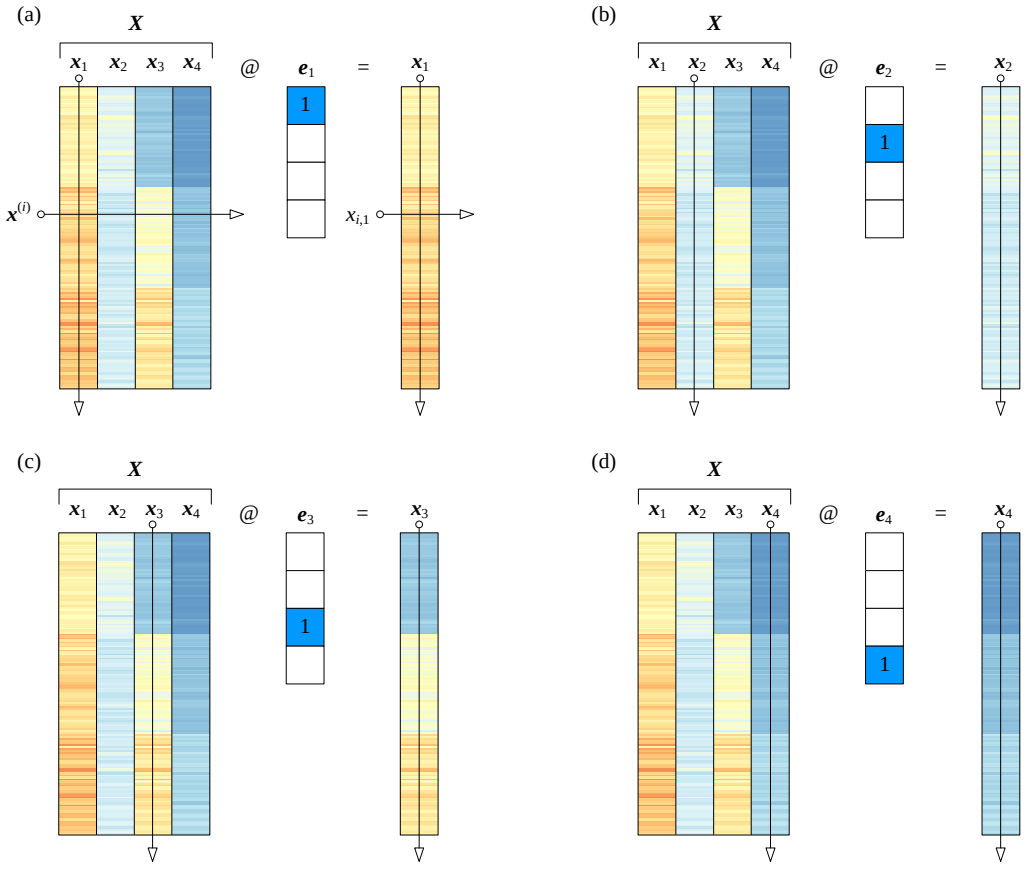


图 27. 四特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times4}$ 分别向 $\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$、$\boldsymbol{e}_3$、$\boldsymbol{e}_4$ 投影，一次投影

二次投影

如前文所述，本章所谓的“二次投影”实际上就是向量投影。如图 28 所示，$\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{e}_1$ 方向向量投影结果就是 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1$ 的矩阵乘积。乘积结果是，只保留鸢尾花数据集第一列——花萼长度，其他数据均置 0。请大家按照这个思路自行分析图 29、图 30、图 31。此外，容易计算 $\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_2$、$\boldsymbol{e}_3 \otimes \boldsymbol{e}_3$、$\boldsymbol{e}_4 \otimes \boldsymbol{e}_4$ 的行列式值都为 0。

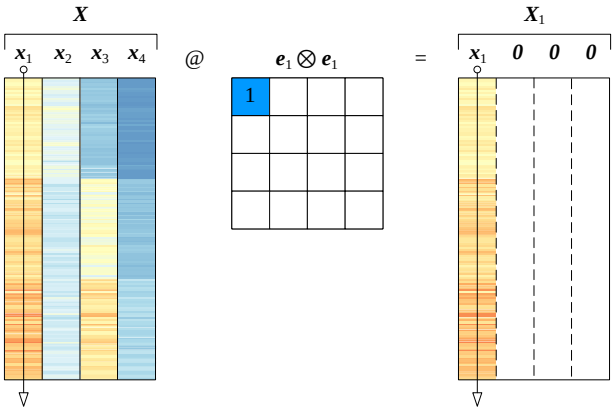


图 28. 四特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times4}$ 向 $\boldsymbol{e}_1$ 方向向量投影，二次投影

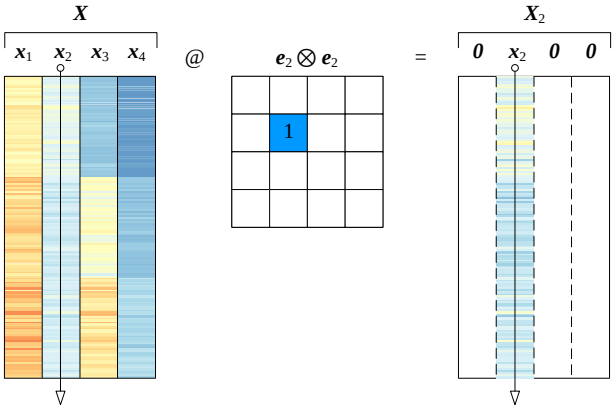


图 29. 四特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times4}$ 向 $\boldsymbol{e}_2$ 方向向量投影，二次投影

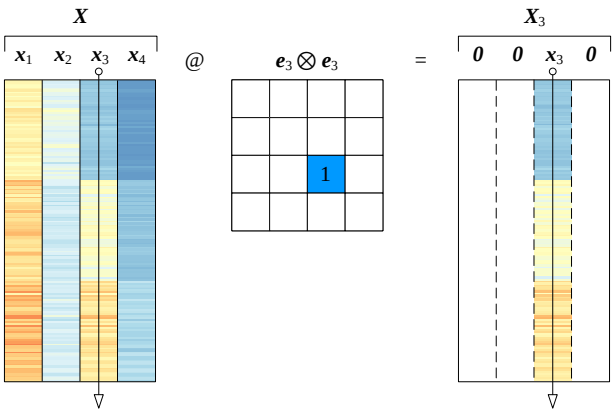


图 30. 四特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times4}$ 向 $\boldsymbol{e}_3$ 方向向量投影，二次投影

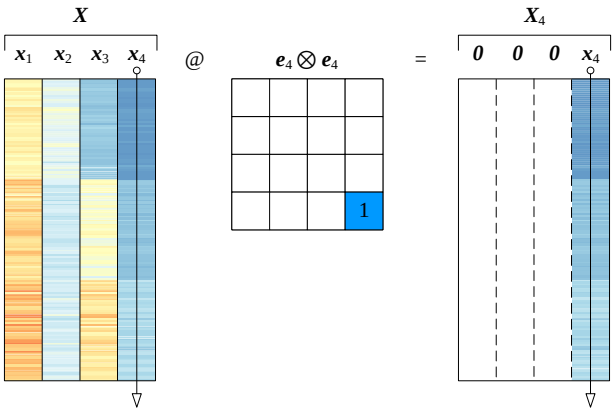


图 31. 四特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times4}$ 向 $\boldsymbol{e}_4$ 方向向量投影，二次投影

向平面投影

本节之前提到的都是向单一方向投影。下面，我们用一个例子说明向某个二维向量空间投影。

如图 32 所示，$\boldsymbol{X}$ 向 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 基底张成的向量空间标量投影，这个过程也相当于降维，从 4 维降到 2 维，只保留了鸢尾花花萼长度、花萼宽度两个特征。

本书第 1 章介绍过成对特征散点图，请大家思考如何用矩阵乘法运算获得每幅散点图数据矩阵。

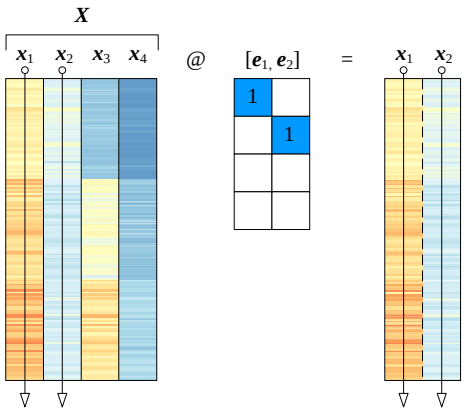


图 32. 四特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times4}$ 向 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 方向标量投影

图 33 所示为 $\boldsymbol{X}$ 向 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 基底张成的向量空间向量投影，结果相当于图 28 和图 29 结果“叠加”，即 $\boldsymbol{X}_1 + \boldsymbol{X}_2$。很明显，$\boldsymbol{X}_1 + \boldsymbol{X}_2$ 并没有还原 $\boldsymbol{X}$。

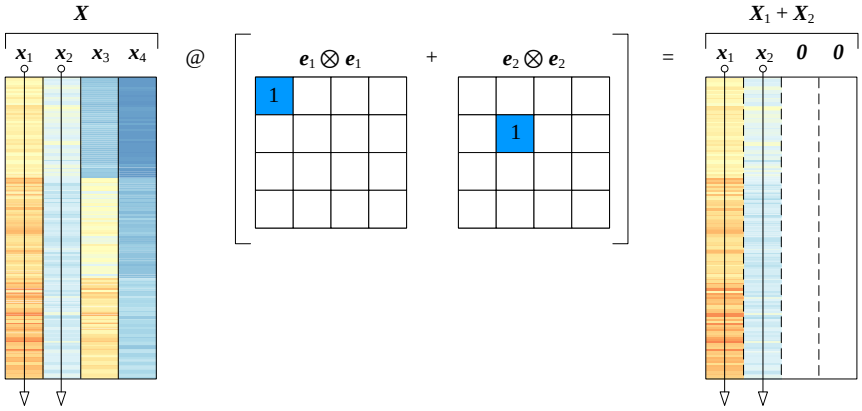


图 33. 四特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times4}$ 向 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 方向向量投影

层层叠加：还原原始矩阵

本章前文 (12) 告诉我们，数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 在规范正交基 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 中每个方向上向量投影层层叠加可以完全还原原始数据。而标准正交基 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_D]$ 可以视作特殊的规范正交基。

观察图 34 得知，要想完整还原 $\boldsymbol{X}$，需要图 28、图 29、图 30、图 31 四幅热图叠加，即 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}_1 + \boldsymbol{X}_2 + \boldsymbol{X}_3 + \boldsymbol{X}_4$。显然，$\boldsymbol{X}_1$、$\boldsymbol{X}_2$、$\boldsymbol{X}_3$、$\boldsymbol{X}_4$ 这四个矩阵的秩都是 1。

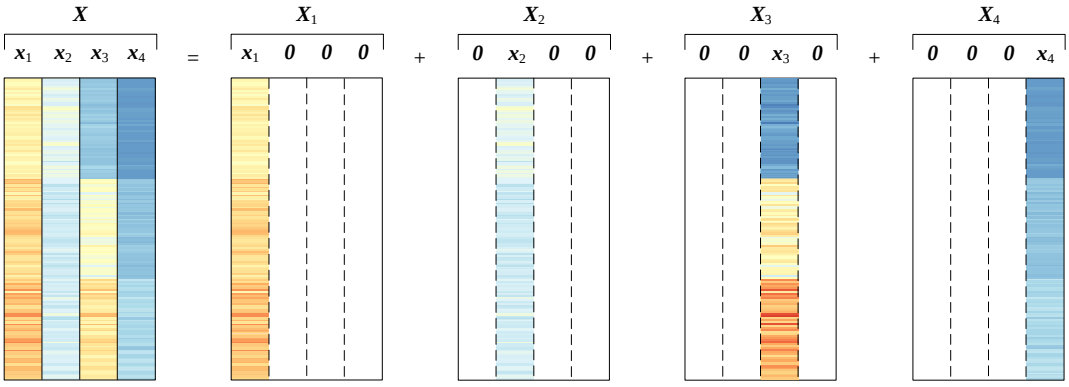


图 34. 投影数据矩阵的层层叠加还原数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times4}$

图 35 是张量积层层叠加得到单位矩阵 $\boldsymbol{I}$，它是数据还原的另外一个视角：

$$\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3 \otimes \boldsymbol{e}_3 + \boldsymbol{e}_4 \otimes \boldsymbol{e}_4 = \boldsymbol{I} \tag{52}$$

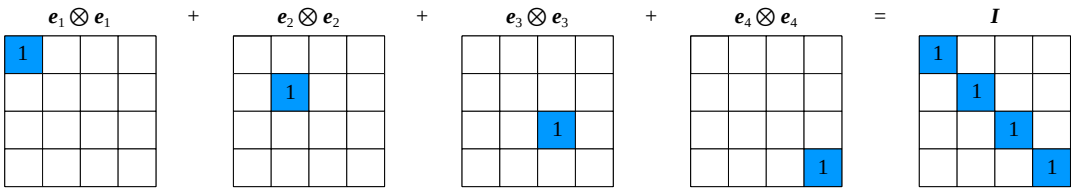


图 35. 张量积的层层叠加还原 4 × 4 单位矩阵

10.6 四维数据投影：规范正交基

有了上一节内容作为基础，这一节提高难度，我们用一个规范正交基重复上一节所有计算。大家阅读这一节时，请对比上一节内容。

某个“无数里挑一”的规范正交基

我们恰好找到了一个 4 × 4 规范正交基 $\boldsymbol{V}$，具体如下：

$$\boldsymbol{V}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \boldsymbol{v}_3 & \boldsymbol{v}_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.751 & 0.284 & 0.502 & 0.321\\ 0.380 & 0.547 & -0.675 & -0.317\\ 0.513 & -0.709 & -0.059 & -0.481\\ 0.168 & -0.344 & -0.537 & 0.752\end{bmatrix} \tag{53}$$

大家可能好奇我们怎么找到这个 $\boldsymbol{V}$，本章后面会揭晓答案。

图 36 所示为规范正交基 $\boldsymbol{V}$ 乘其转置 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 得到单位矩阵。大家可以自己试着验算上式是否满足 $\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}$，即方阵 $\boldsymbol{V}$ 每一列列向量都是单位向量，且 $\boldsymbol{V}$ 的列向量两两正交。上式，$\boldsymbol{V}$ 仅保留小数点后 3 位，$\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 结果非常接近单位矩阵 $\boldsymbol{I}$。

从几何角度来看，规范正交基 $\boldsymbol{V}$ 对应的几何操作是四维空间旋转。

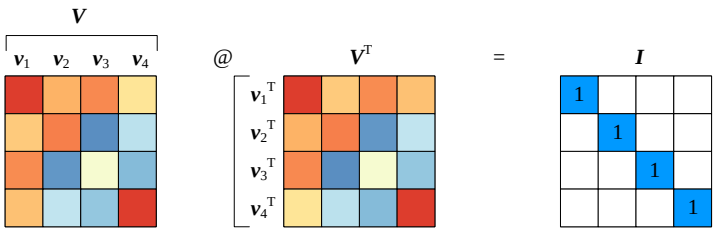


图 36. 规范正交基 $\boldsymbol{V}$ 乘其转置得到 4 × 4 单位矩阵

$\boldsymbol{V}$ 中的像

如图 37 所示，以为规范正交基 $\boldsymbol{V}$ 桥梁，矩阵乘法 $\boldsymbol{Z}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{V}$ 完成 $\boldsymbol{X}$ 到 $\boldsymbol{Z}$ 的映射。$\boldsymbol{Z}$ 就是 $\boldsymbol{X}$ 在 $\boldsymbol{V}$ 中的像，根据 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_j=\boldsymbol{z}_j$，下面逐一分析矩阵 $\boldsymbol{Z}$ 的列向量。

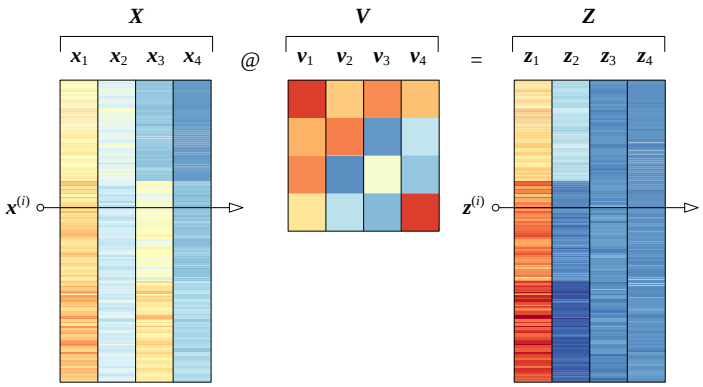


图 37. 四特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times4}$ 投影到规范正交基 $\boldsymbol{V}$ 得到 $\boldsymbol{Z}$

第 1 列向量 $\boldsymbol{v}_1$

图 38 所示为鸢尾花数据集矩阵 $\boldsymbol{X}$ 在 $\boldsymbol{v}_1$ 方向上标量投影的运算热图。

从行向量角度来看，$\boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{v}_1 \rightarrow z_{i,1}$ 代表 $\mathbb{R}^D$ 空间坐标值 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 投影到 $\text{span}(\boldsymbol{v}_1)$ 这个子空间后坐标值变成 $z_{i,1}$。

从列向量角度来看，$[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \boldsymbol{x}_4]\boldsymbol{v}_1 \rightarrow \boldsymbol{z}_1$，是一个线性组合过程，即：

$$\boldsymbol{z}_1 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{x}_3 & \boldsymbol{x}_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.751 \\ 0.380 \\ 0.513 \\ 0.168 \end{bmatrix} = 0.751\boldsymbol{x}_1 + 0.380\boldsymbol{x}_2 + 0.513\boldsymbol{x}_3 + 0.168\boldsymbol{x}_4 \tag{54}$$

上式说明，0.7512 倍 $\boldsymbol{x}_1$、0.380 倍 $\boldsymbol{x}_2$、0.513 倍 $\boldsymbol{x}_3$、0.168 倍 $\boldsymbol{x}_4$ 合成得到了向量 $\boldsymbol{z}_1$。

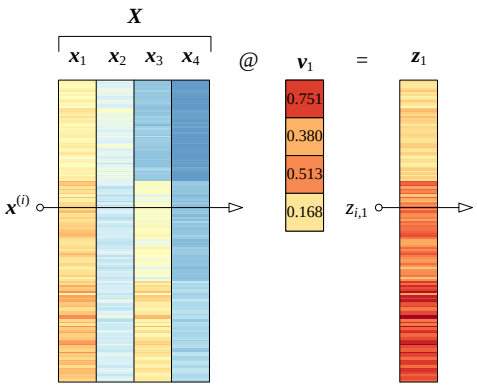


图 38. 四特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times4}\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}_1$ 方向标量投影，一次投影

如图 39 所示，$\boldsymbol{z}_1$ 再乘 $\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}$，便得到 $\boldsymbol{X}_1$。不难理解，$\boldsymbol{X}_1$ 的每一列都是 $\boldsymbol{z}_1$ 乘一个标量系数。也就是说，$\boldsymbol{X}_1$ 的四个列向量之间存在倍数关系，即，

$$\boldsymbol{X}_1 = \boldsymbol{z}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{z}_1\begin{bmatrix} 0.751 & 0.380 & 0.513 & 0.168 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.751\boldsymbol{z}_1 & 0.380\boldsymbol{z}_1 & 0.513\boldsymbol{z}_1 & 0.168\boldsymbol{z}_1 \end{bmatrix} \tag{55}$$

显然，$\boldsymbol{X}_1$的秩为 1，即 $\text{rank}(\boldsymbol{X}_1) = 1$。

总结来说，图 38 和图 39 用了两步完成了“二次投影”，即向量投影。

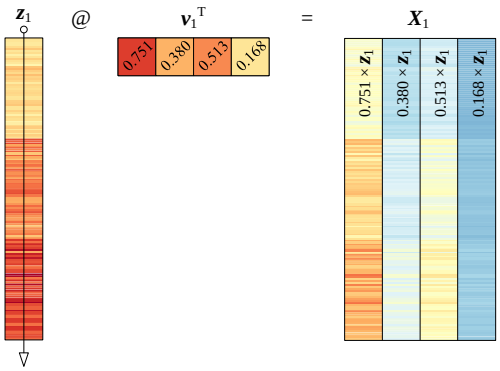


图 39. 四特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times4}\boldsymbol{z}_1$ 乘 $\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}$得到 $\boldsymbol{X}_1$

下面，我们用向量张量积方法完成同样的计算。

首先计算张量积 $\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1$：

$$\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{v}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 0.751 \\ 0.380 \\ 0.513 \\ 0.168 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 0.751 \\ 0.380 \\ 0.513 \\ 0.168 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 0.564 & 0.285 & 0.385 & 0.126 \\ 0.285 & 0.144 & 0.194 & 0.063 \\ 0.385 & 0.194 & 0.263 & 0.086 \\ 0.126 & 0.063 & 0.086 & 0.028 \end{bmatrix} \tag{56}$$

图 40 所示为上述运算热图。很容易发现，张量积为对称矩阵。请大家自行计算张量积的秩是否为 1。

⚠ 注意，(56) 上式仅仅保留小数点后 3 位数值。

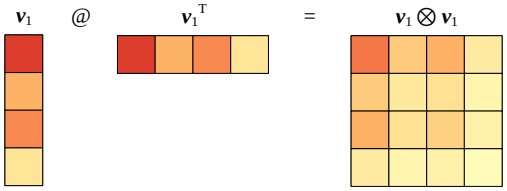


图 40. 计算张量积 $\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1$

图 41 所示为 $\boldsymbol{X}$ 和张量积 $\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1$ 乘积。几何视角来看，$\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}_1$ 向量投影得到 $\boldsymbol{X}_1$，即所谓“二次投影”。

请大家特别注意一点，$\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{X}_1$ 在热图上已经非常接近。我们在选取 $\boldsymbol{v}_1$ 时，有特殊的“讲究”，这就是为什么在本节开头说 $\boldsymbol{V}$ 是“无数里挑一”的原因。我们将会在本书下一个板块——矩阵分解，和大家深入探讨如何获得这个特殊的 $\boldsymbol{V}$。

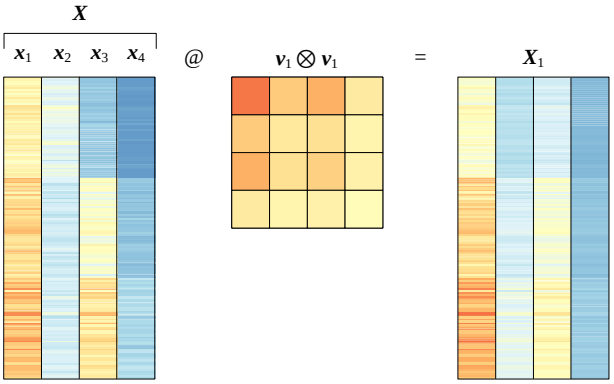


图 41. 四特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times4}$ 向 $\boldsymbol{v}_1$ 方向向量投影，二次投影

第 2 列向量 $\boldsymbol{v}_2$

图 42 展示获得 $\boldsymbol{z}_2$ 和 $\boldsymbol{X}_2$ 的过程。请大家根据之前分析 $\boldsymbol{v}_1$ 的思路自行分析这两图。

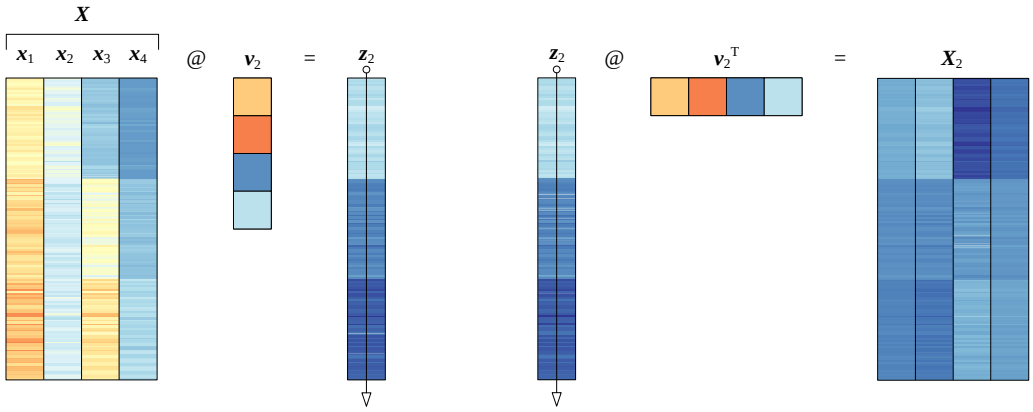


图 42. 四特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times4}\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}_2$ 投影，一次投影，二次投影

同样，利用张量积完成 $\boldsymbol{X}_{150\times4}$ 向 $\boldsymbol{v}_2$ 二次投影。大家自行计算张量积 $\boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2$ 具体值，按照前文思路分析图 43。有必要指出一点，对比 $\boldsymbol{X}_1$，$\boldsymbol{X}_2$ 热图和 $\boldsymbol{X}$ 相差很大。

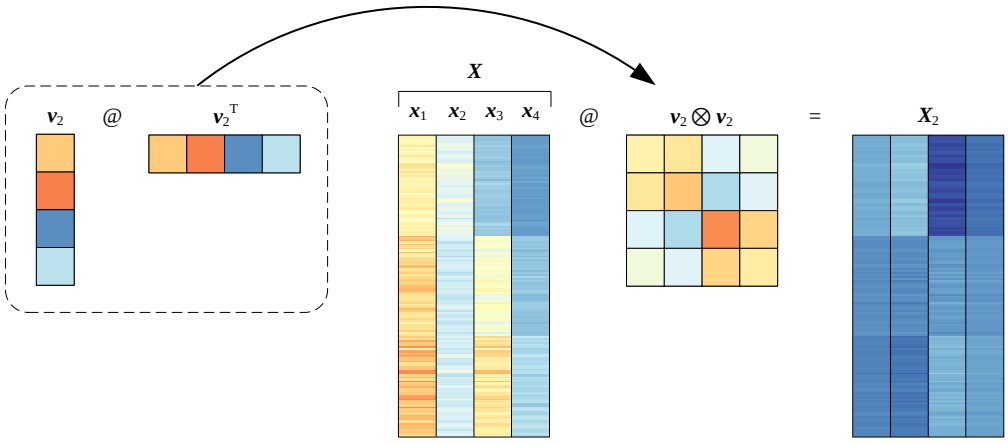


图 43. 四特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times4}$ 向 $\boldsymbol{v}_2$ 投影，二次投影

第 3 列向量 v_3

大家自行分析图 44、图 45。再次强调，一次投影就是标量投影；二次投影相当于向量投影。

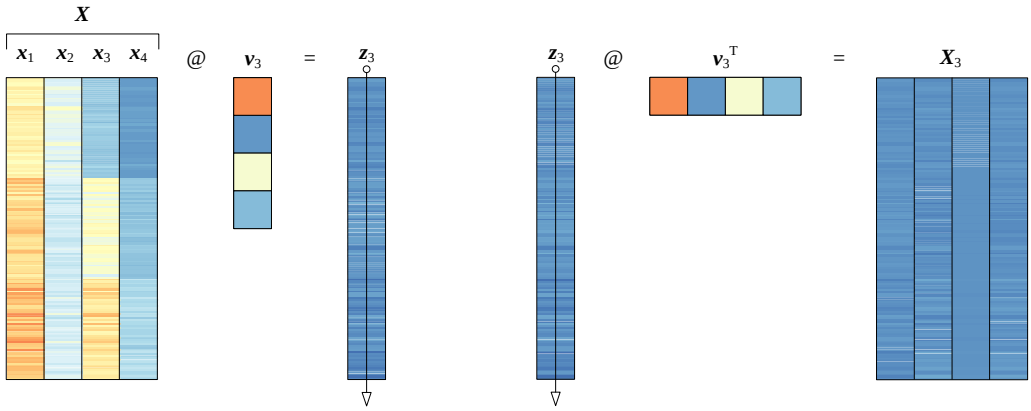


图 44. 四特征数据矩阵 $X_{150\times4}$ 向 v_3 投影，一次投影，二次投影

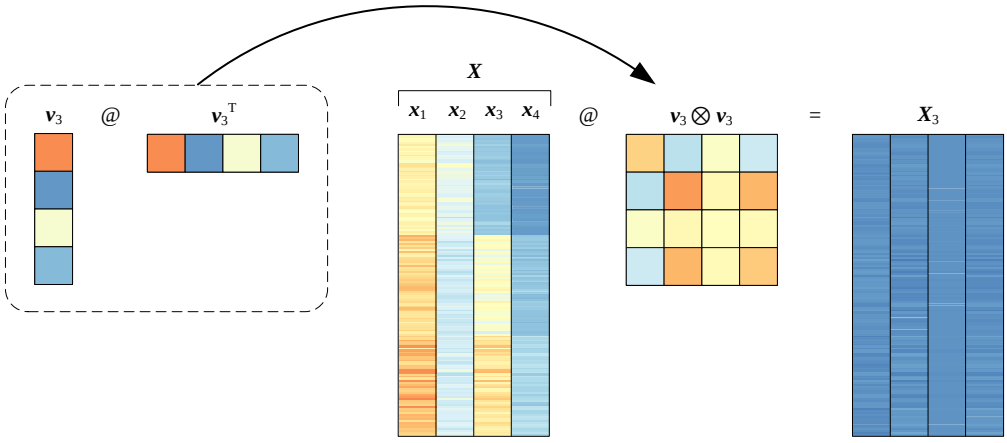


图 45. 四特征数据矩阵 $X_{150\times4}$ 向 v_3 投影，二次投影

第 4 列向量 v_4

大家自行分析图 46、图 47。特别注意比较 X_1、X_2、X_3、X_4 的四幅热图差异。

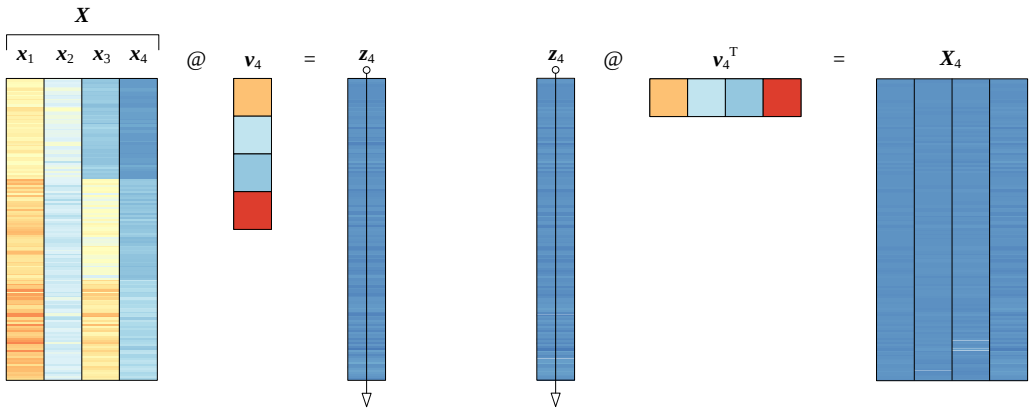


图 46. 四特征数据矩阵 $X_{150\times4}$ 向 v_4 投影，一次投影和二次投影

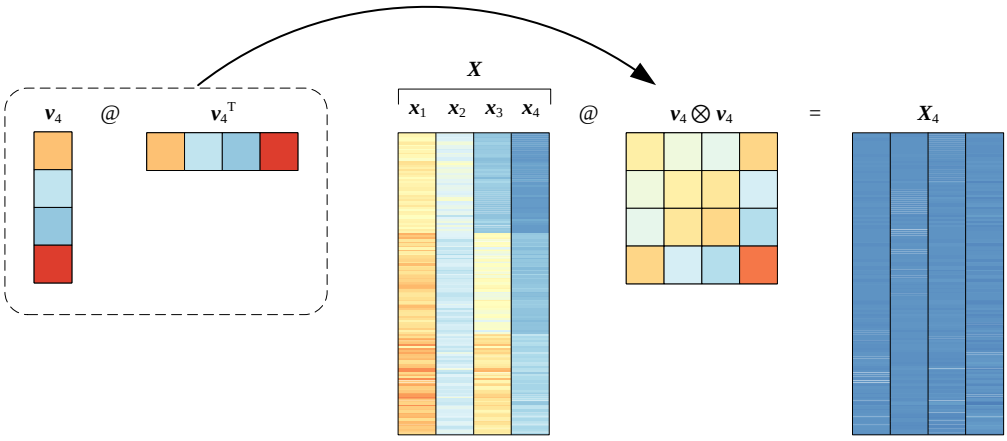


图 47. 四特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times4}$ 向 $\boldsymbol{v}_4$ 投影，二次投影

层层叠加

类似前文，我们也从两个视角讨论层层叠加还原原矩阵。

如图 48 所示，数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 在规范正交基 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 中每个方向上向量投影层层叠加完全还原原始数据。

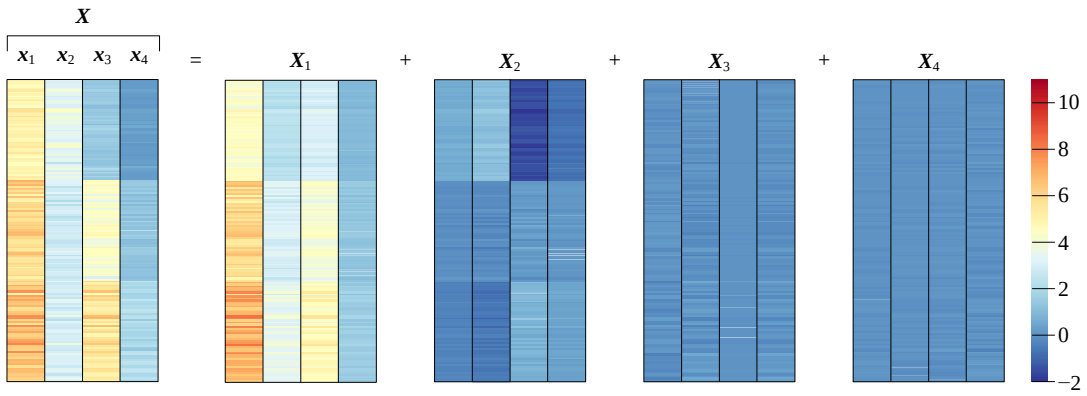


图 48. 层层叠加还原四特征数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times4}$

图 48 告诉我们，要想完整还原 $\boldsymbol{X}$，需要四幅热图叠加，即 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}_1 + \boldsymbol{X}_2 + \boldsymbol{X}_3 + \boldsymbol{X}_4$。我们已经很清楚 $\boldsymbol{X}_1$、$\boldsymbol{X}_2$、$\boldsymbol{X}_3$、$\boldsymbol{X}_4$ 这四个矩阵的秩都是 1。而 $\boldsymbol{X}$ 本身的秩为 4，即 $\text{rank}(\boldsymbol{X}) = 4$。

建议大家仔细对比图 48 中 $\boldsymbol{X}$、$\boldsymbol{X}_1$、$\boldsymbol{X}_2$、$\boldsymbol{X}_3$、$\boldsymbol{X}_4$ 这五幅热图色差，它们采用完全相同的色谱。前文已经提到 $\boldsymbol{X}_1$ 已经非常接近 $\boldsymbol{X}$。也就是说，我们可以用秩为 1 的 $\boldsymbol{X}_1$ 近似秩为 4 的 $\boldsymbol{X}$。

如图 49 所示，这四个张量积层层叠加得到单位矩阵，即：

$$\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1 + \boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2 + \boldsymbol{v}_3 \otimes \boldsymbol{v}_3 + \boldsymbol{v}_4 \otimes \boldsymbol{v}_4 = \boldsymbol{I} \tag{57}$$

如前文所述，(57) 是数据还原的另外一个视角。本章前文提到 (9)，矩阵乘单位矩阵结果为其本身，即 $\boldsymbol{XI} = \boldsymbol{X}$。而单位矩阵 $\boldsymbol{I}$ 可以按 (57) 分解。这也就是说，张量积层层叠加得到了单位矩阵 $\boldsymbol{I}$，等价于还原原始数据。

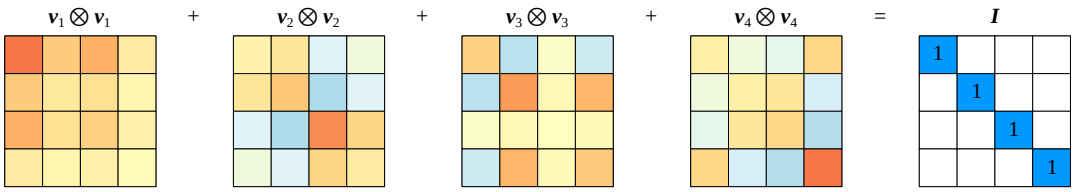


图 49. 张量积层层累加获得 4 × 4 单位矩阵

Bk4_Ch10_01.py 绘制本章前文大部分热图。

10.7 数据正交化

成对特征散点图

本节再回过头来分析图 37 中数据矩阵 $\boldsymbol{Z}$。本书第 1 章提到，对于多特征 ($D > 3$) 数据矩阵，成对特征散点图可以帮助我们可视化数据分布。图 50 所示为矩阵 $\boldsymbol{Z}$ 的成对特征散点图。这幅图中，对角线上的四幅图是每个特征数据分布的直方图，左下角六幅图是二元概率密度估计等高线图。

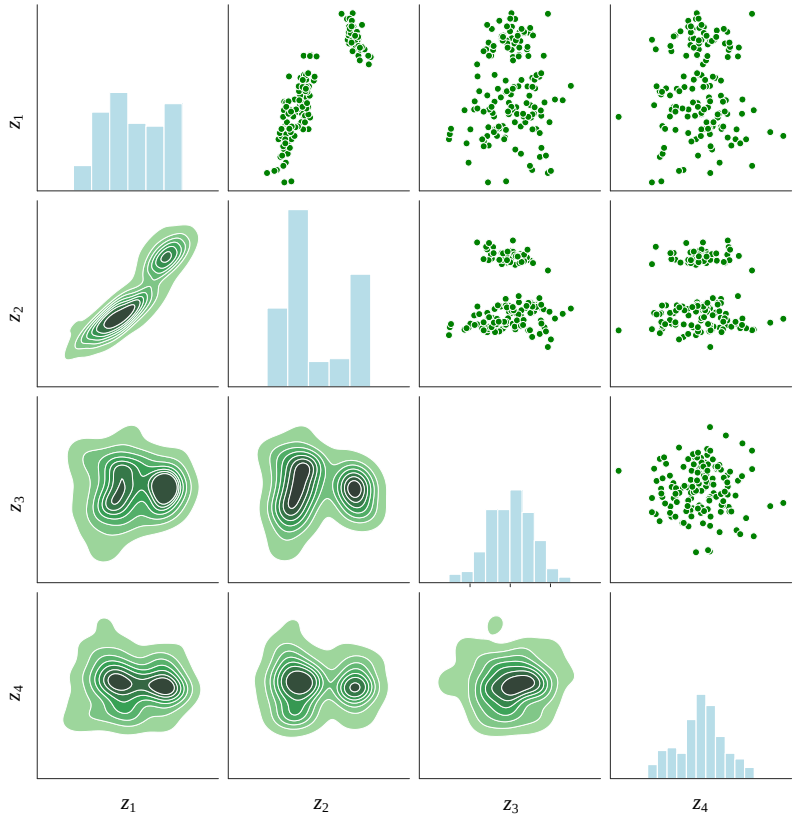


图 50. $\boldsymbol{Z}$ 成对特征分析图

两个格拉姆矩阵

如图 51 所示，$\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}$ 乘 $\boldsymbol{Z}$ 得到 $\boldsymbol{Z}$ 的格拉姆矩阵：

$$\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{z}_2^{\mathrm{T}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{z}_D^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_2 & \cdots & \boldsymbol{z}_D\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_2 & \cdots & \boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_D\\ \boldsymbol{z}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_2 & \cdots & \boldsymbol{z}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_D\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{z}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_2 & \cdots & \boldsymbol{z}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_D\end{bmatrix} \tag{58}$$

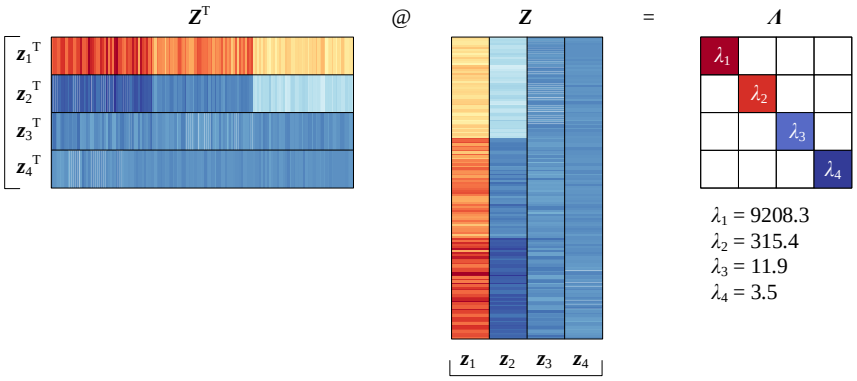


图 51. 矩阵 $\boldsymbol{Z}$ 的格拉姆矩阵

(58) 写成向量内积形式：

$$\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{z}_1\cdot\boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_1\cdot\boldsymbol{z}_2 & \cdots & \boldsymbol{z}_1\cdot\boldsymbol{z}_D\\ \boldsymbol{z}_2\cdot\boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_2\cdot\boldsymbol{z}_2 & \cdots & \boldsymbol{z}_2\cdot\boldsymbol{z}_D\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{z}_D\cdot\boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_D\cdot\boldsymbol{z}_2 & \cdots & \boldsymbol{z}_D\cdot\boldsymbol{z}_D\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{z}_1,\boldsymbol{z}_1\rangle & \langle\boldsymbol{z}_1,\boldsymbol{z}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{z}_1,\boldsymbol{z}_D\rangle\\ \langle\boldsymbol{z}_2,\boldsymbol{z}_1\rangle & \langle\boldsymbol{z}_2,\boldsymbol{z}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{z}_2,\boldsymbol{z}_D\rangle\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \langle\boldsymbol{z}_D,\boldsymbol{z}_1\rangle & \langle\boldsymbol{z}_D,\boldsymbol{z}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{z}_D,\boldsymbol{z}_D\rangle\end{bmatrix} \tag{59}$$

观察图 51，发现 $\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z}$ 恰好是对角方阵，即：

$$\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z}=\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_D\end{bmatrix}=\boldsymbol{\Lambda} \tag{60}$$

这说明，$\boldsymbol{Z}$ 的列向量两两正交，即：

$$\boldsymbol{z}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_j=\boldsymbol{z}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_i=\boldsymbol{z}_i\cdot\boldsymbol{z}_j=\boldsymbol{z}_j\cdot\boldsymbol{z}_i=\langle\boldsymbol{z}_i,\boldsymbol{z}_j\rangle=\langle\boldsymbol{z}_j,\boldsymbol{z}_i\rangle=0,\quad i\neq j \tag{61}$$

对比 $\boldsymbol{X}$ 的格拉姆矩阵：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_D \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 \cdot \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_1 \cdot \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_1 \cdot \boldsymbol{x}_D \\ \boldsymbol{x}_2 \cdot \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 \cdot \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_2 \cdot \boldsymbol{x}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{x}_D \cdot \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_D \cdot \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \cdot \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_D \rangle \\ \langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_D \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \boldsymbol{x}_D, \boldsymbol{x}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{x}_D, \boldsymbol{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{x}_D, \boldsymbol{x}_D \rangle \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{62}
$$

图 52 所示为计算矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的格拉姆矩阵的热图。请大家格外注意一点，图 52 中矩阵 $\boldsymbol{G}$ 的迹，即对角线元素之和，tr($\boldsymbol{G}$) = 9539.29。而图 51 中矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的迹和 $\boldsymbol{G}$ 的迹相同，tr($\boldsymbol{G}$) = tr($\boldsymbol{\Lambda}$) = 9539.29。本书后面还会反复提到这一点。

$\boldsymbol{V}$因 $\boldsymbol{X}$而生

细细想来，上一节介绍的 $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{XV}$ 的数据转换很神奇！

还是以鸢尾花数据为例，如图 52 所示，$\boldsymbol{G}$ 中没有一个元素为 0！$\boldsymbol{G}$ 主对角线元素代表 $\boldsymbol{X}$ 的列向量模的平方，$\boldsymbol{G}$ 主对角线以外元素代表 $\boldsymbol{X}$ 两个特定列向量的内积。

如图 51 所示，经过数据转换 $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{XV}$，矩阵 $\boldsymbol{Z}$ 的格拉姆矩阵为对角方阵 $\boldsymbol{\Lambda}$。$\boldsymbol{\Lambda}$ 的主对角线以外元素都为 0。也就是说，$i \neq j$ 时，$\boldsymbol{z}_i$ 和 $\boldsymbol{z}_j$ 都是行数为 150 的列向量，$\boldsymbol{z}_i$ 和 $\boldsymbol{z}_j$ 的向量内积竟然为 0。也就是说 150 个成对元素乘积之和为 0！这种情况在图 51 中竟然发生了 12 次，本质上发生了 6 次。

对于鸢尾花数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 来说，(53) 中给出的这个 $\boldsymbol{V}$ 真可谓“无数里挑一”！

换句话说，$\boldsymbol{V}$ 因 $\boldsymbol{X}$ 而生！

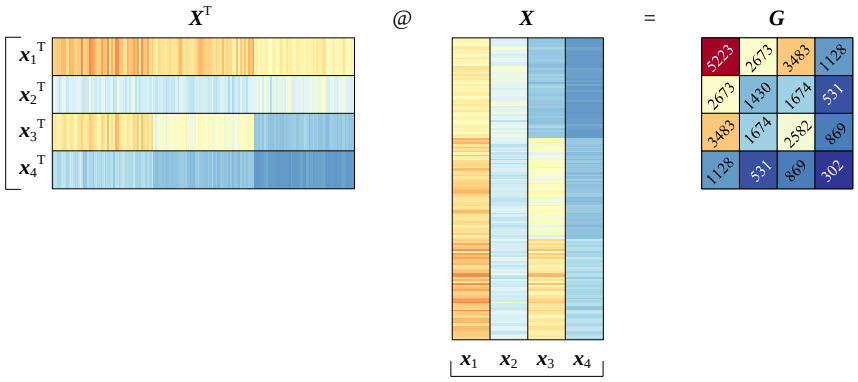


图 52. 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的格拉姆矩阵

⚠ 注意，统计视角下，矩阵 $\boldsymbol{Z}$ 的列向量两两内积为 0，不代表两两相关性系数为 0。本系列丛书《概率统计》将介绍如何通过正交投影获得两两相关性系数为 0 的数据矩阵。

对角化

将 $\boldsymbol{Z}=\boldsymbol{XV}$ 其代入 (60) 得到：

$$\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z}=\left(\boldsymbol{XV}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{XV}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\underbrace{\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}}_{\boldsymbol{G}}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{\Lambda} \tag{63}$$

再进一步，由于 $\boldsymbol{V}$ 为规范正交基，因此 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{I}$，根据 (63) 等式关系，$\boldsymbol{G}$ 可以写成：

$$\boldsymbol{G}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{64}$$

这就是说，如图 53 所示，$\boldsymbol{X}$ 的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 可以通过某种矩阵分解得到三个矩阵的乘积。其中，$\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵，$\boldsymbol{\Lambda}$ 为对角方阵。从 $\boldsymbol{G}$ 到 $\boldsymbol{\Lambda}$ 也是一个方阵**对角化** (diagonalization) 的过程。

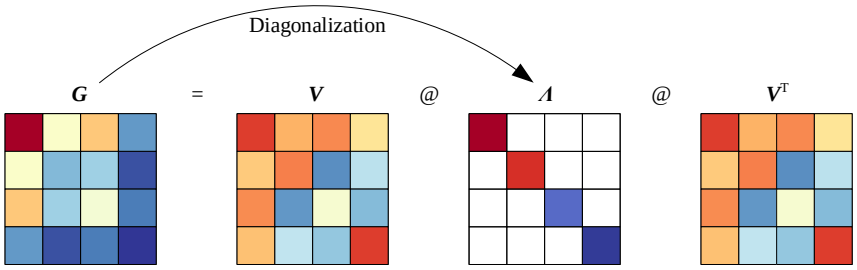


图 53. 对 $\boldsymbol{G}$ 矩阵分解

为了获得 (64)，就需要本书下一个板块要介绍的重要线性代数工具——特征值分解 (eigen decomposition)。

回看规范正交基 $\boldsymbol{V}$：双标图

像 $\boldsymbol{Z}$ 这样具有这种**正交性** (orthogonality) 的数据应用场合很多，因此我们再深究一步。

类似 (54)，我们可以把 $\boldsymbol{z}_1$、$\boldsymbol{z}_2$、$\boldsymbol{z}_3$、$\boldsymbol{z}_4$ 写成如下线性组合：

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{z}_1 &= \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1 = 0.751\boldsymbol{x}_1 + 0.380\boldsymbol{x}_2 + 0.513\boldsymbol{x}_3 + 0.168\boldsymbol{x}_4 \\
\boldsymbol{z}_2 &= \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2 = 0.284\boldsymbol{x}_1 + 0.547\boldsymbol{x}_2 - 0.709\boldsymbol{x}_3 - 0.344\boldsymbol{x}_4 \\
\boldsymbol{z}_3 &= \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_3 = 0.502\boldsymbol{x}_1 - 0.675\boldsymbol{x}_2 - 0.059\boldsymbol{x}_3 - 0.537\boldsymbol{x}_4 \\
\boldsymbol{z}_4 &= \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_4 = 0.321\boldsymbol{x}_1 - 0.317\boldsymbol{x}_2 - 0.481\boldsymbol{x}_3 + 0.752\boldsymbol{x}_4 \\
\boldsymbol{V} &= \begin{bmatrix} 0.751 & 0.284 & 0.502 & 0.321 \\ 0.380 & 0.547 & -0.675 & -0.317 \\ 0.513 & -0.709 & -0.059 & -0.481 \\ 0.168 & -0.344 & -0.537 & 0.752 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{65}$$

请大家格外注意 (65) 各个元素颜色对应关系。

我们给 $\boldsymbol{z}_1$、$\boldsymbol{z}_2$、$\boldsymbol{z}_3$、$\boldsymbol{z}_4$ 取一个新的名字——**主成分** (Principal Component, PC)。$\boldsymbol{z}_1$、$\boldsymbol{z}_2$、$\boldsymbol{z}_3$、$\boldsymbol{z}_4$ 分别对应 PC_1、PC_2、PC_3、PC_4。显然 PC_1、PC_2、PC_3、PC_4 相互垂直。

有了 PC_1、PC_2、PC_3、PC_4，我们可以绘制图 54 这幅图，图中有 6 幅子图，每幅子图都是一个**双标图** (biplot)。

我们以图 54 中浅蓝色阴影背景子图为例介绍如何理解双标图。

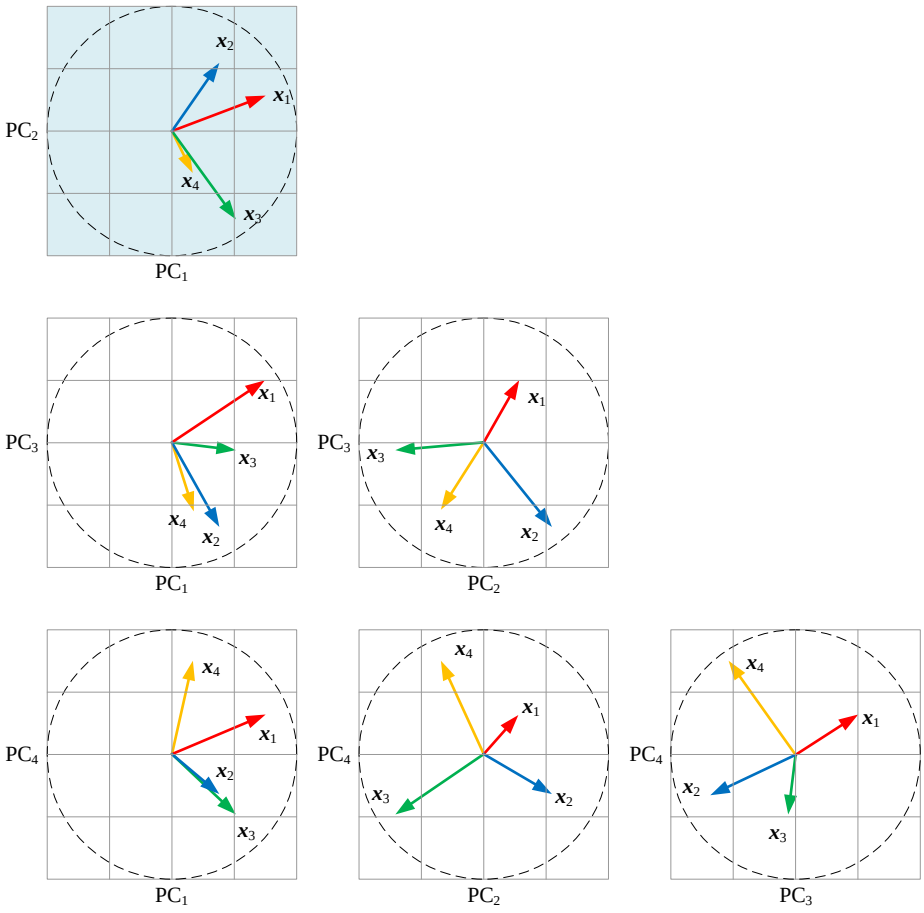


图 54. 分解主成分

在 PC_1-PC_2 平面上，$\boldsymbol{x}_1$ 对应坐标点为 (0.751, 0.284)，这意味着 $\boldsymbol{x}_1$ 分别给 $\boldsymbol{z}_1$ 和 $\boldsymbol{z}_2$ 贡献 $0.751\boldsymbol{x}_1$ 和 $0.284\boldsymbol{x}_1$。同理，我们可以发现 $\boldsymbol{x}_2$ 分别给 $\boldsymbol{z}_1$ 和 $\boldsymbol{z}_2$ 贡献 $0.380\boldsymbol{x}_2$ 和 $0.547\boldsymbol{x}_2$。以此类推。

反向来看，$\boldsymbol{x}_1$ 在 PC_1、PC_2、PC_3、PC_4 方向上的分量分别为 $0.751\boldsymbol{x}_1$、$0.284\boldsymbol{x}_1$、$0.502\boldsymbol{x}_1$、$0.321\boldsymbol{x}_1$，这四个成分满足：

$$0.751^2 + 0.284^2 + 0.502^2 + 0.321^2 = 1 \tag{66}$$

反向正交投影

由于 $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{XV}$，且正交矩阵 $\boldsymbol{V}$ 可逆，$\boldsymbol{X}$ 则可以通过 $\boldsymbol{Z}$ 反推得到，即：

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Z}\boldsymbol{V}^{-1} = \boldsymbol{Z}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{67}$$

图 55 所示为 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{Z}$ 相互转化的关系。这幅图告诉我们另外一个重要性质——$\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 都是规范正交基！

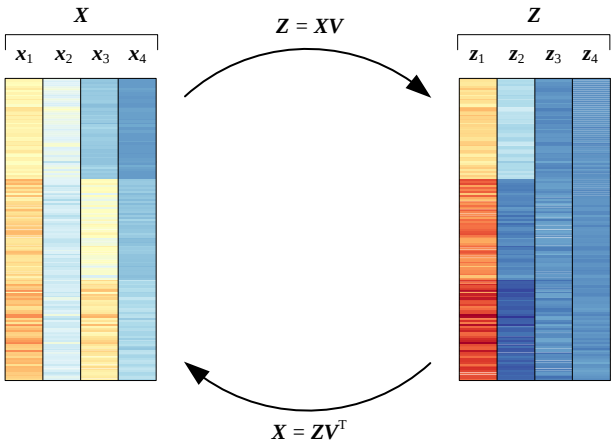


图 55. $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{Z}$ 之间关系

将 (67) 展开写：

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Z}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{Z}\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}^{(1)} \\ \boldsymbol{v}^{(2)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}^{(D)} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{Z}\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}^{(1)\mathrm{T}} & \boldsymbol{v}^{(2)\mathrm{T}} & \cdots & \boldsymbol{v}^{(D)\mathrm{T}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{Z}\boldsymbol{v}^{(1)\mathrm{T}} & \boldsymbol{Z}\boldsymbol{v}^{(2)\mathrm{T}} & \cdots & \boldsymbol{Z}\boldsymbol{v}^{(D)\mathrm{T}} \end{bmatrix} \tag{68}$$

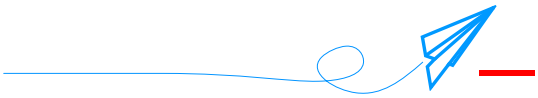
$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = [\boldsymbol{v}^{(1)\mathrm{T}}, \boldsymbol{v}^{(2)\mathrm{T}}, \ldots, \boldsymbol{v}^{(j)\mathrm{T}}]$ 也是一个规范正交基。上式代表“反向”正交投影的过程。

取出 (68) 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 第 j 列对应的等式：

$$\boldsymbol{x}_j = \boldsymbol{Z}\boldsymbol{v}^{(j)\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_2 & \cdots & \boldsymbol{z}_D \end{bmatrix}\begin{bmatrix} v_{j,1} \\ v_{j,2} \\ \vdots \\ v_{j,D} \end{bmatrix} = v_{j,1}\boldsymbol{z}_1 + v_{j,2}\boldsymbol{z}_2 + \cdots + v_{j,D}\boldsymbol{z}_D \tag{69}$$

(69) 这一视角在主成分分析中非常重要，我们将会在《数据科学》一书中深入探讨。

本书第 1 章用 Streamlit 制作了一个 App，我们利用 Plotly 可视化鸢尾花数据集的热图、平面散点图、三维散点图、成对特征散点图。本章“照葫芦画瓢”照搬这个 App，采用完全一致的图像可视化转换得到的数据矩阵 $\boldsymbol{Z}$。请大家参考 Streamlit_Bk4_Ch10_01.py。



本章是个分水岭。如果本章前两节内容，你读起来毫无压力，恭喜你，你可以顺利进入本书下一个板块——矩阵分解——的学习。阅读本章时，如果感觉很吃力，请回头重读前 9 章内容。

大家可能会好奇，本章中神奇的 $\boldsymbol{V}$ 是怎么算出来的？其实本章代码文件已经给出了答案——特征值分解。这是本书下一个板块要讲的重要内容之一。

有数据的地方，就有矩阵！有矩阵的地方，就有向量！有向量的地方，就有几何！

再加一句，有向量的地方，肯定有空间！

请大家带着这四句话，进入本书下一阶段的学习。

11 Matrix Decompositions
矩阵分解

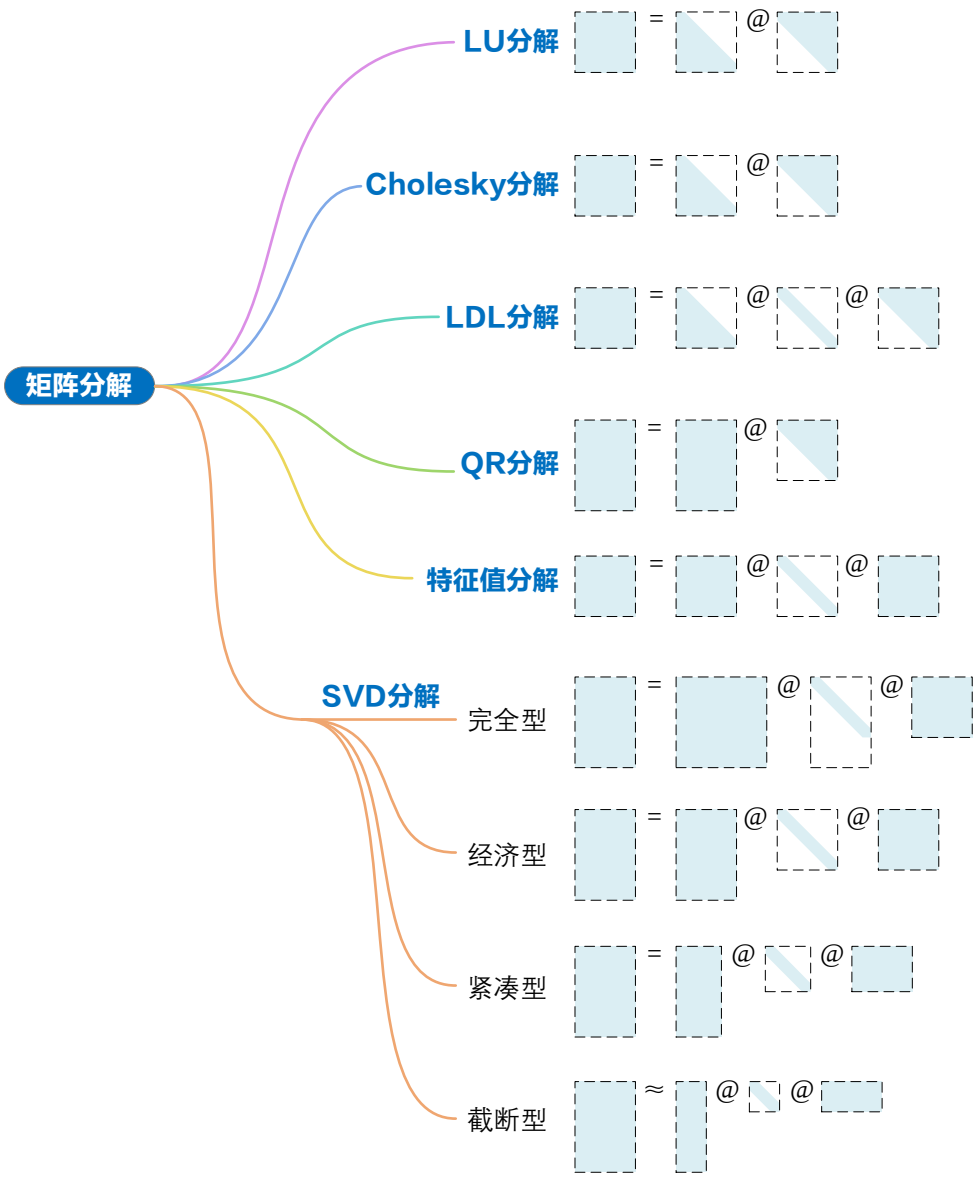
类似代数中的因式分解

宇宙是一部鸿篇巨制，只有掌握它的文字和语言的人才能读懂宇宙；而数学便是解密宇宙的语言。

The universe is a grand book which cannot be read until one first learns to comprehend the language and become familiar with the characters in which it is composed. It is written in the language of mathematics.

—— 伽利略·伽利莱 (Galilei Galileo) | 意大利物理学家、数学家及哲学家 | 1564 ~ 1642

- `matplotlib.pyplot.contour()` 绘制等高线图
- `matplotlib.pyplot.contourf()` 绘制填充等高线图
- `numpy.linalg.cholesky()` Cholesky 分解
- `numpy.linalg.eig()` 特征值分解
- `numpy.linalg.qr()` QR 分解
- `numpy.linalg.svd()` 奇异值分解
- `numpy.meshgrid()` 生成网格化数据
- `scipy.linalg.ldl()` LDL 分解
- `scipy.linalg.lu()` LU 分解
- `seaborn.heatmap()` 绘制热图



11.1 矩阵分解：类似因式分解

矩阵分解 (matrix decomposition) 将矩阵解构得到其组成部分，类似代数中的因式分解。

从矩阵乘法角度，矩阵分解将矩阵拆解为若干矩阵的乘积。

从几何角度，矩阵分解结果可能对应缩放、旋转、投影、剪切等等各种几何变换。而原矩阵的映射作用就是这些几何变换按特定次序的叠加。

数据科学和机器学习很多算法都直接依赖矩阵分解。本章全景介绍以下几种矩阵分解：

- **LU 分解** (lower–upper decomposition, LU decomposition)；
- **Cholesky 分解** (Cholesky decomposition, Cholesky factorization)；
- **LDL 分解** (lower-diagonal-lower transposed decomposition, LDL/LDLT decomposition)；
- **QR 分解** (QR decomposition) 本质上就是本书前文介绍的 Gram-Schmidt 正交化；
- **特征值分解** (eigendecomposition)；
- **SVD 分解** (singular value decomposition)。

本章偶尔会出现“手算”矩阵分解的情况，这仅仅是为了演示在没有计算机辅助的情况下如何进行特定矩阵分解。注意，本书完全不要求大家掌握矩阵分解“手算”技巧！

此外，仅仅会调用 Numpy 库中函数完成矩阵分解也是远远不够的。

我们需要掌握的是各种不同分解背后的数学思想，更要掌握如何从数据、空间、几何、优化、统计等角度理解这些矩阵分解，并且清楚它们之间的关系、局限性、应用场合。

在数据分析和机器学习很多算法中，Cholesky 分解、特征值分解和 SVD 分解应用较多，本书此后第 12 ~ 16 章将专门讲解这三种矩阵分解。

11.2 LU 分解：上下三角

一说，**LU 分解** (lower–upper decomposition, LU decomposition) 由图灵 (Alan Turing) 于 1948 年发明；另一说，波兰数学家 Tadeusz Banachiewicz 于 1938 年发明 LU 分解。

LU 分解将一个方阵 $\boldsymbol{A}$，分解为一个**下三角矩阵** (lower triangular matrix) $\boldsymbol{L}$ 和一个**上三角矩阵** (upper triangular matrix) $\boldsymbol{U}$ 的乘积，即，

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U} \tag{1}$$

(1) 展开来写：

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,m} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \dots & a_{2,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1} & a_{m,2} & \dots & a_{m,m} \end{bmatrix}_{m\times m} = \begin{bmatrix} l_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{2,1} & l_{2,2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{m,1} & l_{m,2} & \cdots & l_{m,m} \end{bmatrix}_{m\times m} \begin{bmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & \cdots & u_{1,m} \\ 0 & u_{2,2} & \cdots & u_{2,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{m,m} \end{bmatrix}_{m\times m} \tag{2}$$

图 1 所示为 LU 分解对应的矩阵运算示意图。LU 分解可以视为**高斯消元法** (Gaussian elimination) 的矩阵乘法形式。

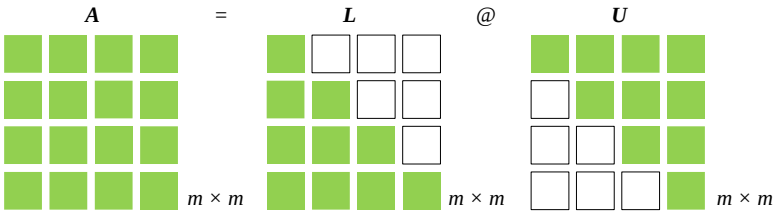


图 1. LU 分解

本书常用 `scipy.linalg.lu()` 函数进行 LU 分解。注意，`scipy.linalg.lu()` 默认进行 PLU 分解，即，

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{PLU} \tag{3}$$

其中，$\boldsymbol{P}$ 为**置换矩阵** (permutation matrix)。`scipy.linalg.lu()` 函数得到的矩阵 $\boldsymbol{L}$ 主对角线均为 1。

前文介绍过，置换矩阵的任意一行或列只有一个 1，剩余均为 0。置换矩阵的作用是交换矩阵的行、列。

⚠ 注意，本书中默认置换矩阵为方阵。置换矩阵的逆还是置换矩阵，置换矩阵必定是正交矩阵。

图 2 所示为对方阵 $\boldsymbol{A}$ 进行 PLU 分解运算热图。注意，所有的方阵都可以进行 PLU 分解。

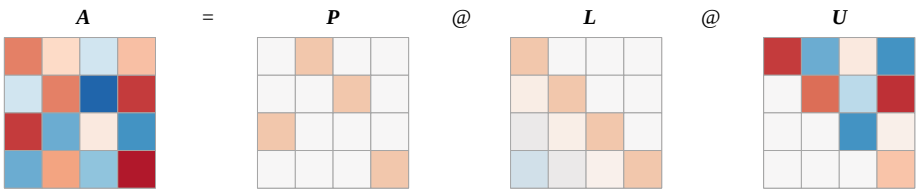
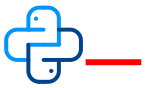


图 2. 对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 PLU 分解热图

PLU 分解有很高的数值稳定性。举个例子，如果 (1) 中矩阵 $\boldsymbol{A}$ 中有一个元素的数值特别小，LU 分解后，得到的 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 矩阵会出现数值很大的数。为了避免这种情况，如 (3) 所示，通过一个置换矩阵 $\boldsymbol{P}$，先对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 进行变换，然后再进行 LU 分解。



Bk4_Ch11_01.py 绘制图 2。

11.3 Cholesky 分解：适用于正定矩阵

Cholesky 分解 (Cholesky decomposition) 是 LU 分解的特例。丛书在讲解**协方差矩阵** (covariance matrix)、数据转换、蒙特卡洛模拟等内容都会使用 Cholesky 分解。

Cholesky 分解把矩阵分解为一个下三角矩阵以及它的转置矩阵的乘积：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}} \tag{4}$$

也就是说：

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,m} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1} & a_{m,2} & \cdots & a_{m,m} \end{bmatrix}_{m\times m} = \begin{bmatrix} l_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{2,1} & l_{2,2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{m,1} & l_{m,2} & \cdots & l_{m,m} \end{bmatrix}_{m\times m} \begin{bmatrix} l_{1,1} & l_{2,1} & \cdots & l_{m,1} \\ 0 & l_{2,2} & \cdots & l_{m,2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & l_{m,m} \end{bmatrix}_{m\times m} \tag{5}$$

当然，利用上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$，Cholesky 分解也可以写成：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R} \tag{6}$$

其中，$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$。

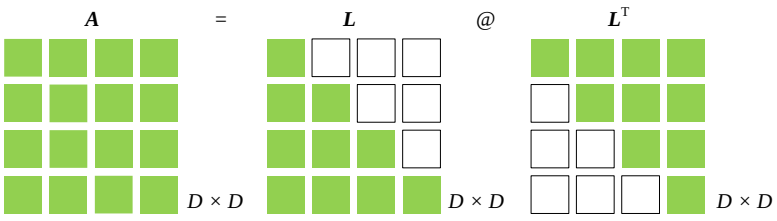


图 3. Cholesky 分解矩阵运算

Numpy 中进行 Cholesky 分解的函数为 `numpy.linalg.cholesky()`。请读者自行编写代码并绘制图 4。

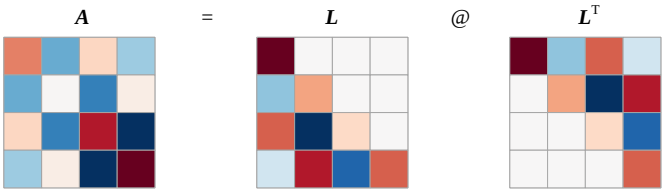


图 4. Cholesky 分解示例

⚠ 注意，只有正定矩阵 (positive definite matrix) 才能 Cholesky 分解。下一章将简单地介绍正定性及其几何内涵。本书第 21 章将专门讲解正定性。

LDL 分解：Cholesky 分解的扩展

Cholesky 分解可以进一步扩展为 **LDL 分解** (LDL decomposition)：

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{1/2}\left(\boldsymbol{D}^{1/2}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{1/2}\left(\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{1/2}\right)^{\mathrm{T}} \tag{7}$$

其中，$\boldsymbol{L}$ 为下三角矩阵，但是对角线元素均为 1；$\boldsymbol{D}$ 为对角矩阵，起到缩放作用；几何角度来看，$\boldsymbol{L}$ 的作用就是“剪切”。也就是说，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 被分解成“剪切 → 缩放 → 剪切”。

(7) 展开来写：

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,m} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1} & a_{m,2} & \cdots & a_{m,m} \end{bmatrix}_{m\times m} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{2,1} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{m,1} & l_{m,2} & \cdots & 1 \end{bmatrix}_{m\times m} \begin{bmatrix} d_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_{2,2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_{m,m} \end{bmatrix}_{m\times m} \begin{bmatrix} 1 & l_{2,1} & \cdots & l_{m,1} \\ 0 & 1 & \cdots & l_{m,2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}_{m\times m} \tag{8}$$

图 5 所示为 LDL 分解矩阵运算示意图。

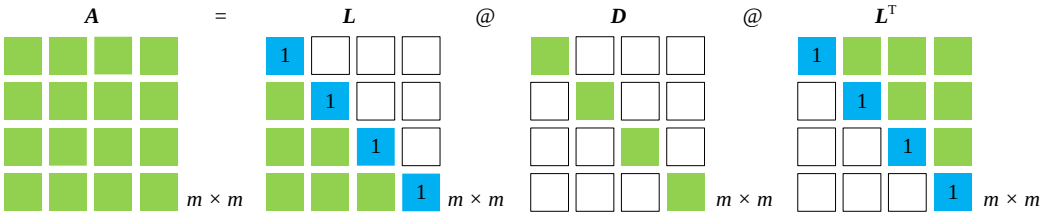


图 5. LDL 分解矩阵运算示意图

LDL 分解的函数为 `scipy.linalg.ldl()`，注意这个函数的返回结果也包括置换矩阵。图 6 所示为 LDL 分解运算热图。请读者根据前文代码自行绘制图 6。

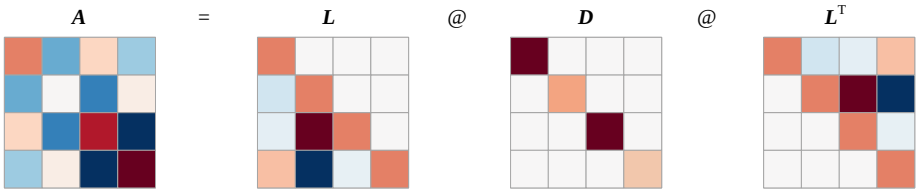


图 6. LDL 分解示例热图

11.4 QR 分解：正交化

QR 分解 (QR decomposition, QR factorization) 和本书第 9 章介绍的格拉姆-斯密特正交化联系紧密。QR 分解有两种常见形式：

- **完全型** (complete)，$\boldsymbol{Q}$ 为方阵；
- **缩略型** (reduced)，$\boldsymbol{Q}$ 和原矩阵形状相同。

图 7 所示为形状对 $n \times D$ 数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 进行完全型 QR 分解示意图，对应的等式为：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D} = \boldsymbol{Q}_{n\times n}\boldsymbol{R}_{n\times D} \tag{9}$$

其中，$\boldsymbol{Q}$ 为方阵，形状为 $n \times n$；$\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{X}$ 形状一致，形状为 $n \times D$。

⚠ 注意，任何实数矩阵都可以 QR 分解。

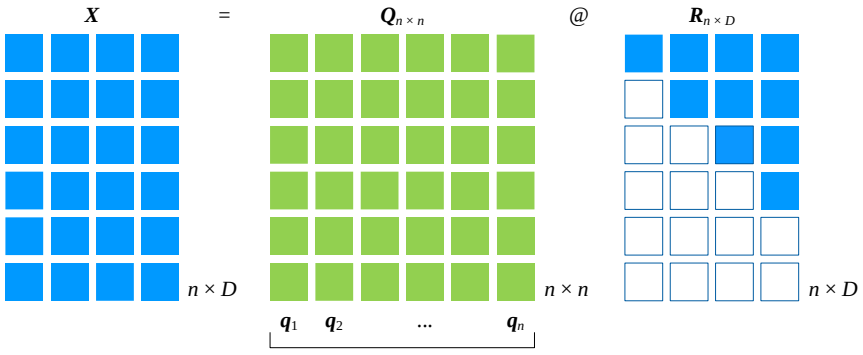


图 7. 完全型 QR 分解示意图

图 8 所示为对某个细高数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 进行完全型 QR 分解运算热图。

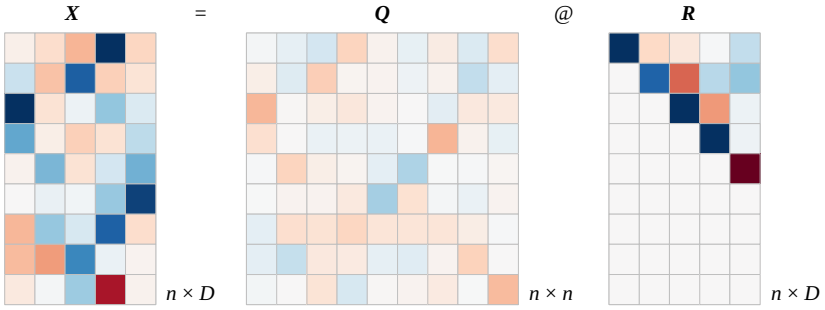


图 8. 完全型 QR 分解热图

方阵 $\boldsymbol{Q}$ 为正交矩阵，也就是说：

$$\boldsymbol{Q}_{n\times n}\boldsymbol{Q}_{n\times n}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{Q}_{n\times n}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{n\times n}=\boldsymbol{I}_{n\times n} \tag{10}$$

图 9 所示为 (10) 运算对应热图。根据本书前文介绍的有关正交矩阵的性质，$\boldsymbol{Q}=[\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\ldots,\boldsymbol{q}_n]$ 是一个规范正交基，张起的向量空间为 $\mathbb{R}^n$。

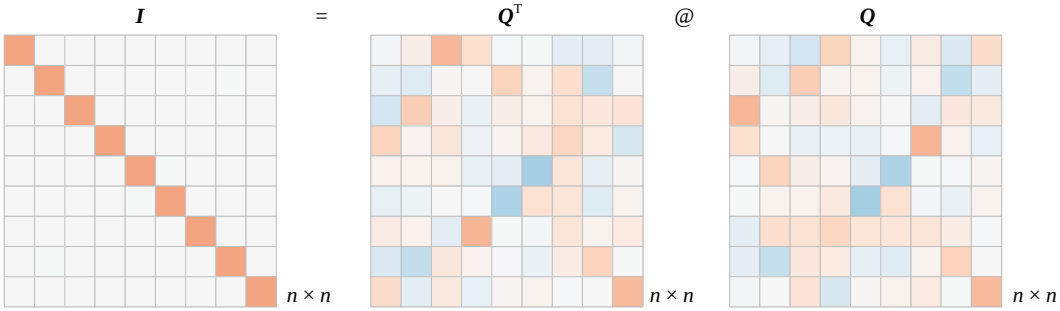


图 9. $\boldsymbol{Q}$ 为正交矩阵

把 $\boldsymbol{Q}$ 展开写成 $[\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\ldots,\boldsymbol{q}_n]$，$\boldsymbol{X}$ 的第一列向量 $\boldsymbol{x}_1$ 可以通过下式得到：

$$\boldsymbol{x}_1=\begin{bmatrix}\boldsymbol{q}_1 & \boldsymbol{q}_2 & \cdots & \boldsymbol{q}_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}r_{1,1}\\ r_{2,1}\\ \vdots\\ r_{n,1}\end{bmatrix}=r_{1,1}\boldsymbol{q}_1+\underbrace{r_{2,1}\boldsymbol{q}_2+\cdots}_{=0}\underbrace{r_{n,1}\boldsymbol{q}_n}_{=0}=r_{1,1}\boldsymbol{q}_1 \tag{11}$$

上式相当于 $\boldsymbol{x}_1$ 在规范正交基 $[\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\ldots,\boldsymbol{q}_n]$ 张成的空间坐标为 $(r_{1,1},r_{2,1},\ldots,r_{n,1})$，即 $(r_{1,1},0,\ldots,0)$。也就是说，$\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{q}_1$ 平行，方向同向或反向。这和本书第 9 章介绍的格拉姆-施密特正交化第一步一致。

$\boldsymbol{q}_1$ 是单位向量，也就是说：

$$r_{1,1}=\pm\left\|\boldsymbol{x}_1\right\| \tag{12}$$

这一点已经说明 QR 分解结果不唯一。但是，如果 $\boldsymbol{X}$ 列满秩，且 $\boldsymbol{R}$ 的对角元素为正实数的情况下 QR 分解唯一。

类似地，$\boldsymbol{X}$ 的第二列向量 $\boldsymbol{x}_2$ 写成：

$$\boldsymbol{x}_2 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{q}_1 & \boldsymbol{q}_2 & \cdots & \boldsymbol{q}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{1,2} \\ r_{2,2} \\ \vdots \\ r_{n,2} \end{bmatrix} = r_{1,2}\boldsymbol{q}_1 + r_{2,2}\boldsymbol{q}_2 + \underbrace{r_{3,2}}_{=0}\boldsymbol{q}_3 + \cdots \underbrace{r_{n,2}}_{=0}\boldsymbol{q}_n = r_{1,2}\boldsymbol{q}_1 + r_{2,2}\boldsymbol{q}_2 \tag{13}$$

$\boldsymbol{x}_2$ 在规范正交基 $[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_n]$ 张成的空间坐标为 $(r_{1,2}, r_{2,2}, r_{3,2}, \ldots, r_{n,1})$，即 $(r_{1,2}, r_{2,2}, 0, \ldots, 0)$。

缩略型

图 7 对应的完全型 QR 分解可以进一步简化。将 (9) 中 $\boldsymbol{R}$ 上下切一刀，让上方子块为方阵，下方子块为零矩阵 $\boldsymbol{O}$。这样 (9) 可以写成分块矩阵乘法：

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{Q}_{n\times D} & \boldsymbol{Q}_{n\times(n-D)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{R}_{D\times D} \\ \boldsymbol{O}_{(n-D)\times D} \end{bmatrix} = \boldsymbol{Q}_{n\times D}\boldsymbol{R}_{D\times D} + \boldsymbol{Q}_{n\times(n-D)}\boldsymbol{O}_{(n-D)\times D} = \boldsymbol{Q}_{n\times D}\boldsymbol{R}_{D\times D} \tag{14}$$

其中，$\boldsymbol{Q}_{n\times D}$ 和 $\boldsymbol{X}$ 矩阵形状相同，而 $\boldsymbol{R}_{D\times D}$ 为上三角方阵。注意，上式中零矩阵 $\boldsymbol{O}$ 的形状为 $(n-D)\times D$，其所有元素均为 0。

图 10 所示为 QR 分解从完全型到缩略型简化过程。

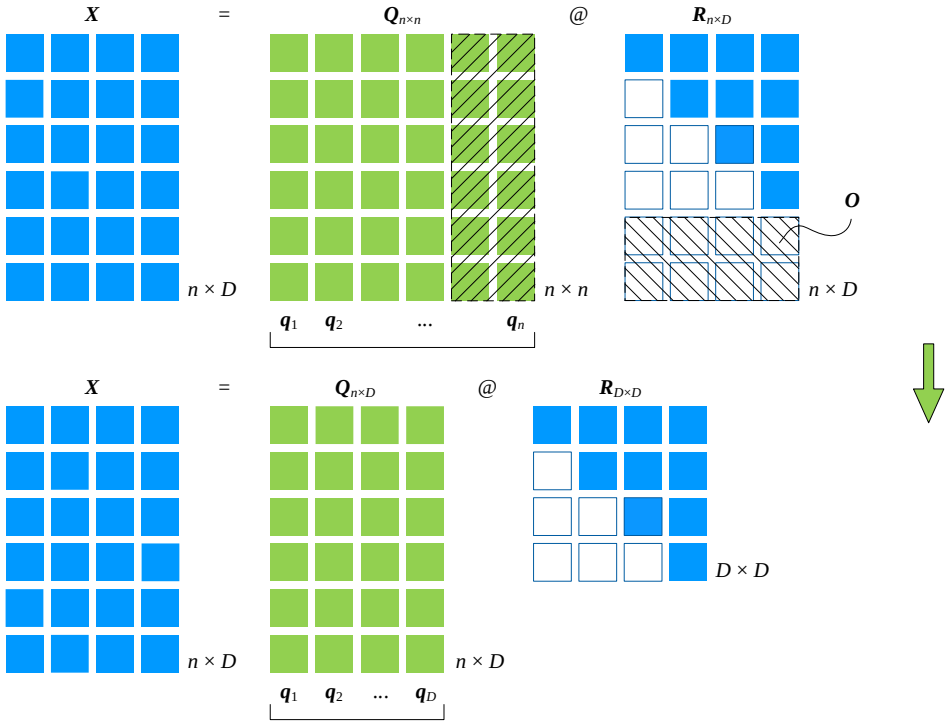


图 10. QR 分解从完全型到缩略型简化过程

图 11 所示为对矩阵 $\boldsymbol{X}$ 进行缩略型 QR 分解运算热图。

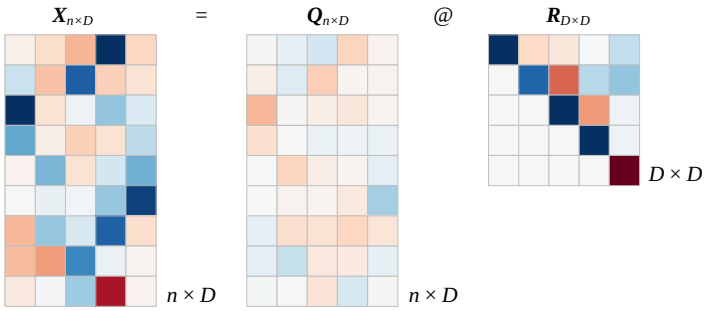


图 11. 缩略型 QR 分解热图

列向量两两正交

虽然 (14) 中矩阵 $\boldsymbol{Q}_{n\times D}$ 不是一个方阵，但列向量也两两正交，因为，

$$\left(\boldsymbol{Q}_{n\times D}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{n\times D}=\boldsymbol{I}_{D\times D} \tag{15}$$

注意，$\boldsymbol{Q}_{n\times D}$ 不再是正交矩阵。正交矩阵的前提是矩阵为方阵。

把 $\boldsymbol{Q}$ 展开写成 $[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_D]$，代入上式得到：

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{q}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{q}_2^{\mathrm{T}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{q}_D^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{q}_1 & \boldsymbol{q}_2 & \cdots & \boldsymbol{q}_D\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}_1 & \boldsymbol{q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}_2 & \cdots & \boldsymbol{q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}_D\\ \boldsymbol{q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}_1 & \boldsymbol{q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}_2 & \cdots & \boldsymbol{q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}_D\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{q}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}_1 & \boldsymbol{q}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}_2 & \cdots & \boldsymbol{q}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}_D\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 1 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & 1\end{bmatrix}_{D\times D} \tag{16}$$

其中，$\boldsymbol{q}_j$ 向量为 n 行。图 12 所示为 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}$ 运算对应的热图。

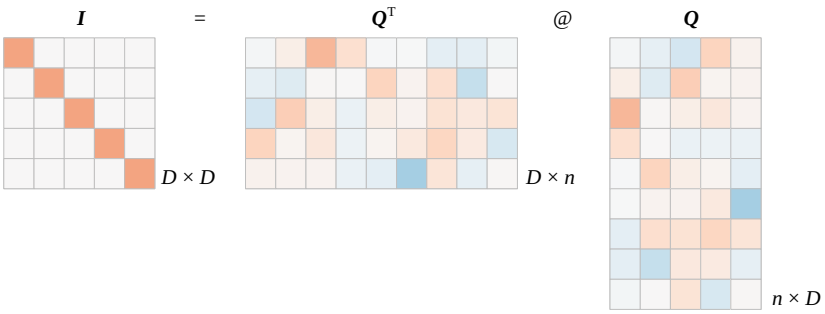


图 12. $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}$ 运算对应的热图

几何视角

从几何角度来看，如图 13 所示，QR 分解完成对数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的正交化。$\boldsymbol{X}$ 的列向量 $[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D]$ 可能并非两两正交，经过 QR 分解得到的 $[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_D]$ 两两正交，且每个向量为单位向量。

$[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_D]$ 是一个规范正交基。$[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_D]$ 的重要特点是 $\boldsymbol{q}_1$ 平行于 $\boldsymbol{x}_1$，通过逐步正交投影得到 $\boldsymbol{q}_j$ $(j = 2, 3, \ldots, D)$。

当然，对数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的正交化方法并不唯一，不同正交化方法得到的规范正交基也不同。本书后面还会介绍其他正交化方法，请大家注意区分结果的差异以及应用场合。

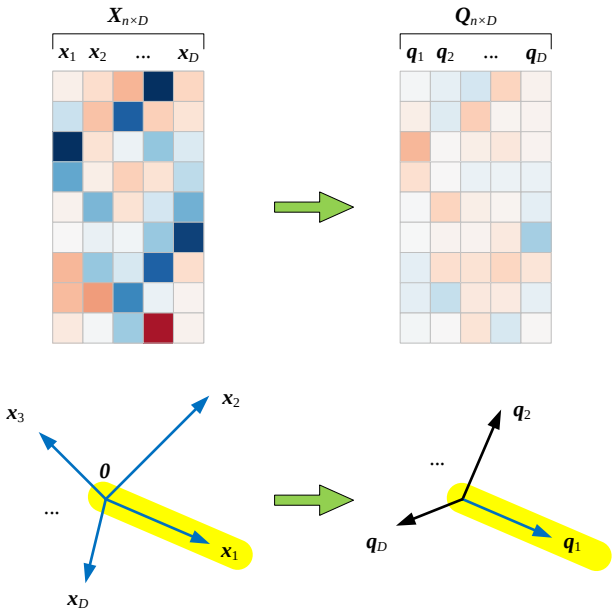


图 13. QR 分解背后的几何意义

Bk4_Ch11_02.py 绘制本节热图。

11.5 特征值分解：刻画矩阵映射的特征

枯燥的定义

对于方阵 $\boldsymbol{A}$，如果存在**非零向量** (non-zero vector) $\boldsymbol{v}$ 使得：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v} \tag{17}$$

$\boldsymbol{v}$ 就是的 $\boldsymbol{A}$ 的**特征向量** (eigen vector)，标量 λ 被称作**特征值** (eigen value)。特征向量 $\boldsymbol{v}$ 代表方向，通常是列向量；特征值 λ 是在这个方向上的比例，特征值是标量。

(17) 可以写作：

$$\left(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{I}\right)\boldsymbol{v} = 0 \tag{18}$$

其中，$\boldsymbol{I}$ 是**单位阵** (identity matrix)。

并不是所有方阵都可以特征值分解，只有**可对角化矩阵** (diagonalizable matrix) 才能进行特征值分解。如果一个方阵 $\boldsymbol{A}$ 相似于对角矩阵，也就是说，如果存在一个可逆矩阵 $\boldsymbol{V}$ 使得矩阵乘积 $\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}$ 结果为对角矩阵，则 $\boldsymbol{A}$ 就被称为**可对角化** (diagonalizable)。大家是否还记得，本书前文讲解几何变换时提到，我们更喜欢看到对角阵，因为几何角度来看对角阵代表“立方体”。

二维方阵

假设某个二维方阵 $\boldsymbol{A}$，有两个特征值和特征向量：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 &= \lambda_1\boldsymbol{v}_1 \\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 &= \lambda_2\boldsymbol{v}_2\end{aligned} \tag{19}$$

两个特征向量可以构成矩阵 $\boldsymbol{V}$，用两个特征值构造对角阵 $\boldsymbol{\Lambda}$，上式可以写成：

$$\boldsymbol{A}\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}} = \underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}}\underbrace{\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Lambda}} \tag{20}$$

即，

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda} \tag{21}$$

(21) 可以进一步写成：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{22}$$

上式就叫做矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**特征分解** (eigen-decomposition)。$\boldsymbol{\Lambda}$ 被称作特征值矩阵，$\boldsymbol{V}$ 被称作特征向量矩阵。

多维方阵

对于 $D \times D$ 方阵 $\boldsymbol{A}$，如果存在如下一系列等式：

$$\begin{cases} \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 = \lambda_1 \boldsymbol{v}_1 \\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 = \lambda_2 \boldsymbol{v}_2 \\ \quad \vdots \\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_D = \lambda_D \boldsymbol{v}_D \end{cases} \tag{23}$$

整理上式得到：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 \boldsymbol{v}_1 & \lambda_2 \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \lambda_D \boldsymbol{v}_D \end{bmatrix} \tag{24}$$

即，

$$\boldsymbol{A}\underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}} \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Lambda}} \tag{25}$$

特征多项式

方阵 $\boldsymbol{A}$ **特征多项式** (characteristic polynomial) 可以这样获得：

$$p(\lambda) = |\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}| \tag{26}$$

$\boldsymbol{A}$ 的**特征方程** (characteristic equation) 为：

$$|\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}| = 0 \tag{27}$$

特征方程可以用来求解矩阵的特征值，从而进一步求解对应的特征向量。

手算特征值分解

给定如下矩阵 $\boldsymbol{A}$：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1.25 & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 \end{bmatrix} \tag{28}$$

方阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征方程为：

$$\begin{aligned} p(\lambda) = |\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}| &= \begin{vmatrix} 1.25 - \lambda & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 - \lambda \end{vmatrix} \\ &= \lambda^2 - 2.5\lambda + 1 = (\lambda - 2)(\lambda - 0.5) = 0 \end{aligned} \tag{29}$$

求解 (29) 所示一元二次方程，得到 $p(\lambda)$ 的两个根分别为：

$$\lambda_1 = 0.5, \quad \lambda_2 = 2 \tag{30}$$

对于 $\lambda_1 = 0.5$，

$$(\boldsymbol{A}-\lambda_1\boldsymbol{I})\boldsymbol{v}_1 = \left\{\begin{bmatrix} 1.25 & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}\right\}\begin{bmatrix} v_{1,1} \\ v_{2,1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{31}$$

得到如下等式：

$$v_{1,1} - v_{2,1} = 0 \tag{32}$$

满足如上等式的向量都是特征向量，选择第一象限的单位向量为特征向量 $\boldsymbol{v}_1$

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \tag{33}$$

这一步可以看出特征向量不唯一。本书中，特征向量一般都是单位向量，除非特殊说明。

对于 $\lambda_2 = 2$，

$$(\boldsymbol{A}-\lambda_2\boldsymbol{I})\boldsymbol{v}_2 = \left\{\begin{bmatrix} 1.25 & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}\right\}\begin{bmatrix} v_{1,2} \\ v_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{34}$$

得到如下等式：

$$v_{1,2} + v_{2,2} = 0 \tag{35}$$

同样，满足如上等式的向量都是特征向量，选择第二象限的单位向量为特征向量 $\boldsymbol{v}_2$

$$\boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \tag{36}$$

图 14 所示为候选特征向量之间关系。

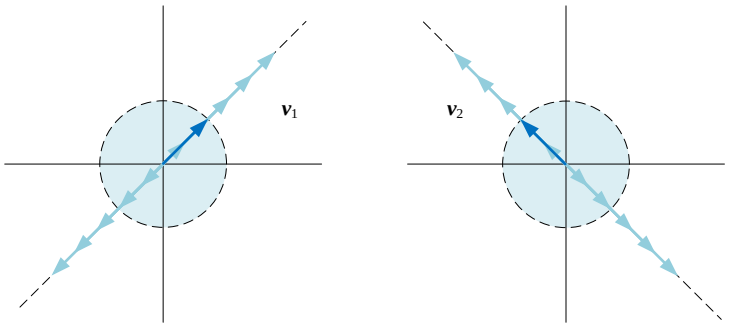


图 14. 候选特征向量

这样我们可以得到特征向量矩阵 $\boldsymbol{V}$：

$$\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \tag{37}$$

$\boldsymbol{V}$ 的逆为：

$$\boldsymbol{V}^{-1}=\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix} \tag{38}$$

大家可能已经发现：

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{V}^{-1} \tag{39}$$

这是因为 (28) 中 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵。

对称矩阵

对称矩阵的特征值分解又叫**谱分解** (spectral decomposition)。如果 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵，则 (22) 可以写作：

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{40}$$

$\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵，即满足：

$$\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I} \tag{41}$$

谱分解是特征值分解的一种特殊情况，本书第 13 章会专门介绍。

几何视角

对于一个细高的长方形实数矩阵 $\boldsymbol{X}$ 来说，它本身肯定不能进行特征值分解。但是，它的两个格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 都是对称阵！如图 15 所示，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 都可以进行特征值分解，而且分解得到的特征向量矩阵 $\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 都是正交矩阵。

$\boldsymbol{V}=[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 张起的向量空间为 $\mathbb{R}^D$。$\boldsymbol{U}=[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$ 张起的向量空间为 $\mathbb{R}^n$。之所以用 $\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 分别表达特征向量矩阵，是为了和下一节奇异值分解呼应。

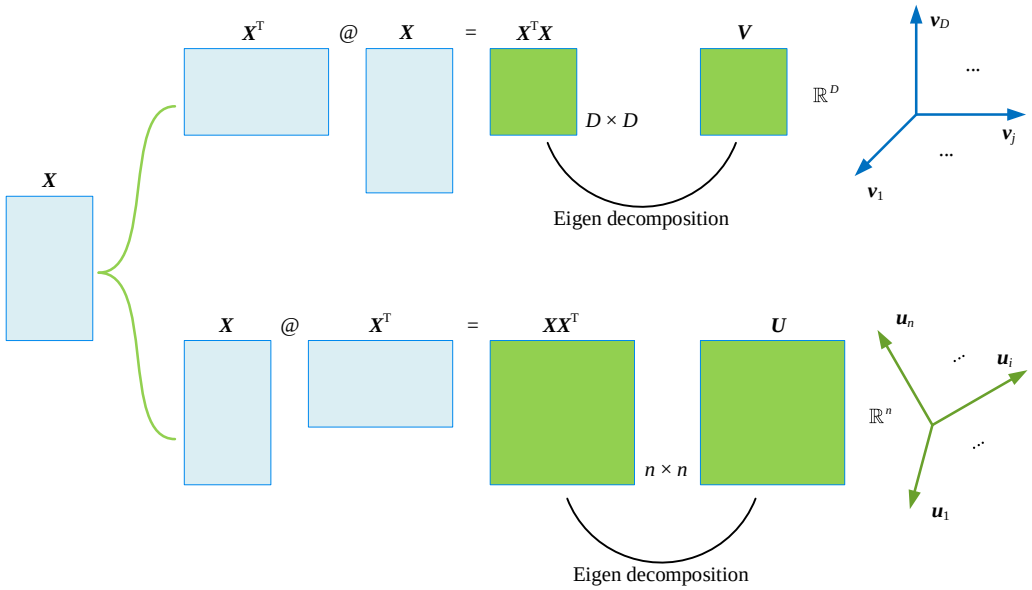


图 15. 对 Gram 矩阵特征值分解

如果本书有关特征值分解内容就此结束的话，相信所有读者会极其失望，说好的“图解”呢？多视角呢？空间、几何、数据、优化、统计视角又在哪？特征值分解是矩阵分解中的一道“大菜”，它在数据科学和机器学习领域应用非常广泛，本节仅仅介绍其皮毛。本书第 13、14 章专门讲解特征值分解及其应用。

11.6 奇异值分解：适用于任何实数矩阵

如果特征值分解是“大菜”，奇异值分解绝对就是矩阵分解中的“头牌”！本节将蜻蜓点水地介绍一些奇异值分解最基本概念，并让大家尝尝手算奇异值分解的滋味！

本书第 15、16 两章专门讲解奇异值分解和应用。本书最后三章还会梳理特征值分解和奇异值分解之间关系，以及它们和数据、空间、统计等概念的关系，把大家对矩阵分解的认识提高一个全新高度。

定义

对矩阵 $\boldsymbol{X}_{n\times D}$ **奇异值分解** (Singular Value Decomposition, SVD)，得到：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{42}$$

$\boldsymbol{S}$ 主对角线元素 s_i 为**奇异值** (singular value)。一些教材用 $\boldsymbol{\Sigma}$ 代表奇异值矩阵，而本系列丛书专门用 $\boldsymbol{\Sigma}$ 作为协方差矩阵记号。本书也会用 $\boldsymbol{S}$ 代表“缩放”矩阵，这和奇异值分解中的 $\boldsymbol{S}$ 在功能上完全一致。

$\boldsymbol{U}$ 的列向量称作**左奇异值向量** (left singular vector)。

$\boldsymbol{V}$ 的列向量称作**右奇异值向量** (right singular vector)。

常用的 SVD 分解有四种类型。完全型 SVD 分解中，$\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 为方阵，$\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{X}$ 的形状相同，具体如图 16 所示。本书第 15、16 章会介绍 SVD 的四种分解类型。

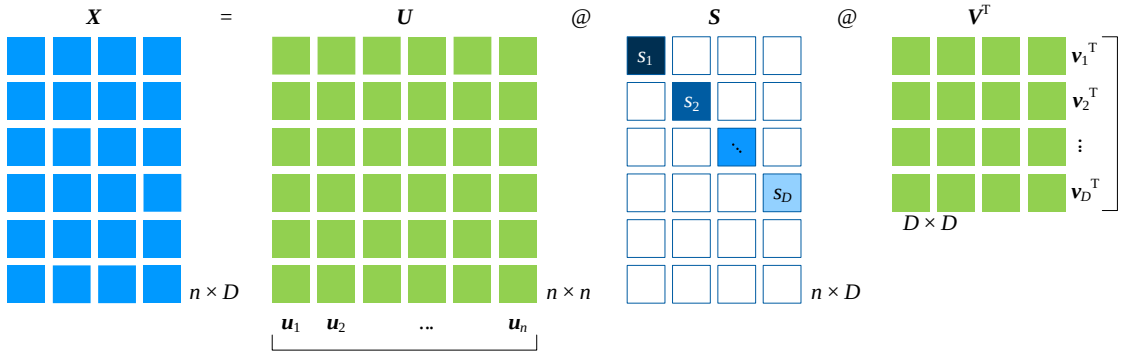


图 16. SVD 分解示意图

任何实数矩阵都可以 SVD 分解。“任何”二字奠定了奇异值分解宇宙第一矩阵分解的地位！不管是方阵，还是细高、宽矮矩阵，SVD 分解都能处理，可谓兵来将挡、水来土掩。

两个规范正交基

在完全 SVD 分解中，$\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 都是正交矩阵。这也就是说，向量空间视角下，$\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 都是规范正交基！如图 17 所示，这相当于一个 SVD 完成了图 15 中两个特征值分解。

SVD 分解也是对原始数据矩阵进行正交化的工具，本章前文提到 QR 分解和特征值分解都可以得到规范正交基，这些矩阵分解之间的区别和联系是什么？得到的规范正交基有什么不同？它们和向量空间又有怎样关系？这是本书最后三章“数据三部曲”要回答的问题。

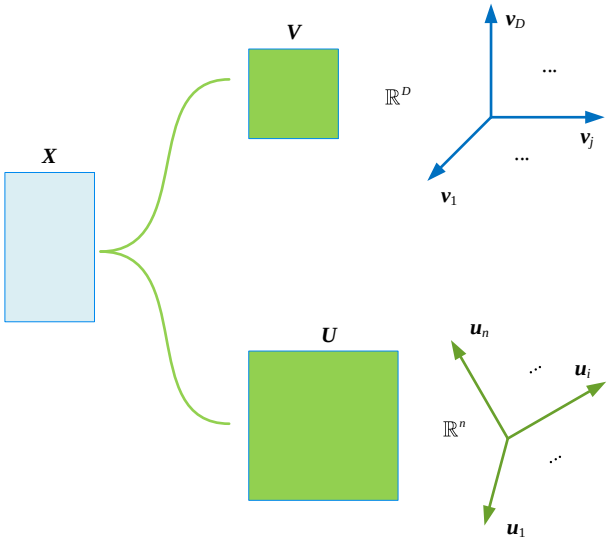


图 17. 对 $\boldsymbol{X}$ 矩阵完全 SVD 分解获得两个规范正交基

手算奇异值分解

给定矩阵 $\boldsymbol{X}$：

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{43}$$

前文提过，细高或宽矮的长方形矩阵在进行矩阵运算时并不友好，我们通常需要将它们“平方”，写成格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 这种形式。为求解 $\boldsymbol{V}$，先计算第一个格拉姆矩阵——$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$，

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2 & 1\\ 1 & 2\end{bmatrix} \tag{44}$$

进一步计算得到 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 特征值和特征向量：

$$\begin{cases}\lambda_1=3\\ \boldsymbol{v}_1=\begin{bmatrix}\frac{\sqrt{2}}{2}\\ \frac{\sqrt{2}}{2}\end{bmatrix}\end{cases}\quad\begin{cases}\lambda_2=1\\ \boldsymbol{v}_2=\begin{bmatrix}-\frac{\sqrt{2}}{2}\\ \frac{\sqrt{2}}{2}\end{bmatrix}\end{cases} \tag{45}$$

然后，计算第二个格拉姆矩阵——$\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$，

$$\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}1 & 1 & 0\\ 1 & 2 & 1\\ 0 & 1 & 1\end{bmatrix} \tag{46}$$

⚠ 注意区分，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 形状为 2×2，$\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 形状为 3×3。

计算 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 特征值和特征向量：

$$\begin{cases}\lambda_1=3\\ \boldsymbol{u}_1=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}\\ \frac{2}{\sqrt{6}}\\ \frac{1}{\sqrt{6}}\end{bmatrix}\end{cases}\quad\begin{cases}\lambda_2=1\\ \boldsymbol{u}_2=\begin{bmatrix}\frac{\sqrt{2}}{2}\\ 0\\ -\frac{\sqrt{2}}{2}\end{bmatrix}\end{cases}\quad\begin{cases}\lambda_3=0\\ \boldsymbol{u}_3=\begin{bmatrix}\frac{\sqrt{3}}{3}\\ -\frac{\sqrt{3}}{3}\\ \frac{\sqrt{3}}{3}\end{bmatrix}\end{cases} \tag{47}$$

奇异值矩阵 $\boldsymbol{S}$ 如下：

$$\boldsymbol{S}=\begin{bmatrix}s_1 & 0\\ 0 & s_2\\ 0 & 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sqrt{\lambda_1} & 0\\ 0 & \sqrt{\lambda_2}\\ 0 & 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sqrt{3} & 0\\ 0 & 1\\ 0 & 0\end{bmatrix} \tag{48}$$

(45) 和 (47) 中都得到了 λ_1 和 λ_2 这两个特征值。奇异值矩阵 $\boldsymbol{S}$ 对角线元素为 λ_1 和 λ_2 平方根。这一点是特征值分解和 SVD 分解的一个重要的区别，也是一个重要的联系。

因此，$\boldsymbol{X}$ 的完全型 SVD 分解为：

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{3} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{3} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{49}$$

再次强调，本书绝不要求大家掌握如何徒手进行 SVD 分解。大家需要掌握的是 SVD 背后的数学思想，如何利用不同视角理解 SVD 分解。

本章开启了本书一个全新的板块——矩阵分解。以下四幅图总结本章的主要内容。请大家将不同矩阵分解对号入座。

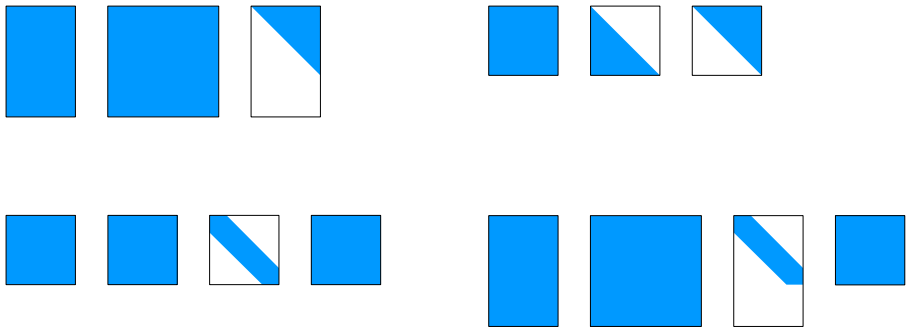


图 18. 总结本章重要内容的四幅图

矩阵分解看着让人眼花缭乱，但是万变不离其宗——矩阵乘法！大家很快就会看到，我们会反复使用矩阵乘法的两个视角来分析各种矩阵分解。矩阵分解让我们从一个全新的高度领略到了矩阵乘法的魅力。

数据视角、几何视角，这两点绝对是学好矩阵分解的利器，怎么强调都不为过。有数据的地方，就有矩阵！有矩阵的地方，就有向量！有向量的地方，就有几何！

下面五章将展开讲解 Cholesky 分解、特征值分解和奇异值分解。本书最后三章会结合几何、数据、空间、应用等概念，再次升华矩阵分解！也就是说，有向量的地方，肯定有空间！

习惯通过做题学习数学的读者，给大家强推 Nathaniel Johnston 编写的 *Introduction to Linear and Matrix Algebra* 和 *Advanced Linear and Matrix Algebra* 两本线性代数教材。该书作者并非什么“大家”，但是依我看，这两本书远好于绝大多数线性代数教材。

12 Cholesky 分解

Cholesky Decomposition

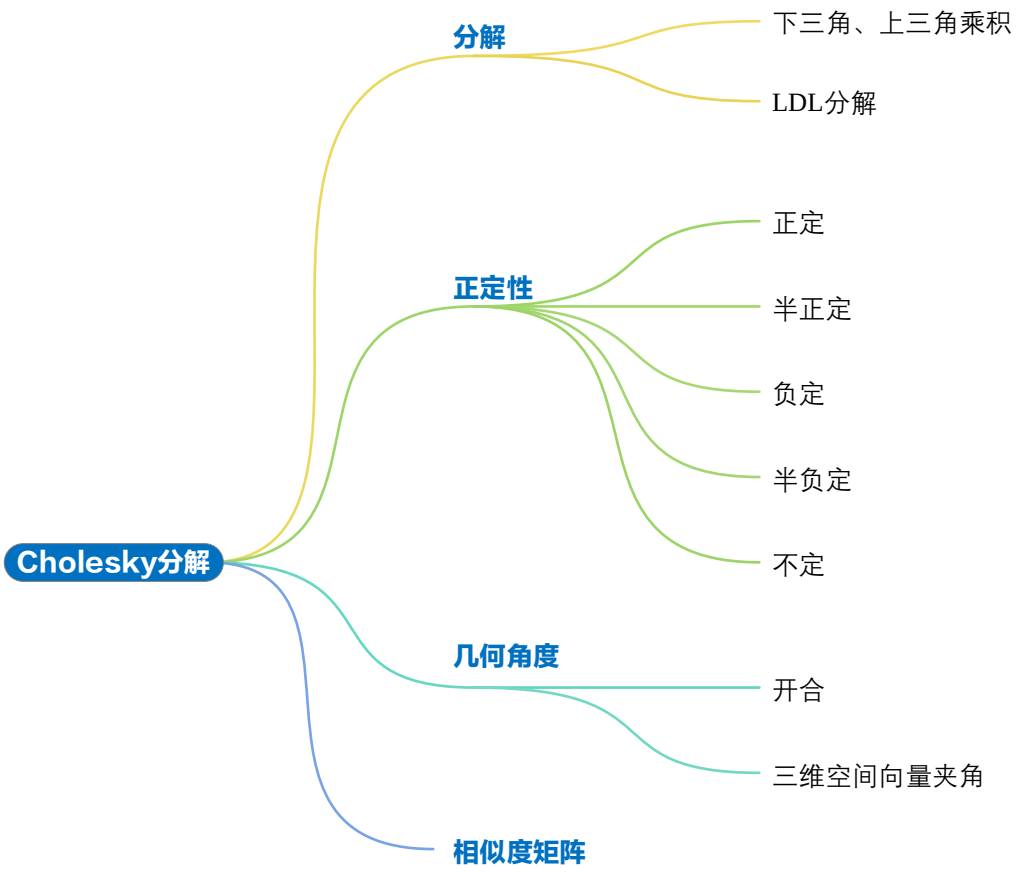
适用于正定矩阵

每个人都是天才。但是，如果你以爬树的能力来评判一条鱼，那么那条鱼终其一生都会认为自己愚蠢无能。

Everybody is a genius. But if you judge a fish by its ability to climb a tree, it will live its whole life believing that it is stupid.

—— 阿尔伯特·爱因斯坦 (Albert Einstein) | 理论物理学家 | 1879 ~ 1955

- `ax.contour3D()` 绘制三维曲面等高线
- `ax.plot_wireframe()` 绘制线框图
- `math.radians()` 将角度转换成弧度
- `matplotlib.pyplot.contour()`绘制平面等高线
- `matplotlib.pyplot.contourf ()`绘制平面填充等高线
- `matplotlib.pyplot.plot()` 绘制线图
- `matplotlib.pyplot.quiver()` 绘制箭头图
- `matplotlib.pyplot.scatter()` 绘制散点图
- `numpy.arccos()` 计算反余弦
- `numpy.cos()` 计算余弦值
- `numpy.deg2rad()` 将角度转化为弧度
- `numpy.linalg.cholesky()` Cholesky 分解
- `numpy.linalg.eig()` 特征值分解



12.1 Cholesky 分解

实数矩阵的 Cholesky 分解由法国军官、数学家**安德烈·路易·科列斯基** (André-Louis Cholesky) 最先发明。科列斯基本人在一战结束前夕战死沙场，Cholesky 分解是由科列斯基的同事在他死后发表的，并以科列斯基的名字命名。

通过上一章学习，大家知道 Cholesky 分解将方阵 $\boldsymbol{A}$ 分解为一个下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$ 以及它的转置 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$ 的乘积：

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

利用上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$ (= $\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$)，(1) 可以写成：

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R} \tag{2}$$

LDL 分解

在 Cholesky 分解基础上，上一章又介绍了 LDL 分解。LDL 分解将上述矩阵 $\boldsymbol{A}$ 分解成下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$、对角阵方阵 $\boldsymbol{D}$、$\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$ 三者乘积，即，

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}} \tag{3}$$

(3) 中下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$ 为对角线元素均为 1。从几何视角来看，$\boldsymbol{L}$ 相当于我们在本书第 8 章中提到剪切。

假设对角方阵 $\boldsymbol{D}$ 对角线元素非负，LDL 分解可以进一步写成：

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{1/2}\left(\boldsymbol{D}^{1/2}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{1/2}\left(\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{1/2}\right)^{\mathrm{T}} \tag{4}$$

$\boldsymbol{D}^{1/2}$ 也是个对角方阵，$\boldsymbol{D}^{1/2}$ 对角线上元素是 $\boldsymbol{D}$ 的对角线元素的非负平方根。

令，

$$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{D}^{1/2} \tag{5}$$

(4) 可写成：

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{B}\left(\boldsymbol{L}\boldsymbol{B}\right)^{\mathrm{T}} \tag{6}$$

$\boldsymbol{L}\boldsymbol{B}$ 相当于 $\boldsymbol{A}$ 的平方根。

用上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$ 替换 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$，(6) 可以写成：

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}\boldsymbol{R}=\left(\boldsymbol{B}\boldsymbol{R}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{R} \tag{7}$$

12.2 正定矩阵才可以进行 Cholesky 分解

上一章提到，并非所有矩阵都可以做 Cholesky 分解，只有**正定矩阵** (positive-definite matrix) 才能 Cholesky 分解。

在 $\boldsymbol{x}$ 为非零列向量 ($\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$) 条件下，如果方阵 $\boldsymbol{A}$ 满足：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} > 0 \tag{8}$$

则称方阵 $\boldsymbol{A}$ 为**正定矩阵** (positive definite matrix)。(8) 中列向量 $\boldsymbol{x}$ 的行数和矩阵 $\boldsymbol{A}$ 行数一致。二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 的结果是标量。此外，正定矩阵的特征值均为正。

几何视角

从几何角度更容易理解正定矩阵，以如下 2 × 2 矩阵为例：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \tag{9}$$

注意，正定矩阵都是对称方阵。

定义二元函数 $y = f(x_1, x_2)$：

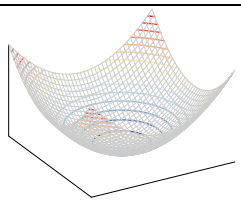
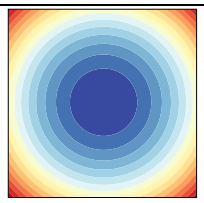
$$y = f(x_1, x_2) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = ax_1^2 + 2bx_1x_2 + cx_2^2 \tag{10}$$

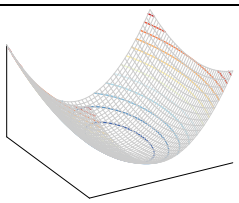
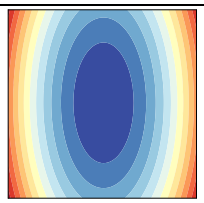
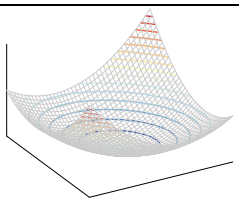
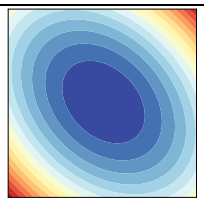
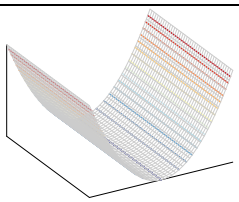
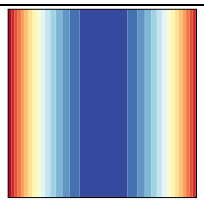
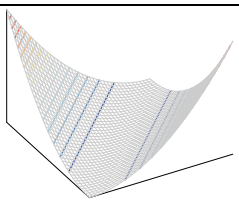
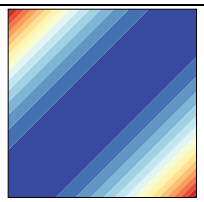
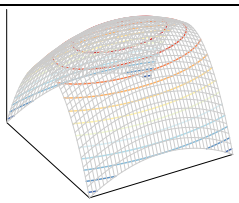
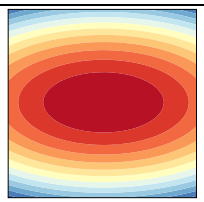
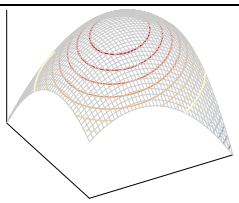
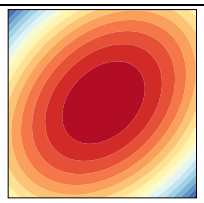
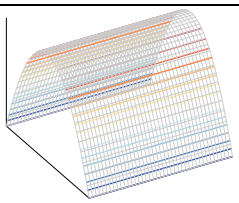
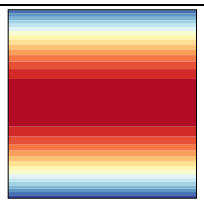
函数 $y = f(x_1, x_2)$ 就是本书第 5 章提到的二次型。更重要的是，上式把正定性和丛书《数学要素》讲过的二次曲面联系起来。

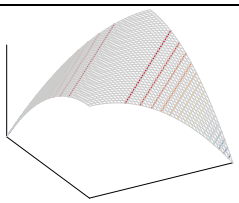
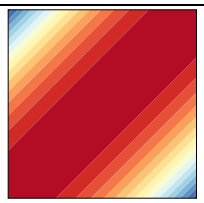
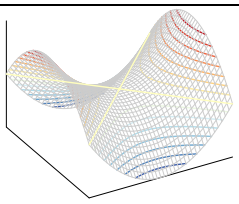
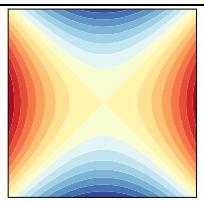
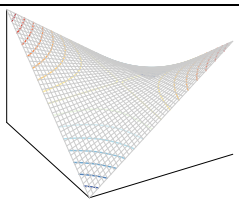
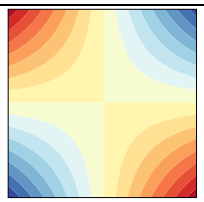
除了正定矩阵，还有半正定、负定、半负定、不定这几种正定性。表 1 总结几种正定性、曲面、等高线特征。希望读者能够通过表中几何图形建立正定性的直观印象。此外，请大家自行分析表中曲面的极值特征。

本书第 21 章将专门讨论矩阵的正定性。

表 1. 几种正定性

正定性	例子	三维曲面	平面等高线
正定 (positive definite)	开口向上正圆抛物面 $\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$		

	开口向上正椭圆抛物面 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 0.5\end{bmatrix}$		
	开口向上旋转椭圆抛物面 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1.5 & 0.5\\ 0.5 & 1.5\end{bmatrix}$		
半正定 (positive semi-definite)	山谷面 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}$		
	旋转山谷面 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0.5 & -0.5\\ -0.5 & 0.5\end{bmatrix}$		
负定 (negative definite)	开口向下正椭圆抛物面 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-0.5 & 0\\ 0 & -2\end{bmatrix}$		
	开口向下旋转椭圆抛物面 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-1.5 & 0.5\\ 0.5 & -1.5\end{bmatrix}$		
半负定 (negative semi-definite)	山脊面 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$		

	旋转山脊面 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-0.5 & 0.5\\ 0.5 & -0.5\end{bmatrix}$		
不定 (indefinite)	马鞍面 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$		
	旋转马鞍面 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0 & -1\\ -1 & 0\end{bmatrix}$		

Bk4_Ch12_01.py 绘制表 1 三维曲面和等高线。请注意改变 a、b、c 三个系数取值。

12.3 几何角度：开合

本节，我们从一个有趣的几何视角分析一种特殊矩阵的 Cholesky 分解。

以 2 × 2 矩阵为例

给定如 2 × 2 矩阵 $\boldsymbol{P}$，它的主对角元素为 1，非主对角线元素为余弦值 $\cos\theta_{1,2}$：

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}1 & \cos\theta_{1,2}\\ \cos\theta_{1,2} & 1\end{bmatrix} \tag{11}$$

对矩阵 $\boldsymbol{P}$ 进行 Cholesky 分解可以得到：

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}=\underbrace{\begin{bmatrix}1 & 0\\ \cos\theta_{1,2} & \sin\theta_{1,2}\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}}\underbrace{\begin{bmatrix}1 & \cos\theta_{1,2}\\ 0 & \sin\theta_{1,2}\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}}=\begin{bmatrix}1 & \cos\theta_{1,2}\\ \cos\theta_{1,2} & 1\end{bmatrix} \tag{12}$$

利用上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$，矩阵 $\boldsymbol{P}$ 的 Cholesky 分解还可以写成：

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}=\underbrace{\begin{bmatrix}1 & 0\\ \cos\theta_{1,2} & \sin\theta_{1,2}\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}}\underbrace{\begin{bmatrix}1 & \cos\theta_{1,2}\\ 0 & \sin\theta_{1,2}\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{R}} \tag{13}$$

将 $\boldsymbol{R}$ 写成：

$$\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix}1 & \cos\theta_{1,2}\\ 0 & \sin\theta_{1,2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{r}_1 & \boldsymbol{r}_2\end{bmatrix} \tag{14}$$

在平面直角坐标系中，$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 分别代表水平和竖直正方向的单位向量，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 是 $\mathbb{R}^2$ 空间的标准正交基。$\boldsymbol{R}$ 分别乘 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$，得到 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}_1&=\boldsymbol{R}\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}1 & \cos\theta_{1,2}\\ 0 & \sin\theta_{1,2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}\\ \boldsymbol{r}_2&=\boldsymbol{R}\boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix}1 & \cos\theta_{1,2}\\ 0 & \sin\theta_{1,2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos\theta_{1,2}\\ \sin\theta_{1,2}\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{15}$$

很容易判断 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 均为单位向量。

而向量 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 夹角余弦值正是 $\cos\theta_{1,2}$：

$$\cos\theta=\frac{\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2}{\|\boldsymbol{r}_1\|\|\boldsymbol{r}_2\|}=\cos\theta_{1,2} \tag{16}$$

几何视角

如图 1 所示，从几何角度来讲，$\boldsymbol{R}$ 相当于把原本正交的 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 标准正交基转化成具有一定夹角的 $[\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2]$ 非正交基，且 $\boldsymbol{e}_1=\boldsymbol{r}_1$，相当于“锚定”。

⚠ 再次强调，虽然 $[\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2]$ 中每个列向量为单位向量，但是并不正交，因此 $[\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2]$ 为非正交基。

如图 1 所示，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 的夹角为 90 度，经过 $\boldsymbol{R}$ 变换后，$[\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2]$ 的夹角变成 $\theta_{1,2}$。这种几何变换像是“门合页”的开合。我们给这种几何变换取个名字，就叫做“开合”。

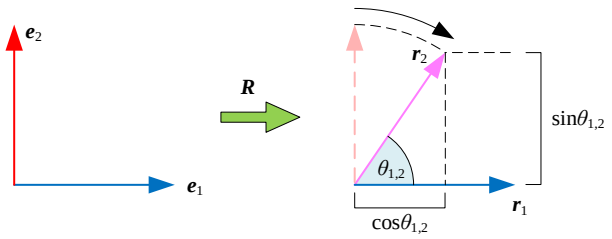


图 1. 开合

图 2 所示为四种不同开合角度。$0 < \cos\theta_{1,2} < 1$ 时，即 $0° < \theta_{1,2} < 90°$，“门合页”从直角 90°关闭至 $\theta_{1,2}$，具体如图 2 (a) (b) 所示两例。

$-1 < \cos\theta_{1,2} < 0$ 时，即 $90° < \theta_{1,2} < 180°$，“合页”从直角 90°打开至 $\theta_{1,2}$，具体如图 2 (c) (d) 所示两例。

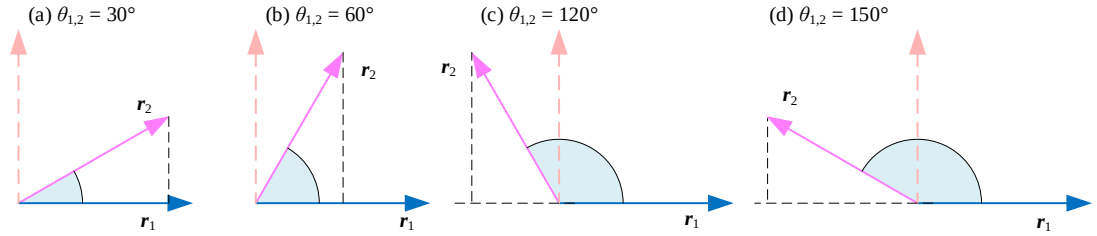


图 2. 不同的开合角度 $\cos\theta_{1,2}$

行列式值

计算 (14) 中 $\boldsymbol{R}$ 的行列式值：

$$|\boldsymbol{R}| = \begin{vmatrix} 1 & \cos\theta_{1,2} \\ 0 & \sin\theta_{1,2} \end{vmatrix} = \sin\theta_{1,2} \tag{17}$$

这个行列式值结果表明“开合”前后，图形的面积缩放比例为 $\sin\theta_{1,2}$。这和我们在图 3 中看到一致。$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 构造正方形面积为 1，而 $[\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2]$ 构造的平行四边形面积为 $\sin\theta_{1,2}$。

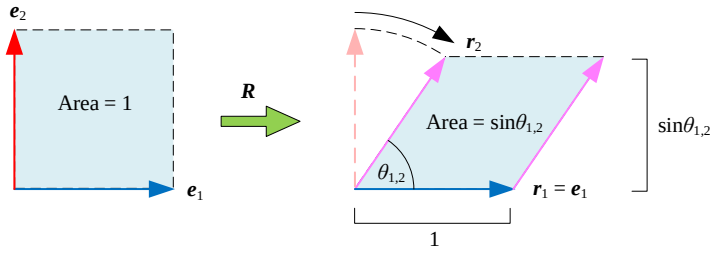


图 3. 开合对应的面积变化

举个例子

给定 $\boldsymbol{P}$ 为：

$$\boldsymbol{P} = \begin{bmatrix} 1 & \cos 60° \\ \cos 60° & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0.5 \\ 0.5 & 1 \end{bmatrix} \tag{18}$$

对 $\boldsymbol{P}$ 进行 Cholesky 分解得到：

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}=\underbrace{\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0.5 & \sqrt{3}/2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}}\underbrace{\begin{bmatrix}1 & 0.5\\ 0 & \sqrt{3}/2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{R}} \tag{19}$$

图 4 所示为 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 经过 (19) 中 $\boldsymbol{R}$ 转换得到向量 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$，而正圆经过 $\boldsymbol{R}$ 转换变成旋转椭圆。大家可能会问这个旋转椭圆的半长轴和半短轴长度分别为多少，这就需要借助特征值分解来计算。

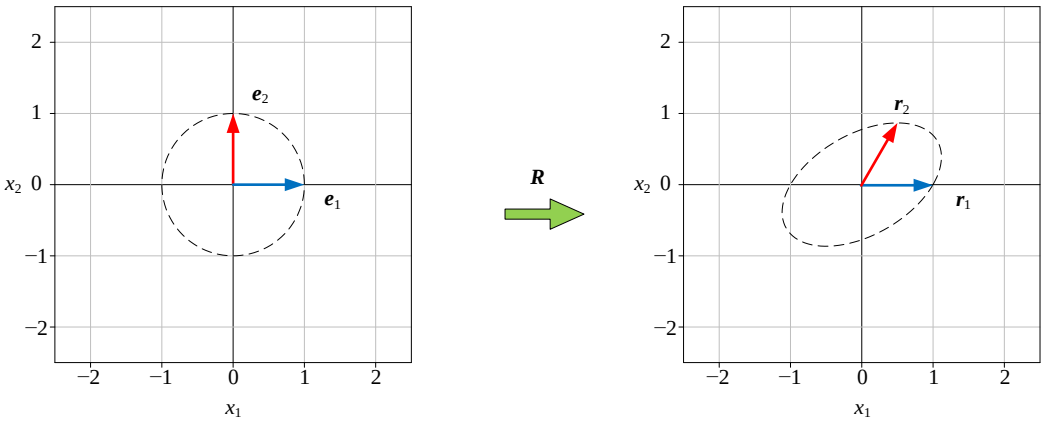


图 4. $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 经过 $\boldsymbol{R}$ 转换得到向量 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$

12.4 几何变换：缩放 → 开合

给定 $\boldsymbol{\Sigma}$ 具体形式如下：

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}a^2 & a\cdot b\cdot\cos\theta_{1,2}\\ a\cdot b\cdot\cos\theta_{1,2} & b^2\end{bmatrix} \tag{20}$$

其中，a 和 b 都是正数。

先把 $\boldsymbol{\Sigma}$ 写成：

$$\boldsymbol{\Sigma}=\underbrace{\begin{bmatrix}a & \\ & b\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{S}}\underbrace{\begin{bmatrix}1 & \cos\theta_{1,2}\\ \cos\theta_{1,2} & 1\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{P}}\underbrace{\begin{bmatrix}a & \\ & b\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{S}} \tag{21}$$

将 (11) 代入 (21)，得到：

$$\boldsymbol{\Sigma}=(\boldsymbol{RS})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{RS})=\underbrace{\begin{bmatrix}a & 0\\ 0 & b\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{S}}\underbrace{\begin{bmatrix}1 & 0\\ \cos\theta_{1,2} & \sin\theta_{1,2}\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}}\underbrace{\begin{bmatrix}1 & \cos\theta_{1,2}\\ 0 & \sin\theta_{1,2}\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{R}}\underbrace{\begin{bmatrix}a & 0\\ 0 & b\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{S}} \tag{22}$$

上式相当于对 $\boldsymbol{\Sigma}$ 直接进行 Cholesky 分解的结果。

将 $\boldsymbol{RS}$ ($\boldsymbol{S}$ 先、$\boldsymbol{R}$ 后) 作用在在 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 上，得到 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}_1 &= \boldsymbol{RSe}_1 = \begin{bmatrix}1 & \cos\theta_{1,2}\\ 0 & \sin\theta_{1,2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a & 0\\ 0 & b\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} = a\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\\ \boldsymbol{x}_2 &= \boldsymbol{RSe}_2 = \begin{bmatrix}1 & \cos\theta_{1,2}\\ 0 & \sin\theta_{1,2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a & 0\\ 0 & b\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} = b\begin{bmatrix}\cos\theta_{1,2}\\ \sin\theta_{1,2}\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{23}$$

这相当于，对 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 先缩放 ($\boldsymbol{S}$)，再开合 ($\boldsymbol{R}$)。

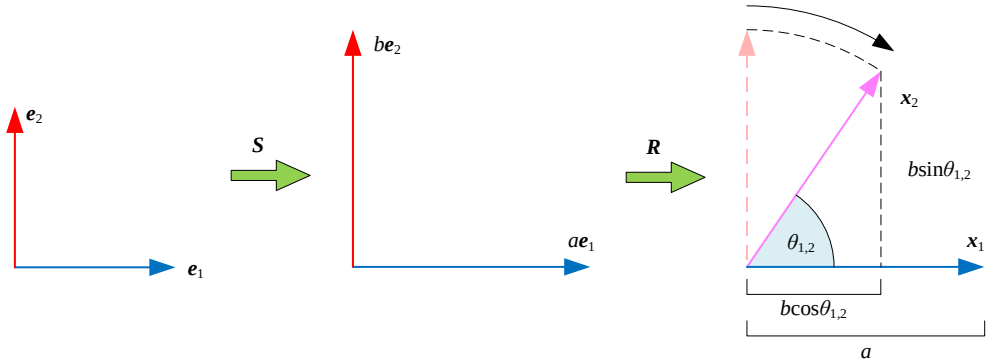


图 5. 先缩放再开合

计算 (23) 中，向量 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 夹角余弦值为：

$$\cos\theta = \frac{\boldsymbol{x}_1 \cdot \boldsymbol{x}_2}{\|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_2\|} = \frac{a \cdot b \cdot \cos\theta_{1,2}}{a \cdot b} = \cos\theta_{1,2} \tag{24}$$

发现向量 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 夹角等同于向量 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 夹角。

举个例子

给定 $\boldsymbol{\Sigma}$ 具体值为：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix}1.5^2 & 1.5\times 2\times\cos 60^\circ\\ 1.5\times 2\times\cos 60^\circ & 2^2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}2.25 & 1.5\\ 1.5 & 4\end{bmatrix} \tag{25}$$

对 $\boldsymbol{\Sigma}$ 进行 Cholesky 分解得到：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \left(\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{\Sigma}}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{\Sigma}}\right) = \begin{bmatrix}1.5 & 0\\ 1 & 1.732\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1.5 & 1\\ 0 & 1.732\end{bmatrix} \tag{26}$$

图 6 所示为 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 经过 $\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{\Sigma}}$ 转换得到向量 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$。

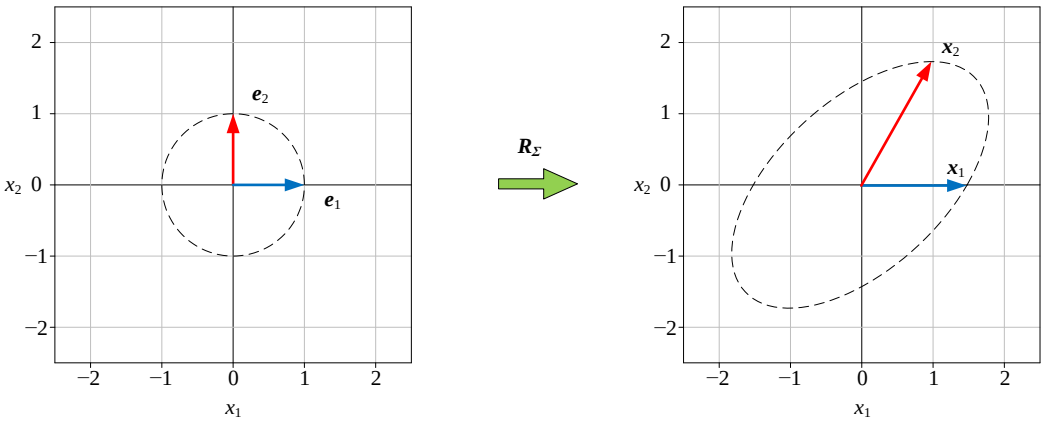


图 6. $\boldsymbol{e}_1$和 $\boldsymbol{e}_2$经过 $\boldsymbol{R}_\Sigma$转换得到向量 $\boldsymbol{x}_1$和 $\boldsymbol{x}_2$

按照 (22)，$\boldsymbol{\Sigma}$可以分解成：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1.5 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{S}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0.5 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0.5 \\ 0 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{R}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1.5 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{S}} = (\boldsymbol{RS})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{RS} \tag{27}$$

图 7 所示为 $\boldsymbol{e}_1$和 $\boldsymbol{e}_2$分别经过 $\boldsymbol{S}$和 $\boldsymbol{R}$转换，得到向量 $\boldsymbol{x}_1$和 $\boldsymbol{x}_2$。

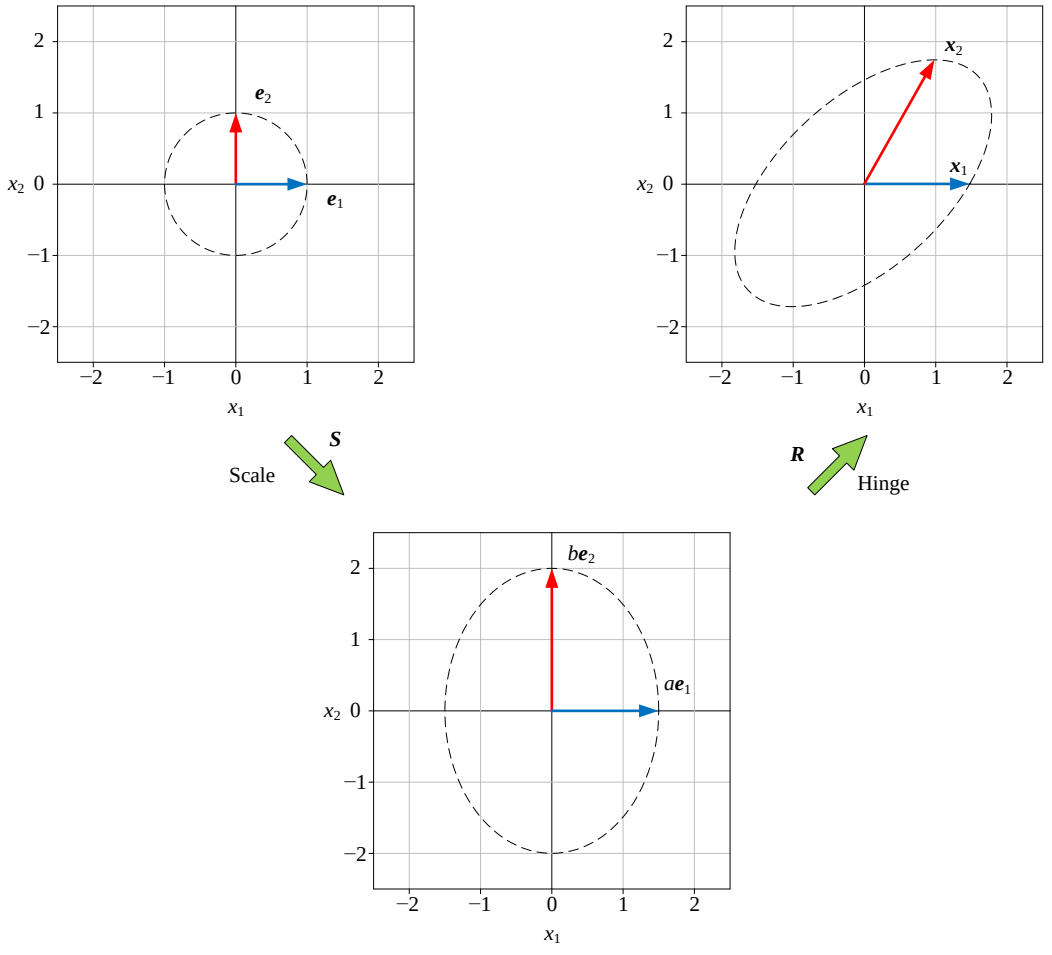


图 7. $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 分别经过 $\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{R}$ 转换

对 (25) 中 $\boldsymbol{\Sigma}$ 进行 LDL 分解：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 2.25 & 1.5 \\ 1.5 & 4 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2/3 & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}} \underbrace{\begin{bmatrix} 2.25 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{D}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 2/3 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}} \tag{28}$$

将对角矩阵 $\boldsymbol{D}$ 写成 $\boldsymbol{BB}$，

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 2.25 & 1.5 \\ 1.5 & 4 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2/3 & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1.5 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{B}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1.5 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{B}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 2/3 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}} = \left(\boldsymbol{BL}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{BL}^{\mathrm{T}} \tag{29}$$

上式中的 $\boldsymbol{L}$ 对应的几何变换为剪切，$\boldsymbol{B}$ 对应缩放。也就是说，先剪切 ($\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$) 再缩放 ($\boldsymbol{B}$)，我们也可以获得图 6 右图。请大家自行绘制分步几何变换图像。

本系列丛书一般用 $\boldsymbol{\Sigma}$ 来代表协方差矩阵。本节之所以用矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$，这是因为大家很快会发现 Cholesky 分解和协方差矩阵之间的紧密联系。而本章前文中提到的矩阵 $\boldsymbol{P}$，就是本书之后要讲的相关性系数矩阵。类比的话，矩阵 $\boldsymbol{P}$ 中的余弦值就是相关性系数。

请大家特别关注《统计至简》第 13、14、15 这三章。

12.5 推广到三维空间

本节利用立体几何视角探讨 Cholesky 分解。

给定如下 3 × 3 矩阵 $\boldsymbol{P}$，

$$\boldsymbol{P} = \begin{bmatrix} 1 & \cos\theta_{1,2} & \cos\theta_{1,3} \\ \cos\theta_{1,2} & 1 & \cos\theta_{2,3} \\ \cos\theta_{1,3} & \cos\theta_{2,3} & 1 \end{bmatrix} \tag{30}$$

其中，$\theta_{1,2}$、$\theta_{1,3}$、$\theta_{2,3}$ 三个角度均大于等于 0°。

对 $\boldsymbol{P}$ 进行 Cholesky 分解：

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R} \tag{31}$$

其中，

$$\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix} 1 & \cos\theta_{1,2} & \cos\theta_{1,3} \\ 0 & \sqrt{1-\cos^2\theta_{1,2}} & \dfrac{\cos\theta_{2,3}-\cos\theta_{1,3}\cos\theta_{1,2}}{\sqrt{1-\cos^2\theta_{1,2}}} \\ 0 & 0 & \sqrt{1-\cos^2\theta_{1,3}-\dfrac{\left(\cos\theta_{2,3}-\cos\theta_{1,3}\cos\theta_{1,2}\right)^2}{1-\cos^2\theta_{1,2}}} \end{bmatrix} \tag{32}$$

相当于：

$$\boldsymbol{r}_1=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{r}_2=\begin{bmatrix}\cos\theta_{1,2}\\ \sqrt{1-\cos^2\theta_{1,2}}\\0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{r}_2=\begin{bmatrix}\cos\theta_{1,3}\\ \dfrac{\cos\theta_{2,3}-\cos\theta_{1,3}\cos\theta_{1,2}}{\sqrt{1-\cos^2\theta_{1,2}}}\\ \sqrt{1-\cos^2\theta_{1,3}-\dfrac{\left(\cos\theta_{2,3}-\cos\theta_{1,3}\cos\theta_{1,2}\right)^2}{1-\cos^2\theta_{1,2}}}\end{bmatrix} \tag{33}$$

将 $\boldsymbol{R}=[\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3]$ 代入 (31) 得到：

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}1&\cos\theta_{1,2}&\cos\theta_{1,3}\\ \cos\theta_{1,2}&1&\cos\theta_{2,3}\\ \cos\theta_{1,3}&\cos\theta_{2,3}&1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{r}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{r}_2^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{r}_3^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{r}_1 & \boldsymbol{r}_2 & \boldsymbol{r}_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{r}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_1 & \boldsymbol{r}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_2 & \boldsymbol{r}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_3\\ \boldsymbol{r}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_1 & \boldsymbol{r}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_2 & \boldsymbol{r}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_3\\ \boldsymbol{r}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_1 & \boldsymbol{r}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_2 & \boldsymbol{r}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_1 & \boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2 & \boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_3\\ \boldsymbol{r}_2\cdot\boldsymbol{r}_1 & \boldsymbol{r}_2\cdot\boldsymbol{r}_2 & \boldsymbol{r}_2\cdot\boldsymbol{r}_3\\ \boldsymbol{r}_3\cdot\boldsymbol{r}_1 & \boldsymbol{r}_3\cdot\boldsymbol{r}_2 & \boldsymbol{r}_3\cdot\boldsymbol{r}_3\end{bmatrix} \tag{34}$$

观察 (34) 对角线，可以容易判断 $\boldsymbol{r}_1$、$\boldsymbol{r}_2$、$\boldsymbol{r}_3$ 均为单位向量，但是 $[\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3]$ 为非正交基。

而 $\boldsymbol{P}$ 中非对角线元素 $\cos\theta_{i,j}$ 就是 $\boldsymbol{r}_i$ 和 $\boldsymbol{r}_j$ 向量夹角的余弦值。下面验证一下。

计算向量 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 夹角的余弦值：

$$\frac{\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2}{\|\boldsymbol{r}_1\|\|\boldsymbol{r}_2\|}=\cos\theta_{1,2} \tag{35}$$

$\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_3$ 夹角的余弦值为：

$$\frac{\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_3}{\|\boldsymbol{r}_1\|\|\boldsymbol{r}_3\|}=\cos\theta_{1,3} \tag{36}$$

$\boldsymbol{r}_2$ 和 $\boldsymbol{r}_3$ 夹角的余弦值为：

$$\frac{\boldsymbol{r}_2\cdot\boldsymbol{r}_3}{\|\boldsymbol{r}_2\|\|\boldsymbol{r}_3\|}=\cos\theta_{2,3} \tag{37}$$

几何视角

如图 8 所示，利用 $\boldsymbol{R}$，我们完成了标准正交基 $[\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\boldsymbol{e}_3]$ 向非正交基 $[\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3]$ 的转换。

换个角度，(30) 中矩阵 $\boldsymbol{P}$ 指定了目标向量两两“相对夹角”余弦值 $\cos\theta_{1,2}$、$\cos\theta_{1,3}$、$\cos\theta_{2,3}$。即 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 的相对夹角余弦值为 $\cos\theta_{1,2}$，$\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_3$ 的相对夹角余弦值为 $\cos\theta_{1,3}$，$\boldsymbol{r}_2$ 和 $\boldsymbol{r}_3$ 的相对夹角余弦值为 $\cos\theta_{2,3}$。我们想要找到空间中满足这个条件的三个单位向量。

对 $\boldsymbol{P}$ 进行 Cholesky 分解得到矩阵 $\boldsymbol{R}$，它的列向量 $\boldsymbol{r}_1$、$\boldsymbol{r}_2$、$\boldsymbol{r}_3$ 就是我们想要找的三个向量的空间坐标点。特别地，$\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_1$ 相同。好就好比，在构造 $[\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3]$ 这个非正交基时，$\boldsymbol{r}_1$ 锚定在 $\boldsymbol{e}_1$。

⚠ 再次强调一下，$\cos\theta_{1,2}$、$\cos\theta_{1,3}$、$\cos\theta_{2,3}$ 确定的角度是向量之间的“相对夹角”。而 $[\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3]$ 两两列向量确定的角度则是参考标准正交基的“绝对夹角”，这是因为 $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{e}_1$。

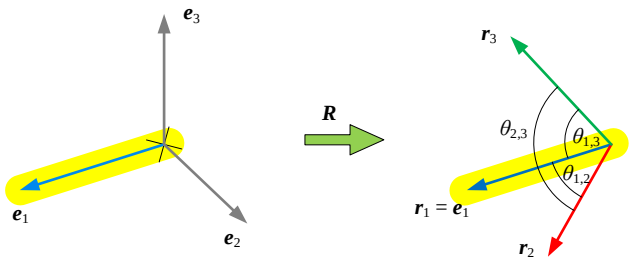


图 8. 三维系转化成满足指定两两夹角的坐标系

两个例子

图 9 给出两个例子，在给定 $\cos\theta_{1,2}$、$\cos\theta_{1,3}$、$\cos\theta_{2,3}$ 三个角度条件下，我们可以利用 Cholesky 分解矩阵 $\boldsymbol{P}$ 计算得到满足夹角条件的三个单位向量 $\boldsymbol{r}_1$、$\boldsymbol{r}_2$、$\boldsymbol{r}_3$。

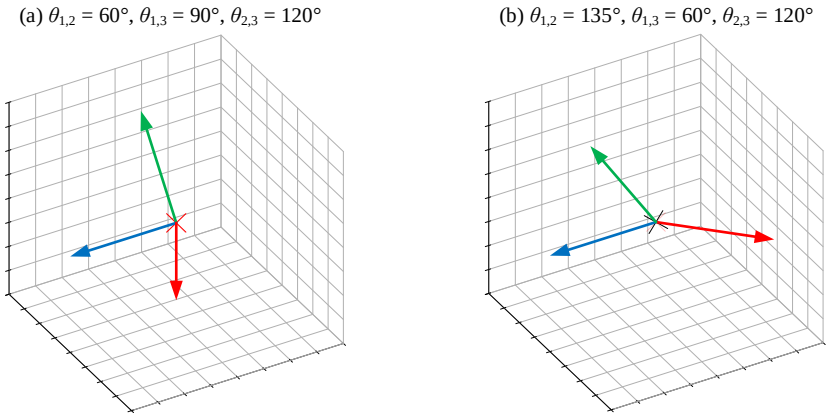


图 9. 给定三个夹角，确定向量三维空间位置

前提条件

在图 8 中，任意两个夹角之和必须大于等于第三个夹角，且任意角度不能为 0°，也就是必须满足如下三个不等式：

$$\begin{aligned}\theta_{1,2}+\theta_{1,3}\geq\theta_{2,3}>0°\\ \theta_{1,2}+\theta_{2,3}\geq\theta_{1,3}>0°\\ \theta_{1,3}+\theta_{2,3}\geq\theta_{1,2}>0°\end{aligned} \tag{38}$$

另外，三个角度夹角必须小于等于 360°：

$$\theta_{1,2}+\theta_{1,3}+\theta_{2,3}\leq 360° \tag{39}$$

试想一个有趣的现象，在图 8 中，如果 $\theta_{1,2}=\theta_{1,3}+\theta_{2,3}$，这意味着 $\boldsymbol{r}_1$、$\boldsymbol{r}_2$、$\boldsymbol{r}_3$ 三个向量在一个平面上，$\boldsymbol{r}_1$、$\boldsymbol{r}_2$、$\boldsymbol{r}_3$ 线性相关。这种情况，矩阵 $\boldsymbol{R}$ 不满秩，也就是说 $\boldsymbol{P}$ 也不满秩，因此 $\boldsymbol{P}$ 不可以 Cholesky 分解。

而三个夹角之和等于 360°时，即 $\theta_{1,2}+\theta_{1,3}+\theta_{2,3}=360°$，$\boldsymbol{r}_1$、$\boldsymbol{r}_2$、$\boldsymbol{r}_3$ 三个向量也在一个平面上，$\boldsymbol{P}$ 也不可以 Cholesky 分解。

最后，如果 $\theta_{1,2}$、$\theta_{1,3}$、$\theta_{2,3}$ 任一角度为 0°，这意味着存在两个向量共线，这种情况 $\boldsymbol{P}$ 也不可以 Cholesky 分解。

也就是为了保证 (30) 中 $\boldsymbol{P}$ 可以 Cholesky 分解，即正定，需要满足以下条件：

$$\begin{aligned}&\theta_{1,2}>0°,\quad \theta_{1,3}>0°,\quad \theta_{2,3}>0°\\ &\theta_{1,2}+\theta_{1,3}>\theta_{2,3},\quad \theta_{1,2}+\theta_{2,3}>\theta_{1,3},\quad \theta_{1,3}+\theta_{2,3}>\theta_{1,2}\\ &\theta_{1,2}+\theta_{1,3}+\theta_{2,3}<360°\end{aligned} \tag{40}$$

夹角相同

再看一组特殊情况，(30) 中 $\boldsymbol{P}$ 两两夹角相同，即，

$$\theta_{1,2}=\theta_{1,3}=\theta_{2,3}=\theta \tag{41}$$

此时，$\boldsymbol{P}$ 可以写成：

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}1 & \cos\theta & \cos\theta\\ \cos\theta & 1 & \cos\theta\\ \cos\theta & \cos\theta & 1\end{bmatrix} \tag{42}$$

打个比方，这个例子像是一把雨伞的开合。假设雨伞只有三个伞骨，雨伞开合时，伞骨之间的两两夹角相等。

雨伞合起来时，三个伞骨并拢，相当于三个向量之间夹角为 0°，即共线。三个向量必然线性相关。

如果雨伞最大开度可以让伞面为平面，这时三个伞骨之间夹角为 120°，三个向量在一个平面上，也线性相关。

有了这两个极限情况，我们知道向量之间夹角 θ 取值范围为 [0°, 120°]，而 $\cos\theta$ 的取值范围为 [−0.5, 1] (cos(120°) = −0.5, cos(0°) = 1)。这也就是说，这种情况下，$\boldsymbol{P}$ 的两个极端取值为：

$$\boldsymbol{P} = \begin{bmatrix} 1 & -0.5 & -0.5 \\ -0.5 & 1 & -0.5 \\ -0.5 & -0.5 & 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{P} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \tag{43}$$

上式中两个 $\boldsymbol{P}$ 都不能进行 Cholesky 分解，因为 $\boldsymbol{P}$ 都不满秩。

图 10 给出四个不同开合角度。图 10 (d) 对应的 (43) 第一个矩阵 $\boldsymbol{P}$，$\theta_{1,2}$、$\theta_{1,3}$、$\theta_{2,3}$ 三个角度都是 120°，因此 $\boldsymbol{r}_1$、$\boldsymbol{r}_2$、$\boldsymbol{r}_3$ 在一个平面上，线性相关。

从统计角度来看，$\boldsymbol{P}$ 代表相关性系数矩阵。如果其中任意两个随机变量的相关性系数相等，满足 (42) 相关性系数的取值范围为 [−0.5, 1]。

至此，我们利用空间几何视角，探讨了 Cholesky 分解以及满足 Cholesky 分解条件。

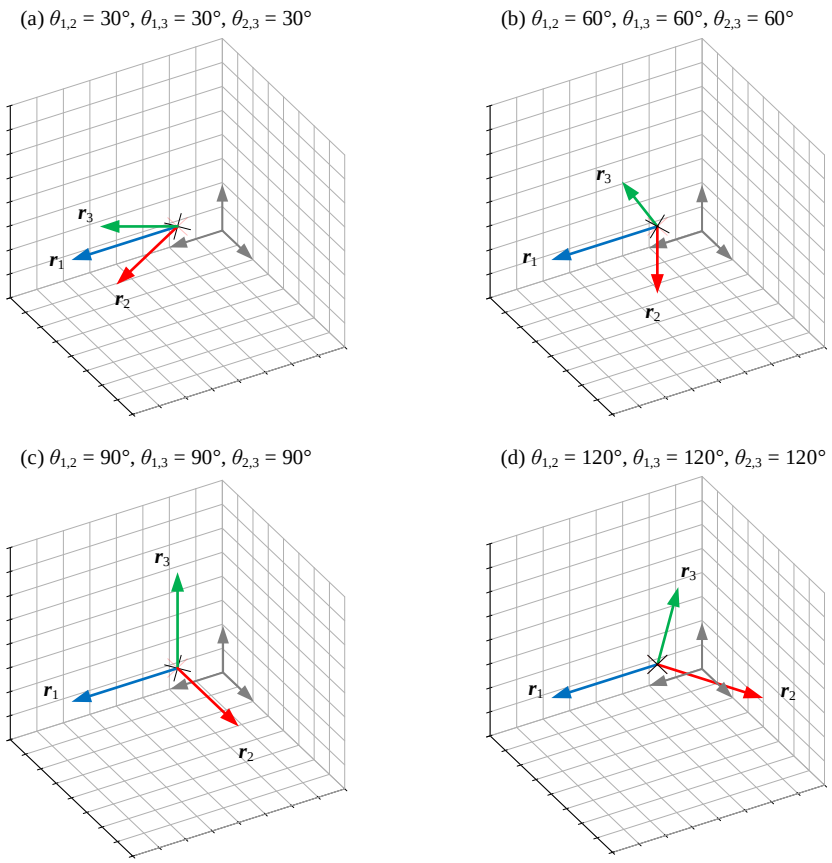


图 10. 相等角度条件下，确定向量三维空间位置

`Bk4_Ch12_02.py` 绘制图 9 和图 10。请读者自行设定夹角条件，看看哪些角度组合能够进行 Cholesky 分解，哪些不能。

12.6 从格拉姆矩阵到相似度矩阵

有了本章前文内容铺垫，下面我们回头来看一下格拉姆矩阵。

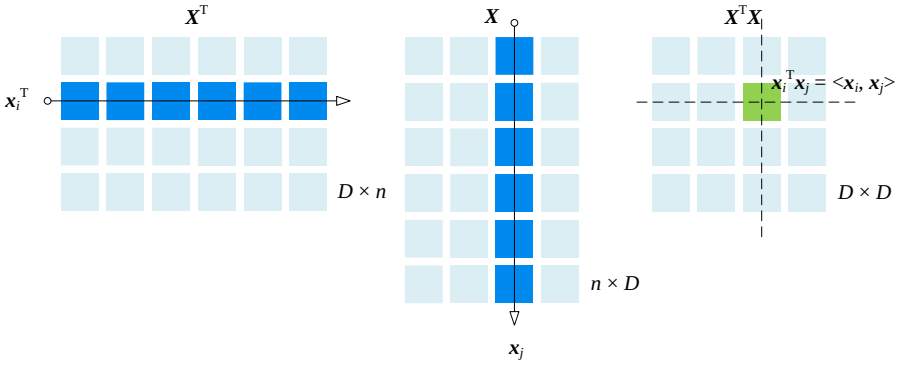


图 11. 格拉姆矩阵

如图 11 所示，数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 可以写成标量积形式：

$$\boldsymbol{G}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1\cdot\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_1\cdot\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_1\cdot\boldsymbol{x}_D\\ \boldsymbol{x}_2\cdot\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2\cdot\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_2\cdot\boldsymbol{x}_D\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{x}_D\cdot\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_D\cdot\boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D\cdot\boldsymbol{x}_D\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_1\rangle & \langle\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_D\rangle\\ \langle\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_1\rangle & \langle\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_D\rangle\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \langle\boldsymbol{x}_D,\boldsymbol{x}_1\rangle & \langle\boldsymbol{x}_D,\boldsymbol{x}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{x}_D,\boldsymbol{x}_D\rangle\end{bmatrix} \tag{44}$$

确定列向量坐标

对 $\boldsymbol{G}$ 进行 Cholesky 分解得到：

$$\boldsymbol{G}=\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{G}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{G}} \tag{45}$$

将 $\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{G}}$ 写成一排列向量：

$$\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{G}}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{r}_{\boldsymbol{G},1} & \boldsymbol{r}_{\boldsymbol{G},2} & \cdots & \boldsymbol{r}_{\boldsymbol{G},D}\end{bmatrix} \tag{46}$$

将 (46) 代入 (45) 得到：

$$\boldsymbol{G}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{r}_{G,1}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{r}_{G,2}^{\mathrm{T}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{r}_{G,D}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{r}_{G,1} & \boldsymbol{r}_{G,2} & \cdots & \boldsymbol{r}_{G,D}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\langle \boldsymbol{r}_{G,1},\boldsymbol{r}_{G,1}\rangle & \langle \boldsymbol{r}_{G,1},\boldsymbol{r}_{G,2}\rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{r}_{G,1},\boldsymbol{r}_{G,D}\rangle\\ \langle \boldsymbol{r}_{G,2},\boldsymbol{r}_{G,1}\rangle & \langle \boldsymbol{r}_{G,2},\boldsymbol{r}_{G,2}\rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{r}_{G,1},\boldsymbol{r}_{G,D}\rangle\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \langle \boldsymbol{r}_{G,D},\boldsymbol{r}_{G,1}\rangle & \langle \boldsymbol{r}_{G,D},\boldsymbol{r}_{G,2}\rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{r}_{G,D},\boldsymbol{r}_{G,D}\rangle\end{bmatrix} \tag{47}$$

(44) 等价于 (47)，向量模和向量夹角之间完全等价。这“相当于”在 $\mathbb{R}^D$ 中找到了 $\boldsymbol{X}$ 每个列向量的具体坐标！

以鸢尾花数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 为例，$\boldsymbol{X}$ 可以写成四个列向量左右排列，即 $\boldsymbol{X}=[\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_3,\boldsymbol{x}_4]$。这些列向量都有 150 个元素，显然不能直接在 $\mathbb{R}^4$ 空间中展示。

图 12 所示为计算 $\boldsymbol{X}$ 的 Gram 矩阵 $\boldsymbol{G}$ 过程热图。如前文所述，矩阵 $\boldsymbol{G}$ 中包含了 $[\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_3,\boldsymbol{x}_4]$ 各个列向量的模，以及它们之间两两夹角余弦值。

一个向量就两个元素——大小和方向，$\boldsymbol{G}$ 这相当于集成了 $[\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_3,\boldsymbol{x}_4]$ 每个向量关键信息。

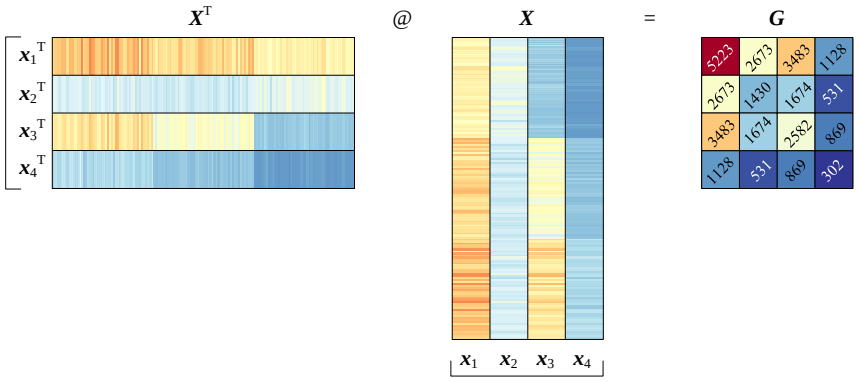


图 12. 鸢尾花数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 格拉姆矩阵，图片来自本书第 10 章

如图 13 所示，对 Gram 矩阵 $\boldsymbol{G}$ 进行 Cholesky 分解得到上三角矩阵 $\boldsymbol{R}_G$，$\boldsymbol{R}_G$ 的列向量长度为 4，它们在在 $\mathbb{R}^4$ 空间中，“等价于” $[\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_3,\boldsymbol{x}_4]$。

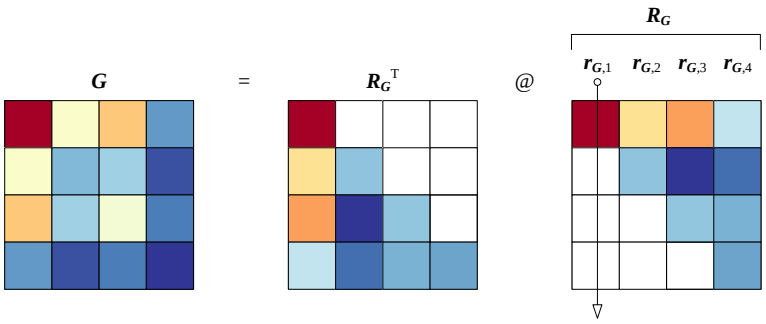


图 13. 对格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 进行 Cholesky 分解

向量夹角

以向量夹角余弦形式展开 $\boldsymbol{G}$ 中向量积：

$$\boldsymbol{G}=\begin{bmatrix} \|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_1\|\cos\theta_{1,1} & \|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_2\|\cos\theta_{2,1} & \cdots & \|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_D\|\cos\theta_{1,D} \\ \|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_1\|\cos\theta_{1,2} & \|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_2\|\cos\theta_{2,2} & \cdots & \|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_D\|\cos\theta_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_1\|\cos\theta_{1,D} & \|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_2\|\cos\theta_{2,D} & \cdots & \|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_D\|\cos\theta_{D,D} \end{bmatrix} \tag{48}$$

观察矩阵 $\boldsymbol{G}$，它包含了数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 中列向量的两个重要信息——模 $\|\boldsymbol{x}_i\|$、方向 (向量两两夹角余弦值 $\cos\theta_{i,j}$)。

定义缩放矩阵 $\boldsymbol{S}$，具体形式如下：

$$\boldsymbol{S}=\begin{bmatrix} \|\boldsymbol{x}_1\| & & & \\ & \|\boldsymbol{x}_2\| & & \\ & & \ddots & \\ & & & \|\boldsymbol{x}_D\| \end{bmatrix} \tag{49}$$

对 $\boldsymbol{G}$ 左右分别乘上 $\boldsymbol{S}$ 的逆，得到 $\boldsymbol{C}$：

$$\boldsymbol{C}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{S}^{-1}=\begin{bmatrix} \frac{\boldsymbol{x}_1\cdot\boldsymbol{x}_1}{\|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_1\|} & \frac{\boldsymbol{x}_1\cdot\boldsymbol{x}_2}{\|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_2\|} & \cdots & \frac{\boldsymbol{x}_1\cdot\boldsymbol{x}_D}{\|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_D\|} \\ \frac{\boldsymbol{x}_2\cdot\boldsymbol{x}_1}{\|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_1\|} & \frac{\boldsymbol{x}_2\cdot\boldsymbol{x}_2}{\|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_2\|} & \cdots & \frac{\boldsymbol{x}_2\cdot\boldsymbol{x}_D}{\|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_D\|} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\boldsymbol{x}_D\cdot\boldsymbol{x}_1}{\|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_1\|} & \frac{\boldsymbol{x}_D\cdot\boldsymbol{x}_2}{\|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_2\|} & \cdots & \frac{\boldsymbol{x}_D\cdot\boldsymbol{x}_D}{\|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_D\|} \end{bmatrix} \tag{50}$$

矩阵 $\boldsymbol{C}$ 中元素就是向量两两夹角余弦值。

余弦相似度矩阵

矩阵 $\boldsymbol{C}$ 有自己的名字——**余弦相似度矩阵** (cosine similarity matrix)。这是因为 $\boldsymbol{C}$ 的每个元素实际上计算的是 $\boldsymbol{x}_i$ 和 $\boldsymbol{x}_j$ 向量的相对夹角 $\theta_{i,j}$ 余弦值 $\cos\theta_{i,j}$，即，

$$\boldsymbol{C}=\begin{bmatrix} 1 & \cos\theta_{2,1} & \cdots & \cos\theta_{1,D} \\ \cos\theta_{1,2} & 1 & \cdots & \cos\theta_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \cos\theta_{1,D} & \cos\theta_{2,D} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \tag{51}$$

相比格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$，余弦相似度矩阵 $\boldsymbol{C}$ 中只包含了 $\boldsymbol{X}$ 列向量两两夹角 $\cos\theta_{i,j}$ 这个单一信息。

对 $\boldsymbol{C}$ 进行 Cholesky 分解得到：

$$\boldsymbol{C}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R} \tag{52}$$

将 $\boldsymbol{R}$ 写成 $[\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_D]$，$\boldsymbol{C}$ 可以写成：

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{r}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{r}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{r}_D^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{r}_1 & \boldsymbol{r}_2 & \cdots & \boldsymbol{r}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{r}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_1 & \boldsymbol{r}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_2 & \cdots & \boldsymbol{r}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_D \\ \boldsymbol{r}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_1 & \boldsymbol{r}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_2 & \cdots & \boldsymbol{r}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{r}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_1 & \boldsymbol{r}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_2 & \cdots & \boldsymbol{r}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \cos\theta_{2,1} & \cdots & \cos\theta_{1,D} \\ \cos\theta_{1,2} & 1 & \cdots & \cos\theta_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \cos\theta_{1,D} & \cos\theta_{2,D} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \tag{53}$$

根据本章前文分析，我们知道 $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_D$ 都是单位向量。

图 14 所示为鸢尾花数据矩阵的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$，先转化成相似度矩阵 $\boldsymbol{C}$，再转化成角度矩阵。角度越小说明特征越相似。

当然，我们也可以对鸢尾花数据先中心化，得到矩阵 $\boldsymbol{X}_c$。再 $\boldsymbol{X}_c$ 计算的格拉姆矩阵，然后再计算其相似度矩阵，最后计算角度矩阵。请大家自行完成上述运算，并和图 14 结果比较。

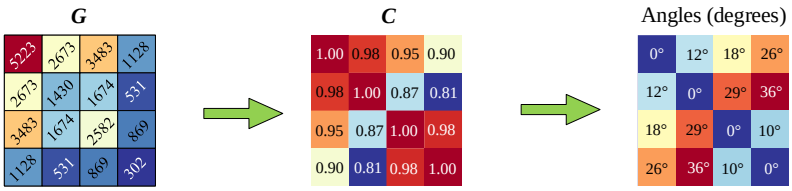


图 14. 格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 转化成相似度矩阵 $\boldsymbol{C}$，再转化成角度

本节介绍的内容在**蒙特卡洛模拟** (Monte Carlo simulation) 中有重要应用。如图 15 所示，本章介绍的 Cholesky 分解结果可以用来产生满足指定相关性系数的随机数。

本系列丛书《概率统计》和《数据科学》两本会从理论、应用两个角度讲解蒙特卡洛模拟。

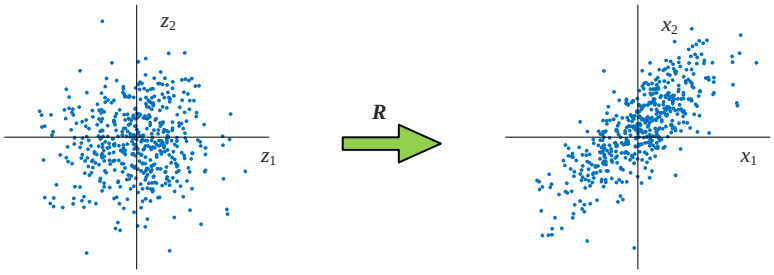


图 15. 产生满足指定相关性矩阵要求的随机数

本章从几何视角讲解了 Cholesky 分解。只有正定矩阵才可以进行 Cholesky 分解，这一点可以用来判断矩阵是否为正定。我们创造了“开合”这个词用来描述 Cholesky 分解得到的上三角矩阵对应的几何变换。

对 Gram 矩阵进行 Cholesky 分解可以帮我们确定原数据矩阵的列向量空间等价坐标。此外，我们将在本系列丛书《概率统计》中有关协方差矩阵和蒙特卡罗模拟中再聊到 Cholesky 分解。

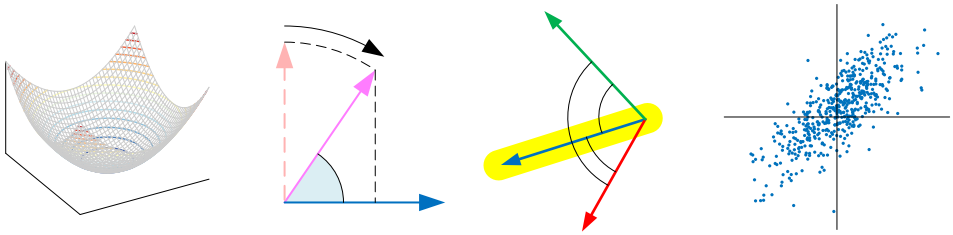


图 16. 总结本章重要内容的四幅图

13 Eigen Decomposition
特征值分解

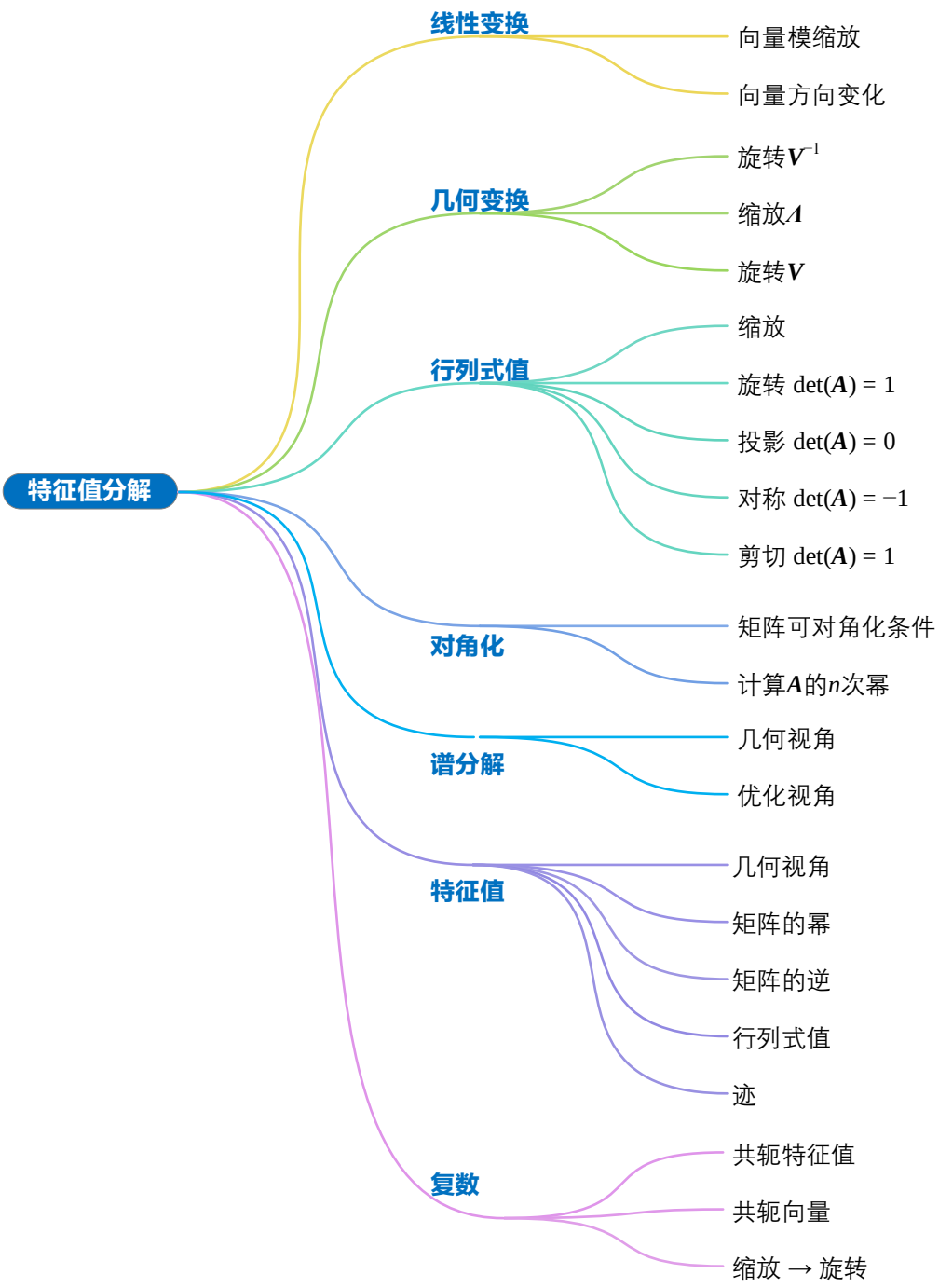
旋转 → 缩放 → 旋转

如果不能用数学表达，人类任何探索都不能被称之为真正的科学。

No human investigation can be called real science if it cannot be demonstrated mathematically.

—— 列奥纳多·达·芬奇 (Leonardo da Vinci) | 文艺复兴三杰之一 | 1452 ~ 1519

- `numpy.meshgrid()` 产生网格化数据
- `numpy.prod()` 指定轴的元素乘积
- `numpy.linalg.inv()` 矩阵求逆
- `numpy.linalg.eig()` 特征值分解
- `numpy.cos()` 计算余弦值
- `numpy.sin()` 计算正弦值
- `numpy.tan()` 计算正切值
- `numpy.flip()` 指定轴翻转数组
- `numpy.fliplr()` 左右翻转数组
- `numpy.flipud()` 上下翻转数组



13.1 几何角度看特征值分解

本书第 8 章讲解线性变换时提到，几何视角下，方阵对应缩放、旋转、投影、剪切等几何变换中一种甚至多种的组合，而矩阵分解可以帮我们找到这些几何变换的具体成分。本章要讲的特征值分解能帮我们找到某些特定方阵中“缩放”和“旋转”这两个成分。

举个例子

给定如下一个矩阵 $\boldsymbol{A}$，具体如下：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1.25 & -0.75\\ -0.75 & 1.25\end{bmatrix} \tag{1}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 乘向量 $\boldsymbol{w}_1$ 得到一个新向量 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}_1$，比如：

$$\boldsymbol{w}_1=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{w}_1=\begin{bmatrix}1.25 & -0.75\\ -0.75 & 1.25\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1.25\\-0.75\end{bmatrix} \tag{2}$$

如图 1 所示，从几何角度，对比原向量 $\boldsymbol{w}_1$，经过 $\boldsymbol{A}$ 的映射，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}_1$ 的方向和模都发生了变化。也就是说，$\boldsymbol{A}$ 起到了缩放、旋转两方面作用。

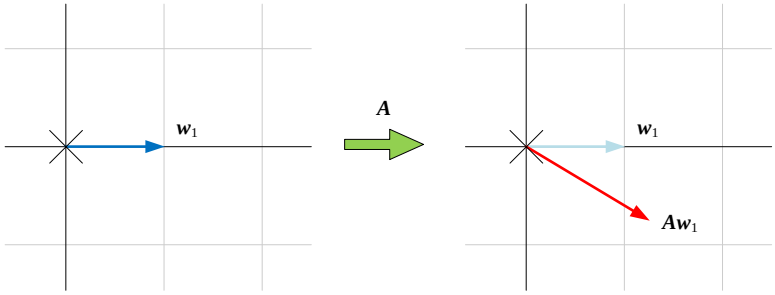


图 1. 我们发现相比原向量 $\boldsymbol{w}_1$，新向量 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}_1$ 的方向和模都发生变化

图 2 给出 81 个不同朝向向量 $\boldsymbol{w}$，它们都是单位向量，即向量模均为 1。

经过 $\boldsymbol{A}$ 的映射得到图 3 所示 81 个不同 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}$ 结果。图 3 中，多数情况，$\boldsymbol{w}$ (蓝色箭头) 到 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}$ (红色箭头) 同时发生旋转、缩放。

请大家特别注意图 3 中如下四个向量 (背景为浅蓝色)：

$$\boldsymbol{w}_{11}=\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{w}_{31}=\begin{bmatrix}-\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{w}_{51}=\begin{bmatrix}-\sqrt{2}/2\\ -\sqrt{2}/2\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{w}_{71}=\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2\\ -\sqrt{2}/2\end{bmatrix} \tag{3}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和这四个向量相乘得到的结果和原向量相比，仅仅发生缩放，也就是向量模变化，但是方向没有变化。$\boldsymbol{A}$ 对这些向量只产生缩放变换，不产生旋转效果，那么这些向量就称为 $\boldsymbol{A}$ 特征向量，伸缩的比例就是特征值。

⚠ 注意，准确来说，如果 $\boldsymbol{w}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量，$\boldsymbol{w}$ 和 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}$ 方向平行，同向或反向。

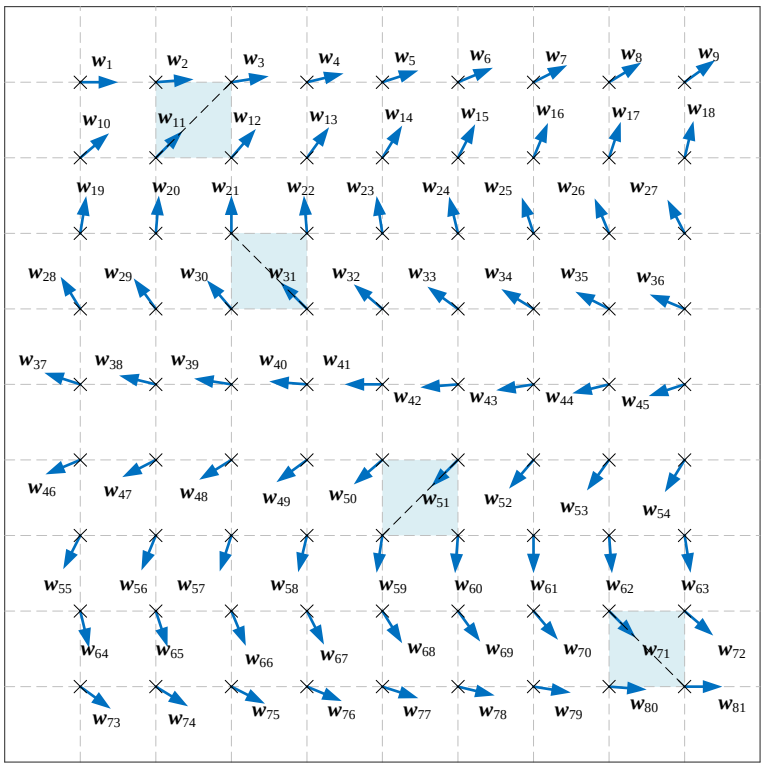


图 2. 81 个朝向不同方向的单位向量

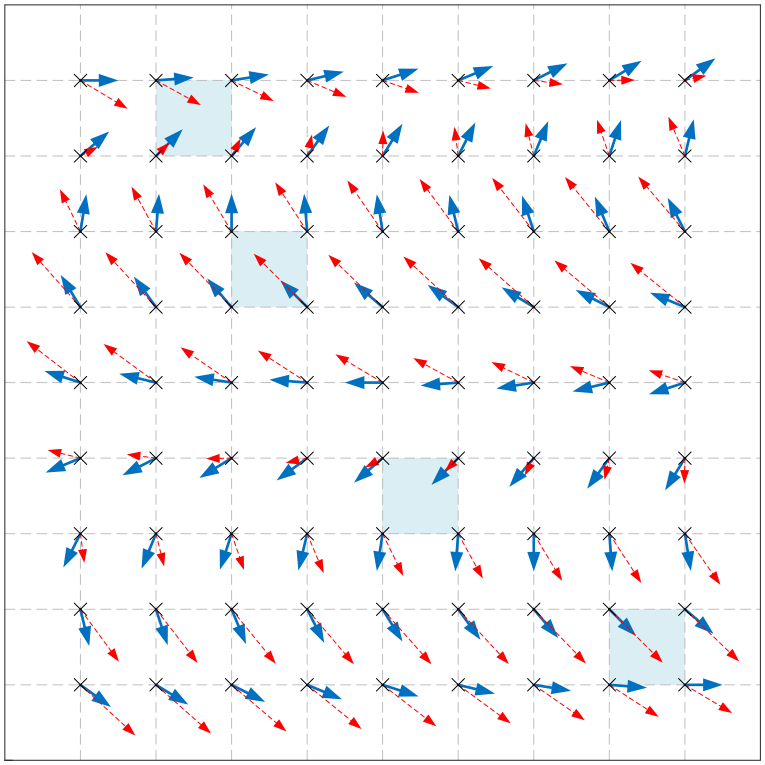


图 3. 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 乘 $\boldsymbol{w}$ 得到的 81 个不同结果

单位圆

为了更好看清矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的作用，我们将不同朝向的向量都放在一个单位圆中，如图 4 左图。

图 4 左图中，向量的终点落在单位圆上。为了方便可视化，图 4 左图只展示四个蓝色箭头的线段，它们都是特征向量。图 4 右图为经过 $\boldsymbol{A}$ 映射后得到向量，终点落在旋转椭圆上。对比图 4 椭圆和正圆的缩放比例，大家可以试着估算特征值大小。

不禁感叹，椭圆真是无处不在。本书后文椭圆还将出现在不同场合，特别是和协方差矩阵相关的内容中。

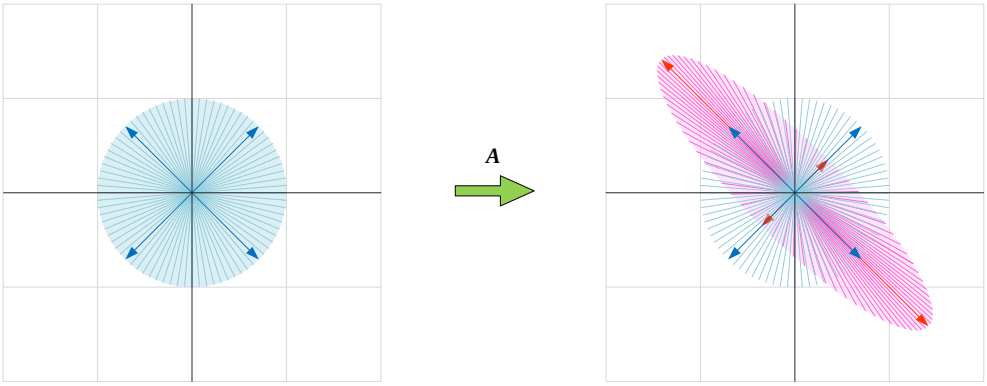


图 4. 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对一系列向量的映射结果

`Bk4_Ch13_01.py` 绘制图 2、图 3、图 4。需要说明的是，为了方便大家理解以及保证图形的矢量化，丛书不会直接使用 Python 出图。所有图片后期都经过多道美化工序。因此，大家使用代码获得的图片和书中图片存在一定差异，但是图片美化中绝不会篡改数据。

13.2 旋转 → 缩放 → 旋转

根据本书第 11 章所述，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值分解可以写成：

$$\boldsymbol{A} = \underbrace{\boldsymbol{V}}_{\text{Rotate}} \underbrace{\boldsymbol{\Lambda}}_{\text{Scale}} \underbrace{\boldsymbol{V}^{-1}}_{\text{Rotate}} \tag{4}$$

几何视角，$\boldsymbol{A}$ 乘任意向量 $\boldsymbol{w}$ 代表“旋转 → 缩放 →旋转”，即，

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{w} = \underbrace{\boldsymbol{V}}_{\text{Rotate}} \underbrace{\boldsymbol{\Lambda}}_{\text{Scale}} \underbrace{\boldsymbol{V}^{-1}}_{\text{Rotate}} \boldsymbol{w} \tag{5}$$

⚠ 注意，几何变换顺序是从右向左，即旋转 ($\boldsymbol{V}^{-1}$) → 缩放 ($\boldsymbol{\Lambda}$) →旋转 ($\boldsymbol{V}$)。此外，准确来说，只有 $\boldsymbol{V}$ 是正交矩阵且 det($\boldsymbol{V}$) = 1，$\boldsymbol{V}$ 才是旋转矩阵 (rotation matrix)，对应的几何操作才是纯粹的旋转。

举个 2 × 2 矩阵的例子

(4) 等式右乘 $\boldsymbol{V}$ 得到：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda} \tag{6}$$

将 $\boldsymbol{V}$ 展开写成 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 并代入上式得到：

$$\boldsymbol{A}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_1 & \\ & \lambda_2\end{bmatrix} \tag{7}$$

展开 (7) 得到：

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\lambda_1\boldsymbol{v}_1 & \lambda_2\boldsymbol{v}_2\end{bmatrix} \tag{8}$$

对于上一节给出的例子，将具体数值代入 (4)，得到：

$$\underbrace{\begin{bmatrix}1.25 & -0.75\\ -0.75 & 1.25\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}} = \underbrace{\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}}\underbrace{\begin{bmatrix}0.5 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Lambda}}\underbrace{\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}^{-1}} \tag{9}$$

下面，我们分别讨论 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$ 的几何特征。

第一特征向量

$\boldsymbol{v}_1$ 为：

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix}\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2\end{bmatrix} \tag{10}$$

$\boldsymbol{A}$ 乘 $\boldsymbol{v}_1$ 得到 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1$：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix}1.25 & -0.75\\ -0.75 & 1.25\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\sqrt{2}/4\\ \sqrt{2}/4\end{bmatrix} = \underbrace{\frac{1}{2}}_{\lambda_1}\times\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2\end{bmatrix} \tag{11}$$

可以发现，相比 $\boldsymbol{v}_1$，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1$ 方向没有发生变化，$\boldsymbol{A}$ 仅仅产生缩放作用，缩放比例为 $\lambda_1 = 1/2$。

图 5 中蓝色箭头代表 $\boldsymbol{v}_1$，将 (4) 代入 (11)，将 $\boldsymbol{A}$ 拆解为“旋转→缩放→旋转”三步几何操作：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 = \overset{\text{Rotate}}{\boldsymbol{V}}\ \overset{\text{Scale}}{\boldsymbol{\Lambda}}\ \overset{\text{Rotate}}{\boldsymbol{V}^{-1}}\boldsymbol{v}_1 \tag{12}$$

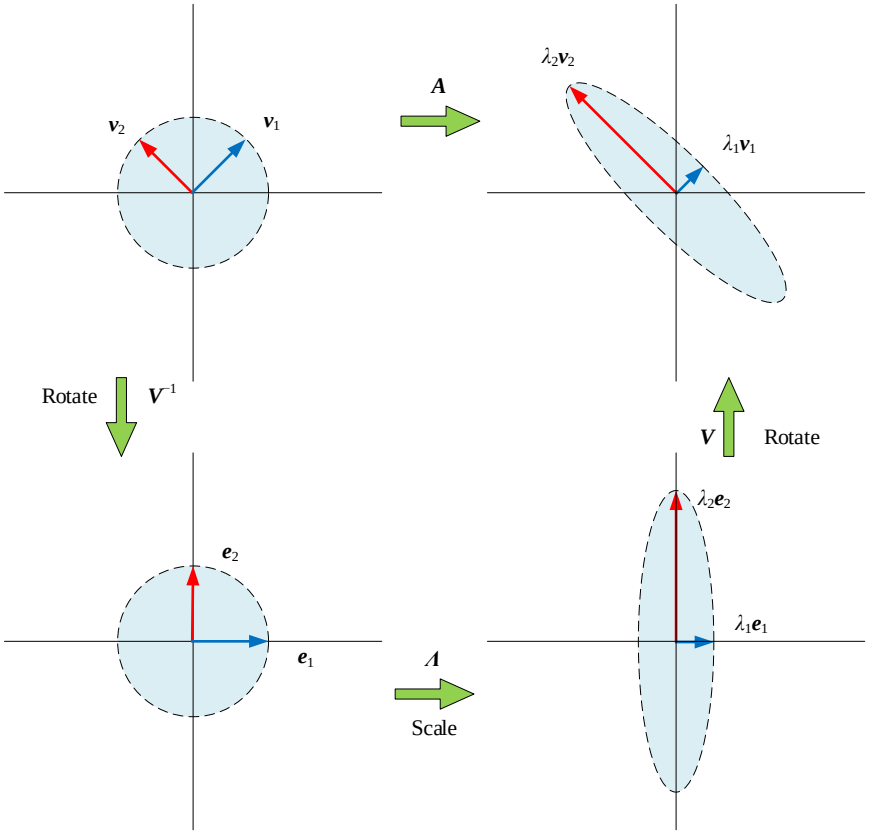


图 5. “旋转→缩放→旋转”操作

$\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_1$ 相对 $\boldsymbol{v}_1$ 顺时针旋转 45°：

$$\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_1=\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}=\boldsymbol{e}_1 \tag{13}$$

然后再利用 $\boldsymbol{\Lambda}$ 完成缩放操作，得到 $\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_1$：

$$\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_1=\begin{bmatrix}0.5 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.5\\ 0\end{bmatrix}=\underset{\lambda_1}{0.5}\boldsymbol{e}_1 \tag{14}$$

最后利用 $\boldsymbol{V}$ 完成逆时针旋转 45°，得到 $\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_1$：

$$\begin{aligned}\underbrace{\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}}_{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{v}_1&=\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix}\underset{\lambda_1}{0.5}\boldsymbol{e}_1\\ &=\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.5\\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sqrt{2}/4\\ \sqrt{2}/4\end{bmatrix}=\underset{\lambda_1}{0.5}\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2\end{bmatrix}\\ &=\lambda_1\boldsymbol{v}_1\end{aligned} \tag{15}$$

第二特征向量

类似地，下面讨论 $\boldsymbol{A}$ 乘 $\boldsymbol{v}_2$ 对应的“旋转→缩放→旋转”操作。

$\boldsymbol{v}_2$ 为：

$$\boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \tag{16}$$

$\boldsymbol{A}$ 乘 $\boldsymbol{v}_2$ 得到 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2$：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} 1.25 & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{bmatrix} = \underset{\lambda_2}{2} \times \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \tag{17}$$

相比 $\boldsymbol{v}_2$，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2$ 方向没有发生变化，$\boldsymbol{A}$ 产生缩放作用，缩放比例为 $\lambda_2 = 2$。

$\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_2$ 将 $\boldsymbol{v}_2$ 顺时针旋转 45°：

$$\underset{\text{Rotate}}{\boldsymbol{V}^{-1}}\boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \boldsymbol{e}_2 \tag{18}$$

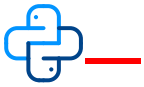
再缩放得到 $\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_2$：

$$\underset{\text{Scale}}{\boldsymbol{\Lambda}}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix} = \underset{\lambda_2}{2}\boldsymbol{e}_2 \tag{19}$$

最后旋转得到 $\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_2$：

$$\begin{aligned} \underset{\text{Rotate}}{\boldsymbol{V}}\ \boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_2 &= \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \underset{\lambda_2}{2}\boldsymbol{e}_2 \\ &= \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{bmatrix} = \underset{\lambda_2}{2} \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \\ &= \lambda_2 \boldsymbol{v}_2 \end{aligned} \tag{20}$$

整个几何变换过程如图 5 中红色箭头所示。



Bk4_Ch13_02.py 绘制图 5。

13.3 再谈行列式值和线性变换

计算本章第一节给出矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值 $\det(\boldsymbol{A})$：

$$\det(\boldsymbol{A}) = \det\left(\begin{bmatrix} 1.25 & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 \end{bmatrix}\right) = 1 \tag{21}$$

本书第 4 章提到过，2 × 2 矩阵行列式值相当于几何变换前后“面积缩放系数”。上式中 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值为 1，因此几何变换前后面积没有任何缩放。

这一点也可以通过 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的行列式值加以验证：

$$\begin{aligned} \det(\boldsymbol{A}) &= \det\left(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}\right) = \det(\boldsymbol{V})\det(\boldsymbol{\Lambda})\det\left(\boldsymbol{V}^{-1}\right) \\ &= \det(\boldsymbol{\Lambda})\det\left(\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{-1}\right) = \det(\boldsymbol{\Lambda}) \\ &= \lambda_1\lambda_2 = \frac{1}{2}\times 2 = 1 \end{aligned} \tag{22}$$

上式说明，如果 $\boldsymbol{A}$ 可以进行特征值分解，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值等于 $\boldsymbol{A}$ 的所有特征值之积。

图 6 给出一个正方形，内部和边缘整齐排列散点。在 $\boldsymbol{A}$ 的作用下，正方形完成“旋转→缩放→旋转”三步几何操作。不难发现，得到的菱形和原始正方形的面积一致，这一点印证了 $|\boldsymbol{A}| = 1$。

回过头来看图 4 右图旋转椭圆，它的半长轴长度为 2，而半短轴长度为 1/2。但是，得到的椭圆面积和原来单位圆面积一样。

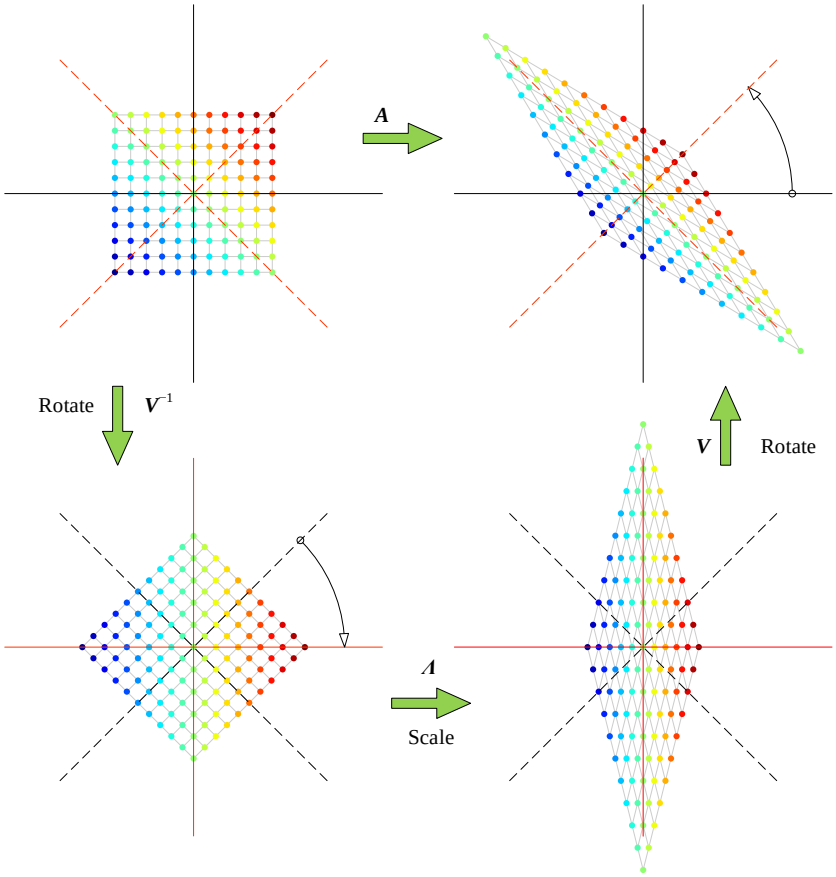


图 6. 正方形经过矩阵 $\boldsymbol{A}$ 线性变换

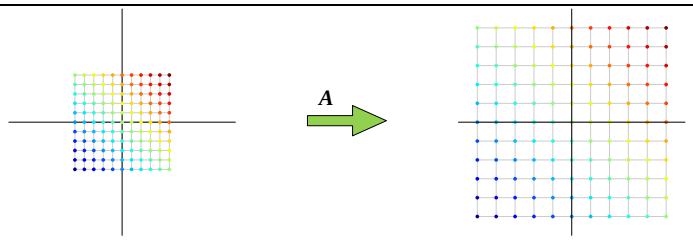
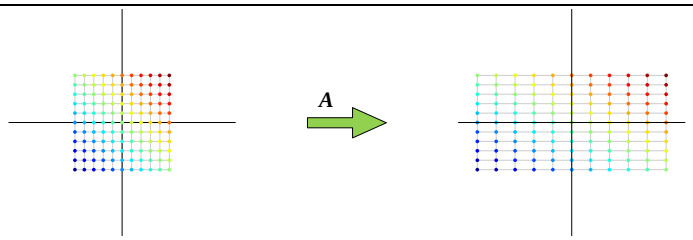
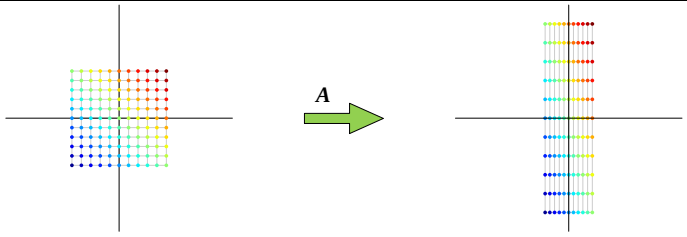
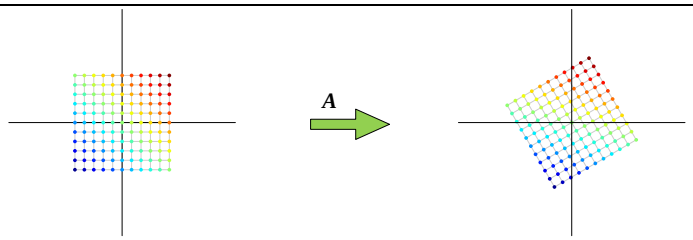
线性变换、特征值、行列式值

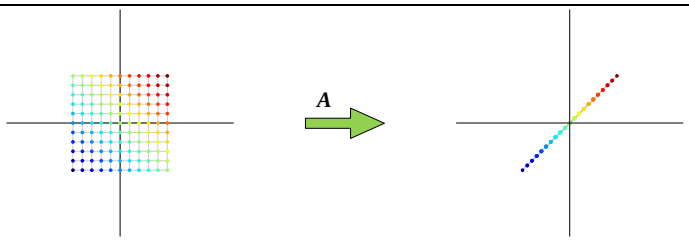
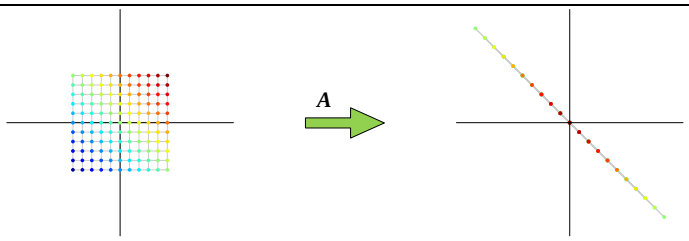
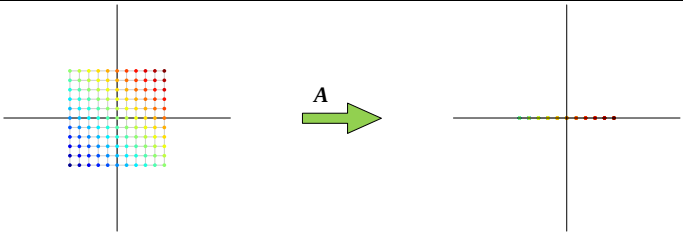
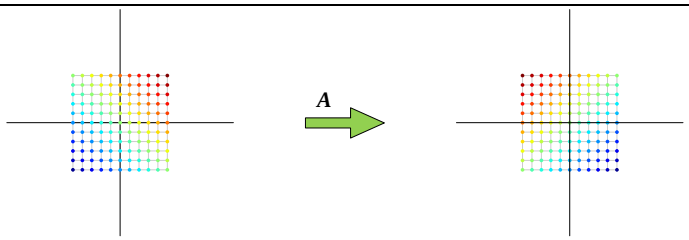
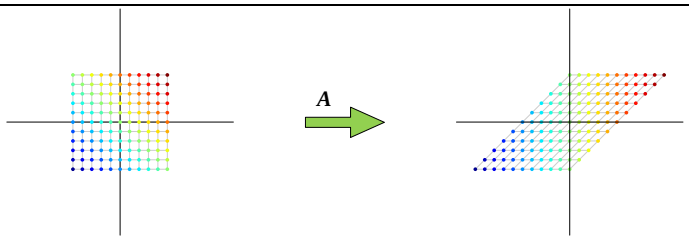
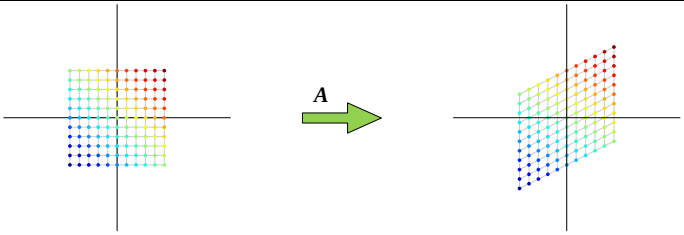
表 1 总结常见 2 × 2 矩阵对应的线性变换、特征值、行列式值。表 1 告诉我们特征值可以为正数、负数、0，甚至是复数。复数特征值都是成对出现，且共轭。本章最后专门讲解特征值分解中出现复数现象。

此外，请大家自行判断表中哪些矩阵可逆，也就是几何变换可逆。

本章用 Streamlit 制作了一个 App，大家可以自行输入矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的值，然后绘制表 1 不同散点图。请参考 Streamlit_Bk4_Ch13_04.py。

表 1. 常见 2 × 2 矩阵对应的线性变换、特征值、行列式值

矩阵 $\boldsymbol{A}$	几何特征
等比例缩放 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1=2\\ \lambda_2=2\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A})=4$	
不等比例缩放 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1=2\\ \lambda_2=1\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A})=2$	
不等比例缩放 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0.5 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1=2\\ \lambda_2=0.5\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A})=1$	
旋转 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\sqrt{3}/2 & -0.5\\ 0.5 & \sqrt{3}/2\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1=\sqrt{3}/2+0.5i\\ \lambda_2=\sqrt{3}/2-0.5i\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A})=1$	

投影 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0.5 & 0.5\\ 0.5 & 0.5\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1=1\\ \lambda_2=0\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A})=0$	
非正交映射 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & -1\\ -1 & 1\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1=2\\ \lambda_2=0\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A})=0$	
横轴投影 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1=1\\ \lambda_2=0\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A})=0$	
纵轴镜像 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1=1\\ \lambda_2=-1\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A})=-1$	
剪切 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 0 & 1\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1=1\\ \lambda_2=1\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A})=1$	
剪切 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0.5 & 1\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1=1\\ \lambda_2=1\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A})=1$	

13.4 对角化、谱分解

可对角化

如果存在一个非奇异矩阵 $\boldsymbol{V}$ 和一个对角矩阵 $\boldsymbol{D}$，使得方阵 $\boldsymbol{A}$ 满足：

$$\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{D} \tag{23}$$

则称 $\boldsymbol{A}$ **可对角化** (diagonalizable)。

只有可对角化的矩阵才能特征值分解：

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{24}$$

其中，矩阵 $\boldsymbol{D}$ 就是特征值矩阵。

如果 $\boldsymbol{A}$ 可以对角化，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的平方可以写成：

$$\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{V}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{V}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{-1}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{D}^2\boldsymbol{V}^{-1}=\boldsymbol{V}\begin{bmatrix}(\lambda_1)^2 & & & \\ & (\lambda_2)^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & (\lambda_D)^2\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{25}$$

类似地，$\boldsymbol{A}$ 的 n 次幂可以写成：

$$\boldsymbol{A}^n=\boldsymbol{V}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{V}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{-1}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{D}^n\boldsymbol{V}^{-1}=\boldsymbol{V}\begin{bmatrix}(\lambda_1)^n & & & \\ & (\lambda_2)^n & & \\ & & \ddots & \\ & & & (\lambda_D)^n\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{26}$$

谱分解

特别地，如果 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵，$\boldsymbol{A}$ 的特征值分解可以写成：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}&=\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\\ &=\lambda_1\boldsymbol{v}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}+\lambda_2\boldsymbol{v}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}+\cdots\lambda_D\boldsymbol{v}_D\boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}=\sum_{j=1}^{D}\lambda_j\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{v}_j^{\mathrm{T}}\\ &=\lambda_1\boldsymbol{v}_1\otimes\boldsymbol{v}_1+\lambda_2\boldsymbol{v}_2\otimes\boldsymbol{v}_2+\cdots\lambda_D\boldsymbol{v}_D\otimes\boldsymbol{v}_D=\sum_{j=1}^{D}\lambda_j\boldsymbol{v}_j\otimes\boldsymbol{v}_j\end{aligned} \tag{27}$$

其中，$\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵，满足 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}$。

上式告诉我们为什么对称矩阵的特征分解又叫**谱分解** (spectral decomposition)，因为特征值分解将矩阵拆解成一系列特征值和特征向量张量积乘积之和，就好比将白光分解成光谱中各色光一样。

再进一步，将 $\boldsymbol{V}$ 整理到 (27) 等式的左边：

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{\Lambda} \tag{28}$$

同样将 $\boldsymbol{V}$ 写成其列向量并展开上式，

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}} \boldsymbol{A} \underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_D \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Lambda}} \tag{29}$$

观察上式，我们发现，当 $i = j$ 时，方阵对角线元素满足：

$$\boldsymbol{v}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j = \lambda_j \tag{30}$$

当 $i \neq j$ 时，方阵非对角线元素满足：

$$\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j = 0 \tag{31}$$

谱分解格拉姆矩阵

本书中见到的对称矩阵多数是格拉姆矩阵。对于数据矩阵 $\boldsymbol{X}$，它的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 为 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$。$\boldsymbol{G}$ 就是 (29) 中的矩阵 $\boldsymbol{A}$，代入得到：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_D \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{V}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Lambda}} \tag{32}$$

特别地，如果 $\boldsymbol{X}$ 列满秩，$\boldsymbol{G}$ 可逆，$\boldsymbol{G}$ 逆矩阵的特征值分解为：

$$\boldsymbol{G}^{-1} = \boldsymbol{V} \underbrace{\begin{bmatrix} 1/\lambda_1 & & & \\ & 1/\lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1/\lambda_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Lambda}^{-1}} \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{33}$$

令 $\boldsymbol{y}_j = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_j$。如图 7 所示，由于 $\boldsymbol{y}_j$ 是单位矩阵，矩阵乘积 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_j$ 相当于数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 span($\boldsymbol{v}_j$) 投影结果为 $\boldsymbol{y}_j$。

(32) 可以写成：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{y}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_1 & \boldsymbol{y}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_2 & \cdots & \boldsymbol{y}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_D \\ \boldsymbol{y}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_1 & \boldsymbol{y}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_2 & \cdots & \boldsymbol{y}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{y}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_1 & \boldsymbol{y}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_2 & \cdots & \boldsymbol{y}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{V}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Lambda}} \tag{34}$$

观察上式，我们发现当 $i \neq j$ 时，$\boldsymbol{y}_i$ 和 $\boldsymbol{y}_j$ 正交。我们在本书第 10 章介绍过这一结论，上述推导让我们“知其所以然”。

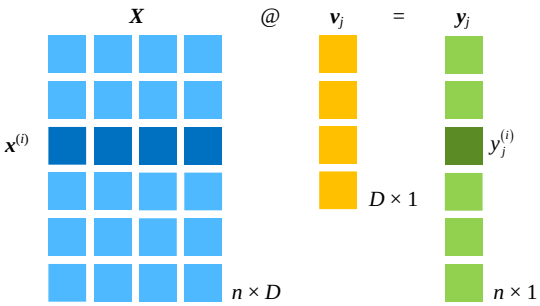


图 7. 数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 span($\boldsymbol{v}_j$) 投影结果为 $\boldsymbol{y}_j$

注意，(32) 上式中矩阵每个元素显然都是标量。本书之前一直强调，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。

(34) 对角线元素显然可以写成 L^2 范数：

$$\left\| \boldsymbol{y}_j \right\|_2^2 = \left\| \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_j \right\|_2^2 = \lambda_j \tag{35}$$

几何视角

该怎么理解 (35)？

我们还是要拿出看家本领——几何视角。

如图 8 所示，用散点 ● 代表数据矩阵 $\boldsymbol{X}$，散点 ● 向 span($\boldsymbol{v}_j$) 投影结果为 $\boldsymbol{y}_j$，即图中 ×。$\boldsymbol{y}_j$ 中的每个值就是 × 到原点的距离。

图 8 中红点 ● 代表矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的第 i 行行向量为 $\boldsymbol{x}^{(i)}$。$\boldsymbol{x}^{(i)}$ 向 $\boldsymbol{v}_j$ 投影结果 $y_j^{(i)}$ 就是 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 在 span($\boldsymbol{v}_j$) 的坐标：

$$y_j^{(i)} = \boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{v}_j \tag{36}$$

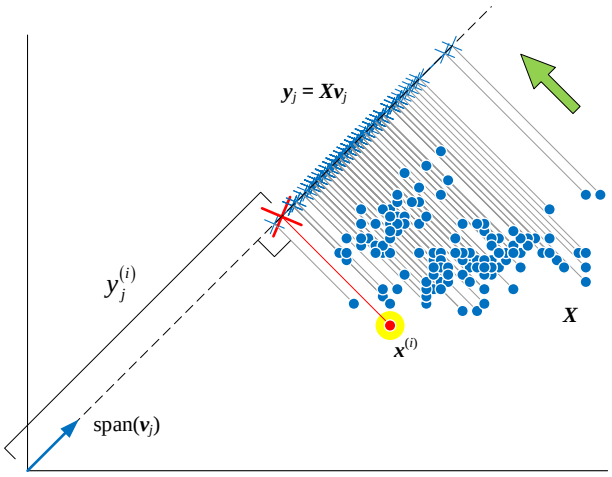


图 8. 数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 span($\boldsymbol{v}_j$) 投影结果为 $\boldsymbol{y}_j$，几何视角

有了这个视角，我们知道 (35) 中 $\|\boldsymbol{y}_j\|_2^2$ 代表 $y_j^{(i)}$ 到原点距离 (有正负) 的平方和，即：

$$\|\boldsymbol{y}_j\|_2^2 = \left(y_j^{(1)}\right)^2 + \left(y_j^{(2)}\right)^2 + \cdots \left(y_j^{(n)}\right)^2 = \lambda_j \tag{37}$$

注意，这些距离的平方和恰好等于特征值 λ_j。

若 (34) 中特征值 λ_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。数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 朝不同特征向量 $\boldsymbol{v}$ 投影，得到的 $\|\boldsymbol{y}\|_2^2 = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}\|_2^2$ 有大有小。

如果某个特征值为 0，这说明在它之前的特征向量已经“解释了”矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的所有成分。轮到之后的特征向量，投影分量必然为 0。

有大小之分，就意味存在优化问题。我们先给结论，在 $\mathbb{R}^D$ 有无数个 $\boldsymbol{v}$ 中，$\boldsymbol{X}$ 朝第一特征向量 $\boldsymbol{v}_1$ 投影对应的 $\|\boldsymbol{y}_1\|_2^2 = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1\|_2^2$ 最大，最大值为 λ_1。本书第 18 章将提供优化视角告诉我们“为什么”。

以鸢尾花为例

本书第 10 章计算了鸢尾花数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$，如图 9 所示。图 9 中 $\boldsymbol{G}$ 中元素没有保留任何小数位。

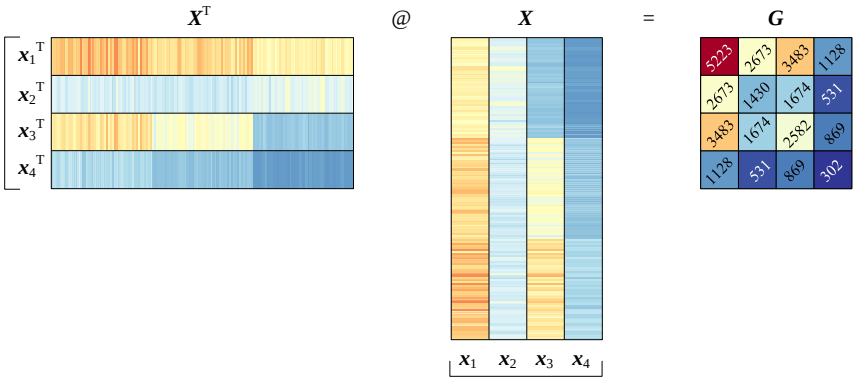


图 9. 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的格拉姆矩阵，图片来自本书第 10 章

格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 为对称矩阵，对 $\boldsymbol{G}$ 特征值分解得到：

$$\boldsymbol{G}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}0.75 & 0.28 & 0.50 & 0.32\\ 0.38 & 0.54 & -0.67 & -0.31\\ 0.51 & -0.70 & -0.05 & -0.48\\ 0.16 & -0.34 & -0.53 & 0.75\end{bmatrix}\begin{bmatrix}9208.3 & & & \\ & 315.4 & & \\ & & 11.9 & \\ & & & 3.5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.75 & 0.28 & 0.50 & 0.32\\ 0.38 & 0.54 & -0.67 & -0.31\\ 0.51 & -0.70 & -0.05 & -0.48\\ 0.16 & -0.34 & -0.53 & 0.75\end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{38}$$

上式中，$\boldsymbol{V}$ 仅保留两位小数位，特征值仅保留一位小数位。

(38) 也回答了本书第 10 章矩阵 $\boldsymbol{V}$ 从哪里来的问题。除了特征值分解，本书第 15、16 章介绍的奇异值分解也可以帮助我们获得矩阵 $\boldsymbol{V}$。

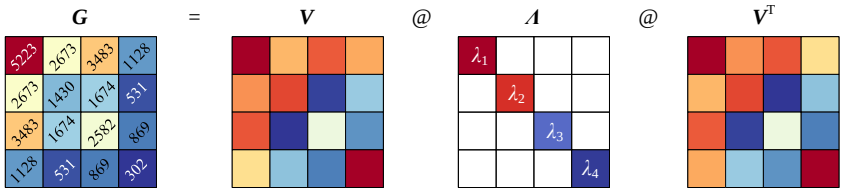


图 10. 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的格拉姆矩阵的特征值分解

利用谱分解方式展开 (38) 得到：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{G}&=\lambda_1\boldsymbol{v}_1\otimes\boldsymbol{v}_1+\lambda_2\boldsymbol{v}_2\otimes\boldsymbol{v}_2+\lambda_3\boldsymbol{v}_3\otimes\boldsymbol{v}_3+\lambda_4\boldsymbol{v}_4\otimes\boldsymbol{v}_4\\&=9208.3\boldsymbol{v}_1\otimes\boldsymbol{v}_1+315.4\boldsymbol{v}_2\otimes\boldsymbol{v}_2+11.9\boldsymbol{v}_3\otimes\boldsymbol{v}_3+3.5\boldsymbol{v}_4\otimes\boldsymbol{v}_4\end{aligned} \tag{39}$$

由于 $\boldsymbol{V}$ 是规范正交基，因此在 $\mathbb{R}^4$ 空间中，$\boldsymbol{V}$ 的作用仅仅是旋转。

而真正决定具体哪个 $\boldsymbol{v}_j$“更重要”的是特征值 λ_j 大小。

观察上式容易发现，随着特征值 λ_j 不断减小，对应 $\boldsymbol{v}_j \otimes \boldsymbol{v}_j$ 的影响力也在衰减。图 11 中五幅热图采用相同色谱，$\lambda_1 \boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1$ 影响力最大，剩下三个成分影响几乎可以忽略不计。根据本书第 10 章代码，请大家自行编写代码绘制本节热图。

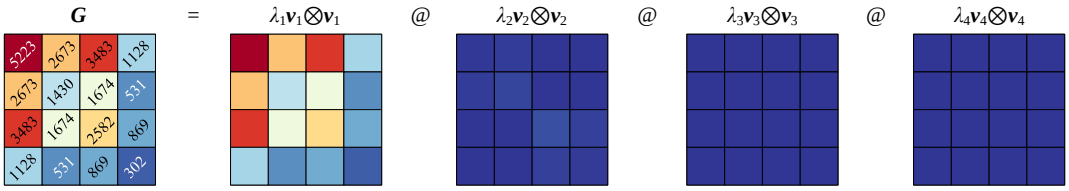


图 11. 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的格拉姆矩阵的谱分解

13.5 聊聊特征值

几何视角

本书第 4 章在讲解行列式值时，简单介绍过特征值。从几何角度来看，如图 12 (a) 所示，当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的形状为 2×2 时，以它的两个列向量 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 为边的平行四边形面积就是 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值。如图 12 (b) 所示，当 $\boldsymbol{A}$ 的形状为 3×3 时，$\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 为边的平行六面体体积便是 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值。

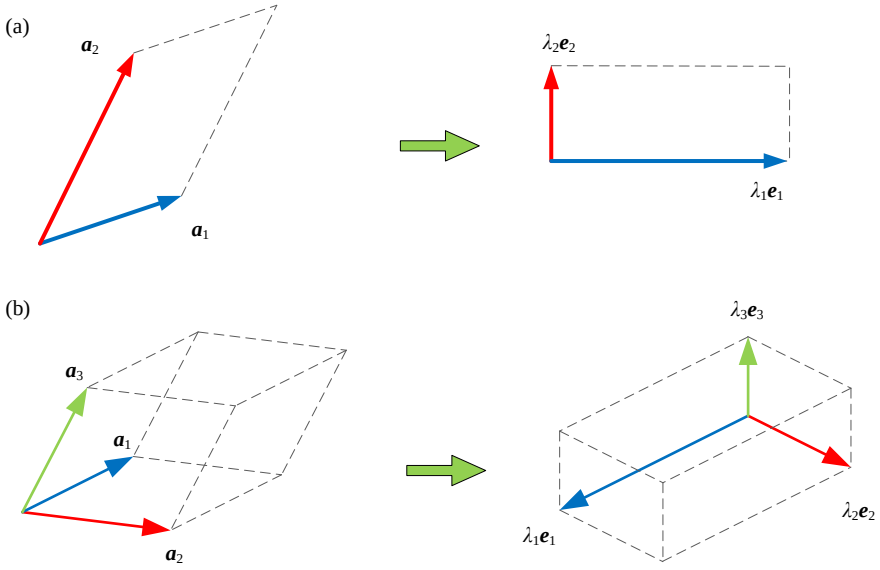


图 12. 特征值的几何性质

比如，给定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}3 & 2\\ 1 & 4\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{a}_1=\begin{bmatrix}3\\ 1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{a}_2=\begin{bmatrix}2\\ 4\end{bmatrix} \tag{40}$$

$\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 为边的平行四边形面积为 10，即 $|\boldsymbol{A}| = 10$。

对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 特征值分解后得到的特征值写成矩阵形式，并分别作用于 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$：

$$\boldsymbol{\Lambda}=\begin{bmatrix}5 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases}\boldsymbol{\lambda}_1=\lambda_1\boldsymbol{e}_1=5\boldsymbol{e}_1\\ \boldsymbol{\lambda}_2=\lambda_2\boldsymbol{e}_2=2\boldsymbol{e}_2\end{cases} \tag{41}$$

如图 12 (a) 所示，$\lambda_1\boldsymbol{e}_1$ 和 $\lambda_2\boldsymbol{e}_2$ 为边的平行四边形为矩形。容易计算矩形的面积为 $\lambda_1\lambda_2 = 10$，即 $|\boldsymbol{\Lambda}| = \lambda_1\lambda_2$。图 12 (a) 左右两个图形的面积相同，即$|\boldsymbol{A}| = |\boldsymbol{\Lambda}| = 10$。

从几何角度来看，对角化实际上就是，平行四边形转化为矩形，或者，平行六面体转化为立方体的过程，如图 12 (b)。

如图 13 所示，当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 非满秩时，也就是说 $\boldsymbol{A}$ 的列向量线性相关。如果 $\boldsymbol{A}$ 可以对角化，特征值分解后至少一个特征值为 0。这样的话，得到的立方体的体积为 0。也就是说，原来的平行六面体体积也为 0，即 $|\boldsymbol{A}| = 0$。从线性映射角度来看，$\boldsymbol{A}$ 起到降维作用。

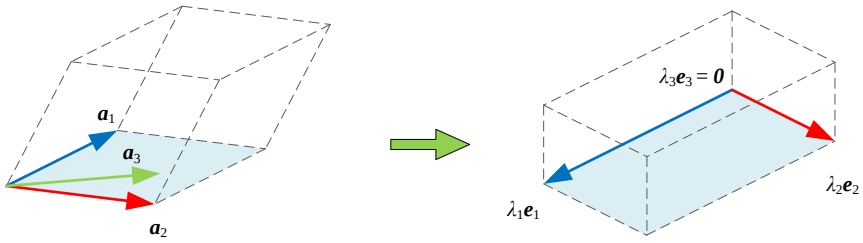


图 13. 特征值的几何性质，线性相关

重要性质

下面介绍特征值重要性质。

前文几次提到，给定矩阵 $\boldsymbol{A}$，其特征值 λ 和特征向量 $\boldsymbol{v}$ 关系为：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}=\lambda\boldsymbol{v} \tag{42}$$

$\boldsymbol{A}$ 标量积 $k\boldsymbol{A}$ 对应的特征值为 λk，即，

$$(k\boldsymbol{A})\boldsymbol{v}=(k\lambda)\boldsymbol{v} \tag{43}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}^2$ 的特征向量仍然为 $\boldsymbol{v}$，特征值为 λ^2：

$$\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{v}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{v})=\boldsymbol{A}(\lambda\boldsymbol{v})=\lambda(\boldsymbol{A}\boldsymbol{v})=\lambda^2\boldsymbol{v} \tag{44}$$

推广上式，n 为任意整数，$\boldsymbol{A}^n$ 的特征值为 λ^n：

$$\boldsymbol{A}^n\boldsymbol{v}=\lambda^n\boldsymbol{v} \tag{45}$$

(45) 也可以推广得到：

$$\boldsymbol{A}^n\boldsymbol{V}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^n \tag{46}$$

如果逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 存在，$\boldsymbol{A}^{-1}$ 的特征向量仍为 $\boldsymbol{v}$，特征值为 $1/\lambda$：

$$\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{v}=\frac{1}{\lambda}\boldsymbol{v} \tag{47}$$

前文提到，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值为其特征值乘积：

$$\det(\boldsymbol{A})=\prod_{j=1}^{D}\lambda_j \tag{48}$$

$\boldsymbol{A}$ 标量积 $k\boldsymbol{A}$ 的行列式值为：

$$\det(k\boldsymbol{A})=k^D\prod_{j=1}^{D}\lambda_j \tag{49}$$

这相当于“平行体”和“正立方体”每个维度上边长都等比例缩放，缩放系数为 k。而体积的缩放比例为 k^D。

如果方阵 $\boldsymbol{A}$ 的形状为 $D\times D$，且 $\boldsymbol{A}$ 的秩 (rank) 为 r，则 $\boldsymbol{A}$ 有 $D-r$ 个特征值为 0。

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的迹等于其特征值之和：

$$\operatorname{tr}(\boldsymbol{A})=\sum_{i=1}^{D}\lambda_i \tag{50}$$

我们将会在**主成分分析** (Principal Component Analysis, PCA) 中用到 (50) 结论。

13.6 特征值分解中的复数现象

本章前文在对实数矩阵进行特征值分解时，我们偶尔发现特征值、特征向量存在虚数。这一节讨论这个现象。

举个例子

给定如下 2×2 实数矩阵 $\boldsymbol{A}$：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix} \tag{51}$$

对 $\boldsymbol{A}$ 进行特征值分解，得到两个特征值分别为：

$$\lambda_1 = 1+i, \quad \lambda_2 = 1-i \tag{52}$$

共轭特征值、共轭特征向量

这对共轭特征值出现的原因是，方阵 $\boldsymbol{A}$ 特征方程有一对复数解：

$$\left|\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}\right| = 0 \tag{53}$$

求解出的非实数的特征值会以共轭复数形式成对出现，因此它们也常被称作**共轭特征值** (conjugate eigenvalues)。所谓**共轭复数** (complex conjugate)，是指两个实部相等，虚部互为相反数的复数。

(51) 中 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 λ_1 和 λ_2 对应的特征向量分别是：

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} i \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} -i \\ 1 \end{bmatrix} \tag{54}$$

这样的特征向量被称作**共轭特征向量** (conjugate eigenvector)。

展开来说，本书前文讲述的向量矩阵等概念都是建立在 $\mathbb{R}^n$ 上，我们可以把同样的数学工具推广到复数空间 $\mathbb{C}^n$ 上。

$\mathbb{C}^n$ 中的任意复向量 $\boldsymbol{x}$ 的共轭向量 $\bar{\boldsymbol{x}}$，也是 $\mathbb{C}^n$ 中的向量。$\bar{\boldsymbol{x}}$ 中每个元素是 $\boldsymbol{x}$ 对应元素的共轭复数。比如，给定复数向量 $\boldsymbol{x}$ 和对应的共轭向量 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 如下：

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 1+i \\ 3-2i \end{bmatrix}, \quad \bar{\boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} 1-i \\ 3+2i \end{bmatrix} \tag{55}$$

一个特殊的 2 × 2 矩阵

给定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 如下：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a & -b \\ b & a \end{bmatrix} \tag{56}$$

其中，a 和 b 均为实数，且不同时等于 0。

容易求得 $\boldsymbol{A}$ 的复数特征值为一对共轭复数：

$$\lambda = a \pm bi \tag{57}$$

两者的关系如图 14 所示。图 14 横轴为实部，纵轴为虚部。

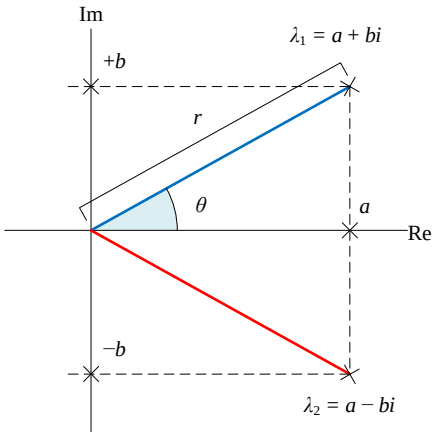


图 14. 一对共轭特征值

图 14 中，两个共轭特征值的模相等，令 r 为复数特征值的模，容易发现，r 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 行列式值的平方根：

$$r = |\lambda| = \sqrt{a^2 + b^2} = \sqrt{|\boldsymbol{A}|} \tag{58}$$

因此，$\boldsymbol{A}$ 可以写成：

$$\boldsymbol{A} = \sqrt{a^2+b^2}\begin{bmatrix} \frac{a}{\sqrt{a^2+b^2}} & \frac{-b}{\sqrt{a^2+b^2}} \\ \frac{b}{\sqrt{a^2+b^2}} & \frac{a}{\sqrt{a^2+b^2}} \end{bmatrix} = r\begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{R}}\underbrace{\begin{bmatrix} r & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{S}} \tag{59}$$

图 14 所示复平面上，θ 为 (0, 0) 到 (a, b) 线段和水平轴正方向夹角，θ 也称作为复数 $\lambda_1 = a + bi$ 的辐角。

几何视角

有了上述分析，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的几何变换就变得很清楚，$\boldsymbol{A}$ 是缩放 ($\boldsymbol{S}$) 和旋转 ($\boldsymbol{R}$) 的复合。给平面上某个 $\boldsymbol{x}_0$，将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 不断作用在 $\boldsymbol{x}_0$ 上：

$$\boldsymbol{x}_n = \boldsymbol{A}^n \boldsymbol{x}_0 \tag{60}$$

如图 15 (a) 所示，当缩放系数 $r = 1.2 > 1$，我们可以看到，随着 n 增大，向量 $\boldsymbol{x}_n$ 不断旋转向外发散。

如图 15 (b) 所示，当缩放系数 $r = 0.8 < 1$，随着 n 增大，向量 $\boldsymbol{x}_n$ 不断旋转向内收缩。

注意，图 14 中平面是复平面，横轴是实数轴，纵轴是虚数轴。而图 15 则是实数 x_1x_2 平面。

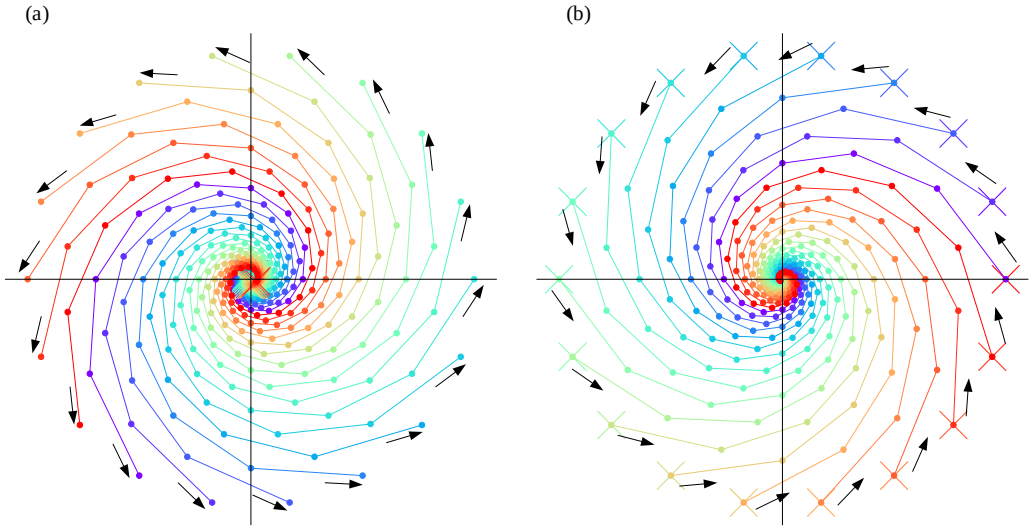


图 15. 在矩阵 $\boldsymbol{A}$ 几何变换重复下，向量的 $\boldsymbol{x}$ 位置变化

`Bk4_Ch13_03.py` 绘制图 15。

下图四幅子图其实是一张图，它代表着特征值分解的几何视角——“旋转 → 缩放 → 旋转”。这一点对于理解特征值分解尤其重要。

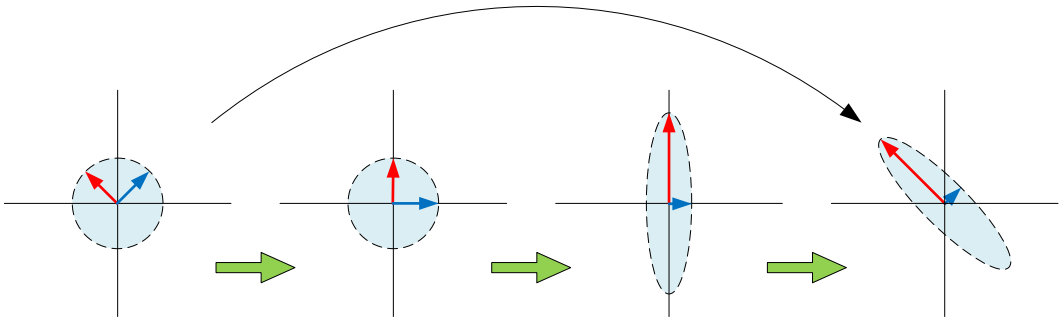


图 16. 总结本章重要内容的四幅图

此外，请大家特别注意对称矩阵的特征值分解又叫谱分解，结果中 $\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵，即规范正交基。

注意，这幅图中展示的几何变换对应的是谱分解，即对称矩阵的特征值分解。更准确地说，谱分解得到的正交矩阵 $\boldsymbol{V}$ 的行列式值为 1 时，$\boldsymbol{V}$ 才叫旋转矩阵，应的几何操作才是纯粹的旋转。当正交矩阵 $\boldsymbol{V}$ 的行列式值为−1 时，$\boldsymbol{V}$ 对应的几何操作是“旋转 + 镜像”。但是为了方便理解，本书很多场合将特征值分解对应的几何操作“简单粗暴”地写成“旋转 → 缩放 → 旋转”。

本章最后以我们在对实数矩阵分解中遇到的复数现象为例，介绍了共轭特征值和共轭特征向量。注意，复数矩阵自有一套运算体系，比如复数矩阵的转置叫做**埃尔米特转置** (Hermitian transpose)，记号一般用上标 $^{\mathrm{H}}$。复数矩阵中的“正交矩阵”叫做**酉矩阵**、**幺正矩阵** (unitary matrix)。再比如，复数矩阵中的“对称矩阵”叫做**正规矩阵** (normal matrix)。复数矩阵相关内容不在本书范围内，感兴趣的读者可以自行学习。

14 Dive into Eigen Decomposition
深入特征值分解

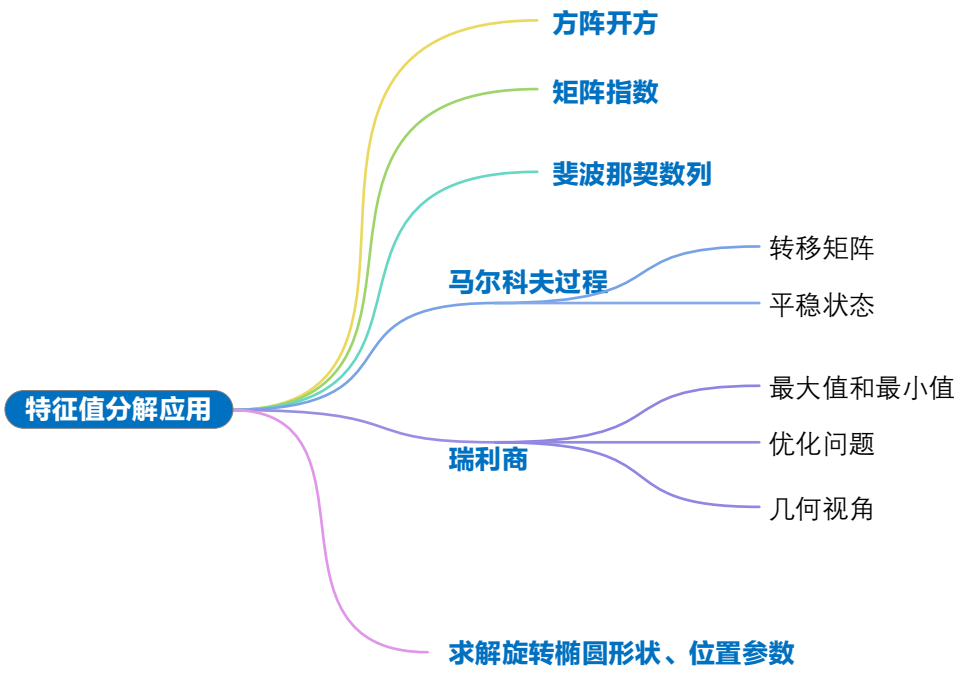
无处不在的特征值分解

生命之哀，并非求其上，却得其中；而是求其下，必得其下。

The greater danger for most of us lies not in setting our aim too high and falling short; but in setting our aim too low, and achieving our mark.

—— 米开朗琪罗 (Michelangelo) | 文艺复兴三杰之一 | 1475 ~ 1564

- `numpy.meshgrid()` 产生网格化数据
- `numpy.prod()` 指定轴的元素乘积
- `numpy.linalg.inv()` 矩阵求逆
- `numpy.linalg.eig()` 特征值分解
- `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
- `seaborn.heatmap()` 绘制热图



14.1 方阵开方

本章是上一章的延续，本章继续探讨特征值分解及其应用。这一节介绍利用特征值分解完成方阵开方。

如果方阵 $\boldsymbol{A}$ 可以写作：

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{B} \tag{1}$$

$\boldsymbol{B}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的平方根。利用特征值分解，可以求得 $\boldsymbol{A}$ 的平方根。

首先对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 特征值分解：

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{2}$$

令：

$$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{3}$$

$\boldsymbol{B}^2$ 可以写成：

$$\boldsymbol{B}^2=\left(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{V}^{-1}\right)^2=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\underbrace{\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{V}}_{\boldsymbol{I}}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{V}^{-1}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}=\boldsymbol{A} \tag{4}$$

即：

$$\boldsymbol{A}^{\frac{1}{2}}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{5}$$

类似地，方阵 $\boldsymbol{A}$ 的立方根可以写成：

$$\boldsymbol{A}^{\frac{1}{3}}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{3}}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{6}$$

继续推广，可以得到：

$$\boldsymbol{A}^{p}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{p}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{7}$$

其中，p 为任意实数。

举个例子

给定如下方阵 $\boldsymbol{A}$，求解如下矩阵的平方根：

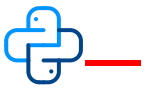
$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1.25 & -0.75\\ -0.75 & 1.25\end{bmatrix} \tag{8}$$

对 $\boldsymbol{A}$ 进行特征值分解得到：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1.25 & -0.75\\ -0.75 & 1.25\end{bmatrix}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}=\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 1/2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix} \tag{9}$$

矩阵 $\boldsymbol{B}$ 为：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{B}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{V}^{-1}&=\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sqrt{2} & 0\\ 0 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix}\\ &=\begin{bmatrix}1 & 1/2\\ -1 & 1/2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3\sqrt{2}/4 & -\sqrt{2}/4\\ -\sqrt{2}/4 & 3\sqrt{2}/4\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{10}$$



`Bk4_Ch14_01.py` 求解上述例子中 $\boldsymbol{A}$ 的平方根。

14.2 矩阵指数：幂级数的推广

给定一个标量 a，指数 e^a 可以用幂级数展开表达：

$$e^{a}=\exp(a)=1+a+\frac{1}{2!}a^{2}+\frac{1}{3!}a^{3}+\cdots \tag{11}$$

对于 (11) 这个式子感到生疏的读者，可以回顾《数学要素》第 17 章有关泰勒展开内容。

类似地，对于方阵 $\boldsymbol{A}$，可以定义**矩阵指数** (matrix exponential) $e^{\boldsymbol{A}}$ 为一个收敛幂级数：

$$e^{\boldsymbol{A}}=\exp(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}+\frac{1}{2!}\boldsymbol{A}^{2}+\frac{1}{3!}\boldsymbol{A}^{3}+\cdots \tag{12}$$

如果 $\boldsymbol{A}$ 可以特征值分解得到如下等式，计算 (12) 则容易很多：

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{13}$$

其中，

$$\boldsymbol{\Lambda}=\begin{bmatrix}\lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D\end{bmatrix} \tag{14}$$

利用特征值分解，$\boldsymbol{A}^k$ 可以写作：

$$\boldsymbol{A}^k = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^k\boldsymbol{V}^{-1} \tag{15}$$

其中，k 为非负整数。

将 (15) 代入 (12)，得到：

$$\begin{aligned} e^{\boldsymbol{A}} &= \exp(\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{-1} + \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1} + \frac{1}{2!}\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^2\boldsymbol{V}^{-1} + \frac{1}{3!}\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^3\boldsymbol{V}^{-1} + \cdots \\ &= \boldsymbol{V}\left(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\Lambda} + \frac{1}{2!}\boldsymbol{\Lambda}^2 + \frac{1}{3!}\boldsymbol{\Lambda}^3 + \cdots\right)\boldsymbol{V}^{-1} \end{aligned} \tag{16}$$

特别地，对角方阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 矩阵指数为：

$$e^{\boldsymbol{\Lambda}} = \exp(\boldsymbol{\Lambda}) = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{\Lambda} + \frac{1}{2!}\boldsymbol{\Lambda}^2 + \frac{1}{3!}\boldsymbol{\Lambda}^3 + \cdots \tag{17}$$

容易计算对角阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 矩阵指数 $e^{\boldsymbol{\Lambda}}$：

$$\begin{aligned} e^{\boldsymbol{\Lambda}} &= \exp(\boldsymbol{\Lambda}) = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{\Lambda} + \frac{1}{2!}\boldsymbol{\Lambda}^2 + \frac{1}{3!}\boldsymbol{\Lambda}^3 + \cdots \\ &= \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D \end{bmatrix} + \frac{1}{2!}\begin{bmatrix} \lambda_1^2 & & & \\ & \lambda_2^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D^2 \end{bmatrix} + \cdots \\ &= \lim_{n\to\infty}\begin{bmatrix} \sum_{k=0}^{n}\frac{1}{k!}\lambda_1^k & & & \\ & \sum_{k=0}^{n}\frac{1}{k!}\lambda_2^k & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sum_{k=0}^{n}\frac{1}{k!}\lambda_D^k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{\lambda_1} & & & \\ & e^{\lambda_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{\lambda_D} \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{18}$$

将 (17) 代入 (16)，得到：

$$\exp(\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{V}\exp(\boldsymbol{\Lambda})\boldsymbol{V}^{-1} \tag{19}$$

将 (18) 代入 (19)，得到：

$$\exp(\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{V}\begin{bmatrix} e^{\lambda_1} & & & \\ & e^{\lambda_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{\lambda_D} \end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{20}$$

Python 中可以用 `scipy.linalg.expm()` 计算矩阵指数。

14.3 斐波那契数列：求通项式

本系列丛书《数学要素》第 14 章介绍过**斐波那契数列** (Fibonacci number)，本节介绍如何使用特征值分解推导得到斐波那契数列通项式。

斐波那契数列可以通过如下**递归** (recursion) 方法获得：

$$\begin{cases} F_0 = 0 \\ F_1 = F_2 = 1 \\ F_n = F_{n-1} + F_{n-2}, \quad n > 2 \end{cases} \tag{21}$$

包括第 0 项，斐波那契数列的前 11 项为：

$$0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55 \tag{22}$$

构造列向量

将斐波那契数列连续每两项写成列向量形式：

$$\boldsymbol{x}_0 = \begin{bmatrix} F_0 \\ F_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}_1 = \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}_2 = \begin{bmatrix} F_2 \\ F_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}_3 = \begin{bmatrix} F_3 \\ F_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}_4 = \begin{bmatrix} F_4 \\ F_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 5 \end{bmatrix}, \cdots \tag{23}$$

图 1 所示为列向量连续变化过程，能够看到它们逐渐收敛到一条直线上。这条直线通过原点，斜率实际上是**黄金分割** (golden ratio)：

$$\varphi = \frac{\sqrt{5}+1}{2} \approx 1.61803 \tag{24}$$

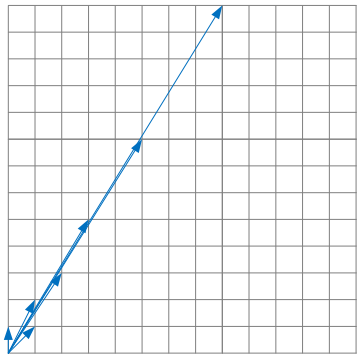


图 1. 斐波那契数列列向量连续变化过程

连续列向量间关系

数列的第 $k+1$ 项 x_{k+1} 和第 k 项 x_k 之间的关系可以写成如下矩阵运算：

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \begin{bmatrix} F_{k+1} \\ F_{k+2} \end{bmatrix} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{A}\begin{bmatrix} F_k \\ F_{k+1} \end{bmatrix} \tag{25}$$

其中

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \tag{26}$$

观察上式 $\boldsymbol{A}$，发现 $\boldsymbol{A}$ 对应的几何操作是“剪切 + 镜像”的合成。

有了 (25)，$\boldsymbol{x}_k$ 可以写成：

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_{k-1} = \boldsymbol{A}^2\boldsymbol{x}_{k-2} = \boldsymbol{A}^3\boldsymbol{x}_{k-3} = \cdots = \boldsymbol{A}^k\boldsymbol{x}_0 \tag{27}$$

特征值分解

$\boldsymbol{A}$ 的特征方程为：

$$\lambda^2 - \lambda - 1 = 0 \tag{28}$$

求解 (28)，可以得到两个特征值：

$$\lambda_1 = \frac{1-\sqrt{5}}{2}, \quad \lambda_2 = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \tag{29}$$

然后求得两个特征向量，并建立它们和特征值的关系如下：

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ \dfrac{1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \lambda_1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ \dfrac{1+\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} \tag{30}$$

这样，$\boldsymbol{A}$ 的特征值分解可以写成：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{31}$$

其中，

$$\boldsymbol{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \\ & \lambda_2 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \lambda_1 & \lambda_2 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{V}^{-1} = \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1}\begin{bmatrix} \lambda_2 & -1 \\ -\lambda_1 & 1 \end{bmatrix} \tag{32}$$

$\boldsymbol{x}_k$ 可以写成：

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^k\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{x}_0 \tag{33}$$

将 (32) 代入 (33)，得到：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}_k &= \frac{1}{\lambda_2-\lambda_1}\begin{bmatrix}1 & 1\\ \lambda_1 & \lambda_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_1^k & \\ & \lambda_2^k\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_2 & -1\\ -\lambda_1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}\\ &= \frac{1}{\lambda_2-\lambda_1}\begin{bmatrix}\lambda_2^k-\lambda_1^k\\ \lambda_2^{k+1}-\lambda_1^{k+1}\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{34}$$

即，

$$\begin{bmatrix}F_k\\ F_{k+1}\end{bmatrix} = \frac{1}{\lambda_2-\lambda_1}\begin{bmatrix}\lambda_2^k-\lambda_1^k\\ \lambda_2^{k+1}-\lambda_1^{k+1}\end{bmatrix} \tag{35}$$

确定通项式

因此 F_k 可以写成：

$$F_k = \frac{\lambda_2^k-\lambda_1^k}{\lambda_2-\lambda_1} \tag{36}$$

将 (29) 代入 (36) 得到 F_k 解析式：

$$F_k = \frac{\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^k-\left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^k}{\sqrt{5}} \tag{37}$$

至此，我们通过特征值分解得到斐波那契数列通项式解析式。

14.4 马尔科夫过程的平稳状态

本系列丛书在《数学要素》鸡兔同笼三部曲中虚构了“鸡兔互变”的故事。本节回顾这个故事，并介绍如何用特征值分解求解其平稳状态。

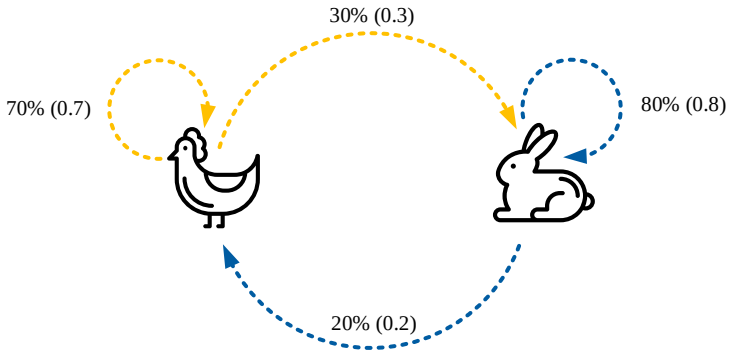


图 2. 鸡兔互变的比例

图 2 描述鸡兔互变的比例，每晚有 30%的小鸡变成小兔，其他小鸡不变；同时，每晚有 20%小兔变成小鸡，其余小兔不变。这个转化的过程叫做**马尔科夫过程** (Markov process)。

马尔科夫过程满足以下三个性质：(1) 可能输出状态有限；(2) 下一步输出的概率仅仅依赖上一步的输出状态；(3) 概率值相对于时间为常数。

“鸡兔互变”这个例子中，第 k 天，鸡兔的比例用列向量 $\boldsymbol{\pi}(k)$ 表示；其中，$\boldsymbol{\pi}(k)$ 第一行元素代表小鸡的比例，第二行元素代表小兔的比例。第 $k+1$ 天，鸡兔的比例用列向量 $\boldsymbol{\pi}(k+1)$ 表示。

图 2 中变化的比例写成方阵 $\boldsymbol{T}$，$\boldsymbol{T}$ 通常叫做**转移矩阵** (transition matrix)。

这样 $k \to k+1$ 变化过程可以写成：

$$k \to k+1: \quad \boldsymbol{T}\boldsymbol{\pi}(k) = \boldsymbol{\pi}(k+1) \tag{38}$$

对于鸡兔互变，$\boldsymbol{T}$ 为：

$$\boldsymbol{T} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.2 \\ 0.3 & 0.8 \end{bmatrix} \tag{39}$$

求平稳状态

观察图 3，我们初步得出结论不管初始状态向量 ($k = 0$) 如何，鸡兔比例最后都达到了一定的平衡，也就是：

$$\boldsymbol{T}\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi} \tag{40}$$

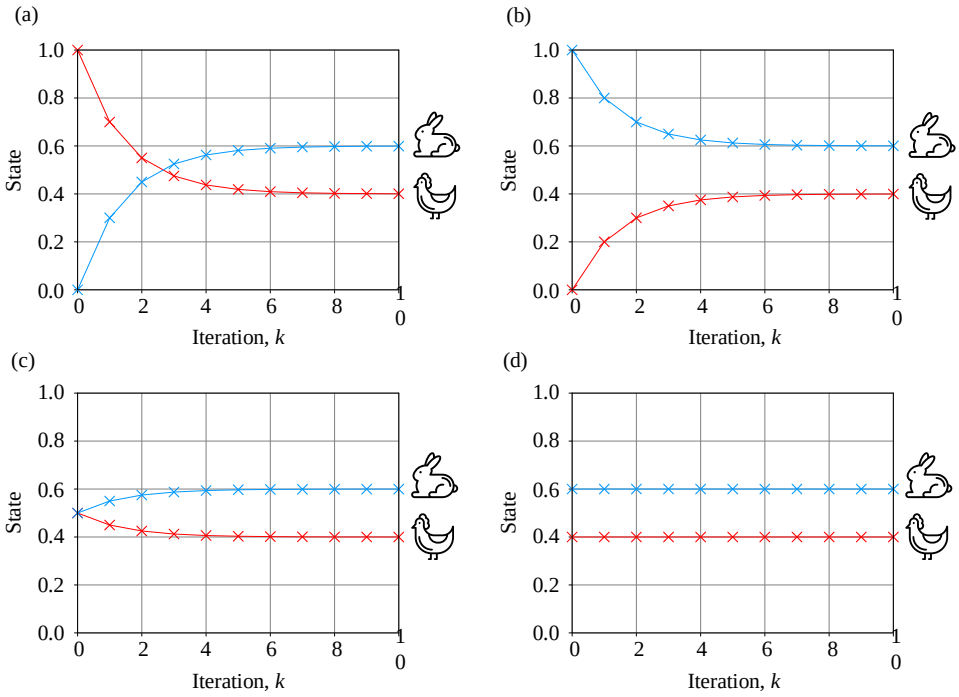


图 3. 不同初始状态条件下平稳状态

有了本书特征值分解相关的知识，相信大家一眼就看出来，(40) 告诉我们 $\boldsymbol{\pi}$ 是 $\boldsymbol{T}$ 的特征向量。对 $\boldsymbol{T}$ 进行特征值分解得到两个单位特征向量：

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} -0.707 \\ 0.707 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} 0.5547 \\ 0.8321 \end{bmatrix} \tag{41}$$

鸡、兔比例非负，且两者之和为 1。因此选择 $\boldsymbol{v}_2$ 来计算 $\boldsymbol{\pi}$：

$$\boldsymbol{\pi} = \frac{1}{0.5547 + 0.8321} \boldsymbol{v}_2 = \frac{1}{0.5547 + 0.8321} \begin{bmatrix} 0.5547 \\ 0.8321 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.4 \\ 0.6 \end{bmatrix} \tag{42}$$

这个 $\boldsymbol{\pi}$ 叫做**平稳状态** (steady state)。

`Bk4_Ch14_02.py` 绘制图 3。

看过本系列丛书《数学要素》一册的读者应该还记得图 4 这幅图，它从几何视角描述了不同初始状态向量条件下，经过连续 12 次变化，向量都收敛于同一方向。

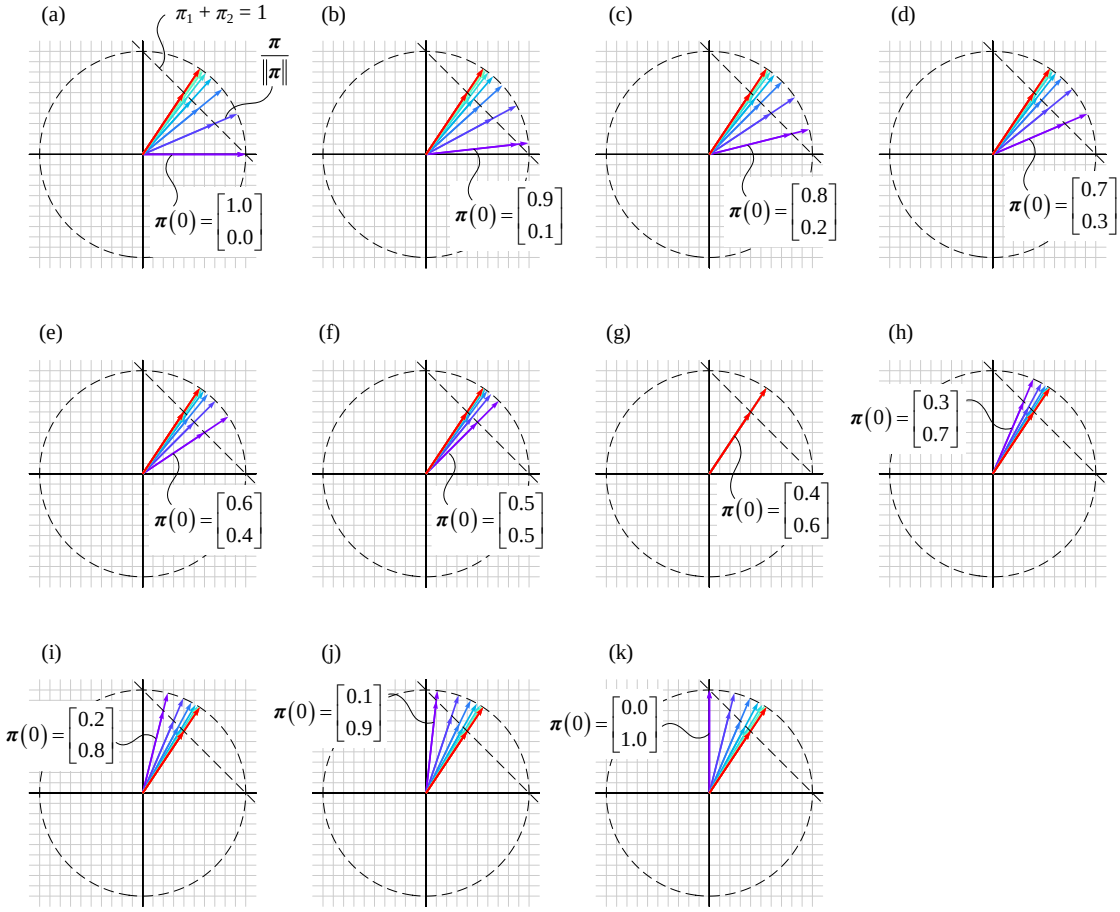


图 4. 连续 12 夜鸡兔互变比例，几何视角，图片来自《数学要素》

在 Bk4_Ch14_02.py 基础上，我们用 Streamlit 做了一个 App，模拟不同鸡兔比例条件下，达到平衡过程的动画。大家可以输入鸡兔比例，也可以改变模拟"夜数"。请大家参考 Streamlit_Bk4_Ch14_02.py。

14.5 瑞利商

瑞利商 (Rayleigh quotient) 在很多机器学习算法中扮演重要角色，瑞利商和特征值分解有着密切关系。本节利用几何视角可视化瑞利商，让大家深入理解瑞利商这个概念。

定义

给定实数对称矩阵 $\boldsymbol{A}$，它的瑞利商定义为：

$$R(\boldsymbol{x}) = \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}} \tag{43}$$

其中，$\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \ldots, x_D]^{\mathrm{T}}$。(43) 中 $\boldsymbol{x}$ 不能为零向量 $\boldsymbol{0}$，也就是说，$x_1, x_2, \ldots, x_D$ 不能同时为 0。

此外，请大家格外注意，上式的分子和分母都是标量。

先给出结论，瑞利商 $R(\boldsymbol{x})$ 的取值范围：

$$\lambda_{\min} \le R(\boldsymbol{x}) \le \lambda_{\max} \tag{44}$$

其中，$\lambda_{\min}$ 和 $\lambda_{\max}$ 分别为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最小和最大特征值。

最大值和最小值

求解 (43) 中 $R(\boldsymbol{x})$ 的最大、最小值，等价于 $R(\boldsymbol{x})$ 分母为定值条件下，求解分子的最大值和最小值。

令 $\boldsymbol{x}$ 为单位向量，即：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \|\boldsymbol{x}\|_2^2 = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \|\boldsymbol{x}\|_2 = 1 \tag{45}$$

$\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵，对其特征值分解得到：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{46}$$

$R(\boldsymbol{x})$ 的分子可以写成：

$$\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Lambda}\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)=\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}\lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D\end{bmatrix}\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right) \tag{47}$$

令

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \tag{48}$$

这样，(48) 可以写成：

$$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}\lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D\end{bmatrix}\boldsymbol{y}=\begin{bmatrix}y_1\\ y_2\\ \vdots\\ y_D\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}\lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y_1\\ y_2\\ \vdots\\ y_D\end{bmatrix}=\lambda_1 y_1^2+\lambda_2 y_2^2+\cdots+\lambda_D y_D^2 \tag{49}$$

类似地，$R(\boldsymbol{x})$ 的分母可以写成：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=y_1^2+y_2^2+\cdots+y_D^2=1 \tag{50}$$

这样，瑞利商就可以简洁地写成以 $\boldsymbol{y}$ 为自变量的函数 $R(\boldsymbol{y})$：

$$R\left(\boldsymbol{y}\right)=\frac{\lambda_1 y_1^2+\lambda_2 y_2^2+\cdots+\lambda_D y_D^2}{y_1^2+y_2^2+\cdots+y_D^2} \tag{51}$$

举个例子

下面，我们以 2 × 2 矩阵为例，讲解如何求解瑞利商。给定 $\boldsymbol{A}$ 为：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1.5 & 0.5\\ 0.5 & 1.5\end{bmatrix} \tag{52}$$

$R(\boldsymbol{x})$ 为：

$$R\left(\boldsymbol{x}\right)=\frac{\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}1.5 & 0.5\\ 0.5 & 1.5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}}{\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}}=\frac{1.5x_1^2+x_1x_2+1.5x_2^2}{x_1^2+x_2^2} \tag{53}$$

$\boldsymbol{A}$ 的两个特征值分别为 $\lambda_1 = 2$，$\lambda_2 = 1$。$R(\boldsymbol{x})$ 等价于 $R(\boldsymbol{y})$，根据 (51)，$R(\boldsymbol{y})$ 写成：

$$R\left(\boldsymbol{y}\right)=\frac{y_1^2+2y_2^2}{y_1^2+y_2^2} \tag{54}$$

推导最值

求解 $R(\boldsymbol{y})$ 的最大、最小值，等价于 $R(\boldsymbol{y})$ 分母为 1 条件下，分子的最大值和最小值。

简单推导 $R(\boldsymbol{y})$ 最大值：

$$R(\boldsymbol{y}) = y_1^2 + 2y_2^2 \le 2\underbrace{\left(y_1^2 + y_2^2\right)}_{1} = 2 \tag{55}$$

$R(\boldsymbol{y})$ 最小值：

$$R(\boldsymbol{y}) = y_1^2 + 2y_2^2 \ge \underbrace{\left(y_1^2 + y_2^2\right)}_{1} = 1 \tag{56}$$

几何视角

下面我们用几何方法来解释瑞利商。

(53) 的分母为 1，意味着分母代表的几何图形是个单位圆，即，

$$x_1^2 + x_2^2 = 1 \tag{57}$$

(53) 分子对应二次函数：

$$f(x_1, x_2) = 1.5x_1^2 + x_1x_2 + 1.5x_2^2 \tag{58}$$

这个二次函数的等高线图如图 5 (a) 所示。$f(x_1, x_2)$ 等高线和单位圆相交的交点中找到 $f(x_1, x_2)$ 在非线性等式约束条件下取得最大值和最小值点。最大特征值 λ_1 对应的特征向量 $\boldsymbol{v}_1$，$\boldsymbol{v}_1$ 这个方向上做一条直线，直线和单位圆交点 (x_1, x_2) 对应的就是瑞利商的最大值点；此时，瑞利商的最大值为 λ_1。

图 6 (a) 所示为 $f(x_1, x_2)$ 曲面，以及单位圆在曲面上的映射得到的曲线。

从优化视角来看，上述问题实际上是个含约束优化问题，本书第 18 章将介绍如何利用拉格朗日乘子法将含约束优化问题转化为无约束优化问题。

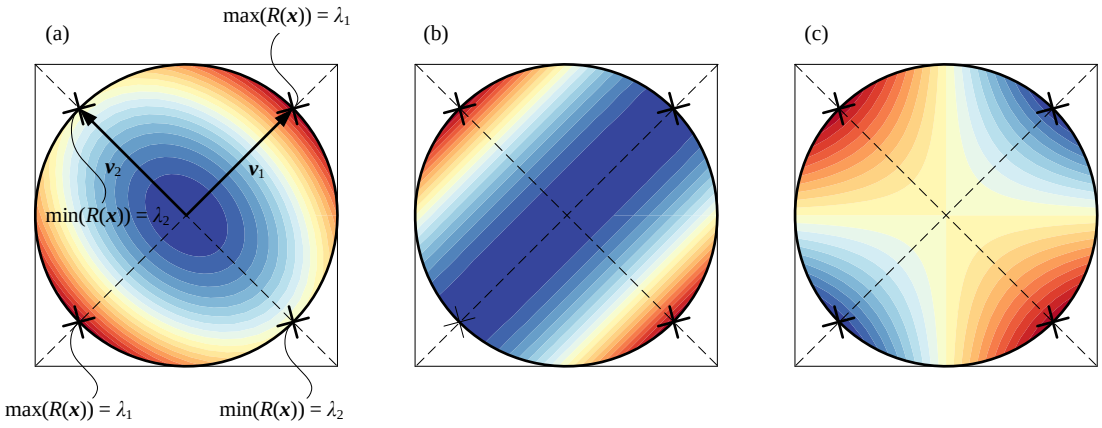


图 5. 平面上可视化 $f(x_1, x_2)$ 和单位圆

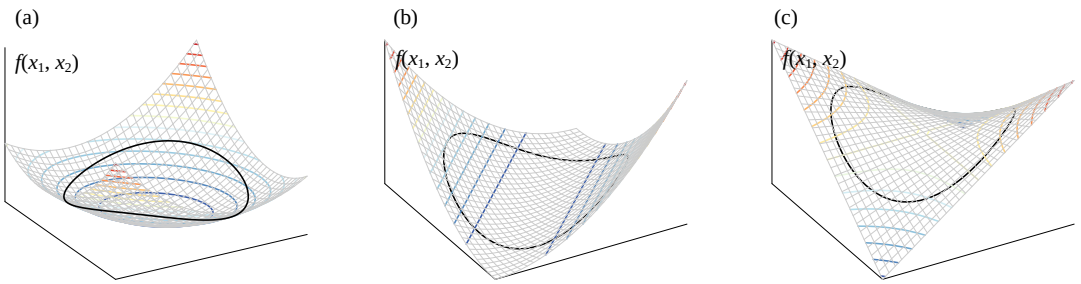


图 6. 三维空间中可视化 $f(x_1, x_2)$ 和单位圆

`Bk4_Ch14_03.py` 绘制图 5 和图 6。

采用单位圆作为限制条件是为了简化瑞利商对应的优化问题，而且单位圆正好是单位向量终点的落点。实际上满足瑞利商最大值的点 (x_1, x_2) 有无数个，它们都位于特征向量 $\boldsymbol{v}_1$ 所在直线上。我们能从图 7 中一睹瑞利商 $R(x_1, x_2)$ 曲面形状真容，以及瑞利商最大值和最小值对应的 (x_1, x_2) 坐标值。

⚠ 注意，瑞利商 $R(x_1, x_2)$ 在 $(0, 0)$ 没有定义。

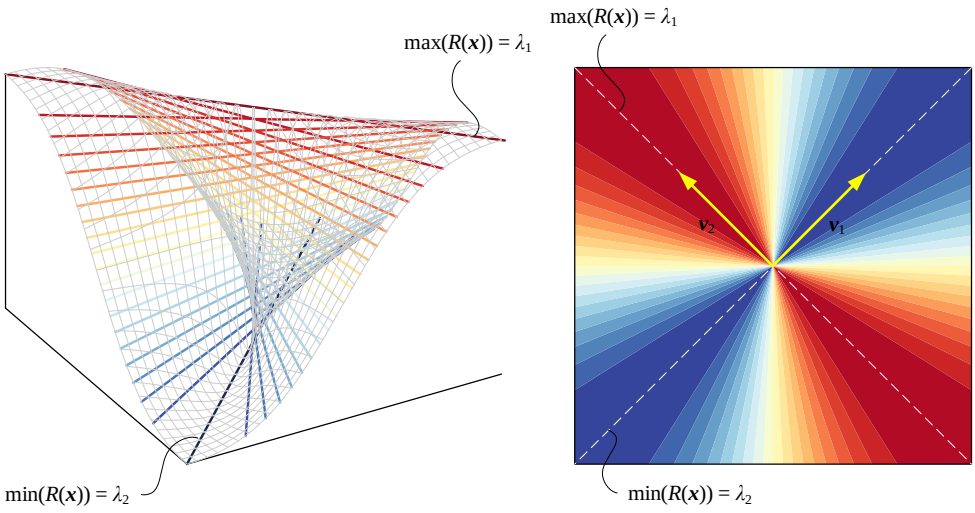


图 7. 三维空间中可视化瑞利商

再举两个例子

给定矩阵 $\boldsymbol{A}$：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0.5 & -0.5\\ -0.5 & 0.5\end{bmatrix} \tag{59}$$

它的特征值分别为 $\lambda_1 = 1$，$\lambda_2 = 0$。$f(x_1, x_2)$ 等高线和曲面如图 5 (b) 和图 6 (b) 所示。

图 5 (c) 等高线对应的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0 & -1\\ -1 & 0\end{bmatrix} \tag{60}$$

它的特征值分别为 $\lambda_1 = 1$，$\lambda_2 = -1$。图 6 (c) 所示为 $f(x_1, x_2)$ 曲面的形状。

三维空间

以上探讨的三种情况都是以 2×2 矩阵为例。在三维空间中，$D = 3$ 这种情况，(45) 对应的是一个单位圆球体，将 $f(x_1, x_2, x_3)$ 三元函数的数值以等高线的形式映射到单位圆球体，得到图 8。

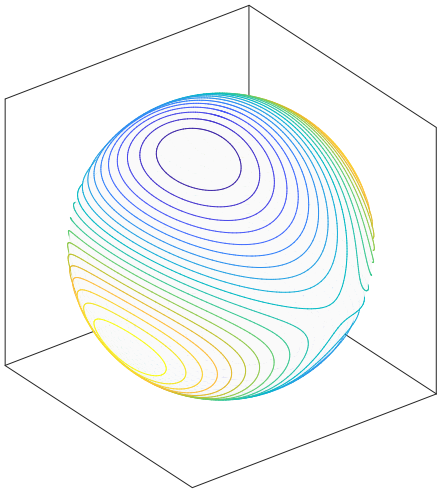


图 8. 三维单位球体表面瑞利商值等高线

14.6 再谈椭圆：特征值分解

从《数学要素》一册开始，本系列丛书几次三番谈及椭圆。这是因为圆锥曲线，特别是椭圆，在机器学习中扮演重要角色。本章最后将结合线性变换、特征值分解、LDL 分解再聊聊椭圆。

平面上，圆心位于原点半径为 1 的正圆叫做**单位圆** (unit circle)，解析式可以写成如下形式：

$$\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}-1=0 \tag{61}$$

其中 $\boldsymbol{z}$ 为，

$$\boldsymbol{z}=\begin{bmatrix}z_1\\ z_2\end{bmatrix} \tag{62}$$

利用 L^2 范数，(61) 可以写成：

$$\|\boldsymbol{z}\| = 1 \tag{63}$$

经过 $\boldsymbol{A}$ 映射向量 $\boldsymbol{z}$ 变成 $\boldsymbol{x}$：

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{z} \tag{64}$$

假设 $\boldsymbol{A}$ 可逆，也就是说 $\boldsymbol{A}$ 对应的几何操作可逆，$\boldsymbol{z}$ 可以写成：

$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x} \tag{65}$$

将 (65) 代入 (61) 得到：

$$\left(\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x} - 1 = 0 \tag{66}$$

利用 L^2 范数，(66) 还可以写成：

$$\left\|\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\right\| = 1 \tag{67}$$

整理 (66) 得到如下二次型：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \underbrace{\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}}_{\boldsymbol{Q}} \boldsymbol{x} - 1 = 0 \tag{68}$$

举个例子

以本章开头 (8) 给出的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为例，在 $\boldsymbol{A}$ 的映射下 $\boldsymbol{z} \rightarrow \boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{z}$：

$$\boldsymbol{x} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1.25 & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}} \boldsymbol{z} \tag{69}$$

如图 9 所示，满足 (61) 的向量 $\boldsymbol{z}$ 终点落在单位圆上。经过 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{z}$ 映射后，向量 $\boldsymbol{x}$ 终点落在旋转椭圆上。

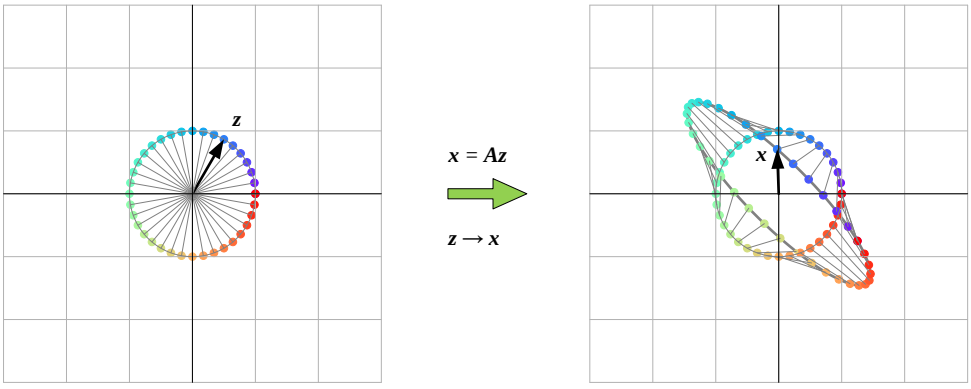


图 9. 单位圆到旋转椭圆

将 (8) 给定 $\boldsymbol{A}$ 代入 (68)，得到图 9 右侧旋转椭圆解析式如下：

$$2.125x_1^2 + 3.75x_1x_2 + 2.125x_2^2 - 1 = 0 \tag{70}$$

如果有人问我们，图 9 右侧旋转椭圆的半长轴、半短轴多长？椭圆长轴旋转角度多大？为了解决这些问题，我们需要借助特征值分解。

特征值分解

令 $\boldsymbol{Q}$ 为：

$$\boldsymbol{Q} = \left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\right)^{-1} = \begin{bmatrix} 2.125 & 1.875 \\ 1.875 & 2.125 \end{bmatrix} \tag{71}$$

$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 显然是个对称矩阵，对称矩阵的逆还是对称矩阵，因此 $\boldsymbol{Q}$ 是对称矩阵。对 $\boldsymbol{Q}$ 进行特征值分解得到：

$$\boldsymbol{Q} = \left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\right)^{-1} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{72}$$

强调一下，本节特征值分解的对象为 $\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}$，而不是 $\boldsymbol{A}$。

利用 (8) 给定 $\boldsymbol{A}$ 计算 $\boldsymbol{Q}$ 具体值，并特征值分解得到：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 2.125 & 1.875 \\ 1.875 & 2.125 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{Q}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}} \underbrace{\begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 0.25 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Lambda}} \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}} \tag{73}$$

大家已经清楚上式中的 $\boldsymbol{V}$、$\boldsymbol{\Lambda}$ 对应的几何操作分别是“旋转”、“缩放”。请大家注意，$\boldsymbol{\Lambda}$ 并不是单位圆到椭圆的缩放比例。我们还需对 $\boldsymbol{\Lambda}$ 再多一步处理。

几何视角：缩放 → 旋转

整理 (72) 得到 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 对应的特征值分解：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} &= \left(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{-1} = \left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\boldsymbol{V}^{-1} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \\ &= \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\left(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\right)^{\mathrm{T}} \end{aligned} \tag{74}$$

由于 $\boldsymbol{Q}$ 为对称矩阵，特征值分解得到的 $\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵，因此存在 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}$。如上推导用到了这个关系。

$\boldsymbol{z}$ 先经过缩放 ($\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}$) 得到 $\boldsymbol{y}$，$\boldsymbol{y}$ 经过旋转 ($\boldsymbol{V}$) 得到 $\boldsymbol{x}$：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{y} &= \boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{z} \\ \boldsymbol{x} &= \boldsymbol{V}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{z} \end{aligned} \tag{75}$$

上式告诉我们 $\boldsymbol{A}$ 相当于：

$$\boldsymbol{A} \sim \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}} \tag{76}$$

注意，$\boldsymbol{A} \neq \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}$。这是因为，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}$，不能推导得到 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}$。本书第 5 章强调过这一点。

将具体值代入 (74)，得到：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 2.125 & -1.875 \\ -1.875 & 2.125 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}} \left\{ \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}} \right\}^{\mathrm{T}} \tag{77}$$

从几何角度来看，$\boldsymbol{A}$ 这个映射相当于被分解成“先缩放 ($\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}$) + 再旋转 ($\boldsymbol{V}$)”。将 (76) 代入 (64)，得到：

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{V}\underbrace{\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{z}}_{\boldsymbol{y}} \tag{78}$$

总结来说，$\boldsymbol{z}$ 先经过缩放 ($\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}$) 得到 $\boldsymbol{y}$，$\boldsymbol{y}$ 经过旋转 ($\boldsymbol{V}$) 得到 $\boldsymbol{x}$：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{y} &= \boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{z} \\ \boldsymbol{x} &= \boldsymbol{V}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{z} \end{aligned} \tag{79}$$

图 10 所示为上述“单位圆 → 正椭圆 → 旋转椭圆”几何变换过程。比较图 9 和图 10，容易发现形状上旋转椭圆完全相同。但是大家如果仔细比较图 9 和图 10 上，可以发现“彩灯”位置并不相同。这个差异来自于 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}$ 不能推导得到 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}$。

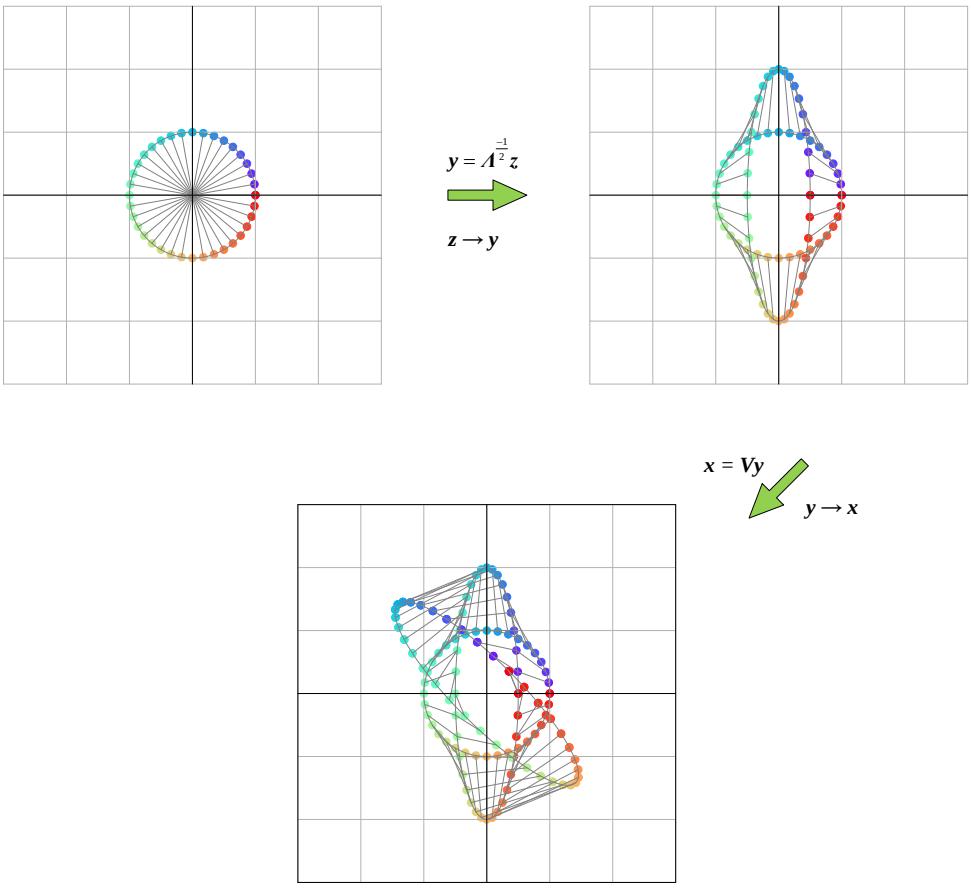


图 10. 单位圆 (缩放) → 正椭圆 (旋转) → 旋转椭圆

椭圆长、短轴

利用 $\boldsymbol{y}$ 和 $\boldsymbol{z}$ 的关系，(61) 可以写成：

$$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{y} - 1 = 0 \tag{80}$$

即：

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} \lambda_1 & \\ & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} - 1 = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda_1 y_1^2 + \lambda_2 y_2^2 = 1 \tag{81}$$

将上式写成大家熟悉的椭圆形式：

$$\frac{y_1^2}{\left(1/\sqrt{\lambda_1}\right)^2} + \frac{y_2^2}{\left(1/\sqrt{\lambda_2}\right)^2} = 1 \tag{82}$$

如果 $\lambda_1 > \lambda_2 > 0$，上式中这个正椭圆的半长轴长度为 $\sqrt{1/\lambda_2}$，半短轴长度为 $\sqrt{1/\lambda_1}$。实际上，我们在本书第 5 章接触过这个结论。

代入具体值，得到正椭圆的解析式：

$$\frac{y_1^2}{0.5^2}+\frac{y_2^2}{2^2}=1 \tag{83}$$

图 11 所示为旋转椭圆的长轴、短轴位置，以及半长轴、半短轴长度。

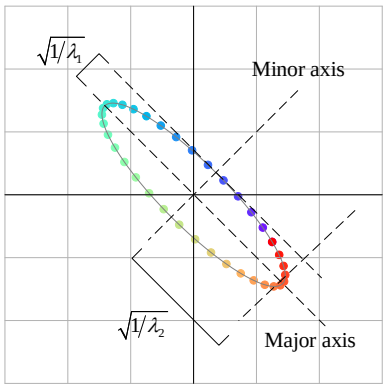


图 11. 旋转椭圆长轴、短轴

本章用 Streamlit 制作了一个 App，大家可以输入矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的元素值，并绘制类似图 11 中椭圆。请大家参考 Streamlit_Bk4_Ch14_04.py。

LDL 分解：缩放 → 剪切

看到 (74) 这种 “方阵 @ 对角方阵 @ 方阵转置”矩阵分解形式，大家是否想到第 11、12 章介绍的 LDL 分解。

LDL 分解也是“方阵 @ 对角方阵 @ 方阵转置”，对 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 进行 LDL 分解得到：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}&=\begin{bmatrix}1 & \\ -0.882 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2.125 & \\ & 0.471\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & -0.882\\ & 1\end{bmatrix}\\ &=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{D}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}=\left(\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{\frac{1}{2}}\right)\left(\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{\frac{1}{2}}\right)^{\mathrm{T}}\end{aligned} \tag{84}$$

其中，$\boldsymbol{L}$ 为下三角方阵，$\boldsymbol{D}$ 是对角方阵。

类似 (76)，$\boldsymbol{A}$ 相当于：

$$\boldsymbol{A}\sim\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix}1 & \\ -0.882 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1.458 & \\ & 0.686\end{bmatrix} \tag{85}$$

从几何角度来看，如图 12 所示，$\boldsymbol{A}$ 这个映射相当于“先缩放 ($\boldsymbol{D}^{\frac{-1}{2}}$) + 再剪切 ($\boldsymbol{L}$)”，即：

$$\underset{\text{Shear Scaling}}{\boldsymbol{x} = \boldsymbol{L}\ \boldsymbol{D}^{\frac{1}{2}}\ \boldsymbol{z}} \tag{86}$$

比较图 10 和图 12，虽然几何变换过程完全不同，但是最后获得的旋转椭圆的形状一致。这两条不同的几何变换路线也是获得具有一定相关性系数随机数的两种不同方法。本系列丛书《概率统计》一册会展开讲解。

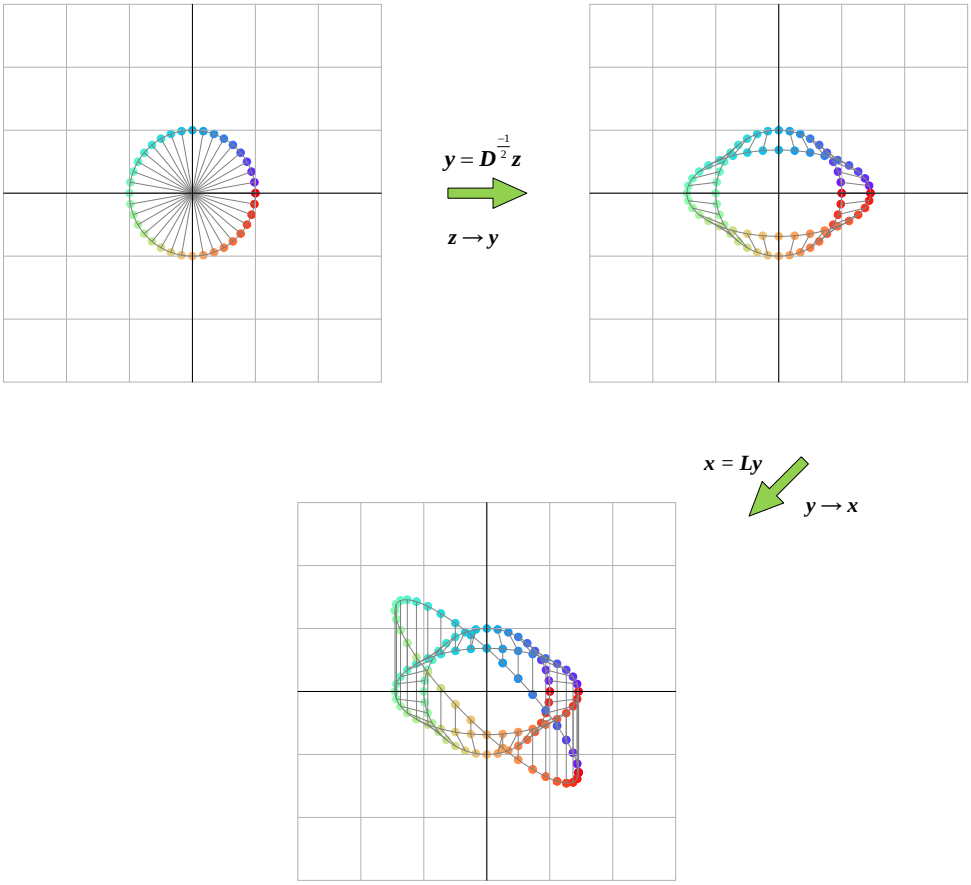


图 12. 单位圆 (缩放) → 正椭圆 (剪切) → 旋转椭圆

本章主要着墨在特征值分解的应用，比如方阵开方、矩阵指数、斐波那契数列、马尔科夫过程平衡状态等等。

本章特别值得注意的一个知识点是瑞利商，数据科学和机器学习很多算法中都离不开瑞利商。希望大家能从几何视角理解瑞利商的最值。本书还将在拉格朗日乘子法中继续探讨瑞利商。

本章最后讨论了如何用特征值分解获得旋转椭圆的半长轴、半短轴长度，以及旋转角度等位置信息。这部分内容和《概率统计》一册中多元高斯分布关系密切。

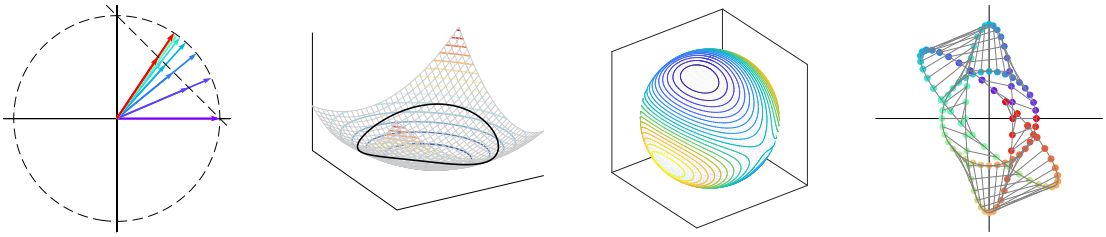


图 13. 总结本章重要内容的四幅图

想系统学习线性代数的读者，可以参考这本书——*Interactive Linear Algebra*。该书作者系统性地讲解线性代数核心概念，提供大量可视化方案和例题。电子图书地址为：

https://textbooks.math.gatech.edu/ila/

本书 PDF 文件下载地址：

https://personal.math.ubc.ca/~tbjw/ila/ila.pdf

15 Singular Value Decomposition

奇异值分解

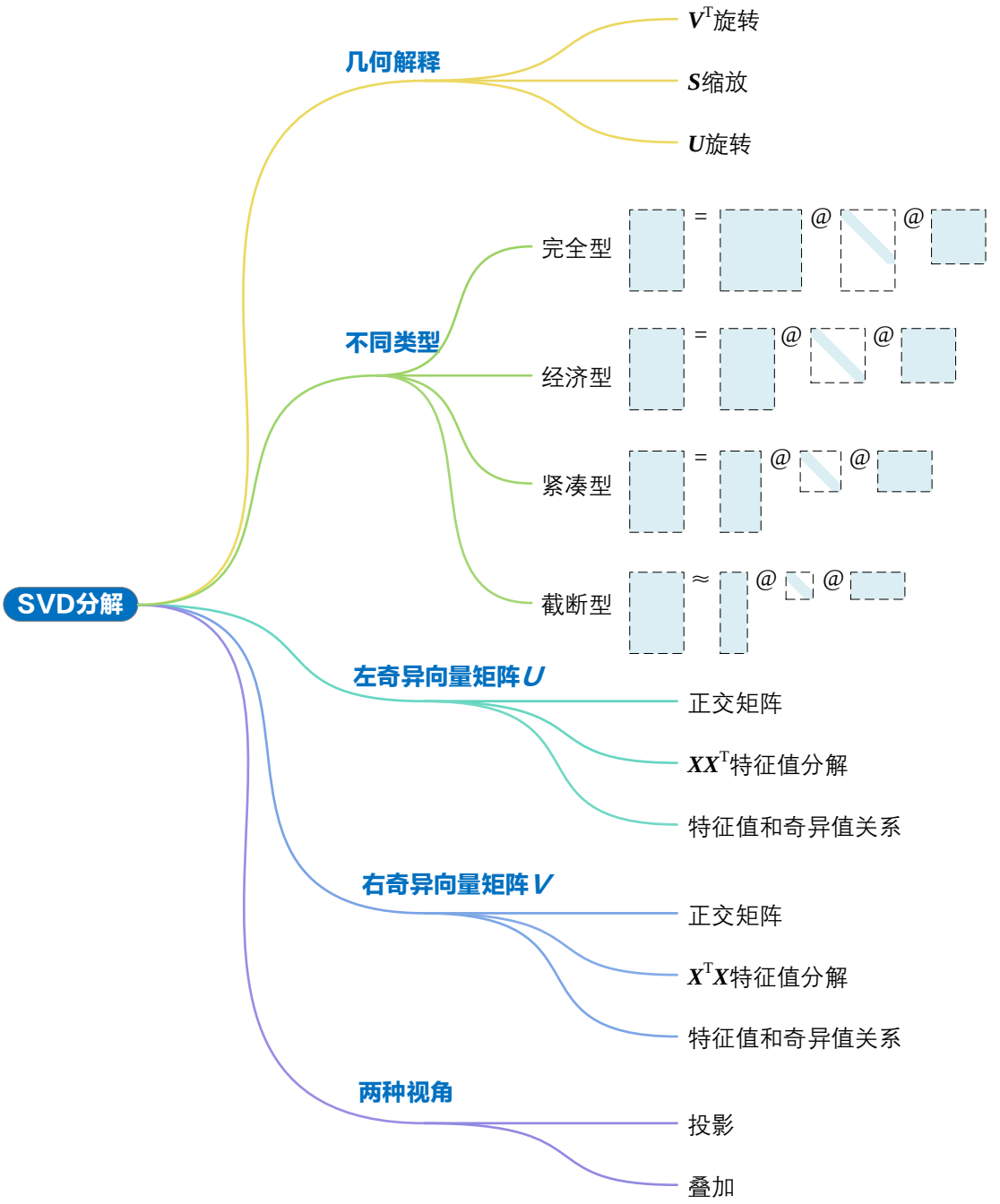
最重要的矩阵分解，没有之一

就我而言，我一无所知，但满眼的繁星让我入梦。

For my part I know nothing with any certainty, but the sight of the stars makes me dream.

—— 文森特·梵高 (Vincent van Gogh) | 荷兰后印象派画家 | 1853 ~ 1890

- `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



15.1 几何视角：旋转 → 缩放 → 旋转

本书第 11 章简要介绍过**奇异值分解** (Singular Value Decomposition, SVD) —— 宇宙中最重要的矩阵分解。本节将从几何视角解剖奇异值分解。

对数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{n\times D}$ 奇异值分解得到：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{1}$$

其中，$\boldsymbol{S}$ 为对角阵，其主对角线元素 s_j (j = 1, 2, …, D) 为**奇异值** (singular value)。

⚠ 注意，SVD 分解得到的奇异值非负，即 $s_j \geqslant 0$。此外注意，(1) 中矩阵 $\boldsymbol{V}$ 的转置运算。

$\boldsymbol{U}$ 的列向量称作**左奇异向量** (left singular vector)。

$\boldsymbol{V}$ 的列向量称作**右奇异向量** (right singular vector)。

SVD 分解有四种主要形式，完全型是其中一种。在完全型 SVD 分解中，$\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵，即 $\boldsymbol{U}$ 和自己转置 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}$ 的乘积为单位矩阵；$\boldsymbol{V}$ 和自己转置 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 的乘积也是单位矩阵。

从向量空间角度来看，$\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$ 为 $\mathbb{R}^n$ 的规范正交基，$\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 为 $\mathbb{R}^D$ 的规范正交基。

根据这三个矩阵的形态，我们知道，从几何视角来看，正交矩阵 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 矩阵作用是旋转，而对角矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的作用是缩放。

大家可能会问这和特征值分解对应的“旋转 → 缩放 →旋转”有何不同？

特征值分解中，三步几何变换是旋转 ($\boldsymbol{V}^{-1}$) → 缩放 ($\boldsymbol{\Lambda}$) →旋转 ($\boldsymbol{V}$)。

奇异值分解中，三步几何变换是旋转 ($\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$) → 缩放 ($\boldsymbol{S}$) →旋转 ($\boldsymbol{U}$)。一个明显的区别是，$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 的旋转发生在 $\mathbb{R}^D$ 空间，$\boldsymbol{U}$ 的旋转则发生在 $\mathbb{R}^n$ 空间。值得强调的是，这要求奇异分解为“完全型”。本书后续会介绍包括“完全型”在内的四种 SVD 分解。

几何视角

为了方便解释，我们用 2 × 2 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 做例子。

利用矩阵 $\boldsymbol{A}$ 完成 $\boldsymbol{z} \rightarrow \boldsymbol{x}$ 线性映射，即 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{z}$。利用 SVD 分解，将 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 代入映射运算得到：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{z} = \underset{\text{Rotate}}{\boldsymbol{U}}\ \underset{\text{Scale}}{\boldsymbol{S}}\ \underset{\text{Rotate}}{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}}\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{2}$$

图 1 所示为几何变换角度解释奇异值分解，$\boldsymbol{A}$ 乘 $\boldsymbol{x}$，相当于先用 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 旋转，再用 $\boldsymbol{S}$ 缩放，最后用 $\boldsymbol{U}$ 旋转。

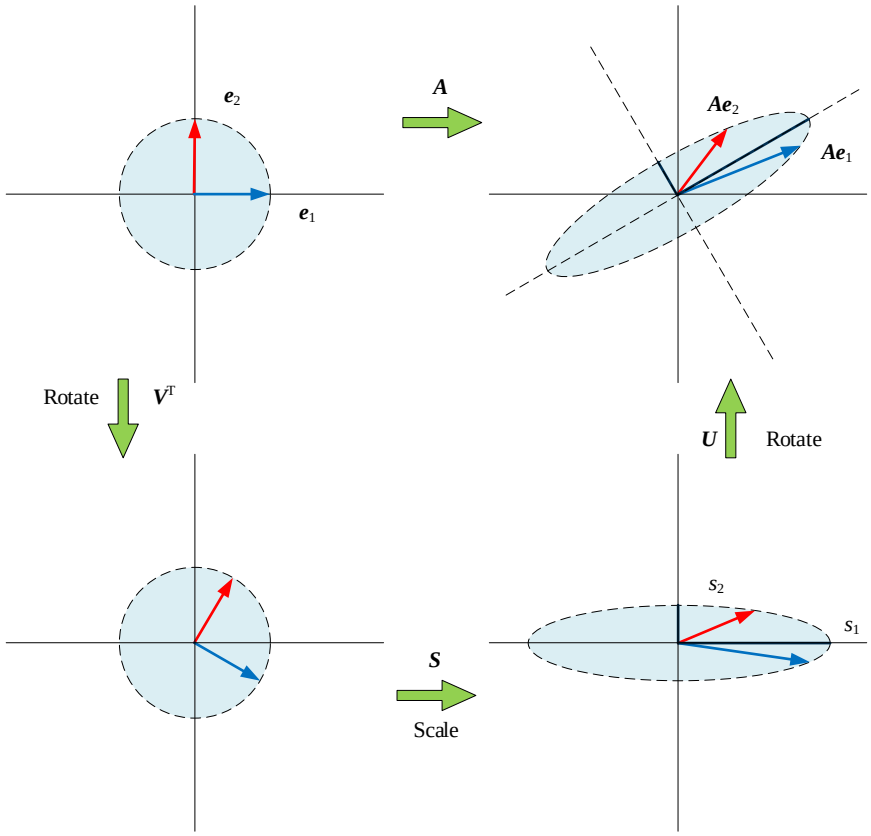


图 1. 几何角度解释奇异值分解

举个实例

下面用具体实例解释图 1。给定如下 2 × 2 矩阵 $\boldsymbol{A}$：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1.625 & 0.6495\\ 0.6495 & 0.875\end{bmatrix} \tag{3}$$

对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 进行 SVD 分解：

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}=\underbrace{\begin{bmatrix}0.866 & -0.5\\ 0.5 & 0.866\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{U}}\underbrace{\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 0.5\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{S}}\underbrace{\begin{bmatrix}0.866 & -0.5\\ 0.5 & 0.866\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}} \tag{4}$$

即，

$$\boldsymbol{U}=\begin{bmatrix}0.866 & -0.5\\ 0.5 & 0.866\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{S}=\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 0.5\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{V}=\begin{bmatrix}0.866 & 0.5\\ -0.5 & 0.866\end{bmatrix} \tag{5}$$

⚠ 注意，如果特征值分解和奇异值分解的对象都是可对角化矩阵，两个分解得到的结果等价。但是，奇异值分解的强大之处在于，任何实数矩阵都可以奇异值分解。

给定 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 两个单位向量：

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{6}$$

$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 经过 $\boldsymbol{A}$ 转换分别得到：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1 &= \begin{bmatrix} 1.625 & 0.6495 \\ 0.6495 & 0.875 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.625 \\ 0.6495 \end{bmatrix} \\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2 &= \begin{bmatrix} 1.625 & 0.6495 \\ 0.6495 & 0.875 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.6495 \\ 0.875 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{7}$$

图 2 所示为转换前后的结果对比。请大家注意转换前后向量的方向和长度 (模) 的变化。

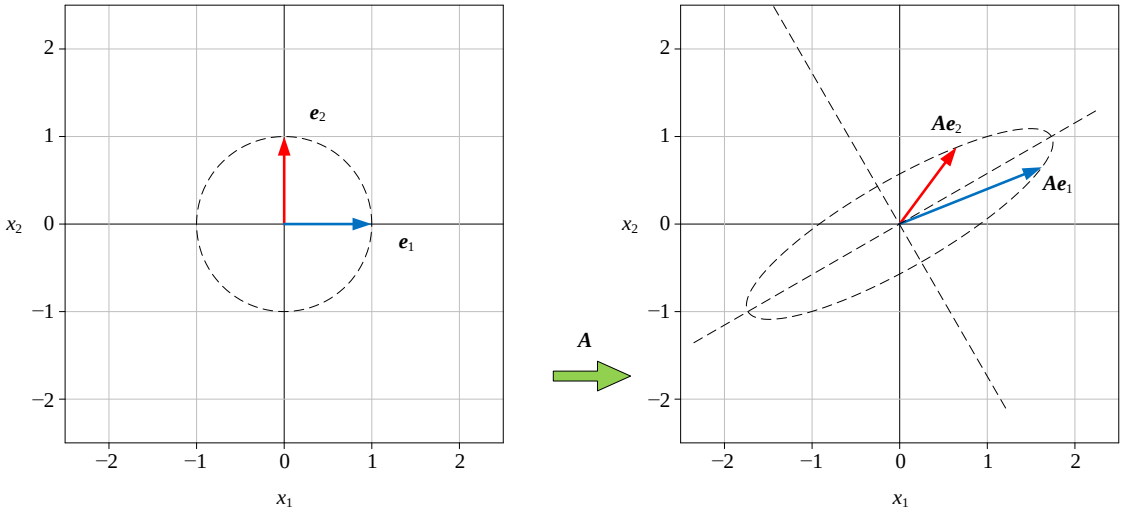


图 2. $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 经过 $\boldsymbol{A}$ 线性转换

分步几何变换

(7) 等价于“旋转 ($\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$) → 缩放 ($\boldsymbol{S}$) → 旋转 ($\boldsymbol{U}$)”，具体如图 3 所示。

$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 两个向量先通过 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 进行旋转，得到：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{e}_1 &= \begin{bmatrix} 0.866 & 0.5 \\ -0.5 & 0.866 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.866 \\ -0.5 \end{bmatrix} \\ \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{e}_2 &= \begin{bmatrix} 0.866 & 0.5 \\ -0.5 & 0.866 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.866 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{8}$$

在 (8) 基础上，再用对角矩阵 $\boldsymbol{S}$ 进行缩放，得到：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{e}_1 &= \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.866 \\ -0.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.732 \\ -0.25 \end{bmatrix} \\
\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{e}_2 &= \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.866 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0.433 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{9}
$$

在之前“旋转 ($\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$)”和“缩放 ($\boldsymbol{S}$)”两步基础上，最后再利用 $\boldsymbol{U}$ 进行旋转，得到：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{e}_1 &= \begin{bmatrix} 0.866 & -0.5 \\ 0.5 & 0.866 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1.732 \\ -0.25 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.625 \\ 0.6495 \end{bmatrix} \\
\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{e}_2 &= \begin{bmatrix} 0.866 & -0.5 \\ 0.5 & 0.866 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 0.433 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.6495 \\ 0.875 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{10}
$$

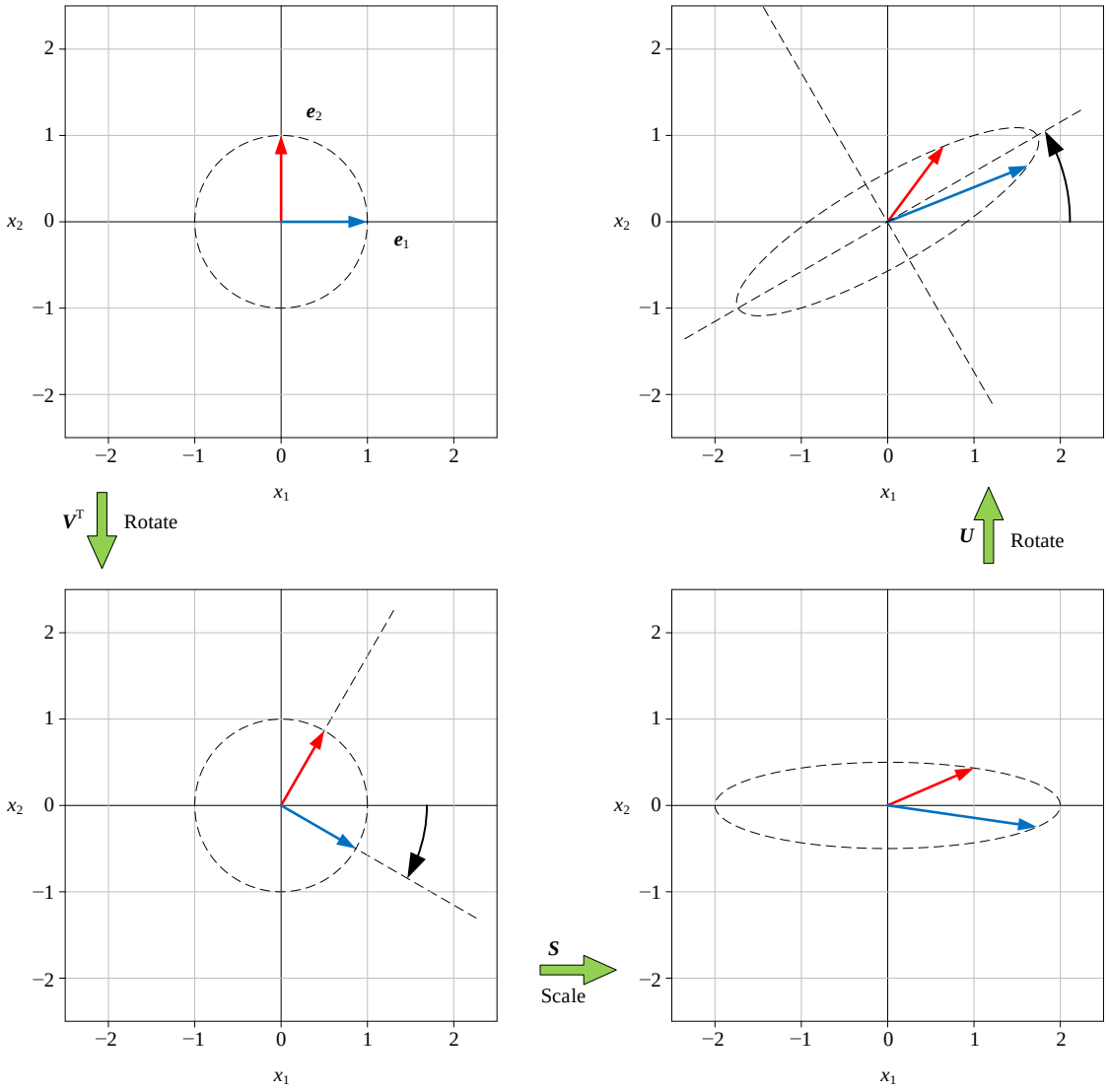
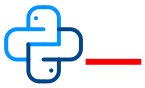


图 3. $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 分别经过 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$、$\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 转换



Bk4_Ch15_01.py 绘制图 3 所有子图。

15.2 不同类型 SVD 分解

SVD 分解分为**完全型** (full)、**经济型** (economy-size, thin)、**紧凑型** (compact) 和**截断型** (truncated) 四大类。

本节将简要介绍完全型和经济型两种奇异值分解之间的关系。下一章将深入讲解这四种 SVD 分解。

完全型

图 4 所示为完全型 SVD 分解热图，其中左奇异值矩阵 $\boldsymbol{U}$ 为方阵，形状为 $n \times n$。$\boldsymbol{S}$ 的形状和 $\boldsymbol{X}$ 相同，为 $n \times D$。$\boldsymbol{S}$ 的主对角线元素 s_j 为奇异值，具体形式为：

$$\boldsymbol{S} = \begin{bmatrix} s_1 & & & \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_D \\ & & & \end{bmatrix} \tag{11}$$

约定俗成，这 D 个奇异值的大小关系为 $s_1 \geqslant s_2 \geqslant \ldots \geqslant s_D$。

如图 4 所示，$\boldsymbol{S}$ 可以分块为上下两个子块——对角方阵、全 0 矩阵 $\boldsymbol{O}$。

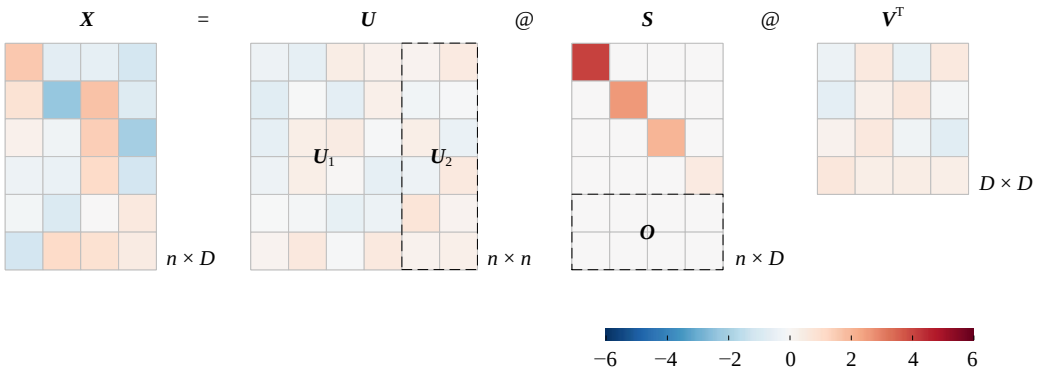


图 4. 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的完全型 SVD 分解

注意，一般情况，数据矩阵为“细高”长方形，偶尔大家也会见到“宽矮”长方形的数据矩阵。(1) 中 $\boldsymbol{X}$ 为细高长方形，对 $\boldsymbol{X}$ 转置便得到宽矮长方形矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$。如图 5 所示，相应的，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 的 SVD 分解为：

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}} \tag{12}$$

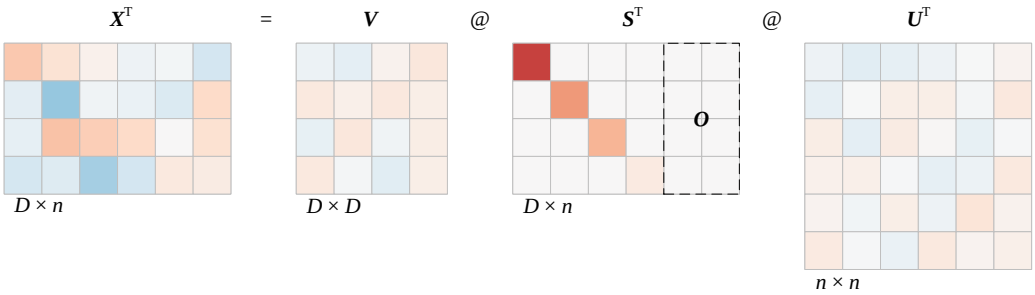


图 5. 矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 的完全型 SVD 分解

经济型

图 6 所示为经济型 SVD 分解结果热图。可以发现，左奇异值矩阵 $\boldsymbol{U}$ 形状和 $\boldsymbol{X}$ 相同，均为为 $n \times D$。而 $\boldsymbol{S}$ 为方阵，形状为 $D \times D$。从图 4 到图 6，利用的是分块矩阵乘法，这个话题留到下一章讨论。

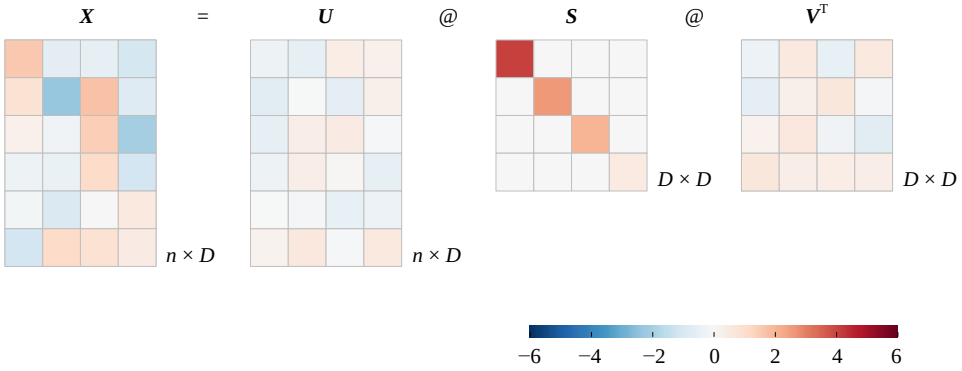


图 6. 经济型 SVD 分解

在经济型 SVD 分解中，$\boldsymbol{S}$ 为对角方阵：

$$\boldsymbol{S} = \begin{bmatrix} s_1 & & & \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_D \end{bmatrix} \tag{13}$$

当 $\boldsymbol{S}$ 为对角方阵时，(12) 可以写成：

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{S}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}} \tag{14}$$

Bk4_Ch15_02.py 中 Bk4_Ch15_02_A 部分绘制图 4 和图 6。

15.3 左奇异向量矩阵 $\boldsymbol{U}$

$\boldsymbol{U}$ 的列向量称作**左奇异向量** (left singular vector)，$\boldsymbol{U}$ 和自己转置 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}$ 的乘积为单位矩阵：

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I} \tag{15}$$

如图 7 所示，对于完全型 SVD 分解，$\boldsymbol{U}$ 为方阵。

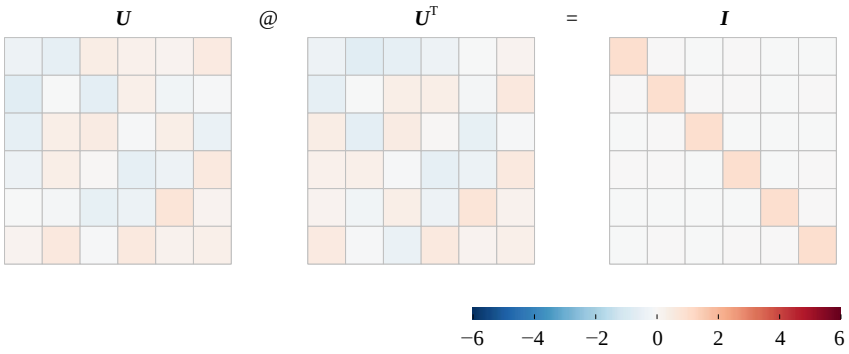


图 7. $\boldsymbol{U}$ 和自己转置 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}$ 的乘积为单位矩阵

特征值分解

本书前文提到过两次，细高的长方形矩阵 $\boldsymbol{X}$ 不能进行特征值分解。但是，它的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 都是对称矩阵，可以进行特征值分解。下面，我们先分析 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$。

图 8 所示为 $\boldsymbol{X}$ 和自己转置 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 相乘得到第一个格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 的热图，$\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 为 $n \times n$ 方阵。

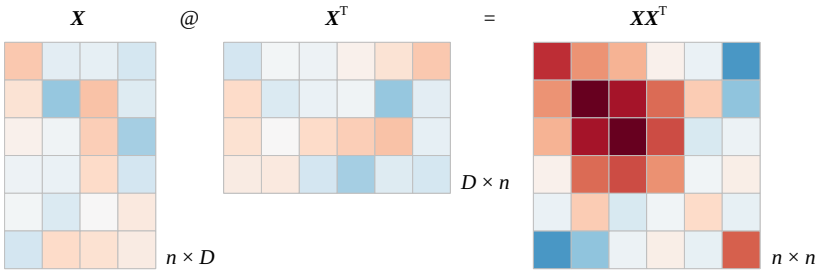


图 8. $\boldsymbol{X}$ 和自己转置 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 的乘积热图

对方阵 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 进行特征值分解，可以发现 $\boldsymbol{U}$ 的列向量是特征向量，而 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}$ 是 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 的特征值矩阵：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} &= \left(\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)\left(\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}} \\
&= \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\right)\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}} \\
&= \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}
\end{aligned} \tag{16}
$$

图 9 所示为 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 特征值分解热图。

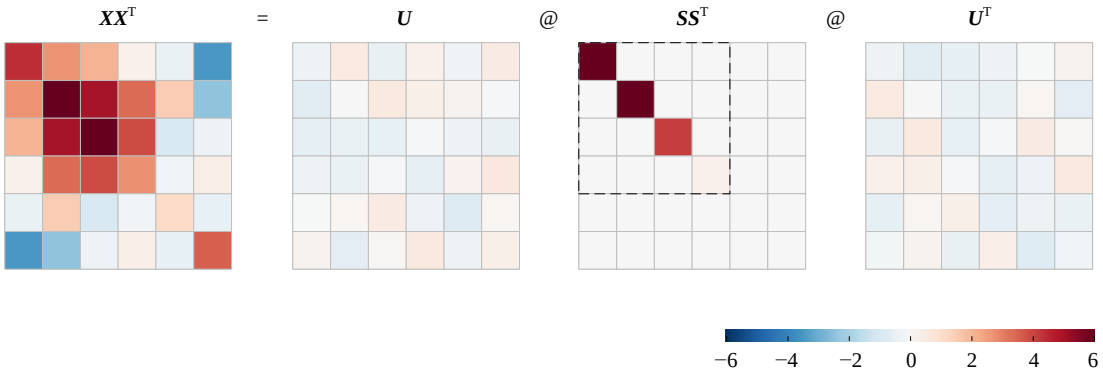


图 9. 对 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 特征值分解

$\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}$ 主对角线为特征值，对 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}$ 展开得到：

$$
\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} s_1 & & & \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_1 & & & \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_1^2 & & & & & \\ & s_2^2 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & s_D^2 & & \\ & & & & 0 & \\ & & & & & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & & & \\ & \lambda_2 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \lambda_D & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & \lambda_n \end{bmatrix} \tag{17}
$$

观察上式，发现当 $j = 1 \sim D$ 时，特征值 λ_j 和奇异值 s_j 存在如下关系：

$$
\lambda_j = s_j^2 \tag{18}
$$

剩余的特征值均为 0。

向量空间

如图 10 所示，$\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 进行特征值分解得到正交矩阵 $\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$ 是个规范正交基，张起的空间为 $\mathbb{R}^n$。

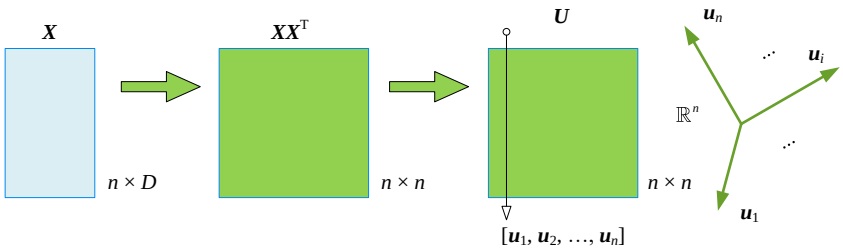


图 10. 对 Gram 矩阵 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 特征值分解得到规范正交基 $\boldsymbol{U}$

类比 QR 分解

数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 进行 QR 分解得到：

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{R} \tag{19}$$

对于完全型 QR 分解，$\boldsymbol{Q}$ 为正交矩阵，也是一个规范正交基 $[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_D]$。

对 $\boldsymbol{X}$ 进行完全型 SVD 分解，把结果写成：

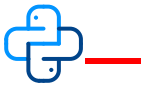
$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{U}\left(\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right) \tag{20}$$

对比 (19) 和 (20)，$\boldsymbol{Q}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 都是正交矩阵，形状虽然相同，但是两者显然是不同的规范正交基。

对于 QR 分解，$\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{q}_1$ 平行。打个比方，$\boldsymbol{x}_1$ 像是一个锚，确定了 $[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_D]$ 的空间位置。

而 SVD 分解则引入了一个优化视角——逐个最大化奇异值。本书第 18 章将深入介绍这个优化视角。

对比 (19) 和 (20)，$\boldsymbol{R}$ 则对应 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$。特别地，$\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 结果正交，即 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}$。



`Bk4_Ch15_02.py` 中 `Bk4_Ch15_02_B` 部分绘制图 7。请读者自行编写代码绘制图 8 和图 9。

15.4 右奇异向量矩阵 $\boldsymbol{V}$

$\boldsymbol{V}$ 的列向量称作**右奇异向量** (right singular vector)，$\boldsymbol{V}$ 和其转置 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 的乘积也是单位矩阵：

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{I} \tag{21}$$

图 11 所示为上式运算对应热图。

值得强调的是，凡是满足 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}$ 的方阵 $\boldsymbol{V}$ 都是**正交矩阵** (orthogonal matrix)，对应规范正交基。前文提过，并不是所有正交矩阵都是**旋转矩阵** (rotation matrix)。只有 $\det(\boldsymbol{V})=1$ 的正交矩阵才叫旋转矩阵，这种矩阵也叫**特殊正交矩阵** (special orthogonal matrix)。

而一般正交矩阵的行列式值为±1，即 $\det(\boldsymbol{V})=\pm1$。当 $\det(\boldsymbol{V})=-1$ 时，$\boldsymbol{V}$ 对应的几何操作为“旋转 + 镜像”。这也告诉我们，SVD 分解中 $\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 并不唯一，$\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 的列向量都可以取负。当 $\det(\boldsymbol{V})=\det(\boldsymbol{U})=-1$ 时，$\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 都是“旋转 + 镜像”。但是为了方便，完全型 SVD 结果中的 $\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{U}$，我们还是管它们的几何操作叫“旋转”。

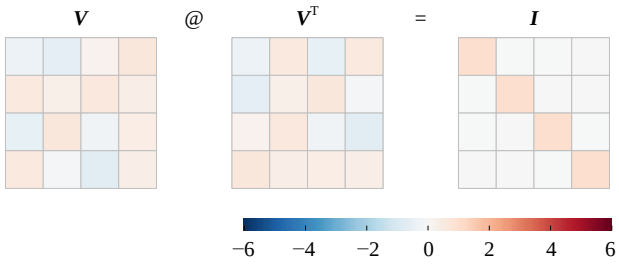


图 11. $\boldsymbol{V}$ 和其转置 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 的乘积也是单位矩阵

特征值分解

图 12 所示为转置 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{X}$ 相乘得到第二个格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的热图，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 为 $D\times D$ 方阵。

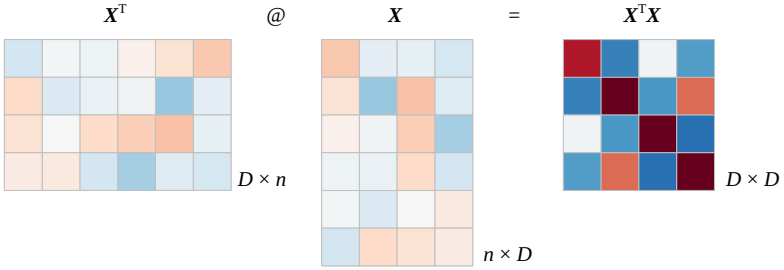


图 12. 转置 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{X}$ 乘积热图

对 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 特征值分解得到：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} &= \left(\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right) \\
&= \boldsymbol{V}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}\right)\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \\
&= \boldsymbol{V}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}
\end{aligned} \tag{22}
$$

$\boldsymbol{V}$ 是 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的特征向量矩阵，$\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}$ 为特征值矩阵。图 13 所示为对 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 进行特征值分解热图。

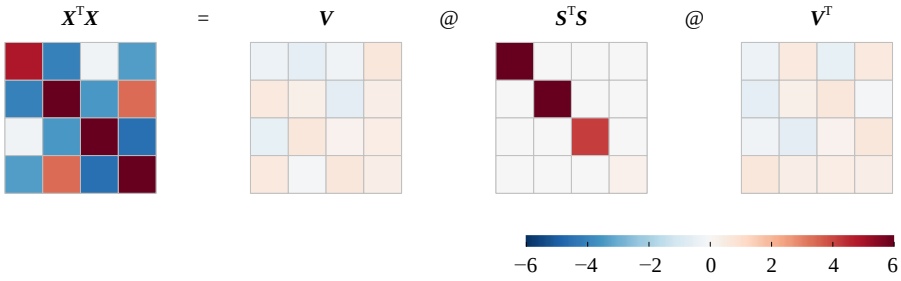


图 13. 对 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 进行特征值分解

如图 14 所示，对 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 进行特征值分解，$\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}$ 为特征值矩阵，奇异值和特征值也存在如下平方关系：

$$\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}=\begin{bmatrix} s_1^2 & & & \\ & s_2^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_D^2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D \end{bmatrix} \tag{23}$$

比较 (17) 和 (23)，我们容易发现两个不同格拉姆矩阵特征值之间的关系。

本书第 24 章将总结分解对象不同时，奇异值和特征值之间的联系和差异。

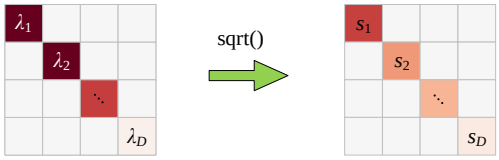


图 14. 奇异值和特征值之间关系

向量空间

如图 10 所示，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 进行特征值分解得到正交矩阵 $\boldsymbol{V}=[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$，它也是个规范正交基，张起的空间为 $\mathbb{R}^D$。

奇异值分解不但可以分解各种形状实数矩阵，并且一次性获得 $\boldsymbol{U}=[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$ 和 $\boldsymbol{V}=[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 两个规范正交基。

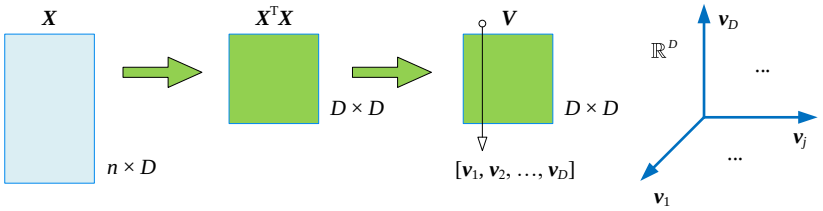


图 15. 对 Gram 矩阵 X^TX 特征值分解得到规范正交基 V

Bk4_Ch15_02.py 中 Bk4_Ch15_02_C 部分绘制图 11。请读者自行编写代码绘制图 12 和图 13。

15.5 两个视角：投影和数据叠加

本节用两个视角观察 SVD 分解。这两个视角对应两种不同的矩阵乘法展开方式。

投影

对于经济型 SVD 分解，将 (1) 等式左右两侧右乘 V，可以得到：

$$X_{n\times D}V = US \tag{24}$$

将 V 和 U 本身分别写成左右排列的列向量：

$$X_{n\times D}\begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & \cdots & u_D \end{bmatrix}\begin{bmatrix} s_1 & & & \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_D \end{bmatrix} \tag{25}$$

(25) 进一步展开得到：

$$\begin{bmatrix} Xv_1 & Xv_2 & \cdots & Xv_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_1u_1 & s_2u_2 & \cdots & s_Du_D \end{bmatrix} \tag{26}$$

因此，

$$Xv_j = s_ju_j \tag{27}$$

上式可以理解为 X 向 v_j 投影，结果为 s_ju_j。对应运算热图如图 16 所示。注意，v_j 和 u_j 都是单位向量，即两者的模都是 1。从另外一个角度来看，v_j 和 u_j 都不含单位，而 X 和 s_j 含有单位。

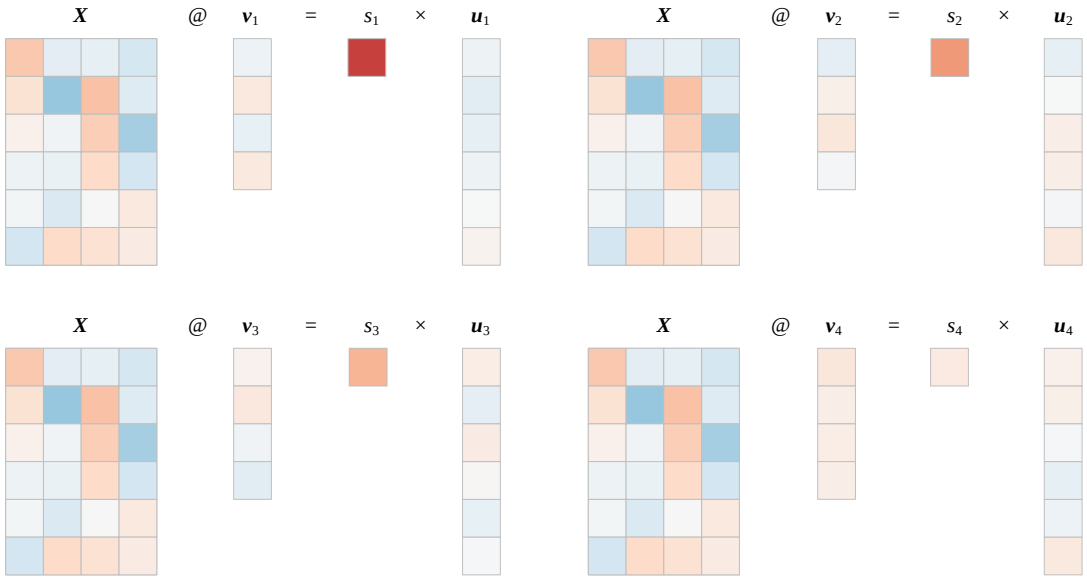


图 16. $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}_j$ 映射结果为 $s_j\boldsymbol{u}_j$

(27) 左右都是向量，等式两侧分别求模，即 L^2 范数，得到：

$$\left\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_j\right\| = \left\|s_j\boldsymbol{u}_j\right\| = s_j\left\|\boldsymbol{u}_j\right\|_1 = s_j \tag{28}$$

也就是说 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_j$ 的模为对应奇异值 s_j。由于奇异值 s_1 到 s_4 从大到小排列，也就是说 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1$ 的模最大。这个角度对于理解**主成分分析** (principal component analysis, PCA) 极为重要。

叠加

第二种展开方式如下：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{X}_{n\times D} &= \begin{bmatrix}\boldsymbol{u}_1 & \boldsymbol{u}_2 & \cdots & \boldsymbol{u}_D\end{bmatrix}\begin{bmatrix}s_1 & & & \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_D\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix}s_1\boldsymbol{u}_1 & s_2\boldsymbol{u}_2 & \cdots & s_D\boldsymbol{u}_D\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\end{bmatrix} = s_1\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + s_2\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} + \cdots + s_D\boldsymbol{u}_D\boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\end{aligned} \tag{29}$$

举个例子，对于 $D = 4$ 时：

$$\boldsymbol{X} = s_1\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + s_2\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} + s_3\boldsymbol{u}_3\boldsymbol{v}_3^{\mathrm{T}} + s_4\boldsymbol{u}_4\boldsymbol{v}_4^{\mathrm{T}} \tag{30}$$

(30) 中奇异值 s_1 到 s_4 从大到小排列，即 $s_1 \geqslant s_2 \geqslant s_3 \geqslant s_4$。

⚠ 注意，$s_j\boldsymbol{u}_j\boldsymbol{v}_j^{\mathrm{T}}$ 的秩为 1。

如图 17 所示，可以发现对应 (30) 等式右侧从左到右的四项相当于逐步还原 $\boldsymbol{X}$。特别地，请大家注意图 17 左侧四幅热图由上到下颜色逐渐变浅。下一章会深入介绍通过叠加还原原始数据矩阵。

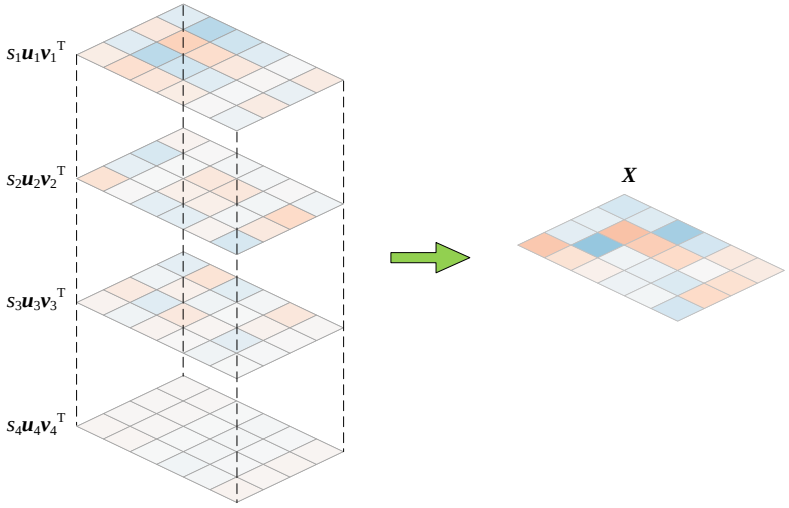


图 17. 四幅热图叠加还原原始图像

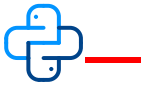
张量积

再进一步，利用 (27) 给出的关系，我们将 (30) 写成张量积之和的形式：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{X} &= s_1\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + s_2\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} + s_3\boldsymbol{u}_3\boldsymbol{v}_3^{\mathrm{T}} + s_4\boldsymbol{u}_4\boldsymbol{v}_4^{\mathrm{T}} \\ &= \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_3\boldsymbol{v}_3^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_4\boldsymbol{v}_4^{\mathrm{T}} \\ &= \boldsymbol{X}\left(\boldsymbol{v}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{v}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{v}_3\boldsymbol{v}_3^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{v}_4\boldsymbol{v}_4^{\mathrm{T}}\right) \\ &= \boldsymbol{X}\left(\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1 + \boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2 + \boldsymbol{v}_3 \otimes \boldsymbol{v}_3 + \boldsymbol{v}_4 \otimes \boldsymbol{v}_4\right)\end{aligned} \tag{31}$$

这就是本书第 10 章讲解的“二次投影”再“层层叠加”。

能完成类似 (31) 投影的规范正交基有无数组，为什么 $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 脱颖而出？$\boldsymbol{V}$ 的特殊性体现在哪？回答这个问题需要优化方面的知识，这是本书第 18 章要探讨的话题。



`Bk4_Ch15_02.py` 中 `Bk4_Ch15_02_D` 部分绘制本节图像。

图 18 四幅子图总结本章主要内容。请大家特别注意，奇异值分解对应“旋转 → 缩放 → 旋转”，不同于特征值分解的“旋转 → 缩放 → 旋转”。

任何实数矩阵都可以进行奇异值分解，但是只有可对角矩阵才能进行特征值分解。此外，奇异值分解得到的两个正交矩阵 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 一般形状不同。

请大家注意，特征值和奇异值之间的关系。格拉姆矩阵是奇异值分解和特征值分解的桥梁，这一点本书后续还要反复提到。

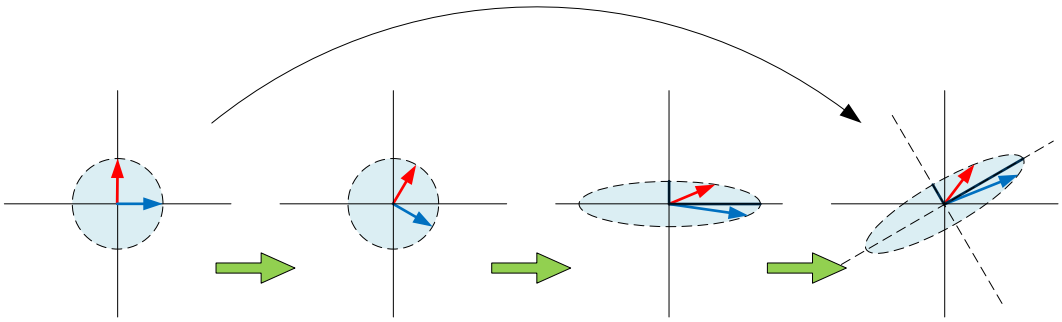


图 18. 总结本章重要内容的四幅图

数值线性代数是本书完全没有涉及的板块。

本书有关矩阵分解这个版块介绍了 LU 分解、Cholesky 分解、QR 分解、特征值分解、奇异值分解等等原理和应用，也介绍如何利用 Python 函数完成矩阵分解。但是本书没有提到计算机如何完成这些矩阵分解，也就是 Python 库中这些函数的底层算法实现，这就是数值线性代数研究的问题。

大家如果对这个话题感兴趣的话，可以参考 Holger Wendland 的 *Numerical Linear Algebra: An Introduction*。

16 深入奇异值分解

Dive into Singular Value Decomposition

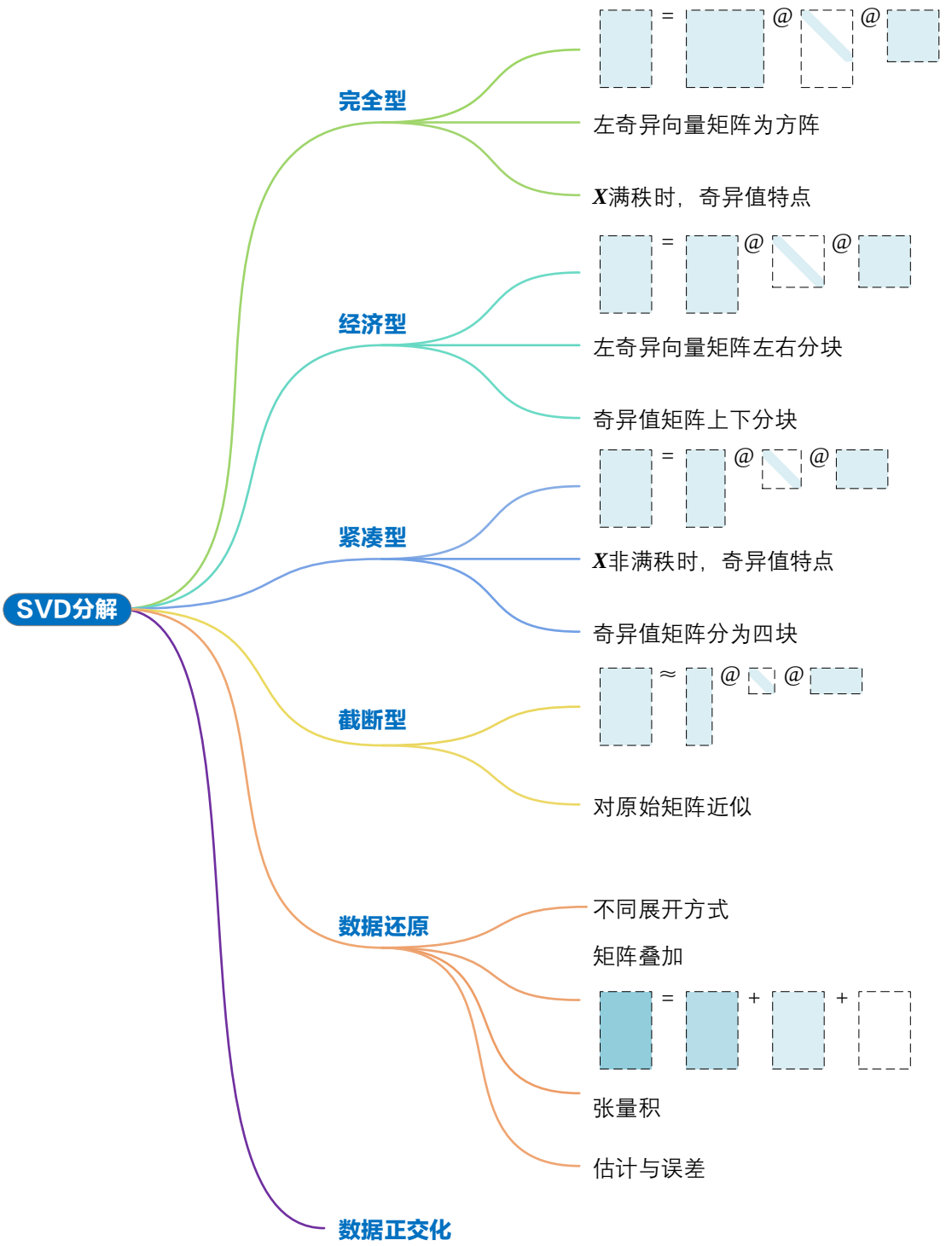
四种类型、数据还原、正交化

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



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 $\boldsymbol{X}_{6\times4}$ 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 $\boldsymbol{X}$ 形状 $n > D$，即细高型。

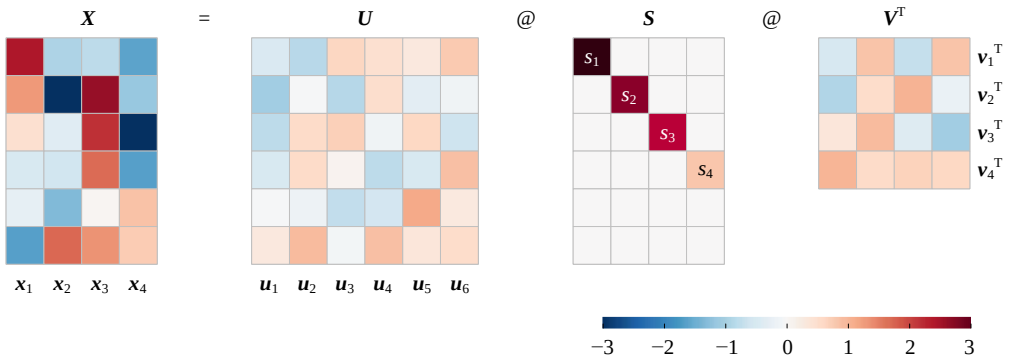


图 1. 数据 $\boldsymbol{X}$ 完全型 SVD 分解矩阵热图

完全型 SVD 分解中，左奇异向量矩阵 $\boldsymbol{U}$ 为方阵，形状为 $n \times n$。$\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$ 是张成 $\mathbb{R}^n$ 空间的规范正交基。

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

如果 $\boldsymbol{X}$ 满秩，$\text{rank}(\boldsymbol{X}) = D$，$\boldsymbol{S}$ 的主对角线元素 (奇异值 s_j) 一般大小关系为：

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

右奇异向量矩阵 $\boldsymbol{V}$ 形状为 $D \times D$。$\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 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 $\boldsymbol{S}_{n\times D}$ 上下分块为一个对角方阵和一个零矩阵 $\boldsymbol{O}$：

$$\boldsymbol{S}_{n\times D}=\begin{bmatrix} s_1 & & & \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_D \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{S}_{D\times D} \\ \boldsymbol{O}_{(n-D)\times D} \end{bmatrix} \tag{2}$$

将 $\boldsymbol{U}_{n\times n}$ 写成左右分块矩阵 $[\boldsymbol{U}_{n\times D}, \boldsymbol{U}_{n\times(n-D)}]$，其中 $\boldsymbol{U}_{n\times D}$ 和 $\boldsymbol{X}$ 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：

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

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 $\boldsymbol{V}$，它一直保持方阵形态。

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

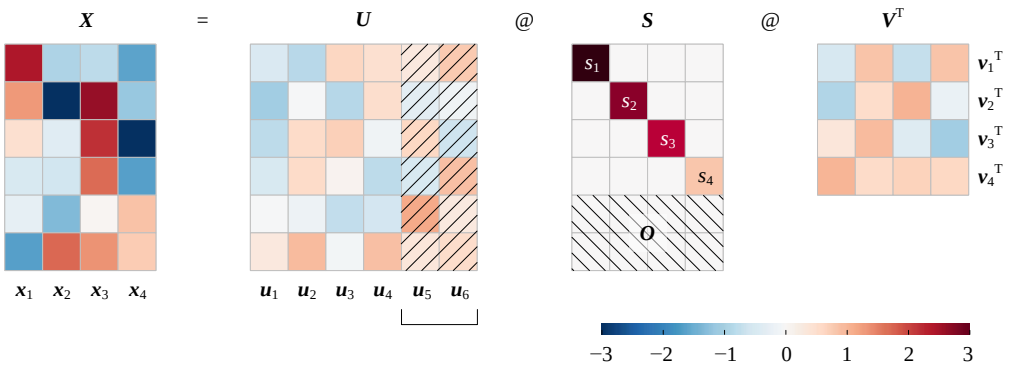


图 2. 数据 $\boldsymbol{X}$ 完全型 SVD 分解分块热图

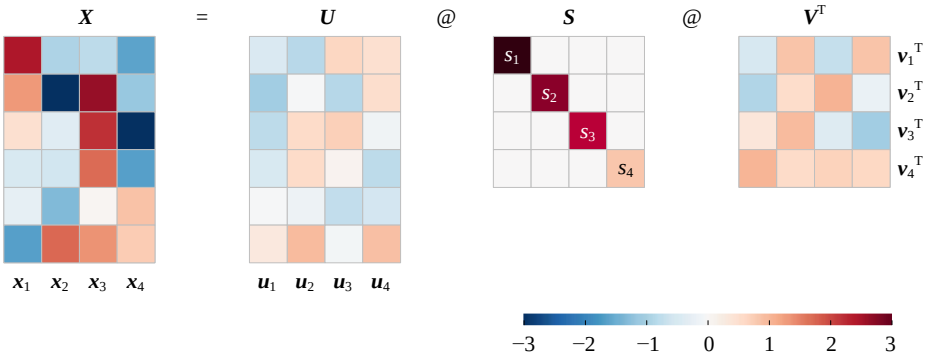


图 3. 数据 $\boldsymbol{X}$ 经济型 SVD 分解热图

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($\boldsymbol{X}$) = r < D，奇异值 s_j 满足：

$$s_1 \geq s_2 \geq \cdots s_r > 0, \quad s_{r+1} = s_{r+2} = \cdots s_D = 0 \tag{4}$$

这种条件下，经济型 SVD 分解得到的奇异值方阵 $\boldsymbol{S}$ 可以分成四个子块：

$$\boldsymbol{S} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{S}_{r\times r} & \boldsymbol{O}_{r\times(D-r)} \\ \boldsymbol{O}_{(D-r)\times r} & \boldsymbol{O}_{(D-r)\times(D-r)} \end{bmatrix} \tag{5}$$

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

将 (5) 代入经济型 SVD 分解 (3)，整理得到：

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

大家特别注意 (6) 中，矩阵 $\boldsymbol{V}$ 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 $\boldsymbol{X}$ 第一、二列数据之和替代 $\boldsymbol{X}$ 矩阵第四列，即 $\boldsymbol{x}_4 = \boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{x}_2$。这样 $\boldsymbol{X}$ 矩阵列向量线性相关，$\text{rank}(\boldsymbol{X}) = 3$，而 $s_4 = 0$。再次强调，只有 $\boldsymbol{X}$ 为非满秩情况下，才存在紧缩型 SVD 分解。紧缩型 SVD 分解中，$\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 都不是方阵。

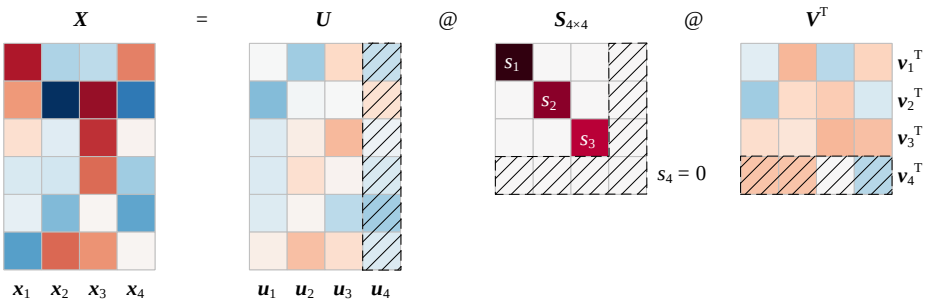


图 4. 数据 $\boldsymbol{X}$ 经济型 SVD 分解热图

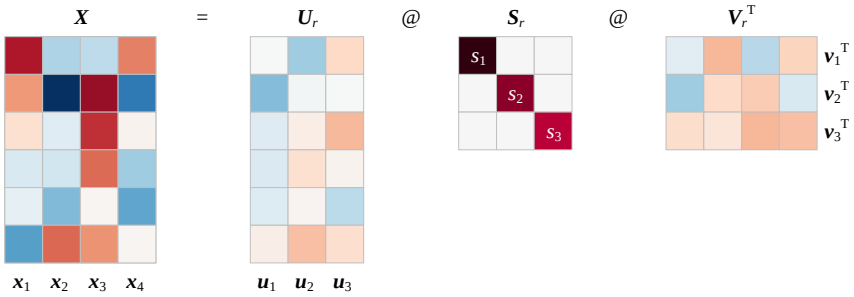


图 5. 数据 $\boldsymbol{X}$ 紧凑型 SVD 分解热图

`Bk4_Ch16_01.py` 中 `Bk4_Ch16_01_C` 部分绘制图 4。

16.4 截断型：近似

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

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

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 $\boldsymbol{X}$ 的一种近似。图 6 所示为 SVD 截断型分解热图，可以发现 $\boldsymbol{X}_{n\times D}$ 和 $\hat{\boldsymbol{X}}_{n\times D}$ 两幅热图存在一定“色差”。

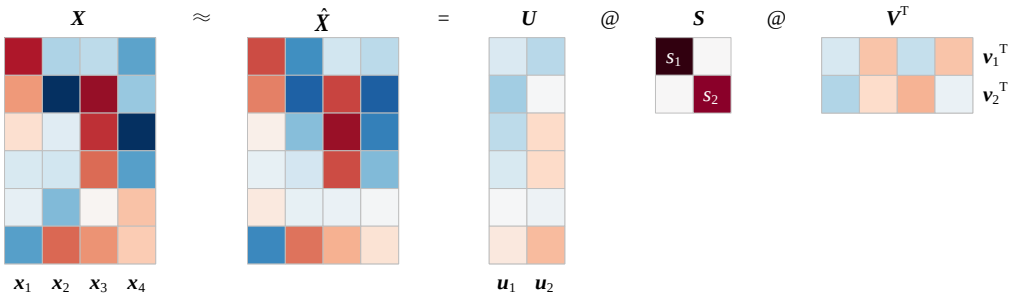
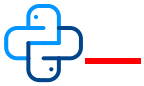


图 6. 采用截断型 SVD 分解还原数据运算热图



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：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{u}_1 & \boldsymbol{u}_2 & \cdots & \boldsymbol{u}_D\end{bmatrix}\begin{bmatrix}s_1 & & & \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_D\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}\end{bmatrix} \tag{8}$$

$$=\underbrace{s_1\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}}_{\hat{\boldsymbol{X}}_1}+\underbrace{s_2\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}}_{\hat{\boldsymbol{X}}_2}+\cdots+\underbrace{s_D\boldsymbol{u}_D\boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}}}_{\hat{\boldsymbol{X}}_D}$$

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

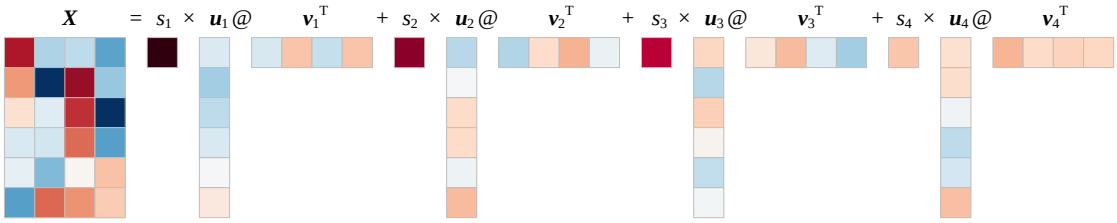


图 7. SVD 分解展开计算热图

组成部分

定义矩阵 $\boldsymbol{X}_j$ 为：

$$\boldsymbol{X}_j = s_j \boldsymbol{u}_j \boldsymbol{v}_j^{\mathrm{T}} \tag{9}$$

矩阵 $\boldsymbol{X}_j$ 形状和 $\boldsymbol{X}$ 相同。图 8 所示为矩阵 $\boldsymbol{X}_j$ (j = 1, 2, 3, 4) 计算过程热图。

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

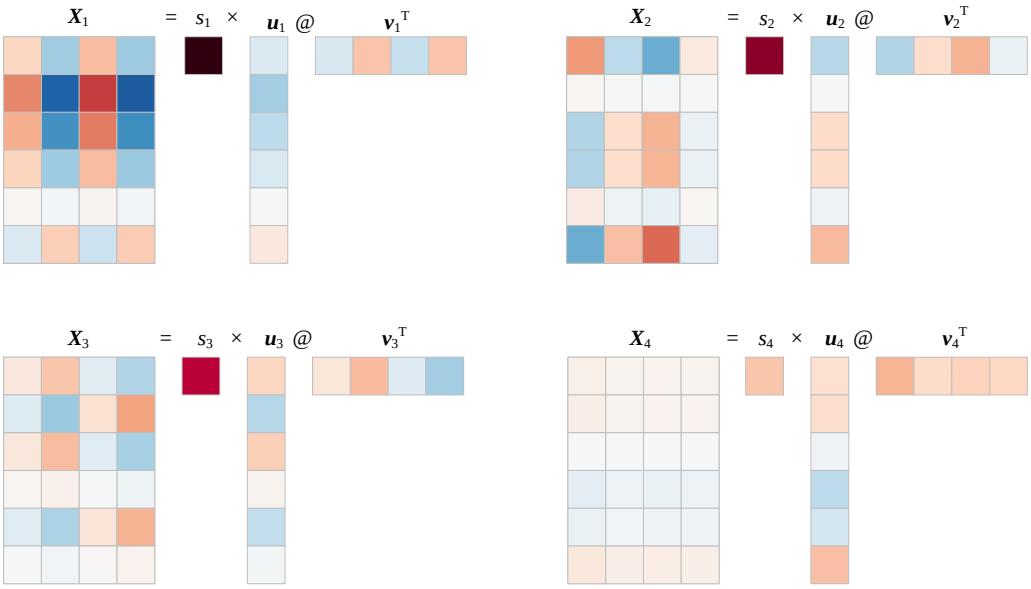


图 8. 还原数据的叠加成分

还原

(9) 代入 (8) 得到：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D} = \boldsymbol{X}_1 + \boldsymbol{X}_2 + \cdots + \boldsymbol{X}_D \tag{10}$$

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

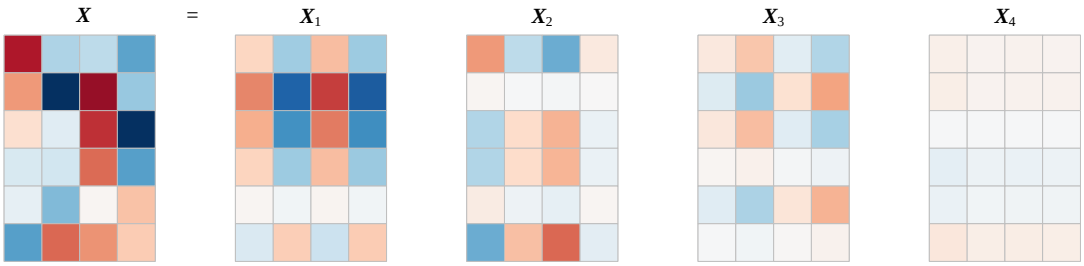


图 9. 还原原始数据

张量积

利用向量张量积，(8) 可以写成：

$$\boldsymbol{X} = \underbrace{s_1 \boldsymbol{u}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1}_{\hat{\boldsymbol{X}}_1} + \underbrace{s_2 \boldsymbol{u}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2}_{\hat{\boldsymbol{X}}_2} + \cdots + \underbrace{s_D \boldsymbol{u}_D \otimes \boldsymbol{v}_D}_{\hat{\boldsymbol{X}}_D} = \sum_{j=1}^{D} s_j \boldsymbol{u}_j \otimes \boldsymbol{v}_j \tag{11}$$

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

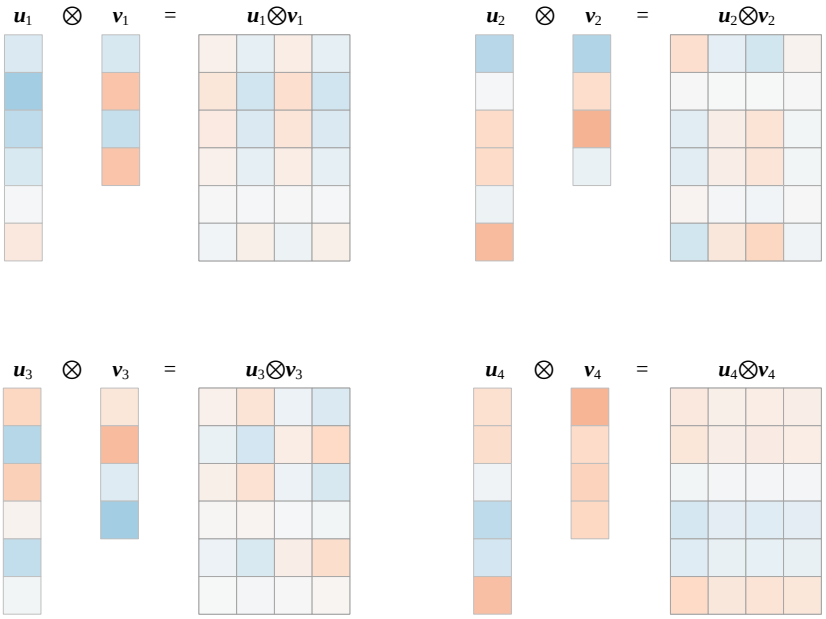


图 10. 向量张量热图

然后再用奇异值 s_j 乘以对应张量积 $\boldsymbol{u}_j \otimes \boldsymbol{v}_j$ 得到 $\boldsymbol{X}_j$，具体如图 11 所示。可以发现 $\boldsymbol{X}_1$ 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 $\boldsymbol{u}_j$ 和 $\boldsymbol{v}_j$ 决定了投影方向。

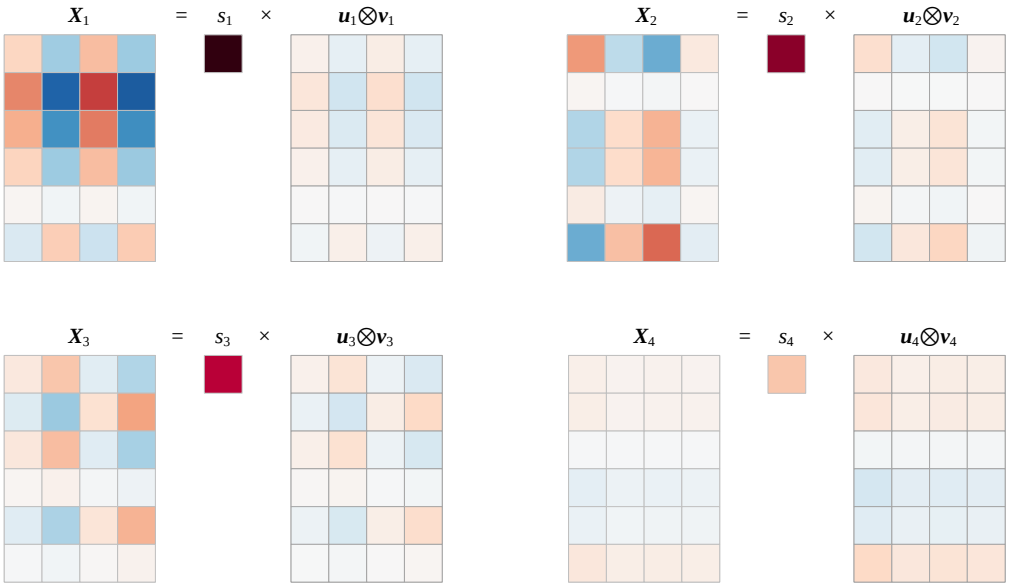


图 11. 奇异值标量乘张量积结果

正交投影

上一章指出 $\boldsymbol{v}_j$ 和 $\boldsymbol{u}_j$ 存在如下关系：

$$\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_j = s_j\boldsymbol{u}_j \tag{12}$$

将 (12) 代入 (11)，就得到：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{X} &= \underbrace{\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1}_{\hat{\boldsymbol{X}}_1} + \underbrace{\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2}_{\hat{\boldsymbol{X}}_2} + \cdots + \underbrace{\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_D \otimes \boldsymbol{v}_D}_{\hat{\boldsymbol{X}}_D} \\ &= \boldsymbol{X}\left(\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1 + \boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2 + \cdots + \boldsymbol{v}_D \otimes \boldsymbol{v}_D\right)\end{aligned} \tag{13}$$

这就是本书第 9、10 章反复提到的“二次投影 + 层层叠加”。以 $\boldsymbol{v}_1$ 为例，数据 $\boldsymbol{X}$ 在 span($\boldsymbol{v}_1$) 中投影在 $\mathbb{R}^D$ 中的像就是 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1$。span($\boldsymbol{v}_1$) 是 $\mathbb{R}^D$ 的子空间，维度为 1。这就意味着 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1$ 的秩为 1，即 $\text{rank}\left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1\right) = 1$。

之所以选择 $\boldsymbol{v}_1$ 做第一投影方向，就是因为在所有的一维方向中，$\boldsymbol{v}_1$ 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。

16.6 估计与误差：截断型 SVD

把数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 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 s_1 和 s_2 还原原始数据，其中 s_1 最大，s_2 其次。

根据上一节讨论，从图像还原角度，s_1 对应 $\boldsymbol{X}_1$，$\boldsymbol{X}_1$ 还原了 $\boldsymbol{X}$ 图像大部分特征；s_2 对应 $\boldsymbol{X}_2$，$\boldsymbol{X}_2$ 在 $\boldsymbol{X}_1$ 基础上进一步还原 $\boldsymbol{X}$。

$\boldsymbol{X}_1$ 和 $\boldsymbol{X}_2$ 叠加得到 $\hat{\boldsymbol{X}}$ 。如图 12 所示，$\boldsymbol{X}$ 和 $\hat{\boldsymbol{X}}$ 热图的相似度已经很高：

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

$\boldsymbol{X}$ 和 $\hat{\boldsymbol{X}}$ 热图误差矩阵为：

$$\boldsymbol{E}_{\varepsilon} = \boldsymbol{X}_{n\times D} - \hat{\boldsymbol{X}}_{n\times D} \tag{15}$$

我们给 $\boldsymbol{E}_{\varepsilon}$ 加了个下角标，以便区分标准正交基 $\boldsymbol{E}$。

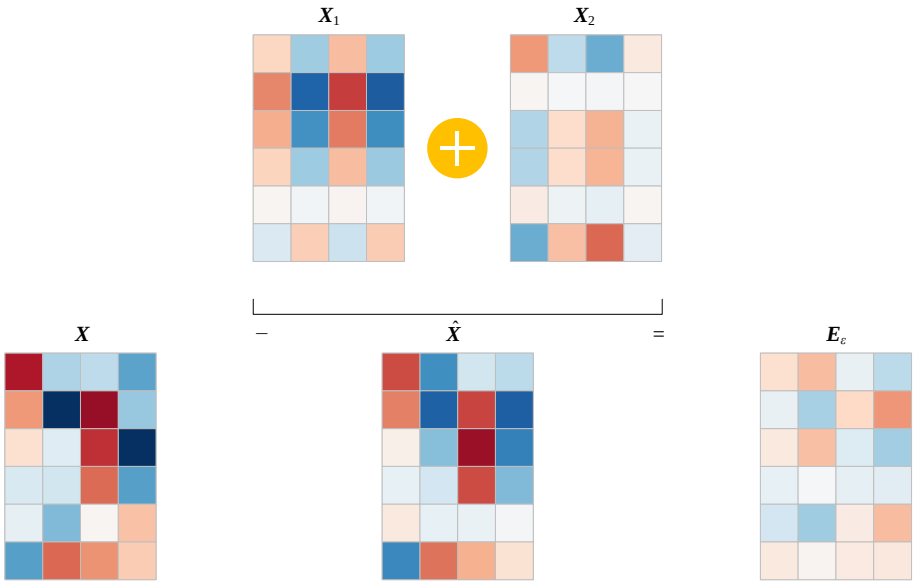


图 12. 利用前两个奇异值对应的矩阵还原数据

将 (14) 展开写成：

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

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。

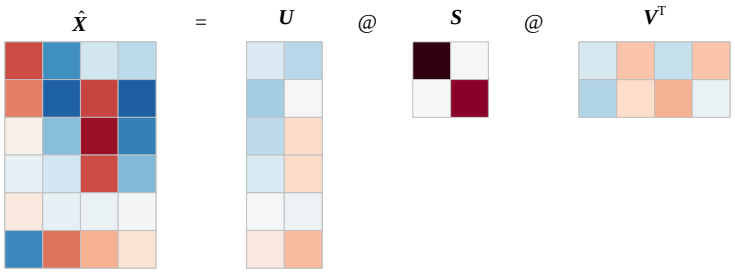


图 13. 用前两个主元还原原始数据

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。

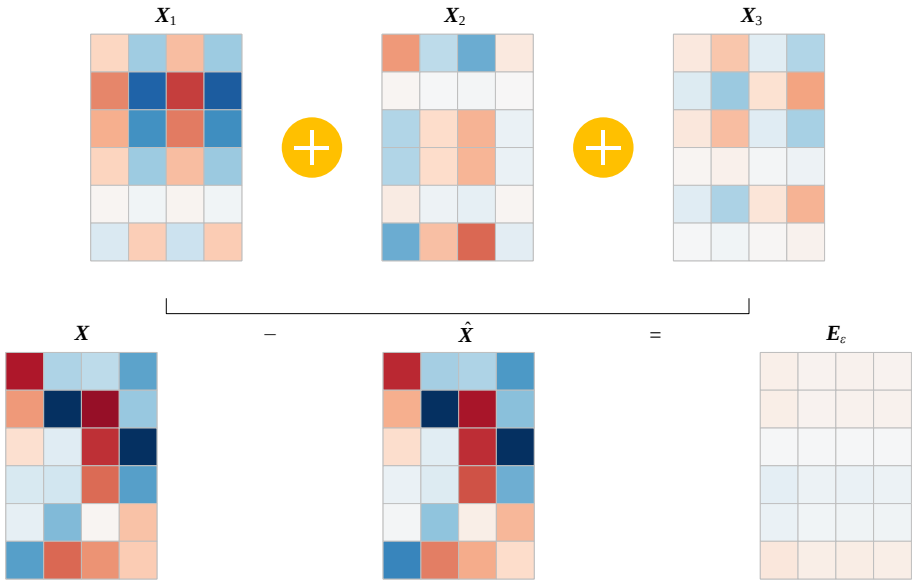
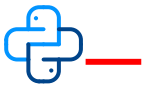


图 14. 利用前三个奇异值对应的矩阵还原数据

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：

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

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 O 矩阵。



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 $\boldsymbol{X}$。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。

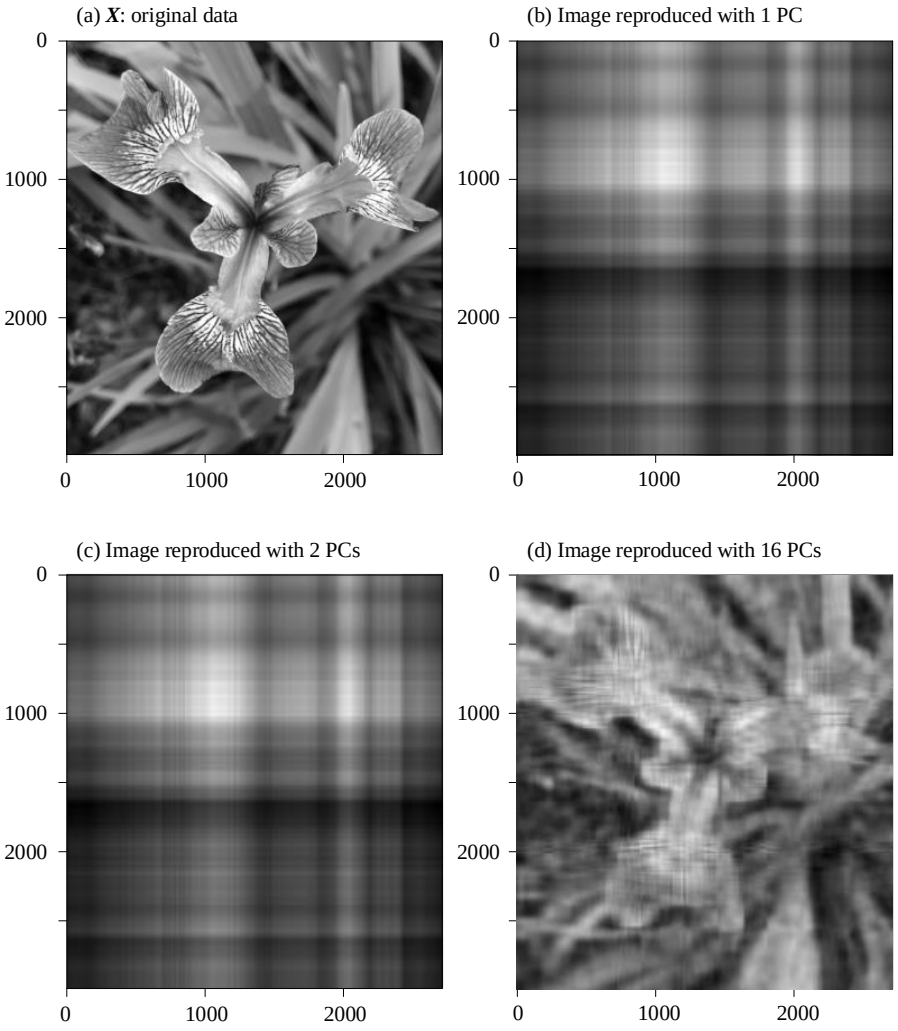


图 15. 还原原始图片

这个主成分对应的投影方向就是本节规范正交基向量 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$、$\boldsymbol{v}_3$ 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。

16.7 正交投影：数据正交化

本书之前第 10 章介绍过，下式相当于数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向规范正交基 $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 构成的 D 维空间投影：

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

乘积结果 $\boldsymbol{Z}$ 代表 $\boldsymbol{X}$ 在新的规范正交基 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 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 $\boldsymbol{V}$。本节聊聊投影结果 $\boldsymbol{Z}$ 的性质。

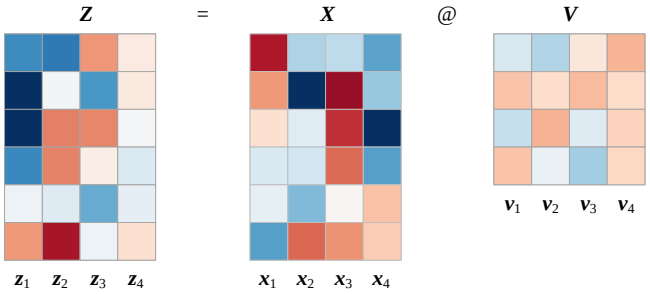


图 16. $\boldsymbol{X}$ 向规范正交基 $\boldsymbol{V}$ 投影

由于 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$，代入 (18) 得到：

$$\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{S} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_1 & \boldsymbol{u}_2 & \cdots & \boldsymbol{u}_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_1 & & & \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_1\boldsymbol{u}_1 & s_2\boldsymbol{u}_2 & \cdots & s_D\boldsymbol{u}_D \end{bmatrix} \tag{19}$$

即，

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_2 & \cdots & \boldsymbol{z}_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{Z}} = \underbrace{\begin{bmatrix} s_1\boldsymbol{u}_1 & s_2\boldsymbol{u}_2 & \cdots & s_D\boldsymbol{u}_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}} \tag{20}$$

如图 17 所示，上式给了我们计算 $\boldsymbol{Z}$ 的第二条路径。换句话说，$\boldsymbol{u}_j$ 实际上就是“单位化”的投影坐标，s_j 是 $\boldsymbol{z}_j$ 向量的模，即 $\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_j\| = \|\boldsymbol{z}_j\| = \|s_j\boldsymbol{u}_j\| = s_j\|\boldsymbol{u}_j\| = s_j$。

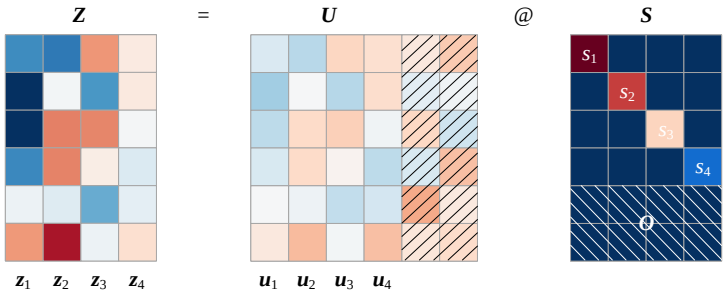


图 17. 第二条计算 $\boldsymbol{Z}$ 的路径

格拉姆矩阵

对 $\boldsymbol{Z}$ 求格拉姆矩阵：

$$\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{z}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{z}_D^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_2 & \cdots & \boldsymbol{z}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_2 & \cdots & \boldsymbol{z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_D \\ \boldsymbol{z}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_2 & \cdots & \boldsymbol{z}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{z}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_2 & \cdots & \boldsymbol{z}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_D \end{bmatrix} \tag{21}$$

请大家将上式写成向量内积形式。

将 (19) 代入得到 (21)：

$$\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z} = (\boldsymbol{U}\boldsymbol{S})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\underbrace{\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}}_{\boldsymbol{I}}\boldsymbol{S} = \begin{bmatrix} s_1^2 & & & \\ & s_2^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_D^2 \end{bmatrix} \tag{22}$$

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

$$\boldsymbol{z}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_j = \boldsymbol{z}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_i = \boldsymbol{z}_i \cdot \boldsymbol{z}_j = \boldsymbol{z}_j \cdot \boldsymbol{z}_i = \langle \boldsymbol{z}_i, \boldsymbol{z}_j \rangle = \langle \boldsymbol{z}_j, \boldsymbol{z}_i \rangle = 0, \quad i \neq j \tag{23}$$

回看图 16，$\boldsymbol{X} \rightarrow \boldsymbol{Z}$ 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”。

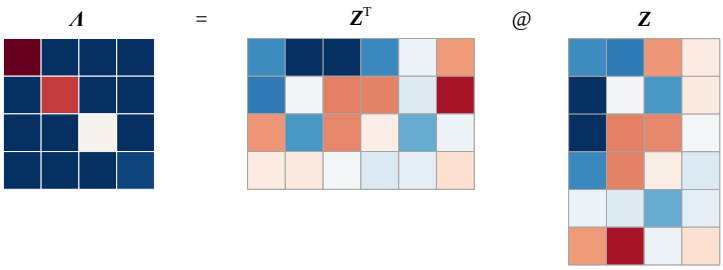


图 18. $\boldsymbol{Z}$ 的格拉姆矩阵

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。

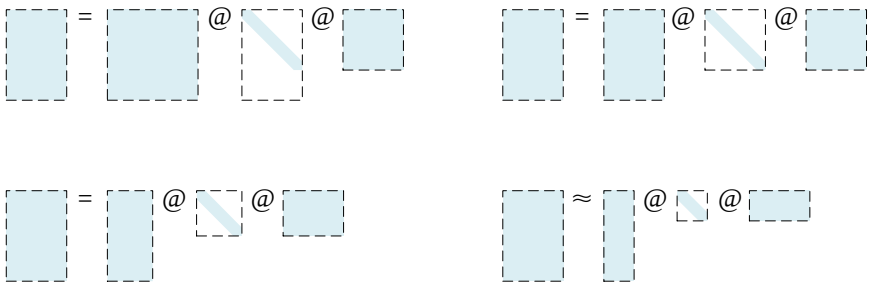


图 19. 总结本章重要内容的四幅图

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。

17 Derivatives of Multivariable Functions
多元函数微分

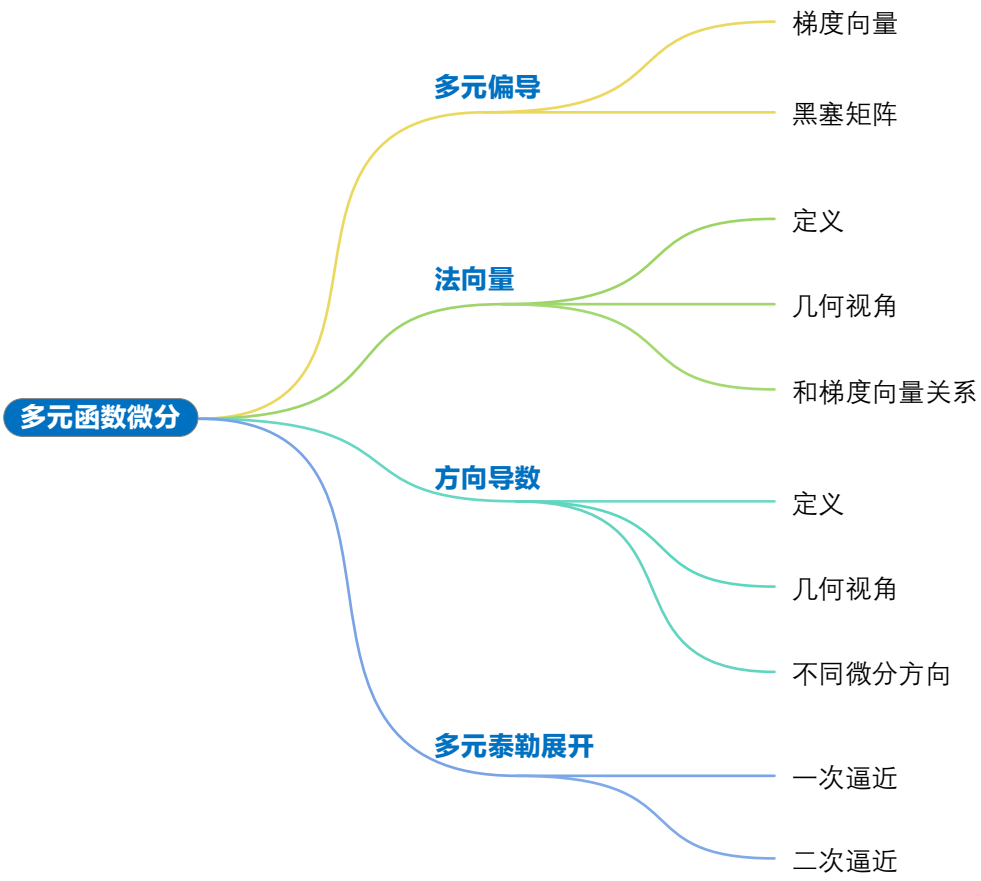
将偏微分延伸到高维和任意方向

数学的终极目标是人类精神的荣誉。

The object of mathematics is the honor of the human spirit.

—— 卡尔·雅可比 (Carl Jacobi) | 普鲁士数学家 | 1804 ~ 1851

- `numpy.meshgrid()` 获得网格数据
- `numpy.multiply()` 向量或矩阵逐项乘积
- `numpy.roots()` 多项式求根
- `numpy.sqrt()` 平方根
- `sympy.abc import x` 定义符号变量 x
- `sympy.diff()` 求解符号导数和偏导解析式
- `sympy.Eq()` 定义符号等式
- `sympy.evalf()` 将符号解析式中未知量替换为具体数值
- `sympy.plot_implicit()`绘制隐函数方程
- `sympy.symbols()` 定义符号变量



17.1 偏导：特定方向的变化率

回顾偏导

本系列丛书《数学要素》第 16 章讲过偏导数 (partial derivative) 内容。

一个多变量的函数的偏导数是函数关于其中一个变量的导数，而保持其他变量恒定。白话说，偏导数关注曲面某个特定方向上的变化率。换个角度，一元函数导数这个工具改造成偏导数后，可以用在多元函数上。

下面以二元函数为例回顾偏导数定义。设 $f(x_1, x_2)$ 是定义在平面 $\mathbb{R}^2$ 上的二元函数，$f(x_1, x_2)$ 在点 (a, b) 的某一邻域内有定义。

图 1 (a) 网格面为 $f(x_1, x_2)$ 函数曲面，平行 x_1y 平面在 $x_2 = b$ 切一刀得到浅蓝色剖面，偏导 $f_{x1}(a,b)$ 就是浅蓝色剖面在 (a, b) 一点的切线斜率。

同理，如图 1 (b) 所示，平行 x_2y 平面在 $x_1 = a$ 切一刀，偏导 $f_{x2}(a,b)$ 就是浅蓝色剖面在 (a, b) 一点的切线斜率。

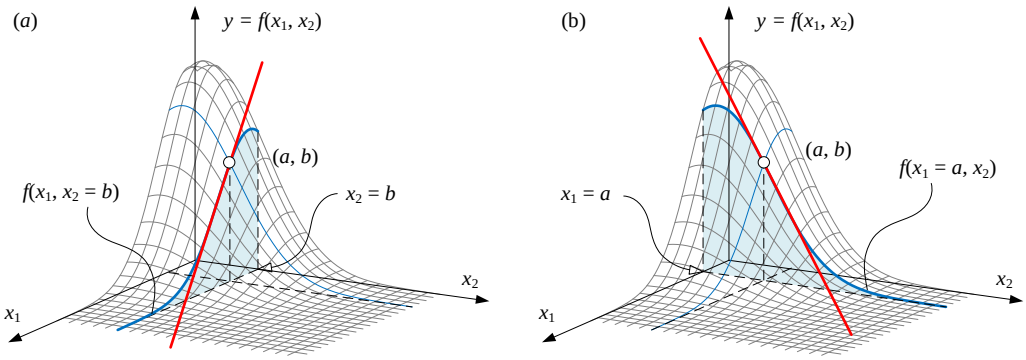


图 1. $f(x_1, x_2)$ 偏导定义，图片来自《数学要素》

向量形式

为了方便表达和运算，我们可以把上述二元函数在 x_1 和 x_2 方向上的偏导写成列向量形式：

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \end{bmatrix} \tag{1}$$

其中，$\boldsymbol{x}$ 为列向量，$\boldsymbol{x} = [x_1, x_2]^T$。

一次函数

给定如下多元一次函数 $f(\boldsymbol{x})$：

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w} + b \tag{2}$$

其中，$\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{w}$ 均为列向量：

$$\boldsymbol{w} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_D \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_D \end{bmatrix} \tag{3}$$

(2) 展开得到大家熟悉的一次函数形式：

$$f(\boldsymbol{x}) = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots w_D x_D + b \tag{4}$$

从空间角度来看，当 $b = 0$ 时，上式代表的超平面通过原点，可以看做是向量空间；当 $b \neq 0$ 时，超平面不过原点，上式可以视作仿射空间。

(2) 多元一次函数 $f(\boldsymbol{x})$ 对 $\boldsymbol{x}$ 求一阶导，并写成列向量形式：

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_D} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_D \end{bmatrix} = \boldsymbol{w} \tag{5}$$

本章后文会给上式一个新的名字——**梯度向量** (gradient vector)。另外，请大家注意以下等价关系：

$$\frac{\partial\left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}\right)}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial\left(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x}\right)}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial\left(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{w}\right)}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial\left\langle \boldsymbol{w}, \boldsymbol{x}\right\rangle}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{w} \tag{6}$$

二次函数

给定如下二次函数：

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = x_1^2 + x_2^2 + \cdots x_D^2 \tag{7}$$

从几何角度来看，上式是多元空间的正圆抛物面。特别地，$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = c$ ($c > 0$) 时，上式代表 D 维正球体。

(7) 对向量 $\boldsymbol{x}$ 求一阶导：

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_D} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \\ \vdots \\ 2x_D \end{bmatrix} = 2\boldsymbol{x} \tag{8}$$

要是类比的话，$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 相当于 $f(x) = x^2$。而上式相当于 $f(x)$ 的一阶导数 $f'(x) = 2x$。

(8) 等价于：

$$\frac{\partial(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial\left(\|\boldsymbol{x}\|_2^2\right)}{\partial \boldsymbol{x}} = 2\boldsymbol{x} \tag{9}$$

形如 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}$ 函数

给定：

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} \tag{10}$$

(10) 对 $\boldsymbol{x}$ 求一阶导：

$$\frac{\partial(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = (\boldsymbol{Q} + \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{x} \tag{11}$$

⚠ 注意，$\boldsymbol{Q}$ 为常数方阵。

如果 $\boldsymbol{Q}$ 为对称矩阵，(10) 对 $\boldsymbol{x}$ 一阶导数可以写成：

$$\frac{\partial(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = 2\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} \tag{12}$$

假设 $\boldsymbol{Q}$ 为对称矩阵，给定如下二次函数：

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b \tag{13}$$

(13) 对 $\boldsymbol{x}$ 求一阶导：

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{w} \tag{14}$$

举个形似 (13) 的例子：

$$f(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\underbrace{\begin{bmatrix}1 & 2\\ 2 & 3\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{Q}}\boldsymbol{x}+\underbrace{\begin{bmatrix}4\\ 5\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}}_{\boldsymbol{w}}\boldsymbol{x}+6 \tag{15}$$

(15) 向量 $\boldsymbol{x}$ 求一阶导：

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}=\begin{bmatrix}1 & 2\\ 2 & 3\end{bmatrix}\boldsymbol{x}+\begin{bmatrix}4\\ 5\end{bmatrix} \tag{16}$$

如下形式函数对向量 $\boldsymbol{x}$ 求一阶导：

$$\frac{\partial\left((\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c})\right)}{\partial \boldsymbol{x}}=2\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}) \tag{17}$$

其中，$\boldsymbol{Q}$ 为对称矩阵。

二阶偏导：黑塞矩阵

黑塞矩阵 (Hessian matrix) 是一个多元函数的二阶偏导数构成的方阵，黑塞矩阵描述了函数的局部曲率。黑塞矩阵由德国数学家**奥托·黑塞** (Otto Hesse) 引入并以其名字命名。

假设有一实值函数 $f(\boldsymbol{x})$，如果它的所有二阶偏导数都存在、并在定义域内连续，那么 $f(\boldsymbol{x})$ 的黑塞矩阵 $\boldsymbol{H}$ 为：

$$\boldsymbol{H}=\frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{x}\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}=\nabla^2 f(\boldsymbol{x})=\begin{bmatrix}\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1\partial x_D}\\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2\partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2\partial x_D}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_D\partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_D\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_D^2}\end{bmatrix} \tag{18}$$

注意，$\underset{x_1\to x_2}{\frac{\partial^2 f}{\partial x_1\partial x_2}}=\frac{\partial}{\partial x_2}\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)$ 代表先对 x_1、后对 x_2 二阶混合偏导。

(10) 中给定二次函数对向量 $\boldsymbol{x}$ 求二阶导，获得黑塞矩阵：

$$\boldsymbol{H}=\frac{\partial^2\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}\right)}{\partial \boldsymbol{x}\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}=\boldsymbol{Q}+\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}} \tag{19}$$

如果 $\boldsymbol{Q}$ 为对称，(19) 中黑塞矩阵为：

$$\boldsymbol{H}=\frac{\partial^2\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}\right)}{\partial \boldsymbol{x}\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}=2\boldsymbol{Q} \tag{20}$$

以 (15) 为例，这个二元函数的黑塞矩阵为：

$$\boldsymbol{H}=\frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{x}\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1\partial x_2}\\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2\partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}\end{bmatrix}\begin{matrix}\\ {\scriptstyle x_1\to x_2}\\ {\scriptstyle x_2\to x_1}\\ \\ \end{matrix}=\begin{bmatrix}1 & 2\\ 2 & 3\end{bmatrix} \tag{21}$$

本书后续会在优化问题中用到黑塞矩阵判断极值点。本节的内容可能会显得单调。本章后续将依托几何视角帮助大家理解本节内容。

17.2 梯度向量：上山方向

我们给上节讨论的一阶导数新名字——**梯度向量** (gradient vector)。函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的梯度向量定义如下：

$$\operatorname{grad} f(\boldsymbol{x})=\nabla f(\boldsymbol{x})=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f}{\partial x_1}\\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2}\\ \vdots\\ \dfrac{\partial f}{\partial x_D}\end{bmatrix} \tag{22}$$

梯度向量可以使用 grad() 作为运算符，也常使用**倒三角微分算子** ∇，∇ 也叫 **Nabla 算子** (Nabla symbol)。

几何视角

从几何视角来看梯度向量，如图 2 所示，在坡面 P 点处放置一个小球，轻轻松开手一瞬间，小球沿着坡面最陡峭方向 (绿色箭头) 滚下。瞬间滚动方向在平面上的投影方向便是**梯度下降方向** (direction of gradient descent)，也称“下山”方向。

数学中，下山方向的反方向即梯度向量方向，也称作“上山”方向。

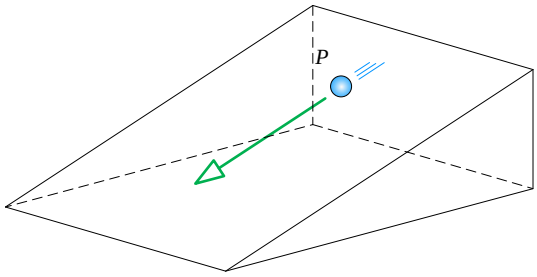


图 2. 梯度方向原理

二元函数

以二元函数为例，$f(x_1, x_2)$ 某一点 P 处梯度向量为：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}_P) = \text{grad } f(\boldsymbol{x}_P) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \end{bmatrix}_{x_P} \tag{23}$$

P 处于不同点时，可以得到**梯度向量场** (gradient vector field)。图 3 所示为某个函数梯度向量的分布。大家容易发现，梯度向量垂直所在位置等高线。某点梯度向量长度越长，即向量模越大，这说明该处越陡峭。相反，如果梯度向量模越小，这说明该点越平坦。特殊情况是，梯度向量为 $\boldsymbol{0}$ 向量时，这一点便是驻点，该点切平面平行于水平面。

白话讲，把图 3 看成一幅地图的话，某点梯度向量指向的方向就是该点最陡峭的上山方向。梯度向量的垂直方向就是该点等高线切线。沿着等高线规划的路径运动，高度不变。

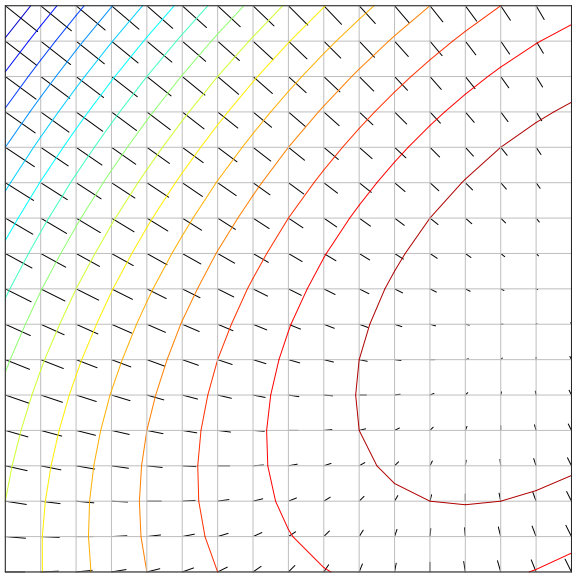


图 3. 梯度向量场

下面我们来看三个例子。

第一个例子：一次函数

给定二元一次 $f(x_1, x_2)$ 函数如下：

$$f(x_1, x_2) = x_1 + x_2 \tag{24}$$

如图 4 (a) 所示，这个函数在三维空间的形状是个平面。这个平面通过原点，可以视作向量空间。

(24) 函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的梯度向量为：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{25}$$

观察上式，容易发现二元一次函数的梯度向量的方向和大小不随位置改变，具体如图 4 (b) 所示。不存在任何约束条件的话，这个平面不存在任何极值点。沿着梯度向量方向运动，函数值增大，即上山。

本书第 19 章会专门讲解直线、平面和超平面。

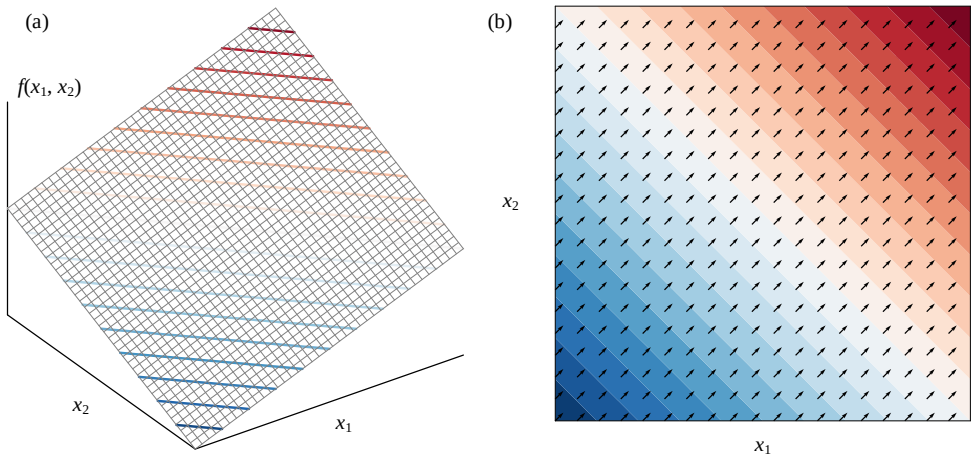


图 4. 平面的梯度向量场

第二个例子：二次函数

$f(x_1, x_2)$ 为二元二次函数，具体如下：

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 \tag{26}$$

图 5 (a) 告诉我们这个二元二次函数图像是个开口朝上的正圆抛物面，曲面显然存在最小值点，位于 (0, 0)。

(26) 函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的梯度向量定义如下：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{bmatrix} \tag{27}$$

观察图 5 (b)，容易发现越靠近 (0, 0)，也就是最小值点附近，曲面梯度向量的模越小。在 (0, 0) 处，梯度向量为 $\boldsymbol{0}$。也就是说，该点处 $f(x_1, x_2)$ 对 x_1 和 x_2 偏导数都为 0。显然 $\boldsymbol{0}$ 是函数的最小值点。图 5 (b) 中不同点处梯度向量均垂直于等高线，指向背离最小值点，即上山方向。离 $\boldsymbol{0}$ 越远，梯度向量模越大，曲面坡度越陡峭。

如果我们现在处于曲面上某一点，沿着下山方向一步步行走，最终我们会到达最小值点处。这个思路就是基于梯度的优化方法。当然，我们需要制定一个下山的策略。比如，下山的步伐怎么确定？路径怎么规划？怎么判定是否到达极值点？不同的基于梯度的优化方法在具体下山策略上有差别。这些内容，我们会在本系列丛书后续分册中讨论。

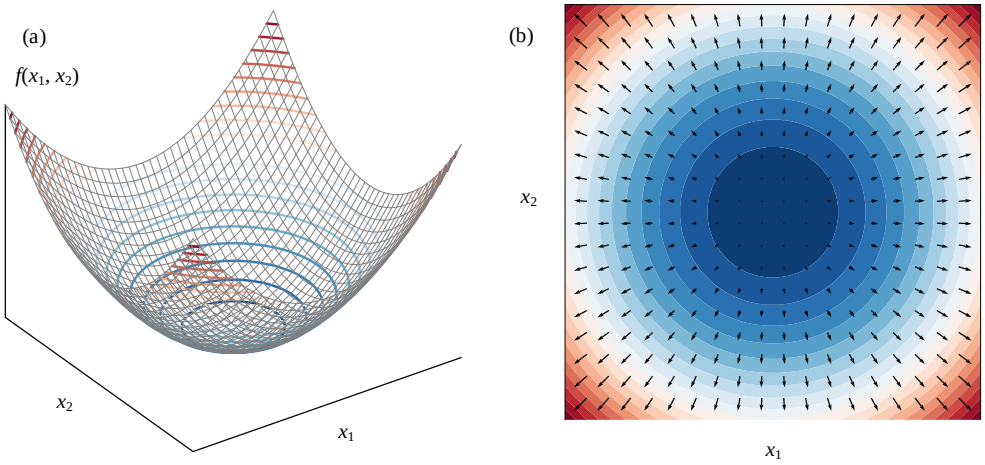


图 5. 正圆抛物面的向量场

第三个例子：复合函数

给定 $f(x_1, x_2)$ 函数如下：

$$f(x_1, x_2) = x_1 \exp\left(-\left(x_1^2 + x_2^2\right)\right) \tag{28}$$

图 6 (a) 所示为函数曲面，它存在一个最大值点和一个最小值点。

函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的梯度向量定义如下：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2x_1^2 \exp\left(-\left(x_1^2 + x_2^2\right)\right) + \exp\left(-\left(x_1^2 + x_2^2\right)\right) \\ -2x_1 x_2 \exp\left(-\left(x_1^2 + x_2^2\right)\right) \end{bmatrix} \tag{29}$$

图 6 (b) 中，最大值点附近，梯度向量均指向最大值点。最小值点附近，梯度向量均背离最小值点。

在最大值和最小值点处，梯度向量都是 $\boldsymbol{0}$ 向量。

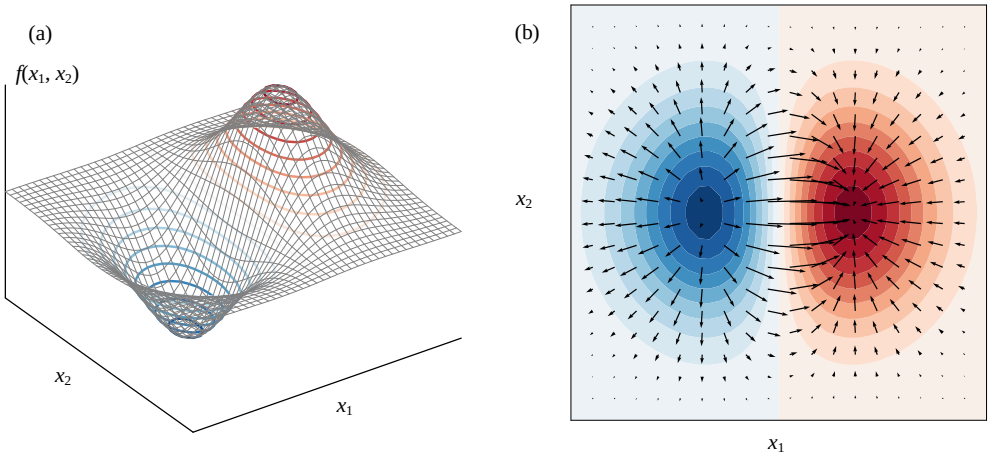


图 6. $x_1 \exp\left(-\left(x_1^2 + x_2^2\right)\right)$ 的梯度向量场

请大家修改 Bk4_Ch17_01.py 并绘制图 4、图 5、图 6。

在 Bk4_Ch17_01.py 基础上，我们用 Streamlit 和 Plotly 制作了一个 App，用来交互可视化图 6 两幅图像。请大家参考 Streamlit_Bk4_Ch17_01.py。

17.3 法向量：垂直于切平面

对于 $y = f(\boldsymbol{x})$ 函数，我们可以把它看做是等式 $f(\boldsymbol{x}) - y = 0$。定义 $F(\boldsymbol{x}, y)$ 如下：

$$F(\boldsymbol{x},y)=f(\boldsymbol{x})-y \tag{30}$$

函数 $F(\boldsymbol{x},y)$ 梯度向量为：

$$\nabla F(\boldsymbol{x},y)=\begin{bmatrix}\nabla f(\boldsymbol{x})\\ -1\end{bmatrix} \tag{31}$$

这个梯度向量就是 $f(\boldsymbol{x})$ 点 $\boldsymbol{x}$ 处曲面的法向量 $\boldsymbol{n}$：

$$\boldsymbol{n}=\begin{bmatrix}\nabla f(\boldsymbol{x})\\ -1\end{bmatrix} \tag{32}$$

如图 7 所示，以二元函数 $f(\boldsymbol{x})$ 为例，$\boldsymbol{n}$ 向水平面投影得到梯度向量 $\nabla f(\boldsymbol{x})$。

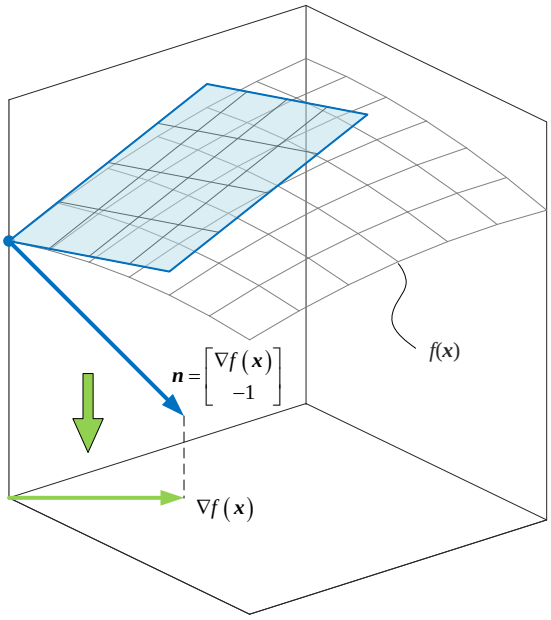


图 7. $\boldsymbol{n}$ 向水平面投影得到梯度向量

图 8 左图所示为某个二元函数 $f(\boldsymbol{x})$ 曲面上不同点处的法向量，这些法向量向 x_1x_2 平面投影便得到 $f(\boldsymbol{x})$ 的梯度向量，具体如图 8 右图所示。这个视角非常重要，本书第 21 章还会继续用到。

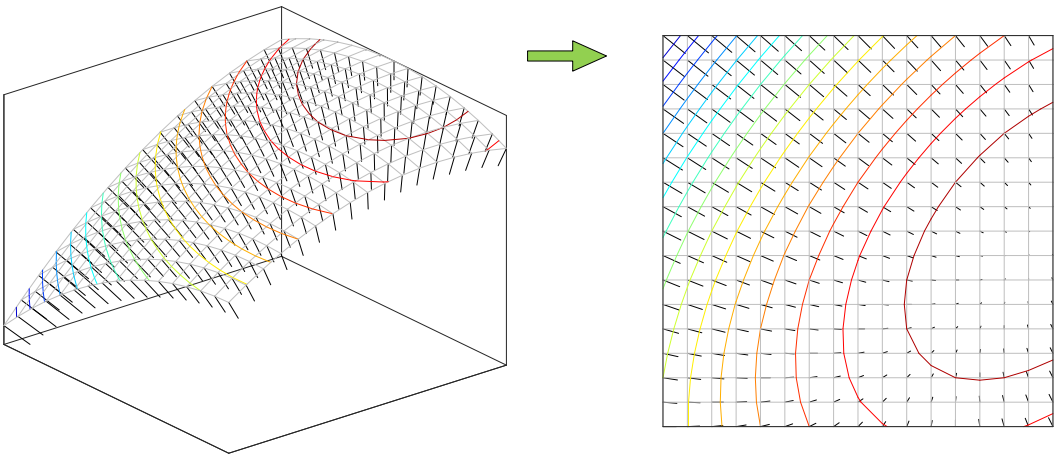


图 8. 曲面法向量场投影得到梯度向量场

图 9 给出的是 (28) 中函数在不同点处的法向量，这些向量朝水平面投影便得到图 6 (b)。曲面越陡峭，法向量在水平面投影的分量越多。举个极端例子，曲面某点处切面垂直于水平面，即坡度为 90 度，它的法线则平行于水平面。特别地，在极值点处，曲面的法向量垂直于水平面，因此在水平面的投影为零向量 $\boldsymbol{0}$。觉得图 9 不容易看的话，请大家参考图 10。

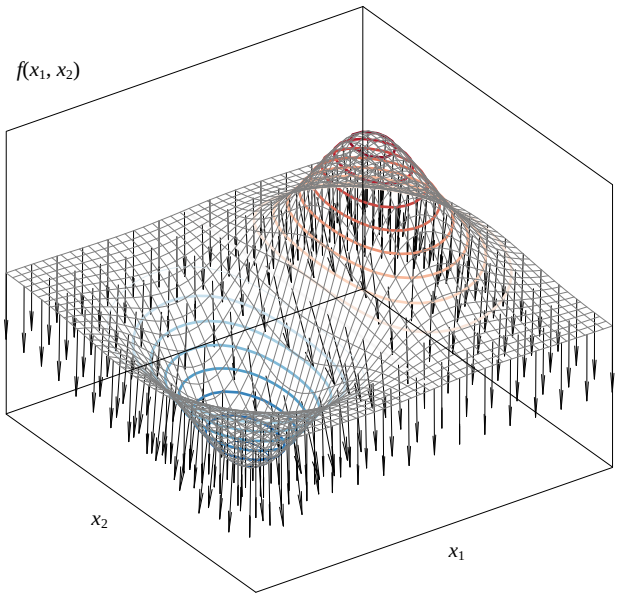


图 9. $x_1 \exp\left(-\left(x_1^2 + x_2^2\right)\right)$ 的法向量场

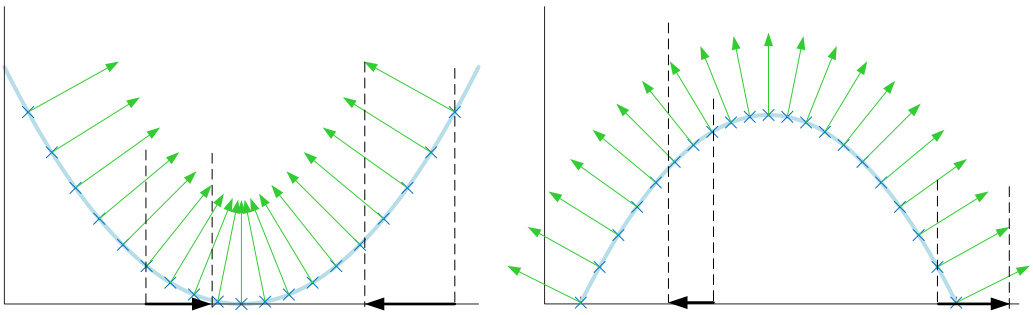
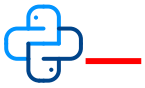


图 10. 曲线法向量在水平面上投影



Bk4_Ch17_02.py 绘制图 9。

17.4 方向性微分：函数任意方向的变化率

《数学要素》一册提到过，光滑曲面 $f(x_1, x_2)$ 某点的切线有无数条，如图 11 所示。而偏导数仅仅分析了其中两条切线的变化率，它们分别沿着 x_1 和 x_2 轴方向。

本节将介绍一个全新的数学工具——**方向性微分** (directional derivative)，它可以分析光滑曲面某点处不同方向切线的变化率。

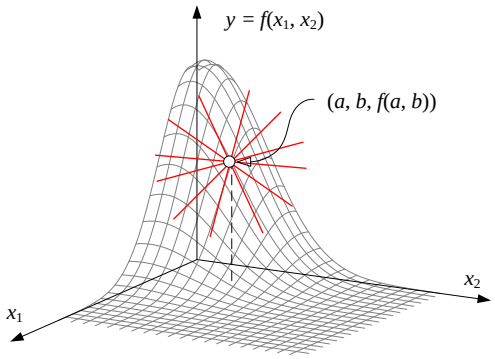


图 11. 光滑曲面 $f(x_1, x_2)$ 某点的切线有无数条

以二元函数为例

二元函数 $f(x_1, x_2)$ 写作 $f(\boldsymbol{x})$：

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2) \tag{33}$$

$P(x_1, x_2)$ 点处，任意偏离 P 点微小移动 $(\Delta x_1, \Delta x_2)$ 可能导致 $f(\boldsymbol{x})$ 大小发生变化，函数值变化具体为：

$$\Delta f = f(\boldsymbol{x} + \Delta\boldsymbol{x}) - f(\boldsymbol{x}) = f(x_1 + \Delta x_1, x_2 + \Delta x_2) - f(x_1, x_2) \tag{34}$$

如图 12 所示，曲面从 P 点移动到 Q 点高度变化就是上式中的 Δf 。

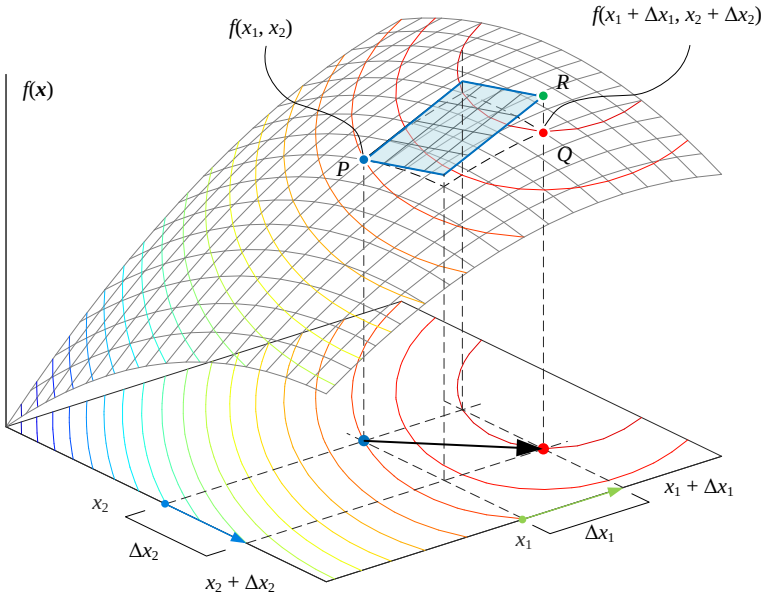


图 12. 曲面从 P 点移动到 Q 点对应位置变化

用一阶偏微分近似求解 Δf:

$$\begin{aligned}\Delta f &= f(\boldsymbol{x} + \Delta\boldsymbol{x}) - f(\boldsymbol{x}) \\ &= \underbrace{f(x_1 + \Delta x_1, x_2 + \Delta x_2)}_{Q} - \underbrace{f(x_1, x_2)}_{P} \approx \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1}\Delta x_1 + \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2}\Delta x_2\end{aligned} \tag{35}$$

上式便是本系列丛书《数学要素》讲过的二元函数泰勒一阶展开。如图 12 所示，上式相当于用二元一次函数斜面 (浅蓝色背景) 近似函数曲面，即：

$$\underbrace{f(x_1 + \Delta x_1, x_2 + \Delta x_2)}_{Q} \approx \underbrace{f(x_1, x_2) + \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1}\Delta x_1 + \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2}\Delta x_2}_{R} \tag{36}$$

上式左侧代表 Q 点高度，右侧代表 R 点高度。两者之差就是估算误差。

几何视角

图 13 为图 12 局部放大图，这张图更清晰地展示估算过程。

在 $P(x_1, x_2)$ 点处，二元函数曲面的高度为 $f(x_1, x_2)$。沿着蓝色斜面从 P 点运动到 R 点，我们把高度变化分成两步阶梯来看。沿着 x_1 方向上移动 Δx_1 带来的高度变化为 $\left.\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1}\right|_P \Delta x_1$。类似地，在 x_2 方向上移动 Δx_2 带来的高度变化为 $\left.\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2}\right|_P \Delta x_2$。两个高度变化之和便是对的 Δf 一阶逼近。

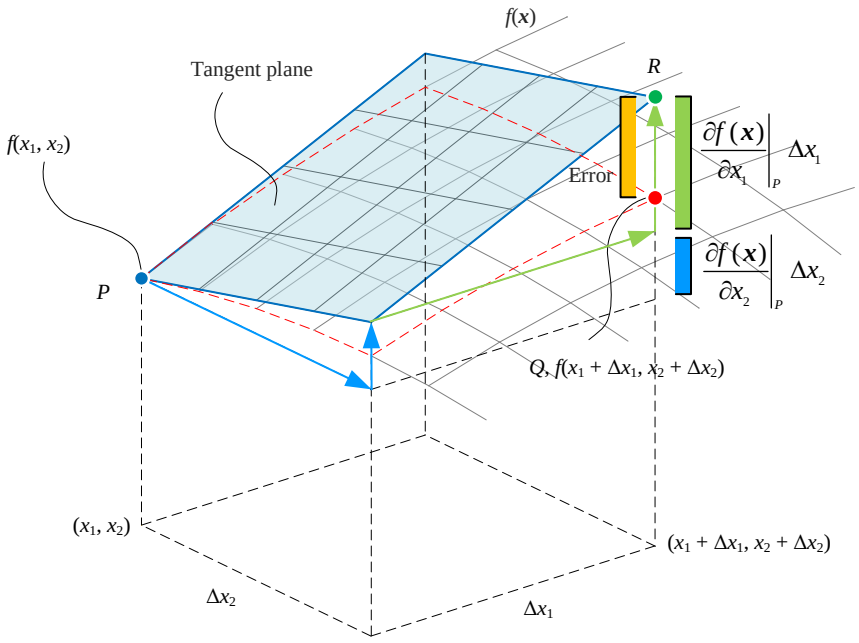


图 13. 二元函数一阶泰勒展开估算

(35) 可以写成两个向量内积关系：

$$\Delta f \approx \begin{bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \end{bmatrix} \tag{37}$$

换个角度，向量 $[\Delta x_1, \Delta x_2]^{\mathrm{T}}$ 决定了 P 点方向微分方向，如图 14 所示。

也就是说，有了向量 $[\Delta x_1, \Delta x_2]^{\mathrm{T}}$，我们可以量化二元函数 $f(x_1, x_2)$ 在任意方向的函数变化，以及变化率。

单位向量

x_1x_2 平面上，给定一个方向，用单位向量 $\boldsymbol{v}$ 表示：

$$\boldsymbol{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} \tag{38}$$

令单位向量 $\boldsymbol{v}$ 为：

$$\boldsymbol{v} = \begin{bmatrix} \cos\theta_1 \\ \cos\theta_2 \end{bmatrix} \tag{39}$$

图 14 给出 θ_1 和 θ_2 角度定义。可以这样理解单位向量 $\boldsymbol{v}$，模为 1 代表“一步”，$\boldsymbol{v}$ 的方向代表运动方向。也就是说，单位向量 $\boldsymbol{v}$ 确定了朝哪个方向运动一步。

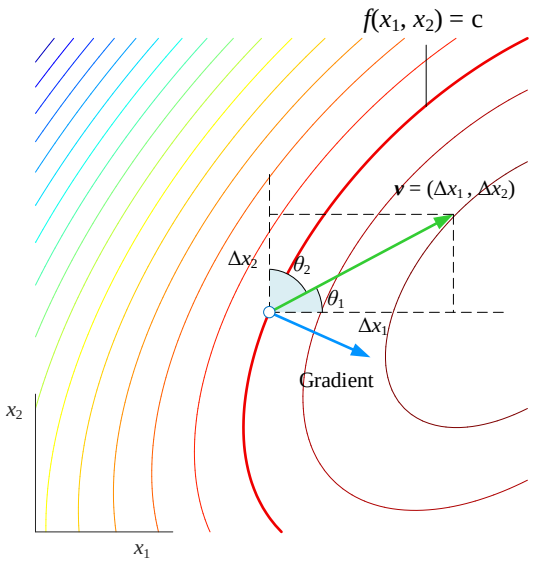


图 14. x_1x_2 平面上方向微分

对于上述二元函数，定义方向性微分为：

$$\nabla_{\boldsymbol{v}} f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{v} \cdot \nabla f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \nabla f(\boldsymbol{x}) = \langle \boldsymbol{v}, \nabla f(\boldsymbol{x}) \rangle \tag{40}$$

展开得到方向导数和偏导之间关系为：

$$\nabla_{\boldsymbol{v}} f(\boldsymbol{x}) = \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1}\cos\theta_1 + \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2}\cos\theta_2 = \begin{bmatrix} \cos\theta_1 \\ \cos\theta_2 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \end{bmatrix} \tag{41}$$

(40) 也适用于多元函数。

不同方向

根据向量内积法则，(40) 可以写成：

$$\begin{aligned}\nabla_{\boldsymbol{v}} f(\boldsymbol{x}) &= \nabla f(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{v} \\ &= \left\|\nabla f(\boldsymbol{x})\right\| \cdot \left\|\boldsymbol{v}\right\| \cos(\theta) \\ &= \left\|\nabla f(\boldsymbol{x})\right\| \cos(\theta)\end{aligned} \tag{42}$$

其中，$\boldsymbol{v}$ 为单位向量，θ 为 $\nabla f(\boldsymbol{x})$ 和 $\boldsymbol{v}$ 之间相对夹角。

图 15 所示为 x_1x_2 平面上六种不同方向导数情况。

如图 15 (a) 和 (b) 所示，若 $\theta = 90°$，方向导数垂直于梯度向量，(42) 为 0。这说明沿着等高线运动，函数值不会有任何变化。

如图 15 (c)，若 $\theta = 180°$，(42) 取得最小值。此时，$\boldsymbol{v}$ 方向为梯度向量反方向，即下山方向。沿着 $\boldsymbol{v}$ 运动瞬间，函数值减小最快。

如图 15 (d)，$\theta = 0°$，(42) 取得最大值。方向导数和梯度向量同向，对应该点处函数值增大最快方向，即上山方向。

当 θ 为锐角，(42) 大于 0。沿着 $\boldsymbol{v}$ 运动瞬间，函数变化值大于 0，如图 15 (e)。当 θ 为钝角，(42) 小于 0。沿着 $\boldsymbol{v}$ 运动瞬间，函数变化值小于 0，如图 15 (f)。

特别地，$\boldsymbol{v} = [1, 0]^T$ 对应 $f(x_1, x_2)$ 对 x_1 偏导。$\boldsymbol{v} = [0, 1]^T$ 对应 $f(x_1, x_2)$ 对 x_2 偏导。可见，方向性微分比偏导更灵活。

方向导数可以用来研究多元函数在某一特定方向的函数变化率，机器学习和深度学习很多算法在求解优化问题时都会用到方向导数这个重要的数学工具。

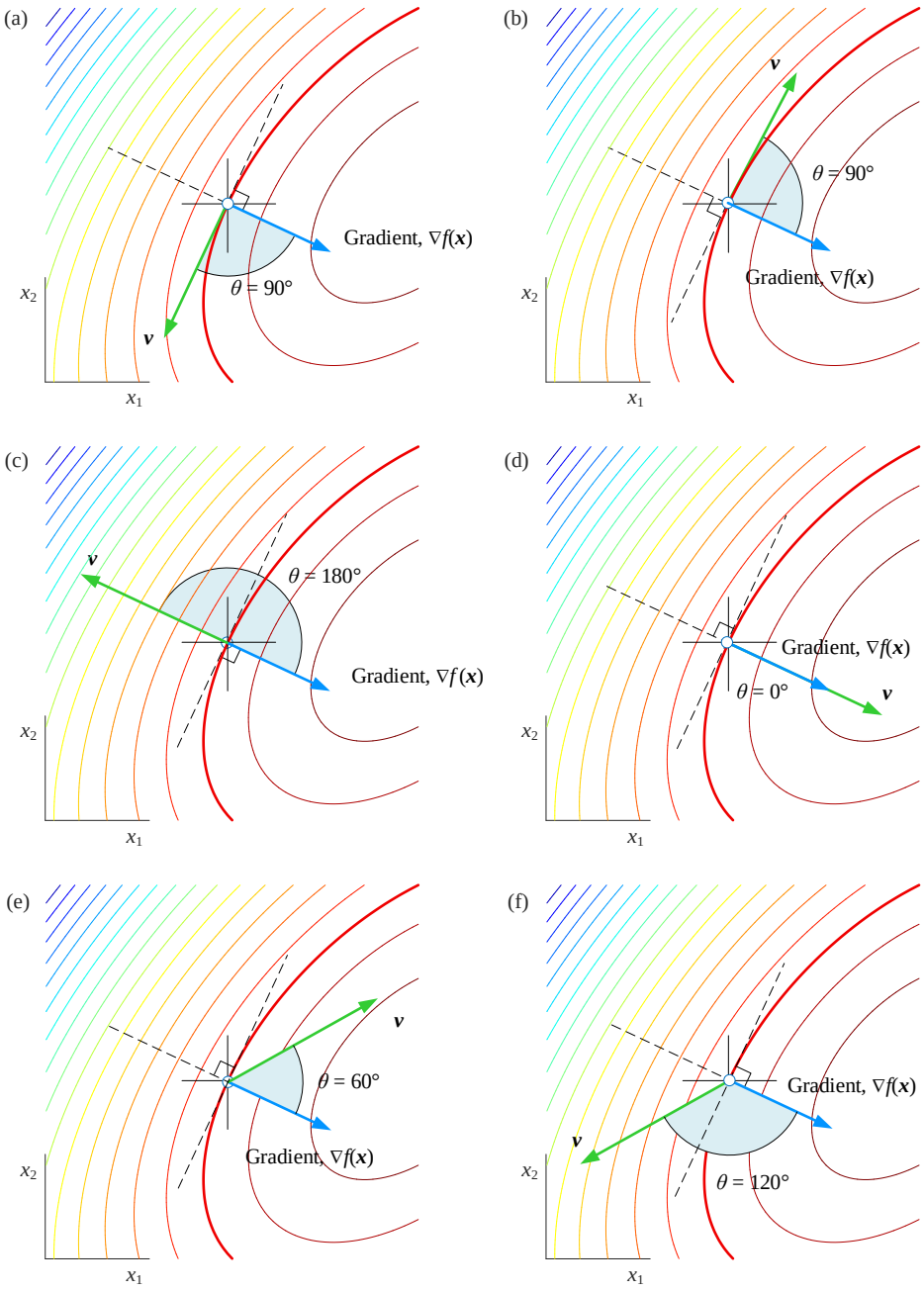


图 15. x_1x_2 平面上六种方向导数情况

17.5 泰勒展开：一元到多元

丛书《数学要素》第 17 章介绍**泰勒展开** (Taylor series expansion)。本节将一元泰勒展开扩展到多元函数。

一元函数泰勒展开

一元函数 $f(x)$ 在展开点 $x = a$ 处泰勒展开形式为：

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n \\ &= \underbrace{f(a)}_{\text{Constant}} + \underbrace{\frac{f'(a)}{1!}(x-a)}_{\text{Linear}} + \underbrace{\frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2}_{\text{Quadratic}} + \underbrace{\frac{f'''(a)}{3!}(x-a)^3}_{\text{Cubic}} + \cdots \end{aligned} \tag{43}$$

上式保留“常数 + 一阶导数”两个成分就是线性逼近：

$$f(x) \approx \underbrace{f(a)}_{\text{Constant}} + \underbrace{\frac{f'(a)}{1!}(x-a)}_{\text{Linear}} \tag{44}$$

我们在《数学要素》第 17 章中讲过，如图 16 所示，从几何角度，二元函数泰勒展开相当于，水平面、斜面、二次曲面、三次曲面等多项式曲面叠加。

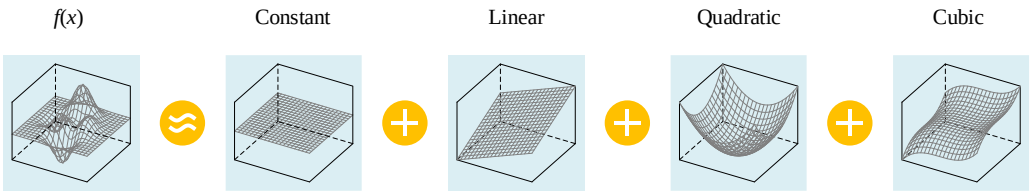


图 16. 二元函数泰勒展开原理，来自《数学要素》

线性逼近

更一般情况，对于多元函数 $f(\boldsymbol{x})$，当 $\boldsymbol{x}$ 足够靠近展开点 $\boldsymbol{x}_P$ 时，$f(\boldsymbol{x})$ 函数值可以用泰勒一阶展开逼近，如下式：

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}) &\approx f(\boldsymbol{x}_P) + \nabla f(\boldsymbol{x}_P)^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_P) \\ &= f(\boldsymbol{x}_P) + \nabla f(\boldsymbol{x}_P)^{\mathrm{T}} \Delta \boldsymbol{x} \end{aligned} \tag{45}$$

$\boldsymbol{x}_P$ 为**泰勒级数展开点** (expansion point of Taylor series)，$\nabla f(\boldsymbol{x}_p)$ 为多元函数 $f(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{x}_P$ 处梯度向量。

图 17 比较一元函数和二元函数线性逼近。一元线性逼近是用切线逼近曲线，二元线性逼近是用切面逼近曲面。

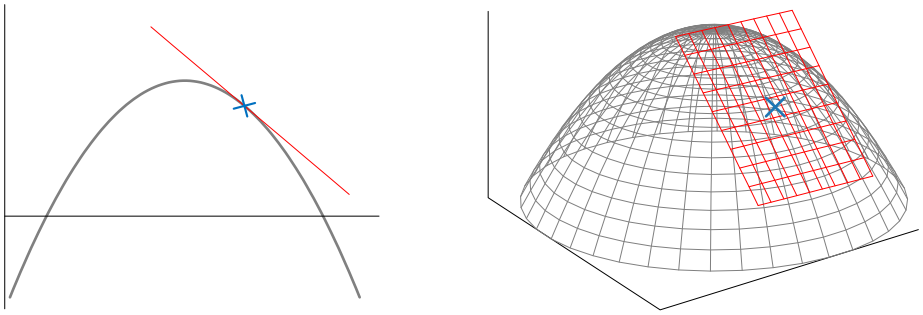


图 17. 一元到二元线性逼近

二次逼近

多元函数 $f(\boldsymbol{x})$ 泰勒二阶级数展开式对应的矩阵运算如下：

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{x}) &\approx f(\boldsymbol{x}_P) + \nabla f(\boldsymbol{x}_P)^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_P) + \frac{1}{2} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_P)^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}_P) (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_P) \\
&= f(\boldsymbol{x}_P) + \nabla f(\boldsymbol{x}_P)^{\mathrm{T}} \Delta \boldsymbol{x} + \frac{1}{2} \Delta \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}_P) \Delta \boldsymbol{x} \\
&= f(\boldsymbol{x}_P) + \nabla f(\boldsymbol{x}_P)^{\mathrm{T}} \Delta \boldsymbol{x} + \frac{1}{2} \Delta \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{H} \Delta \boldsymbol{x}
\end{aligned}
\tag{46}
$$

上式就是二次逼近。其中，$\boldsymbol{H}$ 为黑塞矩阵。

二次曲面

本章最后讨论二次曲面在某点切面，即一次逼近。采用圆锥曲线一般式，令 $y = f(x_1, x_2)$：

$$
y = f(x_1, x_2) = Ax_1^2 + Bx_1x_2 + Cx_2^2 + Dx_1 + Ex_2 + F \tag{47}
$$

$y = f(x_1, x_2)$ 写成矩阵运算式：

$$
y = f(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} 2A & B \\ B & 2C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} D \\ E \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + F \tag{48}
$$

构造函数 $F(x_1, x_2, y)$：

$$
F(x_1, x_2, y) = Ax_1^2 + Bx_1x_2 + Cx_2^2 + Dx_1 + Ex_2 + F - y \tag{49}
$$

在三维空间中一点 $P\ (p_1, p_2, p_y)$，$F(x_1, x_2, y)$ 曲面法向量 $\boldsymbol{n}_p$ 通过下式得到：

$$\boldsymbol{n}_P = \left[\begin{array}{c} \dfrac{\partial F}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial F}{\partial x_2} \\ \dfrac{\partial F}{\partial y} \end{array}\right]_{(p_1,p_2,p_y)} = \begin{bmatrix} 2Ap_1 + Bp_2 + D \\ Bp_1 + 2Cp_2 + E \\ -1 \end{bmatrix} \tag{50}$$

切面上任意一点 (x_1, x_2, y) 和切点 P 构成向量 $\boldsymbol{p}$：

$$\boldsymbol{p} = \begin{bmatrix} x_1 - p_1 \\ x_2 - p_2 \\ y - p_y \end{bmatrix} \tag{51}$$

$\boldsymbol{p}$ 垂直于 $\boldsymbol{n}_p$，因此两者向量内积为 0，得到如下等式：

$$(2Ap_1 + Bp_2 + D)(x_1 - p_1) + (Bp_1 + 2Cp_2 + E)(x_2 - p_2) - y + p_y = 0 \tag{52}$$

整理得到切面解析式 $t(x_1, x_2)$：

$$t(x_1, x_2) = (2Ap_1 + Bp_2 + D)(x_1 - p_1) + (Bp_1 + 2Cp_2 + E)(x_2 - p_2) + p_y \tag{53}$$

另外，以上切面解析式就是 P 点泰勒一次逼近：

$$t(x_1, x_2) = f(p_1, p_2) + \nabla f(p_1, p_2)^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} x_1 - p_1 \\ x_2 - p_2 \end{bmatrix} \tag{54}$$

$y = f(x_1, x_2)$ 在 P 点梯度向量：

$$\nabla f(p_1, p_2) = \begin{bmatrix} 2A & B \\ B & 2C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} D \\ E \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2Ap_1 + Bp_2 + D \\ Bp_1 + 2Cp_2 + E \end{bmatrix} \tag{55}$$

将 (55) 代入 (54)，同样可以得到 (53) 结果。

举个例子

给定二元函数 $y = f(x_1, x_2)$，

$$y = f(x_1, x_2) = -4x_1^2 - 4x_2^2 \tag{56}$$

将 A 点坐标 $(0, -1.5, -9)$ 带入 (53)，得到曲面 A 点处切面解析式，具体如下：

$$t(x_1, x_2) = 12x_2 + 9 \tag{57}$$

图 18 (a) 所示为二次曲面和曲面上 A 点 $(0, -1.5, -9)$ 切面。图 18 (b) 所示为 B 点 $(-1.5, 0, -9)$ 曲面切面。请大家自行计算曲面 B 点处切面解析式。

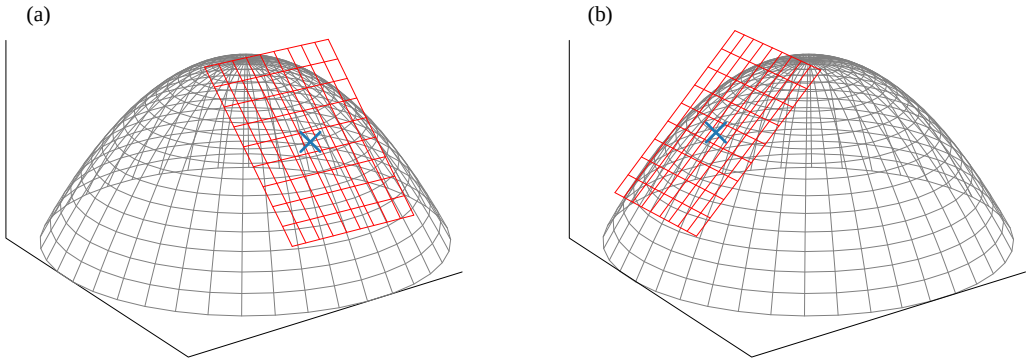


图 18. 二次凹曲面 A 点处切面

Bk4_Ch17_03.py 绘制图 18。

本章将一元函数导数和微分工具推广到多元函数，并介绍了几个重要数学工具——梯度向量、黑塞矩阵、法向量、方向导数、一次泰勒逼近、二次泰勒逼近。本书后续将利用这些数学工具分析解决各种数学问题。

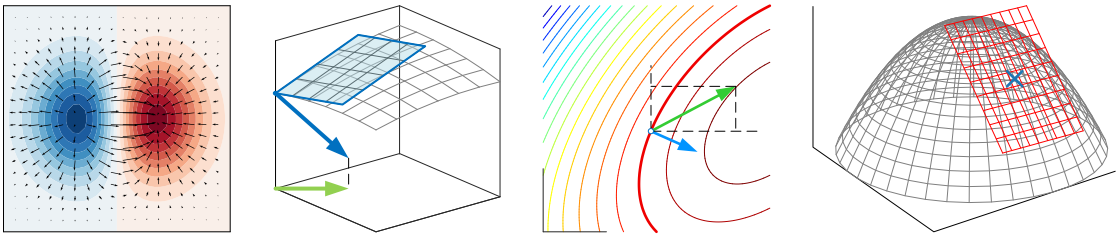


图 19. 总结本章重要内容的四幅图

本章仅仅讨论了本书后续将会用到的矩阵微分法则。大家如果对这个话题感兴趣的话，推荐大家参考 *The Matrix Cookbook*。下载地址为：

https://www.math.uwaterloo.ca/~hwolkowi/matrixcookbook.pdf

18 拉格朗日乘子法

Lagrange Multiplier

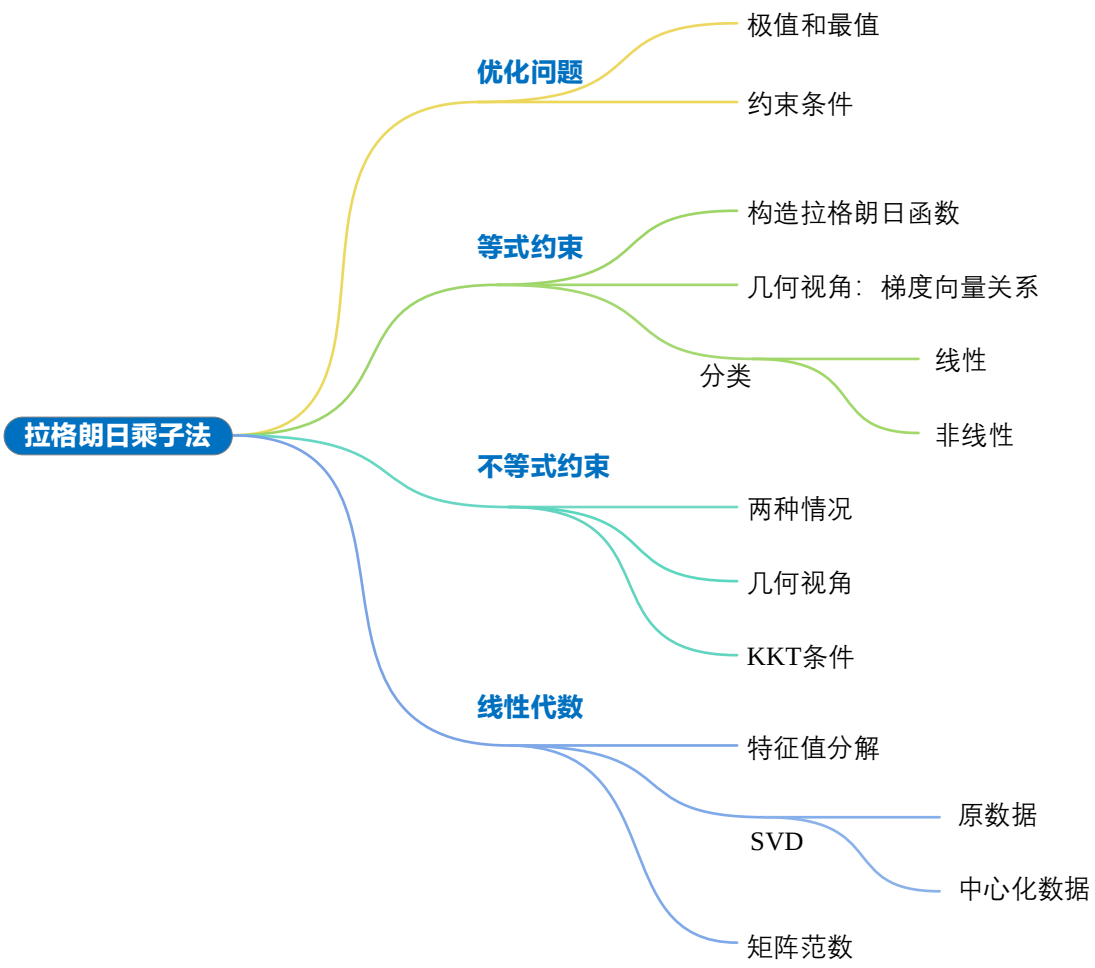
把有约束优化问题转化为无约束优化问题

伟大的事情是由一系列小事情聚集在一起实现的。

Great things are done by a series of small things brought together.

—— 文森特·梵高 (Vincent van Gogh) | 荷兰后印象派画家 | 1853 ~ 1890

- `numpy.linalg.eig()` 特征值分解
- `numpy.linalg.svd()` 奇异值分解
- `sklearn.decomposition.PCA()` 主成分分析函数



18.1 回顾优化问题

本系列丛书《数学要素》第 19 章专门讲解过优化问题入门内容，本节稍作回顾。

极值、最值

优化问题好比在一定区域范围内，徒步寻找山谷或山峰。图 1 中的优化问题的目标函数 $f(x)$ 就是海拔，优化变量是水平位置 x。

极值 (extrema 或 local extrema) 是**极大值**和**极小值**的统称。白话讲，极值是搜索区域内所有的山峰和山谷，图 1 中 A、B、C、D、E 和 F 这六个点横坐标 x 值对应极值点。

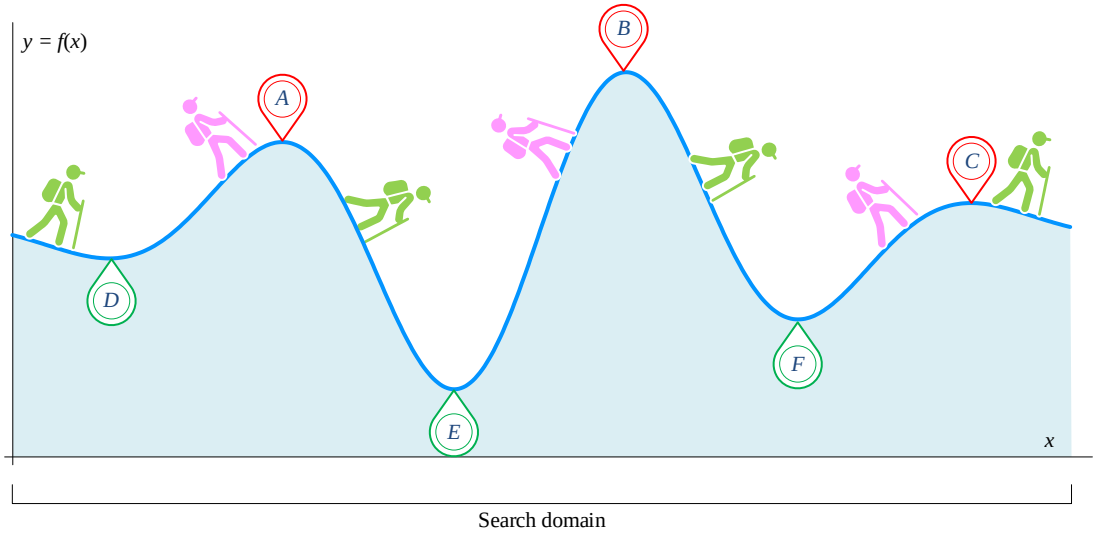


图 1. 爬上寻找山谷和山峰，图片来自《数学要素》

如果某个极值是整个指定搜索区域内的极大值或极小值，这个极值又被称作是**最大值** (maximum 或 global maximum) 或者**最小值** (minimum 或 global minimum)。最大值和最小值统称**最值** (global extrema)。

图 1 搜索域内有三座山峰 (A、B 和 C)，即搜索域极大值。而 B 是最高的山峰，因此 B 叫全局最大值，简称最大值，即站在 B 点一览众山小。E 是最深的山谷，因此 E 是全局最小值，简称最小值。

一般情况下，标准优化问题都是最小化优化问题。最大化优化问题的目标函数取个负号便转化为最小化优化问题。

含约束最小化优化问题

结合约束条件，完整最小化优化问题形式为：

$$\begin{aligned} &\arg\min_{\boldsymbol{x}} \ f(\boldsymbol{x}) \\ &\text{subject to: } \boldsymbol{l} \le \boldsymbol{x} \le \boldsymbol{u} \\ &\qquad\qquad \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \le \boldsymbol{b} \\ &\qquad\qquad \boldsymbol{A}_{\text{eq}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}_{\text{eq}} \\ &\qquad\qquad c(\boldsymbol{x}) \le 0 \\ &\qquad\qquad c_{\text{eq}}(\boldsymbol{x}) = 0 \end{aligned} \tag{1}$$

上式中，约束条件分为五类，按先后顺序：(a) **上下界** (lower and upper bounds)；(b) **线性不等式** (linear inequalities)；(c) **线性等式** (linear equalities)；(d) **非线性不等式** (nonlinear inequalities)；(e) **非线性等式** (nonlinear equalities)。

当约束条件存在时，如图 2 所示，最值可能出现在搜索区域内部或约束边界上。本章介绍的拉格朗日乘子法就是一种能够把有约束优化问题转化成无约束优化问题的方法。

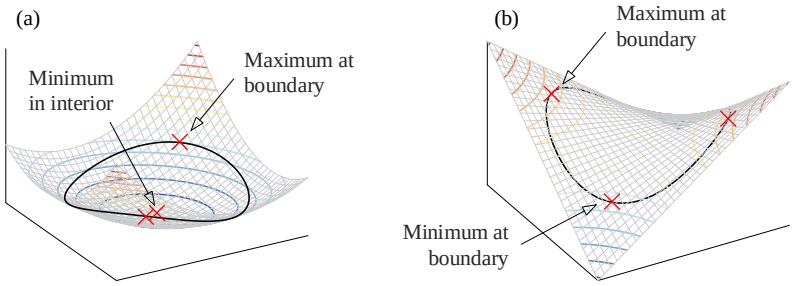


图 2. 最值和约束关系

《数学要素》还讲了如何利用导数和偏导数等数学工具求解一元和多元函数极值，本节就不再赘述。有必要的话，大家可以在学习本章之前先翻翻《数学要素》一册相关内容。

18.2 等式约束条件

拉格朗日乘子法 (method of Lagrange multiplier) 把有约束的优化问题转化为无约束优化问题。拉格朗日乘子法是以 18 世纪法国著名数学家**约瑟夫·拉格朗日** (Joseph Lagrange) 命名。本章后续将主要从几何和数据视角来帮助大家理解拉格朗日乘子法。

拉格朗日函数

给定含等式约束优化问题：

$$\begin{aligned} &\arg\min_{\boldsymbol{x}} \ f(\boldsymbol{x}) \\ &\text{subject to: } h(\boldsymbol{x}) = 0 \end{aligned} \tag{2}$$

其中，$f(\boldsymbol{x})$ 和 $h(\boldsymbol{x})$ 为连续函数。$h(\boldsymbol{x}) = 0$ 为等式约束条件。

构造**拉格朗日函数** (Lagrangian function) $L(\boldsymbol{x}, \lambda)$：

$$L(\boldsymbol{x},\lambda) = f(\boldsymbol{x}) + \lambda h(\boldsymbol{x}) \tag{3}$$

其中，λ 被称作**拉格朗日乘子** (Lagrange multiplier)，或拉格朗日乘数。上式中，λ 前符号也可为负号，不影响结果。本书正负号都用。

通过 λ，(2) 这个含等式约束优化问题便转化为一个无约束优化问题：

$$\begin{cases} \arg\min_{\boldsymbol{x}} \ f(\boldsymbol{x}) \\ \text{subject to: } h(\boldsymbol{x}) = 0 \end{cases} \Rightarrow \arg\min_{\boldsymbol{x}} \ L(\boldsymbol{x},\lambda) \tag{4}$$

$L(\boldsymbol{x}, \lambda)$ 对 $\boldsymbol{x}$ 和 λ 偏导都存在的情况下，最优解必要 (不是充分) 条件为一阶偏导数都零，即：

$$\begin{cases} \nabla_{\boldsymbol{x}} L(\boldsymbol{x},\lambda) = \dfrac{\partial L(\boldsymbol{x},\lambda)}{\partial \boldsymbol{x}} = \nabla f(\boldsymbol{x}) + \lambda \nabla h(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0} \\ \nabla_{\lambda} L(\boldsymbol{x},\lambda) = \dfrac{\partial L(\boldsymbol{x},\lambda)}{\partial \lambda} = h(\boldsymbol{x}) = 0 \end{cases} \tag{5}$$

⚠ 再次强调，(5) 存在一个重要前提，假定 $f(\boldsymbol{x})$ 和 $h(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{x}$ 的某一邻域内均有连续一阶偏导。

(5) 中两式合并为：

$$\nabla_{\boldsymbol{x},\lambda} L(\boldsymbol{x},\lambda) = \boldsymbol{0} \tag{6}$$

求解上式得到驻点 $\boldsymbol{x}$。然后进一步判断驻点是极大值、极小值还是鞍点。

对于大部分读者来说，理解拉格朗日乘子法最大障碍在于下式：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) + \lambda \nabla h(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0} \tag{7}$$

下面结合具体图形解释上式含义。

梯度向量方向

(7) 变形得到：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = -\lambda \nabla h(\boldsymbol{x}) \tag{8}$$

(8) 等式隐含一条重要信息，$f(\boldsymbol{x})$ 和 $h(\boldsymbol{x})$ 在驻点 $\boldsymbol{x}$ 处梯度同向或者反向。

图 3 中彩色等高线展示目标函数 $f(\boldsymbol{x})$ 变化趋势，暖色系对应较大函数值，冷色系对应较小函数值。图中黑色直线对应 $h(\boldsymbol{x})$，即线性约束条件。换句话说，变量 $\boldsymbol{x}$ 取值范围限定在图 5 黑色直线上。

图 3 中，等高线和黑色直线可以相交，甚至相切。相交意味着，交点处，沿着黑色直线稍微移动，函数值可能增大，也可能减小。这说明，交点处既不是最大值，也不是最小值。

然而，相切说明，在切线处，沿着黑色直线稍微移动，函数值有可能只朝着一个方向变动，即要么增大、要么减小。也就是说切点可能对应极值点，除非切点为驻点。

如果黑色直线和等高线相切，切点处 $f(\boldsymbol{x})$ 和 $h(\boldsymbol{x})$ 梯度向量平行 (同向或反向)。这就是 (8) 的意义。

这种几何直觉就是理解 (8) 的“利器”。若梯度 $\nabla f(\boldsymbol{x})$ 和梯度 $\nabla h(\boldsymbol{x})$ 反向，λ 为正值，如图 3 (a) 所示。如果梯度 $\nabla f(\boldsymbol{x})$ 和梯度 $\nabla h(\boldsymbol{x})$ 正向，λ 为负值，如图 3 (b) 所示。简单来说，$h(\boldsymbol{x}) = 0$ 约束下 $f(\boldsymbol{x})$ 取得极值时，某点处梯度 $\nabla f(\boldsymbol{x})$ 和梯度 $\nabla h(\boldsymbol{x})$ 平行。

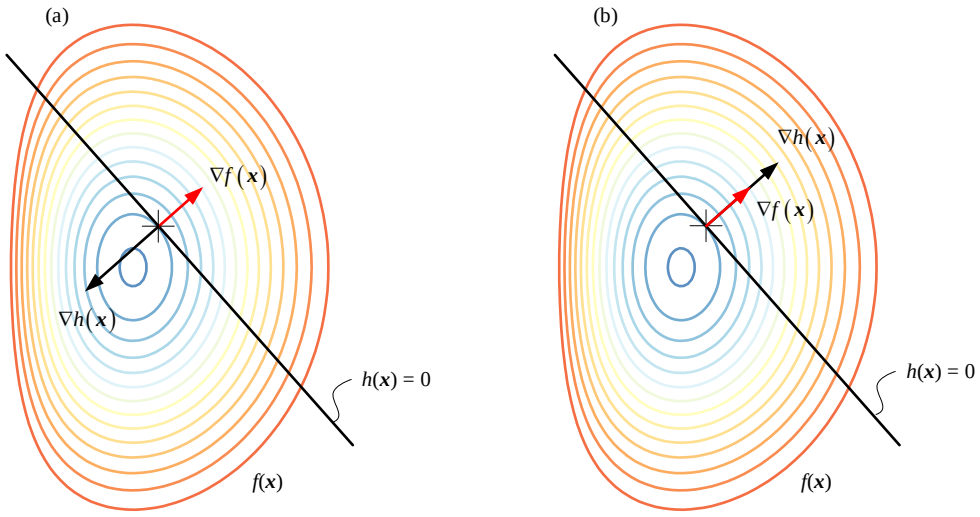


图 3. 线性等式约束条件拉格朗日算子几何意义

梯度平行

图 4 是图 3 (a) 局部视图，我们借助它进一步展示梯度平行的几何意义。

先看图 4 中 A 点，A 点黑色直线和某条等高线的切点。A 点处，梯度 $\nabla f(\boldsymbol{x})$ 和梯度 $\nabla h(\boldsymbol{x})$ 反向。梯度 $\nabla f(\boldsymbol{x})$ 方向为函数 $f(\boldsymbol{x})$ 上山方向，梯度下降方向 $-\nabla f(\boldsymbol{x})$ 为函数 $f(\boldsymbol{x})$ 下山方向。

A 点处，$f(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{x}$ 点处切线就是 $h(\boldsymbol{x})$，该切线垂直于 $\nabla h(\boldsymbol{x})$，也垂直于梯度 $\nabla f(\boldsymbol{x})$。显然，A 点处，$\nabla f(\boldsymbol{x})$ 在 $h(\boldsymbol{x})$ 方向标量投影为 0。

如图 4 所示，若沿着 $h(\boldsymbol{x}) = 0$ 黑色直线向左或者向右偏离 A，$f(\boldsymbol{x})$都会增大 (对应等高线颜色从冷色系变为暖色系)，因此 A 点在 $h(\boldsymbol{x}) = 0$ 等式约束条件下为极小值点。根据目标函数曲面特征，我们可以进一步确定该极小值点为最小值点。

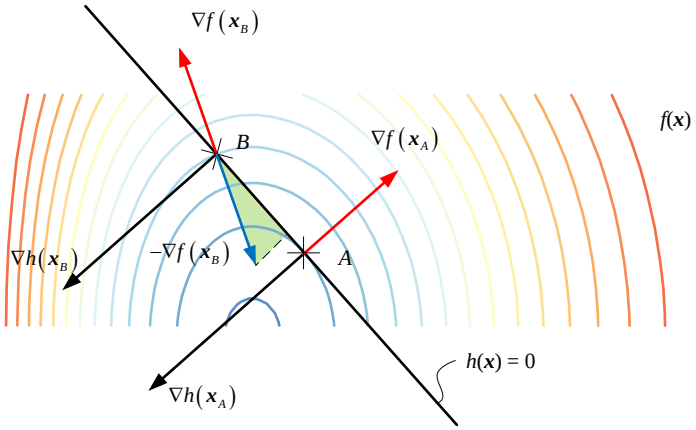


图 4. 梯度平行几何意义

再来看图 4 中 B 点，B 点是黑色直线和某条等高线交点。同样找到 $f(\boldsymbol{x})$ 梯度负方向 $-\nabla f(\boldsymbol{x})$，即 $f(\boldsymbol{x})$ 下山方向；容易发现 $-\nabla f(\boldsymbol{x})$ 在 $h(\boldsymbol{x})$ 方向，在 $f(\boldsymbol{x})$ 减小方向存在投影分量。这说明，在 B 点沿着 $h(\boldsymbol{x})$ 向右下方行走，$f(\boldsymbol{x})$ 进一步减小。因此，B 点不是极值点。

注意，本节没有使用“最值”这一说法，这是因为对于多极值曲面，曲面和线性约束条件可能存在多个“切点”，可能对应若干“极值”。

非线性等式约束条件

上述分析思路也同样适用于非线性等式约束条件。请大家用“交点 + 切点”和“梯度向量投影”两个视角自行分析图 5 两幅子图。

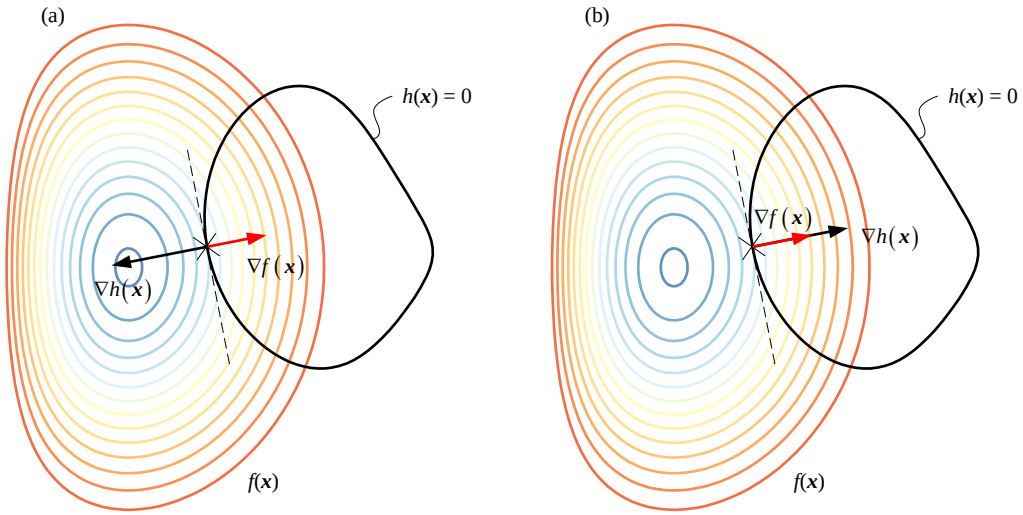


图 5. 非线性等式约束条件拉格朗日算子几何意义

进一步判断

用拉格朗日乘子计算出来的驻点到底是极大值、极小值、鞍点，还需要进一步判断。

图 6 给出四种极值常见情况。如图 6 (a) 所示，$f(x)$ 自身为凹函数，$f(x)$ 等高线图和 $h(x) = 0$ 相切于 A 点和 B 点。在 $h(x) = 0$ 约束条件下，$f(x)$ 在 A 点取得极大值，在 B 点取得极小值。进一步判断，A 为最大值点，B 为最小值点。

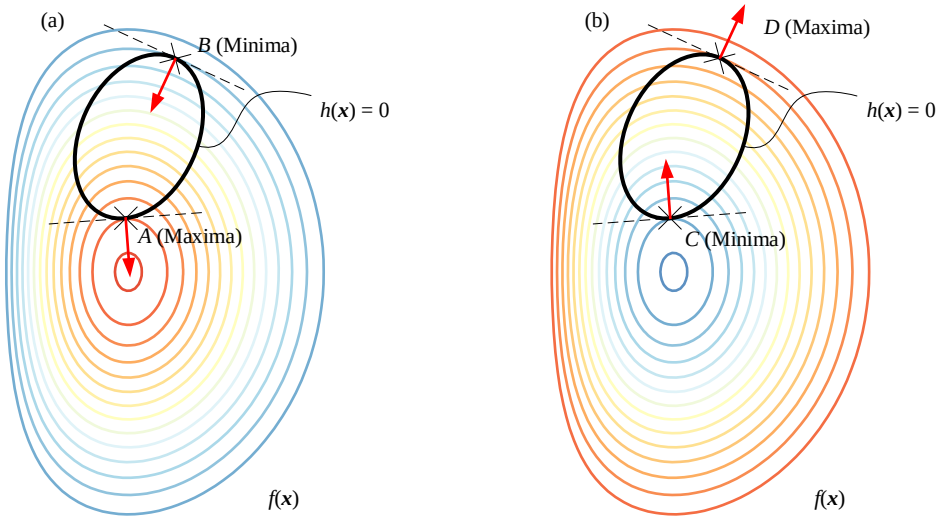


图 6. 四种极值情况

而在图 6 (b)，$f(x)$ 自身为凸函数，$f(x)$ 等高线图和 $h(x) = 0$ 相切于 C 点和 D 点；在 $h(x) = 0$ 约束条件下，$f(x)$ 在 C 点取得极小值，在 D 点取得极大值。进一步判断，C 为最小值点，D 为最大值点。

⚠ 这里请大家注意，如果 $h(x) = 0$ 为等式约束，不需要关注 $h(x)$ 自身函数值变化趋势。但是，不等式约束 $g(x) \leqslant 0$ 就必须考虑 $g(x)$ 函数自身变化趋势，本章后续将讨论这个话题。

说个题外话，天文中的**拉格朗日点** (Lagrangian point) 很可能比本章介绍的拉格朗日乘子法更出名。

两个天体环绕运行，比如太阳-地球 (日-地)、地球-月亮 (地-月)，在空间中可以找到满足两个天体引力平衡五个点，如图 7 所示的 $L_1 \sim L_5$。这五个点叫做拉格朗日点。欧拉于 1767 年推算出前三个拉格朗日点，拉格朗日于 1772 年推导证明剩下两个。

在 $L_1 \sim L_5$ 这五个点任意一点放置质量可以忽略不计的第三个天体，使其和另外两个天体以相同模式运转，这就是所谓的**三体问题** (three-body problem)。

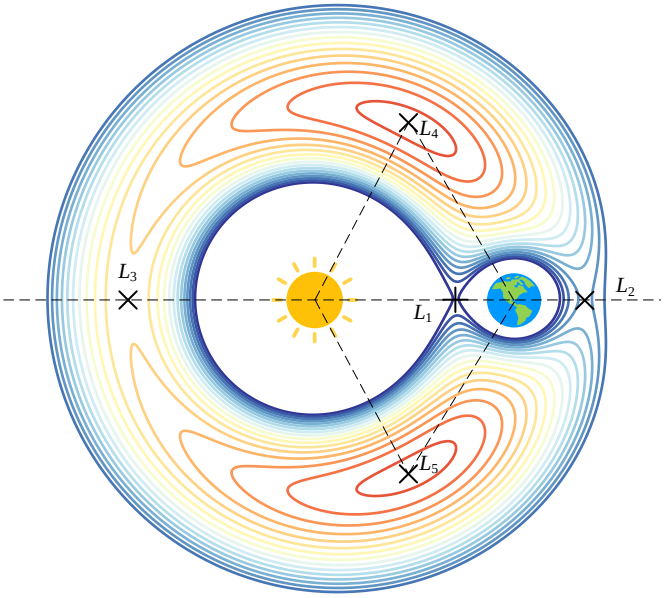


图 7. 五个拉格朗日点

实际情况，第三天体不可能在拉格朗日点保持相对静止；人造卫星一般会围绕拉格朗日点附近运转，完成观测或中继等任务，以节省大量燃料。

嫦娥二号完成探月任务后，专门飞往“日-地”拉格朗日 L_2 点进行科学探测。我国探月时用到的鹊桥中继星就是绕“地-月”拉格朗日 L_2 点运转。詹姆斯·韦伯空间望远镜绕“日-地”拉格朗日 L_2 点运转。

之所以聊到这个话题是因为图 7 所示拉格朗日点、引力场等高线图和驻点、极值、梯度向量场这些概念都有密切的关系。

18.3 线性等式约束

下面用一个简单例子来解释上一节介绍的等式约束优化问题。

给定一个优化问题如下：

$$\begin{aligned} &\arg\min_{\boldsymbol{x}} \ f(\boldsymbol{x}) = x_1^2 + x_2^2 \\ &\text{subject to: } \ h(\boldsymbol{x}) = x_1 + x_2 - 1 = 0 \end{aligned} \tag{9}$$

这是一个二次规划问题，含一个线性等式约束条件 $h(\boldsymbol{x}) = 0$。

利用矩阵运算，(9) 可以写成：

$$\begin{aligned} &\arg\min_{\boldsymbol{x}} \ f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \|\boldsymbol{x}\|_2^2 \\ &\text{subject to: } h(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} - 1 = 0 \end{aligned} \tag{10}$$

根据上一章内容，请大家自行计算两个函数的梯度向量。

图 8 所示为 $h(x)$ 梯度向量场。观察图像，我们发现 $h(x) = 0$ 对应一条直线，直线上不同点处的梯度向量均垂直于该直线。

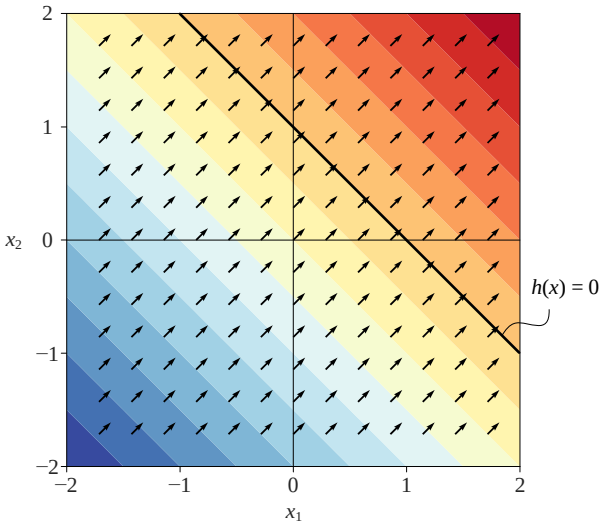


图 8. $h(x)$ 梯度向量场

如图 9 所示，x_1x_2 平面上，目标函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的等高线是一组同心圆。等式约束条件 $x_1 + x_2 - 1 = 0$ 对应图中黑色直线。优化解只能在 $x_1 + x_2 - 1 = 0$ 限定的直线上选取。

图 9 中，黄色箭头代表 $h(\boldsymbol{x})$ 梯度方向，图中的黑色箭头是 $f(\boldsymbol{x})$ 梯度向量场。当同心圆和等式约束相切于 A 点，$f(\boldsymbol{x})$ 取得最小值。显然，A 点处 $f(\boldsymbol{x})$ 和 $h(\boldsymbol{x})$ 梯度方向一致，或称平行。

黑色直线 ($h(\boldsymbol{x}) = 0$) 上任何偏离 A 点位置都会导致目标函数 $f(\boldsymbol{x})$ 增大。

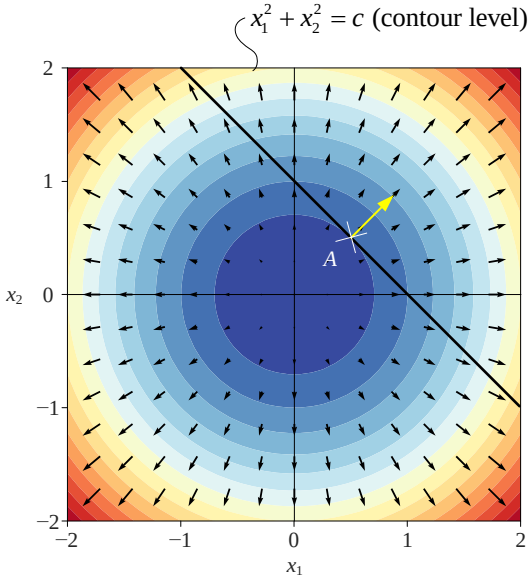


图 9.拉格朗日算子求解二次规划，极值点 A 处 $f(x)$ 和 $h(x)$ 梯度同向，λ 小于 0

拉格朗日函数

构造拉格朗日函数 $L(\boldsymbol{x}, \lambda)$：

$$L(\boldsymbol{x},\lambda) = x_1^2 + x_2^2 + \lambda(x_1 + x_2 - 1) \tag{11}$$

构造下列偏导为 0 等式组并求解 (x_1, x_2, λ)：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial L(\boldsymbol{x},\lambda)}{\partial x_1} = 2x_1 + \lambda = 0 \\ \dfrac{\partial L(\boldsymbol{x},\lambda)}{\partial x_2} = 2x_2 + \lambda = 0 \\ \dfrac{\partial L(\boldsymbol{x},\lambda)}{\partial \lambda} = x_1 + x_2 - 1 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = \dfrac{1}{2} \\ x_2 = \dfrac{1}{2} \\ \lambda = -1 \end{cases} \tag{12}$$

λ 为负值，这说明在优化解处，梯度 $\nabla f(\boldsymbol{x})$ 和梯度 $\nabla h(\boldsymbol{x})$ 同向。

将 $\lambda = -1$ 代回 (11) 得到如图 10 所示的拉格朗日函数 $L(\boldsymbol{x}, \lambda = -1)$ 平面等高线。图 10 中我们发现 $L(\boldsymbol{x}, \lambda = -1)$ 最小值位置就是 (12) 的优化解。

从图像角度，我们将图 9 这个含有线性等式约束的优化问题转化成图 10 这个无约束优化问题。

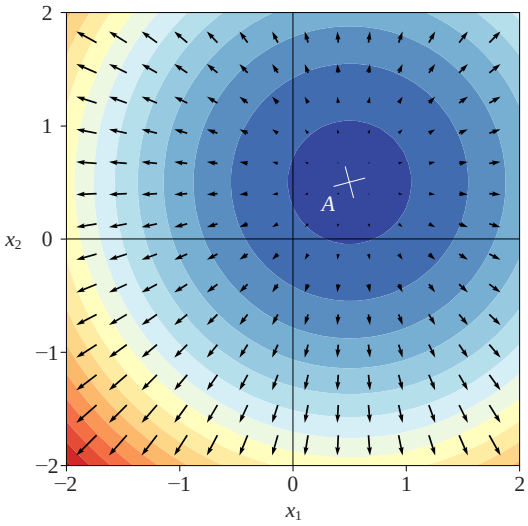


图 10. 拉格朗日函数平面等高线

另外一种记法

前文提过，很多文献 λ 前采用负号，拉格朗日函数 $L(\boldsymbol{x},\lambda)$ 则为：

$$L(\boldsymbol{x},\lambda)=f(\boldsymbol{x})-\lambda h(\boldsymbol{x}) \tag{13}$$

$L(\boldsymbol{x},\lambda)$ 对 $\boldsymbol{x}$ 和 λ 偏导为 0 对应等式组为：

$$\begin{cases}\nabla_{\boldsymbol{x}}L(\boldsymbol{x},\lambda)=\dfrac{\partial L(\boldsymbol{x},\lambda)}{\partial \boldsymbol{x}}=\nabla f(\boldsymbol{x})-\lambda\nabla h(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0}\\ \nabla_{\lambda}L(\boldsymbol{x},\lambda)=\dfrac{\partial L(\boldsymbol{x},\lambda)}{\partial \lambda}=h(\boldsymbol{x})=0\end{cases} \tag{14}$$

这种拉格朗日函数构造，若梯度 $\nabla f(\boldsymbol{x})$ 和梯度 $\nabla h(\boldsymbol{x})$ 同向，λ 为正值。如果梯度 $\nabla f(\boldsymbol{x})$ 和梯度 $\nabla h(\boldsymbol{x})$ 反向，λ 为负值。不管 λ 前是正还是负，都不会影响结果。本章后续也会使用 (13) 这种形式。

18.4 非线性等式约束

本节再看一个线性规划问题实例，它约束条件为非线性等式约束：

$$\begin{aligned}&\arg\min_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})=x_1+x_2\\ &\text{subject to: } h(\boldsymbol{x})=x_1^2+x_2^2-1=0\end{aligned} \tag{15}$$

图 11 所示为，$f(\boldsymbol{x})$ 和 $h(\boldsymbol{x})=0$ 梯度向量场。大家自己是否能够根据图 11 梯度向量之间的关系，判断 (15) 极大值和极小值位置。

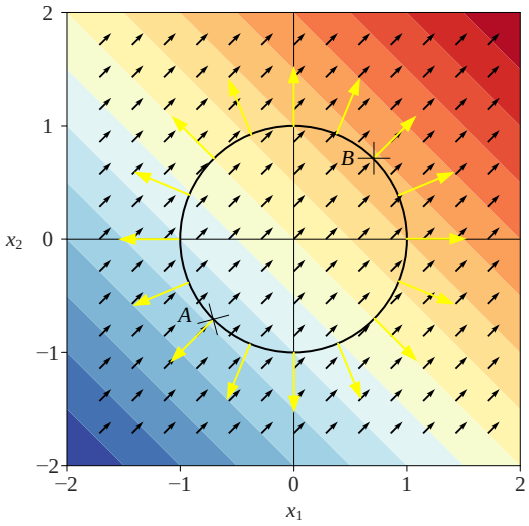


图 11. $f(x)$ 和 $h(x) = 0$ 梯度向量场

拉格朗日函数

构造拉格朗日函数 $L(\boldsymbol{x}, \lambda)$ 如下：

$$L(\boldsymbol{x},\lambda) = x_1 + x_2 + \lambda\left(x_1^2 + x_2^2 - 1\right) \tag{16}$$

根据偏导为 0 构造如下等式组：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial L(\boldsymbol{x},\lambda)}{\partial x_1} = 1 + 2x_1\lambda = 0 \\ \dfrac{\partial L(\boldsymbol{x},\lambda)}{\partial x_2} = 1 + 2x_2\lambda = 0 \\ \dfrac{\partial L(\boldsymbol{x},\lambda)}{\partial \lambda} = x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = -\dfrac{1}{2\lambda} \\ x_2 = -\dfrac{1}{2\lambda} \\ x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0 \end{cases} \tag{17}$$

根据上述等式组构造 λ 等式，并求解 λ：

$$\left(\frac{1}{2\lambda}\right)^2 + \left(\frac{1}{2\lambda}\right)^2 - 1 = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = \pm\frac{\sqrt{2}}{2} \tag{18}$$

λ 取正值获得最小值：

$$\begin{cases} x_1 = -\dfrac{\sqrt{2}}{2} \\ x_2 = -\dfrac{\sqrt{2}}{2} \\ \lambda = \dfrac{\sqrt{2}}{2} \end{cases} \tag{19}$$

λ 取负值获得最大值。

图 12 所示为拉格朗日函数 $L(\boldsymbol{x}, \lambda = \sqrt{2}/2)$ 对应的平面等高线图。同样，利用拉格朗日乘子法，我们将如图 11 所示的含有非线性等式约束的优化问题，转化成如图 12 所示的无约束优化问题。

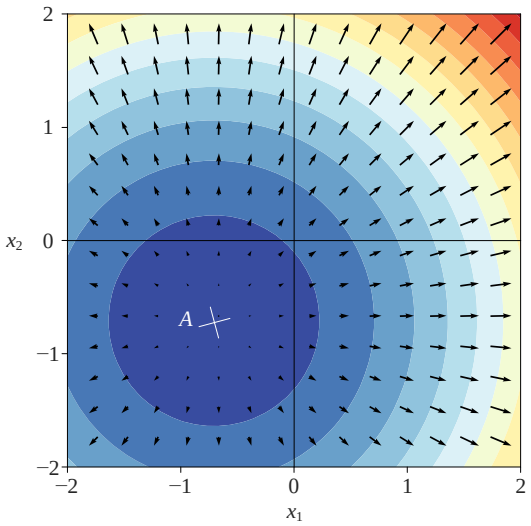


图 12. 拉格朗日函数等高线

18.5 不等式约束

本节介绍如何用 KKT (Karush-Kuhn-Tucker) 条件将本章前文介绍的拉格朗日乘子法推广到不等式约束问题。

给定如下不等式约束优化问题：

$$\begin{aligned} &\arg\min_{\boldsymbol{x}} \ f(\boldsymbol{x}) \\ &\text{subject to: } g(\boldsymbol{x}) \le 0 \end{aligned} \tag{20}$$

其中，$f(\boldsymbol{x})$ 和 $g(\boldsymbol{x})$ 为连续函数。

几何视角

如图 13 所示，黑色曲线和图 5 一样，代表等式情况，即 $g(\boldsymbol{x}) = 0$。图 13 中浅蓝色区域代表 $g(\boldsymbol{x}) < 0$ 情况。

优化解 $\boldsymbol{x}$ 出现位置有两种情况：第一种情况，$\boldsymbol{x}$ 出现在边界上 (黑色线)，约束条件有效，如图 13 (a)；第二种情况，$\boldsymbol{x}^*$出现在不等式区域内 (浅蓝色背景)，约束条件无效，如图 13 (b)。

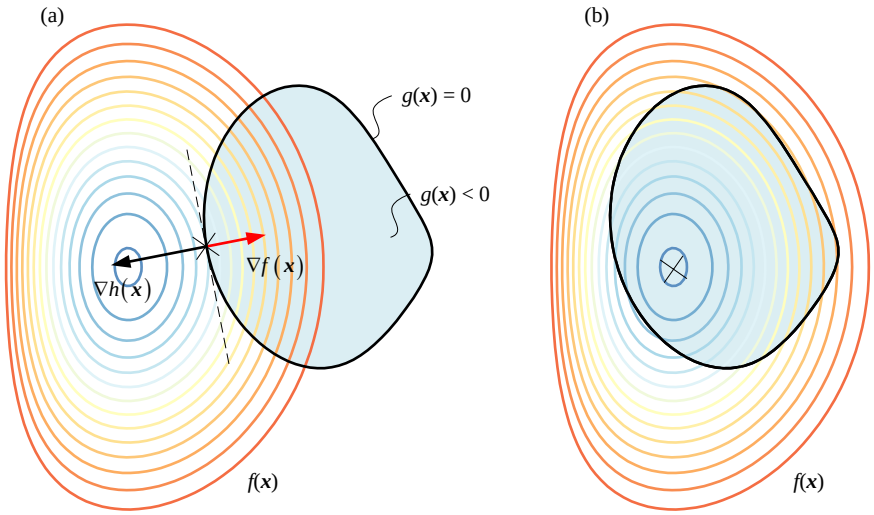


图 13. 不等式约束条件下拉格朗日乘子法两种情况

在图 13(a) 中，第一种情况等价于图 5 讨论情况，即 $g(\boldsymbol{x}) = 0$ 成立。

在图 13(b) 中，优化解 $\boldsymbol{x}$ 出现在 $g(\boldsymbol{x}) < 0$ 蓝色区域内。对于凸函数，如果在优化解的邻域内 $f(\boldsymbol{x})$ 有连续的一阶偏导数，可以直接通过 $\nabla f(\boldsymbol{x}) = 0$ 获得优化解，此时 λ 为 0。这种情况，含约束优化问题直接变成为无约束问题。

结合上述两种情况，$\lambda g(\boldsymbol{x}) = 0$ 恒成立。也就是说，要么 $g(\boldsymbol{x}) = 0$ (图 13(a))，要么 $\lambda = 0$ (图 13(b))。

判断极值点性质

进一步讨论图 13 (a) 对应的情况。如图 14 所示，不等式内部区域 $g(\boldsymbol{x}) < 0$，而边界 $g(\boldsymbol{x}) = 0$。而黑色边界外，$g(\boldsymbol{x}) > 0$。因此，在黑色边界 $g(\boldsymbol{x}) = 0$ 上，梯度向量指向区域外部。

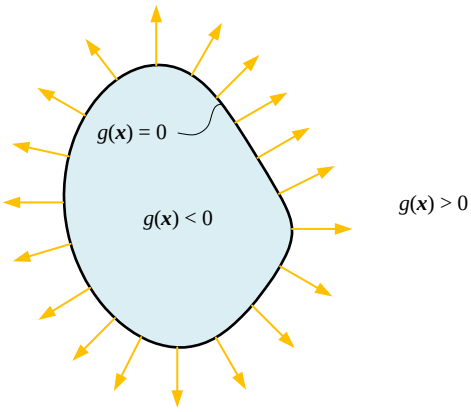


图 14. 不等式约束梯度方向

图 15 所示为 $\nabla f(\boldsymbol{x})$ 和梯度 $\nabla g(\boldsymbol{x})$ 反向和同向两种情况。

图 15 (a) 中，A 点处，$f(\boldsymbol{x})$ 梯度 $\nabla f(\boldsymbol{x})$ 是黑色箭头，指向右上方。而 A 点处，$g(\boldsymbol{x})$ 梯度 $\nabla g(\boldsymbol{x})$ 是橙色箭头，和 $\nabla f(\boldsymbol{x})$ 同向。A 点为 $g(\boldsymbol{x}) \leq 0$ 不等式条件约束下 $f(\boldsymbol{x})$ 极大值。

图 15(b)中，B 点处，$\nabla f(\boldsymbol{x})$ 和 $\nabla g(\boldsymbol{x})$ 方向相反，也就是 $\lambda > 0$。B 点是 $g(\boldsymbol{x}) \leq 0$ 不等式条件约束下 $f(\boldsymbol{x})$ 极小值。

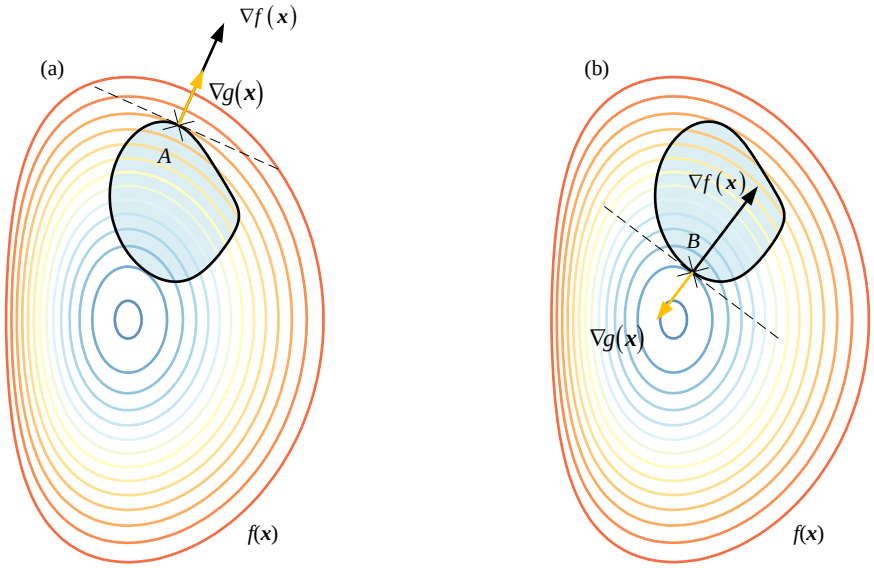


图 15. 梯度向量同方向和反方向

KKT 条件

结合以上讨论，对于 $g(\boldsymbol{x}) \leq 0$ 不等式条件约束下 $f(\boldsymbol{x})$ 最小值问题，构造如下拉格朗日函数 $L(\boldsymbol{x}, \lambda)$：

$$L(\boldsymbol{x},\lambda) = f(\boldsymbol{x}) + \lambda g(\boldsymbol{x}) \tag{21}$$

极小点 $\boldsymbol{x}$ 出现位置满足以下条件：

$$\begin{cases} \nabla f(\boldsymbol{x}) + \lambda \nabla g(\boldsymbol{x}) = 0 \\ g(\boldsymbol{x}) \le 0 \\ \lambda \ge 0 \\ \lambda g(\boldsymbol{x}) = 0 \end{cases} \tag{22}$$

以上这些条件合称 KKT 条件。

合并两类约束条件

在不等式 $g(\boldsymbol{x}) \le 0$ 及等式约束 $h(\boldsymbol{x}) = 0$ 条件下，构造最小化 $f(\boldsymbol{x})$ 优化问题：

$$\begin{aligned} &\arg\min_{\boldsymbol{x}} \ f(\boldsymbol{x}) \\ &\text{subject to: } g(\boldsymbol{x}) \le 0, \ h(\boldsymbol{x}) = 0 \end{aligned} \tag{23}$$

构造拉格朗日函数：

$$L(\boldsymbol{x},\lambda) = f(\boldsymbol{x}) + \lambda_h h(\boldsymbol{x}) + \lambda_g g(\boldsymbol{x}) \tag{24}$$

KKT 条件如下：

$$\begin{cases} \nabla f(\boldsymbol{x}) + \lambda_h \nabla h(\boldsymbol{x}) + \lambda_g \nabla g(\boldsymbol{x}) = 0 \\ h(\boldsymbol{x}) = 0 \\ g(\boldsymbol{x}) \le 0 \\ \lambda_g \ge 0 \\ \lambda_g g(\boldsymbol{x}) = 0 \end{cases} \tag{25}$$

多个约束条件

有以上讨论，把 (25) 推广到多个等式约束和多个不等式约束情况。

对于如下优化问题：

$$\begin{aligned} &\arg\min_{\boldsymbol{x}} \ f(\boldsymbol{x}) \\ &\text{subject to: } \begin{cases} h_i(\boldsymbol{x}) = 0, & i = 1,\ldots,n \\ g_j(\boldsymbol{x}) \le 0, & j = 1,\ldots,m \end{cases} \end{aligned} \tag{26}$$

构造如下拉格朗日函数：

$$L(\boldsymbol{x},\lambda)=f(\boldsymbol{x})+\sum\lambda_{h,i}h_i(\boldsymbol{x})+\sum\lambda_{g,j}g_j(\boldsymbol{x}) \tag{27}$$

(27) 对应的 KKT 条件如下：

$$\begin{cases}\nabla_{x,\lambda}L(\boldsymbol{x},\lambda)=0\\ h_i(\boldsymbol{x})=0\\ g_j(\boldsymbol{x})\le 0\\ \lambda_{g,j}\ge 0\\ \lambda_{g,j}g_j(\boldsymbol{x})=0,\quad \forall j\end{cases} \tag{28}$$

18.6 再谈特征值分解：优化视角

这一节介绍一些线性代数中会遇到的含约束优化问题。利用拉格朗日乘子法，它们最终都可以用特征值分解求解。

第一个优化问题

给定如下优化问题：

$$\begin{aligned}&\arg\max_{\boldsymbol{v}}\ \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}\\ &\text{subject to: }\ \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}=1\end{aligned} \tag{29}$$

其中，$\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵，列向量 $\boldsymbol{v}$ 为优化变量。优化问题的等式约束条件是 $\boldsymbol{v}$ 为单位向量。

构造拉格朗日函数：

$$L(\boldsymbol{v},\lambda)=\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}-\lambda\left(\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}-1\right) \tag{30}$$

⚠ 注意，为了满足特征值分解常用记法，(30) 中 λ 前采用负号。

$L(\boldsymbol{v},\lambda)$ 对 $\boldsymbol{v}$ 偏导为 $\boldsymbol{0}$，得到等式：

$$\frac{\partial L(\boldsymbol{v},\lambda)}{\partial \boldsymbol{v}}=2\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}-2\lambda\boldsymbol{v}=\boldsymbol{0} \tag{31}$$

整理得到：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}=\lambda\boldsymbol{v} \tag{32}$$

最大化问题中，最优解为 $\lambda_{\max}$，特征向量 $\boldsymbol{v}$ 对应矩阵 $\boldsymbol{A}$ 最大特征值 $\lambda_{\max}$。

如果是最小化问题，即：

$$\begin{aligned} &\arg\min_{\boldsymbol{v}} \ \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} \\ &\text{subject to: } \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}=1 \end{aligned} \tag{33}$$

最优解特征向量 $\boldsymbol{v}$ 对应矩阵 $\boldsymbol{A}$ 最小特征值 $\lambda_{\min}$。

此外，(29) 约束条件也可以写成：

$$\|\boldsymbol{v}\|_2 = 1, \quad \|\boldsymbol{v}\|_2^2 = 1 \tag{34}$$

第二个优化问题

给定如下优化问题：

$$\arg\max_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}} \ \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}} \tag{35}$$

上式中，$\boldsymbol{A}$ 为已知数据矩阵，$\boldsymbol{x}$ 为优化变量。注意，$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 在分母上，因此 $\boldsymbol{x}$ 不能为零向量 $\boldsymbol{x}$。这就是本书第 14 章讲的瑞利商。上述优化问题等价于 (29)。本书前文多次强调过，上式分子、分母都是标量。

类似 (35)，最小化优化问题：

$$\arg\min_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}} \ \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}} \tag{36}$$

上式等价于 (33)。

第三个优化问题

给定优化问题：

$$\begin{aligned} &\arg\max_{\boldsymbol{v}} \ \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} \\ &\text{subject to: } \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{v}=1 \end{aligned} \tag{37}$$

构造拉格朗日函数：

$$L(\boldsymbol{v},\lambda) = \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} - \lambda\left(\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{v} - 1\right) \tag{38}$$

$L(\boldsymbol{v},\lambda)$ 对 $\boldsymbol{v}$ 偏导为 0，得到等式：

$$\frac{\partial L(\boldsymbol{v},\lambda)}{\partial \boldsymbol{v}} = 2\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} - 2\lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{v} = 0 \tag{39}$$

整理得到：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{v} \tag{40}$$

如果 $\boldsymbol{B}$ 可逆，上式相当于对 $\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}$ 进行特征值分解。特别地，当 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{I}$ 时对应 (29)。

第四个优化问题

给定优化问题：

$$\arg\max_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}} \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}} \tag{41}$$

上式实际上是瑞利商的一般式。这个优化问题等价于 (37)。一般情况，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 为正定，这样 $\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}$ 时，$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}>0$ 。

令：

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{B}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{y} \tag{42}$$

代入 (41) 中的目标函数，得到：

$$\frac{\left(\boldsymbol{B}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{y}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{B}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{y}\right)}{\left(\boldsymbol{B}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{y}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\left(\boldsymbol{B}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{y}\right)}=\frac{\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}^{\frac{-1}{2}\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{y}}{\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}} \tag{43}$$

如果 $\boldsymbol{B}$ 为正定矩阵，$\boldsymbol{B}$ 的特征值分解可以写成：

$$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{44}$$

而 $\boldsymbol{B}^{\frac{-1}{2}}$ 为：

$$\boldsymbol{B}^{\frac{-1}{2}}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{45}$$

请大家自己将 (45) 代入 (43)，并完成推导。

第五个优化问题

给定优化问题：

$$\begin{aligned}&\arg\min_{\boldsymbol{v}} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}\|\\&\text{subject to: } \|\boldsymbol{v}\|=1\end{aligned} \tag{46}$$

(46) 也等价于：

$$\begin{aligned}&\arg\min_{\boldsymbol{v}} \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}\\&\text{subject to: } \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}=1\end{aligned} \tag{47}$$

(46) 还等价于：

$$\arg\min_{x\neq 0}\left(\frac{\|Ax\|}{\|x\|}\right)^2=\frac{x^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}Ax}{x^{\mathrm{T}}x} \tag{48}$$

注意，x 不能是零向量 0。

(46) 也等价于：

$$\arg\min_{x\neq 0}\frac{\|Ax\|}{\|x\|} \tag{49}$$

式中，对 A 是否为对称矩阵没有限制，因为 $A^{\mathrm{T}}A$ 为对称矩阵。对 $A^{\mathrm{T}}A$ 的特征值分解，便可以解决这个优化问题。这个优化问题实际上就是我们要在本章后文要讨论的 SVD 分解的优化视角。

18.7 再谈 SVD：优化视角

本节从优化视角再讨论 SVD 分解。

从投影说起

如图 16 所示，数据矩阵 X 中任意行向量 $x^{(i)}$ 在 v 上投影，得到标量投影结果为 $y^{(i)}$：

$$x^{(i)}v=y^{(i)} \tag{50}$$

其中，v 为单位向量。

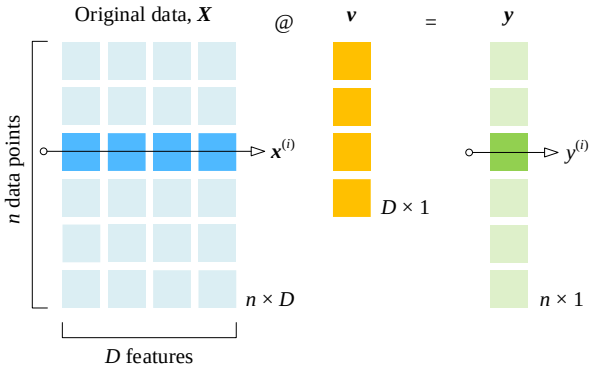


图 16. 数据矩阵 X 中任意行向量 $x^{(i)}$ 在 v 上投影

如图 17 所示，$y^{(i)}$ 就是 $x^{(i)}$在 v 上坐标，$h^{(i)}$ 为 $x^{(i)}$ 到 v 的距离。

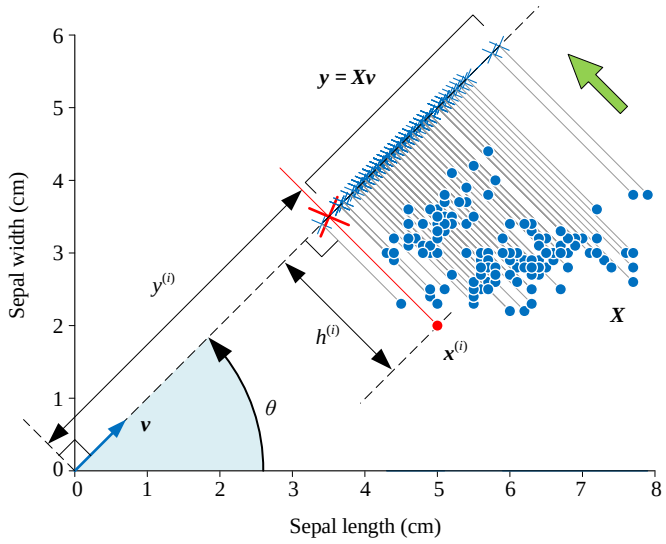


图 17. $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 在 $\boldsymbol{v}$ 上投影

整个数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 在 $\boldsymbol{v}$ 上投影得到向量 $\boldsymbol{y}$：

$$\boldsymbol{X}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{y} \tag{51}$$

数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 对应图 17 中的圆点 ●，$\boldsymbol{y}$ 对应图 17 中的叉 ×。

构造优化问题

从优化问题角度，SVD 分解等价于最大化 $y^{(i)}$ 平方和：

$$\max_{\boldsymbol{v}} \sum_{i=1}^{n} \left(y^{(i)} \right)^2 \tag{52}$$

上式相当于，最小化 $h^{(i)}$ 平方和：

$$\min \sum_{i=1}^{n} \left(h^{(i)} \right)^2 \tag{53}$$

而如下几个式子等价，

$$\sum_{i=1}^{n} \left(y^{(i)} \right)^2 = \left\| \boldsymbol{y} \right\|_2^2 = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{y} = \left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{v} \right)^{\mathrm{T}} \left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{v} \right) = \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \underbrace{\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}}_{\boldsymbol{G}} \boldsymbol{v} \tag{54}$$

大家是否看到了 (48) 的影子。

构造如下优化问题：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v}_1 &= \arg\max_{\boldsymbol{v}} \ \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X} \boldsymbol{v} \\ &\text{subject to: } \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{v} = 1 \end{aligned} \tag{55}$$

上式中，$\boldsymbol{X}$ 为已知数据矩阵，$\boldsymbol{v}$ 为优化变量。

(55) 等价于：

$$\boldsymbol{v}_1 = \arg\max_{\boldsymbol{v}} \frac{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}} \tag{56}$$

利用 L^2 范数，(55) 还等价于：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v}_1 &= \arg\max_{\boldsymbol{v}} \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}\| \\ &\text{subject to: } \|\boldsymbol{v}\| = 1 \end{aligned} \tag{57}$$

(55) 也等价于：

$$\arg\max_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}} \frac{\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \tag{58}$$

上式中，$\boldsymbol{x}$ 为优化变量。

对 $\boldsymbol{X}$ 进行奇异值分解得到的最大奇异值 s_1 满足：

$$s_1 = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1\| = \|\boldsymbol{y}_1\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(y_1^{(i)}\right)^2} \tag{59}$$

其中，$\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{y}_1$。也就是说，奇异值 s_1 代表，$\boldsymbol{X}$ 行向量在 $\boldsymbol{v}$ 方向上投影结果 $\boldsymbol{y}$ 的模的最大值。

格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 最大特征值 λ_1 满足：

$$\lambda_1 = s_1^2 = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1\|_2^2 = \|\boldsymbol{y}_1\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(y_1^{(i)}\right)^2 \tag{60}$$

请大家格外注意理解这个优化视角，它阐释了奇异值分解的内核。

顺序求解其他右奇异向量

确定第一右奇异向量 $\boldsymbol{v}_1$ 之后，我们可以依次构造类似如下优化问题求解其他右奇异向量：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v}_2 &= \arg\max_{\boldsymbol{v}} \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}\| \\ &\text{subject to: } \|\boldsymbol{v}\| = 1,\ \boldsymbol{v} \perp \boldsymbol{v}_1 \end{aligned} \tag{61}$$

上式等价于：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v}_2 &= \arg\max_{\boldsymbol{v}} \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v} \\ &\text{subject to: } \|\boldsymbol{v}\| = 1,\ \boldsymbol{v} \perp \boldsymbol{v}_1 \end{aligned} \tag{62}$$

中心化数据

数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 中每一列数据 $\boldsymbol{x}_j$ 分别减去本列均值可以得到中心化数据 $\boldsymbol{X}_c$。利用广播原则，$\boldsymbol{X}$ 减去行向量 E($\boldsymbol{X}$) 得到 $\boldsymbol{X}_c$：

$$\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X}) \tag{63}$$

⚠ 特别强调，SVD 分解中心化数据 $\boldsymbol{X}_c$ 得到的结果一般不同于 SVD 分解原数据矩阵 $\boldsymbol{X}$。

如图 18 所示，中心化数据 $\boldsymbol{X}_c$ 在 $\boldsymbol{v}$ 上投影得到向量 $\boldsymbol{y}_c$：

$$\boldsymbol{X}_c\boldsymbol{v} = \boldsymbol{y}_c \tag{64}$$

图 18 对应的优化问题为：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v}_{c\_1} &= \arg\max_{\boldsymbol{v}} \ \|\boldsymbol{X}_c\boldsymbol{v}\| \\ &\text{subject to: } \|\boldsymbol{v}\| = 1 \end{aligned} \tag{65}$$

$\boldsymbol{X}_c$ 的最大奇异值 s_{c_1} 为：

$$s_{c\_1} = \left\|\boldsymbol{X}_c\boldsymbol{v}_{c\_1}\right\| \tag{66}$$

也就是说，s_{c_1} 的平方为 $\boldsymbol{X}_c$ 所有点在 $\boldsymbol{v}_{c\_1}$ 方向上标量投影的平方值之和的最大值：

$$\begin{aligned} s_1^2 &= \left\|\boldsymbol{X}_c\boldsymbol{v}_{c\_1}\right\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(y_c^{(i)}\right)^2 = \|\boldsymbol{y}_c\|_2^2 = \boldsymbol{y}_c{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_c \\ &= \left(\boldsymbol{X}_c\boldsymbol{v}_{c\_1}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{X}_c\boldsymbol{v}_{c\_1}\right) = \boldsymbol{v}_{c\_1}{}^{\mathrm{T}}\underbrace{\boldsymbol{X}_c{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_c}_{(n-1)\boldsymbol{\Sigma}}\boldsymbol{v}_{c\_1} = (n-1)\boldsymbol{v}_{c\_1}{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_{c\_1} \end{aligned} \tag{67}$$

相信大家已经注意到上式中的协方差矩阵。大家可能会对 (67) 感到困惑，SVD 分解怎么和协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 扯到一起？这是本书最后三章要回答的问题。

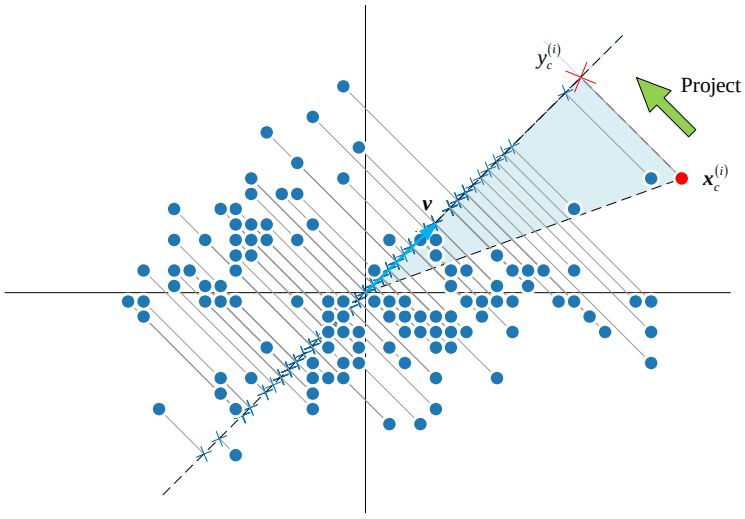


图 18. 中心化数据在 $\boldsymbol{v}$ 上投影

18.8 矩阵范数：矩阵 → 标量，矩阵“大小”

有了上一节的优化视角，本节要介绍几种机器学习算法中常用的**矩阵范数** (matrix norm)。矩阵范数相当于向量范数的推广。本书第 3 章讲过向量范数代表某种“距离”，计算向量范数是某种“向量 → 标量”映射。

类似向量范数，矩阵范数也是某种基于特定规则的“矩阵 → 标量”映射。矩阵范数也从不同角度度量了矩阵的“大小”。

矩阵 p-范数

形状为 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 p-范数定义为：

$$\|\boldsymbol{A}\|_p = \max_{\boldsymbol{x}\neq 0} \frac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_p}{\|\boldsymbol{x}\|_p} \tag{68}$$

大家是否已经看到类似 (49) 的形式。

本节内容以如下矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为例：

$$\boldsymbol{A}_{m\times n} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}_{3\times 2} \tag{69}$$

矩阵 1-范数

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 1-范数，也叫**列元素绝对值之和最大范数** (maximum absolute column sum norm)，具体定义如下：

$$\|\boldsymbol{A}\|_1 = \max_{1\le j\le n} \sum_{i=1}^{m} |a_{i,j}| \tag{70}$$

(69) 给出的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有 2 列，先计算每一列元素绝对值之和，然后再取出其中最大值。这个最大值就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 1-范数：

$$\|\boldsymbol{A}\|_1 = \max(0+1+1, 1+1+0) = \max(2,2) = 2 \tag{71}$$

矩阵∞-范数

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的∞-范数，也叫**行元素绝对值之和最大范数** (maximum absolute row sum norm)，具体定义如下：

$$\|\boldsymbol{A}\|_{\infty} = \max_{1\le i\le m}\sum_{j=1}^{n}\left|a_{i,j}\right| \tag{72}$$

(69) 给出的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有 3 行，先计算每一行元素绝对值之和，然后再取出其中最大值。这个最大值就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的∞-范数：

$$\|\boldsymbol{A}\|_{\infty} = \max(0+1,1+1,1+0) = \max(1,2,1) = 2 \tag{73}$$

矩阵 2-范数

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 2-范数就要用 (49) 这个优化问题。矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 2-范数具体定义如下：

$$\|\boldsymbol{A}\|_2 = \max_{\boldsymbol{x}\neq 0}\frac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} = s_1 = \sqrt{\lambda_1} \tag{74}$$

根据本章前文所讲，$\|\boldsymbol{A}\|_2$ 对应 $\boldsymbol{A}$ 奇异值分解中最大奇异值 $s_1 = \sqrt{3}$。本书第 11 章手算过矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解。

$\|\boldsymbol{A}\|_2$ 也是 $\boldsymbol{A}$ 的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 特征值分解中最大特征值的平方根 $\sqrt{\lambda_1} = \sqrt{3}$。

矩阵 *F*-范数

本节介绍的最后一个范数叫**弗罗贝尼乌斯范数** (Frobenius norm)，简称 *F*-范数，对应定义为：

$$\|\boldsymbol{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}\left|a_{i,j}\right|^2} \tag{75}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 *F*-范数就是矩阵所有元素的平方和，再开方。

(69) 给出的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有 6 个元素，计算它们的平方和、再开方就是 $\boldsymbol{A}$ 的 *F*-范数：

$$\|\boldsymbol{A}\|_F = \sqrt{0^2+1^2+1^2+1^2+1^2+0^2} = \sqrt{4} = 2 \tag{76}$$

本书第 5 章介绍过矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的所有元素平方和就是 $\boldsymbol{A}$ 的格拉姆矩阵的迹，即：

$$\|\boldsymbol{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}\left|a_{i,j}\right|^2} = \sqrt{\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\right)} \tag{77}$$

根据本书第 13 章介绍过矩阵的迹等于其特征值之和，这样我们又得到了 *F*-范数另一个计算方法：

$$\|\boldsymbol{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}\left|a_{i,j}\right|^2} = \sqrt{\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\right)} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\lambda_i} \tag{78}$$

其中，$\sum_{i=1}^{n}\lambda_i$ 为 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的特征值之和。$\boldsymbol{A}$ 的形状为 $m \times n$，因此 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的形状为 $n \times n$。所以，$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 有 n 个特征值。一些教材会把 $\sum_{i=1}^{n}\lambda_i$ 求和上限写成 $\min(m, n)$，即：

$$\|\boldsymbol{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{\min(m,n)}\lambda_i} \tag{79}$$

这是因为格拉姆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 非 0 特征值最多就 $\min(m, n)$。如果 $\boldsymbol{A}$ 非满秩，非 0 特征值更少。

(69) 给出的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 格拉姆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 有两个特征值 1 和 3，由此计算 $\boldsymbol{A}$ 的 F-范数：

$$\|\boldsymbol{A}\|_F = \sqrt{1+3} = \sqrt{4} = 2 \tag{80}$$

由于，$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的特征值和 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值存在等式关系 $\lambda_i = s_i^2$，(78) 还可以写成：

$$\|\boldsymbol{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}\left|a_{i,j}\right|^2} = \sqrt{\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\right)} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\lambda_i} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}s_i^2} \tag{81}$$

对比 (74) 和 (81)，显然矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 2-范数不大于 F-范数，即：

$$\|\boldsymbol{A}\|_2 \le \|\boldsymbol{A}\|_F \tag{82}$$

18.9 再谈数据正交投影：优化视角

本章最后从优化视角再谈数据正交投影。

正交投影

鸢尾花数据集的前两列构造数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 2}$。给定规范正交基 $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$，$\boldsymbol{v}_1$ 和横轴正方向夹角为 θ。

如图 19 所示，$\boldsymbol{X}$ 在 $\boldsymbol{v}_1$ 方向标量投影结果为 $\boldsymbol{y}_1 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1$。$\boldsymbol{y}_1$ 为行数为 150 的列向量，$\boldsymbol{y}_1$ 相当于 $\boldsymbol{X}$ 在 $\boldsymbol{v}_1$ 方向的坐标。

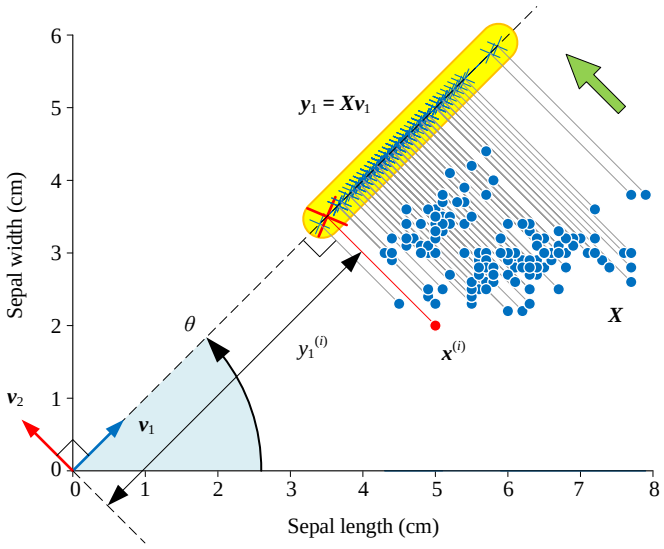


图 19. $\boldsymbol{X}$ 在 $\boldsymbol{v}_1$ 上投影

如图 20 所示，$\boldsymbol{X}$ 在 $\boldsymbol{v}_2$ 方向标量投影结果为 $\boldsymbol{y}_2 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2$，$\boldsymbol{y}_2$ 则是 $\boldsymbol{X}$ 在 $\boldsymbol{v}_2$ 方向的坐标。

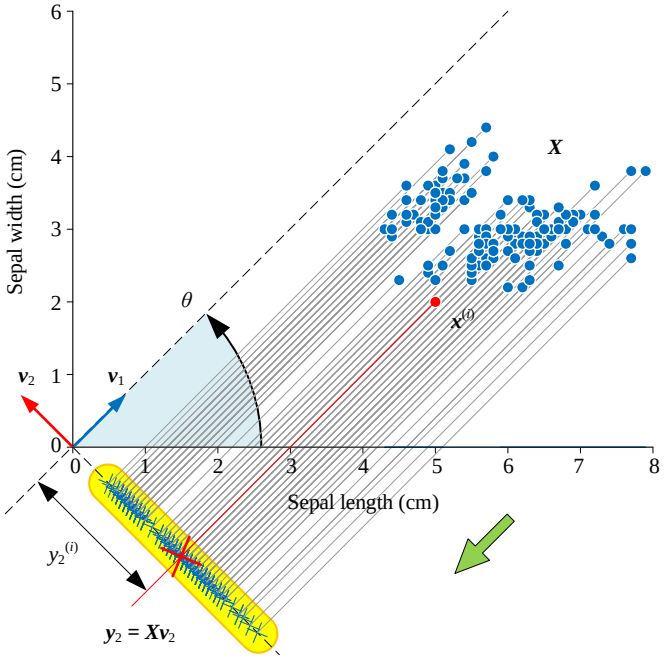


图 20. $\boldsymbol{X}$ 在 $\boldsymbol{v}_2$ 上投影

向量特征、向量之间关系

作为列向量，$\boldsymbol{y}_1$ 和 $\boldsymbol{y}_2$ 各自有其模 ($\|\boldsymbol{y}_1\|$、$\|\boldsymbol{y}_2\|$)，即向量长度。以 $\boldsymbol{y}_1$ 为例，$\|\boldsymbol{y}_1\|^2$ 写成：

$$\left\|\boldsymbol{y}_1\right\|_2^2=\boldsymbol{y}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_1=\left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1=\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\underbrace{\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}}_{\boldsymbol{G}}\boldsymbol{v}_1=\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{v}_1 \tag{83}$$

$\boldsymbol{y}_1$ 和 $\boldsymbol{y}_2$ 的向量内积 ($<\boldsymbol{y}_1,\boldsymbol{y}_2>$)、夹角 ($\cos(\boldsymbol{y}_1,\boldsymbol{y}_2)$)、夹角的余弦值 ($\text{angle}(\boldsymbol{y}_1,\boldsymbol{y}_2)$) 可以用来度量 $\boldsymbol{y}_1$ 和 $\boldsymbol{y}_2$ 之间关系，即：

$$\left\langle \boldsymbol{y}_1,\boldsymbol{y}_2\right\rangle=\boldsymbol{y}_1\cdot\boldsymbol{y}_2=\boldsymbol{y}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_2,\quad \cos\left(\boldsymbol{y}_1,\boldsymbol{y}_2\right)=\frac{\boldsymbol{y}_1\cdot\boldsymbol{y}_2}{\left\|\boldsymbol{y}_1\right\|\left\|\boldsymbol{y}_2\right\|},\quad \text{angle}\left(\boldsymbol{y}_1,\boldsymbol{y}_2\right)=\arccos\left(\frac{\boldsymbol{y}_1\cdot\boldsymbol{y}_2}{\left\|\boldsymbol{y}_1\right\|\left\|\boldsymbol{y}_2\right\|}\right) \tag{84}$$

观察图 19 和图 20，不难发现 $\boldsymbol{y}_1$ 和 $\boldsymbol{y}_2$ 两个列向量随 θ 变化。也就是说，上述几个量值都会随着 θ 变化。有了变化，就会有最大值、最小值，这就进入了优化视角。

进一步，将 $\boldsymbol{y}_1$ 和 $\boldsymbol{y}_2$ 写成 $\boldsymbol{Y}=[\boldsymbol{y}_1,\boldsymbol{y}_2]=\boldsymbol{X}\boldsymbol{V}$，$\boldsymbol{Y}$ 格拉姆矩阵可以写成：

$$\boldsymbol{G}_{\boldsymbol{Y}}=\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Y}=\left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{V}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\underbrace{\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}}_{\boldsymbol{G}_{\boldsymbol{X}}}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{V} \tag{85}$$

将 $\boldsymbol{V}=[\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2]$ 代入 (85)，展开得到：

$$\boldsymbol{G}_{\boldsymbol{Y}}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{V}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\boldsymbol{G}_{\boldsymbol{X}}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{v}_2\\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{v}_2\end{bmatrix} \tag{86}$$

这个格拉姆矩阵集成了 $\boldsymbol{y}_1$ 和 $\boldsymbol{y}_2$ 各自长度 (模)、相互关系 (向量相对夹角) 两方面信息。

统计视角

从统计视角来看，如图 21 所示，数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 在规范正交基 $[\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2]$ 投影的结果为 $\boldsymbol{y}_1$ 和 $\boldsymbol{y}_2$，它俩无非就是两列各自含有 150 样本数据的集合。

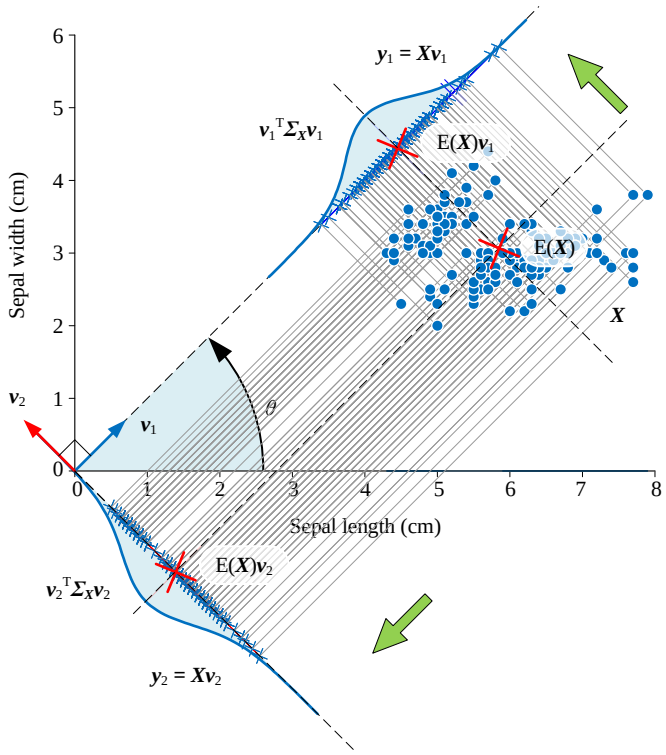


图 21. $\boldsymbol{X}$ 在 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 上投影，统计视角

$\boldsymbol{y}_1$ 和 $\boldsymbol{y}_2$ 肯定都有自己统计量，比如均值 ($E(\boldsymbol{y}_1)$、$E(\boldsymbol{y}_2)$)、方差 ($var(\boldsymbol{y}_1)$、$var(\boldsymbol{y}_2)$)、标准差 ($std(\boldsymbol{y}_1)$、$std(\boldsymbol{y}_2)$)。

而 $\boldsymbol{y}_1$ 和 $\boldsymbol{y}_2$ 之间也存在协方差 ($cov(\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2)$)、相关性系数 ($corr(\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2)$) 这两个重要的统计量。

而上述统计度量值同样随着 θ 变化。图 22 和图 23 展示一系列重要统计运算，下面逐个来说。

$\boldsymbol{y}_1$ 和 $\boldsymbol{y}_2$ 均值 (期望值) $E(\boldsymbol{y}_1)$和 $E(\boldsymbol{y}_2)$为：

$$E(\boldsymbol{y}_1) = E(\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1) = E(\boldsymbol{X})\boldsymbol{v}_1, \quad E(\boldsymbol{y}_2) = E(\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2) = E(\boldsymbol{X})\boldsymbol{v}_2 \tag{87}$$

这相当于数据质心 $E(\boldsymbol{X}) = [E(\boldsymbol{x}_1), E(\boldsymbol{x}_2)]$ 分别向 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$ 投影。

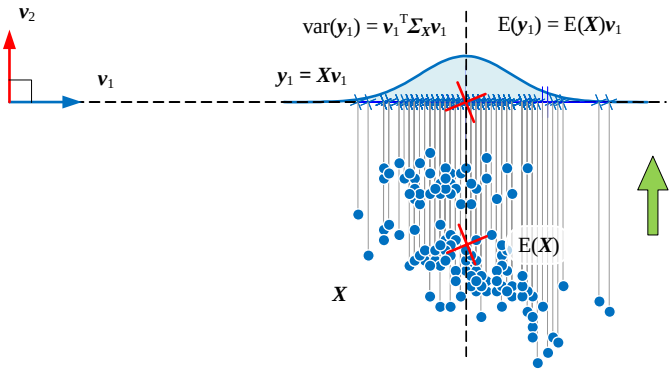


图 22. y_1 的统计特征

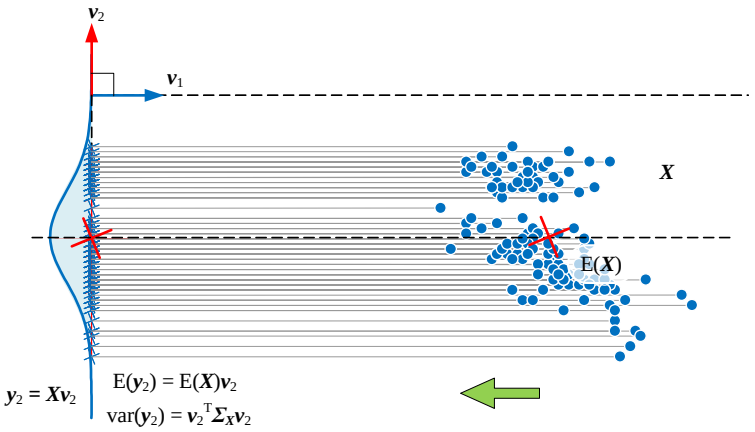


图 23. y_2 的统计特征

y_1 和 y_2 的方差 $\mathrm{var}(y_1)$ 和 $\mathrm{var}(y_2)$ 分别为：

$$\mathrm{var}(y_1) = v_1^T \Sigma_X v_1, \quad \mathrm{var}(y_2) = v_2^T \Sigma_X v_2 \tag{88}$$

其中，Σ_X 为数据矩阵 X 的协方差矩阵。

y_1 和 y_2 的协方差分别为：

$$\mathrm{cov}(y_1, y_2) = v_1^T \Sigma_X v_2 = \mathrm{cov}(y_2, y_1) = v_2^T \Sigma_X v_1 \tag{89}$$

特别地，将 y_1 和 y_2 写成 $Y = [y_1, y_2]$，Y 的协方差矩阵可以写成：

$$\Sigma_Y = \begin{bmatrix} \mathrm{var}(y_1) & \mathrm{cov}(y_1, y_2) \\ \mathrm{cov}(y_2, y_1) & \mathrm{var}(y_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1^T \Sigma_X v_1 & v_1^T \Sigma_X v_2 \\ v_2^T \Sigma_X v_1 & v_2^T \Sigma_X v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1^T \\ v_2^T \end{bmatrix} \Sigma_X \begin{bmatrix} v_1 & v_2 \end{bmatrix} = V^T \Sigma_X V \tag{90}$$

比较 (86) 和 (90)，我们发现协方差矩阵和格拉姆矩阵存在大量相似性。本书最后三章和《概率统计》还会继续深入讨论这一话题。

优化视角、连续变化

下面，我们用图 24 这展示本节前文介绍的有关 y_1 和 y_2 各种量化指标随 θ 变化。容易发现，其中部分曲线类似三角函数，这难道是个巧合？我们将会在《统计至简》一册回答这个问题。

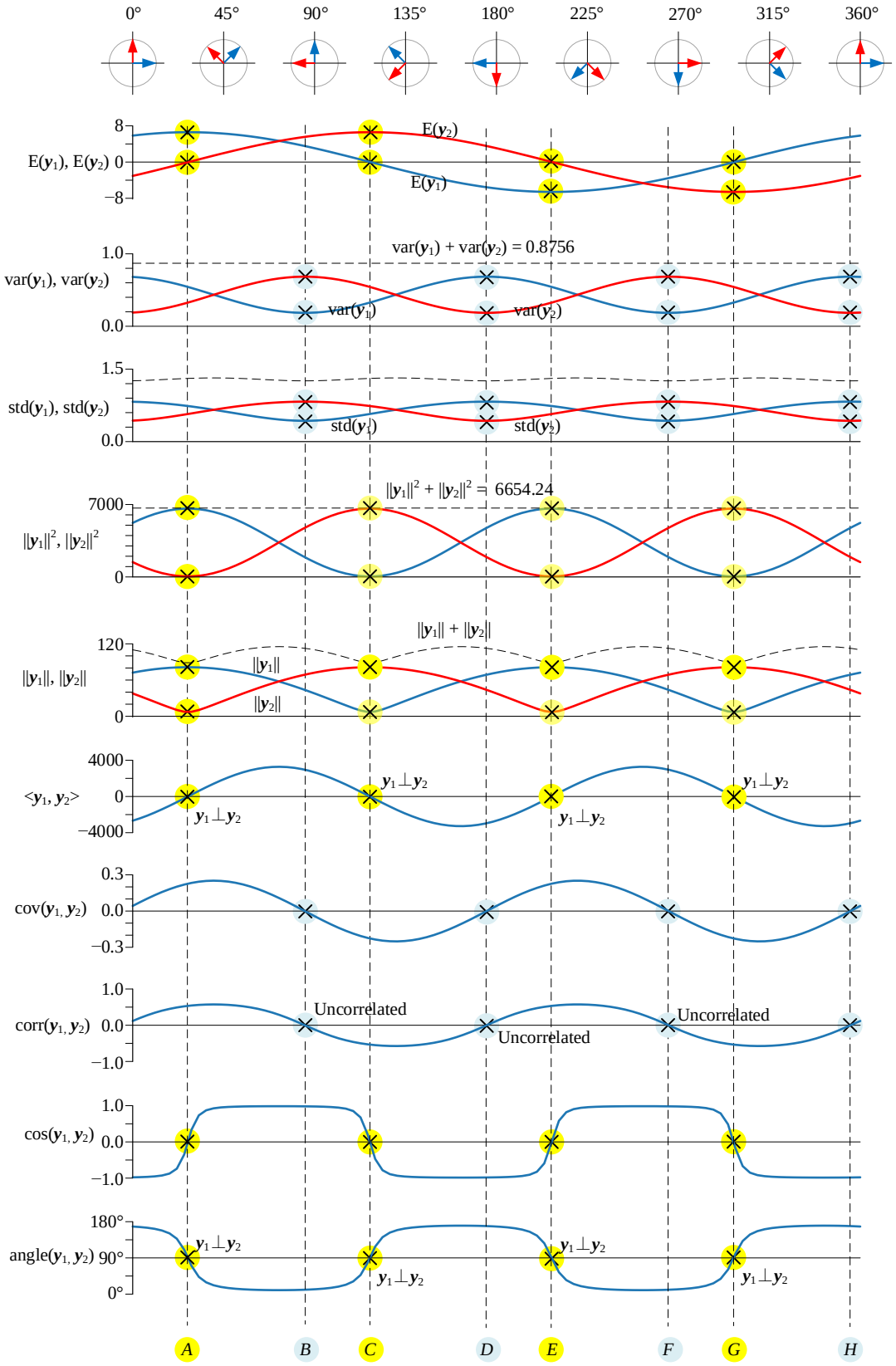


图 24. y_1 和 y_2 各种量化关系随 θ 变化

请大家注意图 24 中两组 θ 位置 A、C、E、G 和 B、D、F、H。

当 θ 位于 A、C、E、G 时，$\|\boldsymbol{y}_1\|^2$ 和 $\|\boldsymbol{y}_2\|^2$ 取得极值，这四个位置对应 $\boldsymbol{y}_1$ 和 $\boldsymbol{y}_2$ 垂直，即 $\boldsymbol{y}_1 \perp \boldsymbol{y}_2$。

特别值得注意的是，不管 θ 怎么变，$\|\boldsymbol{y}_1\|^2$ 和 $\|\boldsymbol{y}_2\|^2$ 之和为定值：

$$\|\boldsymbol{y}_1\|_2^2 + \|\boldsymbol{y}_2\|_2^2 = \boldsymbol{y}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_1 + \boldsymbol{y}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_2 = 6654.24 = \|\boldsymbol{x}_1\|_2^2 + \|\boldsymbol{x}_2\|_2^2 = \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 \tag{91}$$

这是因为矩阵迹的重要性质——$\mathrm{tr}(\boldsymbol{AB}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{BA})$，即：

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{G_Y}) = \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G_X}\boldsymbol{V}\right) = \mathrm{tr}\left(\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G_X}\right)\boldsymbol{V}\right) = \mathrm{tr}\left(\underbrace{\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}}_{\boldsymbol{I}}\boldsymbol{G_X}\right) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{G_X}) \tag{92}$$

$\boldsymbol{G_Y}$ 的迹为：

$$\mathrm{tr}\left(\underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{y}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_1 & \boldsymbol{y}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_2 \\ \boldsymbol{y}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_1 & \boldsymbol{y}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{G_Y}}\right) = \boldsymbol{y}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_1 + \boldsymbol{y}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_2 = \|\boldsymbol{y}_1\|_2^2 + \|\boldsymbol{y}_2\|_2^2 \tag{93}$$

而 $\boldsymbol{G_X}$ 的迹为：

$$\mathrm{tr}\left(\underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{G_X}}\right) = \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 = \|\boldsymbol{x}_1\|_2^2 + \|\boldsymbol{x}_2\|_2^2 \tag{94}$$

特别地，如果 (92) 中 $\boldsymbol{V}$ 来自于特征值分解，则 (93) 等于 $\boldsymbol{G_X}$ 的两个特征值之和：

$$\boldsymbol{y}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_1 + \boldsymbol{y}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_2 = \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 = \lambda_1 + \lambda_2 \tag{95}$$

当 θ 位于 B、D、F、H 时，$\mathrm{var}(\boldsymbol{y}_1)$ 和 $\mathrm{var}(\boldsymbol{y}_2)$ 取得极值，对应 $\boldsymbol{y}_1$ 和 $\boldsymbol{y}_2$ 线性无关，即相关性系数为 0，不同于 $\boldsymbol{y}_1 \perp \boldsymbol{y}_2$。

同样值得注意的是，不管 θ 怎么变，$\mathrm{var}(\boldsymbol{y}_1)$ 和 $\mathrm{var}(\boldsymbol{y}_2)$ 之和为定值：

$$\mathrm{var}(\boldsymbol{y}_1) + \mathrm{var}(\boldsymbol{y}_2) = 0.8756 \tag{96}$$

利用迹运算，同样得出类似结论，

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma_Y}) = \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma_X}\boldsymbol{V}\right) = \mathrm{tr}\left(\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma_X}\right)\boldsymbol{V}\right) = \mathrm{tr}\left(\underbrace{\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}}_{\boldsymbol{I}}\boldsymbol{\Sigma_X}\right) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma_X}) \tag{97}$$

$\boldsymbol{\Sigma_Y}$ 的迹为：

$$\operatorname{tr}\left(\underbrace{\begin{bmatrix}\operatorname{var}(\boldsymbol{y}_1) & \operatorname{cov}(\boldsymbol{y}_1,\boldsymbol{y}_2)\\ \operatorname{cov}(\boldsymbol{y}_2,\boldsymbol{y}_1) & \operatorname{var}(\boldsymbol{y}_2)\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{G}_Y}\right)=\operatorname{var}(\boldsymbol{y}_1)+\operatorname{var}(\boldsymbol{y}_2) \tag{98}$$

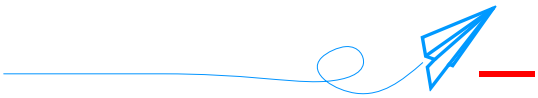
而 $\boldsymbol{\Sigma}_X$ 的迹为：

$$\operatorname{tr}\left(\underbrace{\begin{bmatrix}\operatorname{var}(\boldsymbol{x}_1) & \operatorname{cov}(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)\\ \operatorname{cov}(\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_1) & \operatorname{var}(\boldsymbol{x}_2)\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{G}_X}\right)=\operatorname{var}(\boldsymbol{x}_1)+\operatorname{var}(\boldsymbol{x}_2) \tag{99}$$

也就是说：

$$\operatorname{var}(\boldsymbol{y}_1)+\operatorname{var}(\boldsymbol{y}_2)=\operatorname{var}(\boldsymbol{x}_1)+\operatorname{var}(\boldsymbol{x}_2)=0.8756 \tag{100}$$

这一点非常重要，大家将会在主成分分析看到它的应用。



约束条件影响优化问题解的位置。拉格朗日乘子法可以把有约束优化问题转化为无约束优化问题。本章分别从等式约束和不等式约束两方面来展开。需要大家格外注意的是，如何利用梯度向量理解拉格朗日乘子法？此外，对于不等式约束，KKT 条件中每个式子背后的数学思想是什么？

本章又从优化视角深入讨论了特征值分解、SVD 分解。请大家特别注意，SVD 分解中，分解对象可以分别为原始数据矩阵、中心化数据矩阵，甚至是 z 分数。它们的 SVD 分解结果有着很大差异。本书最后还会深入探讨，请大家留意。

本章最后从优化视角回顾了数据正交投影，建立了向量和统计描述之间的关系，这是本书最后四章要涉及的话题。

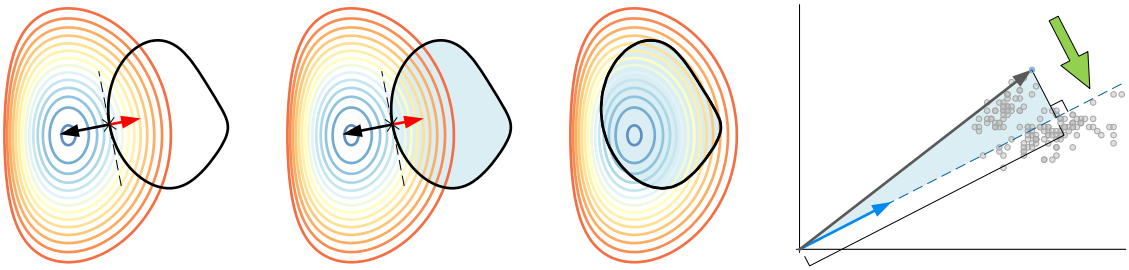


图 25. 总结本章重要内容的四幅图

19 From Lines to Hyperplanes

直线到超平面

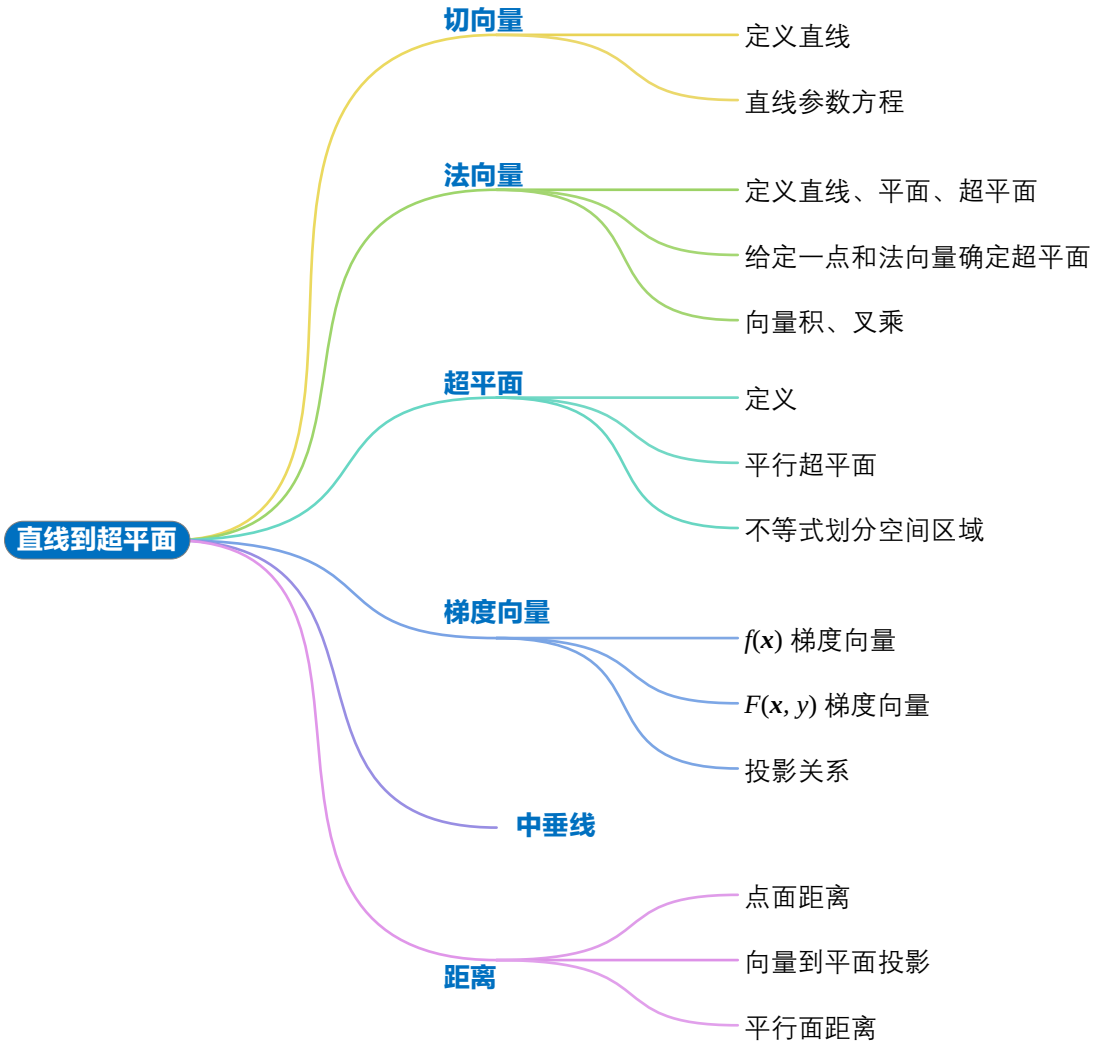
用线性代数工具分析直线、平面和超平面

古人说，算数和几何是数学的双翼。而我认为，算数和几何是任何量化科学的基础和精髓。不仅如此，它们还是压顶石。任何科学的结果都需要用数字或者几何图形来表达。将结果转化为数字，需要借助算数；将结果转化为图形，需要借助几何。

An ancient writer said that arithmetic and geometry are the wings of mathematics; I believe one can say without speaking metaphorically that these two sciences are the foundation and essence of all the sciences which deal with quantity. Not only are they the foundation, they are also, as it were, the capstones; for, whenever a result has been arrived at, in order to use that result, it is necessary to translate it into numbers or into lines; to translate it into numbers requires the aid of arithmetic, to translate it into lines necessitates the use of geometry.

—— 约瑟夫·拉格朗日 (Joseph Lagrange) | 法国籍意大利裔数学家和天文学家 | 1736 ~ 1813

- `matplotlib.pyplot.contour()` 绘制等高线图
- `matplotlib.pyplot.quiver()` 绘制箭头图
- `numpy.meshgrid()` 产生网格化数据
- `numpy.ones_like()` 用来生成和输入矩阵形状相同的全 1 矩阵
- `subs()` 完成符号代数式中替换
- `sympy.abc import x` 定义符号变量 x
- `sympy.diff()` 求解符号函数导数和偏导解析式
- `sympy.evalf()` 将符号解析式中未知量替换为具体数值
- `sympy.lambdify()` 将符号表达式转化为函数
- `sympy.plot_implicit()` 绘制隐函数方程
- `sympy.simplify()` 简化代数式
- `sympy.symbols()` 定义符号变量



19.1 切向量：可以用来定义直线

至此，我们已经掌握大量线性代数运算工具。向量天然具备几何属性，这使得线性代数和几何之间的联系显而易见。本书前文利用几何视角帮助我们可视化重要的线性代数工具，让众多枯燥的概念和运算变得栩栩如生。

本系列丛书《数学要素》一册介绍大量的平面解析几何、立体几何知识，而线性代数工具可以将这些知识从二维、三维，延伸到更高维度，比如将直线的概念延伸到超平面，再比如将椭圆扩展到椭球。包括本章在内的接下来三章则利用线性代数工具讲解数据科学、机器学习中常见的几何知识。

切向量

如图 1 (a) 所示，直线上任意一点**切向量** (tangent vector) 和直线重合。

图 1 (b) 中，曲线上任意一点处的切向量是曲线该点处切线方向上的向量。

如图 1 (c) 所示，三维空间平面上某点切线有无数条，它们都在同一个平面内。

同样，如图 1 (d) 所示，光滑曲面某点切线有无数条，这些切线都在曲面上该点切平面内。也可以说，这些切线构造该切平面。换个角度思考，有了切平面内任意两个向量，若两者相不平行，就可以确定切平面。

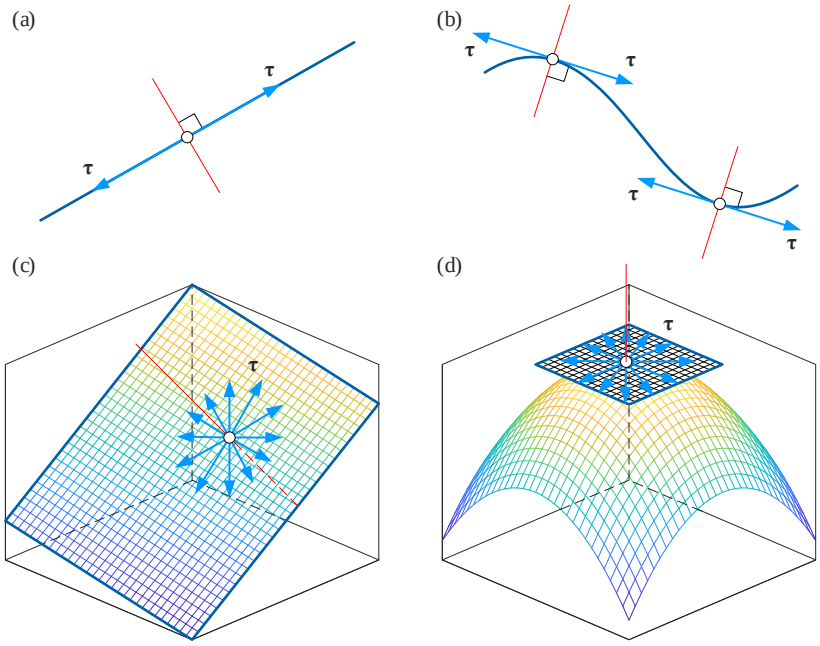


图 1. 直线、平面和光滑曲面切向量

本书一般用 $\boldsymbol{\tau}$ 代表切向量。**单位切向量** (unit tangent vector) $\hat{\boldsymbol{\tau}}$ 通过向量 $\boldsymbol{\tau}$ 单位化获得：

$$\hat{\boldsymbol{\tau}} = \frac{\boldsymbol{\tau}}{\|\boldsymbol{\tau}\|} \tag{1}$$

单位切向量 $\hat{\boldsymbol{\tau}}$ 模为 1。

描述平面直线

切向量可以用来描述直线。给定空间一点 $\boldsymbol{c}$ 和直线的切向量 $\boldsymbol{\tau}$ 便可以确定一条直线：

$$\boldsymbol{x} = k\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{c} \tag{2}$$

其中，k 为任意实数，相当于缩放系数。

从几何角度思考，上式实际上是前文介绍的“缩放 (k) + 平移 ($\boldsymbol{c}$)”。

从空间角度来看，$k\boldsymbol{\tau}$ 通过原点，$k\boldsymbol{\tau}$ 等价于向量空间 span($\boldsymbol{\tau}$)。而 $k\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{c}$ 则是仿射空间，$\boldsymbol{c} \neq 0$ 时，$k\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{c}$ 不过原点。

举个例子，用切向量描述平面上直线：

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = k \begin{bmatrix} \tau_1 \\ \tau_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \tag{3}$$

$\boldsymbol{c} = \boldsymbol{0}$ 时，如图 2 (a) 所示，这条穿越原点、切向量为 $\boldsymbol{\tau} = [4, 3]^T$ 的直线可以写作：

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = k \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix} \tag{4}$$

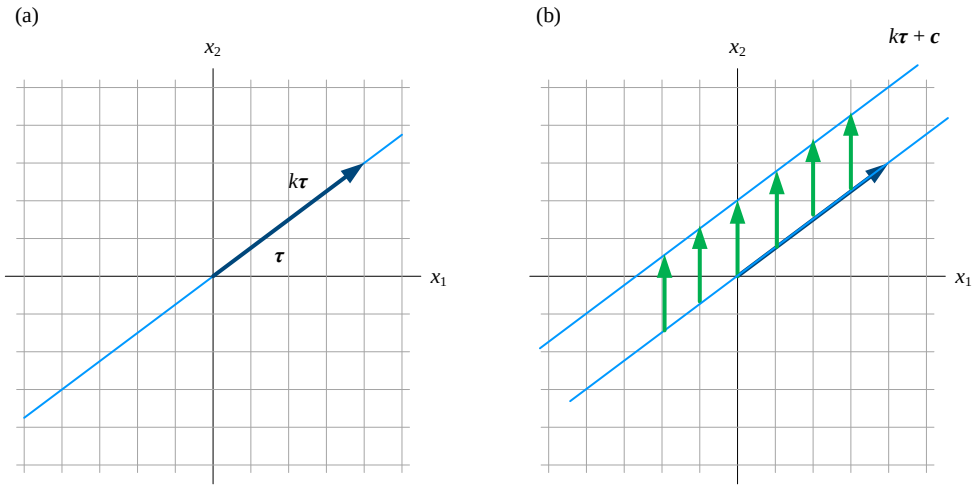


图 2. 用切向量定义平面直线

图 1 (b) 所示，(4) 直线向上平移 $\boldsymbol{c} = [0, 2]^T$，得到如下直线：

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = k \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix} \tag{5}$$

将 (5) 展开得到平面直线的参数方程：

$$\begin{cases} x_1 = 4k \\ x_2 = 3k + 2 \end{cases} \tag{6}$$

用 (3) 这种方式定义平面直线的好处是，切向量可以指向任意方向，比如水平方向 $[2, 0]^T$、竖直方向 $[0, -1]^T$。

描述三维空间直线

类似地，如图 3 所示，给定切向量和直线通过的一点 $\boldsymbol{c}$，便可以定义一条三维空间直线：

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = k \begin{bmatrix} \tau_1 \\ \tau_2 \\ \tau_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_1 \\ c_3 \\ c_3 \end{bmatrix} \tag{7}$$

将 (7) 展开便得到三维空间直线的参数方程：

$$\begin{cases} x_1 = k\tau_1 + c_1 \\ x_2 = k\tau_2 + c_2 \\ x_3 = k\tau_3 + c_3 \end{cases} \tag{8}$$

上述直线定义方式可以很容易推广到高维。图 3 这幅图还告诉我们，从几何角度来看，一维向量空间就是一条过原点的直线；一维仿射空间就是一条未必过原点的直线。

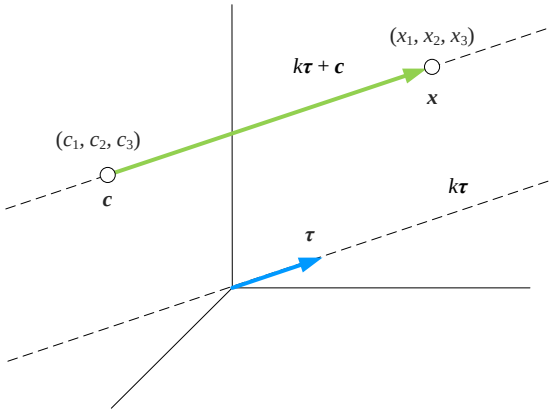


图 3. 空间直线定义

19.2 法向量：定义直线、平面、超平面

本系列丛书常用法向量定义直线、平面，甚至**超平面** (hyperplane)。

直线**法向量** (normal vector) 为垂直于直线非零向量，如图 4 (a) 所示。

如图 4 (b) 所示，光滑曲线某点法向量垂直于曲线该点切线。

如图 4 (c) 所示，**平面法向量** (a normal line to a surface) 垂直于平面内任意直线。

光滑连续曲面某点法向量为曲面该点处**切平面** (tangent plane) 的法向量，如图 4 (d) 所示。

本章用 $\boldsymbol{n}$ 或 $\boldsymbol{w}$ 代表法向量。非零法向量 $\boldsymbol{n}$ 的**单位法向量** (unit normal vector) $\hat{\boldsymbol{n}}$ 通过单位化获得：

$$\hat{\boldsymbol{n}} = \frac{\boldsymbol{n}}{\|\boldsymbol{n}\|} \tag{9}$$

同样，单位法向量 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 模为 1。

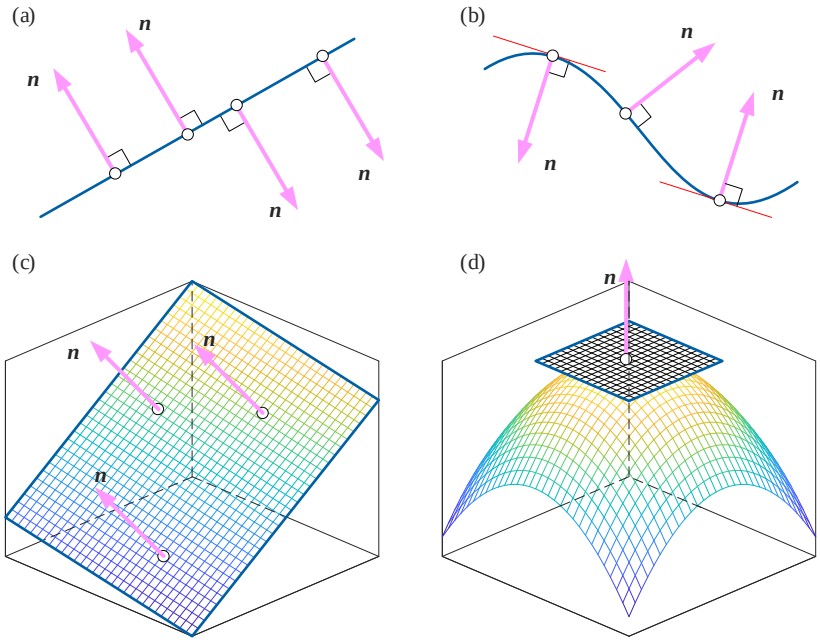


图 4. 直线、平面和光滑曲面法向量

描述三维空间平面

如图 5 所示，过空间一点与已知直线相垂直平面唯一。从向量视角来看，给定平面上一点和平面法向量 $\boldsymbol{n}$，可以确定一个平面。

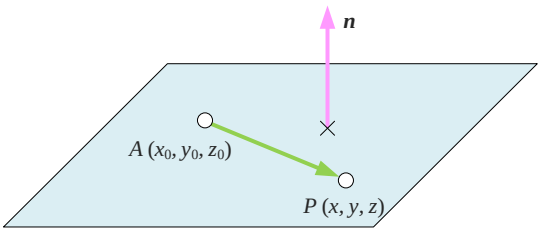


图 5. 空间平面定义

举两个例子

三维空间内某个平面通过点 A (1, 2, 3) 且垂直于法向量 $\boldsymbol{n} = [3, 2, 1]^{\mathrm{T}}$。

为了确定该直线解析式，定义平面上任意一点 P (x_1, x_2, x_3)，点 A 和 P 确定的向量垂直于法向量 $\boldsymbol{n}$，所以下式成立：

$$\boldsymbol{n} \cdot \overrightarrow{AP} = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 - 1 \\ x_2 - 2 \\ x_3 - 3 \end{bmatrix} = 0 \tag{10}$$

整理 (10) 得到平面的解析式：

$$3x_1 + 2x_2 + x_3 - 10 = 0 \tag{11}$$

再举个例子，求通过三个点 P_1 (3, 1, 2)，P_2 (1, 2, 3)，P_3 (4, −1, 1) 的平面解析式。

$\boldsymbol{a}$ 是起点为 P_1 终点为 P_2 的向量，$\boldsymbol{b}$ 是起点为 P_1 终点为 P_3 的向量。用列向量来写，$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 分别为：

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ -1 \end{bmatrix} \tag{12}$$

向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的向量积，即叉乘 $\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$ 结果如下：

$$\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix} \tag{13}$$

如图 6 所示，$\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$ 便是平面法向量 $\boldsymbol{n}$。

有了法向量 $\boldsymbol{n}$，仅仅需要平面任意一点便可以确定平面解析式。利用 P_1 和法向量 $\boldsymbol{n}$ 可以得到如下平面解析式：

$$x_1 - x_2 + 3x_3 - 8 = 0 \tag{14}$$

P_1 (3, 1, 2)，P_2 (1, 2, 3)，P_3 (4, −1, 1) 三点都在 (14) 平面上，请大家自行验证。

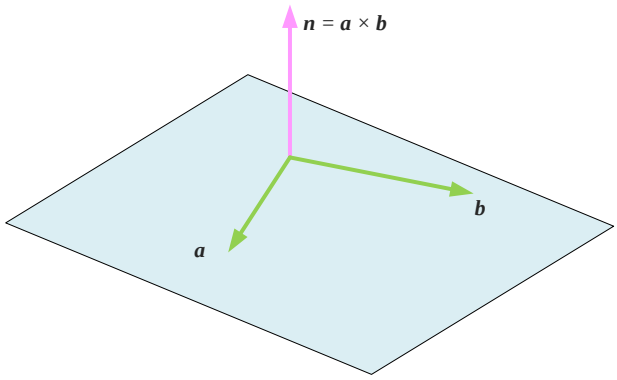


图 6. 向量叉乘为平面法向量

19.3 超平面：一维直线和二维平面的推广

本节将上一节平面扩展到多维空间中的超平面。

超平面

D 维**超平面** (hyperplane) 的定义如下：

$$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b=0 \tag{15}$$

其中，

$$\boldsymbol{w}=\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_D \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_D \end{bmatrix} \tag{16}$$

$\boldsymbol{w}$ 为超平面法向量，形式为列向量。$D>3$ 对应超平面，超平面是直线、平面推广到多维空间得到的数学概念。

⚠ 注意，(15) 中，列向量 $\boldsymbol{w}$ 和 $\boldsymbol{x}$ 行数均为 D。

(15) 也可以通过内积方式表达：

$$\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x}+b=0 \tag{17}$$

展开 (15) 得到：

$$w_1x_1+w_2x_2+\ldots+w_Dx_D+b=0 \tag{18}$$

$D = 2$

特别地，$D = 2$ 时，(17) 对应的平面直线解析式为：

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + b = 0 \tag{19}$$

(19) 不止表达类似一次函数的直线。$w_1 = 0$ 时，(19) 表达平行于横轴的直线，类似于常数函数直线，如图 7 (b)。$w_2 = 0$，(19) 为垂直横轴直线，这显然不是函数图像，如图 7 (c)。二维直角坐标系中，法向量 $\boldsymbol{w}$ 垂直于直线。

$D = 3$

$D = 3$ 时，(17) 对应的三维空间平面为：

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_3 x_3 + b = 0 \tag{20}$$

图 7 所示为上述几种几何图形。空间中，如图 7 (d)，法向量 $\boldsymbol{w}$ 垂直于平面或超平面。

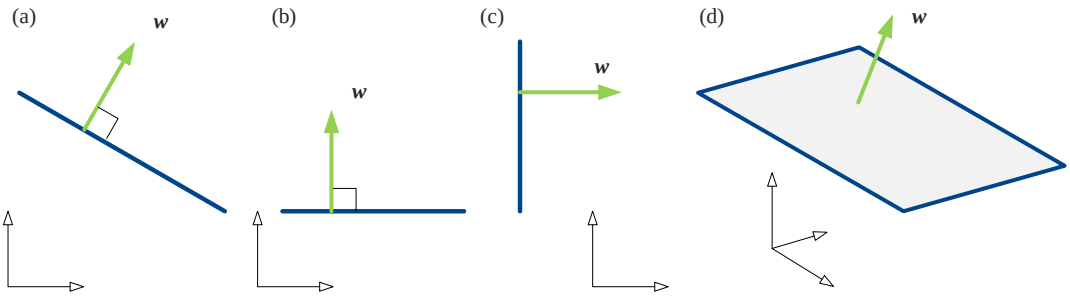


图 7. 几种特殊形态的直线、平面

超平面关系

如果两个超平面平行，则法向量平行。如果两个超平面垂直，则法向量垂直，即内积为 0。

(19) 中 b 取不同值时，代表一系列平行直线，如图 8 (a) 所示。

而 (20) 中 b 取不同值时则获得一系列平行平面，如图 8 (b) 所示。

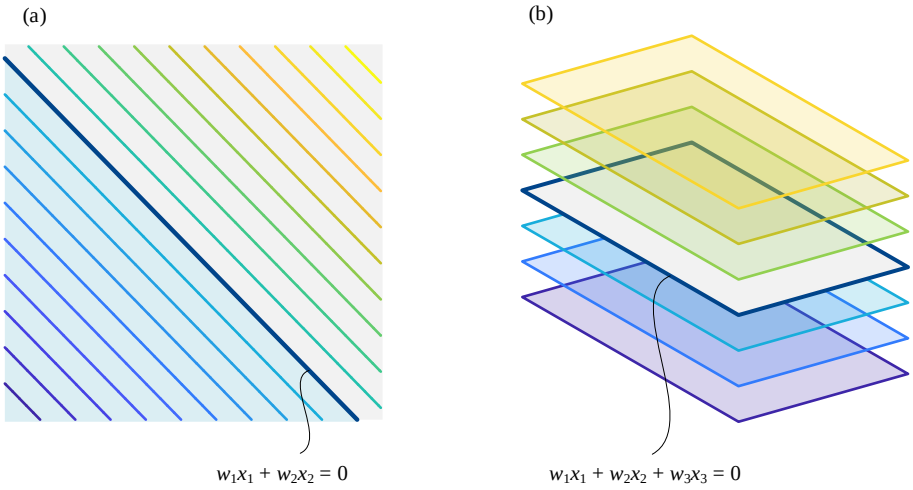


图 8. 平行直线和平行平面

划定区域

此外，某个确定的超平面解析式 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b = 0$ 可以划分空间区域。这一点在机器学习很多算法中非常重要。我们在本系列丛书《数学要素》第 6 章讲解不等式时探讨过这一话题。

图 9 (a) 中，$w_1x_1 + w_2x_2 = 0$ 将平面划分为 $w_1x_1 + w_2x_2 > 0$ 和 $w_1x_1 + w_2x_2 < 0$ 两个区域。

图 9 (b) 中，$w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 = 0$ 将空间划分为 $w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 > 0$ 和 $w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 < 0$ 两个区域。

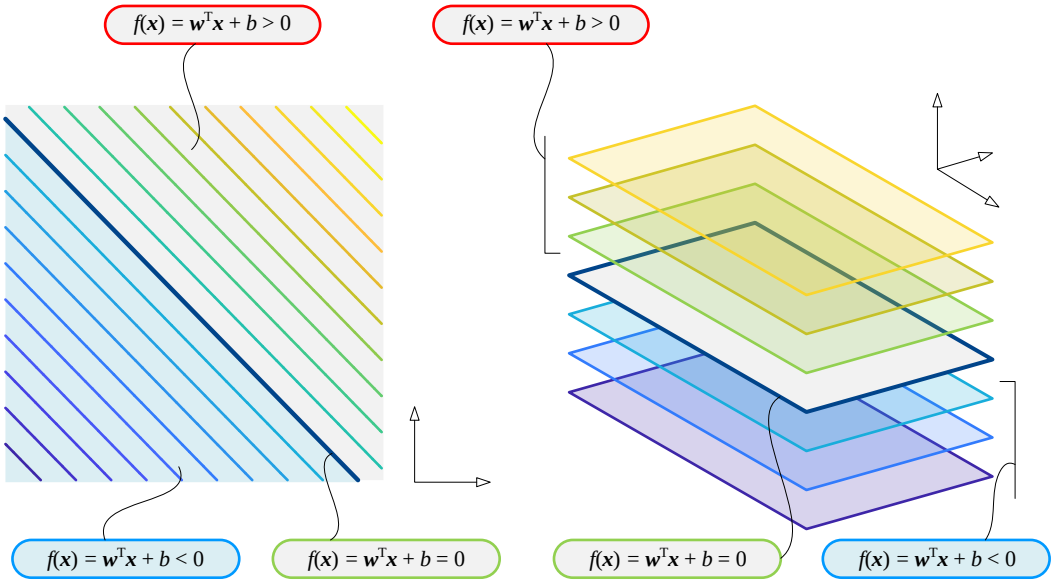


图 9. 超平面分割空间

定义多元一次函数：

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b \tag{21}$$

超平面“上方”的数据点满足：

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b > 0 \tag{22}$$

展开 (22) 得到：

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_D x_D + b > 0 \tag{23}$$

超平面“下方”的数据点满足：

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b < 0 \tag{24}$$

展开 (24) 得到：

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_D x_D + b < 0 \tag{25}$$

⚠ 注意，这里所说的“上方”和“下方”仅仅是方便大家理解。更准确地说，以 (15) 中 $f(\boldsymbol{x}) = 0$ 为基准，“上方”对应 $f(\boldsymbol{x}) > 0$，“下方”对应 $f(\boldsymbol{x}) < 0$。

在机器学习中，类似图 9 中起到划分空间作用的超平面，常常被称作**决策平面** (decision surface)、**决策边界** (decision boundary)。实际应用时，决策平面、决策边界可以是线性，也可以是非线性。

19.4 平面与梯度向量

本节将超平面和函数联系在一起，并用梯度向量来进一步分析超平面。

构造多元一次函数：

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b \tag{26}$$

$f(\boldsymbol{x}) = 0$ 对应的便是 (15) 所示超平面解析式。$f(\boldsymbol{x}) = c$ 时，相当于 (15) 所示超平面平行移动。

$f(\boldsymbol{x})$ 函数的梯度向量为：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_D} \end{bmatrix} = \boldsymbol{w} \tag{27}$$

相信大家已经发现 $f(\boldsymbol{x})$ 函数的梯度向量 $\boldsymbol{w}$ 便是 (15) 给出超平面的法向量。

构造新函数

令 $y = f(\boldsymbol{x})$，构造 $D + 1$ 元函数 $F(\boldsymbol{x}, y)$：

$$F\left(\boldsymbol{x}, y\right) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b - y \tag{28}$$

$F(\boldsymbol{x}, y) = 0$ 相当于降维，得到 (26)。

$F(\boldsymbol{x}, y)$ 函数的梯度向量为：

$$\nabla F\left(\boldsymbol{x}, y\right) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x_1} \\ \frac{\partial F}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial F}{\partial x_D} \\ \frac{\partial F}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_D \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{w} \\ -1 \end{bmatrix}_{(D+1)\times 1} \tag{29}$$

容易发现，(29) 和 (27) 梯度向量之间存在如下投影关系：

$$\nabla f\left(\boldsymbol{x}\right) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{I}_{D\times D} & \boldsymbol{0}_{D\times 1} \end{bmatrix}_{D\times(D+1)} \nabla F\left(\boldsymbol{x}, y\right) \tag{30}$$

展开上式得到：

$$\nabla f\left(\boldsymbol{x}\right) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{w} \\ -1 \end{bmatrix} = \boldsymbol{w}_{D\times 1} \tag{31}$$

上式相当于从 $D + 1$ 维空间降维到 D 维空间。图 10 所示为三维空间平面法向量 $\boldsymbol{n} = \nabla F\left(\boldsymbol{x}, y\right)$ 和梯度向量 $\nabla f\left(\boldsymbol{x}\right)$ 之间关系。

上述投影关系对于理解很多机器学习算法至关重要，下面我用几个三维平面展开讲解上述关系。

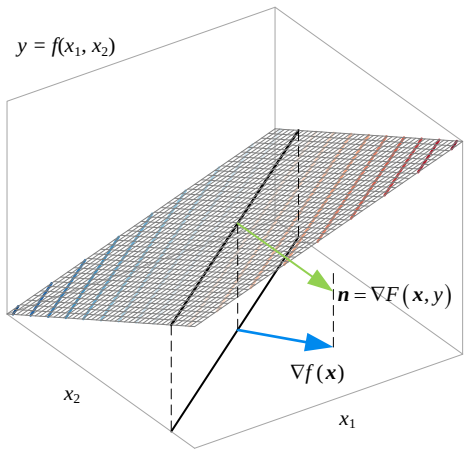


图 10. 平面法向量和梯度向量的关系

第一个例子

图 11 (a) 展示的平面垂直于 x_1y 平面，具体解析式如下：

$$f\left(x_1, x_2\right) = x_1 \tag{32}$$

二元函数 $f(x_1, x_2)$ 梯度向量如下：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{33}$$

如图 11 (b) 所示，发现梯度向量平行于 x_1 轴，方向为 x_1 正方向，向量方向和大小不随位置变化。沿着梯度方向运动，$f(x_1, x_2)$ 不断增大。$f(x_1, x_2)$ 等高线相互平行，梯度向量和函数等高线垂直。

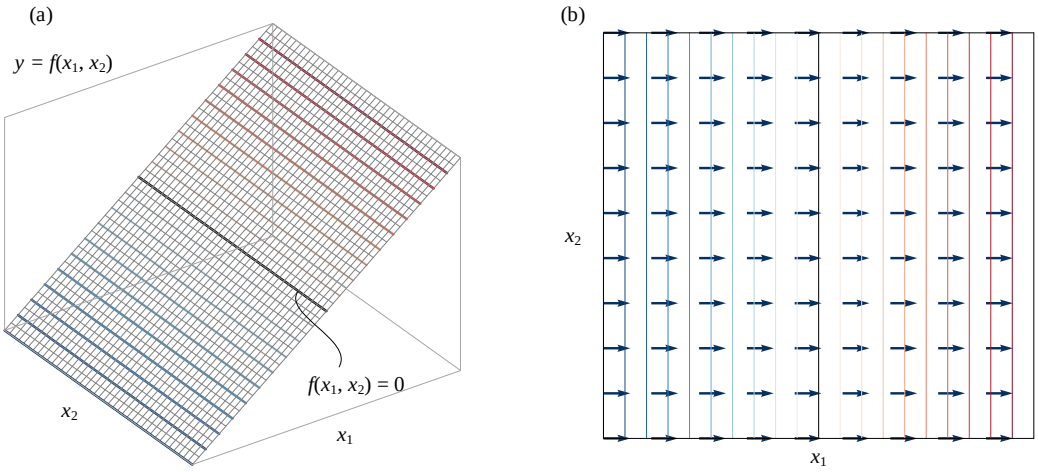


图 11. 垂直于 x_1y 平面，梯度向量朝向 x_1 正方向

构造三元函数 $F(x_1, x_2, y)$：

$$F\left(x_1, x_2, y\right) = x_1 - y \tag{34}$$

$F(x_1, x_2, y)$ 梯度向量：

$$\nabla F\left(\boldsymbol{x}, y\right) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial F}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial F}{\partial x_2} \\ \dfrac{\partial F}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} \tag{35}$$

$\nabla F(\boldsymbol{x}, y)$ 是图 11 (a) 三维平面的法向量。$\nabla F(\boldsymbol{x}, y)$ 向 x_1x_2 平面投影得到 $\nabla f(\boldsymbol{x})$，即：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \nabla F(\boldsymbol{x}, y) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{36}$$

图 11 (b) 等高线则对应一系列垂直于横轴的直线，它们可以写成：

$$x_1 + b = 0 \tag{37}$$

第二个例子

再举个例子，图 12 (a) 对应的二元函数 $f(x_1, x_2)$ 解析式为：

$$f(x_1, x_2) = -x_1 \tag{38}$$

$f(x_1, x_2)$ 梯度向量如下：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{39}$$

图 12 (b) 告诉我们，$f(x_1, x_2)$ 梯度向量同样平行于 x_1 轴，方向为 x_1 负方向，向量方向和大小也不随位置变化。

类似 (34)，请大家自行构造三元函数 $F(x_1, x_2, y)$，并计算它的梯度向量 $\nabla F(\boldsymbol{x}, y)$。并且分析 $\nabla F(\boldsymbol{x}, y)$ 和 (39) 的关系。

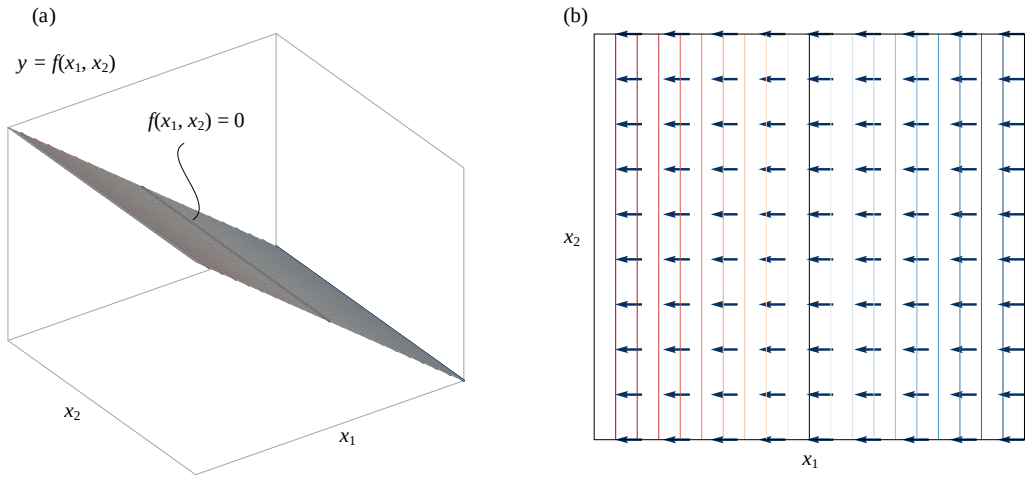


图 12. 垂直于 x_1y 平面，梯度向量朝向 x_1 负方向

第三个例子

图 13 展示平面解析式 $f(x_1, x_2)$ 如下：

$$f\left(x_1, x_2\right) = x_2 \tag{40}$$

$f(x_1, x_2)$ 梯度向量如下：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{41}$$

如图 13 (b) 所示，$f(x_1, x_2)$ 梯度向量平行于 x_2 轴，方向朝向 x_2 正方向。

也请大家构造其三元函数 $F(x_1, x_2, y)$，同时计算它的梯度向量 $\nabla F(\boldsymbol{x}, y)$。

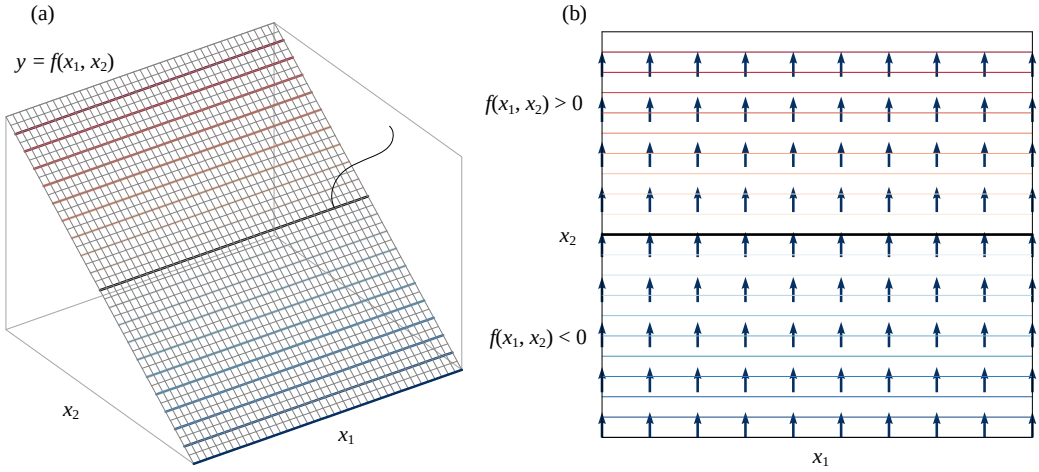


图 13. 垂直于 x_2y 平面，梯度向量为 x_2 正方向

第四个例子

最后一个例子，图 14 (a) 平面解析式如下：

$$f\left(x_1, x_2\right) = x_1 + x_2 \tag{42}$$

$f(x_1, x_2)$ 梯度也是一个固定向量，具体如下：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{43}$$

如图 14 所示，梯度向量和 x_1 轴正方向夹角为 45°，指向右上方。沿着此梯度方向运动，$f(x_1, x_2)$ 不断增大。请大家按照上述思路分析图 14 平面。

本节回答了本系列丛书《数学要素》第 13 章有关梯度向量的问题。

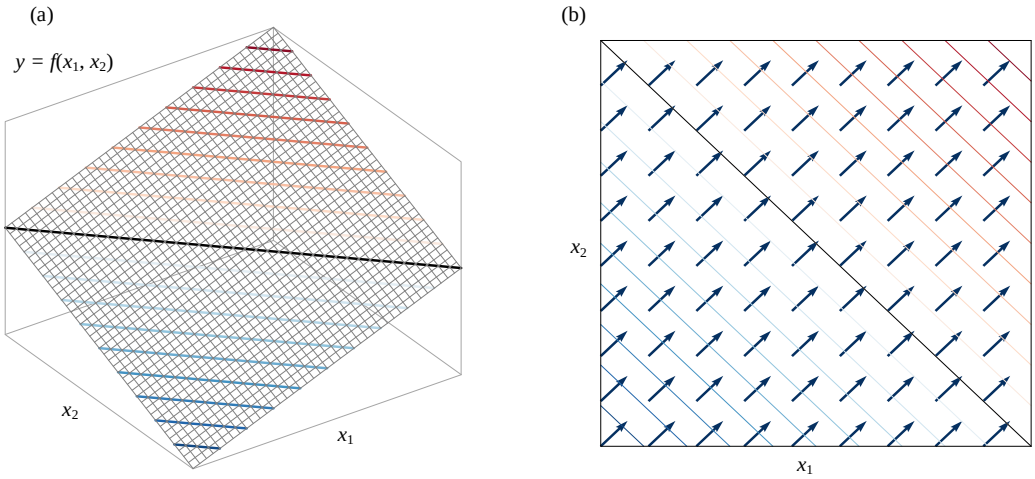


图 14. $f(x_1, x_2) = x_1 + x_2$ 平面和梯度

请读者自行修改 Bk4_Ch19_01.py，并绘制图 11 ~ 图 14 几幅图像。

19.5 中垂线：用向量求解析式

两点构成一条线段，**中垂线** (perpendicular bisector) 通过线段中点，且垂直该线段。本节介绍如何利用向量求解中垂线解析式。

本系列丛书《数学要素》第 7 章介绍过中垂线，请大家回顾。

如图 15 所示，$\boldsymbol{x}$ 代表中垂线上任意一点，中垂线通过 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$ 中点 $(\boldsymbol{\mu}_2 + \boldsymbol{\mu}_1)/2$。

$\boldsymbol{a}$ 为 $\boldsymbol{x}$ 和中点 $(\boldsymbol{\mu}_2 + \boldsymbol{\mu}_1)/2$ 构成的向量：

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{x} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_2 + \boldsymbol{\mu}_1) \tag{44}$$

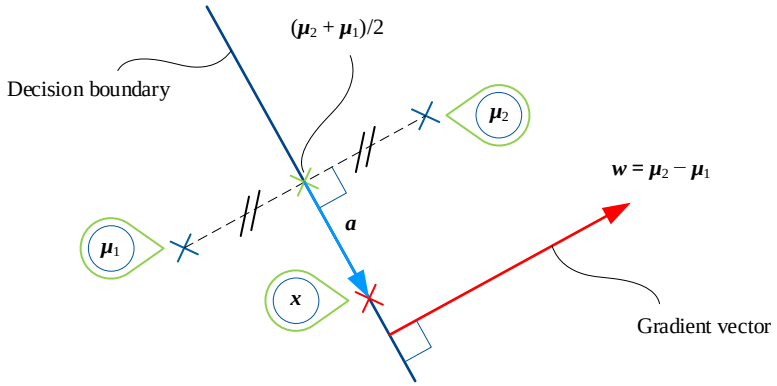


图 15. $\boldsymbol{\mu}_1 \neq \boldsymbol{\mu}_2$时，中垂线位置

$(\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1)$ 为中垂线法向量，它垂直 $\boldsymbol{a}$，所以下式成立：

$$(\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1) \cdot \boldsymbol{a} = (\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{a} = 0 \tag{45}$$

将 (44) 代入 (45)，得到：

$$(\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1)^{\mathrm{T}} \left[\boldsymbol{x} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_2 + \boldsymbol{\mu}_1) \right] = 0 \tag{46}$$

展开得到中垂线解析式：

$$\underbrace{(\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1)^{\mathrm{T}}}_{\text{Norm vector}} \boldsymbol{x} \underbrace{- \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1)^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{\mu}_2 + \boldsymbol{\mu}_1)}_{\text{Constant}} = 0 \tag{47}$$

注意，(47) 中 $(\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1)^{\mathrm{T}}$ 不能消去。这就是本书第 5 章介绍的矩阵乘法不满足消去率，即 $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{AC}$ 或 $\boldsymbol{BA} = \boldsymbol{CA}$，即便 $\boldsymbol{A}$ 不是零矩阵 $\boldsymbol{O}$，也不能得到 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{C}$。$\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{AC}$ 能得到 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B} - \boldsymbol{C}) = \boldsymbol{O}$；而 $\boldsymbol{BA} = \boldsymbol{CA}$ 能得到 $(\boldsymbol{B} - \boldsymbol{C})\boldsymbol{A} = \boldsymbol{O}$。对于 $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{AC}$，能否进一步消去 $\boldsymbol{A}$，要看 $\boldsymbol{A}$ 是否可逆。

举个例子

平面上一条直线为 (1, 2) 和 (3, 4) 两点的中垂线，容易知道这条直线的法向量为：

$$\boldsymbol{w} = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} \tag{48}$$

中垂线通过 (1, 2) 和 (3, 4) 两点的中点 (2, 3)。这样有了法向量和直线上一点，就可以构造如下等式：

$$\begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} x_1 - 2 \\ x_2 - 3 \end{bmatrix} = 0 \tag{49}$$

整理得到中垂线的解析式：

$$x_1 + x_2 - 5 = 0 \tag{50}$$

白话说，机器学习中的聚类分析 (cluster analysis) 就是“物以类聚，人以群分”，根据样本的特征，将其分成若干类。K 均值聚类 (K-means clustering) 是最基本的聚类算法之一。

K 均值聚类的每一簇样本数据用簇质心 (cluster centroid) 来描述。二聚类问题就是把样本数据分成两类。假设两类样本的簇质心分别为 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$。以欧氏距离为距离度量，距离质心 $\boldsymbol{\mu}_1$ 更近的点，被划分为 C_1 簇；而距离质心 $\boldsymbol{\mu}_2$ 更近的点，被划分为 C_2 簇。

将鸢尾花数据的标签去掉，用其第一二特征，即花萼长度、花萼宽度，作为依据，用 K 均值聚类把样本数据分为三类。图 16 中红色 × 代表簇质心，红色线就是决策边界。大家可能已经发现，每一段决策边界都是两个簇质心连线的中垂线。

本系列《机器学习》一册将展开讲解 K 均值聚类。

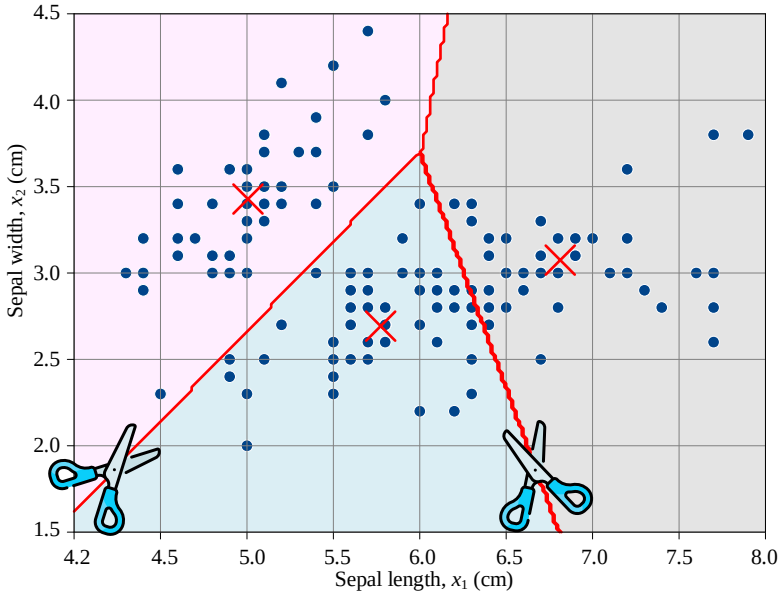


图 16. K 均值算法聚类鸢尾花数据

19.6 用向量计算距离

本节要介绍两个重要距离——点面距离，平行面距离。这两个距离实际上是本书第 9 章点线距离的推广。不同的是，第 9 章的直线、平面都过原点，本节的直线、平面、超平面未必过原点。本节内容对于理解很多机器学习算法特别重要，请大家务必认真对待。建议大家跟着本节思路一起推导公式。

点面距离

图 17 所示，直线、平面或超平面上任一点为 $\boldsymbol{x}$，满足下式：

$$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b=0 \tag{51}$$

下面讲解如何用线性代数工具计算图 17 中超平面外一点 $\boldsymbol{q}$ 到 (51) 距离。

整理 (51) 得到：

$$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=-b \tag{52}$$

直线、平面或超平面上取任意一点 $\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{q}$ 和 $\boldsymbol{x}$ 构造的向量为 $\boldsymbol{a}$：

$$\boldsymbol{a}=\boldsymbol{q}-\boldsymbol{x} \tag{53}$$

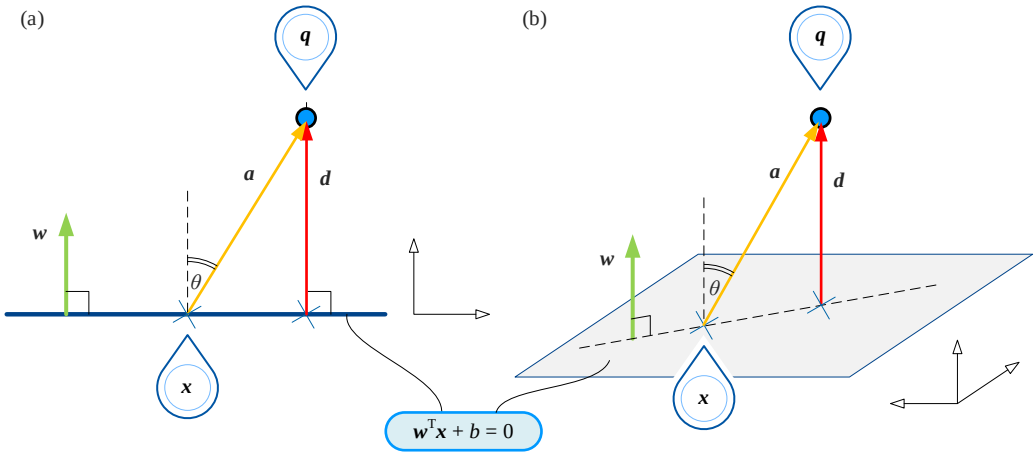


图 17. 直线外一点到直线距离，和平面外一点到平面距离

向量 $\boldsymbol{a}$ 向梯度向量 $\boldsymbol{w}$ 方向向量投影，可以得到向量 $\boldsymbol{d}$：

$$\boldsymbol{d}=\|\boldsymbol{a}\|\cos\theta\frac{\boldsymbol{w}}{\|\boldsymbol{w}\|}=\|\boldsymbol{a}\|\frac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}}{\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{w}\|}\frac{\boldsymbol{w}}{\|\boldsymbol{w}\|}=\frac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}}{\|\boldsymbol{w}\|^2}\boldsymbol{w} \tag{54}$$

向量 $\boldsymbol{d}$ 模便是超平面外一点 $\boldsymbol{q}$ 到超平面的距离 d：

$$d=\|\boldsymbol{d}\|=\frac{\|\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}\boldsymbol{w}\|}{\|\boldsymbol{w}\|^2}=\frac{|\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}|\|\boldsymbol{w}\|}{\|\boldsymbol{w}\|^2}=\frac{|\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}|}{\|\boldsymbol{w}\|}=\frac{|\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{a}|}{\|\boldsymbol{w}\|} \tag{55}$$

abs() norm()

考虑到 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}$ 结果为标量，因此 (55) 分子仅用绝对值。

将 (53) 代入 (55)，整理得到：

$$d=\frac{|\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{x})|}{\|\boldsymbol{w}\|}=\frac{|\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}-\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}|}{\|\boldsymbol{w}\|}=\frac{|\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{q}-\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x}|}{\|\boldsymbol{w}\|} \tag{56}$$

将 (52) 代入 (56) 得到：

$$d = \frac{\left|\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{x}\right)\right|}{\|\boldsymbol{w}\|} = \frac{\left|\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}+b\right|}{\|\boldsymbol{w}\|} = \frac{\left|\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{q}+b\right|}{\|\boldsymbol{w}\|} \tag{57}$$

本系列丛书《数学要素》第 7 章介绍过，距离可以有“正负”。将 (57) 分子绝对值符号去掉得到含有正负的距离为：

$$d = \frac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}+b}{\|\boldsymbol{w}\|} = \frac{\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{q}+b}{\|\boldsymbol{w}\|} \tag{58}$$

配合前文介绍的内容，$d > 0$，$\boldsymbol{q}$ 在超平面 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b=0$ “上方”；$d < 0$，$\boldsymbol{q}$ 在超平面 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b=0$ “下方”；$d = 0$，$\boldsymbol{q}$ 在超平面 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b=0$ 内。

正交投影点坐标

下面求解点 $\boldsymbol{q}$ 在超平面上的正交投影点 $\boldsymbol{x}_q$ 的坐标。

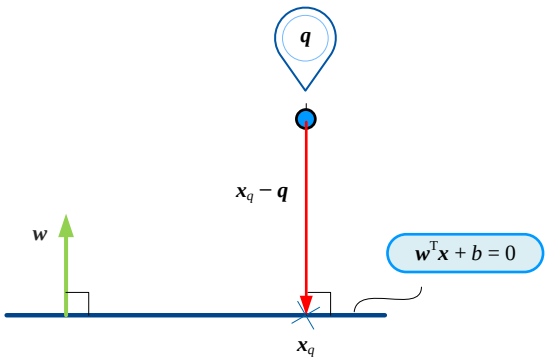


图 18. 直线外一点到直线的正交投影点

如图 18 所示，$\boldsymbol{x}_q$ 在超平面上，因此下式成立：

$$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_q + b = 0 \tag{59}$$

此外，$\boldsymbol{w}$ 平行于 $\boldsymbol{x}_q - \boldsymbol{q}$ 由此可以构造第二个等式：

$$\boldsymbol{x}_q - \boldsymbol{q} = k\boldsymbol{w} \tag{60}$$

k 为任意非零实数。整理上式，$\boldsymbol{x}_q$ 为：

$$\boldsymbol{x}_q = k\boldsymbol{w} + \boldsymbol{q} \tag{61}$$

将 (61) 代入 (59)，得到：

$$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\left(k\boldsymbol{w}+\boldsymbol{q}\right)+b = 0 \tag{62}$$

整理上式得到 k

$$k = -\frac{\left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q} + b\right)}{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}} \tag{63}$$

将上式代入 (61)，得到正交投影点为 $\boldsymbol{x}_q$：

$$\boldsymbol{x}_q = \boldsymbol{q} - \frac{\left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q} + b\right)}{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}}\boldsymbol{w} \tag{64}$$

注意，上式分母为 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}$ 标量，不能消去其中的 $\boldsymbol{w}$。

向量在过原点平面内投影

同样利用上述投影思路，可以计算如图 19 所示的向量 $\boldsymbol{q}$ 在平面 H ($\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = 0$) 的投影：

$$\mathrm{proj}_H\left(\boldsymbol{q}\right) = \boldsymbol{q} - \mathrm{proj}_{\boldsymbol{w}}\left(\boldsymbol{q}\right) = \boldsymbol{q} - \frac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}}{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}}\boldsymbol{w} \tag{65}$$

比较 (64) 和 (65)，可以发现 (65) 就是 (64) 中 $b = 0$ 的特殊情况。$\mathrm{proj}_H\left(\boldsymbol{q}\right)$ 和 $\mathrm{proj}_{\boldsymbol{w}}\left(\boldsymbol{q}\right)$ 正交。这也不难理解，平面 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = 0$ 通过原点 $\boldsymbol{0}$，即 $b = 0$。从向量空间角度，span($\boldsymbol{w}$) 是一维空间，span($\boldsymbol{w}$) 和 H 互为正交补。

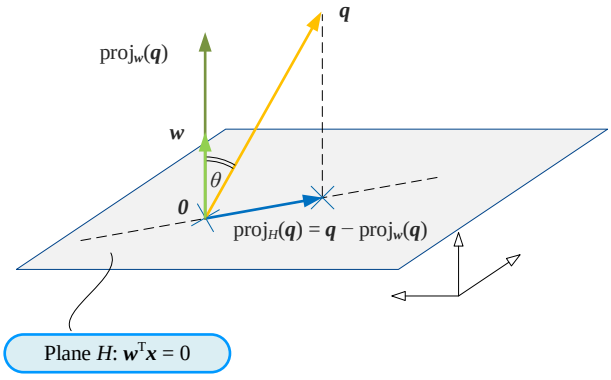


图 19. 向量 $\boldsymbol{q}$ 在平面 H 的投影

平行面距离

给定两个相互平行超平面的解析式分别如下：

$$\begin{cases} \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b_1 = 0 \\ \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b_2 = 0 \end{cases} \tag{66}$$

如图 20 所示，A 和 B 分别位于这两个超平面上，A 点坐标为 $\boldsymbol{x}_A$，B 点坐标为 $\boldsymbol{x}_B$。构造如下等式：

$$\begin{cases} \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_A + b_1 = 0 \\ \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_B + b_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_A = -b_1 \\ \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_B = -b_2 \end{cases} \tag{67}$$

构造向量 $\boldsymbol{a}$ 起点为 B，终点为 A：

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{x}_A - \boldsymbol{x}_B \tag{68}$$

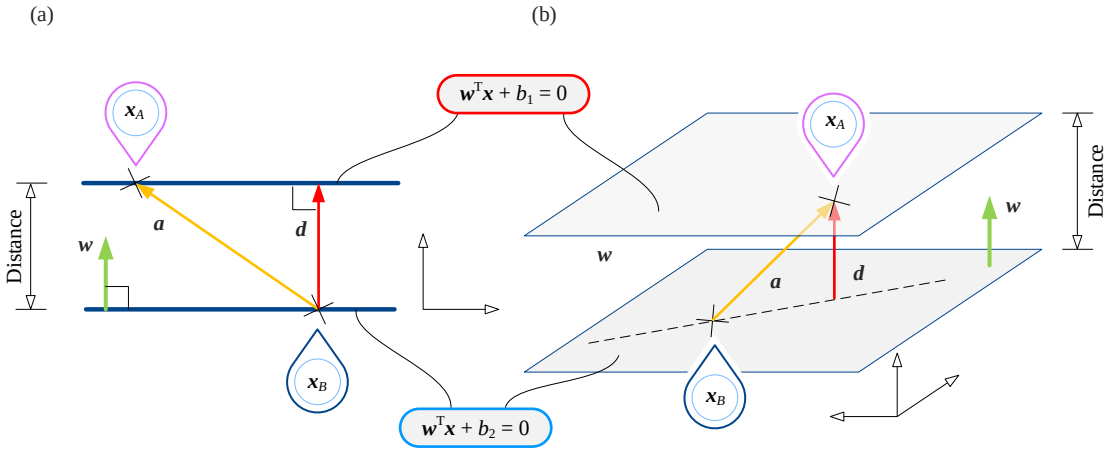
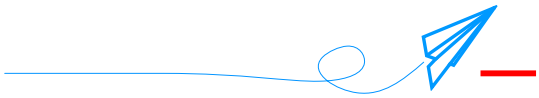


图 20. 利用向量投影计算间隔宽度

根据 (55)，向量 $\boldsymbol{a}$ 在向量 $\boldsymbol{w}$ 上的投影就是我们要求的两个平行面之间距离：

$$\frac{\left|\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}\right|}{\|\boldsymbol{w}\|} = \frac{\left|\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{a}\right|}{\|\boldsymbol{w}\|} = \frac{\left|\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}_A - \boldsymbol{x}_B\right)\right|}{\|\boldsymbol{w}\|} = \frac{\left|-b_1 - \left(-b_2\right)\right|}{\|\boldsymbol{w}\|} = \frac{\left|b_2 - b_1\right|}{\|\boldsymbol{w}\|} \tag{69}$$

如果去掉 (69) 分子中的绝对值，我们可以根据距离的正负，判断两个平面的“上下”关系。



相比本书之前内容，本章内容很特殊。本章之前在讲解线性代数工具时，我们利用几何视角观察数学工具背后的思想。而本章正好相反，本章讲解的是几何知识，采用的是线性代数工具。

有向量的地方，就有几何！

本章内容告诉我们，这句话反过来也正确。有几何的地方，就有向量！

本书讲解的几何知识对于很多机器学习、数据科学算法非常重要。本系列丛书在讲到具体算法时，会提醒大家其中用到了本章和下两章介绍的对应的几何知识。

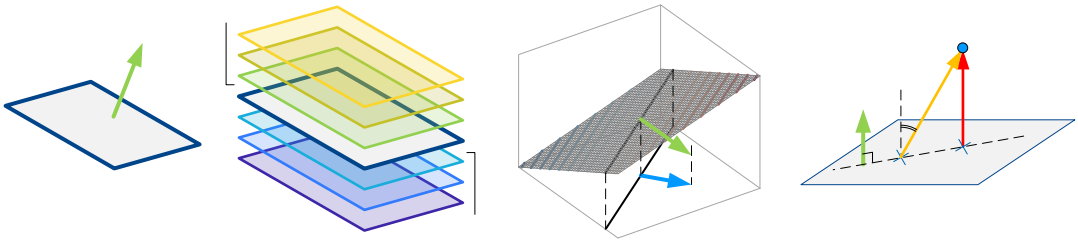


图 21. 总结本章重要内容的四幅图

20 Revisit Conic Sections
再谈圆锥曲线

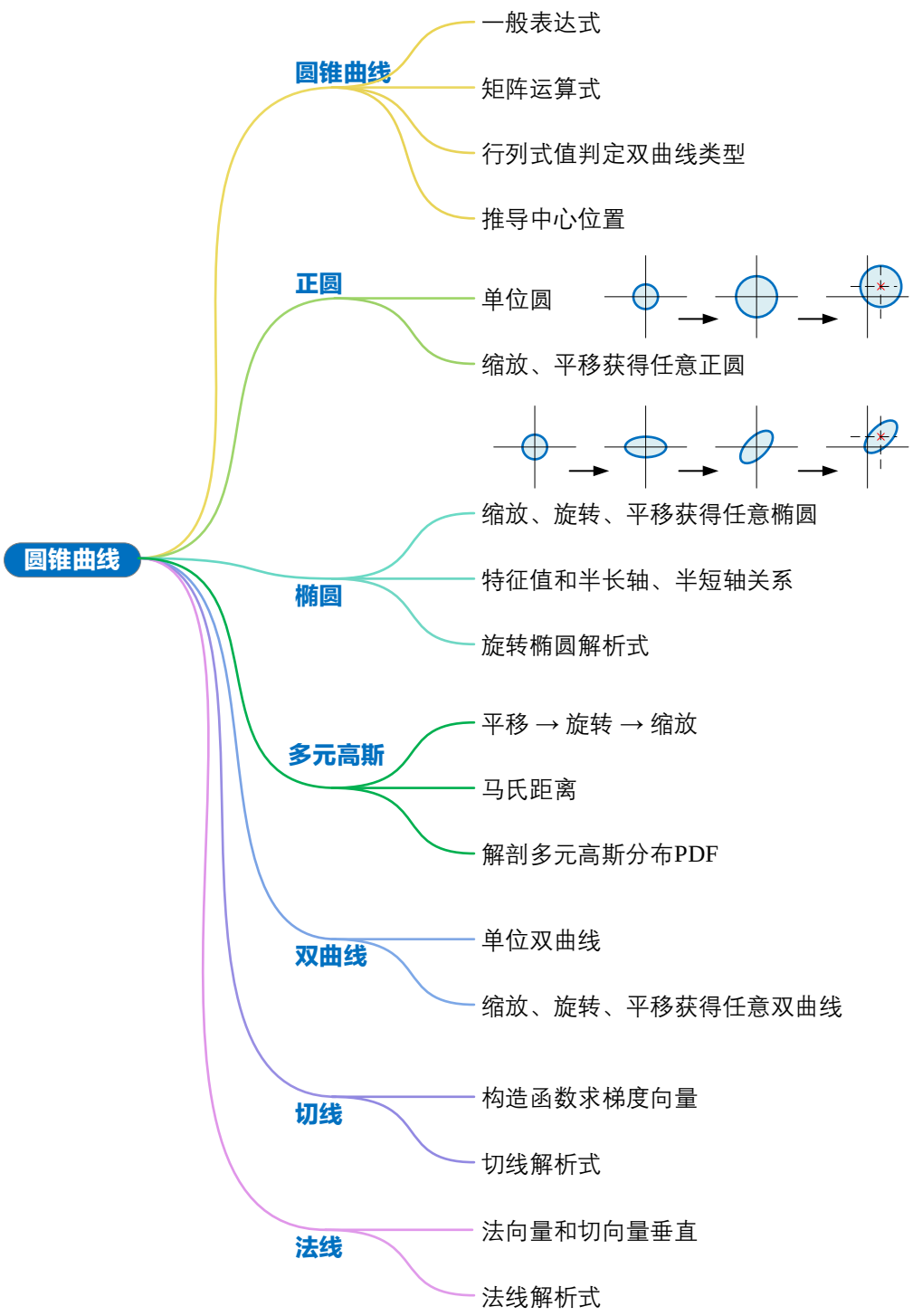
从矩阵运算和几何变换视角

滴水穿石，靠的不是力量，而是持之以恒。

Dripping water hollows out stone, not through force but through persistence.

—— 奥维德 (Ovid) | 古罗马诗人 | 43 BC ~ 17/18 AD

- `matplotlib.pyplot.contour()` 绘制等高线图
- `numpy.cos()` 计算余弦值
- `numpy.linalg.eig()` 特征值分解
- `numpy.linalg.inv()` 矩阵求逆
- `numpy.sin()` 计算正弦值
- `numpy.tan()` 计算正切值



20.1 无处不在的圆锥曲线

本套丛书每一册几乎都离不开圆锥曲线这个话题。

《数学要素》第 8、9 章详细介绍过圆锥曲线相关性质，《概率统计》一册会讨论圆锥曲线和高斯分布千丝万缕的联系。同时我们也看到条件概率、回归分析和主成分分析中，圆锥曲线扮演重要角色。《机器学习》一册介绍的很多算法中，决策边界就是圆锥曲线。

利用本书前文讲解的线性代数工具，本章将从矩阵运算和几何变换角度探讨圆锥曲线。这个视角将帮助大家更加深刻理解圆锥曲线在概率统计、数据学科和机器学习的重要作用。

一般表达式

圆锥曲线一般表达式如下：

$$Ax_1^2 + Bx_1x_2 + Cx_2^2 + Dx_1 + Ex_2 + F = 0 \tag{1}$$

把 (1) 写成矩阵运算式：

$$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} 2A & B \\ B & 2C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} D \\ E \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + F = 0 \tag{2}$$

(2) 进一步写成：

$$\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + F = 0 \tag{3}$$

其中，

$$\boldsymbol{Q} = \begin{bmatrix} 2A & B \\ B & 2C \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{w} = \begin{bmatrix} D \\ E \end{bmatrix} \tag{4}$$

矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的行列式值为：

$$\det \boldsymbol{Q} = \det \begin{bmatrix} 2A & B \\ B & 2C \end{bmatrix} = 4AC - B^2 \tag{5}$$

矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的行列式值决定圆锥曲线的形状：

- 当 $4AC - B^2 > 0$，上式为**椭圆** (ellipse)；特别地，当 $A = C$ 且 $B = 0$，解析式为**正圆** (circle)；
- $4AC - B^2 = 0$ 时，解析式为**抛物线** (parabola)；
- $4AC - B^2 < 0$ 时，解析式为**双曲线** (hyperbola)。

这实际上回答了本系列丛书《数学要素》中提出的一个问题——为什么用 $4AC - B^2$ 判断圆锥曲线形状。

中心

当 $4AC - B^2$ 不等于 0，圆锥曲线中椭圆、正圆和双曲线这三类曲线存在中心。依照 (2) 构造如下二元函数 $f(x_1, x_2)$：

$$f\left(x_1, x_2\right) = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} 2A & B \\ B & 2C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} D \\ E \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + F \tag{6}$$

下面介绍如何求解圆锥曲线中心。

$f(x_1, x_2)$ 对 $[x_1, x_2]^{\mathrm{T}}$ 一阶导数为 $[0, 0]^{\mathrm{T}}$ 时，也就是梯度向量为 $\boldsymbol{0}$ 时，(x_1, x_2) 为 $f(x_1, x_2)$ 驻点：

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{7}$$

这个驻点就是圆锥曲线的中心。推导圆锥曲线中心位置：

$$\begin{bmatrix} 2A & B \\ B & 2C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} D \\ E \end{bmatrix} = \boldsymbol{0} \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} 2A & B \\ B & 2C \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} D \\ E \end{bmatrix} \tag{8}$$

回忆 2 × 2 方阵的逆：

$$\begin{bmatrix} 2A & B \\ B & 2C \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{\underbrace{4AC - B^2}_{\text{Determinant}}} \begin{bmatrix} 2C & -B \\ -B & 2A \end{bmatrix} \tag{9}$$

将 (9) 代入 (8)，得到圆锥曲线中心 $\boldsymbol{c}$ 坐标：

$$\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{B^2 - 4AC} \begin{bmatrix} 2CD - BE \\ 2AE - BD \end{bmatrix} \tag{10}$$

大家通过上式也知道了，为什么对于椭圆、正圆和双曲线会要求 $4AC - B^2$ 不等于 0。

20.2 正圆：从单位圆到任意正圆

单位圆

平面上，圆心位于原点半径为 1 的正圆叫做**单位圆** (unit circle)，解析式可以写成如下形式：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} - 1 = 0 \tag{11}$$

其中 $\boldsymbol{x}$ 为，

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{12}$$

展开 (11) 得到：

$$\begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} - 1 = x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0 \tag{13}$$

当然，(11) 可以用 L^2 范数、向量内积等方式表达单位圆，比如：

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{x}\|_2 - 1 &= 0 \\ \|\boldsymbol{x}\|_2^2 - 1 &= 0 \\ \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x} - 1 &= 0 \\ \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle - 1 &= 0 \end{aligned} \tag{14}$$

其中，$\|\boldsymbol{x}\|_2 - 1 = 0$ 可以写成 $\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{0}\|_2 - 1 = 0$，代表 $\boldsymbol{x}$ 距离原点 $\boldsymbol{0}$ 的 L^2 范数 (欧几里得距离) 为 1。

缩放

圆心位于原点半径为 r 的正圆解析式为：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} - r^2 = 0 \tag{15}$$

上式相当于，

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} 1/r^2 & 0 \\ 0 & 1/r^2 \end{bmatrix} \boldsymbol{x} - 1 = 0 \tag{16}$$

将 (16) 写成：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1/r & 0 \\ 0 & 1/r \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{S}^{-1}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1/r & 0 \\ 0 & 1/r \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{S}^{-1}} \boldsymbol{x} - 1 = 0 \tag{17}$$

令矩阵 $\boldsymbol{S}$ 为：

$$\boldsymbol{S} = \begin{bmatrix} r & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix} \tag{18}$$

由于 $\boldsymbol{S}$ 为对角方阵，因此 (17) 可以进一步整理为：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{S}^{-1} \boldsymbol{S}^{-1} \boldsymbol{x} - 1 = \left(\boldsymbol{S}^{-1} \boldsymbol{x} \right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{S}^{-1} \boldsymbol{x} - 1 = 0 \tag{19}$$

从几何变换视角来观察，相信大家已经在 (19) 中看到 $\boldsymbol{S}$ 起到缩放作用。

缩放 + 平移

圆心位于 $\boldsymbol{c} = [c_1, c_2]^T$ 半径为 r 的正圆解析式为：

$$(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c})^T \begin{bmatrix} 1/r^2 & 0 \\ 0 & 1/r^2 \end{bmatrix} (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}) - 1 = 0 \tag{20}$$

(20) 也可以写成：

$$\begin{aligned} &(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c})^T (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}) - r^2 = 0 \\ &\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}\|_2 - r = 0 \\ &\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}\|_2^2 - r^2 = 0 \\ &(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c})\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}) - r^2 = 0 \\ &\langle (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}), (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}) \rangle - r^2 = 0 \end{aligned} \tag{21}$$

不同参考资料中圆锥曲线的表达各有不同。本节不厌其烦地罗列圆锥曲线的各种形式解析式目的只有一个，让大家知道这些表达的等价关系，从而对它们不再感到陌生、畏惧。

此外，本书前文一直强调，看到矩阵乘法结果为标量时，要考虑是否能将其写成范数，并从距离角度理解。

为了让大家看到我们熟悉的正圆解析式，进一步展开整理 (20) 得到：

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c})^T \begin{bmatrix} 1/r^2 & 0 \\ 0 & 1/r^2 \end{bmatrix} (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}) &= \left(\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \right)^T \begin{bmatrix} 1/r^2 & 0 \\ 0 & 1/r^2 \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \right) \\ &= \begin{bmatrix} x_1 - c_1 & x_2 - c_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/r^2 & 0 \\ 0 & 1/r^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - c_1 \\ x_2 - c_2 \end{bmatrix} \\ &= \frac{(x_1 - c_2)^2}{r^2} + \frac{(x_1 - c_2)^2}{r^2} = 1 \end{aligned} \tag{22}$$

从单位圆到一般正圆

在 (20) 中，大家应该看到了平移。

下面探讨圆心位于原点的单位圆如何一步步经过几何变换得到 (22) 中对应的圆心位于 $\boldsymbol{c} = [c_1, c_2]^T$ 半径为 r 的正圆。

平面内，单位圆解析式写成：

$$\boldsymbol{z}^T \boldsymbol{z} - 1 = 0 \tag{23}$$

$\boldsymbol{z}$ 通过先等比例缩放，再平移得到 $\boldsymbol{x}$：

$$\boldsymbol{x} = \underbrace{\begin{bmatrix} r & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix}}_{\text{Scale}} \boldsymbol{z} + \underbrace{\boldsymbol{c}}_{\text{Translate}} \tag{24}$$

整理上式，$\boldsymbol{z}$ 可以写作：

$$\boldsymbol{z} = \begin{bmatrix} r & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix}^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{c}) \tag{25}$$

将 (25) 代入 (23)，得到：

$$\left(\begin{bmatrix} r & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix}^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{c}) \right)^{\mathrm{T}} \left(\begin{bmatrix} r & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix}^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{c}) \right) - 1 = 0 \tag{26}$$

整理上式，

$$(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{c})^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} 1/r & 0 \\ 0 & 1/r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/r & 0 \\ 0 & 1/r \end{bmatrix} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{c}) - 1 = 0 \tag{27}$$

即，

$$(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{c})^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} 1/r^2 & 0 \\ 0 & 1/r^2 \end{bmatrix} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{c}) - 1 = 0 \tag{28}$$

可以发现 (28) 和 (20) 完全一致。也就是说，如图 1 所示，单位圆可以通过“缩放 + 平移”，得到圆心位于 $\boldsymbol{c}$ 半径为 r 的圆。

沿着这一思路，下一节我们讨论如何通过几何变换一步步将单位圆转换成任意旋转椭圆。

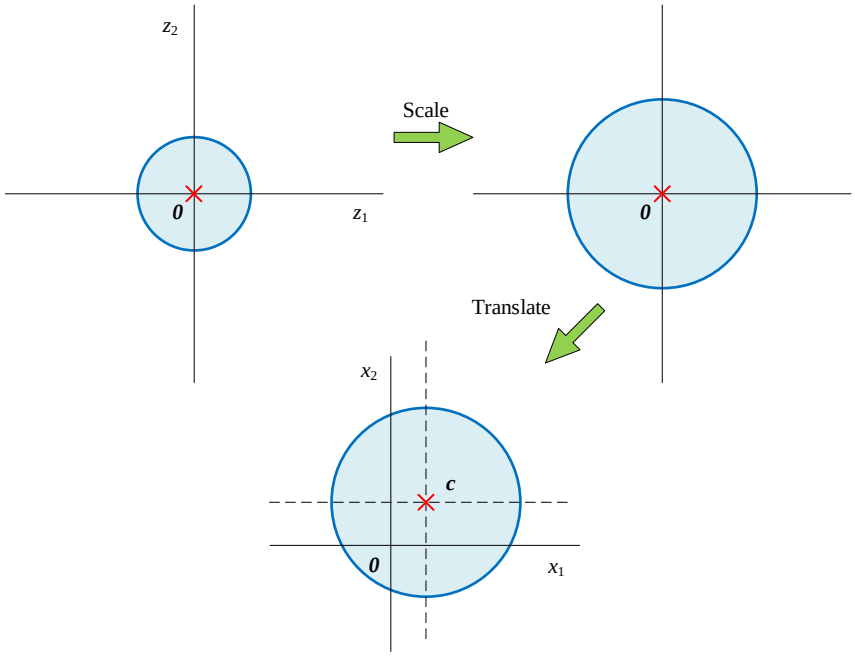


图 1. 单位圆变换得到圆心位于 $\boldsymbol{c}$ 半径为 r 的正圆

20.3 单位圆到旋转椭圆：缩放 → 旋转 → 平移

这一节介绍如何利用“缩放 → 旋转 → 平移”几何变换，将单位圆变成中心位于任何位置的旋转椭圆。

利用上一节 (23) 给出的单位圆解析式中 $\boldsymbol{z}$，对 $\boldsymbol{z}$ 先用 $\boldsymbol{S}$ 缩放，再通过 $\boldsymbol{R}$ 逆时针旋转 θ，最后平移 $\boldsymbol{c}$，得到 $\boldsymbol{x}$：

$$\underbrace{\boldsymbol{R}}_{\text{Rotate}}\underbrace{\boldsymbol{S}}_{\text{Scale}}\boldsymbol{z}+\underbrace{\boldsymbol{c}}_{\text{Translate}}=\boldsymbol{x} \tag{29}$$

其中，

$$\boldsymbol{R}=\underbrace{\begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}}_{\text{Rotate}},\quad \boldsymbol{S}=\underbrace{\begin{bmatrix}a & 0\\ 0 & b\end{bmatrix}}_{\text{Scale}},\quad \boldsymbol{c}=\underbrace{\begin{bmatrix}c_1\\ c_2\end{bmatrix}}_{\text{Translate}} \tag{30}$$

如果 $a > b > 0$，a、b 分别为椭圆半长轴、半短轴长度。

从向量空间角度来看，(29) 代表仿射变换；当 $\boldsymbol{c} = \boldsymbol{0}$ 时，不存在平移，(29) 代表线性变换。

将 (30) 代入 (29)，得到：

$$\underbrace{\begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}}_{\text{Rotate}}\underbrace{\begin{bmatrix}a & 0\\ 0 & b\end{bmatrix}}_{\text{Scale}}\begin{bmatrix}z_1\\ z_2\end{bmatrix}+\underbrace{\begin{bmatrix}c_1\\ c_2\end{bmatrix}}_{\text{Translate}}=\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix} \tag{31}$$

图 2 所示为从单位圆经过“缩放 → 旋转 → 平移”几何变换得到中心位于 $\boldsymbol{c}$ 的旋转椭圆过程。

对这些几何变换感到陌生的读者，请回顾本书第 8 章。

再次强调，单位圆默认圆心位于原点，半径为 1。此外，请大家注意从欧氏距离、等距线、L^2 范数等视角理解正圆。

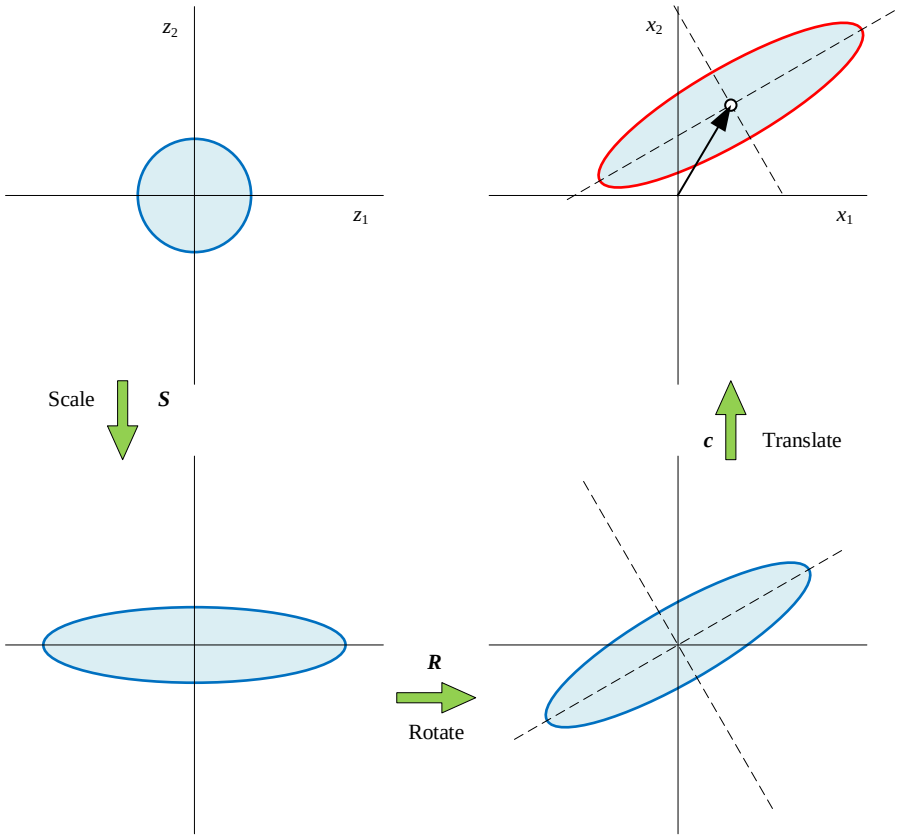


图 2. 从单位圆得到旋转椭圆

整理 (29) 得到 $\boldsymbol{z}$ 的解析式为：

$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{R}^{-1}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}\right) \tag{32}$$

$\boldsymbol{R}$ 为正交矩阵，所以：

$$\boldsymbol{R}^{-1} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}} \tag{33}$$

(32) 写成：

$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}\right) \tag{34}$$

反方向来看图 2，中心位于任何位置的旋转椭圆可以通过“平移 → 旋转 → 缩放”变成单位圆。

将 (34) 代入 (23) 正圆解析式，得到：

$$\left(\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}\right)\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}\right)\right)-1=0 \tag{35}$$

进一步整理，得到旋转椭圆解析式：

$$\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{S}^{-2}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}\right)-1=0 \tag{36}$$

令

$$\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{S}^{-2}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{R}\begin{bmatrix} a^{-2} & \\ & b^{-2} \end{bmatrix}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}} \tag{37}$$

特征值分解

对 $\boldsymbol{Q}$ 特征值分解，得到：

$$\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{R}\begin{bmatrix} \lambda_1 & \\ & \lambda_2 \end{bmatrix}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}} \tag{38}$$

比较 (37) 和 (38)，得出特征值矩阵和缩放矩阵关系：

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 & \\ & \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a^{-2} & \\ & b^{-2} \end{bmatrix} \tag{39}$$

即，

$$a = \frac{1}{\sqrt{\lambda_1}}, \quad b = \frac{1}{\sqrt{\lambda_2}} \tag{40}$$

其中，$\lambda_2 > \lambda_1 > 0$。

这样，我们便得到椭圆半长轴和半短轴长度和矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 特征值之间的关系。前文说过，如果 $a > b > 0$，椭圆的半长轴长度为 a，半短轴长度为 b。而 a/b 的比值为：

$$\frac{a}{b} = \frac{\sqrt{\lambda_2}}{\sqrt{\lambda_1}} \tag{41}$$

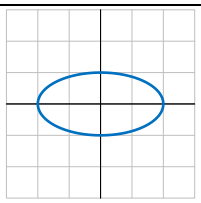
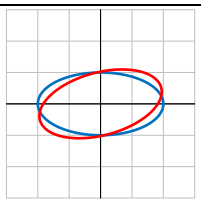
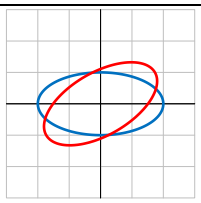
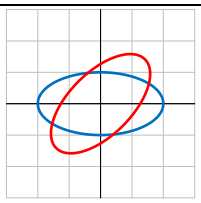
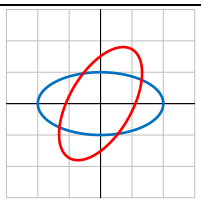
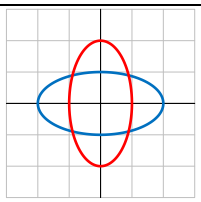
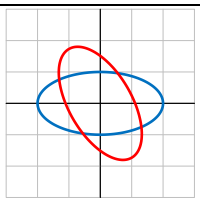
我们在本书第 14 章也讨论过如何用解特征值分解获得椭圆半长轴和半短轴。此外第 14 章还比较“缩放 + 旋转”和“缩放 + 剪切”这两种几何变换路线。

只考虑旋转

表 1 中给出一系列不同旋转角度椭圆解析式和对应 $\boldsymbol{Q}$ 的特征值分解。表 1 中不同椭圆半长轴和半短轴长度保持一致，唯一变化的就是旋转角度。大家如果对几个不同 $\boldsymbol{Q}$ 特征值分解，容易发现它们特征值完全相同，也就是椭圆的半长轴、半短轴长度一致。

表 1. 旋转椭圆解析式、$\boldsymbol{Q}$ 的特征值分解

旋转角度	椭圆解析式 (最多保留小数点后 4 位)	对 $\boldsymbol{Q}$ 特征值分解 (最多保留小数点后 4 位)	图像

$\theta = 0°$ (0)	$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} 0.25 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\boldsymbol{x} - 1 = 0$	$\begin{bmatrix} 0.25 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.25 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	
$\theta = 15°$ ($\pi/12$)	$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} 0.3002 & -0.1875 \\ -0.1875 & 0.9498 \end{bmatrix}\boldsymbol{x} - 1 = 0$	$\begin{bmatrix} 0.3002 & -0.1875 \\ -0.1875 & 0.9498 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.9659 & -0.2588 \\ 0.2588 & 0.9659 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.25 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.9659 & 0.2588 \\ -0.2588 & 0.9659 \end{bmatrix}$	
$\theta = 30°$ ($\pi/6$)	$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} 0.4375 & -0.3248 \\ -0.3248 & 0.8125 \end{bmatrix}\boldsymbol{x} - 1 = 0$	$\begin{bmatrix} 0.4375 & -0.3248 \\ -0.3248 & 0.8125 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.8660 & -0.5000 \\ 0.5000 & 0.8660 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.25 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.8660 & 0.5000 \\ -0.5000 & 0.8660 \end{bmatrix}$	
$\theta = 45°$ ($\pi/4$)	$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} 0.6250 & -0.3750 \\ -0.3750 & 0.6250 \end{bmatrix}\boldsymbol{x} - 1 = 0$	$\begin{bmatrix} 0.6250 & -0.3750 \\ -0.3750 & 0.6250 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7071 & -0.7071 \\ 0.7071 & 0.7071 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.25 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.7071 & 0.7071 \\ -0.7071 & 0.7071 \end{bmatrix}$	
$\theta = 60°$ ($\pi/3$)	$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} 0.8125 & -0.3248 \\ -0.3248 & 0.4375 \end{bmatrix}\boldsymbol{x} - 1 = 0$	$\begin{bmatrix} 0.8125 & -0.3248 \\ -0.3248 & 0.4375 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5000 & -0.8660 \\ 0.8660 & 0.5000 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.25 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.5000 & 0.8660 \\ -0.8660 & 0.5000 \end{bmatrix}$	
$\theta = 90°$ ($\pi/2$)	$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0.25 \end{bmatrix}\boldsymbol{x} - 1 = 0$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0.25 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.25 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$	
$\theta = 120°$ ($2\pi/3$)	$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} 0.8125 & 0.3248 \\ 0.3248 & 0.4375 \end{bmatrix}\boldsymbol{x} - 1 = 0$	$\begin{bmatrix} 0.8125 & 0.3248 \\ 0.3248 & 0.4375 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.5000 & -0.8660 \\ 0.8660 & -0.5000 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.25 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -0.5000 & 0.8660 \\ -0.8660 & -0.5000 \end{bmatrix}$	

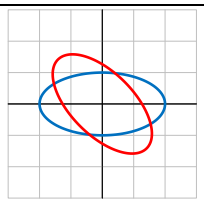
$\theta =$ 145° (3π/4)	$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} 0.4967 & 0.3524 \\ 0.3524 & 0.7533 \end{bmatrix}\boldsymbol{x}-1=0$	$\begin{bmatrix} 0.4967 & 0.3524 \\ 0.3524 & 0.7533 \end{bmatrix}$ $=\begin{bmatrix} -0.8192 & -0.5736 \\ 0.5736 & -0.8192 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.25 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -0.8192 & 0.5736 \\ -0.5736 & -0.8192 \end{bmatrix}$	

图 3 所示为单位圆经过几何变换获得中心位于 (2, 1) 的几个不同旋转角度椭圆的示例。

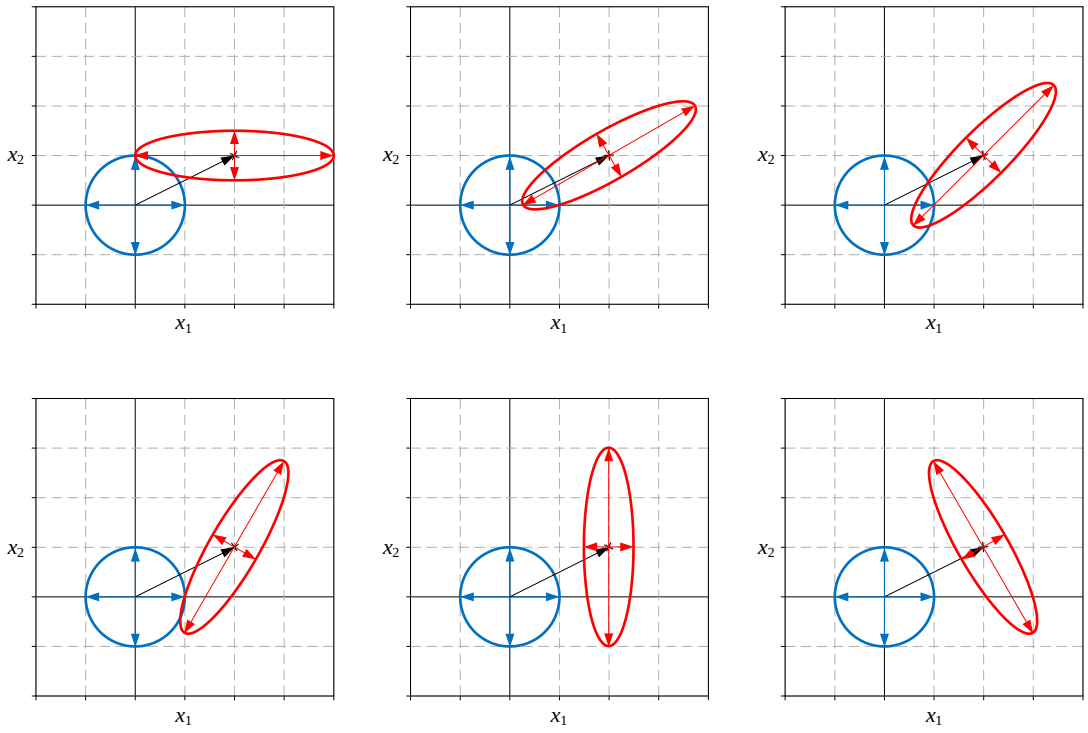


图 3. 通过单位圆获得几个不同的旋转椭圆

`Bk4_Ch20_01.py` 绘制图 3。

一般解析式

为了方便整理旋转椭圆解析式，省略 (34) 平移项 $\boldsymbol{c}$，将 (34) 展开得到：

$$
\begin{aligned}
\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} &= \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 1/a & 0 \\ 0 & 1/b \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \dfrac{\cos\theta}{a}x_1 + \dfrac{\sin\theta}{a}x_2 \\ -\dfrac{\sin\theta}{b}x_1 + \dfrac{\cos\theta}{b}x_2 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{42}
$$

将 (42) 代入 (23)，整理得到旋转椭圆解析式：

$$
\frac{\left[x_1\cos(\theta) + x_2\sin(\theta)\right]^2}{a^2} + \frac{\left[x_1\sin(\theta) - x_2\cos(\theta)\right]^2}{b^2} = 1 \tag{43}
$$

(43) 和《数学要素》第 8 章给出的旋转椭圆解析式完全一致。

对比 (36) 和 (43)，相信大家已经体会到用矩阵运算表达椭圆解析式极为简洁。(43) 还仅仅是在二维平面上中心位于原点的椭圆解析式，当中心不在原点，或者维度升高，(43) 这种解析式显然不能胜任描述复杂的椭圆或椭球。更重要的是，借助特征值分解等线性代数工具，(36) 让我们能够分析椭圆或者椭球的几何特点，比如中心位置、长短轴长度、旋转等等。

20.4 多元高斯分布：矩阵分解、几何变换、距离

本节介绍如何用上一节介绍的“平移 → 旋转 → 缩放”解剖多元高斯分布。

多元高斯分布

多元高斯分布的**概率密度函数** (Probability Density Function, PDF) 解析式如下：

$$
f_{\boldsymbol{\chi}}(\boldsymbol{x}) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}\overbrace{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})}^{\text{Ellipse}}\right)}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} \tag{44}
$$

注意，上式中希腊字母 $\boldsymbol{\chi}$ 代表 D 维随机变量构成的列向量，$\boldsymbol{\chi} = [X_1, X_2, \ldots, X_D]^{\mathrm{T}}$。

相信大家已经在它的分子中看到了旋转椭圆解析式 $(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})$。这就是为什么很多机器学习算法能够和以椭圆为代表的圆锥曲线扯上关系，因为这些算法中都含有多元高斯分布成分。

本系列丛书会用椭圆等高线描述 (44)。(44) 中 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的不同形态还会影响到椭圆的形状，如图 4 所示。实际上多元高斯分布 PDF 等高线是多维空间层层包裹的多维椭球面，为了方便展示，我们选择了椭圆这个可视化方案。

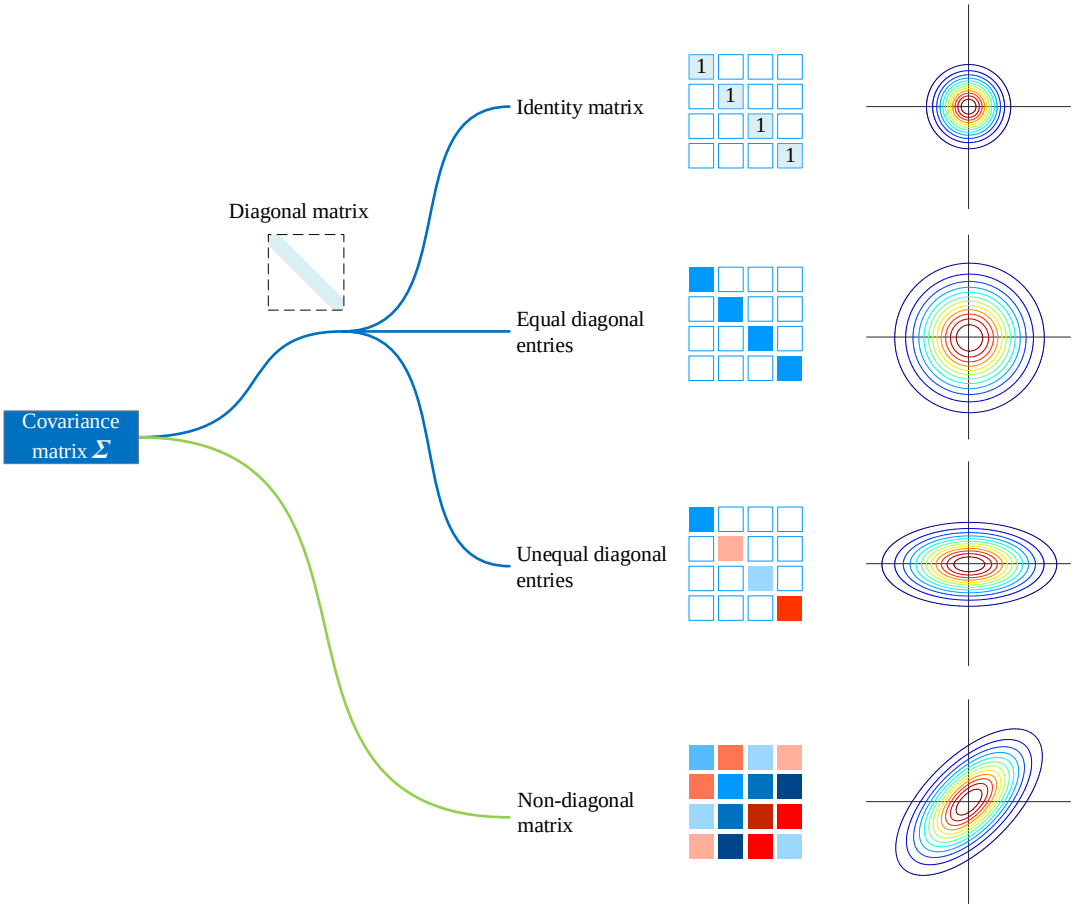


图 4. 协方差矩阵的形态影响高斯密度函数形状

特征值分解协方差矩阵

协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 为对称矩阵，对 $\boldsymbol{\Sigma}$ 特征值分解得到：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{45}$$

其中，$\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵。通过上式可以得到对协方差矩阵的逆 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 的特征值分解：

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \left(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{-1} = \left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\boldsymbol{V}^{-1} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{46}$$

进一步，将 (46) 代入 (44) 中的椭圆解析式，并整理得到：

$$\begin{aligned}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}\right) &= \left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}\right) \\ &= \left[\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}\right)\right]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}\right)\end{aligned} \tag{47}$$

也就是说，$\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}\right)$ 可以拆成 $\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}\right)$ 的“平方”。

平移 → 旋转 → 缩放

大家应该对图 5 这四幅子图并不陌生，我们在本书第 8 章用它们解释过常见几何变换。下面，我们再聊聊它们和多元高斯分布的联系。

几何视角来看，(47) 中，$\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}\right)$ 代表中心在 $\boldsymbol{\mu}$ 的旋转椭圆，通过“平移 → 旋转 → 缩放”转换成单位圆的过程。

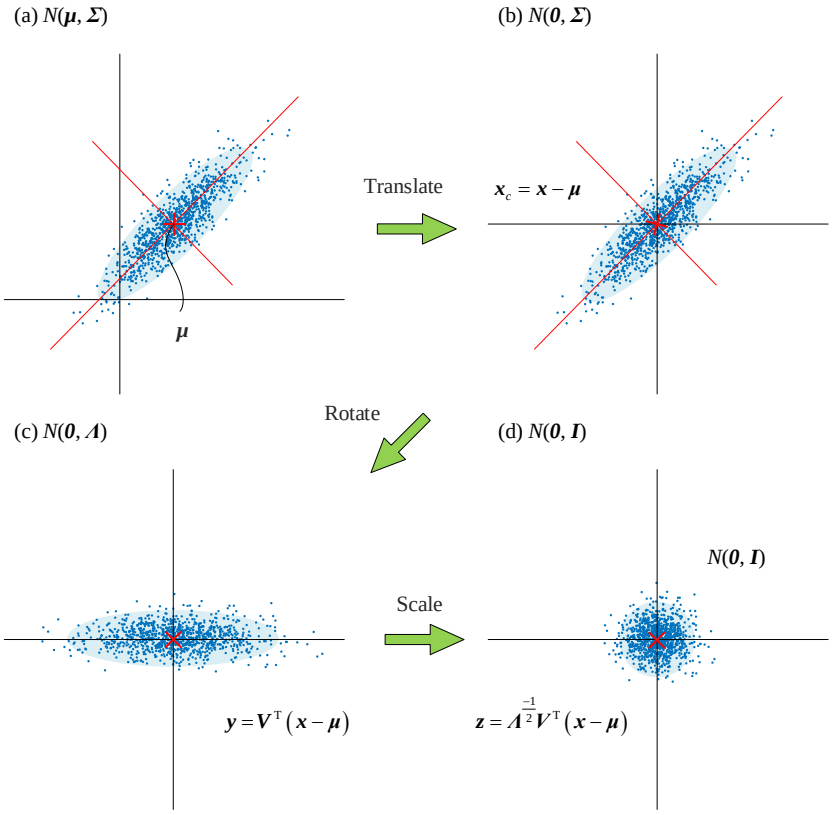


图 5. 平移 → 旋转 → 缩放

从统计视角来思考，图 5 (a) 中旋转椭圆代表多元高斯分布 $N(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$，随机数质心位于 $\boldsymbol{\mu}$，椭圆形状描述了协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$。图 5 (a) 中散点是服从 $N(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 的随机数。

图 5 (a) 中散点经过平移得到 $\boldsymbol{x}_c = \boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}$，这是一个去均值 (中心化过程)。图 5 (b) 中旋转椭圆代表多元高斯分布 $N(\boldsymbol{0},\boldsymbol{\Sigma})$。随机数质心平移到原点。

图 5 (b) 中椭圆旋转之后得到图 5 (c) 中正椭圆，对应：

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_c=\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}\right) \tag{48}$$

正椭圆的半长轴、半短轴长度蕴含在特征值矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 中。图 5 (c) 中随机数服从 $N(\boldsymbol{0},\boldsymbol{\Lambda})$。

最后一步是缩放，从图 5 (c) 到图 5 (d)，对应：

$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}} \boldsymbol{y} = \boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}} \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}) \tag{49}$$

图 5 (d) 中单位圆则代表多元高斯分布 $N(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I})$。

利用向量 $\boldsymbol{z}$，多元高斯分布 PDF 可以写成：

$$f_{\boldsymbol{Z}}(\boldsymbol{x}) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}\right)}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}\|\boldsymbol{z}\|_2^2\right)}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} \tag{50}$$

$\boldsymbol{z}$ 的模 $\|\boldsymbol{z}\|$ 实际上代表“整体”z 分数。

类比的话，一元高斯分布的概率密度函数可以写成：

$$f(x) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right)}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma} = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}z^2\right)}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}\left(\sigma^2\right)^{\frac{1}{2}}} \tag{51}$$

大家应该更容易在上式分子中看到 z 分数的平方。

反向来看，$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{z} + \boldsymbol{\mu}$ 代表通过“缩放 → 旋转 → 平移”把单位圆转换成中心在 $\boldsymbol{\mu}$ 的旋转椭圆。也就是把 $N(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I})$ 转换成 $N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$。从数据角度来看，我们可以通过“缩放 → 旋转 → 平移”，把服从 $N(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I})$ 的随机数转化为服从 $N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ 的随机数。

欧氏距离 → 马氏距离

本书前文反复提到，看到 $(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})$ 这种二次型，就要考虑它是否代表某种距离！将 $(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})$ 写成 L^2 范数平方形式：

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}) &= \left[\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}) \\ &= \left\|\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right\|_2^2 \\ &= \|\boldsymbol{z}\|_2^2\end{aligned} \tag{52}$$

也就是说，$(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})$ 开方得到：

$$d = \sqrt{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})} = \left\|\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right\| = \|\boldsymbol{z}\| \tag{53}$$

上式就是大名鼎鼎的马氏距离。马氏距离，也叫**马哈距离** (Mahal distance)，全称**马哈拉诺比斯距离** (Mahalanobis distance)。

马氏距离是机器学习中重要的距离度量。马氏距离的独特之处在于，它通过引入协方差矩阵在计算距离时考虑了数据的分布。此外，马氏距离**无量纲量** (unitless 或 dimensionless)，它将各个特征数据标准化。也就是说，马氏距离可以看做是多元数据的 z 分数。比如，马氏距离为 2，意味着某点距离数据质心的距离为 2 倍标准差。

比对来看，$(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})$ 代表 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{\mu}$ 两点之间欧氏距离平方。$\sqrt{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})}=\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}\|$ 代表欧氏距离。

在本系列丛书《数学要素》一册第 7 章中，我们知道，地理上的相近，不代表关系的紧密。比如，相隔万里的好友，近在咫尺的路人。马氏距离就是考虑了样本数据“亲疏关系”的距离度量。

马氏距离：以鸢尾花为例

为了让大家更好地理解马氏距离，下面我们以鸢尾花数据为例展开讲解。

用鸢尾花花萼长度、花瓣长度两个特征。为了方便，令花萼长度为 x_1，花瓣长度为 x_2。二元数据质心所在位置为：

$$\boldsymbol{\mu}=\begin{bmatrix}5.843\\3.758\end{bmatrix} \tag{54}$$

图 6 中散点代表鸢尾花样本数据。图 6 对比欧氏距离和马氏距离。

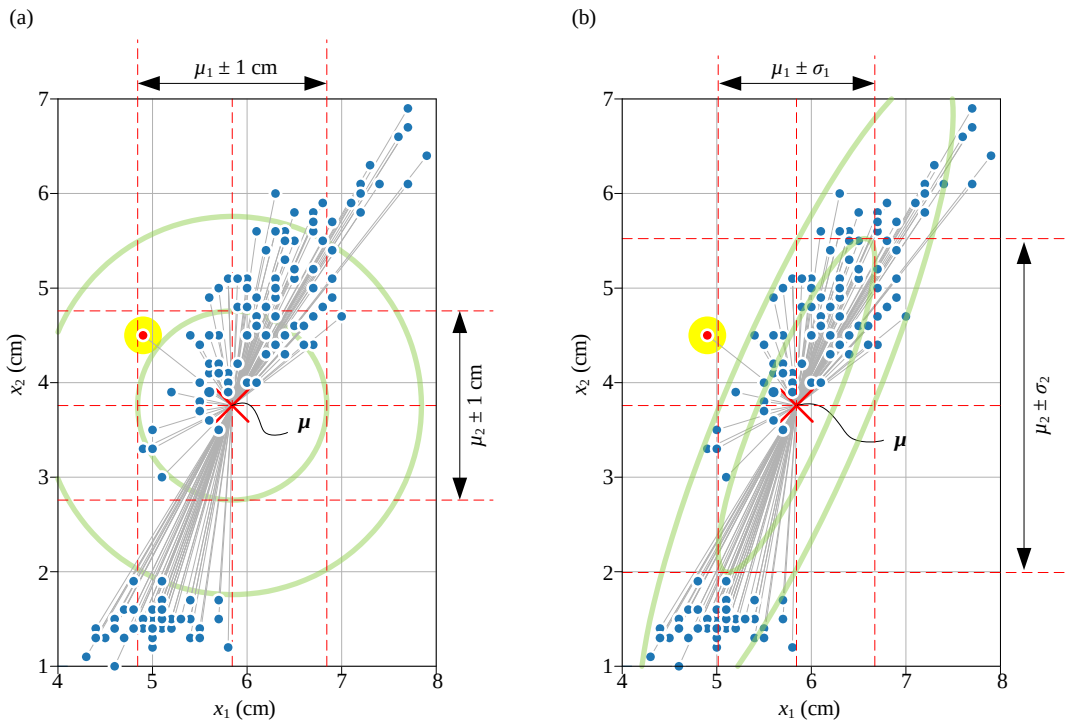


图 6. 欧氏距离和马氏距离

平面上任意一个鸢尾花样本点 $\boldsymbol{x}$ 到质心 $\boldsymbol{\mu}$ 的欧氏距离为：

$$\begin{aligned} d &= \sqrt{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})} = \sqrt{\left(\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 5.843 \\ 3.758 \end{bmatrix}\right)^{\mathrm{T}} \left(\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 5.843 \\ 3.758 \end{bmatrix}\right)} \\ &= \sqrt{(x_1 - 5.843)^2 + (x_2 - 3.758)^2} \end{aligned} \tag{55}$$

图 6 (a) 所示的两个同心圆距离质心 $\boldsymbol{\mu}$ 为 1 cm 和 2 cm。欧氏距离显然没有考虑数据之间的亲疏关系。举个例子，图 6 (a) 中红色点 ● 距离质心的欧氏距离略大于 1 cm。但是对于整体样本数据，● 显得鹤立鸡群，格格不入。

图 6 中鸢尾花数据协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 为：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 0.685 & 1.274 \\ 1.274 & 3.116 \end{bmatrix} \tag{56}$$

协方差的逆 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 为：

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \begin{bmatrix} 6.075 & -2.484 \\ -2.484 & 1.336 \end{bmatrix} \tag{57}$$

代入具体值，图 6 (b) 的马氏距离解析式为：

$$\begin{aligned} d &= \sqrt{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} 6.075 & -2.484 \\ -2.484 & 1.336 \end{bmatrix} (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})} \\ &= \sqrt{\left(\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 5.843 \\ 3.758 \end{bmatrix}\right)^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} 6.075 & -2.484 \\ -2.484 & 1.336 \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 5.843 \\ 3.758 \end{bmatrix}\right)} \\ &= \sqrt{6.08x_1^2 - 4.97x_1x_2 + 1.34x_2^2 - 52.32x_1 + 18.99x_2 + 117.21} \end{aligned} \tag{58}$$

图 6 (b) 中两个椭圆就是马氏距离 $d = 1$ 和 $d = 2$ 时对应的等高线。再次强调，马氏距离没有单位，它相当于 z 分数。准确地说，马氏距离的单位是“标准差”。

再看图 6 (b) 中红色点 ●，它的马氏距离远大于 2。也就是说，考虑整体数据分布亲疏情况，红色点 ● 离样本数据“远的多”。

显然，相比欧氏距离，在度量数据之间亲疏关系上，马氏距离更胜任。

我们可以用 scipy.spatial.distance.mahalanobis() 函数计算马氏距离，Scikit-Learn 库中也有计算马氏距离的函数。

本系列丛书会在《概率统计》一册有一章专门讲解马氏距离，我们会继续鸢尾花这个例子。在《数据科学》一册，我们还会用马氏距离判断离群点。

高斯函数

将 (53) 中马氏距离 d 代入多元高斯分布概率密度函数，得到：

$$f_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x}) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}d^2\right)}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} \tag{59}$$

上式，我们看到高斯函数 $\exp(-1/2\ \bullet)$ 把“距离度量”转化成“亲近度”。如图 7 所示，从几何角度来看，这是一个二次曲面到高斯函数曲面的转换。

从统计角度来看，距离中心 $\boldsymbol{\mu}$ 越远，对应的概率越小。概率密度值可以无限接近 0，但是不为 0，这说明虽然是小概率事件，但是“万事皆可能“。强调一下，概率密度不同于概率值，概率密度函数积分或多重积分之后可以得到概率值。

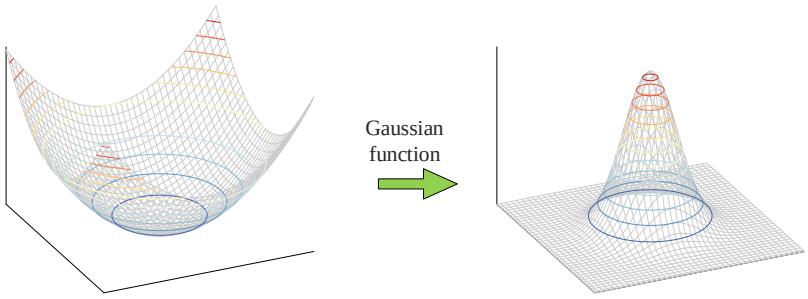


图 7. “距离度量”转化成“亲近度”

分母：行列式值

从体积角度来看，“平移 → 旋转 → 缩放”这一系列几何变换带来的面积/体积缩放系数和 (44) 分母中的 $|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}$ 有直接关系。

把系数 $|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}$ 从 (44) 分母移到分子可以写成 $|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{-1}{2}}$。而 $\boldsymbol{\Sigma}^{\frac{-1}{2}}$ 相当于：

$$\boldsymbol{\Sigma}^{\frac{-1}{2}} \sim \boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}) \tag{60}$$

本书第 5 章和第 14 章都强调过，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}$，不能推导得到 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}$。

$|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{-1}{2}}$ 开根号的原因很容易理解，$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 中有“两份”上述“平移 → 旋转 → 缩放”几何变换，因此 $|\boldsymbol{\Sigma}^{-1}|$ 代表缩放比例的平方。

注意，协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 真正起到缩放的成分是特征值矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$，即 $|\boldsymbol{\Sigma}| = |\boldsymbol{\Lambda}|$。强调一下，$|\bullet|$ 这个运算符是求行列式值，不是绝对值。行列式值完成“矩阵 → 标量”运算，这个标量结果对应面积/体积缩放系数。

从统计角度来看，对比 (44) 和 (51)，$|\boldsymbol{\Sigma}|$ 相当于方差。

分母：体积归一化

如图 8 所示，从几何角度来看，(44) 分母中 $(2\pi)^{\frac{D}{2}}$ 一项起到归一化作用，为了保证概率密度函数曲面和整个水平面包裹的体积为 1，即概率为 1。

同理，(51) 分母中 $(2\pi)^{\frac{1}{2}}$ 用来保证 $f(x)$ 和整条横轴围成图像面积为 1。

再次强调，概率密度经过积分或多重积分可以得到概率。本系列丛书《数学要素》第 18 章介绍过一元高斯函数积分、二元高斯函数“偏积分”和二重积分，建议大家回顾。

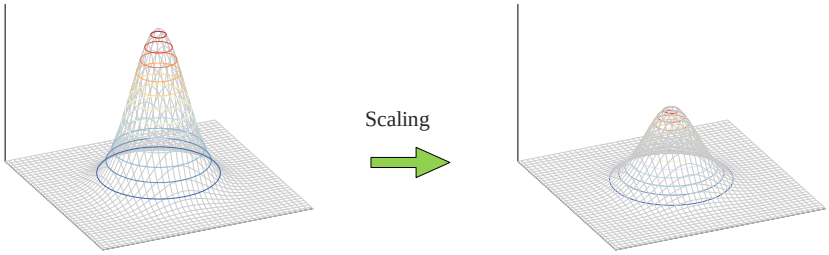


图 8. 体积归一化

解剖多元高斯分布 PDF

有了以上分析，理解、记忆多元高斯分布的概率密度函数解析式，就变得格外容易了：

$$
\begin{aligned}
d &= \sqrt{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})} && \text{Mahal distance}\\
\|\boldsymbol{z}\| && \text{z-score}\\
\boldsymbol{z} &= \boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}) && \text{Translate} \rightarrow \text{rotate} \rightarrow \text{scale}\\
\left[\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right]^{\mathrm{T}} &\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}) && \text{Eigen decomposition}\\
(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}&\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}) && \text{Ellipse/ellipsoid}
\end{aligned}
$$

$$
f_{\chi}(\boldsymbol{x}) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right)}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} \tag{61}
$$

Distance → similarity

Normalization
Multivariable calculus

Scaling
Eigenvalues

有关多元高斯分布的故事才刚刚开始，本系列丛书《概率统计》中多元高斯分布占据大半江山。

我们用 Streamlit 和 Plotly 绘制二元高斯分布概率密度函数曲面、平面等高线，大家可以调节均方差、相关性系数来观察图像变化。请参考 Streamlit_Bk4_Ch20_04.py。

20.5 从单位双曲线到旋转双曲线

本节讲解如何把单位双曲线变换得到任意双曲线。平面上，**单位双曲线** (unit hyperbola) 定义如下：

$$\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\boldsymbol{z}-1=0 \tag{62}$$

(44) 对单位双曲线感到陌生的读者请看到本系列丛书《数学要素》第 9 章。同时也建议大家回顾这章中讲解的双曲函数。

展开 (62) 得到：

$$z_1^2-z_2^2=1 \tag{63}$$

和前文思路完全一致，首先对 $\boldsymbol{z}$ 通过 $\boldsymbol{S}$ 缩放，再通过 $\boldsymbol{R}$ 逆时针旋转 θ，最后平移 $\boldsymbol{c}$：

$$\underbrace{\boldsymbol{R}\ \boldsymbol{S}}_{\text{Rotate Scale}}\boldsymbol{z}+\underbrace{\boldsymbol{c}}_{\text{Translate}}=\boldsymbol{x} \tag{64}$$

同样展开得到：

$$\underbrace{\begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}}_{\text{Rotate}}\underbrace{\begin{bmatrix}a & 0\\ 0 & b\end{bmatrix}}_{\text{Scale}}\begin{bmatrix}z_1\\ z_2\end{bmatrix}+\underbrace{\begin{bmatrix}c_1\\ c_2\end{bmatrix}}_{\text{Translate}}=\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix} \tag{65}$$

后续推导和上一节完全一致，我们可以得到任意双曲线的解析式。鉴于我们已经放弃代数解析式表达复杂圆锥曲线，因此不建议大家展开推导。图 9 所示为通过单位双曲线旋转得到的一系列双曲线。图 9 中蓝色和红色双曲线仅仅存在旋转关系，没有经过缩放和平移操作。

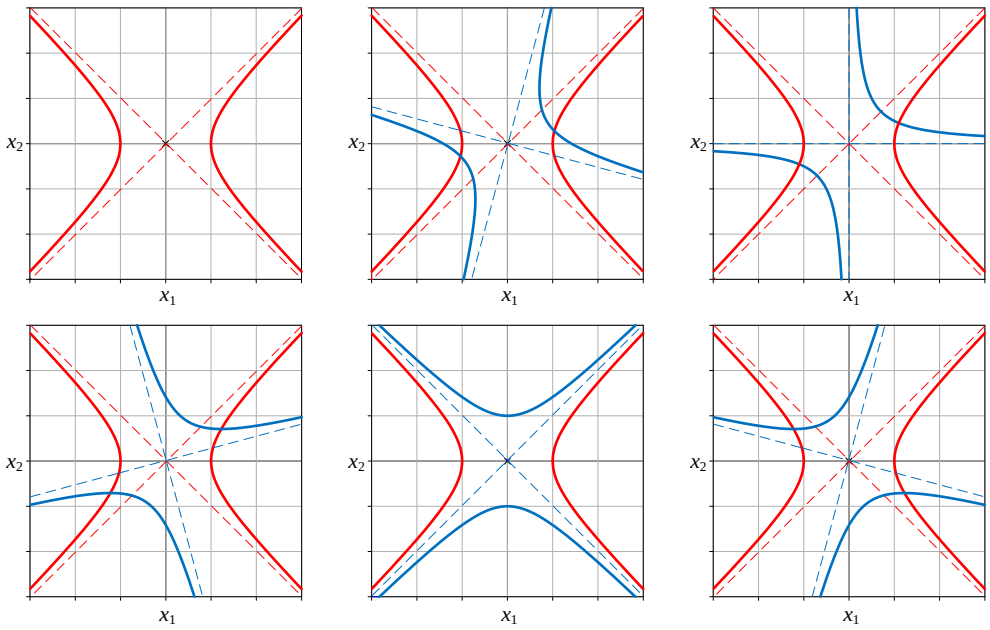


图 9. 通过单位双曲线旋转得到的一系列双曲线

请大家自行修改 `Bk4_Ch20_02.py` 参数绘制不同几何变换条件下双曲线。

20.6 切线：构造函数，求梯度向量

本节探讨如何求解圆锥曲线切线解析式。

椭圆

首先以椭圆为例求解其切线解析式。标准椭圆解析式为：

$$\frac{x_1^2}{a^2}+\frac{x_2^2}{b^2}=1 \tag{66}$$

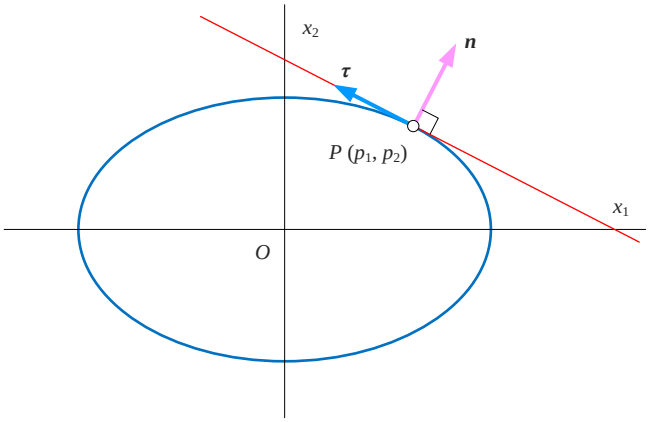


图 10. 椭圆上点 P 处切向量和法向量

先构造一个二元函数 $f(x_1, x_2)$，如下：

$$f\left(x_1, x_2\right) = \frac{x_1^2}{a^2} + \frac{x_2^2}{b^2} \tag{67}$$

如图 10 所示，椭圆上 $P\ (p_1, p_2)$ 一点处 $f(x_1, x_2)$ 梯度，即法向量 $\boldsymbol{n}$ 为：

$$\boldsymbol{n} = \nabla f\left(\boldsymbol{x}\right)\Big|_{(p_1,p_2)} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix}_{(p_1,p_2)} = \begin{bmatrix} \dfrac{2p_1}{a^2} \\ \dfrac{2p_2}{b^2} \end{bmatrix} \tag{68}$$

如图 10 所示，切线上任意一点和点 P 构成向量，垂直于法向量 $\boldsymbol{n}$，因此两者内积为 0，即，

$$\begin{bmatrix} \dfrac{2p_1}{a^2} \\ \dfrac{2p_2}{b^2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 - p_1 \\ x_2 - p_2 \end{bmatrix} = \frac{2p_1}{a^2}\left(x_1 - p_1\right) + \frac{2p_2}{b^2}\left(x_2 - p_2\right) = 0 \tag{69}$$

整理上式，得到 $P\ (p_1, p_2)$ 点处椭圆切线解析式：

$$\frac{p_1}{a^2}x_1 + \frac{p_2}{b^2}x_2 = \frac{p_1^2}{a^2} + \frac{p_2^2}{b^2} \tag{70}$$

图 11 所示为某个给定椭圆上不同点切线。

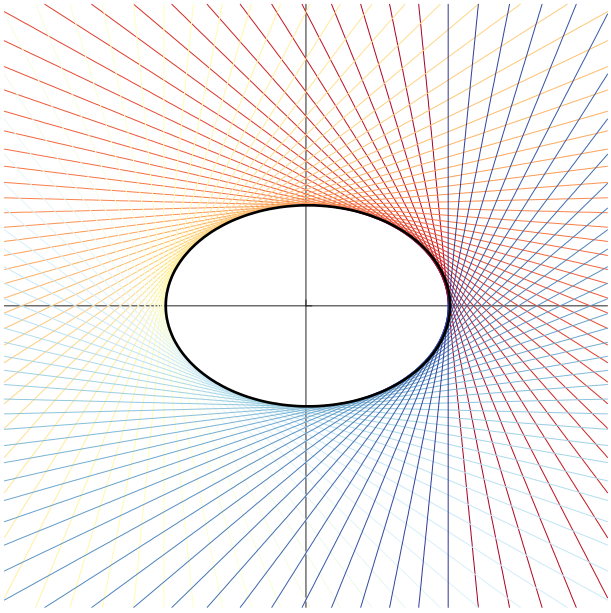


图 11. 椭圆切线分布

正圆

正圆是椭圆特殊形式，将 $a = b = r$ 带入上式，可获得圆心位于原点的正圆上 $P\ (p_1, p_2)$ 点切线解析式：

$$p_1 x_1 + p_2 x_2 = p_1^2 + p_2^2 = r^2 \tag{71}$$

图 12 所示为中心位于原点单位圆不同点上切线。

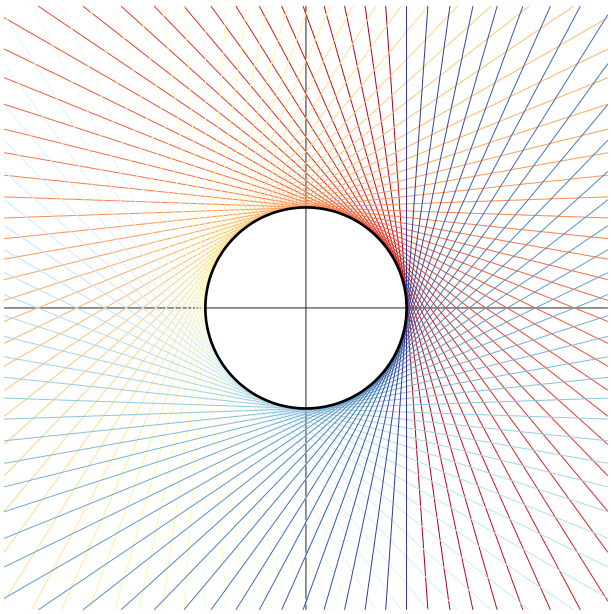


图 12. 单位圆切线分布

双曲线

同样的方法可以求解标准双曲线切线。焦点位于横轴标准椭圆解析式写作：

$$\frac{x_1^2}{a^2}-\frac{x_2^2}{b^2}=1 \tag{72}$$

类似地，先构造一个二元函数 $f(x_1, x_2)$，如下：

$$f\left(x_1,x_2\right)=\frac{x_1^2}{a^2}-\frac{x_2^2}{b^2} \tag{73}$$

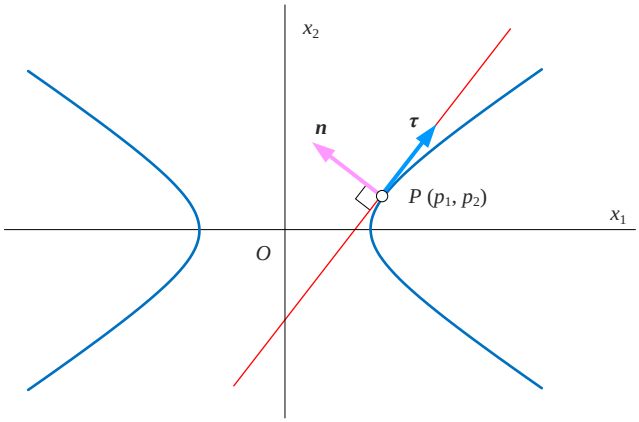


图 13. 双曲线上点 P 处切向量和法向量

如图 13 所示，双曲线上 $P\ (p_1, p_2)$ 点处函数 $f(x_1, x_2)$ 梯度，即法向量 $\boldsymbol{n}$ 为：

$$\boldsymbol{n}=\nabla f\left(\boldsymbol{x}\right)\Big|_{(p_1,p_2)}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f}{\partial x_1}\\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2}\end{bmatrix}\Bigg|_{(p_1,p_2)}=\begin{bmatrix}\dfrac{2p_1}{a^2}\\ -\dfrac{2p_2}{b^2}\end{bmatrix} \tag{74}$$

如图 13 所示，切线上任意一点和点 P 构成向量，垂直于法向量 $\boldsymbol{n}$，通过内积为 0 得到以下等式：

$$\begin{bmatrix}\dfrac{2p_1}{a^2}\\ -\dfrac{2p_2}{b^2}\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}x_1-p_1\\ x_2-p_2\end{bmatrix}=\frac{2p_1}{a^2}\left(x_1-p_1\right)-\frac{2p_2}{b^2}\left(x_2-p_2\right)=0 \tag{75}$$

整理上式，得到双曲线上 $P\ (p_1, p_2)$ 点处切线解析式：

$$\frac{p_1}{a^2}x_1-\frac{p_2}{b^2}x_2=\frac{p_1^2}{a^2}-\frac{p_2^2}{b^2} \tag{76}$$

图 14 展示单位双曲线不同点切线。

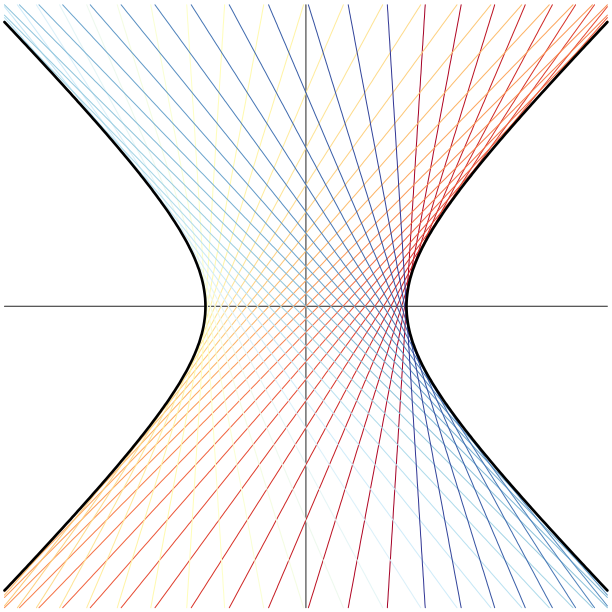


图 14. 双曲线左右两侧切线分布

圆锥曲线一般式

本章前文给出圆锥曲线常见一般表达式，同样据此构造一个二元函数 $f(x_1, x_2)$：

$$f\left(x_1, x_2\right) = Ax_1^2 + Bx_1x_2 + Cx_2^2 + Dx_1 + Ex_2 + F \tag{77}$$

圆锥曲线任意一点 $P\ (p_1, p_2)$ 处二元函数 $f(x_1, x_2)$ 梯度，即法向量 $\boldsymbol{n}$ 为：

$$\boldsymbol{n} = \nabla f\left(\boldsymbol{x}\right)\Big|_{(p_1,p_2)} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix}\Bigg|_{(p_1,p_2)} = \begin{bmatrix} 2Ap_1 + Bp_2 + D \\ Bp_1 + 2Cp_2 + E \end{bmatrix} \tag{78}$$

切线上任意一点和点 P 构成向量，垂直于法向量 $\boldsymbol{n}$，因此两者向量内积为 0：

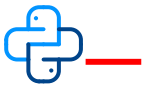
$$\begin{bmatrix} 2Ap_1 + Bp_2 + D \\ Bp_1 + 2Cp_2 + E \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 - p_1 \\ x_2 - p_2 \end{bmatrix} = 0 \tag{79}$$

即

$$\left(2Ap_1 + Bp_2 + D\right)\left(x_1 - p_1\right) + \left(Bp_1 + 2Cp_2 + E\right)\left(x_2 - p_2\right) = 0 \tag{80}$$

整理得到圆锥曲线任意一点 $P\ (p_1, p_2)$ 处切线解析式：

$$\left(2Ap_1 + Bp_2 + D\right)x_1 + \left(Bp_1 + 2Cp_2 + E\right)x_2 = 2Ap_1^2 + 2Bp_1p_2 + 2Cp_2^2 + Dp_1 + Ep_2 \tag{81}$$



Bk4_Ch20_03.py 绘制图 11，请大家修改代码自行绘制本节和下一节其他图像。

20.7 法线：法向量垂直于切向量

椭圆

(67) 所示标准椭圆上 $P(p_1, p_2)$ 一点处切向量 $\boldsymbol{\tau}$ 为：

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ -\frac{\partial f}{\partial x_1} \end{bmatrix}_{(p_1,p_2)} = \begin{bmatrix} \frac{2p_2}{b^2} \\ -\frac{2p_1}{a^2} \end{bmatrix} \tag{82}$$

$P(p_1, p_2)$ 处切向量 $\boldsymbol{\tau}$ 显然垂直其法向量 $\boldsymbol{n}$。

椭圆上 $P(p_1, p_2)$ 点处法线解析式：

$$\begin{bmatrix} \frac{2p_2}{b^2} \\ -\frac{2p_1}{a^2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 - p_1 \\ x_2 - p_2 \end{bmatrix} = \frac{2p_2}{b^2}(x_1 - p_1) - \frac{2p_1}{a^2}(x_2 - p_2) = 0 \tag{83}$$

整理得到：

$$\frac{p_2}{b^2}x_1 - \frac{p_1}{a^2}x_2 = \frac{p_1 p_2}{b^2} - \frac{p_1 p_2}{a^2} \tag{84}$$

图 15 所示为椭圆法线分布情况。

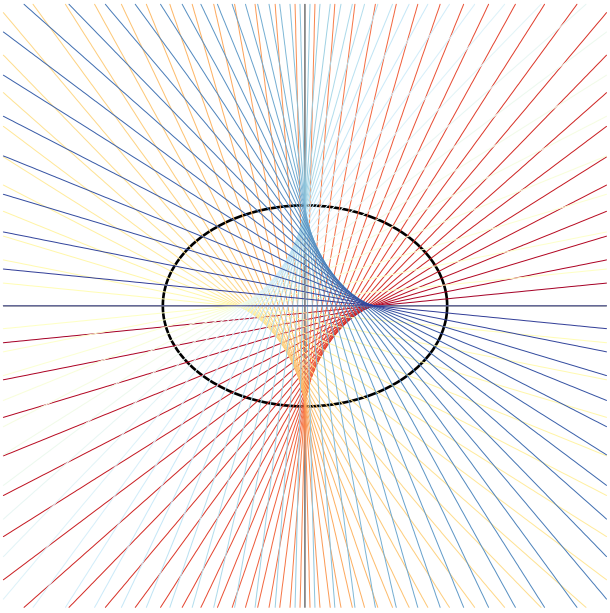


图 15. 椭圆法线分布

圆锥曲线一般式

下面推导一般圆锥曲线的法线。(77) 圆锥曲线解析式上 P 点处切向量 $\boldsymbol{\tau}$ 为：

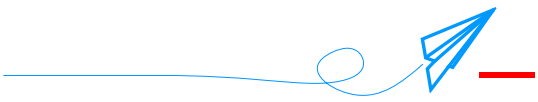
$$\boldsymbol{\tau} = \left[\begin{array}{c} \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \\ -\dfrac{\partial f}{\partial x_1} \end{array}\right]\Bigg|_{(p_1,p_2)} = \left[\begin{array}{c} Bp_1 + 2Cp_2 + E \\ -\left(2Ap_1 + Bp_2 + D\right) \end{array}\right] \tag{85}$$

得到过 P 点圆锥曲线法线直线方程，如下：

$$\left[\begin{array}{c} Bp_1 + 2Cp_2 + E \\ -\left(2Ap_1 + Bp_2 + D\right) \end{array}\right] \cdot \left[\begin{array}{c} x_1 - p_1 \\ x_2 - p_2 \end{array}\right] = 0 \tag{86}$$

整理得到如下法线解析式：

$$\left(Bp_1 + 2Cp_2 + E\right)x_1 - \left(2Ap_1 + Bp_2 + D\right)x_2 = B\left(p_1^2 - p_2^2\right) + \left(2C - 2A\right)p_1 p_2 + Ep_1 - Dp_2 \tag{87}$$



下面这幅图最能总结本章的核心内容。它虽然是四幅子图，却代表着一个连贯的几何变换操作。不管是从旋转椭圆到单位圆，还是从单位圆到旋转椭圆，请大家务必记住每步几何变换对应的线性代数运算。

理解这些几何变换对于理解协方差矩阵、多元高斯分布、主成分分析和很多机器学习算法有至关重要的作用。

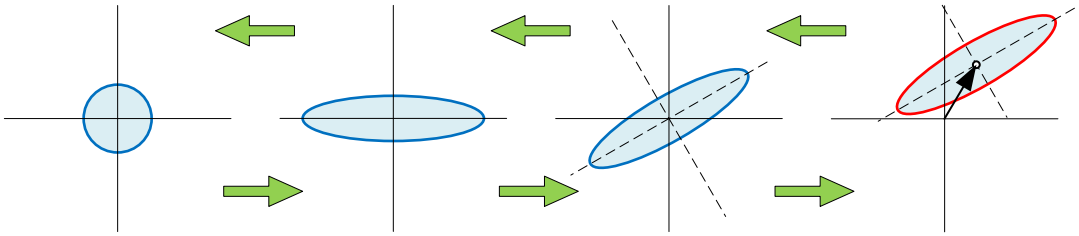


图 16. 总结本章重要内容的四幅图

本章利用矩阵分解、几何视角解剖了多元高斯分布的概率密度函数。请大家特别注意理解“平移 → 旋转 → 缩放”这三步几何操作，以及马氏距离的意义。

21 Surfaces and Positive Definiteness

曲面和正定性

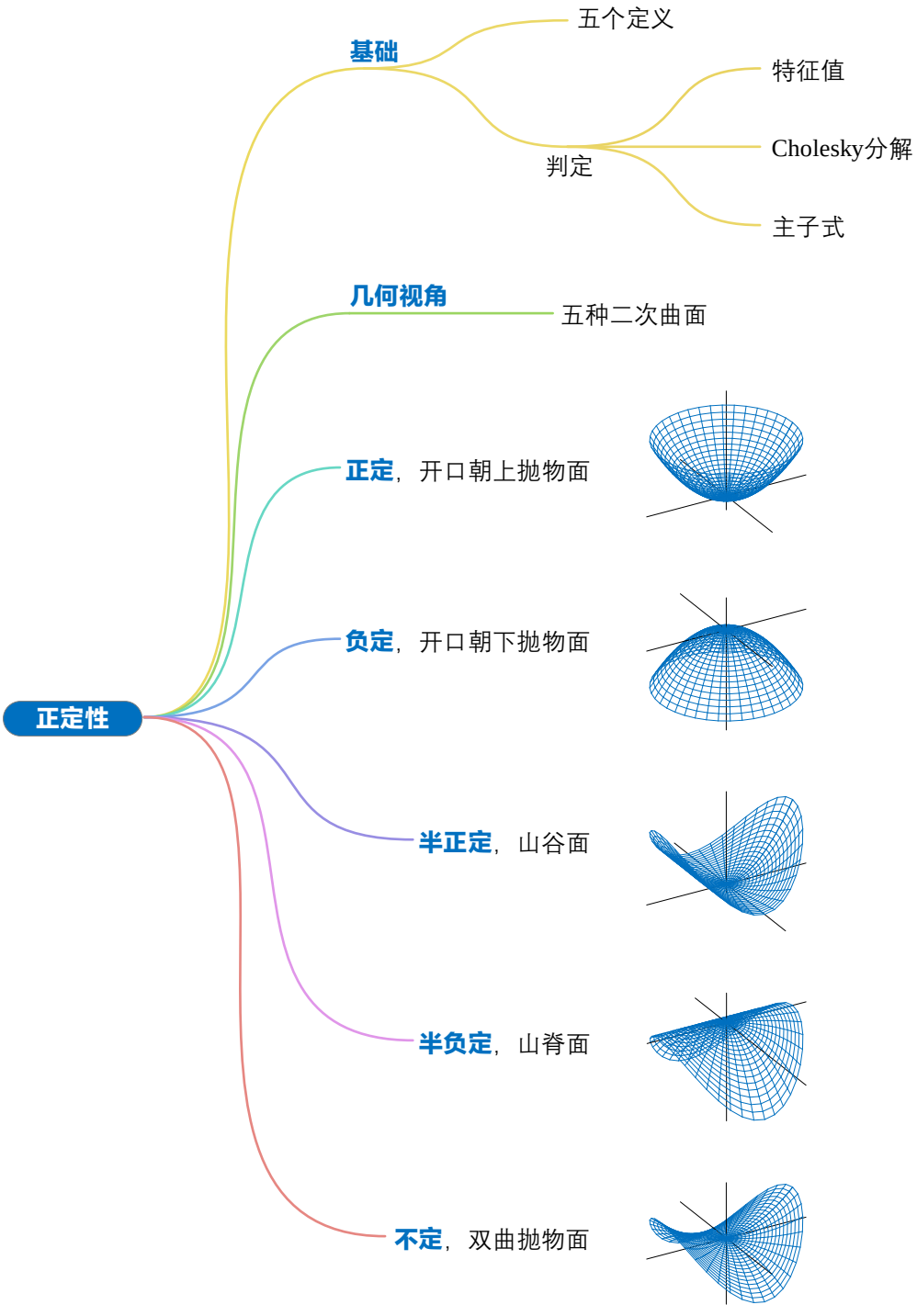
代数、微积分、几何、线性代数的结合体

神，几何化一切。

God ever geometrizes.

—— 柏拉图 (Plato) | 古希腊哲学家 | 424/423 ~ 348/347 BC

- `matplotlib.pyplot.contour()` 绘制等高线线图
- `matplotlib.pyplot.contourf()` 绘制填充等高线图
- `matplotlib.pyplot.scatter()` 绘制散点图
- `numpy.arange()` 在指定区间内返回均匀间隔数组
- `numpy.array()` 创建 array 数据类型
- `numpy.cos()` 余弦函数
- `numpy.linalg.cholesky()` Cholesky 分解函数
- `numpy.linspace()` 产生连续均匀间隔数组
- `numpy.meshgrid()` 生成网格化数据
- `numpy.multiply()` 向量或矩阵逐项乘积
- `numpy.roots()` 多项式求根
- `numpy.sin()` 正弦函数
- `numpy.sqrt()` 计算平方根
- `sympy.abc import x` 定义符号变量 x
- `sympy.diff()` 求解符号导数和偏导解析式
- `sympy.Eq()` 定义符号等式
- `sympy.evalf()` 将符号解析式中未知量替换为具体数值
- `sympy.plot_implicit()` 绘制隐函数方程
- `sympy.symbols()` 定义符号变量



21.1 正定性

正定性 (positive definiteness) 是优化问题经常出现线性代数概念。本章结合**二次曲面** (quadratic surface)，和大家聊一聊正定性及其应用。

五个定义

矩阵正定性分为如下五种情况。

当 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ ($\boldsymbol{x}$ 为非零列向量) 时，如果满足：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} > 0 \tag{1}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为**正定矩阵** (positive definite matrix)。

当 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ 时，

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \geq 0 \tag{2}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为**半正定矩阵** (positive semi-definite matrix)。

当 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ 时，

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} < 0 \tag{3}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为**负定矩阵** (negative definite matrix)。

当 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ 时，

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \leq 0 \tag{4}$$

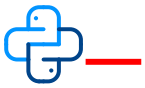
矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为**半负定矩阵** (negative semi-definite matrix)。

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 不属于以上任何一种情况，$\boldsymbol{A}$ 为**不定矩阵** (indefinite matrix)。

判定正定矩阵

判断矩阵是否为正定矩阵，本书主要采用如下两种方法：

- 若矩阵为对称矩阵，并且所有特征值为正，则矩阵为正定矩阵；
- 若矩阵可以进行 Cholesky 分解，则矩阵为正定矩阵。



`Bk4_Ch21_01.py` 介绍如何使用 Cholesky 分解判定矩阵是否为正定矩阵。

Cholesky 分解

如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为正定矩阵，对 $\boldsymbol{A}$ 进行 Cholesky 分解，得到：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R} \tag{5}$$

利用 (5)，将 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 写成如下形式：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{x} = \left(\boldsymbol{R}\boldsymbol{x}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{x} = \left\|\boldsymbol{R}\boldsymbol{x}\right\|^2 \tag{6}$$

$\boldsymbol{R}$ 中列向量线性无关，若 $\boldsymbol{x}$ 为非零向量，则 $\boldsymbol{R}\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$，因此 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} > 0$。

特征值分解

对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 进行特征值分解得到：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{7}$$

将 (7) 代入 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$，得到：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \\ &= \underbrace{\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)}_{\boldsymbol{z}}{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Lambda}\underbrace{\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)}_{\boldsymbol{z}}\end{aligned} \tag{8}$$

令：

$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \tag{9}$$

(8) 可以写成：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{z} \\ &= \lambda_1 z_1^2 + \lambda_2 z_2^2 + \cdots + \lambda_D z_D^2 = \sum_{j=1}^{D}\lambda_j z_j^2\end{aligned} \tag{10}$$

当上式中特征值均为正数，除非 z_1、$z_2 \ldots z_D$ 均为 0 (即 $\boldsymbol{z}$ 为零向量)，否则上式大于 0。

若 $\boldsymbol{A}$ 的特征值均为负值，则矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为负定矩阵。若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 特征值为正值或 0，$\boldsymbol{A}$ 为半正定矩阵。若矩阵特征值为负值或 0，则矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为半负定矩阵。

格拉姆矩阵

给定数据矩阵 $\boldsymbol{X}$，它的格拉姆矩阵为 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$。格拉姆矩阵至少都是半正定矩阵。

将 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{x}$ 写成如下形式：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{x} = \left\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{x}\right\|^2 \geq 0 \tag{11}$$

特别地，当 $\boldsymbol{X}$ 满秩时，$\boldsymbol{x}$ 为非零向量，则 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$，因此 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{x} > 0$。也就是说，当 $\boldsymbol{X}$ 满秩，格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 为正定矩阵。

这一节介绍了正定性相关性质，但是想要直观理解这个概念，还需要借助几何视角。

21.2 几何视角看正定性

给定如下 2 × 2 对称矩阵 $\boldsymbol{A}$：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \tag{12}$$

构造如下二元函数 $y = f(x_1, x_2)$：

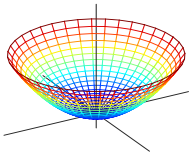
$$y = f\left(x_1, x_2\right) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = ax_1^2 + 2bx_1x_2 + cx_2^2 \tag{13}$$

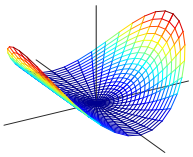
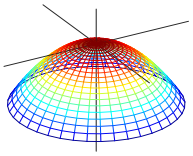
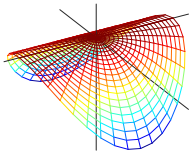
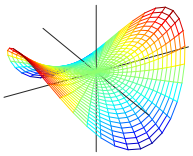
在三维正交空间中，当矩阵 $\boldsymbol{A}_{2\times2}$ 正定性不同时，$y = f(x_1, x_2)$ 对应曲面展现出不同的形状：

- 当 $\boldsymbol{A}_{2\times2}$ 为正定矩阵时，$y = f(x_1, x_2)$ 为开口向上抛物面；
- 当 $\boldsymbol{A}_{2\times2}$ 为半正定矩阵时，$y = f(x_1, x_2)$ 为山谷面；
- 当 $\boldsymbol{A}_{2\times2}$ 为负定矩阵时，$y = f(x_1, x_2)$ 为开口向下抛物面；
- 当 $\boldsymbol{A}_{2\times2}$ 为半负定矩阵时，$y = f(x_1, x_2)$ 为山脊面；
- 当 $\boldsymbol{A}_{2\times2}$ 不定时，$y = f(x_1, x_2)$ 为马鞍面，也叫做双曲抛物面。

表 1 总结了矩阵 $\boldsymbol{A}$ 不同正定性条件下对应的曲面形状。本章以下六节就按表中形状顺序展开。

表 1. 正定性的几何意义

$\boldsymbol{A}_{D\times D}$	特征值	形状
$\boldsymbol{A}_{D\times D}$ 为正定矩阵 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} > 0, \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$	D 个特征值均为正值	

$\boldsymbol{A}_{D\times D}$为半正定矩阵，秩为 r $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\geq 0, \boldsymbol{x}\neq \boldsymbol{0}$	r个正特征值，$D-r$个特征值为 0	
$\boldsymbol{A}_{D\times D}$为负定矩阵 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}<0$	D个特征值均为负值	
$\boldsymbol{A}_{D\times D}$为半负定矩阵，秩为 r $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\leq 0$	r个负特征值，$D-r$个特征值为 0	
$\boldsymbol{A}_{D\times D}$为不定矩阵	特征值符号正负不定	

21.3 开口朝上抛物面：正定

正圆

先来看一个单位矩阵的例子。若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为 2 × 2 单位矩阵：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} \tag{14}$$

单位矩阵显然是正定矩阵。构造如下二元函数 $y = f(x_1, x_2)$：

$$y=f\left(x_1,x_2\right)=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1 & x_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=x_1^2+x_2^2 \tag{15}$$

观察上式，容易发现只有当 $x_1 = 0$ 且 $x_2 = 0$ 时，即 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$，$y = f(x_1, x_2) = 0$。

容易求得 $\boldsymbol{A}$ 特征值分别为 $\lambda_1 = 1$ 和 $\lambda_2 = 1$，对应特征向量分别为：

$$\boldsymbol{v}_1=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{v}_2=\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix} \tag{16}$$

计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩，$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = 2$。

图 1 (a) 所示为 $y = f(x_1, x_2)$ 曲面。在该曲面边缘 A、B 和 C 放置小球，小球都会朝着曲面最低点滚动。

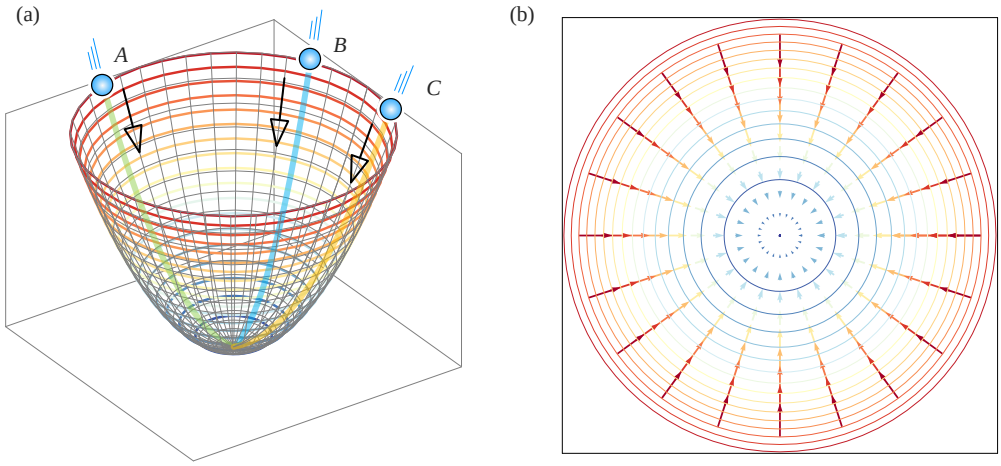


图 1. 正定矩阵曲面和梯度下降，正圆抛物面，箭头指向下山方向

(15) 的梯度向量为：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{bmatrix} \tag{17}$$

而 (15) 的梯度下降向量就是上式中梯度向量反向：

$$-\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} -2x_1 \\ -2x_2 \end{bmatrix} \tag{18}$$

图 1 (b) 展示 $f(x_1, x_2)$ 平面等高线为正圆。图 1 (b) 还给出不同位置的梯度下降向量，即指向下山方向，梯度向量的反方向。在本章中，除了最后一节外，平面等高线中的向量场都是梯度下降向量。

如图 1 (b) 所示，梯度下降向量均指向最小值点。此外，梯度下降向量方向垂直所在等高线。梯度下降向量的长度代表坡度的陡峭程度。向量长度越大，坡度越陡，该方向上函数值变化率越大。当梯度下降向量的长度为 0 时，对应驻点。

梯度下降向量为零向量 $\boldsymbol{0}$ 的点，就是 $y = f(x_1, x_2)$ 两个偏导均为 0 的点。本系列丛书《数学要素》介绍过，(0, 0) 这个点被称作驻点。通过图 1，很容易判断 (0, 0) 就是二元函数最小值点。

⚠ 再次强调，图 1 给出的是梯度下降向量 (下山方向)，方向和梯度向量 (上山方向) 正好相反。沿着梯度下降向量方向移动，函数值减小；沿着梯度向量方向移动，函数值增大。

正椭圆

再看一个 2 × 2 正定矩阵例子。矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具体值如下：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix} \tag{19}$$

同样，构造二元函数 $y = f(x_1, x_2)$，具体如下：

$$y=f\left(x_1,x_2\right)=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1 & x_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=x_1^2+2x_2^2 \tag{20}$$

同样，只有 $x_1 = 0$ 且 $x_2 = 0$ 时，$y = f(x_1, x_2) = 0$。图 2 所示为 (20) 对应开口向上正椭圆抛物面，函数等高线为一系列正椭圆。

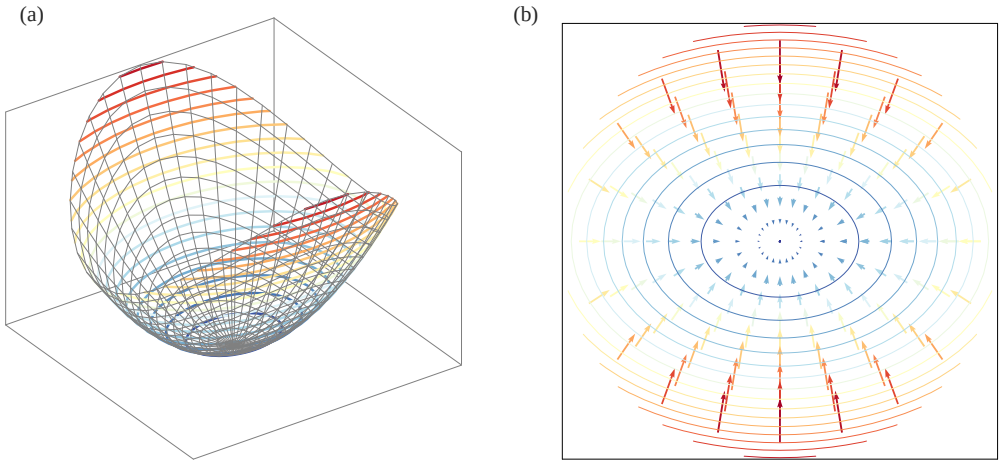


图 2. 正定矩阵曲面和梯度下降，正椭圆抛物面，箭头指向下山方向

容易求得 $\boldsymbol{A}$ 特征值分别为 $\lambda_1 = 1$ 和 $\lambda_2 = 2$，对应特征向量分别为：

$$\boldsymbol{v}_1=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{v}_2=\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix} \tag{21}$$

(15) 的梯度向量为：

$$\nabla f\left(\boldsymbol{x}\right)=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f}{\partial x_1}\\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2x_1\\ 4x_2\end{bmatrix} \tag{22}$$

梯度向量为 $\boldsymbol{0}$ 的点 (0, 0) 是 (20) 函数的最小值点。

旋转椭圆

本节前两个例子对应的曲面的等高线分别是正圆和正椭圆，下面再看一个旋转椭圆情况。$\boldsymbol{A}$ 矩阵具体如下：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1.5 & 0.5\\ 0.5 & 1.5\end{bmatrix} \tag{23}$$

构造函数 $y = f(x_1, x_2)$：

$$y=f\left(x_1,x_2\right)=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1 & x_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1.5 & 0.5\\ 0.5 & 1.5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=1.5x_1^2+x_1x_2+1.5x_2^2 \tag{24}$$

同样，只有当 $x_1 = 0$ 且 $x_2 = 0$ 时，$y = f(x_1, x_2) = 0$。

经过计算得到 $\boldsymbol{A}$ 特征值也是 $\lambda_1 = 1$ 和 $\lambda_2 = 2$；这两个特征值对应特征向量分别为：

$$\boldsymbol{v}_1=\begin{bmatrix}-\frac{\sqrt{2}}{2}\\ \frac{\sqrt{2}}{2}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{v}_2=\begin{bmatrix}\frac{\sqrt{2}}{2}\\ \frac{\sqrt{2}}{2}\end{bmatrix} \tag{25}$$

(24) 梯度向量为：

$$\nabla f\left(\boldsymbol{x}\right)=\begin{bmatrix}\frac{\partial f}{\partial x_1}\\ \frac{\partial f}{\partial x_2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3x_1+x_2\\ x_1+3x_2\end{bmatrix} \tag{26}$$

$y = f(x_1, x_2)$ 曲面对应图像如图 3。图 2 和图 3 两个椭圆唯一的差别就是旋转角度。根据前文所学，我们知道这两组椭圆的半长轴和半短轴的比例关系为 $\sqrt{\lambda_2}/\sqrt{\lambda_1}$，即 $\sqrt{2}/1$。

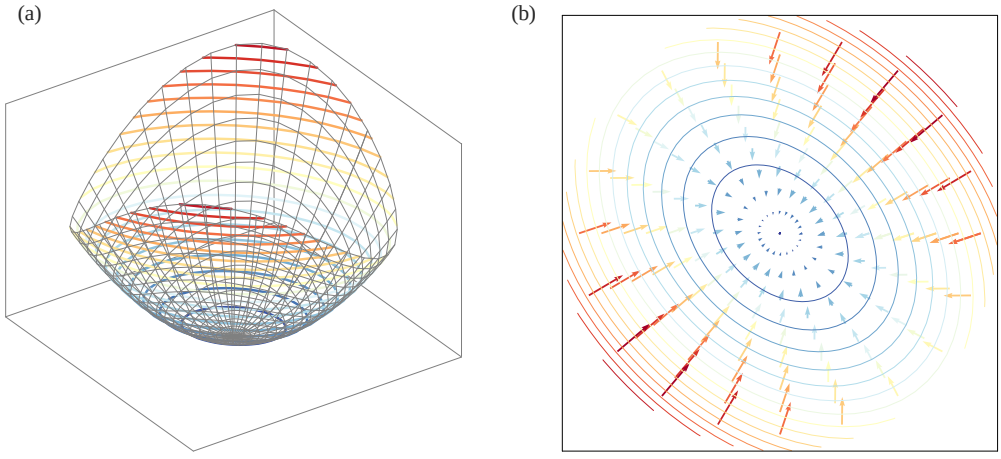
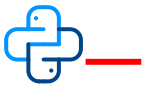


图 3. 正定矩阵曲面和梯度下降，开口向上旋转椭圆抛物面，箭头指向下山方向



Bk4_Ch21_02.py 绘制图 1、图 2、图 3，此外请大家修改代码并绘制本章其他图像。

21.4 山谷面：半正定

下面来聊一聊半正定矩阵情况。举个例子，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 取值如下：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix} \tag{27}$$

容易判定 rank($\boldsymbol{A}$) = 1。构造如下二元函数 $y = f(x_1, x_2)$：

$$y=f\left(x_1,x_2\right)=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1 & x_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=x_1^2 \tag{28}$$

$x_1 = 0$ 时，不管 x_2 取任何值，上式为 0。

图 4 展示 $y = f(x_1, x_2)$ 对应曲面。观察该图容易发现，除了纵轴以外任意点处放置一个小球，小球都会滚动到谷底。

(28) 梯度向量为：

$$\nabla f\left(\boldsymbol{x}\right)=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f}{\partial x_1}\\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2x_1\\ 0\end{bmatrix} \tag{29}$$

谷底位置对应一条直线，这条直线上每一点处梯度向量均为 $\boldsymbol{0}$，它们都是函数 $y = f(x_1, x_2)$ 极小值。

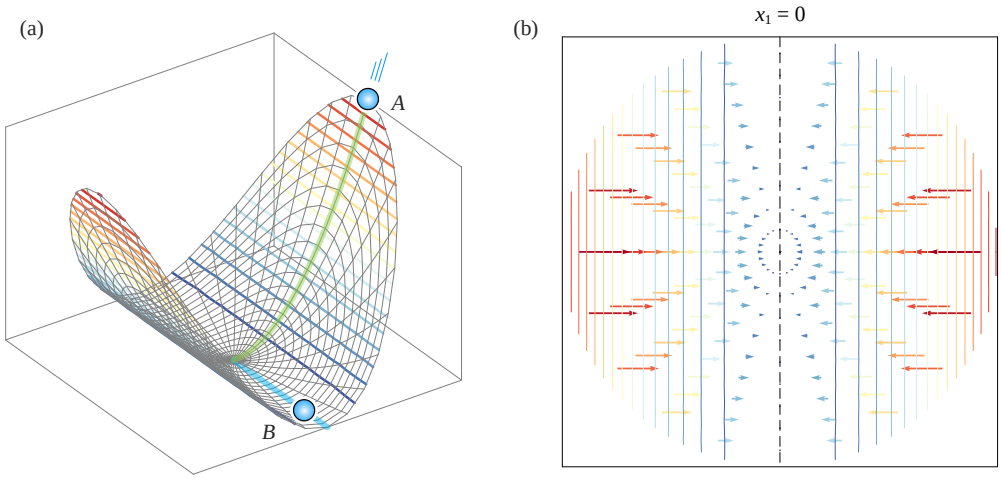


图 4. 半正定矩阵对应曲面，箭头指向下山方向

旋转山谷面

下式中矩阵 $\boldsymbol{A}$ 也是半正定矩阵：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0.5 & -0.5\\ -0.5 & 0.5\end{bmatrix} \tag{30}$$

构造函数 $y = f(x_1, x_2)$：

$$y=f\left(x_1,x_2\right)=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1 & x_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.5 & -0.5\\ -0.5 & 0.5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=0.5x_1^2-x_1x_2+0.5x_2^2 \tag{31}$$

(31) 配方得到：

$$f\left(x_1,x_2\right)=0.5x_1^2-x_1x_2+0.5x_2^2=\frac{1}{2}\left(x_1-x_2\right)^2 \tag{32}$$

容易发现，任何满足 $x_1 = x_2$ 的点，都会使得 $y = f(x_1, x_2)$ 为 0。

(31) 中矩阵 $\boldsymbol{A}$ 特征值为 $\lambda_1 = 0$ 和 $\lambda_2 = 1$，对应特征向量如下：

$$\boldsymbol{v}_1=\begin{bmatrix}-\frac{\sqrt{2}}{2}\\ -\frac{\sqrt{2}}{2}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{v}_2=\begin{bmatrix}-\frac{\sqrt{2}}{2}\\ \frac{\sqrt{2}}{2}\end{bmatrix} \tag{33}$$

图 5 展示 (31) 对应的旋转山谷面。同样，小球沿图 5 中 $\boldsymbol{v}_1$ (特征值为 0 对应特征向量) 方向运动，函数值没有任何变化。这条直线上的点都是 (32) 二元函数极小值点。

(32) 梯度向量为：

$$\nabla f\left(\boldsymbol{x}\right)=\begin{bmatrix}\frac{\partial f}{\partial x_1}\\ \frac{\partial f}{\partial x_2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_1-x_2\\ -x_1+x_2\end{bmatrix} \tag{34}$$

观察图 5 (b)，容易发现梯度下降向量长度各有不同，但是它们相互平行，且都垂直于等高线，指向函数减小方向，即下山方向。

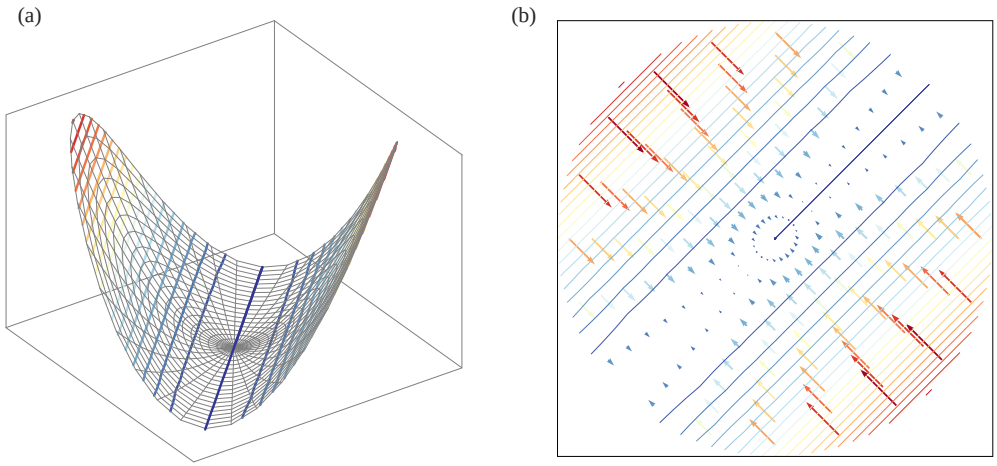


图 5. 旋转山谷面，箭头指向下山方向

21.5 开口朝下抛物面：负定

最简单的负定矩阵是单位矩阵取负，即$-\boldsymbol{I}$。$-\boldsymbol{I}$ 的特征值都为−1。

下面也用 2 × 2 矩阵讨论负定。如下 $\boldsymbol{A}$ 为负定矩阵：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & -2\end{bmatrix} \tag{35}$$

构造如下二元函数 $y = f(x_1, x_2)$：

$$y=f\left(x_1,x_2\right)=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1 & x_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & -2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=-x_1^2-2x_2^2 \tag{36}$$

观察上式，容易发现只有当 $x_1 = 0$ 且 $x_2 = 0$ 时，$y = f(x_1, x_2) = 0$。

很容易求得 $\boldsymbol{A}$ 特征值分别为 $\lambda_1 = -2$ 和 $\lambda_2 = -1$，对应特征向量分别为：

$$\boldsymbol{v}_1=\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{v}_2=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix} \tag{37}$$

图 6 展示负定矩阵对应曲面，容易发现 $y = f(x_1, x_2)$ 对应曲面为凹面。在曲面最大值处放置一个小球，小球处于不稳定平衡状态。受到轻微扰动后，小球沿着任意方向运动，都会下落。

(36) 中 $y = f(x_1, x_2)$ 梯度向量为：

$$\nabla f\left(\boldsymbol{x}\right)=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f}{\partial x_1}\\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-2x_1\\ -4x_2\end{bmatrix} \tag{38}$$

如图 6 所示，梯度下降向量指向均背离最大值点。

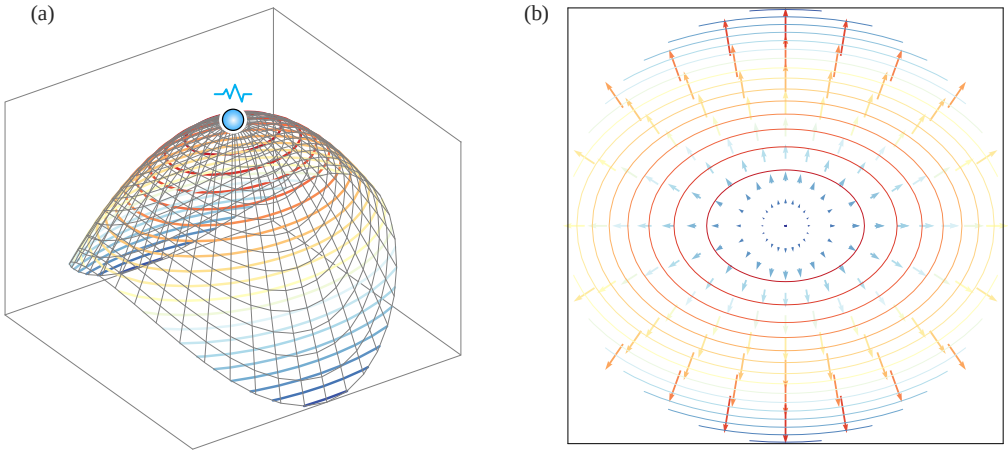


图 6. 负定矩阵对应曲面，箭头指向下山方向

21.6 山脊面：半负定

下面看一个半负定矩阵例子，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 取值如下：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix} \tag{39}$$

构造 $y = f(x_1, x_2)$：

$$y=f\left(x_1,x_2\right)=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1 & x_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=-x_2^2 \tag{40}$$

$x_2 = 0$，x_1 为任意值，上式为 0。矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩为 1，$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = 1$。

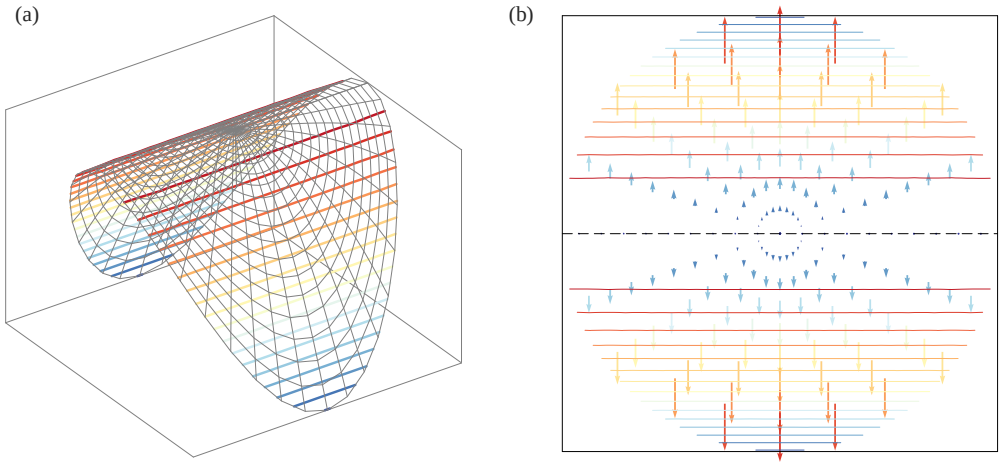


图 7. 半负定矩阵对应山脊面，箭头指向下山方向

图 7 展示半负定矩阵对应山脊面，发现曲面有无数个极大值。在任意极大值 (山脊) 处放置一个小球，受到扰动后，小球会沿着曲面滚下。然而，沿着山脊方向运动，函数值没有任何变化。

(40) 梯度向量为：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -2x_2 \end{bmatrix} \tag{41}$$

图 7 (b) 中梯度下降方向平行于纵轴，指向函数值减小方向。

21.7 双曲抛物面：不定

本节最后聊一下不定矩阵情况。举个例子，$\boldsymbol{A}$ 为：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{42}$$

构造函数 $y = f(x_1, x_2)$：

$$y = f(x_1, x_2) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = x_1^2 - x_2^2 \tag{43}$$

求得矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对应特征值为 $\lambda_1 = -1$ 和 $\lambda_2 = 1$，对应特征向量如下：

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{44}$$

图 8 展示 $y = f(x_1, x_2)$ 对应曲面。

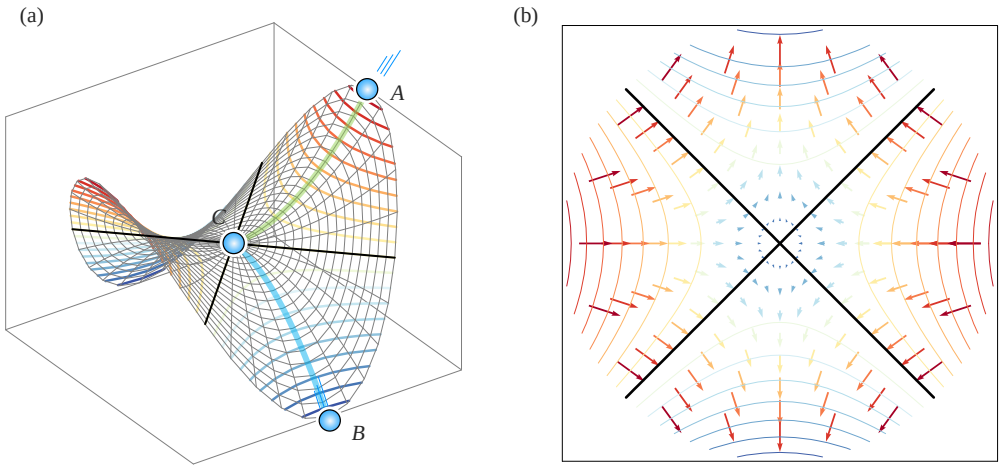


图 8. 不定矩阵对应曲面，马鞍面，箭头指向下山方向

当 $y \neq 0$，曲面对应等高线为双曲线。当 $y = 0$，曲面对应等高线是两条在 x_1x_2 平面内直线 (图 8 (a) 中黑色直线)，它们是双曲线渐近线。

图 8 告诉我们，曲面边缘不同位置放置小球会有完全不同运动方向。A 点处松手小球会向向着中心方向滚动，B 点处小球会朝远离中心方向滚动。

$y = f(x_1, x_2)$ 梯度向量为：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ -2x_2 \end{bmatrix} \tag{45}$$

图 8 所示马鞍面中心 C 既不是极小值点，也不是极大值点；图 8 中马鞍面中心点被称作为**鞍点** (saddle point)。另外，沿着图 8 中黑色轨道运动，小球高度没有任何变化。

旋转双曲抛物面

图 8 中马鞍面顺时针旋转 45°得到图 9 曲面。图 9 曲面对应矩阵 $\boldsymbol{A}$ 如下：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \tag{46}$$

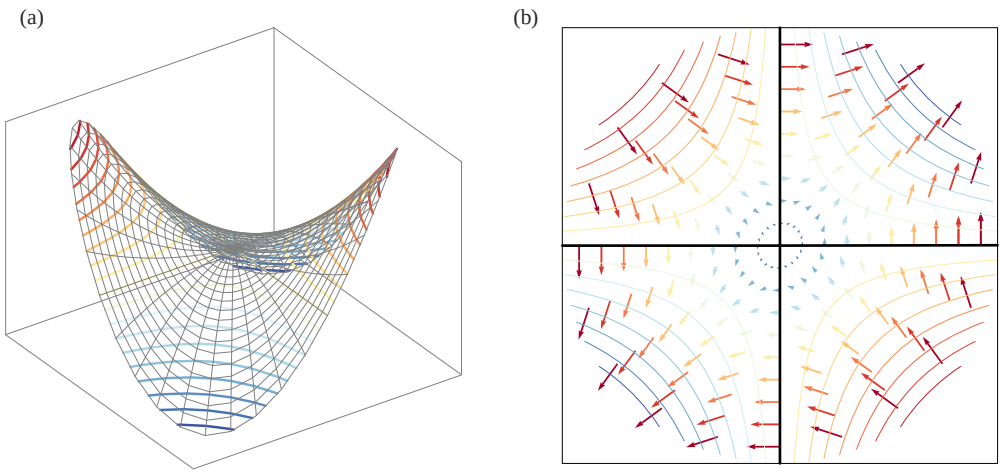


图 9. 不定矩阵对应曲面，旋转马鞍面，箭头指向下山方向

构造如下二元函数 $y = f(x_1, x_2)$：

$$y = f(x_1, x_2) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = -2x_1x_2 \tag{47}$$

在 $y = f(x_1, x_2)$ 为非零定值时，上式相当于反比例函数。

(47) 的梯度向量为：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2x_2 \\ -2x_1 \end{bmatrix} \tag{48}$$

请大家自行分析图 8 两幅图。

在 `Bk4_Ch21_02.py` 基础上，我们用 Streamlit 和 Plotly 制作了一个 App，可以调节参数 a、b、c 观察图像变化。App 还显示矩阵的特征值分解结果。请参考 Streamlit_Bk4_Ch21_02.py。

21.8 多极值曲面：局部正定性

判定二元函数极值点

本系列丛书在《数学要素》一册介绍过如何判定二元函数 $y = f(x_1, x_2)$ 的极值。对于 $y = f(x_1, x_2)$，一阶偏导数 $f_{x1}(x_1, x_2) = 0$ 和 $f_{x2}(x_1, x_2) = 0$ 同时成立的点 (x_1, x_2) 为二元函数 $f(x_1, x_2)$ 的驻点。如图 10 所示，驻点可以是极大值、极小值或鞍点。

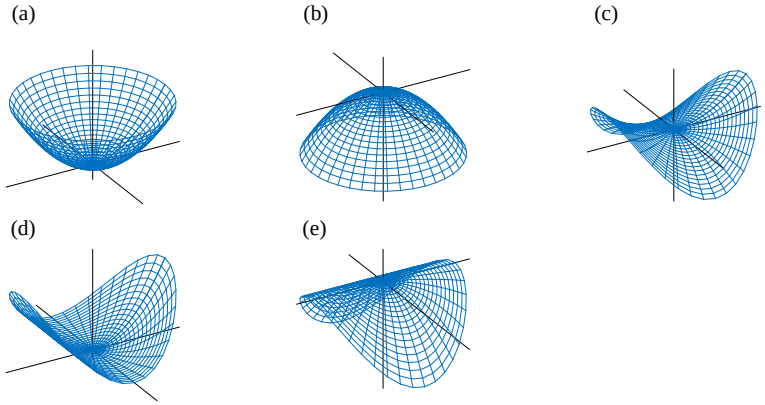


图 10. 二元函数驻点的三种情况

当时，我们聊过为了进一步判定驻点到底是极大值、极小值或是鞍点，需要知道二元函数 $f(x_1, x_2)$ 二阶偏导。如果 $f(x_1, x_2)$ 在 (a, b) 邻域内连续，且 $f(x_1, x_2)$ 二阶偏导连续。令，

$$A = f_{x1x1}, \quad B = f_{x1x2}, \quad C = f_{x2x2} \tag{49}$$

$f(a, b)$ 是否为极值点可以通过如下条件判断：

a) $AC - B^2 > 0$ 存在极值，且当 $A < 0$ 有极大值，$A > 0$ 时有极小值；

b) $AC - B^2 < 0$ 没有极值；

c) $AC - B^2 = 0$，可能有极值，也可能没有极值，需要进一步讨论。

当时我们留了一个问题，$AC - B^2$ 这个表达值的含义到底是什么？本节就来回答这个问题。

(13) 中函数的**黑塞矩阵** (Hessian matrix) 为：

$$\boldsymbol{H} = \frac{\partial^2\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\right)}{\partial \boldsymbol{x}\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} = 2\boldsymbol{A} = 2\begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \tag{50}$$

注意上式中 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵。

$\boldsymbol{A}$ 的行列式值为：

$$\left|\boldsymbol{A}\right| = ac - b^2 \tag{51}$$

相信大家已经在上式中看到和 $AC - B^2$ 一样的形式。

对于二元函数，$\boldsymbol{A}$ 的形状为 2 × 2。$\boldsymbol{A}$ 为正定或负定时，$\boldsymbol{A}$ 的两个特征值同号，因此 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值都大于 0。而 a 的正负则决定了开口方向，也就是决定了 $\boldsymbol{A}$ 是正定还是负定，因此决定了极大值或极小值。

再进一步，a 实际上是 $\boldsymbol{A}$ 的一阶主子式，即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第一行、第一列元素构成矩阵的行列式值。这实际上引出了判断正定的第三个方法——$\boldsymbol{A}$ 正定的充分必要条件为 $\boldsymbol{A}$ 的顺序主子式全大于零。

举个例子

继续采用《数学要素》一书中反复出现的多极值曲面的例子。

图 11 为曲面平面等高线。图中，深绿色线代表 $f_{x1}(x_1, x_2) = 0$，深蓝色线代表 $f_{x2}(x_1, x_2) = 0$。两个颜色线交点标记为 ×。也就是说，图中 × 对应的位置为梯度向量为 $\boldsymbol{0}$。

观察图中等高线不难发现，I、II、III 点为极大值点，其中 I 为最大值点。IV、V、VI 为极小值点，其中 IV 为最小值点。VII、VIII、IX 是鞍点。

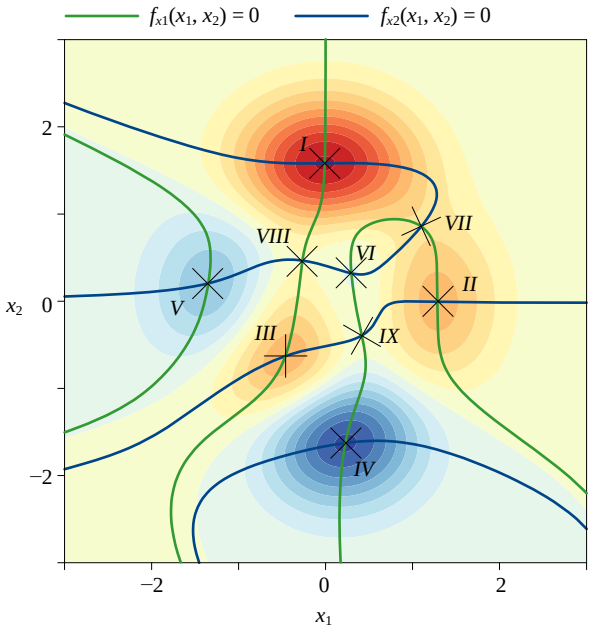


图 11. $f_{x1}(x_1, x_2) = 0$ 和 $f_{x2}(x_1, x_2) = 0$ 同时投影在 $f(x_1, x_2)$ 曲面填充等高线，来自本系列丛书《数学要素》

图 12 给出的是二元函数的梯度向量图 (和梯度下降向量方向相反)。极大值点处，梯度向量 (上山方向) 汇聚；极小值点处，梯度向量发散。这一点很好理解，在极大值点附近，朝着极大值走就是上山；相反，在极小值点附近，背离极小值走则对应上山，朝着极小值走则是下山。

而鞍点处，有些梯度向量指向鞍点，有些梯度向量背离鞍点。也就是说，鞍点处，既可以下山，也可以上山。

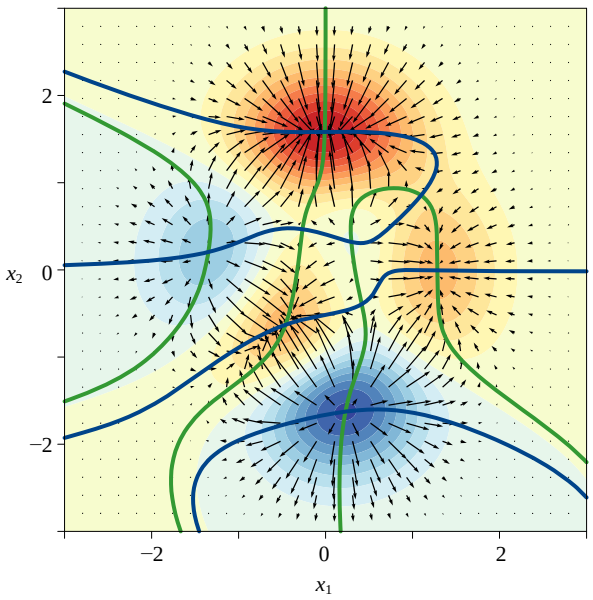


图 12. $f(x_1, x_2)$ 梯度向量图，箭头指向上山方向，即梯度向量方向

图 13 所示为二次函数黑塞矩阵行列式值对应的等高线图，阴影圈出来的六个点对应行列式值为正，因此它们是要考察的极值点。图 13 中虚线为行列式值为 0 对应位置。

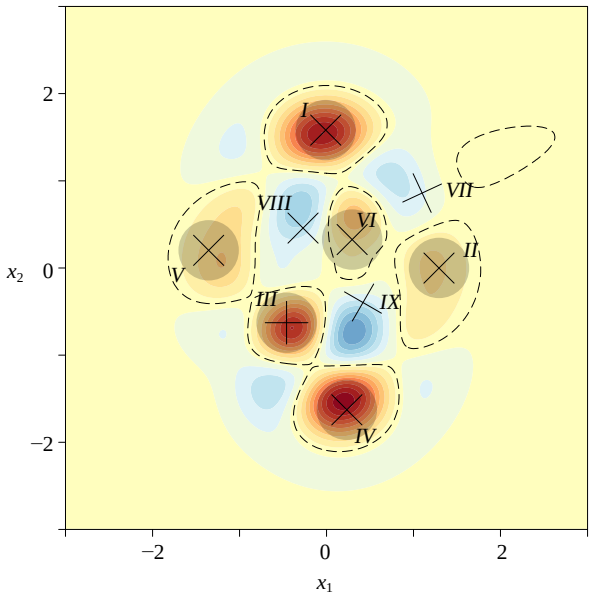


图 13. 黑塞矩阵行列式值

根据图 14 所示一阶主子式对应等高线。通过一阶主子式值的正负，即 f_{x1x1} 正负，可以进一步判定极值点为极大值或极小值点，最终得出的结论和图 11 一致。

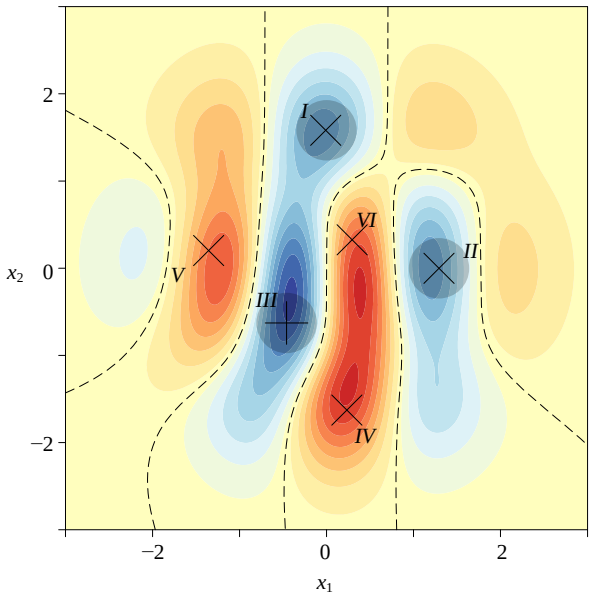


图 14. 一阶主子式正负

更一般情况

对于多元函数 $f(\boldsymbol{x})$，利用本书第 17 章介绍的二次逼近 $f(\boldsymbol{x})$ 可以写成：

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}) &\approx f(\boldsymbol{x}_P) + \nabla f(\boldsymbol{x}_P)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_P) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_P)^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\boldsymbol{x}_P)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_P) \\ &= f(\boldsymbol{x}_P) + \nabla f(\boldsymbol{x}_P)^{\mathrm{T}}\Delta\boldsymbol{x} + \frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\boldsymbol{x}_P)\Delta\boldsymbol{x} \\ &= f(\boldsymbol{x}_P) + \nabla f(\boldsymbol{x}_P)^{\mathrm{T}}\Delta\boldsymbol{x} + \frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}\Delta\boldsymbol{x} \end{aligned} \tag{52}$$

其中 $\boldsymbol{x}_P$ 为展开点。

假设 $\boldsymbol{x}_P$ 处存在梯度向量，且梯度向量为 $\boldsymbol{0}$。

当 $\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x}_P$ 时，$\nabla f(\boldsymbol{x}_P)^{\mathrm{T}}\Delta\boldsymbol{x} \to 0$。但是如果在 $\boldsymbol{x}_P$ 点处黑塞矩阵 $\boldsymbol{H}$ 为正定，$\frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}\Delta\boldsymbol{x}$ 为正。这意味着：

$$f(\boldsymbol{x}_P) + \underbrace{\nabla f(\boldsymbol{x}_P)^{\mathrm{T}}\Delta\boldsymbol{x}}_{\to 0} + \underbrace{\frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}\Delta\boldsymbol{x}}_{+} > f(\boldsymbol{x}_P) \tag{53}$$

这种情况称 $\boldsymbol{x}_P$ 局部正定，对应 $\boldsymbol{x}_P$ 为极小值点。这个判断也适用于半正定情况，不过要将上式的 > 改为 ⩾。

同理，如果在 $\boldsymbol{x}_P$ 点处黑塞矩阵 $\boldsymbol{H}$ 为负定，$\frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}\Delta\boldsymbol{x}$ 为负，因此：

$$f(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}_P) + \underbrace{\nabla f(\boldsymbol{x}_P)^{\mathrm{T}} \Delta \boldsymbol{x}}_{\to 0} + \underbrace{\frac{1}{2} \Delta \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{H} \Delta \boldsymbol{x}}_{<} < f(\boldsymbol{x}_P) \tag{54}$$

我们称 $\boldsymbol{x}_P$ 局部负定，对应 $\boldsymbol{x}_P$ 为极大值点。如上判断也适用于半负定情况，同样将上式的 < 改为 ≤。

我们用 Streamlit 和 Plotly 制作了一个 App 可视化本节多极值曲面。这个 App 采用三种可视化方案：1) 3D 曲面；2) 平面等高线 + 箭头图；3) 平面等高线 + 水流图。水流图相当于将梯度向量连起来，形似水流。注意，水流图中，水流汇聚点为极大值。大家思考应该如何修改代码，让水流汇聚点为极小值点。请参考 Streamlit_Bk4_Ch21_03.py。

本章把曲面、梯度向量、正定性、极值这几个重要的概念有机的联系起来。本章给出的各种例子告诉我们几何视角是学习线性代数的捷径。

请大家再次回顾图 15 给出的五种情况，并且将正定性、极值 (最值) 对号入座。相信大家学完本章之后，会觉得正定性变得极容易理解。

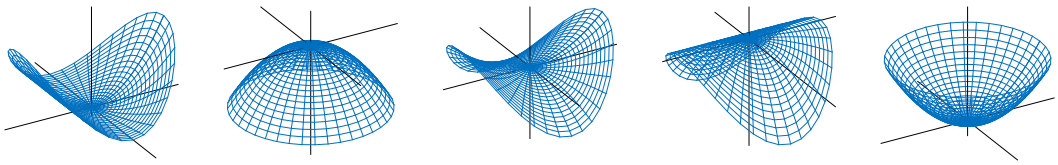


图 15. 总结本章重要内容的五幅图

22 Statistics Meet Linear Algebra

数据与统计

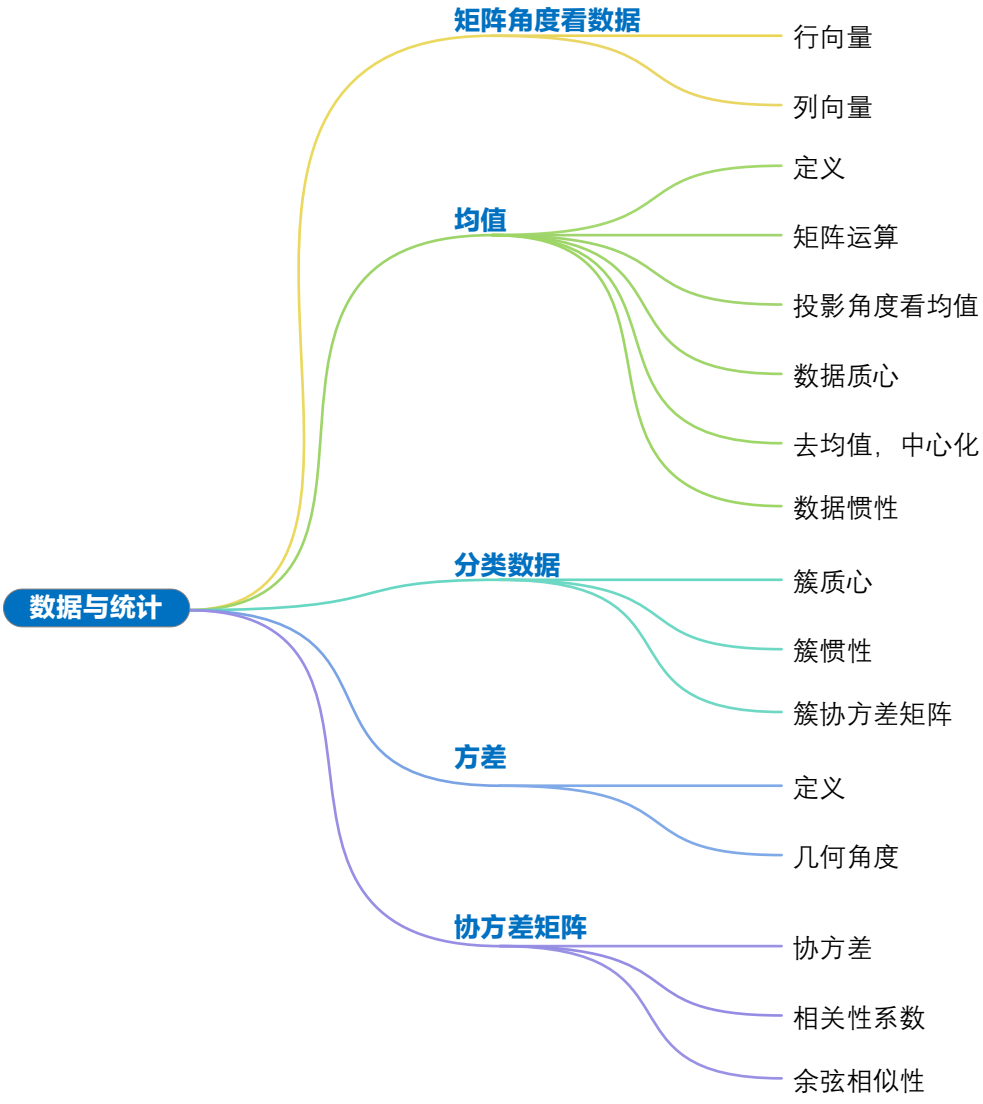
有数据的地方，必有矩阵，亦必有统计

毫无争议的是，人类无法准确地地判断事物的真伪，我们能做就是遵循更大的可能性。

It is truth very certain that, when it is not in one's power to determine what is true, we ought to follow what is more probable.

—— 勒内·笛卡尔 (René Descartes) | 法国哲学家、数学家、物理学家 | 1596 ~ 1650

- `numpy.linalg.norm()` 计算范数
- `numpy.ones()` 创建全 1 向量或全 1 矩阵
- `seaborn.heatmap()` 绘制热图
- `seaborn.kdeplot()` 绘制核密度估计曲线



22.1 统计 + 线性代数：以鸢尾花数据为例

本章大部分内容以鸢尾花数据为例，从线性代数运算视角讲解均值、方差、协方差、相关性系数、协方差矩阵、相关性系数矩阵等统计相关知识点。

鸢尾花数据集

回顾鸢尾花数据集，不考虑鸢尾花品种，数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的形状为 150 × 4，即 150 行、4 列。

鸢尾花数据集共有四个特征——花萼长度、花萼宽度、花瓣长度和花瓣宽度。这些特征依次对应 $\boldsymbol{X}$ 的四列。图 1 所示为用热图可视化鸢尾花数据集。数据的每一行代表一朵花，每一列代表一个特征上的所有数据。

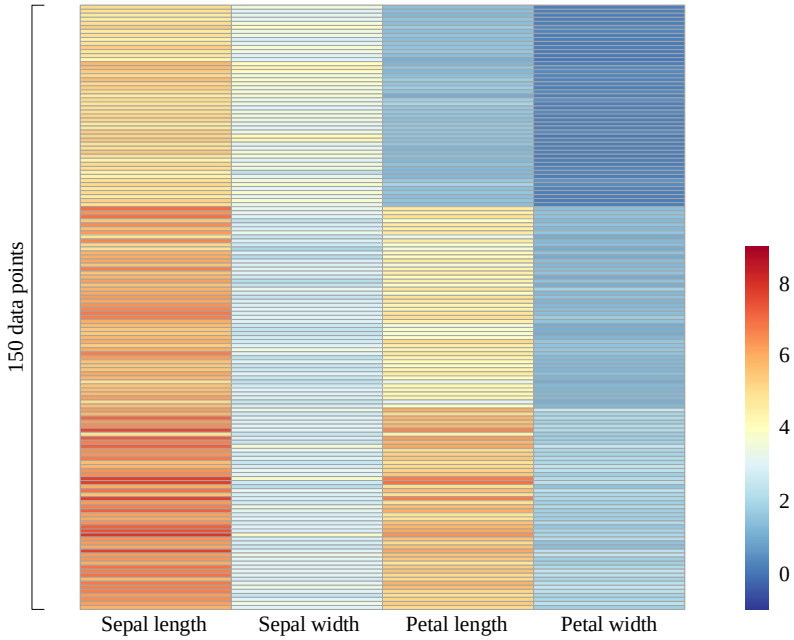


图 1. 鸢尾花数据，原始数据矩阵 $\boldsymbol{X}$，单位为厘米 (cm)

`Bk4_Ch22_01.py` 中 `Bk4_Ch22_01_A` 部分绘制图 1。

22.2 均值：线性代数视角

从样本数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 中，取出任意一列列向量 $\boldsymbol{x}_j$。$\boldsymbol{x}_j$ 代表着第 j 特征的所有样本数据构成的列向量：

$$\boldsymbol{x}_j = \begin{bmatrix} x_{1,j} \\ x_{2,j} \\ \vdots \\ x_{n,j} \end{bmatrix} \tag{1}$$

列向量 $\boldsymbol{x}_j$ 对应随机变量 X_j。

通过样本数据估算随机变量 X_j 的期望值 (均值) $\mathrm{E}(X_j)$：

$$\mathrm{E}\left(X_j\right) = \mu_j = \frac{x_{1,j} + x_{2,j} + \cdots + x_{n,j}}{n} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_{i,j} \tag{2}$$

⚠ 注意，(2) 上式中 $1/n$ 为权重。计算均值时，(2) 中每个数据点为等概率。我们以后还会遇到加权平均值 (weighted average)，也就是说计算均值时不同的数据点权重不同。

本书中，$\mathrm{E}(X_j)$ 等价于 $\mathrm{E}(\boldsymbol{x}_j)$。$\mathrm{E}(\boldsymbol{x}_j)$ 对应的线性代数运算如下：

$$\mathrm{E}\left(\boldsymbol{x}_j\right) = \mathrm{E}\left(X_j\right) = \mu_j = \frac{\boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{n} = \frac{\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j}{n} = \frac{\boldsymbol{x}_j \cdot \boldsymbol{1}}{n} = \frac{\boldsymbol{1} \cdot \boldsymbol{x}_j}{n} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_{i,j} \tag{3}$$

其中，$\boldsymbol{1}$ 为全 1 列向量，行数和 $\boldsymbol{x}_j$ 一致。

(3) 左乘 n 可以得到如下等式：

$$n\mu_j = n\mathrm{E}\left(\boldsymbol{x}_j\right) = \boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1} = \boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j = \boldsymbol{x}_j \cdot \boldsymbol{1} = \boldsymbol{1} \cdot \boldsymbol{x}_j \tag{4}$$

图 2 所示为计算 $\mathrm{E}(\boldsymbol{x}_j)$ 对应的矩阵运算示意图。

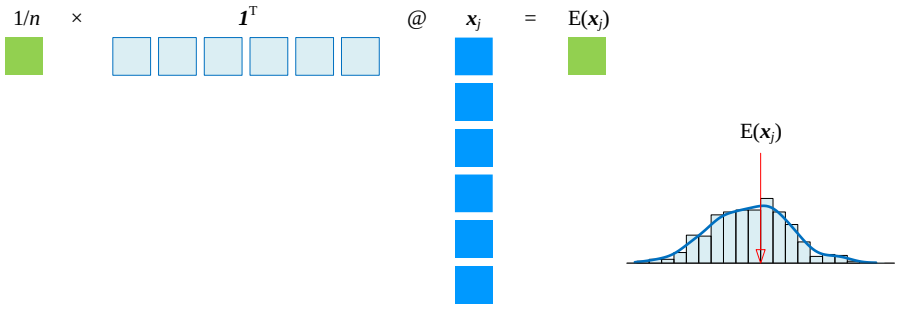


图 2. 计算 $\boldsymbol{x}_j$ 期望值/均值

利用矩阵运算分别得到鸢尾花的四个特征的期望值：

$$\begin{cases} \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_1) = \mu_1 = \underset{\text{Sepal length}}{5.843} \\ \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_2) = \mu_2 = \underset{\text{Sepal width}}{3.057} \\ \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_3) = \mu_3 = \underset{\text{Petal length}}{3.758} \\ \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_4) = \mu_4 = \underset{\text{Petal width}}{1.199} \end{cases} \tag{5}$$

向量视角

下面我们聊一聊解释 $\mathrm{E}(\boldsymbol{x}_j)$ 的有趣角度——投影。

如图 3 所示，$\mathrm{E}(\boldsymbol{x}_j)$ 是一个标量，而向量 $\mathrm{E}(\boldsymbol{x}_j)\boldsymbol{1}$ 相当于向量 $\boldsymbol{x}_j$ 在 $\boldsymbol{1}$ 方向上投影的向量投影结果：

$$\mathrm{E}(\boldsymbol{x}_j)\boldsymbol{1} = \mathrm{proj}_{\boldsymbol{1}}(\boldsymbol{x}_j) = \frac{\boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}\boldsymbol{1} = \frac{\boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{n}\boldsymbol{1} \tag{6}$$

⚠ 再次注意，$\mathrm{E}(\boldsymbol{x}_j)$ 为标量；$\mathrm{E}(\boldsymbol{x}_j)\boldsymbol{1}$ 为向量，和 $\boldsymbol{1}$ 平行。

图 3 中，$\boldsymbol{1}$ 方向上解释了 $\boldsymbol{x}_j$ 中 $\mathrm{E}(\boldsymbol{x}_j)\boldsymbol{1}$ 这部分分量，没有被解释的向量分量为：

$$\boldsymbol{x}_j - \mathrm{proj}_{\boldsymbol{1}}(\boldsymbol{x}_j) = \boldsymbol{x}_j - \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_j)\boldsymbol{1} \tag{7}$$

(7) 这部分垂直于 $\boldsymbol{1}$，也就是说：

$$\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}_j - \mathrm{proj}_{\boldsymbol{1}}(\boldsymbol{x}_j)\right) = \boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}_j - \underbrace{\frac{\boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{n}}_{\text{Scalar}}\boldsymbol{1}\right) = \boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j - \frac{\boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{n}\underbrace{\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}_{n} = \boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1} = 0 \tag{8}$$

注意，上式中 $\boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}$ 为标量，因此 $\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}\right)\boldsymbol{1} = \left(\boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}\right)\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}$。均值作为一个统计量，它能解释列向量 $\boldsymbol{x}_j$ 一部分特征。$\boldsymbol{x}_j - \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_j)\boldsymbol{1}$ 将在标准差 (方差平方根) 中加以解释。

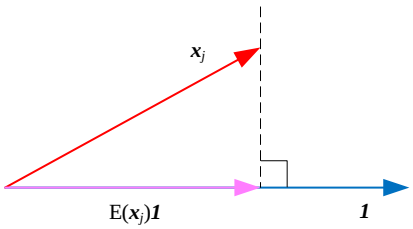


图 3. 投影角度看期望值

两个极端例子

如果 $\boldsymbol{x}_j$ 所有元素均相同，比如全都是 k，那么 $\boldsymbol{x}_j$ 可以写成：

$$\boldsymbol{x}_j = \begin{bmatrix} k \\ k \\ \vdots \\ k \end{bmatrix} = k \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} = k\boldsymbol{1} \tag{9}$$

这种情况，$\boldsymbol{x}_j$ 和 $\boldsymbol{1}$ 共线。

再举个相反的例子，如果 $\boldsymbol{x}_j$ 和 $\boldsymbol{1}$ 垂直，

$$\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j = 0 \tag{10}$$

也就是意味着 $\mathrm{E}(\boldsymbol{x}_j) = 0$。也就是说，$\boldsymbol{x}_j$ 在 $\boldsymbol{1}$ 方向的标量投影为 0。

对于最小二乘法线性回归，$\boldsymbol{x}_j - \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_j)\boldsymbol{1}$ 垂直于 $\boldsymbol{1}$ 这一结论格外重要。本系列丛书《数据科学》将深入讨论如何用向量视角解释最小二乘法线性回归。

22.3 质心：均值排列成向量

上一节，我们探讨了一个特征的均值，本节介绍数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的每列特征均值构成的向量，我们管这个向量叫做数据的**质心** (centroid)。图 4 所示为平面上数据 $\boldsymbol{X}$ 的质心位置。

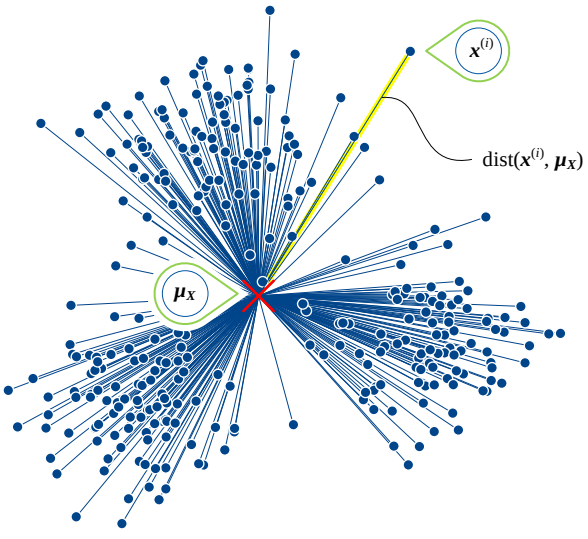


图 4. 平面上数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 质心位置

列向量

$\boldsymbol{X}$ 样本数据的质心 $\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}$ 定义如下：

$$\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_1) \\ \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_2) \\ \vdots \\ \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_D) \end{bmatrix} \tag{11}$$

⚠ 注意，为了方便运算，$\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}$ 被定义为列向量。

比如，在多元高斯分布中，我们会用到列向量 $\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}$。比如，多元高斯分布的概率密度函数：

$$f_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x}) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}})\right)}{(2\pi)^{\frac{D}{2}} |\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} \tag{12}$$

上式中，几何角度来看，$\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}$ 相当于“平移”，$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 则提供“缩放 + 旋转”。对这部分内容感到生疏的读者，请回顾本书第 20 章。

前文介绍过，$\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}$ 可以通过如下矩阵运算获得：

$$\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_D \end{bmatrix} = \frac{\left(\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\right)^{\mathrm{T}}}{n} = \frac{\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{n} \tag{13}$$

其中，样本数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 为 n 行、D 列矩阵，即有 n 个样本，D 个特征。

整理 (13) 得到两个等式：

$$\begin{cases} \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1} = n\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}} \\ \boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} = n\left(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}\right)^{\mathrm{T}} \end{cases} \tag{14}$$

举个例子，鸢尾花数据质心位置：

$$\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}} = \begin{bmatrix} 5.843 \\ 3.057 \\ 3.758 \\ 1.199 \end{bmatrix} \tag{15}$$

本书第 5 章讲过上述内容。

行向量

为了区分，丛书特别定义 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 为行向量，即：

$$\begin{aligned} \mathrm{E}(\boldsymbol{X}) &= \begin{bmatrix} \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_1) & \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_2) & \cdots & \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_D) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_D \end{bmatrix} \\ &= (\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}})^{\mathrm{T}} = \frac{\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}}{n} \end{aligned} \tag{16}$$

整理 (16)，可以得到：

$$\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} = n\mathrm{E}(\boldsymbol{X}) \tag{17}$$

图 5 所示为计算质心示意图，以及 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 和 $\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}$ 之间关系。

$\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 一般用在和数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 相关的计算中，比如中心化 (去均值) $\boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X})$。$\boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 用到了本书第 4 章介绍的“广播原则”。

⚠ 注意，本系列丛书中，$\mathrm{E}(\boldsymbol{\chi})$ 仍然为列向量。$\boldsymbol{\chi}$ 代表 X_1、X_2 … 等随机变量构成的列向量。$\mathrm{E}(\bullet)$ 为求期望值运算符，作用于列向量 $\boldsymbol{\chi}$，结果还是列向量。而 $\boldsymbol{X}$ 的每一列代表一个随机变量，$\mathrm{E}(\bullet)$ 作用于数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 时，$\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 为行向量。

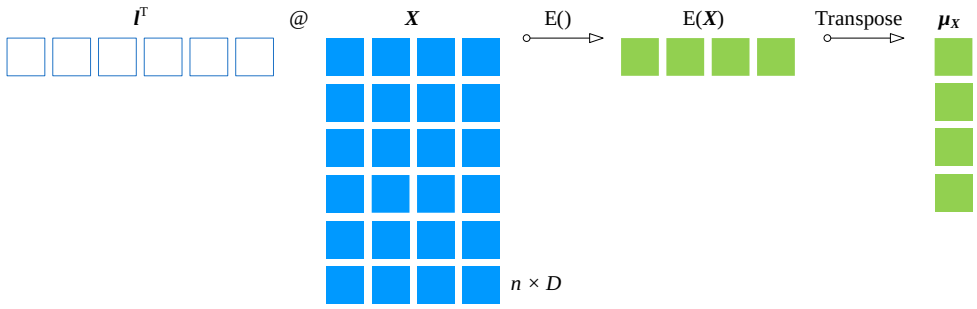


图 5. 计算 $\boldsymbol{X}$ 样本数据的质心 $\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}$

22.4 中心化：平移

中心化、去均值

数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 中第 j 特征特征数据 $\boldsymbol{x}_j$ 减去其均值 μ_j，对应的矩阵运算为：

$$\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{1}\mu_j = \boldsymbol{x}_j - \frac{1}{n}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j = \underbrace{\left(\boldsymbol{I} - \frac{1}{n}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\right)}_{\boldsymbol{M}}\boldsymbol{x}_j \tag{18}$$

上式没有使用“广播原则”。其中，$\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}$ 为全 1 列向量和其转置乘积，结果为方阵。

而数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 中每一列数据 $\boldsymbol{x}_j$ 分别减去对应本列均值 μ_j 得到 $\boldsymbol{X}_c$，对应矩阵运算为：

$$\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{X} - \boldsymbol{1}\left(\frac{\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}}{n}\right)^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{X} - \frac{1}{n}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} = \underbrace{\left(\boldsymbol{I} - \frac{1}{n}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\right)}_{\boldsymbol{M}}\boldsymbol{X} \tag{19}$$

我们管这个运算叫做数据**中心化** (centralize)，也叫**去均值** (demean)。

令：

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{I} - \frac{1}{n}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}} \tag{20}$$

本章后文称 $\boldsymbol{M}$ 为中心化矩阵，或去均值矩阵。

为了方便，我们一般利用广播原则来中心化 $\boldsymbol{X}$，即 $\boldsymbol{X}$ 减去行向量 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 得到 $\boldsymbol{X}_c$：

$$\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X}) \tag{21}$$

中心化后，数据 $\boldsymbol{X}_c$ 质心位于原点 $\boldsymbol{0}$。

中心化矩阵

我们在 (18) 和 (19) 都看到了中心化矩阵 $\boldsymbol{M}$，下面我们简单分析一下这个特殊矩阵。

将 $\boldsymbol{M}$ 展开得到：

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{I} - \frac{1}{n}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1/n & 1/n & \cdots & 1/n \\ 1/n & 1/n & \cdots & 1/n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1/n & 1/n & \cdots & 1/n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1-1/n & -1/n & \cdots & -1/n \\ -1/n & 1-1/n & \cdots & -1/n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1/n & -1/n & \cdots & 1-1/n \end{bmatrix} \tag{22}$$

矩阵 $\boldsymbol{M}$ 为对称矩阵，$\boldsymbol{M}$ 的主对角线元素为 $1 - 1/n$，剩余元素为 $-1/n$。

矩阵 $\boldsymbol{M}$ 为幂等矩阵，即满足：

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{M} = \boldsymbol{M} \tag{23}$$

将 (20) 代入上式，展开整理：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{M}\boldsymbol{M} &= \left(\boldsymbol{I} - \frac{1}{n}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\right)\left(\boldsymbol{I} - \frac{1}{n}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\right) = \boldsymbol{I}\boldsymbol{I} - \frac{1}{n}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{I} - \boldsymbol{I}\frac{1}{n}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}} + \frac{1}{n}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\frac{1}{n}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}} \\ &= \boldsymbol{I} - \frac{2}{n}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}} - \frac{1}{n}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I} - \frac{1}{n}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{M} \end{aligned} \tag{24}$$

我们在后文还会用到 $\boldsymbol{M}$ 这个中心化矩阵。

(24) 中所有全 1 列向量 $\boldsymbol{1}$ 等长，形状均为 $n \times 1$。因此 $\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}$ 结果为 $n \times n$ 方阵，矩阵中每个元素都是 1。而 $\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}$ 结果为标量 n。我们也会在很多运算中看到 $\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}$ 中两个 $\boldsymbol{1}$ 长度不同。此时，$\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}$ 结果为长方阵。此外，(24) 中两个单位矩阵 $\boldsymbol{I}$ 也都是 $n \times n$ 方阵。大家遇到单位矩阵时要注意其形状，比如 $\boldsymbol{I}\boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{I} = \boldsymbol{A}_{m\times n}$ 这个等式左右的单位矩阵形状显然不同，左边 $\boldsymbol{I}$ 形状为 $m \times m$，右边 $\boldsymbol{I}$ 形状为 $n \times n$。

标准化：平移 + 缩放

在中心化的基础上，我们可以进一步对 $\boldsymbol{X}_c$ 进行**标准化** (standardization 或 z-score normalization)。计算过程为，对原始数据先去均值，然后每一列再除以对应标准差。对应的矩阵运算如下：

$$\boldsymbol{Z}_{\boldsymbol{X}} = \boldsymbol{X}_c \boldsymbol{S}^{-1} = \left(\boldsymbol{X} - \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\right)\right)\boldsymbol{S}^{-1} \tag{25}$$

其中，缩放矩阵 $\boldsymbol{S}$ 为：

$$\boldsymbol{S} = \mathrm{diag}\left(\mathrm{diag}\left(\boldsymbol{\Sigma}\right)\right)^{\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_D \end{bmatrix} \tag{26}$$

其中，里层 diag() 提取对角线元素，结果为向量；外层 diag() 将向量展成对角方阵。

(25) 处理得到的数值实际上是原始数据的 **z 分数** (z score)，含义是距离均值若干倍的标准差偏移。比如说，标准化得到的数值为 3，也就是说这个数据距离均值 3 倍标准差偏移。数值的正负表达偏移的方向。

⚠ 注意，数据标准化过程也是一个“去单位化”过程。去单位数值有利于联系、比较单位不同、取值范围差异较大的样本数据。此外，本章不会区分总体标准差和样本标准差记号。

惯性

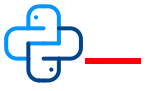
数据**惯性** (inertia) 可以用来描述样本数据紧密程度，惯性实际上就是**总离差平方和** (Sum of Squares for Deviations, SSD)，定义如下：

$$\mathrm{SSD}\left(\boldsymbol{X}\right) = \sum_{i=1}^{n} \mathrm{dist}\left(\boldsymbol{x}^{(i)}, \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\right)\right)^2 = \sum_{i=1}^{n} \left\| \boldsymbol{x}^{(i)} - \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\right) \right\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} \left\| \boldsymbol{x}^{(i)\mathrm{T}} - \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}} \right\|_2^2 \tag{27}$$

如图 4 所示，SSD 相当于样本点和质心 E($\boldsymbol{X}$) 欧氏距离平方和。

(27) 相当于中心化数据 $\boldsymbol{X}_c$ 每个行向量和自身求内积后，再求和。用迹 trace() 可以方便得到 SSD 结果：

$$\mathrm{SSD}\left(\boldsymbol{X}\right) = \mathrm{trace}\left(\boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}_c\right) = \mathrm{trace}\left(\left(\boldsymbol{X} - \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\right)\right)^{\mathrm{T}} \left(\boldsymbol{X} - \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\right)\right)\right) \tag{28}$$



Bk4_Ch22_01.py 中 Bk4_Ch22_01_B 部分绘制图 6 并计算 SSD。请大家根据本节代码自行计算并绘制标准化鸢尾花数据热图。

22.5 分类数据：加标签

大家都清楚鸢尾花样本数据有三类标签，定义为 C_1、C_2、C_3，具体如图 7 所示。

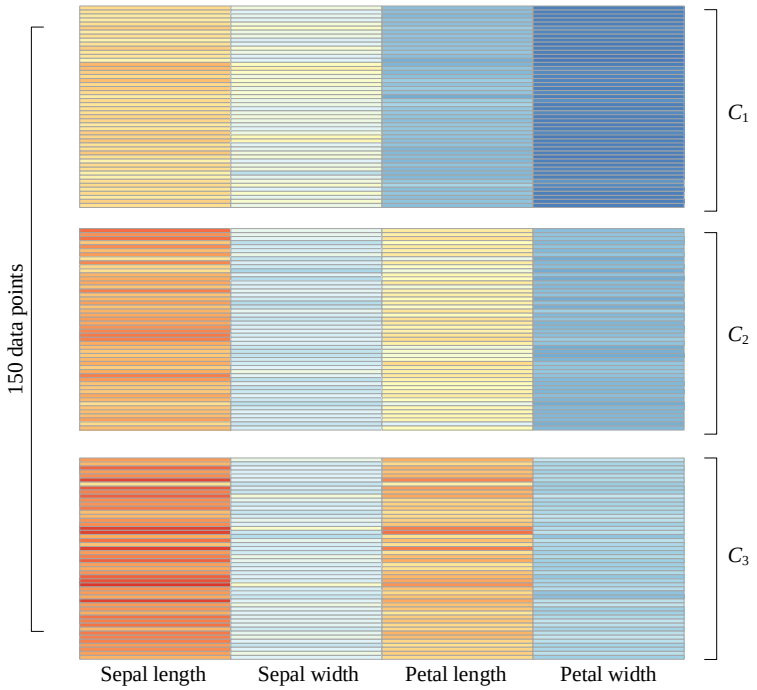


图 7. 鸢尾花数据分为三类

簇质心

类似 $\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{x}$，任意一类标签为 C_k 样本数据的簇质心 $\boldsymbol{\mu}_k$，定义如下：

$$\boldsymbol{\mu}_k = \frac{1}{\text{count}(C_k)} \sum_{i \in C_k} \boldsymbol{x}^{(i)\mathrm{T}} \tag{29}$$

公式看上去复杂，道理其实很简单。

翻译一下，对于属于某个标签 C_k 的所有样本数据 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ ($i \in C_k$)，求其各个特征平均值，构造成一个新的列向量 $\boldsymbol{\mu}_k$。图 8 所示为样本数据质心 $\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{x}$，和三个不同标签数据各自的簇质心 $\boldsymbol{\mu}_1$、$\boldsymbol{\mu}_2$ 和 $\boldsymbol{\mu}_3$ 之间的关系。

⚠ 注意，$\boldsymbol{x}^{(i)}$ 为行向量，而 $\boldsymbol{\mu}_k$ 为列向量。这就是为什么 (29) 存在转置运算。

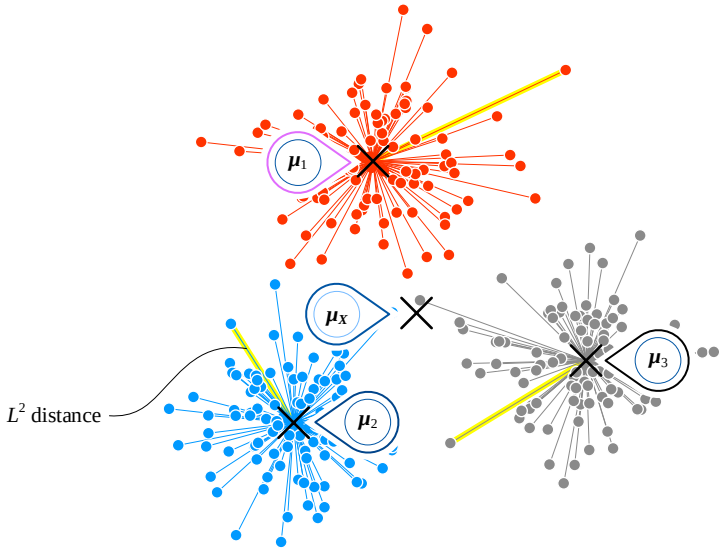


图 8. 样本数据质心 $\boldsymbol{\mu}_X$，和三类数据各自的质心 $\boldsymbol{\mu}_1$、$\boldsymbol{\mu}_2$ 和 $\boldsymbol{\mu}_3$

举个例子

假设样本数据中只有第 2、5、6 和 9 四个数据点标签为 C_1，它们构成了原始数据的一个子集：$\{(\boldsymbol{x}^{(2)}, y^{(2)} = C_1), (\boldsymbol{x}^{(5)}, y^{(5)} = C_1), (\boldsymbol{x}^{(6)}, y^{(6)} = C_1), (\boldsymbol{x}^{(9)}, y^{(9)} = C_1)\}$。

数据点有两特征，具体坐标值如下：

$$\boldsymbol{x}^{(2)} = \begin{bmatrix} 2 & 3 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}^{(5)} = \begin{bmatrix} 3 & 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}^{(6)} = \begin{bmatrix} -2 & 2 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}^{(9)} = \begin{bmatrix} 1 & 6 \end{bmatrix} \tag{30}$$

则标签为 C_1 簇质心位置为 $[1, 3]^{\mathrm{T}}$，具体运算过程如下：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}_{C1} &= \frac{1}{\operatorname{count}(C_1)} \sum_{i \in C_1} \boldsymbol{x}^{(i)\mathrm{T}} = \frac{1}{\operatorname{count}(C_1)} \left(\boldsymbol{x}^{(2)\mathrm{T}} + \boldsymbol{x}^{(5)^{\mathrm{T}}} + \boldsymbol{x}^{(6)^{\mathrm{T}}} + \boldsymbol{x}^{(9)^{\mathrm{T}}} \right) \\ &= \frac{1}{4} \left(\begin{bmatrix} 2 & 3 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} + \begin{bmatrix} 3 & 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} + \begin{bmatrix} -2 & 2 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} + \begin{bmatrix} 1 & 6 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \right) = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{31}$$

以鸢尾花数据为例，计算簇质心就是对图 7 三组标签不同样本数据分别计算质心。图 9 不同颜色的 × 代表不同标签鸢尾花的簇质心位置。

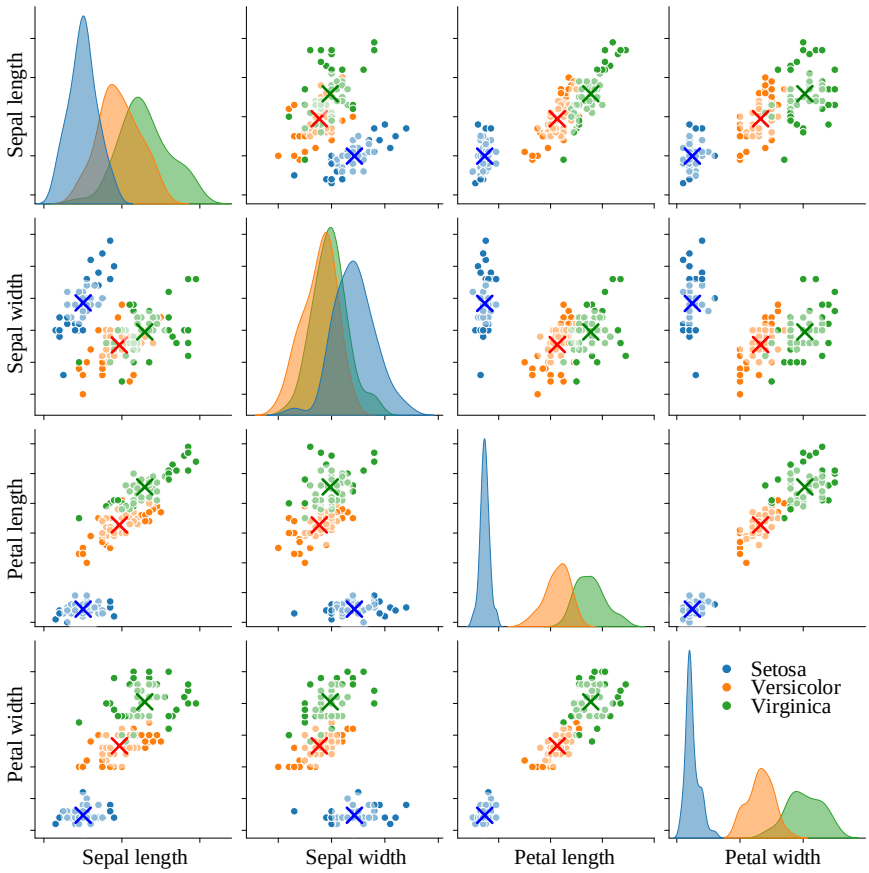


图 9. 鸢尾花数据簇质心位置

22.6 方差：均值向量没有解释的部分

对于总体来说，随机变量 X 方差的计算式为：

$$\operatorname{var}(X)=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(x_i-\mathrm{E}(X)\right)^2 \tag{32}$$

注意，上式有一个假设前提——X 为有 n 个等概率值 $1/n$ 的平均分布。否则，我们要把 $1/n$ 替换成具体的概率值 p_i。不做特殊说明时，本书默认总体或样本取值都为等概率。

对于样本来说，随机变量 X 方差可以用连续分布的样本来估计：

$$\operatorname{var}(X)=\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(x_i-\mathrm{E}(X)\right)^2 \tag{33}$$

对于数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 而言，第 j 列数据 $\boldsymbol{x}_j$ 的方差有几种不同表达方式：

$$\operatorname{var}(X_j)=\operatorname{var}(\boldsymbol{x}_j)=\sigma_j^2=\sigma_{j,j} \tag{34}$$

中心化矩阵

利用中心化矩阵 $\boldsymbol{M}$，$\sum_{i=1}^{n}\left(x_i-\mathrm{E}(X)\right)^2$ 可以写成：

$$\sum_{i=1}^{n}\left(x_i-\mathrm{E}(X)\right)^2=(\boldsymbol{Mx})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Mx}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Mx}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Mx} \tag{35}$$

此外，利用向量范数，$\sum_{i=1}^{n}\left(x_i-\mathrm{E}(X)\right)^2$ 还可以写成：

$$\sum_{i=1}^{n}\left(x_i-\mathrm{E}(X)\right)^2=\left(\boldsymbol{x}-\mathrm{E}(\boldsymbol{x})\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{x}-\mathrm{E}(\boldsymbol{x})\right)=\left\|\boldsymbol{x}-\mathrm{E}(\boldsymbol{x})\right\|_2^2 \tag{36}$$

上式也用到了“广播原则”。

向量视角

图 10 中，$\boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{1}$ 方向上向量投影为 $\mathrm{E}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{1}$。相当于 $\boldsymbol{x}$ 被分解成 $\mathrm{E}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{1}$ 和 $\boldsymbol{x}-\mathrm{E}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{1}$ 两个向量分量。

$\mathrm{E}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{1}$ 和 $\boldsymbol{1}$ 平行，而 $\boldsymbol{x}-\mathrm{E}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{1}$ 和 $\boldsymbol{1}$ 垂直。而向量 $\boldsymbol{x}-\mathrm{E}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{1}$ 的模的平方就是 (36)，即：

$$\left\|\boldsymbol{x}-\mathrm{E}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{1}\right\|_2^2=\sum_{i=1}^{n}\left(x_i-\mathrm{E}(X)\right)^2 \tag{37}$$

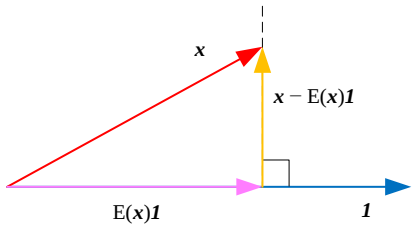


图 10. 投影角度看方差和标准差

鸢尾花数据

计算鸢尾花数据 $\boldsymbol{X}$ 每一列标准差，以向量方式表达：

$$\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{X}}=\begin{bmatrix}\underset{\text{Sepal length}}{0.825} & \underset{\text{Sepal width}}{0.434} & \underset{\text{Petal length}}{1.759} & \underset{\text{Petal width}}{0.759}\end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{38}$$

$\boldsymbol{X}$ 第三个特征，也就是花瓣长度 X_3 对应的标准差最大。图 11 所示为 KDE 估计得到的鸢尾花四个特征分布图。

KDE 是核密度估计 (Kernel Density Estimation, KDE)，采用核函数拟合样本数据点，用来模拟样本数据在某一个特征上的分布情况。这是本系列丛书《概率统计》一册要讲解的话题。

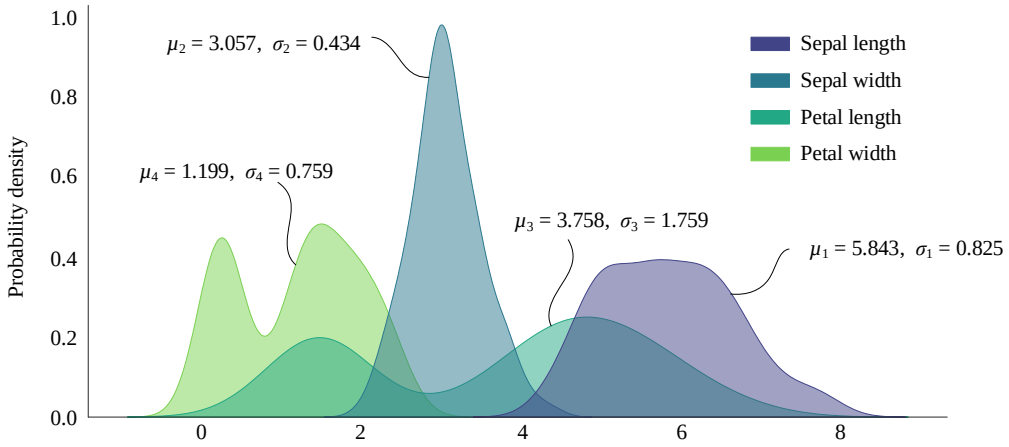


图 11. 鸢尾花数据四个特征上分布

Bk4_Ch22_01.py 中 Bk4_Ch22_01_C 部分绘制图 11。

22.7 协方差和相关性系数

协方差

不考虑样本和总体的区别，列向量数据 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 协方差 $\text{cov}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 可以通过下式获得：

$$\begin{aligned}\text{cov}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) &= \frac{\left(\boldsymbol{x}-\text{E}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{1}\right)^{\text{T}}\left(\boldsymbol{y}-\text{E}(\boldsymbol{y})\boldsymbol{1}\right)}{n} = \frac{n\boldsymbol{x}^{\text{T}}\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^{\text{T}}\boldsymbol{1}\boldsymbol{y}^{\text{T}}\boldsymbol{1}}{n^2} \\ &= \frac{\sum_{i=1}^{n}\left(x_i-\text{E}(X)\right)\left(y_i-\text{E}(Y)\right)}{n} = \frac{n\left(\sum_{i=1}^{n}x_iy_i\right)-\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)\left(\sum_{i=1}^{n}y_i\right)}{n^2}\end{aligned} \tag{39}$$

注意，上式同样有假设前提，即随机变量 (X, Y) 取到 (x_i, y_i) 的概率均为 $1/n$。

对于数据矩阵 $\boldsymbol{X}$，列向量 $\boldsymbol{x}_i$ 和 $\boldsymbol{x}_j$ 的协方差有几种不同表达方式：

$$\operatorname{cov}\left(X_i, X_j\right)=\operatorname{cov}\left(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j\right)=\rho_{i,j}\sigma_i\sigma_j=\sigma_{i,j} \tag{40}$$

中心化矩阵

利用中心化矩阵 $\boldsymbol{M}$，$\sum_{i=1}^{n}\left(x_i-\mathrm{E}(X)\right)\left(y_i-\mathrm{E}(Y)\right)$ 可以写成：

$$\sum_{i=1}^{n}\left(x_i-\mathrm{E}(X)\right)\left(y_i-\mathrm{E}(Y)\right)=(\boldsymbol{M}\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{y} \tag{41}$$

联合 (35) 和 (41)，下式成立：

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n}\left(x_i-\mathrm{E}(X)\right)^2 & \sum_{i=1}^{n}\left(x_i-\mathrm{E}(X)\right)\left(y_i-\mathrm{E}(Y)\right) \\ \sum_{i=1}^{n}\left(y_i-\mathrm{E}(Y)\right)\left(x_i-\mathrm{E}(X)\right) & \sum_{i=1}^{n}\left(y_i-\mathrm{E}(Y)\right)^2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{x} & \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{x} & \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{y} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}\boldsymbol{M}\begin{bmatrix} \boldsymbol{x} & \boldsymbol{y} \end{bmatrix} \tag{42}$$

上式中，协方差矩阵已经呼之欲出！

相关性系数

随机变量 X 和 Y 相关性系数的定义为：

$$\rho_{X,Y}=\operatorname{corr}(X,Y)=\frac{\operatorname{cov}(X,Y)}{\sqrt{\operatorname{var}(X)\operatorname{var}(Y)}}=\frac{\operatorname{cov}(X,Y)}{\sigma_X\sigma_Y} \tag{43}$$

相关性系数可以看做是随机变量 z 分数的协方差。

用向量内积形式来写，列向量数据 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 相关性系数 corr($\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$) 计算式如下：

$$\operatorname{corr}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\frac{\left(\boldsymbol{x}-\mathrm{E}(\boldsymbol{x})\right)\cdot\left(\boldsymbol{y}-\mathrm{E}(\boldsymbol{y})\right)}{\left\|\boldsymbol{x}-\mathrm{E}(\boldsymbol{x})\right\|\left\|\boldsymbol{y}-\mathrm{E}(\boldsymbol{y})\right\|}=\left(\frac{\boldsymbol{x}-\mathrm{E}(\boldsymbol{x})}{\left\|\boldsymbol{x}-\mathrm{E}(\boldsymbol{x})\right\|}\right)\cdot\left(\frac{\boldsymbol{y}-\mathrm{E}(\boldsymbol{y})}{\left\|\boldsymbol{y}-\mathrm{E}(\boldsymbol{y})\right\|}\right) \tag{44}$$

相信大家已经在上式中看到“平移”和“缩放”两步几何操作。上式把线性相关系数和向量内积联系起来。本书第 2 章介绍的**余弦相似度** (cosine similarity) 也是通过两个向量的夹角的余弦值来度量它们之间的相似性：

$$\text{cosine similarity}=\cos(\theta)=\frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|} \tag{45}$$

大家已经发现上两式在形式上高度相似。

向量内积、协方差

实际上，向量内积和协方差相似之处更多。比如，向量内积和协方差都满足交换律：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y} &= \boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{x} \\ \operatorname{cov}(X,Y) &= \operatorname{cov}(Y,X) \end{aligned} \tag{46}$$

向量的模类似标准差：

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{x}\| &= \sqrt{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}} \\ \sigma_X &= \sqrt{\operatorname{var}(X)} = \sqrt{\operatorname{cov}(X,X)} \end{aligned} \tag{47}$$

向量之间夹角余弦值类似线性相关性系数：

$$\begin{aligned} \cos\theta &= \frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|} \\ \rho_{X,Y} &= \operatorname{corr}(X,Y) = \frac{\operatorname{cov}(X,Y)}{\sigma_X\sigma_Y} = \frac{\mathrm{E}\left((X-\mu_X)(Y-\mu_Y)\right)}{\sigma_X\sigma_Y} \end{aligned} \tag{48}$$

(48) 可以分别整理成如下等式：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y} &= \cos\theta\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\| \\ \operatorname{cov}(X,Y) &= \rho_{X,Y}\sigma_X\sigma_Y \end{aligned} \tag{49}$$

此外，余弦定理可以用在向量内积和协方差上：

$$\begin{aligned} &\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2 = \|\boldsymbol{x}\|^2 + \|\boldsymbol{y}\|^2 + 2\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|\cos\theta \\ &\operatorname{var}(X+Y) = \operatorname{var}(X) + \operatorname{var}(Y) + 2\operatorname{cov}(X,Y) \\ &\sigma_{X+Y}^2 = \sigma_X^2 + \sigma_Y^2 + 2\rho_{X,Y}\sigma_X\sigma_Y \\ &\operatorname{var}(aX+bY) = a^2\operatorname{var}(X) + b^2\operatorname{var}(Y) + 2ab\operatorname{cov}(X,Y) \end{aligned} \tag{50}$$

余弦的取值范围是 [−1, 1]，线性相关系数的取值范围也是 [−1, 1]。图 12 所示为余弦相似度和夹角 θ 关系。

有了这种类比，下一章，我们将创造“标准差向量”，用向量视角解释质心、标准差、方差、协方差、协方差矩阵等统计描述。

⚠ 值得注意的是，统计中的方差和协方差运算都存在“中心化”，即去均值。也就是说，从几何角度来看，方差和协方差运算中都默认将“向量”起点移动到质心。

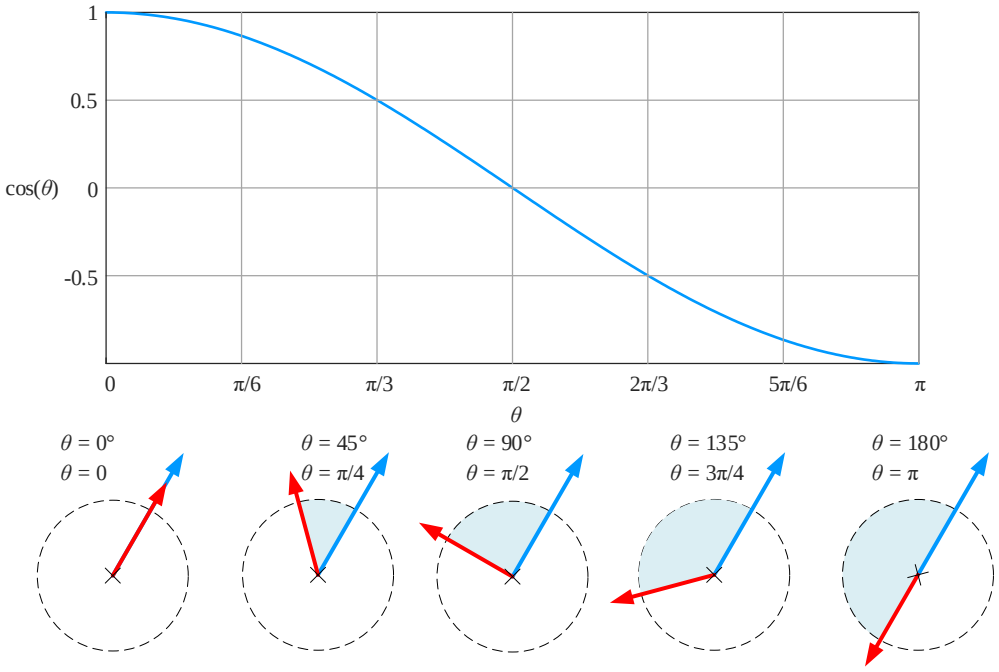


图 12. 余弦相似度

22.8 协方差矩阵和相关性系数矩阵

协方差矩阵

对于矩阵 $\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D]$ 每两个列向量数据之间的协方差可以构造得到**协方差矩阵** (covariance matrix)：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \operatorname{cov}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_1) & \operatorname{cov}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2) & \cdots & \operatorname{cov}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_D) \\ \operatorname{cov}(\boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_1) & \operatorname{cov}(\boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_2) & \cdots & \operatorname{cov}(\boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_D) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \operatorname{cov}(\boldsymbol{x}_D, \boldsymbol{x}_1) & \operatorname{cov}(\boldsymbol{x}_D, \boldsymbol{x}_2) & \cdots & \operatorname{cov}(\boldsymbol{x}_D, \boldsymbol{x}_D) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{1,1} & \sigma_{1,2} & \cdots & \sigma_{1,D} \\ \sigma_{2,1} & \sigma_{2,2} & \cdots & \sigma_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{D,1} & \sigma_{D,2} & \cdots & \sigma_{D,D} \end{bmatrix} \tag{51}$$

很明显协方差矩阵是对称矩阵。协方差矩阵又叫方差-协方差矩阵，这是因为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 对角线元素均为方差，其余元素为协方差。

样本协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 则可以用数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 计算得到：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{\left(\underbrace{\boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X})}_{\text{Centered}} \right)^{\mathrm{T}} \left(\underbrace{\boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X})}_{\text{Centered}} \right)}{n-1} \tag{52}$$

对于总体，分母则改为 n。特别地，如果 n 足够大，n 和 $n-1$ 对计算影响可以忽略不计。

用中心化数据 $\boldsymbol{X}_c$ 代替 $\boldsymbol{X}-\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$，(52) 可以写成：

$$\boldsymbol{\Sigma}=\frac{\overbrace{\boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_c}^{\text{Gram matrix}}}{n-1} \tag{53}$$

相信大家已经在上式中看到了格拉姆矩阵。这也就是说，协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 某种程度上就是 $\boldsymbol{X}_c$ 的格拉姆矩阵。

特征值分解

由于协方差矩阵为对称矩阵，对 $\boldsymbol{\Sigma}$ 进行特征值分解，得到：

$$\boldsymbol{\Sigma}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{54}$$

得知协方差矩阵为对称矩阵，不知道大家是否立刻想到本书第 20 章介绍的二次型，将 $\boldsymbol{\Sigma}$ 写成二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{x}$。将 (54) 代入 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{x}$，得到：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{x}&=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\underbrace{\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)^{\mathrm{T}}}_{\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}}\boldsymbol{\Lambda}\underbrace{\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)}_{\boldsymbol{y}}=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{y}\\&=\lambda_1 y_1^2+\lambda_2 y_2^2+\cdots+\lambda_D y_D^2=\sum_{j=1}^{D}\lambda_j y_j^2\end{aligned} \tag{55}$$

从几何角度来看，$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{y}$ 就是正椭球，这意味着 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{x}$ 为旋转椭球。

特别地，当 $D=2$ 时，$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{x}$ 代表旋转椭圆：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1 & x_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sigma_{1,1} & \sigma_{1,2}\\ \sigma_{2,1} & \sigma_{2,2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=\sigma_{1,1}x_1^2+\left(\sigma_{1,2}+\sigma_{2,1}\right)x_1x_2+\sigma_{2,2}x_2^2 \tag{56}$$

$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{y}$ 为正椭圆：

$$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{y}=\begin{bmatrix}y_1 & y_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y_1\\ y_2\end{bmatrix}=\lambda_1 y_1^2+\lambda_2 y_2^2 \tag{57}$$

如图 13 所示，正是 (54) 中的 $\boldsymbol{V}$ 完成正椭圆到旋转椭圆的“旋转”。如果大家对于几何变换细节感到陌生的话，请回顾本书第 14、20 章。

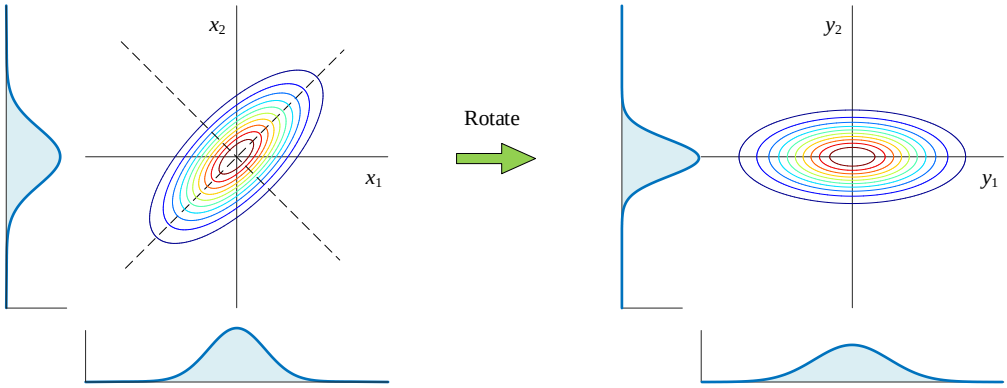


图 13. 旋转椭圆到正椭圆

相关性系数矩阵

相关性系数矩阵 (correlation matrix) $\boldsymbol{P}$ 定义为：

$$\boldsymbol{P} = \begin{bmatrix} 1 & \rho_{1,2} & \cdots & \rho_{1,D} \\ \rho_{1,2} & 1 & \cdots & \rho_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{1,D} & \rho_{2,D} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \tag{58}$$

$\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的关系为：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{SPS} \tag{59}$$

$\boldsymbol{S}$ 就是 (26) 定义的缩放矩阵，$\boldsymbol{S}$ 是个对角方阵。

再进一步，(58) 可以写成：

$$\boldsymbol{P} = \frac{\left(\underbrace{\left(\boldsymbol{X} - \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\right)\right)\boldsymbol{S}^{-1}}_{\text{Translate + Scale}}\right)^{\mathrm{T}} \left(\underbrace{\left(\boldsymbol{X} - \mathrm{E}\left(\boldsymbol{X}\right)\right)\boldsymbol{S}^{-1}}_{\text{Translate + Scale}}\right)}{n-1} \tag{60}$$

我们可以在上式中看到“平移”、“缩放”两步操作。

同时，我们在 (60) 中看到了 (25) 定义的 z 分数矩阵 $\boldsymbol{Z_X}$。因此，(60) 可以写成：

$$\boldsymbol{P} = \frac{\boldsymbol{Z_X}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Z_X}}{n-1} \tag{61}$$

相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 可以看做 $\boldsymbol{Z_X}$ 的协方差矩阵。也就是说，$\boldsymbol{P}$ 相当于的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{Z_X}$。准确地说，$\boldsymbol{Z_X}$ 的格拉姆矩阵为 $\boldsymbol{Z_X}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Z_X} = \left(n-1\right)\boldsymbol{P}$。

鸢尾花数据集

对于鸢尾花数据，它的协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 为：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 0.686 & -0.042 & 1.274 & 0.516 \\ -0.042 & 0.190 & -0.330 & -0.122 \\ 1.274 & -0.330 & 3.116 & 1.296 \\ 0.516 & \underbrace{-0.122}_{\text{Sepal width}} & 1.296 & 0.581 \\ \text{Sepal length} & & \text{Petal length} & \text{Petal width} \end{bmatrix} \begin{matrix} \leftarrow \text{Sepal length} \\ \leftarrow \text{Sepal width} \\ \leftarrow \text{Petal length} \\ \leftarrow \text{Petal width} \end{matrix} \tag{62}$$

鸢尾花数据的相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 为：

$$\boldsymbol{P} = \begin{bmatrix} 1.000 & -0.118 & 0.872 & 0.818 \\ -0.118 & 1.000 & -0.428 & -0.366 \\ 0.872 & -0.428 & 1.000 & 0.963 \\ 0.818 & \underbrace{-0.366}_{\text{Sepal width}} & 0.963 & 1.000 \\ \text{Sepal length} & & \text{Petal length} & \text{Petal width} \end{bmatrix} \begin{matrix} \leftarrow \text{Sepal length} \\ \leftarrow \text{Sepal width} \\ \leftarrow \text{Petal length} \\ \leftarrow \text{Petal width} \end{matrix} \tag{63}$$

图 14 所示为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 和 $\boldsymbol{P}$ 的热图。观察相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$，可以发现花萼长度和花萼宽度线性负相关，花瓣长度和花萼宽度线性负相关，花瓣宽度和花萼宽度线性负相关。当然，鸢尾花数据集样本数量有限，通过样本数据得出的结论还不足以推而广之。

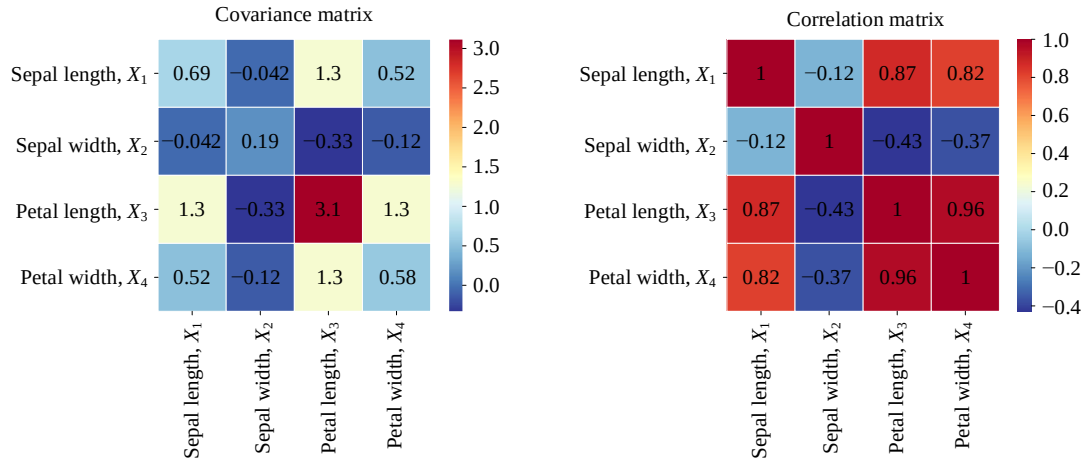


图 14. 协方差矩阵和相关性系数矩阵热图

本系列丛书《概率统计》会建立协方差矩阵和椭圆的密切关系。图 15 便来自《概率统计》，图中我们可以通过椭圆的大小和旋转角度了解不同特征标准差，以及不同特征之间的相关性这样的重要信息。

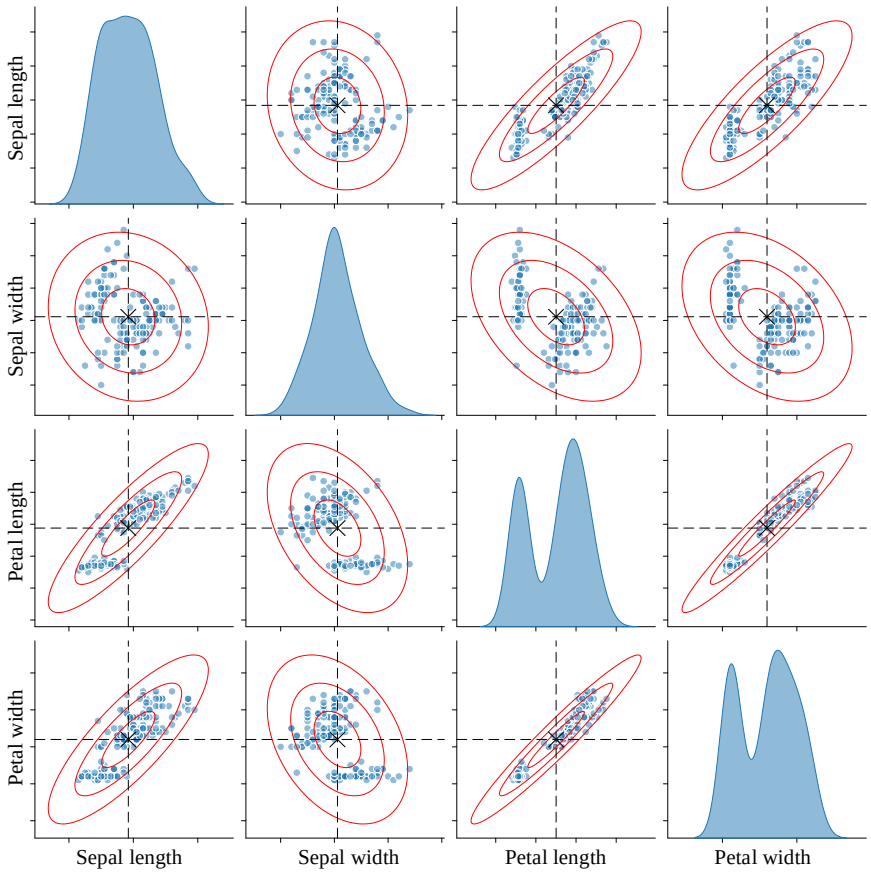


图 15. 协方差矩阵和椭圆的关系

如前文所述，鸢尾花数据分为三类。标签为 C_k 样本数据也对应自身协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_k$ (如图 16) 和相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}_k$ (如图 17)。图 18 也是来自本系列丛书《概率统计》一册，图中绘制椭圆时考虑鸢尾花分类。这些旋转椭圆的中心就是簇质心，椭圆本身代表簇协方差矩阵。

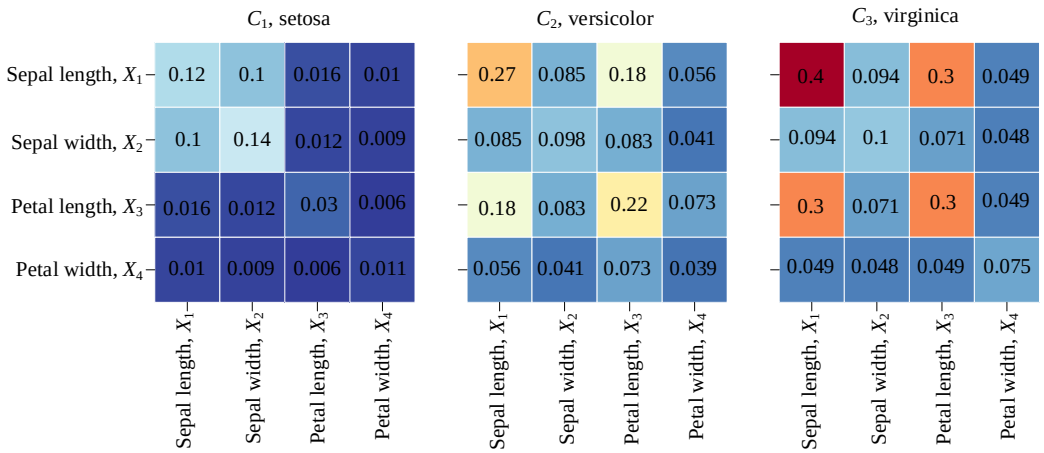


图 16. 协方差矩阵热图，考虑分类

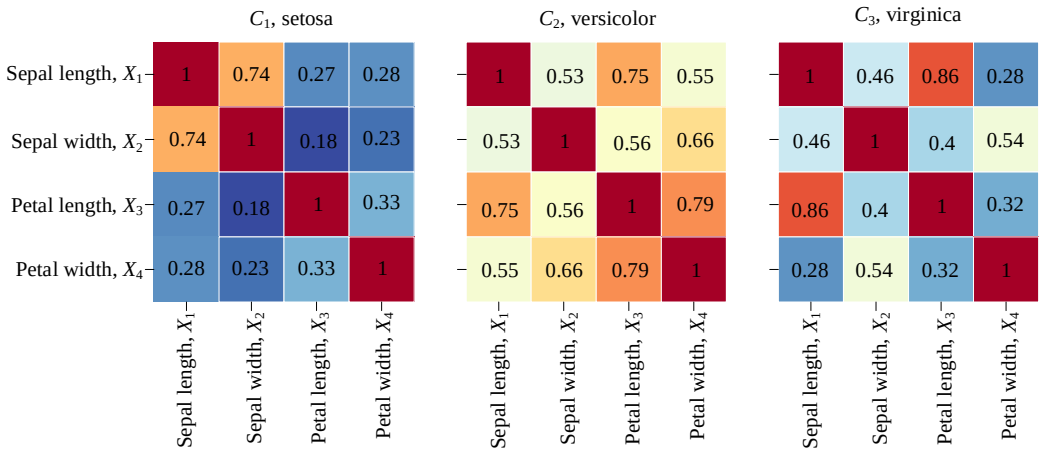


图 17. 相关性系数矩阵热图，考虑分类

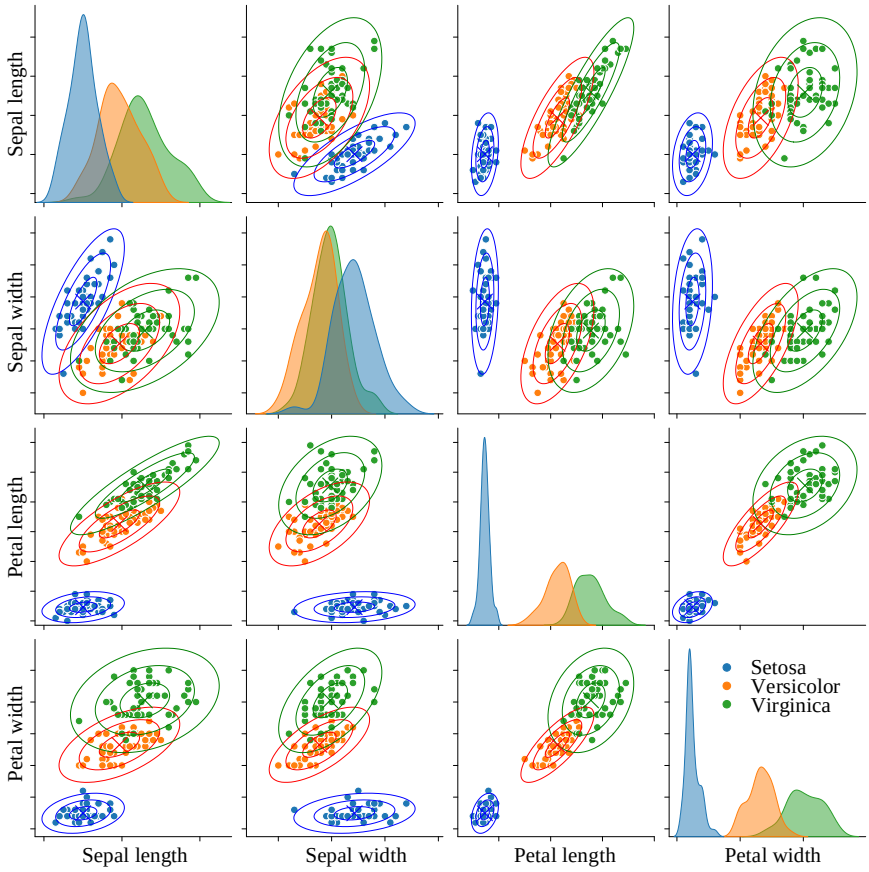
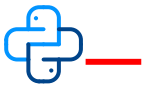
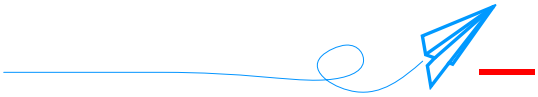


图 18. 协方差矩阵和椭圆的关系，考虑分类



Bk4_Ch22_01.py 中 Bk4_Ch22_01_D 部分绘制图 14、图 16、图 17 这几幅热图。



本章从线性代数运算视角回顾、梳理统计学中一些重要的概念。希望大家学完本章后，能够轻松建立数据、矩阵、向量、统计之间的联系。

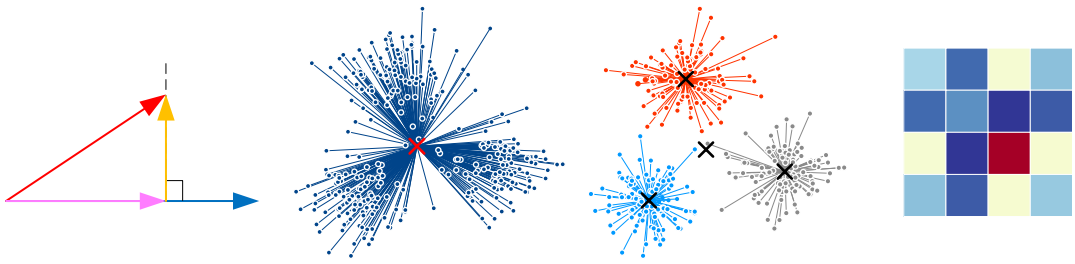


图 19. 总结本章重要内容的四幅图

本章介绍了两种和原始数据 $\boldsymbol{X}$ 形状相同的数据矩阵——中心化数据矩阵 $\boldsymbol{X}_c$、标准化数据矩阵 $\boldsymbol{Z}_X$。请大家注意它们三者区分和联系。并且能从几何变换视角理解运算过程。

质心和协方差矩阵在后续众多数据科学、机器学习算法中扮演重要角色。此外，请大家务必注意协方差矩阵和椭圆之间的千丝万缕的联系。本系列丛书《概率统计》将从不同角度讲解如何利用椭圆更好地理解高斯分布、条件概率、线性回归、主成分分析等数学工具。

下一章正式进入本书收关之旅——数据三部曲。

推荐大家阅读多元统计方面的一本经典，Richard A. Johnson 和 Dean W. Wichern 合著的 *Applied Multivariate Statical Analysis*。清华大学出版社翻译出版了这部作品，书名为《实用多元统计分析》。

23 Four Vector Spaces
数据空间

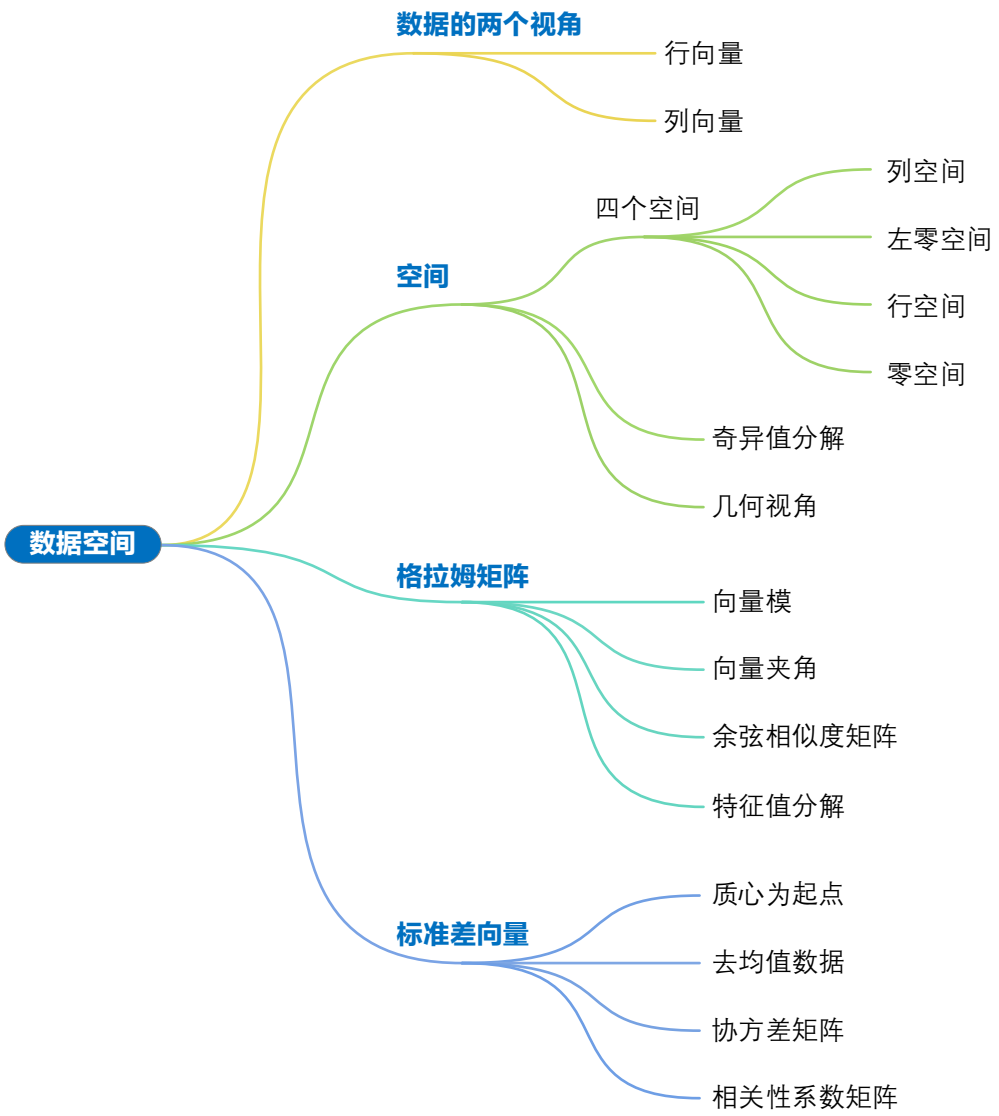
用 SVD 分解寻找数据矩阵的四个空间

智慧的真正标志不是知识，而是想象力。

The true sign of intelligence is not knowledge but imagination.

—— 阿尔伯特·爱因斯坦 (Albert Einstein) | 理论物理学家 | 1879 ~ 1955

- `numpy.cov()` 计算协方差矩阵
- `numpy.corr()` 计算相关性系数矩阵
- `numpy.diag()` 如果 `A` 为方阵，`numpy.diag(A)` 函数提取对角线元素，以向量形式输入结果；如果 `a` 为向量，`numpy.diag(a)` 函数将向量展开成方阵，方阵对角线元素为 `a` 向量元素
- `numpy.linalg.eig()` 特征值分解
- `numpy.linalg.inv()` 计算逆矩阵
- `numpy.linalg.norm()` 计算范数
- `seaborn.heatmap()` 绘制热图



23.1 从数据矩阵 X 说起

本书最后三章叫“数据三部曲”，这三章一方面从数据、空间、几何角度总结全书前文核心内容，另外一方面介绍这些数学工具在数据科学和机器学习领域的应用。

毫不夸张地说，没有线性代数就没有现代计算，大家将会在本系列丛书《数据科学》和《机器学习》两册书的每个角落看到矩阵运算。

“多重视角”仍然是这三章的特色。线性代数中向量、空间、投影、矩阵、矩阵分解等数学工具天然地弥合代数、几何、数据之间的鸿沟。

本章是“数据三部曲”的第一章，将以数据矩阵为切入点，主要通过奇异值分解和大家探讨四个重要的空间定义和用途。

数据矩阵

数据矩阵 (data matrix) 不过就是以表格形式存储的数据。

除了表格功能，矩阵更重要的功能是——**线性映射** (linear mapping)。而矩阵乘法是线性映射的核心。矩阵分解不过是矩阵连乘，将一个复杂的几何变换拆解成容易理解的成分，比如缩放、旋转、投影、剪切等等。

本书最开始便介绍过，数据矩阵可以从两个角度观察。数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的每一行是一个行向量，代表一个样本观察值；$\boldsymbol{X}$ 的每一列为一个列向量，代表某个特征上的样本数据。

行向量

回顾前文，为了区分数据矩阵中的行向量和列向量，本书中数据矩阵的行向量序号采用上标加括号记法，比如：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}^{(1)}\\ \boldsymbol{x}^{(2)}\\ \vdots\\ \boldsymbol{x}^{(n)}\end{bmatrix} \tag{1}$$

其中，第 i 行行向量 D 个元素为：

$$\boldsymbol{x}^{(i)}=\begin{bmatrix}x_{i,1} & x_{i,2} & \cdots & x_{i,D}\end{bmatrix} \tag{2}$$

图 1 所示为从行向量角度观察数据矩阵，每一个行向量 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 代表坐标系中一个点。所有数据散点构成坐标系中的“云”。

实际上，行向量也是具有方向和大小的向量，也可以看成是箭头，因此也有自己的空间。这是本书马上要探讨的内容。

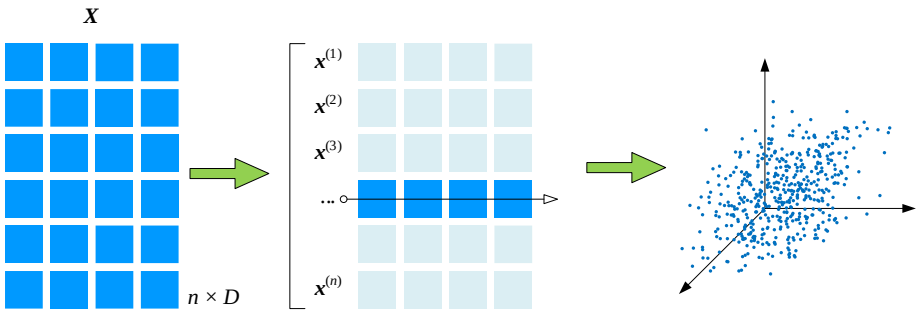


图 1. 从行向量角度观察数据矩阵

列向量

数据矩阵的列向量序号采用下标记法，比如：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D\end{bmatrix} \tag{3}$$

其中，第 j 列列向量 n 个元素为：

$$\boldsymbol{x}_j=\begin{bmatrix}x_{1,j}\\ x_{2,j}\\ \vdots\\ x_{n,j}\end{bmatrix} \tag{4}$$

如图 2 所示，从几何角度，数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的所有列向量 (蓝色箭头) 的起始点均在原点 $\boldsymbol{0}$。$[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_1, \ldots \boldsymbol{x}_D]$ 这些向量的长度和方向信息均包含在格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 之中。

向量长度的表现形式为向量的模，即 L^2 范数。

向量方向是两两向量之间的相对夹角。更具体地说，是两两向量夹角余弦值。

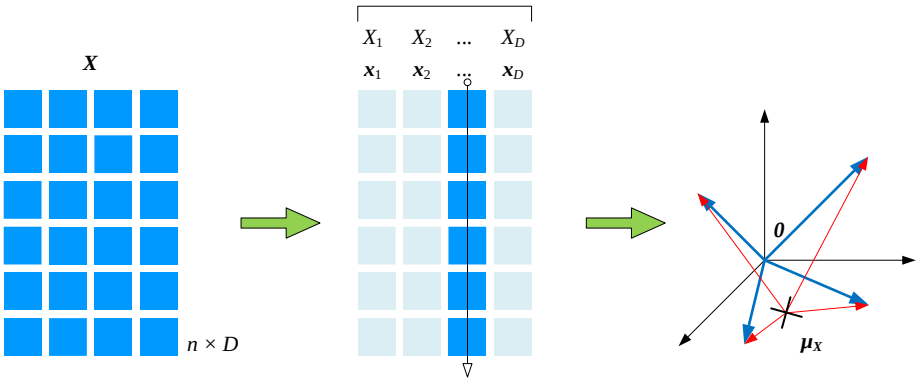


图 2. 从列向量角度观察数据矩阵

如果将图 2 向量起点移动到数据质心 $\boldsymbol{\mu}_X$ (即 E($\boldsymbol{X}$) 的转置)，这时向量 (红色箭头) 的长度可以看做是标准差 (的若干倍)，而向量之间夹角为随机变量之间的线性相关系数。

从统计角度来看，将向量起点移动到 $\boldsymbol{\mu}_X$ 实际上就是数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 去均值，即中心化，对应运算为 $\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X})$。本章后文还将深入介绍这一重要视角。

协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 相当于是 $\boldsymbol{X}_c$ 的格拉姆矩阵。准确来说，对于样本数据，$\boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_c = (n-1)\boldsymbol{\Sigma}$。协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 包含了样本标准差和线性相关系数等信息。

区分符号

现在有必要再次强调本系列丛书的容易混淆的代数、线性代数和概率统计符号。

粗体、斜体、小写 $\boldsymbol{x}$ 为列向量。从概率统计的角度，$\boldsymbol{x}$ 可以代表随机变量 X 采样得到的样本数据，偶尔也代表 X 总体数据。随机变量 X 样本数据集合为 $X = \left\{x^{(1)}, x^{(2)}, ..., x^{(n)}\right\}$。

粗体、斜体、小写、加下标序号的 $\boldsymbol{x}_1$ 为列向量，下角标仅仅是序号，以便区分 $\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}_2$、$\boldsymbol{x}_j$、$\boldsymbol{x}_D$ 等等。从概率统计的角度，$\boldsymbol{x}_1$ 可以代表随机变量 X_1 样本数据，也可以表达 X_1 总体数据。

行向量 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 代表一个具有多个特征的样本点。

从代数角度，斜体、小写、非粗体 x_1 代表变量，下角标代表变量序号。这种记法常用在函数解析式中，比如线性回归解析式 $y = x_1 + x_2$。

$x^{(1)}$ 代表变量 x 的一个取值，或代表随机变量 X 的一个取值。

而 $x_1^{(1)}$ 代表变量 x_1 的一个取值，或代表随机变量 X_1 的一个取值，比如 $X_1 = \left\{x_1^{(1)}, x_1^{(2)}, ..., x_1^{(n)}\right\}$。

粗体、斜体、大写 $\boldsymbol{X}$ 则专门用来表达多行、多列的数据矩阵，$\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D]$。数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 中第 i 行、第 j 列元素则记做 $\underline{x_{i,j}}$。多元线性回归中，$\boldsymbol{X}$ 也叫**设计矩阵** (design matrix)。

我们还会用粗体、斜体、小写希腊字母 $\boldsymbol{\chi}$ (chi，读作/ˈkaɪ/) 代表 D 维随机变量构成的列向量，$\boldsymbol{\chi} = [X_1, X_2, \ldots, X_D]^{\mathrm{T}}$。希腊字母 $\boldsymbol{\chi}$ 主要用在多元概率统计中。

23.2 向量空间：从 SVD 分解角度理解

这一节介绍 $\boldsymbol{X}$ 列向量和行向量张成的四个空间以及它们之间关系。

列向量：列空间、左零空间

由 $\boldsymbol{X}$ 的**列向量** $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_j, \ldots, \boldsymbol{x}_D$ 张成的子空间 $\text{span}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D)$ 为 $\boldsymbol{X}$ 的**列空间** (column space)，记做 $C(\boldsymbol{X})$。很多书上也将**列空间**记做 $\text{Col}(\boldsymbol{X})$，或 $\text{Col}\boldsymbol{X}$。

与 $C(\boldsymbol{X})$ 相对应的是**左零空间** (left null space)，记做 $\text{Null}(\boldsymbol{X}^{\text{T}})$。$C(\boldsymbol{X})$ 和 $\text{Null}(\boldsymbol{X}^{\text{T}})$ 构成了 $\mathbb{R}^n$。$\boldsymbol{X}$ 的**列向量**元素个数为 n，因此需要匹配空间 $\mathbb{R}^n$，才能“装下”$\boldsymbol{X}$ 的**列向量**。

而 $C(\boldsymbol{X})$ 和 $\text{Null}(\boldsymbol{X}^{\text{T}})$ 分别都是 $\mathbb{R}^n$ 的子空间，两者的维度之和为 n，即 $\dim(C(\boldsymbol{X})) + \dim(\text{Null}(\boldsymbol{X}^{\text{T}})) = n$。

$C(\boldsymbol{X})$ 和 $\text{Null}(\boldsymbol{X}^{\text{T}})$ 互为**正交补** (orthogonal complement)，即：

$$C(\boldsymbol{X})^{\perp} = \text{Null}\left(\boldsymbol{X}^{\text{T}}\right) \tag{5}$$

行向量：行空间、零空间

由 $\boldsymbol{X}$ 的**行向量** $\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}, \ldots, \boldsymbol{x}^{(j)}, \ldots, \boldsymbol{x}^{(n)}$ 张成的子空间 $\text{span}(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}, \ldots, \boldsymbol{x}^{(n)})$ 为 $\boldsymbol{X}$ 的**行空间** (row space)，记做 $R(\boldsymbol{X})$。很多书上也记做 $\text{Row}(\boldsymbol{X})$ 或 $\text{Row}\boldsymbol{X}$。

与 $R(\boldsymbol{X})$ 相对应的是**零空间** (null space)，也叫**右零空间** (right null space)，记做 $\text{Null}(\boldsymbol{X})$。

$\boldsymbol{X}$ 的**行向量**元素数量为 D，空间 $\mathbb{R}^D$ 才能“装下”$\boldsymbol{X}$ 的**行向量**。$R(\boldsymbol{X})$ 和 $\text{Null}(\boldsymbol{X})$ 构成了 $\mathbb{R}^D$。$R(\boldsymbol{X})$ 和 $\text{Null}(\boldsymbol{X})$ 分别都是 $\mathbb{R}^D$ 的子空间。

$R(\boldsymbol{X})$ 和 $\text{Null}(\boldsymbol{X})$ 互为正交补，即：

$$R(\boldsymbol{X})^{\perp} = \text{Null}(\boldsymbol{X}) \tag{6}$$

$R(\boldsymbol{X})$的维度为 $\dim(R(\boldsymbol{X})) = \text{rank}(\boldsymbol{X})$。$R(\boldsymbol{X})$ 和 $\text{Null}(\boldsymbol{X})$ 的维度之和为 D，即 $\dim(R(\boldsymbol{X})) + \dim(\text{Null}(\boldsymbol{X})) = D$。也就是说，只有 $\boldsymbol{X}$ 非满秩，$\text{Null}(\boldsymbol{X})$ 维数才不为 0。

怎么理解这四个空间?

相信大家读完本节前文这四个空间定义已经晕头转向，云里雾里不知所云。

的确，这四个空间的定义让很多人望而却步。很多线性代数教材多是从线性方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 角度讲解这四个空间，而作者认为这个视角并没有降低理解这四个空间的难度。

下面，我们从数据和几何两个角度来理解这四个空间，并且介绍如何将它们和本书前文介绍的向量内积、格拉姆矩阵、向量空间、子空间、秩、特征值分解、SVD 分解、数据质心、协方差矩阵等线性代数概念联系起来。

从完全型 SVD 分解说起

对“细长”矩阵 $\boldsymbol{X}$ 进行完全型 SVD 分解，得到等式：

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{7}$$

图 3 所示为 $\boldsymbol{X}$ 完全型 SVD 分解示意图。

⚠ 请大家注意几个矩阵形状。完全型 SVD 分解，$\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 为一般为细高型，$\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 为方阵。

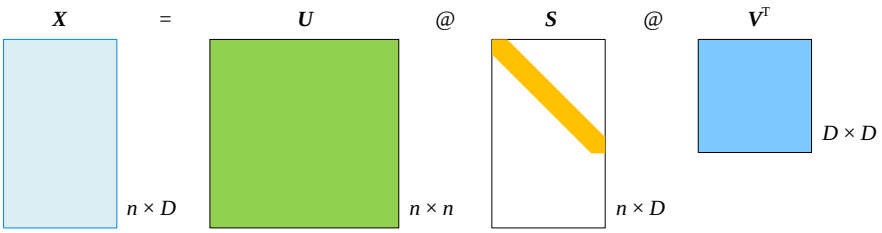


图 3. $\boldsymbol{X}$ 进行完全型 SVD 分解

根据前文所学，大家应该很清楚 $\boldsymbol{U}$ 为 $n \times n$ 正交矩阵，也就是说 $\boldsymbol{U}$ 列向量 $[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$ 特点是两两正交 (向量内积为 0)，且向量模均为 1。

$[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$ 为张成 $\mathbb{R}^n$ 空间的一组规范正交基。

同理，$\boldsymbol{V}$ 为 $D \times D$ 正交矩阵，因此 $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 是张成 $\mathbb{R}^D$ 空间的一组规范正交基。

如图 4 所示，$\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 之间的联系为 $\boldsymbol{US} = \boldsymbol{XV}$。

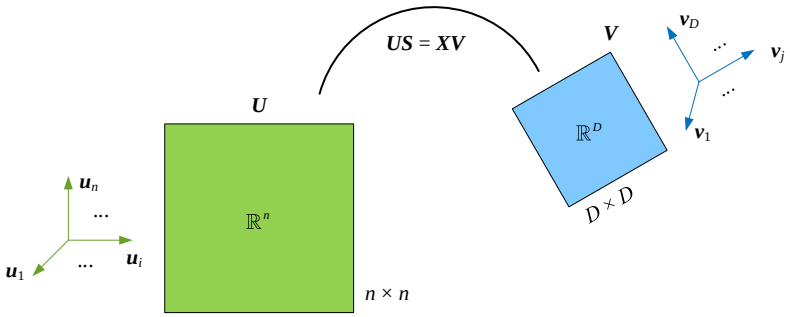


图 4. 对于矩阵 $\boldsymbol{X}$ 来说，$\mathbb{R}^n$ 空间和 $\mathbb{R}^D$ 空间关系

另外，对“粗短”$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$矩阵进行完全型 SVD 分解，就是对 (7) 转置：

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} = \left(\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}} \tag{8}$$

图 5 所示为 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$进行完全型 SVD 分解示意图。后面，我们会用到这一分解。

⚠ 注意，对于完全型 SVD 分解，奇异值矩阵 $\boldsymbol{S}$ 虽然是对角阵，但不是方阵，因此 $\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}} \neq \boldsymbol{S}$。

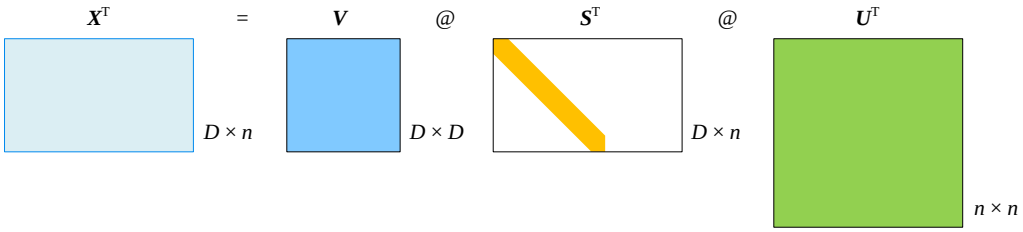


图 5. $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$进行完全型 SVD 分解

23.3 紧凑型 SVD 分解：剔除零空间

紧凑型 SVD 分解

在讲解奇异值分解时，我们特别介绍了紧凑型 SVD 分解。紧凑型 SVD 分解对应的情况为 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{X}) = r < D$。奇异值矩阵 $\boldsymbol{S}$ 可以分成四个子块：

$$\boldsymbol{S} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{S}_{r\times r} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \tag{9}$$

上式中，矩阵 $\boldsymbol{S}_{r\times r}$对角线元素为非 0 奇异值。

图 6 所示为 $\boldsymbol{X}$ 进行紧凑型 SVD 分解示意图。本书第 16 章介绍过，分块矩阵乘法中，图 6 中阴影部分对应的分块矩阵可以全部消去。

正交矩阵 $\boldsymbol{U}$ 保留 $[\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_r]$ 子块，消去 $[\boldsymbol{u}_{r+1}, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$。

正交矩阵 $\boldsymbol{V}$ 保留 $[\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_r]$ 子块，消去 $[\boldsymbol{v}_{r+1}, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$。

$[\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_r]$ 是 $\boldsymbol{X}$ 的**列空间** $C(\boldsymbol{X})$ 基底。而 $[\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_r]$ 是 $\boldsymbol{X}$ 的**行空间** $R(\boldsymbol{X})$ 基底。

⚠ 注意，图 6 中 $\boldsymbol{V}$ 存在转置运算。

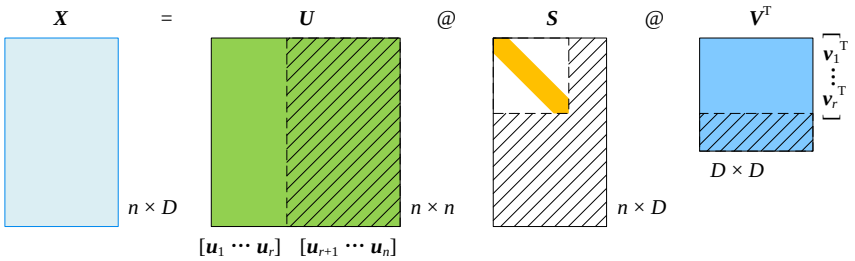


图 6. $\boldsymbol{X}$ 进行紧凑型 SVD 分解

实际上，$\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 矩阵中消去的子块和上一节说到的**零空间**有直接联系。先给出图 7 这幅图，我们马上展开讲解。

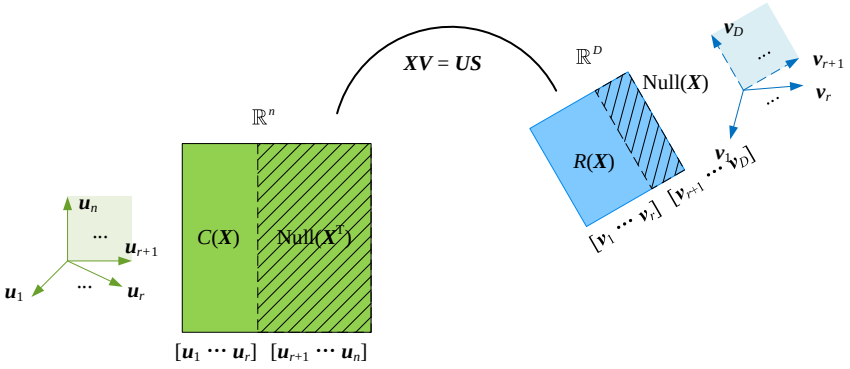


图 7. $\mathbb{R}^n$ 空间和 $\mathbb{R}^D$ 空间关系，考虑**列空间**、**左零空间**、**行空间**、**零空间**

列空间，左零空间

$[\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_r]$ 是 $\boldsymbol{X}$ 的**列空间** $C(\boldsymbol{X})$ 基底。而 $[\boldsymbol{u}_{r+1}, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$ 是**左零空间** $\text{Null}(\boldsymbol{X}^T)$ 基底。

如图 8 所示，将 $\boldsymbol{S}^T$ 左右分块，右侧分块矩阵为 $\boldsymbol{O}$ 矩阵。$\boldsymbol{X}^T$ 向**左零空间** $\text{Null}(\boldsymbol{X}^T)$ $[\boldsymbol{u}_{r+1}, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$ 投影的结果为全 0 矩阵 $\boldsymbol{O}$。

白话说，$\mathbb{R}^n$ 用来装 $\boldsymbol{X}$ 的**列向量**，绝对“杀鸡用牛刀”。$[\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_r]$ 张起的子空间就“刚刚好”够装下 $\boldsymbol{X}$ 的**列向量**。而 $\mathbb{R}^n$ 中没有被用到的部分就是 $[\boldsymbol{u}_{r+1}, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$ 张起的**左零空间** $\text{Null}(\boldsymbol{X}^T)$。

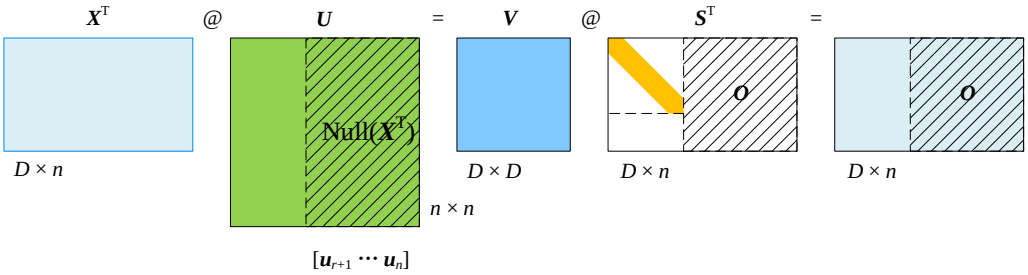


图 8. $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 向 Null($\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$) $[\boldsymbol{u}_{r+1}, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$ 投影的结果为 $\boldsymbol{O}$

这就是为什么 Null($\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$) 被称作**左“零”空间**的原因，因为投影结果为零矩阵。而且，我们也同时在图 8 中投影运算中 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 看到了“转置”，这就解释了为什么**列空间** $C(\boldsymbol{X})$ 对应 Null($\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$)。

多说一句，(8) 可以写成：

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}} \tag{10}$$

上式正交投影中，矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 对应的投影矩阵是 $\boldsymbol{U}$，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 的每一行代表一个散点，对应 $\boldsymbol{X}$ 的**列向量**。大家在这句话中看到**列空间** $C(\boldsymbol{X})$ 和 Null($\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$) 中“**列**”和“$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$”这两个字眼了吧！

行空间，零空间

而 $[\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_r]$ 是 $\boldsymbol{X}$ 的**行空间** $R(\boldsymbol{X})$ 基底。$[\boldsymbol{v}_{r+1}, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 是**零空间** Null($\boldsymbol{X}$) 的基底。

白话说，$\mathbb{R}^D$ 来装 $\boldsymbol{X}$ 的**行向量**，可能大材小用，也可能大小合适。$[\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_r]$ 张起的子空间就刚刚好够装下 $\boldsymbol{X}$ 的**行向量**。富余的部分就是 $[\boldsymbol{v}_{r+1}, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 张起的**零空间** Null($\boldsymbol{X}$)。rank($\boldsymbol{X}$) = r = D 时，$\mathbb{R}^D$ 装 $\boldsymbol{X}$ 的**行向量**后没有任何余量。

也用正交投影视角来看，将 (8) 写成：

$$\boldsymbol{X}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{S} \tag{11}$$

矩阵 $\boldsymbol{X}$ 对应的投影矩阵是 $\boldsymbol{V}$，$\boldsymbol{X}$ 的每一行代表一个散点，对应 $\boldsymbol{X}$ 的**行向量**。如图 9 所示，将 $\boldsymbol{S}$ 左右分块，右侧分块矩阵为 $\boldsymbol{O}$ 矩阵。$\boldsymbol{X}$ 向 Null($\boldsymbol{X}$) 投影的结果为 $\boldsymbol{Z}$ 的右侧零矩阵 $\boldsymbol{O}$。

图 9 解释了为什么 Null($\boldsymbol{X}$) 被称作“零”空间，而**行空间** $R(\boldsymbol{X})$ 对应**零空间** Null($\boldsymbol{X}$)。

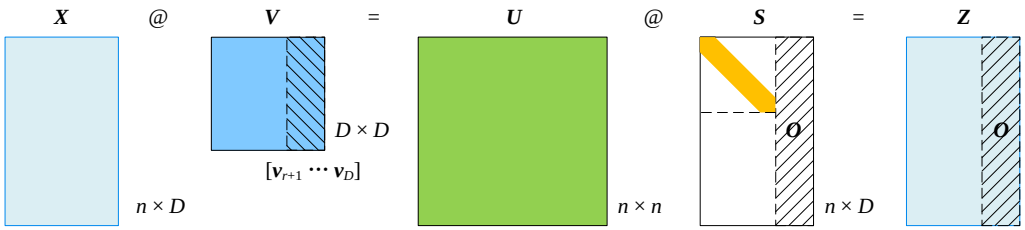


图 9. $\boldsymbol{X}$ 向 Null($\boldsymbol{X}$) 投影的结果为 $\boldsymbol{O}$

复盘一下

$\boldsymbol{U}$ 是正交矩阵，即 $[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$ 中列向量两两垂直。基底 $[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$ 张起了 $\mathbb{R}^n$。

将 $[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$ 划分成两块—— $C(\boldsymbol{X}) = [\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_r]$、$\text{Null}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}) = [\boldsymbol{u}_{r+1}, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$。**列空间** $C(\boldsymbol{X})$ 和**左零空间** $\text{Null}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}})$ 互为正交补。

“正交”两字，来自于 $[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$ 中列向量两两垂直。“补”字，可以理解为“补齐”，也就是说 $C(\boldsymbol{X})$ 和 $\text{Null}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}})$ 补齐了 $\mathbb{R}^n$。

同理，将 $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$ 划分成两块—— $R(\boldsymbol{X}) = [\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_r]$、$\text{Null}(\boldsymbol{X}) = [\boldsymbol{v}_{r+1}, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$。而**行空间** $R(\boldsymbol{X})$ 和**零空间** $\text{Null}(\boldsymbol{X})$ 互为正交补，两者“补齐”得到 $\mathbb{R}^D$。

在图 7 基础上，考虑这两对正交关系，加上 $\mathbb{R}^n$ 空间和 $\mathbb{R}^D$ 空间，我们用图 10 可视化这六个空间。图中加阴影的部分对应**左零空间**和**零空间**。

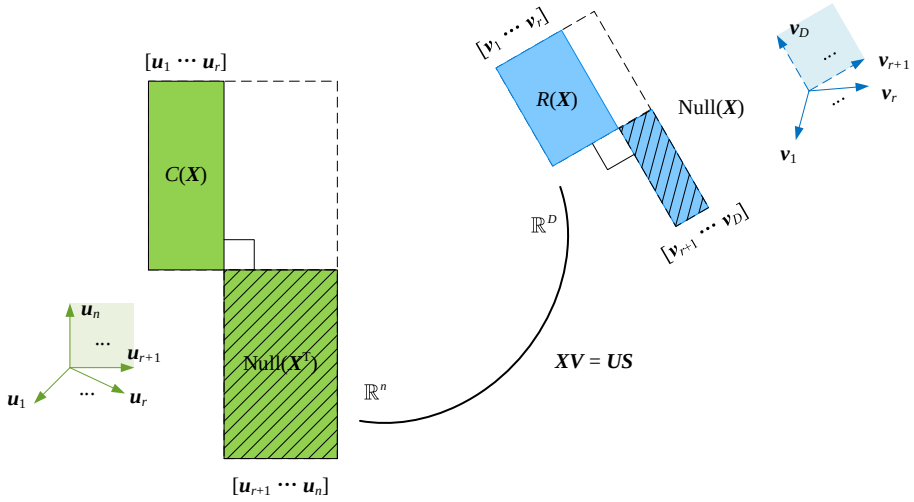


图 10. $\mathbb{R}^n$ 空间和 $\mathbb{R}^D$ 空间关系，考虑**列空间**、**左零空间**、**行空间**、**零空间**的正交关系

四个空间：因 $\boldsymbol{X}$ 而生

格外强调，$\mathbb{R}^n$ 空间和 $\mathbb{R}^D$ 空间是“永恒”存在的，是“铁打的庙”。但是，能张成这两个空间的规范正交基有无数组，都是“流水的和尚”。

$[\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$，即 $C(\boldsymbol{X})$ + $\text{Null}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}})$，是张成 $\mathbb{R}^n$ 空间无数组规范正交基中的一组。

$[\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_D]$，即 $R(\boldsymbol{X})$ + $\text{Null}(\boldsymbol{X})$，是张成 $\mathbb{R}^D$ 空间无数组规范正交基中的一组。

值得强调的是，在矩阵 $\boldsymbol{X}$ 眼中，$C(\boldsymbol{X})$、$\text{Null}(\boldsymbol{X}^T)$、$R(\boldsymbol{X})$ 和 $\text{Null}(\boldsymbol{X})$ 是独一无二的存在，因为它们都是为矩阵 $\boldsymbol{X}$ 而生！

也就是说，数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 稍有变化，不管是元素、还是形状变化，这四个空间就会随之变化。

而获得这四个空间最便捷的方法就是堪称宇宙第一矩阵分解的奇异值分解。

怎么记忆？

如果大家还是分不清这四个空间，我还有一个小技巧！

大家只需要记住 $\boldsymbol{XV} = \boldsymbol{US}$ 这个式子。

$\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{X}$ 等长，即**列向量**行数相等，因此 $\boldsymbol{U}$ 一定包含**列空间**。

$\boldsymbol{U}$ 在矩阵乘积 $\boldsymbol{US}$ 左边，因此包含**“左”零空间**。

$\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{X}$ 等宽，即**行向量**列数相等，且 $\boldsymbol{XV}$ 中的 $\boldsymbol{V}$ 是 $\boldsymbol{X}$ **行向量**投影方向，因此 $\boldsymbol{V}$ 包含**行空间**。

$\boldsymbol{V}$ 在矩阵乘积 $\boldsymbol{XV}$ 右边，因此包含**“右”零空间**。而**右零空间**，就简称**零空间**。因为**右零空间**最常用，所以独占了“**零空间**”这个更简洁的头衔。

问题来了，要是记不住 $\boldsymbol{XV} = \boldsymbol{US}$，怎么办？

就一句话——我们永远 15 岁！

$\boldsymbol{US}$ 代表“我们”，$\boldsymbol{XV}$ 是罗马数字的 15。

23.4 几何视角说空间

下面我们用具体数值从几何视角再强化理解上节介绍的几个空间。

举个例子

给定矩阵 $\boldsymbol{X}$ 如下：

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -\sqrt{3} & \sqrt{3} \\ 2 & -2 \end{bmatrix} \tag{12}$$

一眼就能看出来，$\boldsymbol{X}$ 的两个**列向量**线性相关，因为：

$$\boldsymbol{x}_1 = -\boldsymbol{x}_2 \tag{13}$$

也就是说 $\boldsymbol{X}$ 的秩为 1，即 $\text{rank}(\boldsymbol{X}) = r = 1$。

列向量

为了可视化 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 这两个**列向量**，我们需要三维直角坐标系 $\mathbb{R}^3$，如图 11 (a) 所示。

白话说，$\mathbb{R}^3$ 才能装下长度为 3 的**列向量** $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$。

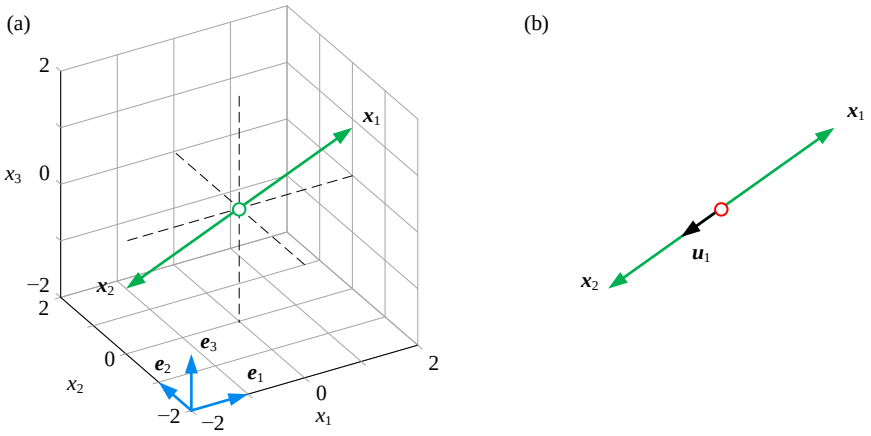


图 11. 从三维空间到一维空间

但是我们发现，实际上，图 11 (b) 告诉我们有了 $\boldsymbol{u}_1$ 这个单位向量，我们就可以把 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 写成：

$$\boldsymbol{x}_1 = a\boldsymbol{u}_1, \quad \boldsymbol{x}_2 = b\boldsymbol{u}_1 \tag{14}$$

也就是说，$\mathbb{R}^3$ 中一维子空间 span($\boldsymbol{u}_1$) 就足够装下 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$，这就是为什么 rank($\boldsymbol{X}$) = 1。

那么问题来了，我们如何找到 $\boldsymbol{u}_1$ 这个单位向量？

根据前文所学，我们知道有至少有两种办法：a) SVD 分解；b) 特征值分解。

SVD 分解

对 $\boldsymbol{X}$ 进行 SVD 分解得到：

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -\sqrt{3} & \sqrt{3} \\ 2 & -2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} -0.3536 & -0.9297 & 0.1034 \\ 0.6124 & -0.1465 & 0.7769 \\ -0.7071 & 0.3380 & 0.6211 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{U}} \underbrace{\begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{S}} \left(\underbrace{\begin{bmatrix} -0.7071 & -0.7071 \\ 0.7071 & -0.7071 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}} \right)^{\mathrm{T}} \tag{15}$$

其中，矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的第一**列向量**就是我们要找的 $\boldsymbol{u}_1$，而这个 $\boldsymbol{u}_1$ 便独立张成**列空间** $C(\boldsymbol{X})$。

也就是说，$C(\boldsymbol{X})$ 对应 $\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3]$ 线性无关的成分。

顺藤摸瓜，有意思的是完全型 SVD 分解中，我们顺路还得到了 $\boldsymbol{u}_2$ 和 $\boldsymbol{u}_3$，基底 $[\boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3]$ 张起了**左零空间** $\text{Null}(\boldsymbol{X}^T)$。

而规范正交基 $[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3]$ 则是张成 $\mathbb{R}^3$ 无数规范正交基中的一个。$[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3]$ 这个独特存在全靠矩阵 $\boldsymbol{X}$。

而 $[\boldsymbol{u}_1]$ 和 $[\boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3]$ 补齐得到 $\mathbb{R}^3$。显然，$\boldsymbol{u}_1$ 垂直于 $\boldsymbol{u}_2$ 和 $\boldsymbol{u}_3$ 张成的平面 $\text{span}(\boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3)$。所示，$[\boldsymbol{u}_1]$ 和 $[\boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3]$ 互为正交补。

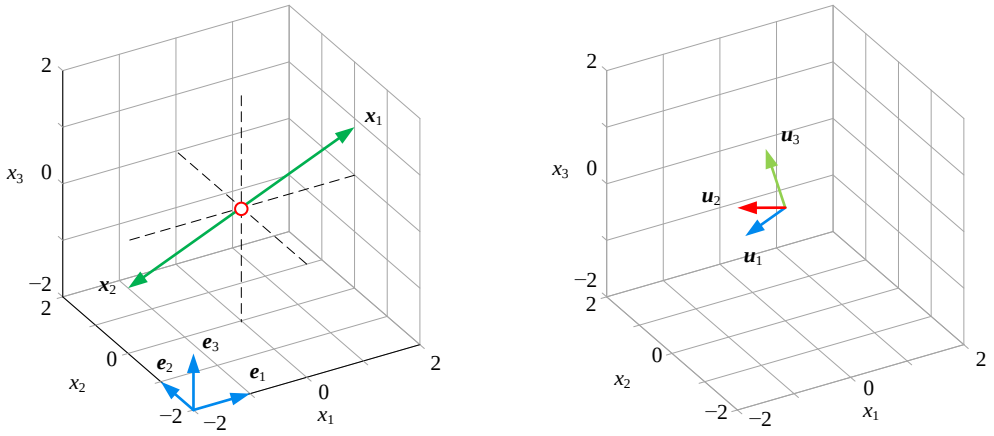


图 12. 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的**列空间** $C(\boldsymbol{X})$ 和**左零空间** $\text{Null}(\boldsymbol{X}^T)$

投影

把**列向量** $\boldsymbol{x}_1$ 投影到 $\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3]$ 中得到：

$$\boldsymbol{x}_1^T\boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} -0.3536 \\ 0.6124 \\ -0.7071 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{u}_1} & \underbrace{\begin{bmatrix} -0.9297 \\ -0.1465 \\ 0.3380 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{u}_2} & \underbrace{\begin{bmatrix} 0.1034 \\ 0.7769 \\ 0.6211 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{u}_3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2.8284 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{16}$$

也就是说，$\boldsymbol{x}_1$ 在 $[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3]$ 这个标准正交基中的坐标为 $(-2.8282, 0, 0)$。

大家可以看到 $\boldsymbol{x}_1$ 在 $\boldsymbol{u}_2$ 和 $\boldsymbol{u}_3$ 上投影结果均为 0，这就是为什么 $\boldsymbol{u}_2$ 和 $\boldsymbol{u}_3$ 上构成**左零空间** $\text{Null}(\boldsymbol{X}^T)$。

(16) 中的 $\boldsymbol{x}_1$ 转置运算也解释了 $\text{Null}(\boldsymbol{X}^T)$ 括号里面为什么是 $\boldsymbol{X}^T$。

同理，把 $\boldsymbol{x}_2$ 投影到 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3\}$ 中得到 $\boldsymbol{x}_1$ 在 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3\}$ 的坐标为 $(2.8282, 0, 0)$，对应矩阵运算具体为：

$$\boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}=\begin{bmatrix}-1 & \sqrt{3} & -2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\underbrace{\begin{bmatrix}-0.3536\\0.6124\\-0.7071\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{u}_1}\underbrace{\begin{bmatrix}-0.9297\\-0.1465\\0.3380\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{u}_2}\underbrace{\begin{bmatrix}0.1034\\0.7769\\0.6211\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{u}_3}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2.8284 & 0 & 0\end{bmatrix} \tag{17}$$

特征值分解

当然，我们也可以用特征值分解得到 $\boldsymbol{U}$。首先计算格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$:

$$\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}1 & -1\\-\sqrt{3} & \sqrt{3}\\2 & -2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & -1\\-\sqrt{3} & \sqrt{3}\\2 & -2\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}2 & -3.4641 & 4\\-3.4641 & 6 & -6.9282\\4 & -6.9282 & 8\end{bmatrix} \tag{18}$$

对 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 特征值分解可以得到 $\boldsymbol{U}$:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}&=\begin{bmatrix}2 & -3.4641 & 4\\-3.4641 & 6 & -6.9282\\4 & -6.9282 & 8\end{bmatrix}\\&=\underbrace{\begin{bmatrix}-0.3536 & -0.9297 & 0.1034\\0.6124 & -0.1465 & 0.7769\\-0.7071 & 0.3380 & 0.6211\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{U}}\begin{bmatrix}16 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\end{bmatrix}\underbrace{\begin{bmatrix}-0.3536 & 0.6124 & -0.7071\\-0.9297 & -0.1465 & 0.3380\\0.1034 & 0.7769 & 0.6211\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}}\end{aligned} \tag{19}$$

图 13 所示为矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的**列空间** $C(\boldsymbol{X})$ 和**左零空间** $\mathrm{Null}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}})$ 之间关系。

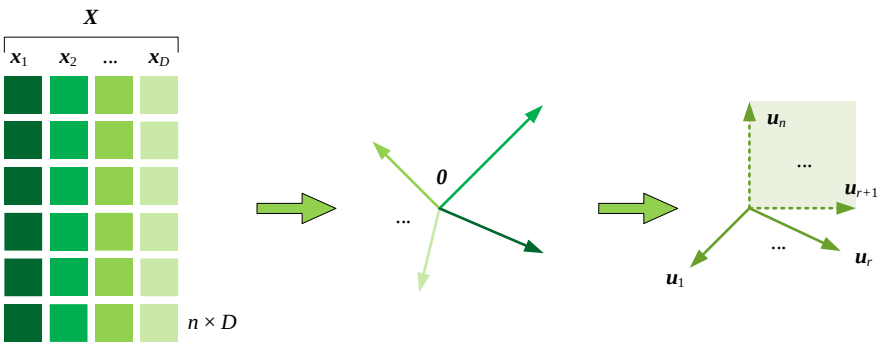


图 13. 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的**列空间** $C(\boldsymbol{X})$ 和**左零空间** $\mathrm{Null}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}})$

行向量

下面，我们聊一下 $\boldsymbol{X}$ 矩阵的**行向量**。

很明显 $\boldsymbol{X}$ 的三个**行向量**也是线性相关:

$$\boldsymbol{x}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}^{(2)} = \begin{bmatrix} -\sqrt{3} & \sqrt{3} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}^{(3)} = \begin{bmatrix} 2 & -2 \end{bmatrix} \tag{20}$$

如图 14 (a) 所示，为了装下**行向量** $\boldsymbol{x}^{(1)}$、$\boldsymbol{x}^{(2)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(3)}$，我们需要二维直角坐标系 $\mathbb{R}^2$。而图 14 (b) 告诉我们，用 $\boldsymbol{v}_1$ 这个单位向量就足以描述 $\boldsymbol{x}^{(1)}$、$\boldsymbol{x}^{(2)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(3)}$，因为 $\boldsymbol{x}^{(1)}$、$\boldsymbol{x}^{(2)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(3)}$可以写成：

$$\boldsymbol{x}^{(1)} = a\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}, \quad \boldsymbol{x}^{(2)} = b\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}, \quad \boldsymbol{x}^{(3)} = c\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \tag{21}$$

白话说，$\mathbb{R}^2$ 中一维子空间 span($\boldsymbol{v}_1$) 就足够装下 $\boldsymbol{X}$ 的三个**行向量**。

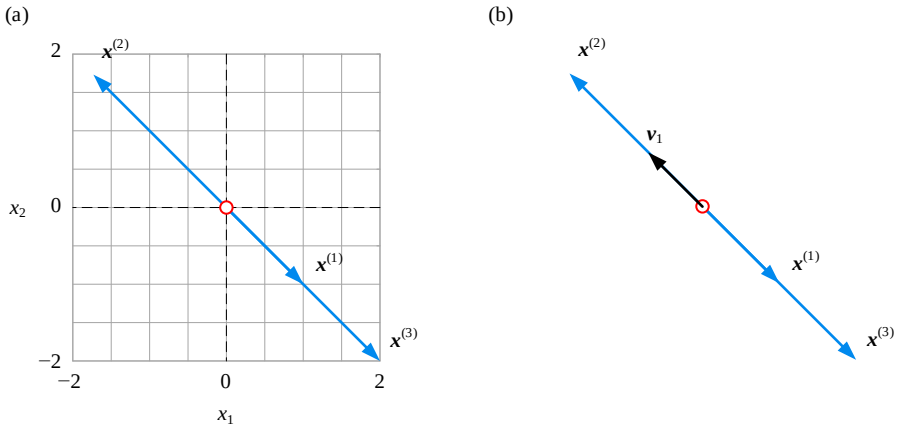


图 14. 从二维空间到一维空间

(15) 给出的 SVD 分解结果已经帮我们找到了 $\boldsymbol{v}_1$。拔出萝卜带出泥，我们也计算得到 $\boldsymbol{v}_2$。$\boldsymbol{v}_1$ 张成**行空间** $R(\boldsymbol{X})$ = span($\boldsymbol{v}_1$)，$\boldsymbol{v}_2$ 张成**零空间** Null($\boldsymbol{X}$) = span($\boldsymbol{v}_2$)。

而规范正交基 [$\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_2$] 则是张成 $\mathbb{R}^2$ 无数规范正交基中的一个。[$\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_2$] 是因 $\boldsymbol{X}$ 而来。

如图 15 (b) 所示，显然 $R(\boldsymbol{X})$ = span($\boldsymbol{v}_1$) 垂直于 Null($\boldsymbol{X}$) = span($\boldsymbol{v}_2$)，即互为正交补。

⚠ 格外注意，大家不要留下错误印象，$\boldsymbol{x}_1$ 或 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 就是 $\boldsymbol{u}_1$ 或 $\boldsymbol{v}_1$ 的方向重合。一般情况这种重合关系不存在，本例中产生重合的原因是 rank($\boldsymbol{X}$) = 1。

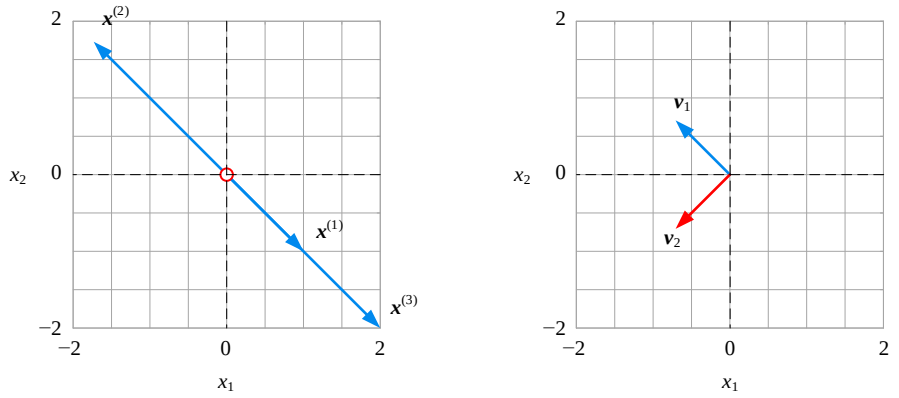


图 15. 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的**行空间** $R(\boldsymbol{X})$ 和**零空间** Null($\boldsymbol{X}$)

把**行向量** $\boldsymbol{x}^{(1)}$投影到 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 中得到：

$$\boldsymbol{x}^{(1)}\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix} \left[\underbrace{\begin{bmatrix} -0.7071 \\ 0.7071 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{v}_1} \underbrace{\begin{bmatrix} -0.7071 \\ -0.7071 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{v}_2} \right] = \begin{bmatrix} -1.4142 & 0 \end{bmatrix} \tag{22}$$

也就是说，$\boldsymbol{x}^{(1)}$ 在 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 这个规范正交基中的坐标为 $(-1.4142, 0)$。请大家自己计算 $\boldsymbol{x}^{(2)}$和 $\boldsymbol{x}^{(3)}$ 投影到 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 结果。

总结来说，Null($\boldsymbol{X}$) 是 $\boldsymbol{X}$ 的**零空间**是因为 $\boldsymbol{X}$ 投影到这个空间的结果都是 0。而 Null($\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$) 是 $\boldsymbol{X}$ 的**左零空间**是因为，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 投影到这个空间的结果都是 0。

特征值分解

下面，我们再用特征值分解求解 $\boldsymbol{V}$。也是先计算格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$：

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -\sqrt{3} & \sqrt{3} \\ 2 & -2 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -\sqrt{3} & \sqrt{3} \\ 2 & -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 & -8 \\ -8 & 8 \end{bmatrix} \tag{23}$$

对 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 进行特征值分解，便得到 $\boldsymbol{V}$：

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 8 & -8 \\ -8 & 8 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} -0.7071 & -0.7071 \\ 0.7071 & -0.7071 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}} \begin{bmatrix} 16 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} -0.7071 & 0.7071 \\ -0.7071 & -0.7071 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}} \tag{24}$$

图 16 所示为矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的**行空间** $R(\boldsymbol{X})$ 和**零空间** Null($\boldsymbol{X}$) 之间的关系。

此外，值得大家注意的是，比较 (19) 和 (24)，大家容易发现，两个特征值分解都得到了 16 这个特征值。为什么会出现这种情况？下一节将给出答案。

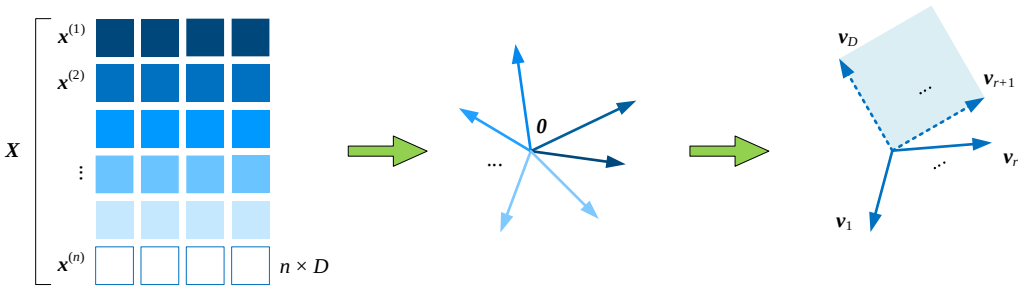


图 16. 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的**行空间** $R(\boldsymbol{X})$ 和**零空间** Null($\boldsymbol{X}$)

通过以上分析，希望大家能从几何角度理解六个空间之间的关系。此外，大家也看到奇异值分解的强大之处——任何实数矩阵都可以进行奇异值分解。

23.5 格拉姆矩阵：向量模、夹角余弦值的集合体

我们可以把矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的每一行或每一列分别视作向量。而对于一个向量而言，最能概括它的性质的基本信息莫过于——长度和方向。

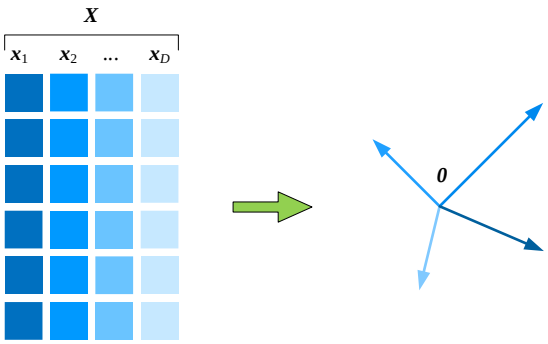


图 17. 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 列向量几何化为空间向量

向量长度不难确定，向量模 (L^2 范数) 就是向量长度。

然而，向量的方向该怎么量化？我们目前接触到几何形体定位最常用的手段是平面或三维直角坐标系，直角坐标系在量化位置、长度、方向具有天然优势。

但是对于图 17 所示向量，随着维度不断升高，直角坐标系显得有点力有不逮。

极坐标系

于是，我们想到利用极坐标量化方向。

如图 18 所示，极坐标中定位需要长度和角度，恰巧对应向量的两个重要的元素。唯一的问题是，极坐标系中量化向量和极轴的夹角，即绝对角度。我们接触最多的是向量两两夹角，即相对角度值。

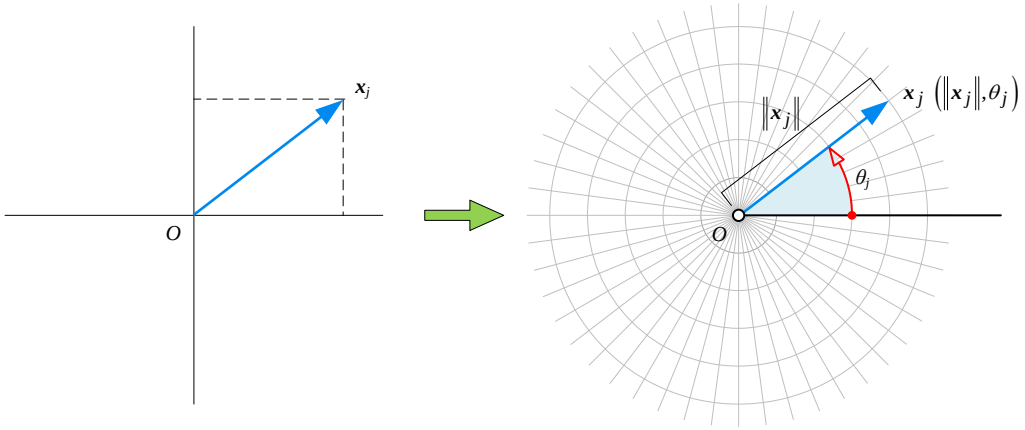


图 18. 从平面直角坐标系到极坐标系，图片参考《数学要素》

此外，向量两两夹角数量也是个问题。数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 有 D 个列向量，这意味着我们可以得到 D 个向量模，以及 $D(D-1)/2$ (C_D^2) 个向量两两夹角余弦值。按照怎样规则保存这些结果？我们反复提到的格拉姆矩阵就是解决方案。而且，本书第 12 章介绍的 Cholesky 分解则帮我们找到这些向量的“绝对位置”。

长度、相对夹角

给定一个 $n \times D$ 数据矩阵 $\boldsymbol{X}$，形状细高，也就是 $n > D$，它的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 为：

$$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} \tag{25}$$

如图 19 所示，$\boldsymbol{G}$ 为对称方阵，形状为 $D \times D$。

用向量内积来表达 $\boldsymbol{G}$:

$$\boldsymbol{G} = \begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_D \rangle \\ \langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_D \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \boldsymbol{x}_D, \boldsymbol{x}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{x}_D, \boldsymbol{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{x}_D, \boldsymbol{x}_D \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_1\|\cos\theta_{1,1} & \|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_2\|\cos\theta_{2,1} & \cdots & \|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_D\|\cos\theta_{1,D} \\ \|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_1\|\cos\theta_{1,2} & \|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_2\|\cos\theta_{2,2} & \cdots & \|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_D\|\cos\theta_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_1\|\cos\theta_{1,D} & \|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_2\|\cos\theta_{2,D} & \cdots & \|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_D\|\cos\theta_{D,D} \end{bmatrix} \tag{26}$$

可以发现，$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 包含的信息有两方面：$\boldsymbol{X}$ 列向量的模、列向量两两夹角余弦值。

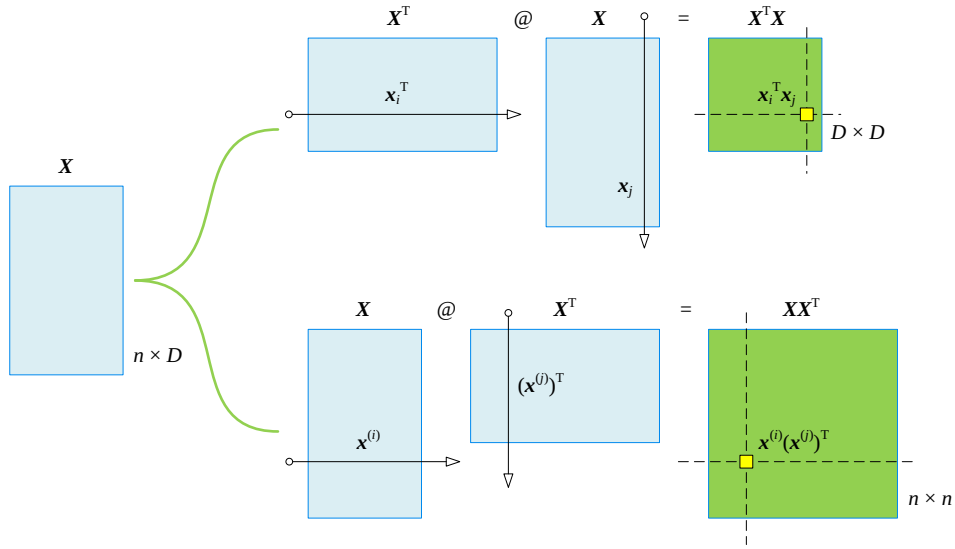


图 19. 两个格拉姆矩阵

而余弦相似度矩阵 $\boldsymbol{C}$ 则进一步减小信息量，只关注列向量夹角余弦值：

$$\boldsymbol{C}=\begin{bmatrix} \frac{\boldsymbol{x}_1\cdot\boldsymbol{x}_1}{\|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_1\|} & \frac{\boldsymbol{x}_1\cdot\boldsymbol{x}_2}{\|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_2\|} & \cdots & \frac{\boldsymbol{x}_1\cdot\boldsymbol{x}_D}{\|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_D\|} \\ \frac{\boldsymbol{x}_2\cdot\boldsymbol{x}_1}{\|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_1\|} & \frac{\boldsymbol{x}_2\cdot\boldsymbol{x}_2}{\|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_2\|} & \cdots & \frac{\boldsymbol{x}_2\cdot\boldsymbol{x}_D}{\|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_D\|} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\boldsymbol{x}_D\cdot\boldsymbol{x}_1}{\|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_1\|} & \frac{\boldsymbol{x}_D\cdot\boldsymbol{x}_2}{\|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_2\|} & \cdots & \frac{\boldsymbol{x}_D\cdot\boldsymbol{x}_D}{\|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_D\|} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & \cos\theta_{2,1} & \cdots & \cos\theta_{1,D} \\ \cos\theta_{1,2} & 1 & \cdots & \cos\theta_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \cos\theta_{1,D} & \cos\theta_{2,D} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \tag{27}$$

计算 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 的格拉姆矩阵，并定义其为 $\boldsymbol{H}$：

$$\boldsymbol{H}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} \tag{28}$$

如图 19 所示，$\boldsymbol{H}$ 为对称方阵，形状为 $n\times n$。

用向量内积来表达 $\boldsymbol{H}$：

$$\boldsymbol{H}=\begin{bmatrix} \left\langle \boldsymbol{x}^{(1)},\boldsymbol{x}^{(1)}\right\rangle & \left\langle \boldsymbol{x}^{(1)},\boldsymbol{x}^{(2)}\right\rangle & \cdots & \left\langle \boldsymbol{x}^{(1)},\boldsymbol{x}^{(n)}\right\rangle \\ \left\langle \boldsymbol{x}^{(2)},\boldsymbol{x}^{(1)}\right\rangle & \left\langle \boldsymbol{x}^{(2)},\boldsymbol{x}^{(2)}\right\rangle & \cdots & \left\langle \boldsymbol{x}^{(2)},\boldsymbol{x}^{(n)}\right\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left\langle \boldsymbol{x}^{(n)},\boldsymbol{x}^{(1)}\right\rangle & \left\langle \boldsymbol{x}^{(n)},\boldsymbol{x}^{(2)}\right\rangle & \cdots & \left\langle \boldsymbol{x}^{(n)},\boldsymbol{x}^{(n)}\right\rangle \end{bmatrix} \tag{29}$$

$\boldsymbol{H}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 也包含两方面的信息：$\boldsymbol{X}$ 行向量的模、行向量之间两两夹角余弦值。

特征值分解

下面用特征值分解找到 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 之间联系。

先对 $\boldsymbol{G}=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 进行特征值分解，得到：

$$\boldsymbol{G}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{30}$$

假设 $\lambda_{\boldsymbol{G}}$ 为 $\boldsymbol{G}$ 的一个特征值，对应的特征向量为 $\boldsymbol{v}$，由此得到等式：

$$\boldsymbol{G}\boldsymbol{v}=\lambda_{\boldsymbol{G}}\boldsymbol{v} \tag{31}$$

即，

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}=\lambda_{\boldsymbol{G}}\boldsymbol{v} \tag{32}$$

然后对 $\boldsymbol{H}$ 特征值分解：

$$\boldsymbol{H}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}} \tag{33}$$

$\boldsymbol{U}$ 为特征向量矩阵，$\boldsymbol{D}$ 为特征值对角阵。

假设 $\lambda_{\boldsymbol{H}}$ 为 $\boldsymbol{H}$ 的一个特征值，对应特征向量为 $\boldsymbol{u}$，构造等式：

$$\boldsymbol{H}\boldsymbol{u}=\lambda_{\boldsymbol{H}}\boldsymbol{u} \tag{34}$$

即，

$$\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}=\lambda_{\boldsymbol{H}}\boldsymbol{u} \tag{35}$$

(32) 左右乘以 $\boldsymbol{X}$，得到：

$$\underset{\boldsymbol{u}}{\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}}=\lambda_{\boldsymbol{G}}\underset{\boldsymbol{u}}{\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}} \tag{36}$$

比较 (35) 和 (36)，可以发现 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 特征值分解得到的非零特征值存在等价关系。这就回答了为什么 (19) 和 (24) 都有 16 这个特征值这个问题。其实，我们在本书第 16 章也谈过这一现象。

23.6 标准差向量：以数据质心为起点

协方差矩阵可以看成是特殊的格拉姆矩阵，协方差矩阵也是一个“向量模”、“向量间夹角”信息的集合体。

对于形状为 $n\times D$ 的样本数据矩阵 $\boldsymbol{X}$，它的协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 可以通过下式计算得到。

$$\boldsymbol{\Sigma}=\frac{\left(\underbrace{\boldsymbol{X}-\mathrm{E}(\boldsymbol{X})}_{\text{Centered}}\right)^{\mathrm{T}}\left(\underbrace{\boldsymbol{X}-\mathrm{E}(\boldsymbol{X})}_{\text{Centered}}\right)}{n-1}=\frac{\boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_c}{n-1} \tag{37}$$

分母上，$n-1$ 仅仅起到取平均作用。$\boldsymbol{X}_c$ 的格拉姆矩阵为：

$$\boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_c = (n-1)\boldsymbol{\Sigma} \tag{38}$$

图 20 所示，$\boldsymbol{X}$ 列向量的向量起点为 $\boldsymbol{0}$。而去均值获得 $\boldsymbol{X}_c$ 过程，相当于把列向量起点移动到质心 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$：

$$\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X}) \tag{39}$$

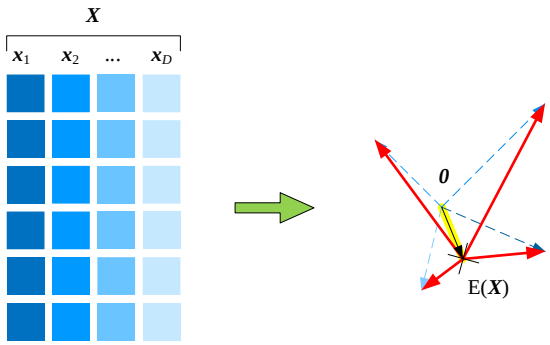


图 20. 数据质心为 $\boldsymbol{X}_c$ 列向量的起点

将 $\boldsymbol{X}_c$ 列向量的起点也平移到 $\boldsymbol{0}$，和 $\boldsymbol{X}$ 列向量起点对齐。图 21 比较 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{X}_c$ 列向量，显然去均值之后，向量的长度和向量之间的夹角都发生了变化。有一种特例是，当质心 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 本来就在 $\boldsymbol{0}$ 时，这样 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}_c$。

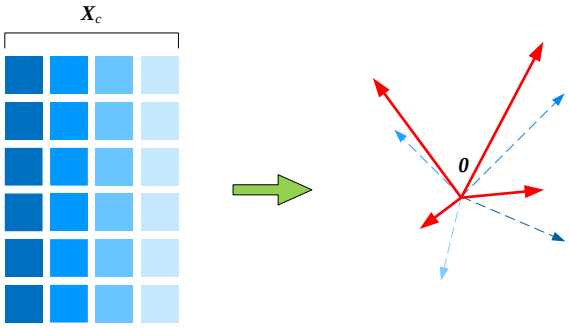


图 21. 比较 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{X}_c$ 列向量

在数据科学和机器学习应用中，最常见的三大类数据矩阵就是：1) 原始数据矩阵 $\boldsymbol{X}$；2) 中心化数据矩阵 $\boldsymbol{X}_c$；3) 标准化数据矩阵 $\boldsymbol{Z}_{\boldsymbol{X}}$ (z 分数)。

根据本章前文介绍数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 有四个空间；显然，中心化数据矩阵 $\boldsymbol{X}_c$ 也有自己的四个空间！那么大家立刻会想到，标准化数据矩阵 $\boldsymbol{Z}_{\boldsymbol{X}}$，肯定也有对应的四个空间！

也就是说，如果用 SVD 分解 $\boldsymbol{X}$、$\boldsymbol{X}_c$、$\boldsymbol{Z}_{\boldsymbol{X}}$ 这三个数据矩阵，会得到不同的结果。下一章则通过各种矩阵分解帮我们分析这三大类数据特点和区别。

标准差向量

整理 (37) 得到 $\boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_c$：

$$\boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_c=(n-1)\boldsymbol{\Sigma}=(n-1)\begin{bmatrix}\sigma_1^2 & \rho_{1,2}\sigma_1\sigma_2 & \cdots & \rho_{1,D}\sigma_1\sigma_D\\ \rho_{1,2}\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 & \cdots & \rho_{2,D}\sigma_2\sigma_D\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \rho_{1,D}\sigma_1\sigma_D & \rho_{2,D}\sigma_2\sigma_D & \cdots & \sigma_D^2\end{bmatrix} \tag{40}$$

对比 (26) 和 (40)，我们可以把标准差 σ_j 也看做是向量 $\boldsymbol{\sigma}_j$，我们给它起个名字“标准差向量”。

标准差向量 $\boldsymbol{\sigma}_j$ 之间的夹角的余弦值便是相关性系数。这样 (40) 可以写成：

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_1\rangle & \langle\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_D\rangle\\ \langle\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{\sigma}_1\rangle & \langle\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{\sigma}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{\sigma}_D\rangle\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \langle\boldsymbol{\sigma}_D,\boldsymbol{\sigma}_1\rangle & \langle\boldsymbol{\sigma}_D,\boldsymbol{\sigma}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{\sigma}_D,\boldsymbol{\sigma}_D\rangle\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\|\boldsymbol{\sigma}_1\|\|\boldsymbol{\sigma}_1\|\cos\phi_{1,1} & \|\boldsymbol{\sigma}_1\|\|\boldsymbol{\sigma}_2\|\cos\phi_{2,1} & \cdots & \|\boldsymbol{\sigma}_1\|\|\boldsymbol{\sigma}_D\|\cos\phi_{1,D}\\ \|\boldsymbol{\sigma}_2\|\|\boldsymbol{\sigma}_1\|\cos\phi_{1,2} & \|\boldsymbol{\sigma}_2\|\|\boldsymbol{\sigma}_2\|\cos\phi_{2,2} & \cdots & \|\boldsymbol{\sigma}_2\|\|\boldsymbol{\sigma}_D\|\cos\phi_{2,D}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \|\boldsymbol{\sigma}_D\|\|\boldsymbol{\sigma}_1\|\cos\phi_{1,D} & \|\boldsymbol{\sigma}_D\|\|\boldsymbol{\sigma}_2\|\cos\phi_{2,D} & \cdots & \|\boldsymbol{\sigma}_D\|\|\boldsymbol{\sigma}_D\|\cos\phi_{D,D}\end{bmatrix} \tag{41}$$

如果两个随机变量线性相关，则对应标准差向量平行；如果两个随机变量线性无关，对应的标准差向量正交。

图 22 比较余弦相似度和相关性系数。

⚠ 注意，图 22 忽略了 $n-1$ 对缩放的影响。

相关性系数和余弦相似性都描述了两个“相似程度”，也就是靠近的程度；两者取值范围都是 [–1, 1]。越靠近 1，说明越相似，向量越贴近；越靠近–1，说明越不同，向量越背离。

不同的是，相关性系数量化“标准差向量”$\boldsymbol{\sigma}_j$ 之间相似，余弦相似性量化数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 列向量 $\boldsymbol{x}_j$ 之间相似。$\boldsymbol{x}_j$ 向量的始点为原点 $\boldsymbol{0}$，$\boldsymbol{\sigma}_j$ 向量始点为数据质心。

大家可能想要知道 $\boldsymbol{x}_j$ 向量和 $\boldsymbol{\sigma}_j$ 向量到底是什么？它们的具体坐标值又如何？我们下一章回答这个问题。

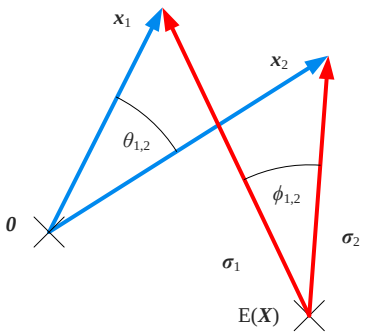


图 22. 余弦相似度和相关性系数的关系，图中忽略标准差向量的缩放系数

相关性系数

类似余弦相似度矩阵 $\boldsymbol{C}$，相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 仅仅含有标准差向量夹角 (即相关性系数) 这一层信息：

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix} \frac{\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_1}{\|\boldsymbol{\sigma}_1\|\|\boldsymbol{\sigma}_1\|} & \frac{\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}{\|\boldsymbol{\sigma}_1\|\|\boldsymbol{\sigma}_2\|} & \cdots & \frac{\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_D}{\|\boldsymbol{\sigma}_1\|\|\boldsymbol{\sigma}_D\|} \\ \frac{\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{\sigma}_1}{\|\boldsymbol{\sigma}_2\|\|\boldsymbol{\sigma}_1\|} & \frac{\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}{\|\boldsymbol{\sigma}_2\|\|\boldsymbol{\sigma}_2\|} & \cdots & \frac{\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{\sigma}_D}{\|\boldsymbol{\sigma}_2\|\|\boldsymbol{\sigma}_D\|} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\boldsymbol{\sigma}_D\cdot\boldsymbol{\sigma}_1}{\|\boldsymbol{\sigma}_D\|\|\boldsymbol{\sigma}_1\|} & \frac{\boldsymbol{\sigma}_D\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}{\|\boldsymbol{\sigma}_D\|\|\boldsymbol{\sigma}_2\|} & \cdots & \frac{\boldsymbol{\sigma}_D\cdot\boldsymbol{\sigma}_D}{\|\boldsymbol{\sigma}_D\|\|\boldsymbol{\sigma}_D\|} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & \cos\phi_{2,1} & \cdots & \cos\phi_{1,D} \\ \cos\phi_{1,2} & 1 & \cdots & \cos\phi_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \cos\phi_{1,D} & \cos\phi_{2,D} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \tag{42}$$

如图 23 所示，以二元随机数为例，相关性系数可以通过散点、二元高斯分布 PDF 曲面、PDF 等高线、椭圆表达。有了本节内容，在众多可视化方案基础上，相关性系数又多了一层几何表达。本系列丛书《概率统计》将讲解随机数、二元高斯分布、概率密度函数 PDF 等概念。此外，《概率统计》中大家会看到无处不在的椭圆。

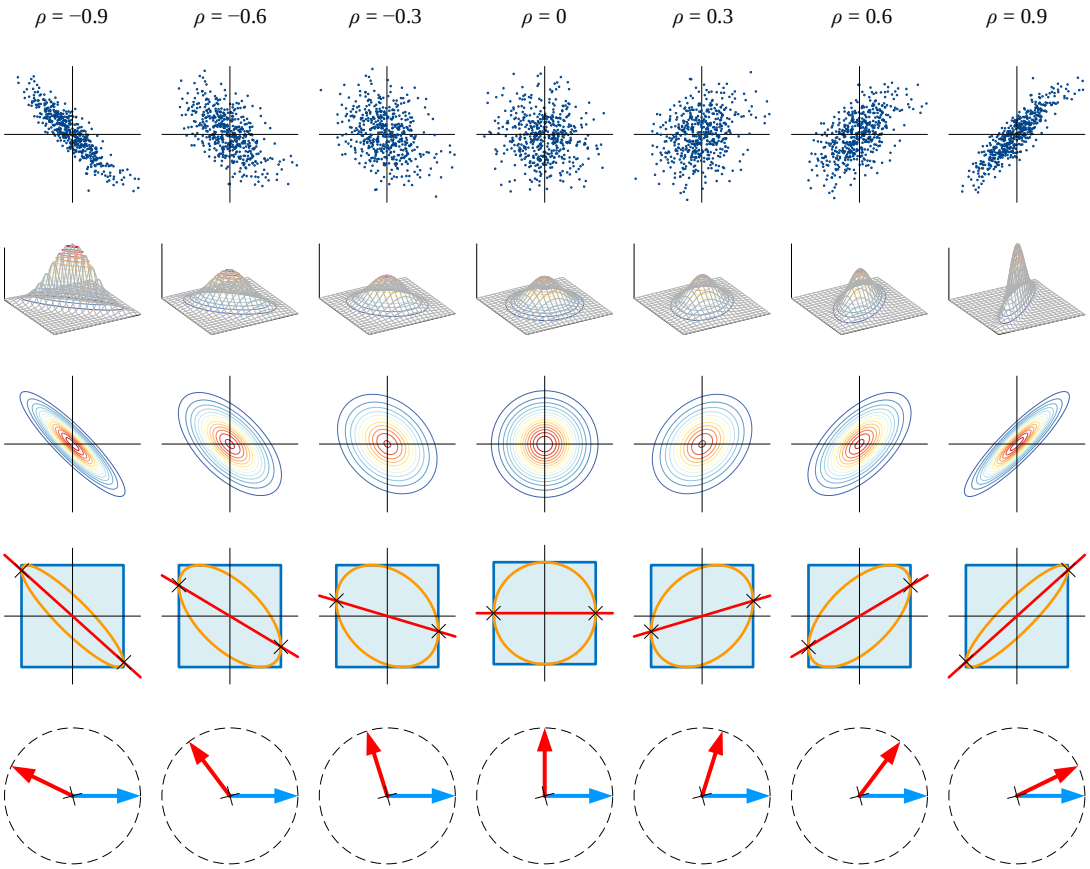


图 23. 相关性系数的几种表达，图中标准差相等，质心位于原点

23.7 白话说空间：以鸢尾花数据为例

本章最后一节，我们尝试尽量用大白话把本章之前讲解的四个空间说清楚。本节用的数据是鸢尾花数据前两列，即 $\boldsymbol{X}_{150\times 2} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2]$。

标准正交基

矩阵 $\boldsymbol{X}$ 有 150 行、2 列，有 150 个行向量，它们就是图 24 中灰色带箭头的线段。为了装下这 150 个行向量，我们自然而然地想到了 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ —— 平面 $\mathbb{R}^2$ 的标准正交基。

图中散点横坐标就对应 $\boldsymbol{X}$ 的第一列向量 $\boldsymbol{x}_1$，纵坐标对应 $\boldsymbol{X}$ 的第二列向量 $\boldsymbol{x}_2$。

本书第 7 章讲过，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 表示平面 $\mathbb{R}^2$ 最为自然，因此叫做“标准”正交基。

大家知道，1 维空间是相当于一条过原点的直线，显然图 24 的散点不在一条过原点的直线上。也就是说，要想装下 $\boldsymbol{X}$ 的行向量至少需要一个二维空间。因此 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 对于图 24 向量来说，大小正好，没有任何富余。

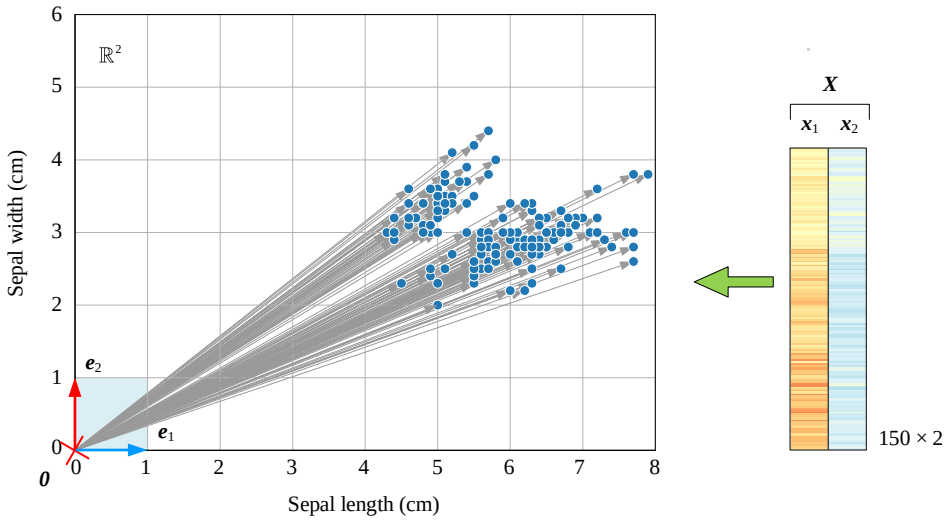


图 24. 找一个能够装下 $\boldsymbol{X}$ 行向量的空间

行空间、零空间

根据本章前文所学，为了计算 $\boldsymbol{X}$ 的**行空间、零空间**，我们可以首先计算格拉姆矩阵 (如所示)，然后对 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 特征值分解：

$$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 5223.85 & 2673.43 \\ 2673.43 & 1430.40 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0.888 & -0.459 \\ 0.459 & 0.888 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}} \underbrace{\begin{bmatrix} 6605.05 & \\ & 49.20 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Lambda}} \underbrace{\begin{bmatrix} 0.888 & 0.459 \\ -0.459 & 0.888 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}} \tag{43}$$

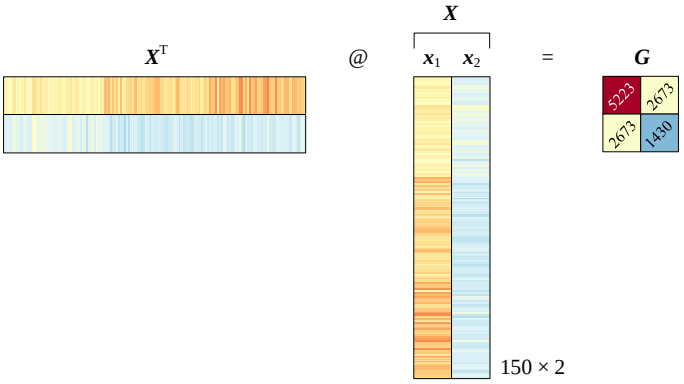


图 25. 计算格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$

可以张起 $\mathbb{R}^2$ 的规范正交基有无数个，(43) 中的 $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 只是其中一个。$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 在平面上的网格如图 26 所示。$\boldsymbol{X}$ 在这个 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 坐标系中有全新的坐标点。请大家自己回忆怎么计算新的坐标点。

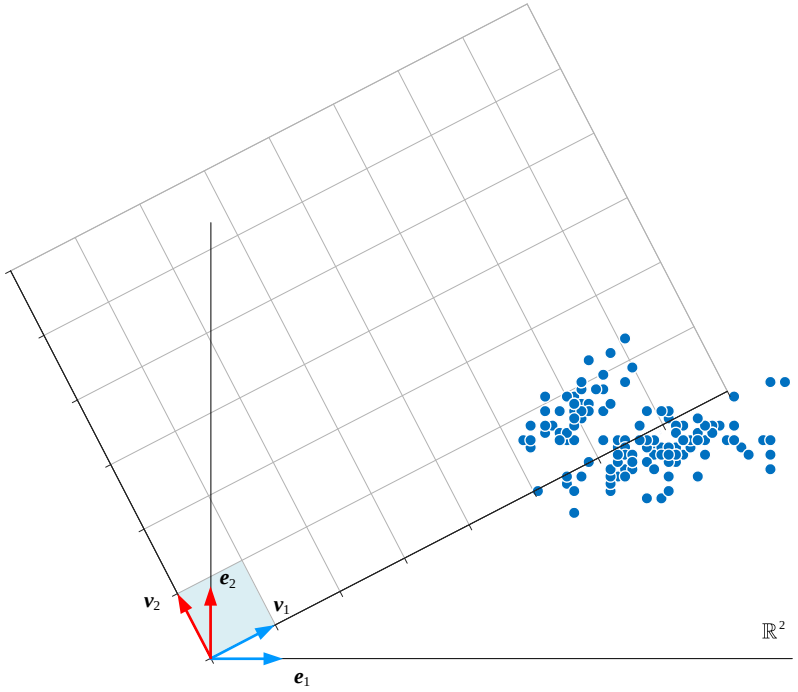


图 26. 规范正交基 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$

大家可能会问，之前我们已经在 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 这个坐标系中“自然地”描绘了数据矩阵 $\boldsymbol{X}$，为何还要劳神费力地寻找 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$。

这是因为对 $\boldsymbol{X}$ 来说，$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 可谓“量身打造”！下面，我们看看 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 有何特殊之处。

如图 27 所示，$\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}_1$ 投影结果为 $\boldsymbol{y}_1 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1$。$\boldsymbol{X}$ 是图中的蓝色点 ●，$\boldsymbol{y}_1$ 为图中的蓝色叉 × 在 $\text{span}(\boldsymbol{v}_1)$ 上的坐标值。蓝色叉 × 距离原点欧氏距离的平方对应 (43) 中特征值 $\lambda_1 = 6605.05$。

利用本书第 18 章介绍的优化视角来观察，给定平面内任意单位向量 $\boldsymbol{v}$，$\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}\|_2^2$ 的最大值就是 λ_1。而 $\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}\|_2$ 能取得的最大值就是 $\sqrt{\lambda_1}$，对应 $\boldsymbol{X}$ 的最大奇异值，即 $s_1 = \sqrt{\lambda_1}$。

反之，如图 28 所示，$\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}_2$ 投影结果为 $\boldsymbol{y}_2 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2$。给定平面内任意单位向量 $\boldsymbol{v}$，$\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}\|_2^2$ 的最小值就是 λ_2。

基底 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 对于 $\boldsymbol{X}$ 来说，也显得“捉襟见肘”，维度不能再进一步减小。

如果 $\boldsymbol{X}$ 非列满秩，$\boldsymbol{V}$ 就会出现“余富”，这个余富就是零空间。

比如，$\boldsymbol{X}_1 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1$ 就是图 27 中蓝色叉 × 在 $\mathbb{R}^2$ 中坐标。蓝色叉 × 显然都在一条过原点的直线上。$\boldsymbol{X}_1$ 的秩为 1 也印证了这一点。对于来说，$\text{span}(\boldsymbol{v}_1)$ 足够装下 $\boldsymbol{X}_1$，余富的 $\text{span}(\boldsymbol{v}_2)$ 就是 $\boldsymbol{X}_1$ 的零空间。很明显，$\boldsymbol{X}_1$ 在 $\text{span}(\boldsymbol{v}_2)$ 投影为零向量 $\boldsymbol{0}$。感兴趣的话，大家可以自己计算 $\boldsymbol{X}_1$ 的特征值，它的一个特征值是 $\lambda_1 = 6605.05$，另一个特征值为 0。

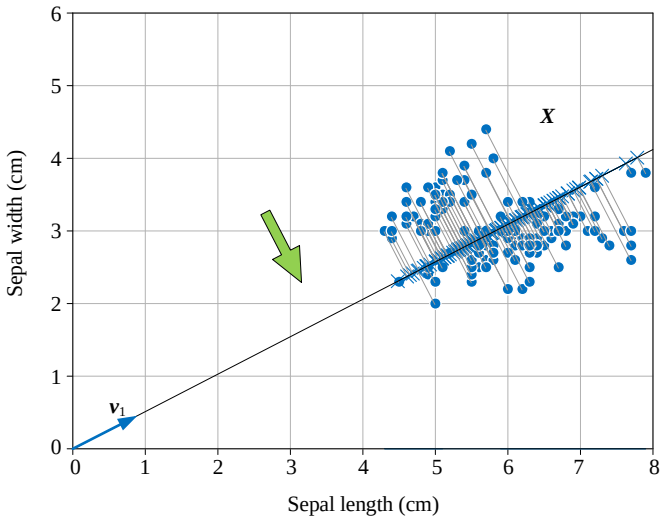


图 27. $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}_1$ 投影

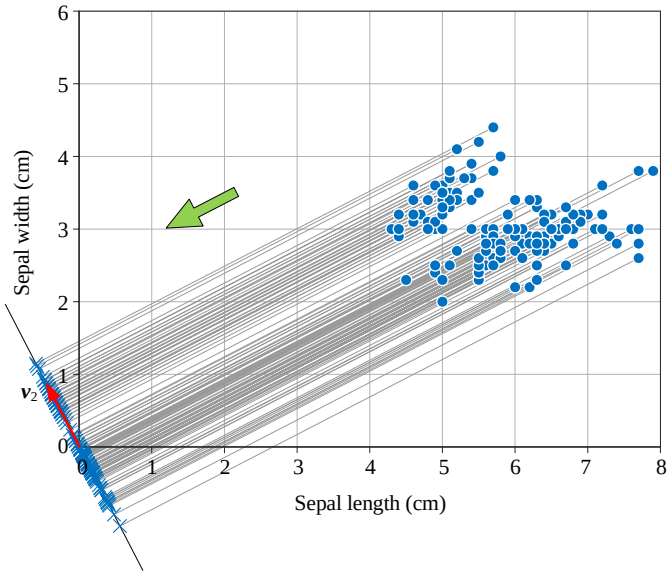


图 28. $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}_2$ 投影

列空间、左零空间

矩阵 $\boldsymbol{X}$ 有两个列向量 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$，$\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 的行数都是 150。为了装下 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$，我们自然想到 $\mathbb{R}^{150}$。但是 $\mathbb{R}^{150}$ 对于矩阵 $\boldsymbol{X}$ 来说简直就是“高射炮打蚊子”，小题大做！

下面解释为什么。

为了计算矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的**列空间、左零空间**，我们首先计算格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$，计算过程如图 29 所示。格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 形状为 150 × 150。格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 看着很大，实际上它的秩只有 2。也就是说，$\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 所有 150 个列向量都可以用两个列向量线性组合来表达。

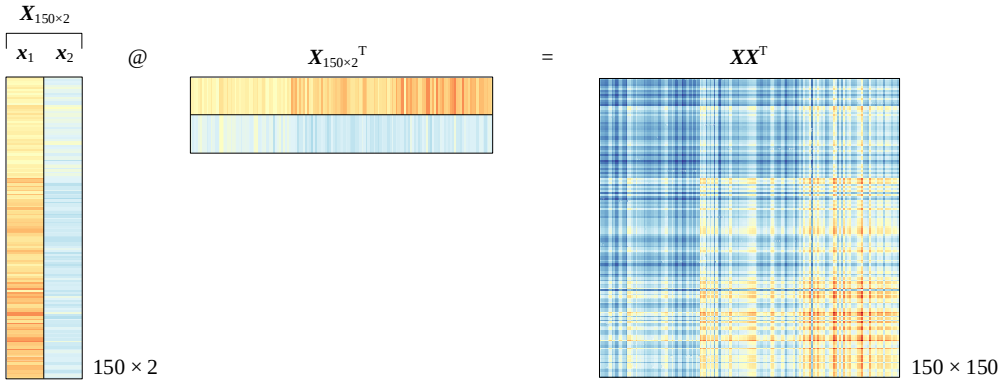


图 29. 计算格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$

对 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 特征值分解得到特征向量构成的矩阵 $\boldsymbol{U}$ 如图 30 所示。$\boldsymbol{U}$ 的形状也是 150×150。$\boldsymbol{U}$ 是 $\mathbb{R}^{150}$ 中无数个规范正交阵中的一个。

$\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 的非零特征值就是 (43) 中的两个特征值，剩余的特征值都为 0。也就是说，$\boldsymbol{U}$ 的前两列 $[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2]$ 就是我们要找的列空间，$[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2]$ 正好可以装下 $\boldsymbol{X}$。剩余的 148 列构成左零空间 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}})$。也就是说，想要装下 $\boldsymbol{X}$ 的列向量，$\mathbb{R}^{150}$ 富富有余。

请大家用同样的思路分析 $\boldsymbol{X}_c$、$\boldsymbol{Z}_{\boldsymbol{X}}$。

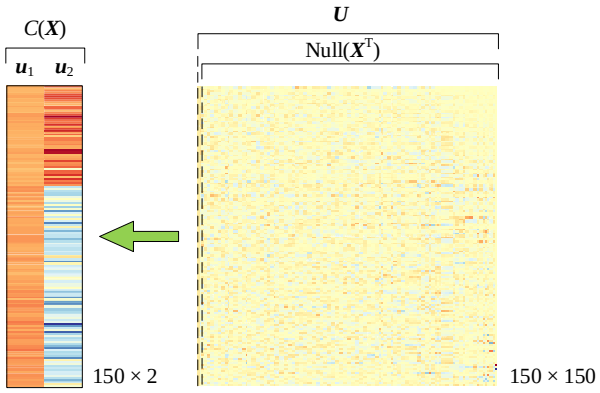


图 30. 格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 的特征向量矩阵 $\boldsymbol{U}$

有数据的地方，就有矩阵！

有矩阵的地方，就有向量！

有向量的地方，就有几何！

有向量的地方，就有空间！

本书最后三章开启了一场特殊的旅行——“数据三部曲”。这三章梳理总结本书前文核心内容，同时展望这些数学工具的应用。本章作为“数据三部曲”的第一部，主要通过数据矩阵奇异值分解介绍了四个空间。

下图虽然是一幅图，但是其中有四幅子图，它们最能总结本章的核心内容——四个空间。强烈建议大家自行脑补图中缺失的各种符号，以及它们的意义。

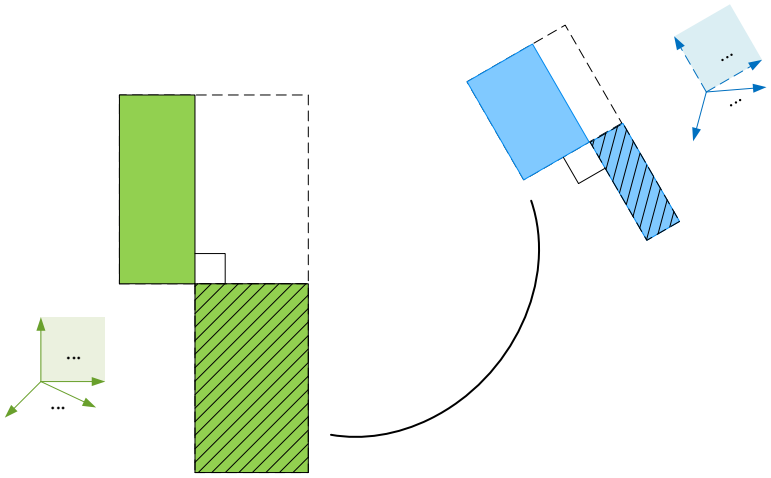


图 31. 总结本章重要内容的四幅图

此外，本书还引出了中心化数据、标准化数据，并创造了“标准差向量”这个概念。格拉姆矩阵是原始数据矩阵列向量长度和两两角度信息的集合体，协方差矩阵则是标准差向量长度和两两角度的结合体。这种类比有助于我们理解线性代数工具在多元统计领域的应用。

推荐大家阅读 MIT 数学教授 Gilbert Strang 的 *Linear Algebra and Learning from Data*。这本书可谓线性代数工具的弹药库，从知识体系上给了本书作者很多启发。图书目前没有免费电子版图书，该书的专属网站提供样张和勘误等资源：

https://math.mit.edu/~gs/learningfromdata/

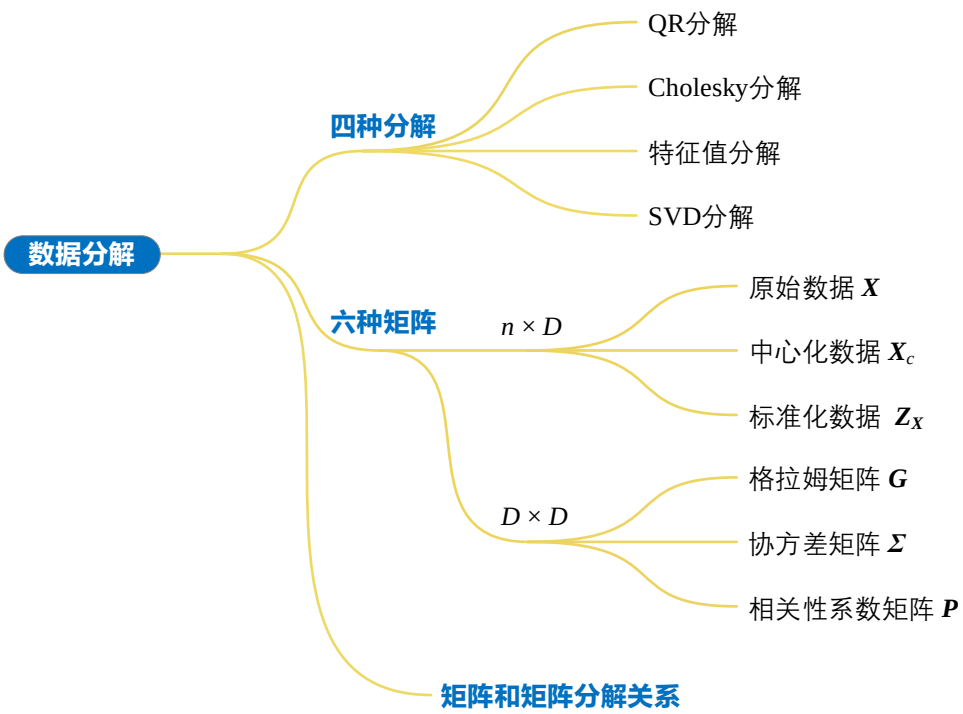
24 Data Matrix Decomposition

数据分解

从几何、空间、优化、统计视角解读

> 你不能教任何人任何东西，你只能帮助他在自己身上发现它。
>
> ***You cannot teach a man anything; you can only help him discover it in himself.***
>
> —— 伽利略·伽利莱 (Galilei Galileo) | 意大利物理学家、数学家及哲学家 | 1564 ~ 1642

- `numpy.average()` 计算平均值
- `numpy.corrcoef()` 计算数据的相关性系数
- `numpy.cov()` 计算协方差矩阵
- `numpy.diag()` 如果 A 为方阵，`numpy.diag(A)` 函数提取对角线元素，以向量形式输入结果；如果 a 为向量，`numpy.diag(a)` 函数将向量展开成方阵，方阵对角线元素为 a 向量元素
- `numpy.linalg.cholesky()` Cholesky 分解
- `numpy.linalg.eig()` 特征值分解
- `numpy.linalg.inv()` 矩阵求逆
- `numpy.linalg.norm()` 计算范数
- `numpy.linalg.svd()` 奇异值分解
- `numpy.ones()` 创建全 1 向量或矩阵
- `numpy.sqrt()` 计算平方根



24.1 为什么要分解矩阵?

QR 分解、Cholesky 分解、特征值分解、SVD 分解，这四种常用的分解的目的是什么？

它们分解的对象是什么？有何限制？

分解结果是什么？有何特殊性质？

矩阵分解之间有哪些区别和联系？

灵魂拷问来了——我们到底为什么需要分解矩阵？

大家可能会反问，前文学都学完了，现在才问是不是太晚了？

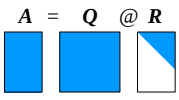
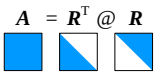
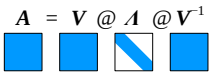
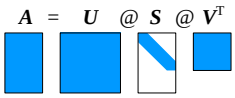
一点也不晚！矩阵分解是线性代数的核心中的核心，现在正是时候结合数据、几何、空间、优化、统计等视角总结这四种矩阵分解的最佳时机。

总结和比较

表 1 比较四种常用矩阵分解，请大家快速浏览这个表格，然后开始本章的学习。也请大家在完成本章内容学习后，回头仔细再看一遍表格内容。如果对任何矩阵分解细节感到生疏的话，请翻看本书前文对应内容。

再次强调，准确来说，表 1 中 $\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 是正交矩阵且行列式为 1 时，$\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 才是旋转矩阵，对应的几何操作才是纯粹的旋转。

表 1. 四种常用矩阵分解

矩阵分解	QR 分解	Cholesky 分解	特征值分解	SVD 分解
前提	任何实数矩阵都可以 QR 分解	正定矩阵才能 Cholesky 分解	可对角化矩阵才能进行特征值分解	任何实数矩阵都可以 SVD 分解
示意图				
公式	$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}$	$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}$ $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LL}^{\mathrm{T}}$	$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{V\Lambda V}^{-1}$ $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{V\Lambda V}^{\mathrm{T}}$ ($\boldsymbol{A}$ 为对称方阵时，其特征值分解又叫谱分解)	$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{USV}^{\mathrm{T}}$ (注意 $\boldsymbol{V}$ 的转置运算)
结果	$\boldsymbol{Q}$ 是正交矩阵 (完全型分解)，意味着 $\boldsymbol{Q}$ 是规范正交基 $\boldsymbol{R}$ 是上三角矩阵	$\boldsymbol{L}$ 为下三角方阵 $\boldsymbol{R}$ 为上三角方阵	$\boldsymbol{\Lambda}$ 为对角方阵，对角线元素为特征值 $\boldsymbol{V}$ 列向量为特征向量 如果 $\boldsymbol{A}$ 为对称方阵，$\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵，即满足 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{VV}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}$	$\boldsymbol{U}$ 为正交矩阵 (完全型分解)，它的列向量为左奇异向量 $\boldsymbol{S}$ 主对角线元素为奇异值 $\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵 (完全型分解)，它的列向量为右奇异向量 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 都是规范正交基

几何视角	$\boldsymbol{Q}$ 代表旋转	写成 $\boldsymbol{LDL}^{\mathrm{T}}$ 形式 ($\boldsymbol{L}$ 主对角线元素为 1) $\boldsymbol{L}$ 代表剪切 $\boldsymbol{D}$ 代表缩放	$\boldsymbol{V}$ 代表旋转 $\boldsymbol{\Lambda}$ 代表缩放	$\boldsymbol{U}$ 代表旋转 $\boldsymbol{S}$ 代表缩放 $\boldsymbol{V}$ 代表旋转
结果唯一？	$\boldsymbol{A}$ 列满秩，且 $\boldsymbol{R}$ 的对角元素为正实数的情况下结果唯一	当限定 $\boldsymbol{R}$ 的对角元素为正时，分解结果唯一	矩阵 $\boldsymbol{V}$ 不唯一 本书的特征向量都是单位向量，特征向量一般差在正负符号上	矩阵 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 不唯一 本书左奇异向量、右奇异向量都是列向量
特殊类型	完全型 ($\boldsymbol{Q}$ 是正交矩阵) 经济型 ($\boldsymbol{Q}$ 是规范正交基，但不是正交矩阵)	正定矩阵 埃尔米特矩阵 (不在本书讨论范围)	对称矩阵 正规矩阵 (不在本书讨论范围之内)	完全型 经济型 缩略型 截断型
向量空间	$\boldsymbol{Q}$ 的列向量为规范正交基，$\boldsymbol{Q}$ 的第一列向量 $\boldsymbol{q}_1$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的第一列向量 $\boldsymbol{a}_1$ 的单位化 $\boldsymbol{R}$ 的列向量相当于坐标值	如果 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ (即 Gram 矩阵) 正定，对 $\boldsymbol{A}$ 进行 Cholesky 分解得到上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$，$\boldsymbol{R}$ 的列向量可以代表 $\boldsymbol{X}$ 列向量	如果 $\boldsymbol{A}$ 为对称方阵，$\boldsymbol{V}$ 为规范正交基 如果 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 且 $\boldsymbol{X}$ 列满秩，$\boldsymbol{V}$ 是 $\boldsymbol{X}$ 的行空间 $R(\boldsymbol{X})$	完全型 SVD 分解获得四个空间：列空间 $C(\boldsymbol{X})$ 和左零空间 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}})$，行空间 $R(\boldsymbol{X})$ 和零空间 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{X})$ 完全型 SVD 分解相当于一次性完成两个特征值分解
优化视角			$\underset{\boldsymbol{v}}{\arg\max}\ \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}$ subject to: $\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}=1$ 或 $\underset{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}{\arg\max}\ \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}$	$\underset{\boldsymbol{v}}{\arg\min}\ \lVert\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}\rVert$ subject to: $\lVert\boldsymbol{v}\rVert=1$ 或 $\underset{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}{\arg\min}\ \frac{\lVert\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\rVert}{\lVert\boldsymbol{x}\rVert}$
Numpy 函数	`numpy.linalg.qr()`	`numpy.linalg.cholesky()`	`numpy.linalg.eig()`	`numpy.linalg.svd()`
本章分解对象	原始数据矩阵 $\boldsymbol{X}$	格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ ($\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$) 协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$	格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ ($\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$) 协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$	原始数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 中心化数据矩阵 $\boldsymbol{X}_c$ 标准化数据矩阵 $\boldsymbol{Z}_{\boldsymbol{X}}$
本系列丛书主要应用	解线性方程组 最小二乘回归 施密特正交化	蒙特卡罗模拟，产生满足特定协方差矩阵要求的随机数 判断正定性	马尔科夫过程 主成分分析 瑞利商 矩阵范数	求解伪逆矩阵 矩阵范数 最小二乘回归 主成分分析 图像压缩

谱分解 ⊂ 特征值分解 ⊂ 奇异值分解

图 1 给出的文氏图为奇异值分解、特征值分解、谱分解之间的集合关系。

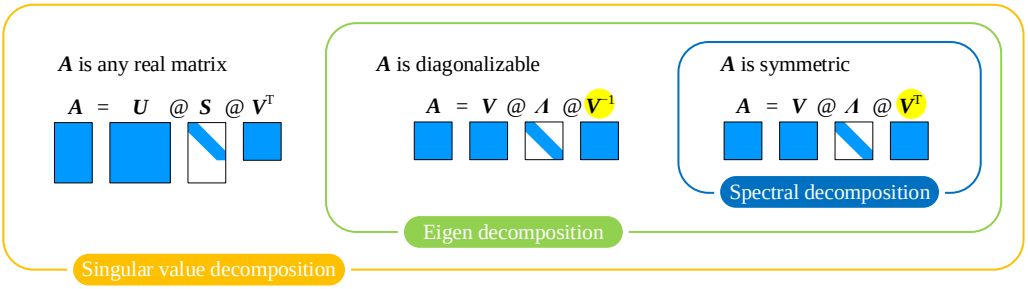


图 1. 特征值分解、奇异值分解之间的从属关系。

SVD 分解的对象是一切实数矩阵。特征值分解可以看做是特殊的 SVD 分解。特征值分解的对象是可对角化矩阵。如果 SVD 分解对象也是可对角化矩阵，其结果等价于特征值分解。注意，可对角化矩阵是特殊的方阵。

特别地，对称矩阵的特征值分解叫谱分解。格拉姆矩阵都是对称矩阵，因此格拉姆矩阵的特征值分解都是谱分解。谱分解得到的 $\boldsymbol{V}$ 是正交矩阵，正交矩阵是“天然”的规范正交基。从几何角度来看，正交矩阵的作用是“旋转”。本书第 15 章提过，更准确地说，正交矩阵的几何操作是“旋转 + 镜像”。只有正交矩阵的行列式值为 1，正交矩阵的作用才是纯粹“旋转”。

对于 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$，对 $\boldsymbol{A}$ 奇异值分解得到 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{USV}^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{VS}^{-1}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$。$\boldsymbol{VS}^{-1}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}$ 就是 $\boldsymbol{A}$ 的摩尔-彭若斯广义逆 (Moore–Penrose inverse)。注意，$\boldsymbol{S}^{-1}$ 的主对角线非零元素为 $\boldsymbol{S}$ 的非零奇异值倒数，$\boldsymbol{S}^{-1}$ 其余对角线元素均为 0。本书第 5 章提到过，numpy.linalg.pinv() 计算摩尔-彭若斯广义逆时，便使用奇异值分解。这还告诉我们，SVD 分解可以用来求解最小二乘回归问题。

分解对象：数据矩阵，衍生矩阵

本章用的数据还是大家再熟悉不过的鸢尾花数据集。

快速回顾一下，如图 2 所示，鸢尾花数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的每一列分别代表鸢尾花的不同特征——花萼长度 (第 1 列，列向量 $\boldsymbol{x}_1$)、花萼宽度 (第 2 列，列向量 $\boldsymbol{x}_2$)、花瓣长度 (第 3 列，列向量 $\boldsymbol{x}_3$) 和花瓣宽度 (第 4 列，列向量 $\boldsymbol{x}_4$)。矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的每一行代表一朵花的样本数据，每一行数据也是一个向量——行向量。注意，图 2 不考虑鸢尾花分类。

图 2. 鸢尾花数据集行、列含义

图 3 所示为本章矩阵分解对象，它们都衍生自鸢尾花数据矩阵 $\boldsymbol{X}$。$\boldsymbol{X}$ 为细高长方形矩阵，形状为 $n \times D$。和本书第 10 章鸢尾花数据矩阵热图相比，图 3 中 $\boldsymbol{X}$ 的热图采用不同范围色谱。

格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 来自数据矩阵 $\boldsymbol{X}$，两者关系为 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}$。格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 为对称矩阵。一般 $\boldsymbol{G}$ 为半正定，只有 $\boldsymbol{X}$ 满秩，$\boldsymbol{G}$ 才正定。

上一章提到，格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 含有 $\boldsymbol{X}$ 列向量模、向量夹角两类重要信息。对于细高的长方形矩阵 $\boldsymbol{X}$，第二个格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^T$ 不常用。

而余弦相似度矩阵 $\boldsymbol{C}$ 仅有 $\boldsymbol{X}$ 列向量两两夹角信息。余弦相似度矩阵 $\boldsymbol{C}$ 也是对称矩阵。余弦相似度的取值 $[-1, 1]$，因此不同余弦相似度具有可比性。这一点类似统计中的相关性系数。对 $\boldsymbol{X}$ 列向量先进行单位化，再求其格拉姆矩阵，得到的就是 $\boldsymbol{C}$。

在统计视角下，$\boldsymbol{X}$ 的两个重要信息——质心 $E(\boldsymbol{X})$ ($\boldsymbol{\mu}_X$)、协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_X$ (常简写为 $\boldsymbol{\Sigma}$)。$E(\boldsymbol{X})$ 对应数据质心位置，$\boldsymbol{\Sigma}_X$ 描述数据分布。注意，质心 $E(\boldsymbol{X})$、协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_X$ 仅仅是描述数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的统计工具而已，不代表 $\boldsymbol{X}$ 服从多元高斯分布 $N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}_X)$。

⚠ 值得注意的是，本系列丛书定义 $E(\boldsymbol{X})$ 为行向量，$E(\boldsymbol{X})$ 的转置为列向量 $\boldsymbol{\mu}_X$。

本章要用到两个和原始数据矩阵形状相同的矩阵——中心化数据矩阵 $\boldsymbol{X}_c$、标准化数据矩阵 $\boldsymbol{Z}_X$。$\boldsymbol{X}$、$\boldsymbol{X}_c$、$\boldsymbol{Z}_X$ 的形状均为 $n \times D$。

$\boldsymbol{X}$ 每一列数据分别减去自己的均值便得到中心化数据 $\boldsymbol{X}_c$，即 $\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{X} - E(\boldsymbol{X})$。这个式子用到了广播原则。请大家回顾如何本书第 22 章有关如何用矩阵运算计算 $\boldsymbol{X}_c$。

几何视角，对于 $\boldsymbol{X}$ 来说，它的数据质心位于 $\boldsymbol{\mu}_X$；而 $\boldsymbol{X}_c$ 的质心位于 $\boldsymbol{0}$。换个角度来看，$\boldsymbol{X}$ 的列向量起点位于原点；而 $\boldsymbol{X}_c$ 列向量的起点相当于移动到了质心，向量终点不动。

标准化数据 $\boldsymbol{Z}_X$ 实际上就是 $\boldsymbol{X}$ 的 z 分数。几何视角，从 $\boldsymbol{X}$ 到 $\boldsymbol{Z}_X$ 经过了平移、缩放两步操作。

⚠ 注意，上一章创造了一个概念——标准差向量。标准差向量的模对应标准差大小，两个标准差向量的夹角余弦值对应相关性系数。

协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_X$ 可以视作 $\boldsymbol{X}_c$ 的格拉姆矩阵。值得注意的是，计算 $\boldsymbol{\Sigma}_X$ 时使用了缩放系数 $1/n$ (总体) 或 $1/(n-1)$ (样本)。

协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 包含两类信息——标准差向量的模 (标准差)、标准差向量两两夹角 (相关性系数)。

相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 仅仅含有标准差向量夹角 (相关性系数) 信息。相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 类似余弦相似度矩阵 $\boldsymbol{C}$。

类似协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$，计算相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 也使用了缩放系数 $1/n$ (总体) 或 $1/(n-1)$ (样本)。相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 就是标准化数据 $\boldsymbol{Z}_X$ 的协方差矩阵。

$\boldsymbol{G}$、$\boldsymbol{C}$、$\boldsymbol{\Sigma}$、$\boldsymbol{P}$ 的形状均为 $D \times D$。

如果大家对这部分内容感到陌生，请回顾本书第 22 章。大家必须对矩阵分解的对象有充分的认识，才能开始本章后续内容学习。

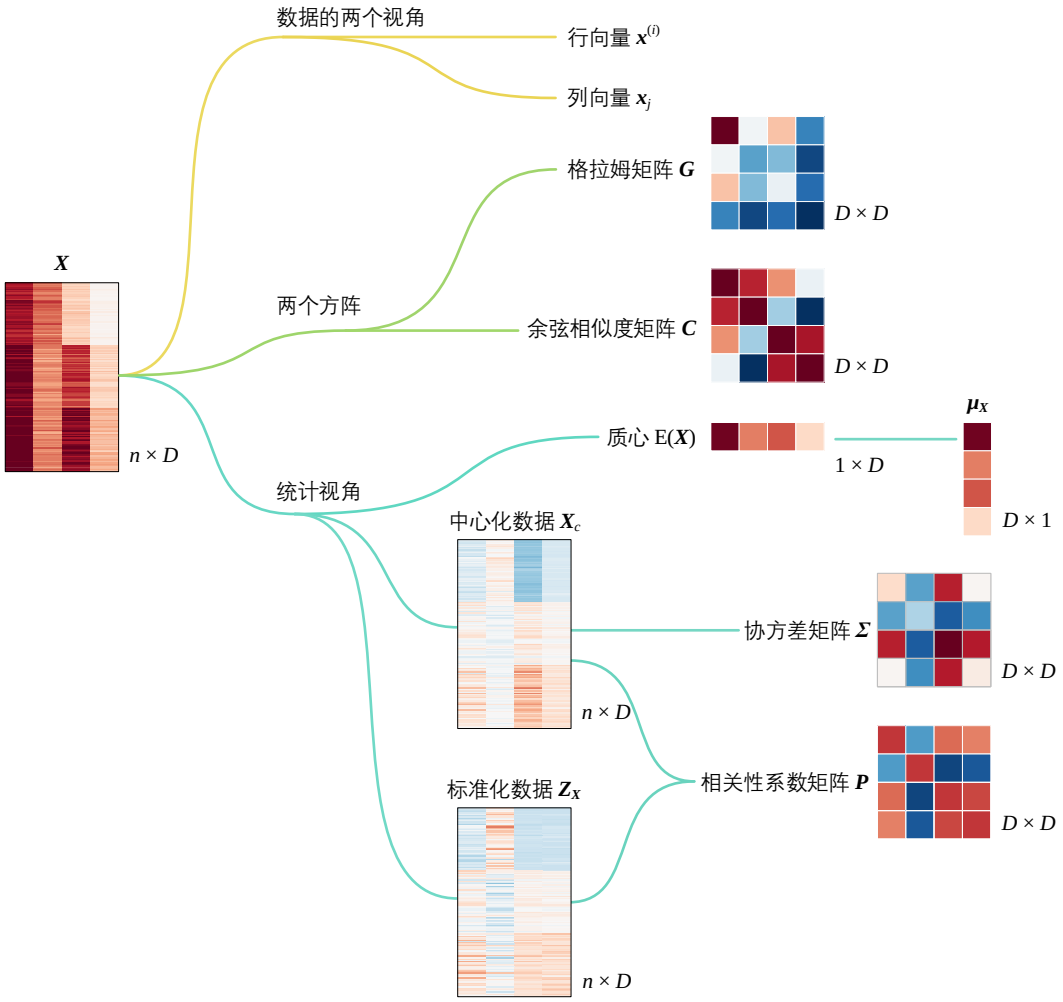


图 3. X 衍生得到的几个矩阵

矩阵 + 矩阵分解

搭配六种不同矩阵 (X、X_c、Z_X、G、Σ、P) 和三种矩阵分解 (Cholesky 分解、特征值分解、SVD 分解)，会碰撞出什么？

表 2 给出了答案。本章后续内容将主要以表格中内容展开。

表 2. 矩阵和矩阵分解之间的关系

对象		Cholesky 分解	特征值分解	SVD 分解
$n \times D$	X	不适用	不适用	$X = U_X S_X V_X^T$
	$X_c = X - E(X)$	不适用	不适用	$X_c = U_c S_c V_c^T$
	$Z_X = (X - E(X))S^{-1}$ $S = \text{diag}(\text{diag}(\Sigma))^{\frac{1}{2}}$	不适用	不适用	$Z_X = U_Z S_Z V_Z^T$

$D \times D$	$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$	正定矩阵为前提 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{R}_X^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_X$	$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{V}_X\boldsymbol{\Lambda}_X\boldsymbol{V}_X^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{V}_X\boldsymbol{S}_X^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_X\boldsymbol{V}_X^{\mathrm{T}}$ $\boldsymbol{S}_X$ 来自于 $\boldsymbol{X}$ 的 SVD 分解	$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{V}_X\boldsymbol{\Lambda}_X\boldsymbol{V}_X^{\mathrm{T}}$
	样本：$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{\left(\boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X})\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X})\right)}{n-1} = \frac{\boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_c}{n-1}$ 总体：$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{\left(\boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X})\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X})\right)}{n} = \frac{\boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_c}{n}$	正定矩阵为前提 $\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{R}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_c$	样本：$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{V}_c\boldsymbol{\Lambda}_c\boldsymbol{V}_c^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{V}_c\boldsymbol{S}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_c/(n-1)\boldsymbol{V}_c^{\mathrm{T}}$ 总体：$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{V}_c\boldsymbol{\Lambda}_c\boldsymbol{V}_c^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{V}_c\boldsymbol{S}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_c/n\boldsymbol{V}_c^{\mathrm{T}}$ $\boldsymbol{S}_c$ 来自于 $\boldsymbol{X}_c$ 的 SVD 分解	$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{V}_c\boldsymbol{\Lambda}_c\boldsymbol{V}_c^{\mathrm{T}}$
	$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{S}^{-1}$ $\boldsymbol{S} = \mathrm{diag}\left(\mathrm{diag}\left(\boldsymbol{\Sigma}\right)\right)^{\frac{1}{2}}$	正定矩阵为前提 $\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{R}_Z^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_Z$	样本：$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{V}_Z\boldsymbol{\Lambda}_Z\boldsymbol{V}_Z^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{V}_Z\boldsymbol{S}_Z^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_Z/(n-1)\boldsymbol{V}_Z^{\mathrm{T}}$ 总体：$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{V}_Z\boldsymbol{\Lambda}_Z\boldsymbol{V}_Z^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{V}_Z\boldsymbol{S}_Z^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_Z/n\boldsymbol{V}_Z^{\mathrm{T}}$ $\boldsymbol{S}_Z$ 来自于 $\boldsymbol{Z}_X$ 的 SVD 分解	$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{V}_Z\boldsymbol{\Lambda}_Z\boldsymbol{V}_Z^{\mathrm{T}}$

Bk4_Ch24_01.py 中 Bk4_Ch24_01_A 部分计算得到图 3 所有矩阵，请读者根据前文所学自行绘制本章所有热图。

24.2 QR 分解：获得正交系

QR 分解不是本章重点，我们仅仅蜻蜓点水回顾一下。

如图 4 所示，对矩阵 $\boldsymbol{X}$ 进行缩略型 QR 分解，得到 $\boldsymbol{Q}$ 和 $\boldsymbol{R}$。$\boldsymbol{Q}$ 和 $\boldsymbol{X}$ 形状相同，是正交矩阵的一部分，也就是说 $\boldsymbol{Q}$ 的列向量 $[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3, \boldsymbol{q}_4]$ 是规范正交基。$[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3, \boldsymbol{q}_4]$ 相当于 $[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \boldsymbol{x}_4]$ 正交化的结果。

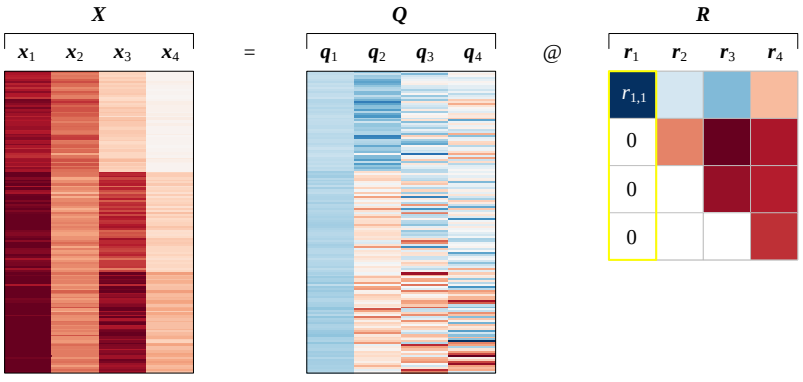


图 4. QR 分解热图

如图 5 所示，从空间角度来讲，如果 x_1、x_2、x_3、x_4 线性无关，则 span(x_1, x_2, x_3, x_4) = span(q_1, q_2, q_3, q_4)。

请大家特别关注如下关系：

$$x_1 = r_{1,1} q_1 \tag{1}$$

也就是说 x_1 和 q_1 平行。取决于 $r_{1,1}$ 正负，x_1 和 q_1 可以同向或反向。通过 QR 分解完成正交化相当于“顺藤”($x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow x_3 \rightarrow x_4$) “摸瓜” ($q_1 \rightarrow q_2 \rightarrow q_3 \rightarrow q_4$)。($r_{1,1}$, 0, 0, 0) 是 x_1 在基底 [q_1, q_2, q_3, q_4] 的坐标。此外请大家注意，QR 分解和**格拉姆–施密特正交化** (Gram–Schmidt process) 之间联系。

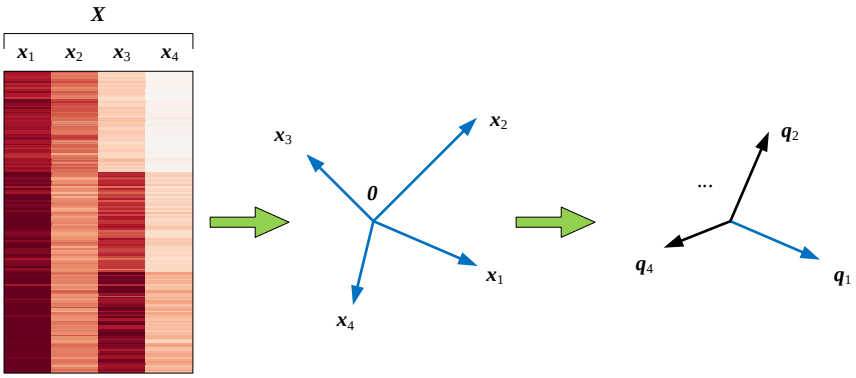


图 5. [q_1, q_2, q_3, q_4] 是规范正交基

Bk4_Ch24_01.py 中 Bk4_Ch24_01_B 部分完成矩阵 X 的 QR 分解。

24.3 Cholesky 分解：找到列向量的坐标

格拉姆矩阵

数据矩阵 X 的每一列可以看做一个向量，而 Cholesky 分解能够找到它们的坐标。

⚠ 注意，这里存在一个前提——X 列满秩。只有这样 X 的格拉姆矩阵 G 才正定，才能进行 Cholesky 分解。

假设 G 正定，对 G 进行 Cholesky 分解：

$$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R} \tag{2}$$

其中，$\boldsymbol{R}$ 为上三角矩阵。(2) 中的 $\boldsymbol{R}$ 不同于上一节 QR 分解的 $\boldsymbol{R}$。

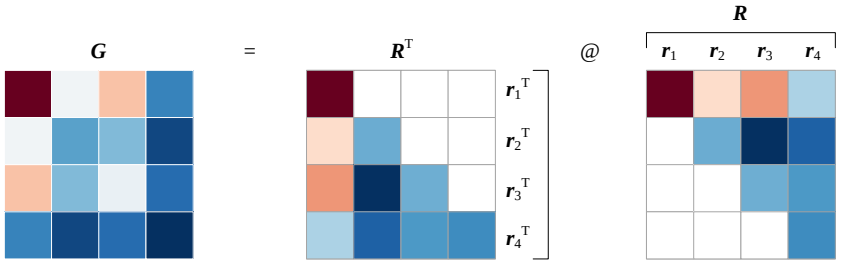


图 6. 对格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 进行 Cholesky 分解矩阵运算热图

如图 6 所示，将 $\boldsymbol{R}$ 写成 $[\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_D]$，(2) 可以写成向量标量积形式，并建立它们和 $[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D]$ 的联系：

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{G} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R} &= \begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_D \rangle \\ \langle \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_2 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_D \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \boldsymbol{r}_D, \boldsymbol{r}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{r}_D, \boldsymbol{r}_2 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{r}_D, \boldsymbol{r}_D \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_D \rangle \\ \langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_D \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \boldsymbol{x}_D, \boldsymbol{x}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{x}_D, \boldsymbol{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{x}_D, \boldsymbol{x}_D \rangle \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \|\boldsymbol{r}_1\|\|\boldsymbol{r}_1\|\cos\theta_{1,1} & \|\boldsymbol{r}_1\|\|\boldsymbol{r}_2\|\cos\theta_{2,1} & \cdots & \|\boldsymbol{r}_1\|\|\boldsymbol{r}_D\|\cos\theta_{1,D} \\ \|\boldsymbol{r}_2\|\|\boldsymbol{r}_1\|\cos\theta_{1,2} & \|\boldsymbol{r}_2\|\|\boldsymbol{r}_2\|\cos\theta_{2,2} & \cdots & \|\boldsymbol{r}_2\|\|\boldsymbol{r}_D\|\cos\theta_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \|\boldsymbol{r}_D\|\|\boldsymbol{r}_1\|\cos\theta_{1,D} & \|\boldsymbol{r}_D\|\|\boldsymbol{r}_2\|\cos\theta_{2,D} & \cdots & \|\boldsymbol{r}_D\|\|\boldsymbol{r}_D\|\cos\theta_{D,D} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_1\|\cos\theta_{1,1} & \|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_2\|\cos\theta_{2,1} & \cdots & \|\boldsymbol{x}_1\|\|\boldsymbol{x}_D\|\cos\theta_{1,D} \\ \|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_1\|\cos\theta_{1,2} & \|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_2\|\cos\theta_{2,2} & \cdots & \|\boldsymbol{x}_2\|\|\boldsymbol{x}_D\|\cos\theta_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_1\|\cos\theta_{1,D} & \|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_2\|\cos\theta_{2,D} & \cdots & \|\boldsymbol{x}_D\|\|\boldsymbol{x}_D\|\cos\theta_{D,D} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{3}$$

$[\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_D]$ 的每个列向量的模分别等于 $[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D]$ 列向量的模；$[\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_D]$ 中两两向量夹角等于 $[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D]$ 中对应列向量夹角。

换个角度来看，$\boldsymbol{X}$ 的形状为 $n \times D$，比如 150×4。$\boldsymbol{X}$ 的 4 个列向量为 150 维，“装下”这些列向量我们自然先考虑 $\mathbb{R}^{150}$ 空间。而 $\boldsymbol{R}$ 的形状为 4×4，用 $\mathbb{R}^4$ 空间装下 $\boldsymbol{R}$ 列向量刚刚好。“刚刚好”是因为 $\boldsymbol{R}$ 满秩。也就是说，我们用 $\mathbb{R}^4$ 空间中的 $[\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \boldsymbol{r}_4]$ 来“代表” $\mathbb{R}^{150}$ 空间中的 $[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \boldsymbol{x}_4]$。显然，$\boldsymbol{R}$ 远比 $\boldsymbol{X}$“小巧”的多。

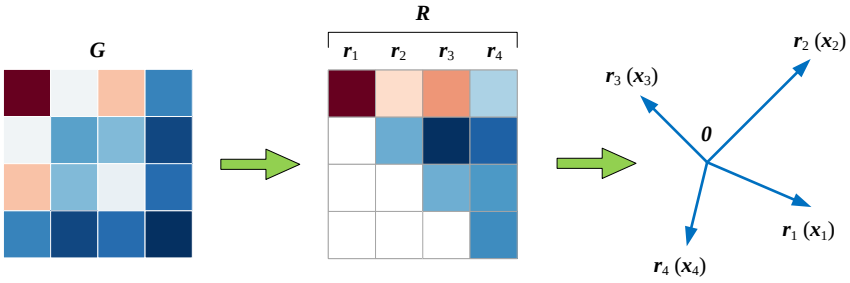


图 7. $[x_1, x_2, x_3, x_4]$ 和 $[r_1, r_2, r_3, r_4]$ “等价”

协方差矩阵

类似地，对协方差矩阵 Σ 进行 Cholesky 分解，具体如图 8 所示。将 R_Σ 写成“标准差向量” $[\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_D]$，整理得到：

$$\Sigma = R_\Sigma^{\mathrm{T}} R_\Sigma = \begin{bmatrix} \langle \sigma_1, \sigma_1 \rangle & \langle \sigma_1, \sigma_2 \rangle & \cdots & \langle \sigma_1, \sigma_D \rangle \\ \langle \sigma_2, \sigma_1 \rangle & \langle \sigma_2, \sigma_2 \rangle & \cdots & \langle \sigma_2, \sigma_D \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \sigma_D, \sigma_1 \rangle & \langle \sigma_D, \sigma_2 \rangle & \cdots & \langle \sigma_D, \sigma_D \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathrm{cov}(X_1, X_1) & \mathrm{cov}(X_1, X_2) & \cdots & \mathrm{cov}(X_1, X_D) \\ \mathrm{cov}(X_2, X_1) & \mathrm{cov}(X_2, X_2) & \cdots & \mathrm{cov}(X_2, X_D) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{cov}(X_D, X_1) & \mathrm{cov}(X_D, X_2) & \cdots & \mathrm{cov}(X_D, X_D) \end{bmatrix} \tag{4}$$

当然，我们也可以对线性相关系数矩阵 P 进行 Cholesky 分解。

R_Σ 将会用在蒙特卡洛模拟中，用来生成满足协方差矩阵 Σ 要求的随机数组，这是本系列丛书《概率统计》要讨论的内容。

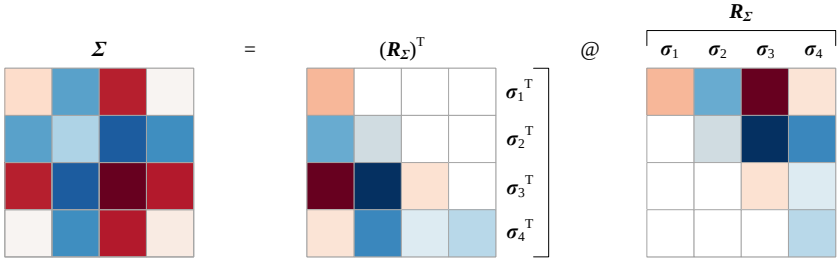


图 8. 对协方差矩阵 Σ 进行 Cholesky 分解矩阵运算热图

向量 $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_D$ 的模分别对应 x_1 (X_1), x_2 (X_2), …, x_D (X_D) 的标准差，向量 $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_D$ 两两夹角余弦值对应 x_1 (X_1), x_2 (X_2), …, x_D (X_D) 的两两线性相关系数。也就是说，协方差矩阵 Σ 集成了标准差和线性相关系数这两类信息。

如图 9 所示，$[\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_D]$ 相当于以数据 X 质心为中心一组非正交基。数据 X 的很多统计学运算和分析都是依托这个空间完成的。

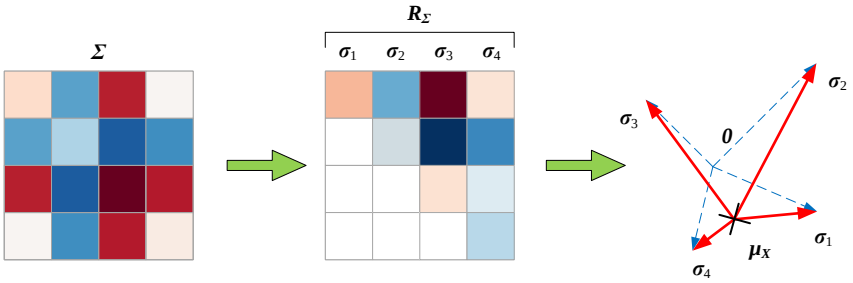


图 9. [σ_1, σ_2, …, σ_D] 相当于以 $\boldsymbol{X}$ 质心为中心张成一个空间

Bk4_Ch24_01.py 中 Bk4_Ch24_01_C 部分完成对格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 和协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的 Cholesky 分解。

24.4 特征值分解：获得行空间和零空间

本节要进行三个特征值分解，为了区分，我们在分解结果加了下角标。

格拉姆矩阵

图 10 所示为格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}$ 进行特征值分解。因为 $\boldsymbol{G}$ 为对称矩阵，所以 $\boldsymbol{V_X}$ 为正交矩阵，即满足 $\boldsymbol{V_X}^{-1} = \boldsymbol{V_X}^T$。从而，$\boldsymbol{G}$ 的特征值分解可以写成 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{V_X}\boldsymbol{\Lambda_X}\boldsymbol{V_X}^T$。

根据上一章内容，$\boldsymbol{V_X}$ 的列向量 [$\boldsymbol{v}_{X\_1}$, $\boldsymbol{v}_{X\_2}$, …, $\boldsymbol{v}_{X\_D}$] 是一组规范正交基。[$\boldsymbol{v}_{X\_1}$, $\boldsymbol{v}_{X\_2}$, …, $\boldsymbol{v}_{X\_D}$] 张成 $\mathbb{R}^D$ 空间，它是矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的行空间和零空间的合体。零空间的维数取决于 $\boldsymbol{G}$ 的秩。

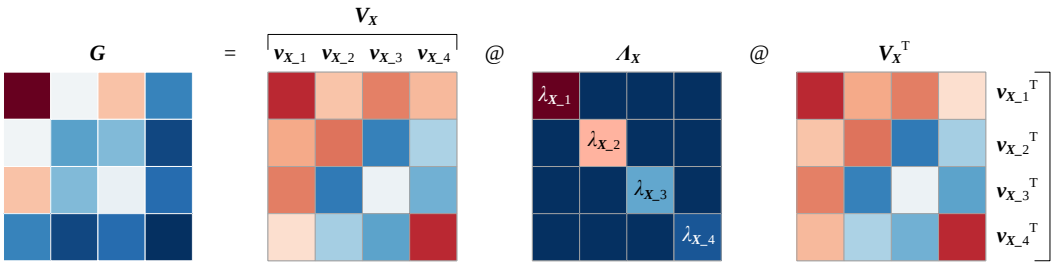


图 10. 对格拉姆矩阵进行特征值分解

如图 11 所示，从 $\boldsymbol{X}$ 到 $\boldsymbol{V_X}$ 相当于对 $\boldsymbol{X}$ 行向量正交化。根据前文所学，大家思考以下几个问题。

$\boldsymbol{X}$ 投影到 $\boldsymbol{v}_{X\_1}$ 的结果怎么计算？$\boldsymbol{X}$ 投影到 $\boldsymbol{V_X}$ 的结果又怎么计算？投影结果有怎样性质？

值得注意的是，本章矩阵 $\boldsymbol{X}$ 为鸢尾花数据，每一列数据单位都是厘米 (cm)。格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 中数值的单位为平方厘米 cm^2。$\boldsymbol{V_X}$ 中每一列都是单位向量，仅仅表达方向，不含有单位。而特征值 λ_X 的单位为平方厘米 cm^2。从几何角度来看，特征值含有椭圆 (椭球) 的大小形状信息，而 $\boldsymbol{V}$ 仅仅提供空间旋转操作。

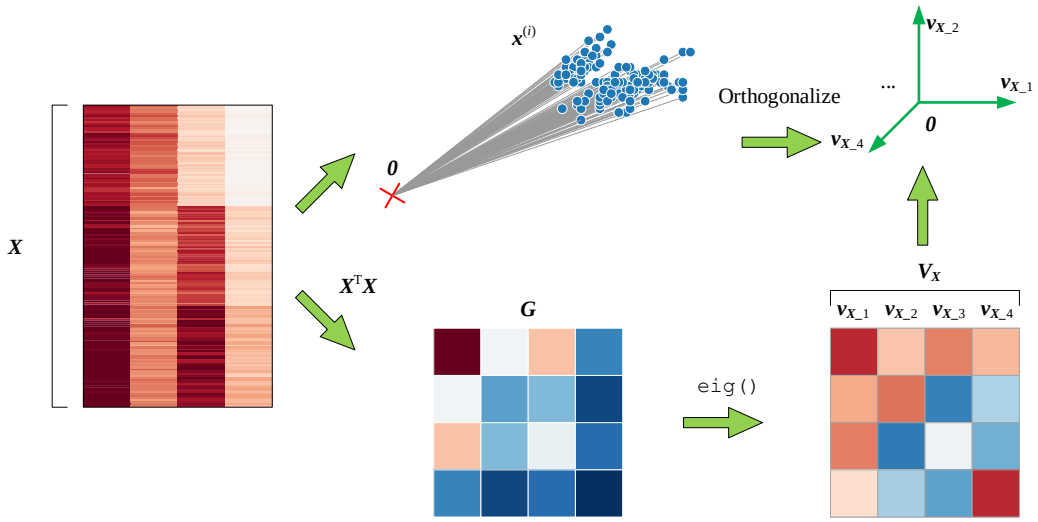


图 11. 特征值分解 $\boldsymbol{G}$ 获得规范正交基

优化视角

本书第 18 章讲过，获得规范正交基 $[\boldsymbol{v}_{X\_1}, \boldsymbol{v}_{X\_2}, \ldots, \boldsymbol{v}_{X\_D}]$ 有着特定的优化目标。下面，我们简要回顾一下。

矩阵 $\boldsymbol{X}$ 在 $\boldsymbol{v}$ 方向投影得到 $\boldsymbol{y}$:

$$\boldsymbol{X}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{y} \tag{5}$$

而 $\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{G}\boldsymbol{v}$ 可以写成:

$$\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{G}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}^T\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\boldsymbol{v} = (\boldsymbol{X}\boldsymbol{v})^T\boldsymbol{X}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{y}^T\boldsymbol{y} = \|\boldsymbol{y}\|_2^2 \tag{6}$$

这就是特征值分解格拉姆矩阵对应的优化问题——找到一个单位向量 $\boldsymbol{v}$，使得 $\boldsymbol{X}$ 在 $\boldsymbol{v}$ 上投影结果 $\boldsymbol{y}$ 的模最大。这个 $\boldsymbol{v}$ 就是 $\boldsymbol{v}_{X\_1}$，对应 $\boldsymbol{y}$ 的模最大值为 $\sqrt{\lambda_{X\_1}}$。

而 $\boldsymbol{y}$ 的模的平方 $\|\boldsymbol{y}\|_2^2$ 就是 $\boldsymbol{y}$ 中所有坐标点距离原点的欧氏距离平方。

解决这个优化问题采用的方法可以是本书第 14 章讲的瑞利商，也可以是第 18 章讲的拉格朗日乘子法。两者在本质上是一致的。

有了 v_{X_1}，寻找 v_{X_2} 时，首先让 v_{X_2} 垂直 v_{X_1} (约束条件)，且 X 在 v_{X_2} 上投影结果 y 的模最大。以此类推得到所有特征向量、特征值。

特征值

前文介绍过，特征值分解得到的特征值之和，等于原矩阵对角线元素之和，即：

$$\lambda_{X\_1}+\lambda_{X\_2}+\lambda_{X\_3}+\lambda_{X\_4}=\operatorname{sum}\left(\operatorname{diag}\left(G\right)\right)=\left\|x_1\right\|_2^2+\left\|x_2\right\|_2^2+\left\|x_3\right\|_2^2+\left\|x_4\right\|_2^2 \tag{7}$$

协方差矩阵

第二个例子是对协方差矩阵 Σ 进行特征值分解，图 12 所示为对应热图。下角标用“c”的原因是对协方差矩阵特征值分解结果和中心化 (去均值) 矩阵 X_c 直接相关。

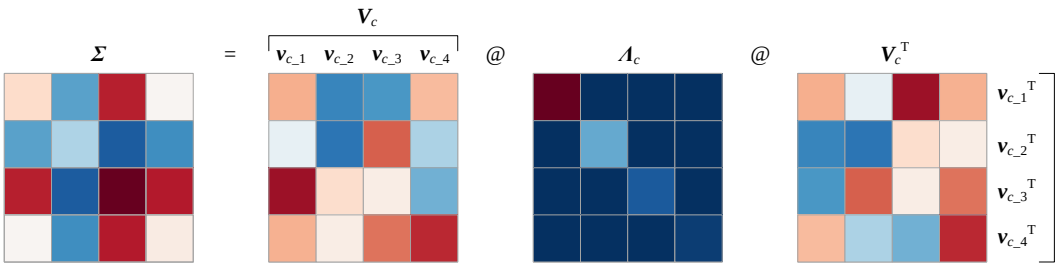


图 12. 对协方差矩阵进行特征值分解

前文提到过，Σ 囊括标准差向量 $[\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4]$ 所有信息——模 (标准差) 和夹角余弦值 (线性相关系数)。对 Σ 特征值分解得到的特征向量矩阵 $[v_{c\_1}, v_{c\_2}, v_{c\_3}, v_{c\_4}]$ 也是一组规范正交基，它显然不同于 $[v_{X\_1}, v_{X\_2}, \ldots, v_{X\_D}]$。

大家思考一个问题，X 和 X_c 分别向 $[v_{c\_1}, v_{c\_2}, v_{c\_3}, v_{c\_4}]$ 和 $[v_{X\_1}, v_{X\_2}, \ldots, v_{X\_D}]$ 投影产生的 4 种结果有怎样差别?

优化视角

采用和本节前文一样的优化角度分析协方差矩阵的特征值分解。

中心化数据矩阵 X_c 向 v 投影得到 y_c：

$$X_c v = y_c \tag{8}$$

而 $v^T \Sigma v$ 可以写成：

$$v^T (n-1)\Sigma v = v^T {X_c}^T X_c v = \left(X_c v\right)^T X_c v = {y_c}^T y_c = \left\|y_c\right\|_2^2 = (n-1)\operatorname{var}\left(y_c\right) \tag{9}$$

上式告诉我们，对协方差矩阵特征值分解，就是要找到一个单位向量 $\boldsymbol{v}$，使得中心化数据 $\boldsymbol{X}_c$ 在 $\boldsymbol{v}$ 上投影结果 $\boldsymbol{y}_c$ 的方差最大。我们要找的这个 $\boldsymbol{v}$ 就是图 12 中的 $\boldsymbol{v}_{c\_1}$，对应的特征值为 λ_{c_1}。

再次注意单位问题，对于鸢尾花数据，协方差矩阵中的数值单位都是平方厘米 cm^2。其特征值 λ_c 的单位也是平方厘米 cm^2，而 $\boldsymbol{v}_c$ 是无单位的。

大家可能会问，(9) 是如何把协方差矩阵和 $\boldsymbol{y}$ 的方差联系起来的？这是我们下一章要探讨的内容。

$\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征值之和，等于 $\boldsymbol{X}$ 的每列数据方差之和，即：

$$\lambda_{\Sigma\_1}+\lambda_{\Sigma\_2}+\lambda_{\Sigma\_3}+\lambda_{\Sigma\_4}=\operatorname{diag}(\boldsymbol{\Sigma})=\sigma_1^2+\sigma_2^2+\sigma_3^2+\sigma_4^2 \tag{10}$$

显然 λ_{Σ_1} 在 (10) 中占比最大。也就是说，对 $\boldsymbol{\Sigma}$ 特征值分解得到第一特征向量 $\boldsymbol{v}_{c\_1}$，相较其他所有可能的单位向量，解释了 $\boldsymbol{\Sigma}$ 中最多的方差成分。

每个特征值占特征值总和的比例是主成分分析中重要的一项分析指标，这是本系列丛书《数据科学》一册要介绍的内容。

相关性系数矩阵

本节的第三个例子是对相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 特征值分解，图 13 所示为对应热图。相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 可以视作 $\boldsymbol{Z_X}$ ($\boldsymbol{X}$ 的 z 分数矩阵) 的协方差矩阵。

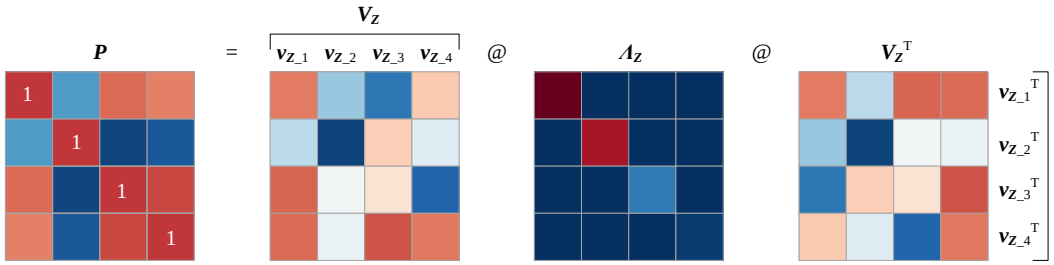


图 13. 对相关性系数矩阵进行特征值分解

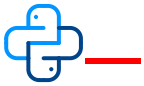
矩阵 $\boldsymbol{Z_X}$ 的特点是，每列均值都是 0。由于 $\boldsymbol{Z_X}$ 已经标准化，每列的均方差为 1。矩阵 $\boldsymbol{Z_X}$ 的列向量可以看成是一排单位向量 $\left[\frac{\boldsymbol{\sigma}_1}{\|\boldsymbol{\sigma}_1\|},\frac{\boldsymbol{\sigma}_2}{\|\boldsymbol{\sigma}_2\|},\frac{\boldsymbol{\sigma}_2}{\|\boldsymbol{\sigma}_2\|},\frac{\boldsymbol{\sigma}_2}{\|\boldsymbol{\sigma}_2\|}\right]$。

从相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 对角线元素也可以看出来，$\boldsymbol{Z_X}$ 每个特征贡献的方差均为 1。

注意，数据矩阵 $\boldsymbol{Z_X}$ 和相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 都已经“去单位化”。比如，$\boldsymbol{P}$ 中对角线上的 1 没有单位；因为数据标准化的过程，单位已经消去。

对 $\boldsymbol{P}$ 的特征向量矩阵 $[\boldsymbol{v}_{Z\_1}, \boldsymbol{v}_{Z\_2}, \boldsymbol{v}_{Z\_3}, \boldsymbol{v}_{Z\_4}]$ 也是一组规范正交基。一般情况，$[\boldsymbol{v}_{Z\_1}, \boldsymbol{v}_{Z\_2}, \boldsymbol{v}_{Z\_3}, \boldsymbol{v}_{Z\_4}]$ 不同于 $[\boldsymbol{v}_{C\_1}, \boldsymbol{v}_{C\_2}, \boldsymbol{v}_{C\_3}, \boldsymbol{v}_{C\_4}]$ 。

利用对相关性系数矩阵特征值分解进行主成分分析也是常见技术路线。这种技术路线可以解决 $\boldsymbol{X}$ 中某些特征的方差异常 (过大或过小) 的问题。



`Bk4_Ch24_01.py` 中 `Bk4_Ch24_01_D` 部分完成本节介绍的三个特征值分解。

24.5 SVD 分解：获得四个空间

SVD 分解可谓矩阵分解之集大成者，本书前文花了很多笔墨从各个角度探讨 SVD 分解。本节对比鸢尾花原始数据矩阵 $\boldsymbol{X}$、中心化矩阵 $\boldsymbol{X}_c$、标准化矩阵 $\boldsymbol{Z}_X$ 等三个矩阵 SVD 分解。

原始数据矩阵

图 14 所示为矩阵 $\boldsymbol{X}$ 进行 SVD 分解矩阵运算热图。图中的正交矩阵 $\boldsymbol{V}_X$ 实际上和图 10 中的 $\boldsymbol{V}_X$ 等价，某些向量的正负号可能存在反号的情况。图 14 中矩阵 $\boldsymbol{U}_X$ 也可以通过对 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^T$ 特征值分解得到。

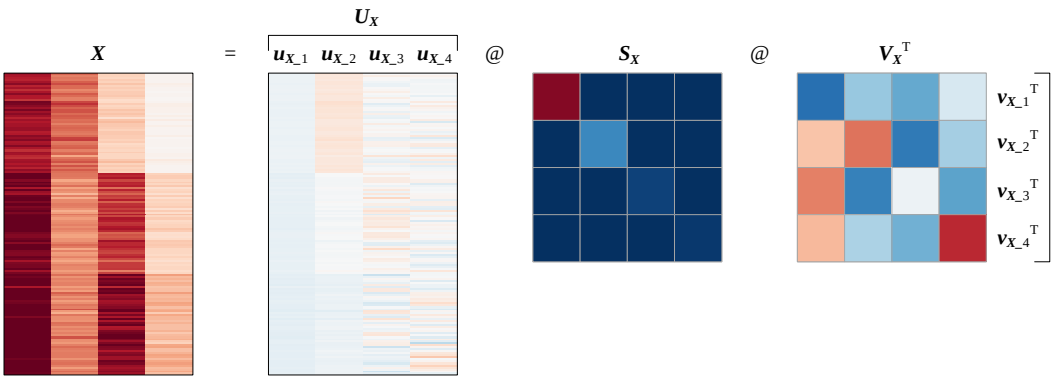


图 14. 对矩阵 $\boldsymbol{X}$ 进行 SVD 分解

前文提到多次，SVD 分解的结果包含了两个特征值分解结果。此外，SVD 分解不丢失原始数据 $\boldsymbol{X}$ 的任何信息，截断型除外。某种程度上说，SVD 分解包含了特征值分解，比特征值分解更“高阶”。

另外，请大家注意图 14 中奇异值和图 10 中特征值之间的关系：

$$\boldsymbol{S}_X^2 = \boldsymbol{\Lambda}_X \tag{11}$$

中心化数据

图 15 所示为中心化数据矩阵 X_c 进行 SVD 分解矩阵运算热图。图 15 中的正交矩阵 V_c 和图 12 中的 V_c 等价，两者若干位置列向量也可能存在符号相反情况。

有些读者可能会问，既然 V_c 也是规范正交基，那么将原始数据 X 在 V_c 上投影结果的质心在哪？投影结果的协方差矩阵又如何？下一章会给大家一些理论基础，本系列丛书《概率统计》一册会专门回答这个问题。

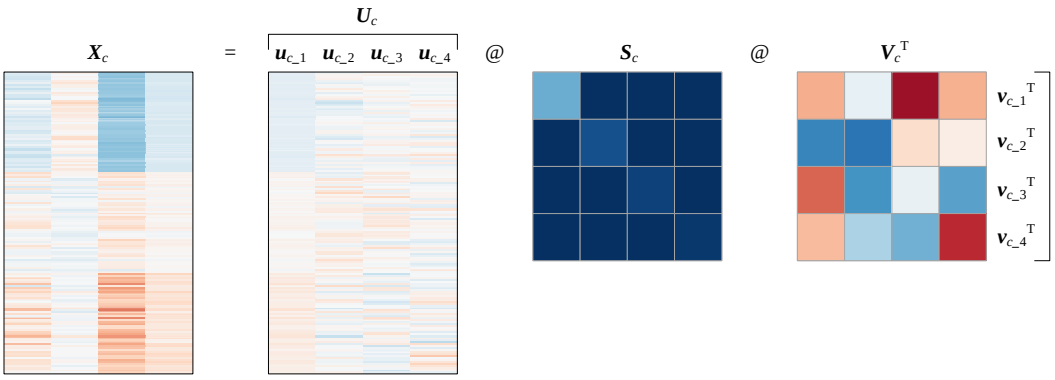


图 15. 对矩阵 X_c 进行 SVD 分解

标准化数据

图 16 所示为标准化数据矩阵 Z_X 进行 SVD 分解矩阵运算热图。图中的 V_Z 和图 13 中的 V_Z 等价，两者某些列向量也可能存在符号相反情况。也请大家思考，原始数据 X 在 V_Z 上投影会有怎样的结果？

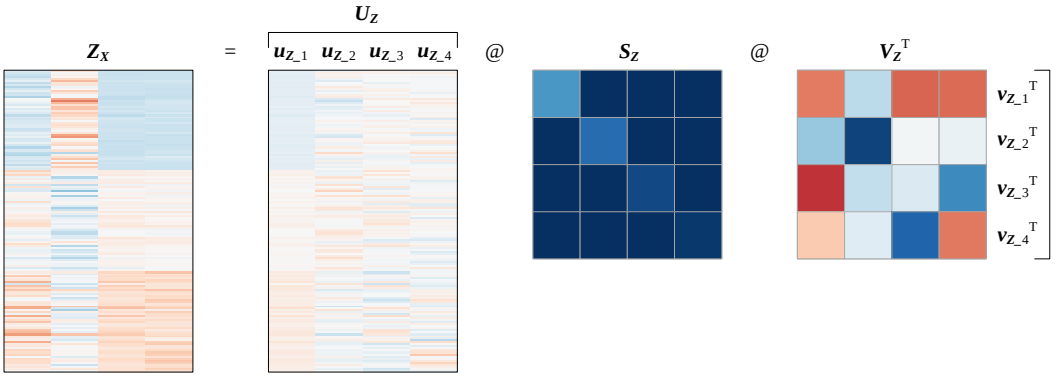
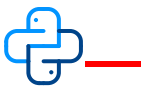
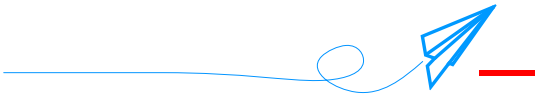


图 16. 对矩阵 Z_X 进行 SVD 分解



Bk4_Ch24_01.py 中 Bk4_Ch24_01_E 部分完成本节三个 SVD 分解运算。



本章最后用一幅图总结本章和上一章内容。

图 17 这幅图是本书中非常重要的几幅图之一，这幅图总结了整本书中和数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 有关的向量、矩阵、矩阵分解、空间等概念。

这幅图的数据分为两个部分：第一部分以 $\boldsymbol{X}$ 为核心，向量以 $\boldsymbol{0}$ 为起点；第二部分是统计视角，以去均值数据 $\boldsymbol{X}_c$ 为核心，向量以质心为起点。

下面，我们聊一下图 17 中关键细节。

$\boldsymbol{X}$ 为细高型矩阵，形状为 $n \times D$，样本数 n 一般远大于特征数 D。对 $\boldsymbol{X}$ 进行 SVD 分解可以得到四个空间。

行空间 $R(\boldsymbol{X})$ “刚刚好”装下 $\boldsymbol{X}$ 的行向量。而 $\mathbb{R}^D$ 装下 $\boldsymbol{X}$ 行向量后则可能略有富余，多余的部分就是零空间 $\text{Null}(\boldsymbol{X})$。零空间维数大于 0 的前提是 $\boldsymbol{X}$ 非满秩。

同理，列空间 $C(\boldsymbol{X})$ 正好装下 $\boldsymbol{X}$ 的列向量，没有富余。而 $\mathbb{R}^n$ 装 $\boldsymbol{X}$ 的列向量则“富富有余”，“有余”的部分就是左零空间 $\text{Null}(\boldsymbol{X}^T)$。

格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 含有 $\boldsymbol{X}$ 列向量模、向量夹角两类重要信息。余弦相似度矩阵 $\boldsymbol{C}$ 仅仅含有向量夹角信息。对格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 进行特征值分解只能获得两个空间。

对格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 进行 Cholesky 分解得到上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$ 可以“代表”$\boldsymbol{X}$ 列向量坐标。

⚠ 反复强调，只有正定矩阵才能进行 Cholesky 分解。

在统计视角下，$\boldsymbol{X}$ 有两个重要信息——质心、协方差矩阵。质心确定数据中心位置，协方差矩阵描述数据分布。协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 同样含有“标准差向量”的模 (标准差大小)、向量夹角 (余弦值为相关性系数) 两类重要信息。相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 仅仅含有向量夹角 (相关性系数) 信息。

⚠ 值得格外注意的是，质心和协方差是多元高斯分布的两个参数，因此需要大家注意协方差矩阵和椭圆的联系。对这部分内容生疏的读者，请参考本书第 14 章。

$\boldsymbol{X}_c$ 是中心化数据矩阵，即每一列数据都去均值。$\boldsymbol{Z_X}$ 是标准化数据矩阵，即 $\boldsymbol{X}$ 的 z 分数。在几何视角下，$\boldsymbol{X}$ 到 $\boldsymbol{X}_c$ 相当于质心“平移”，$\boldsymbol{X}$ 到标准化数据 $\boldsymbol{Z_X}$ 相当于“平移 + 缩放”。

协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 相当于 $\boldsymbol{X}_c$ 的格拉姆矩阵。相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$ 相当于 $\boldsymbol{Z_X}$ 的格拉姆矩阵。此外，注意样本数据缩放系数 $(n-1)$。

$\boldsymbol{X}_c$ 进行 SVD 分解也得到四个空间。这四个空间因 $\boldsymbol{X}_c$ 而生，一般情况不同于 $\boldsymbol{X}$ 的四个空间。

此外，请大家格外注意不同矩阵的单位！以鸢尾花数据为例，$\boldsymbol{X}$ 的每一列数据单位恰好都是 cm，$\boldsymbol{X}_c$ 的单位也都是 cm，而 $\boldsymbol{Z_X}$ 没有单位 (或者说，单位是标准差)；$\boldsymbol{G}$ 的单位是 cm^2，$\boldsymbol{\Sigma}$ 的单位也是 cm^2，$\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 没有有单位。

但是多数时候数据矩阵列向量特征比较丰富，比如高度、质量、时间、温度、密度、百分比、股价、收益率、GDP 等等。它们的数值单位不同、取值范围不同、均方差不同，为了保证可比性，我们需要标准化处理原始数据。

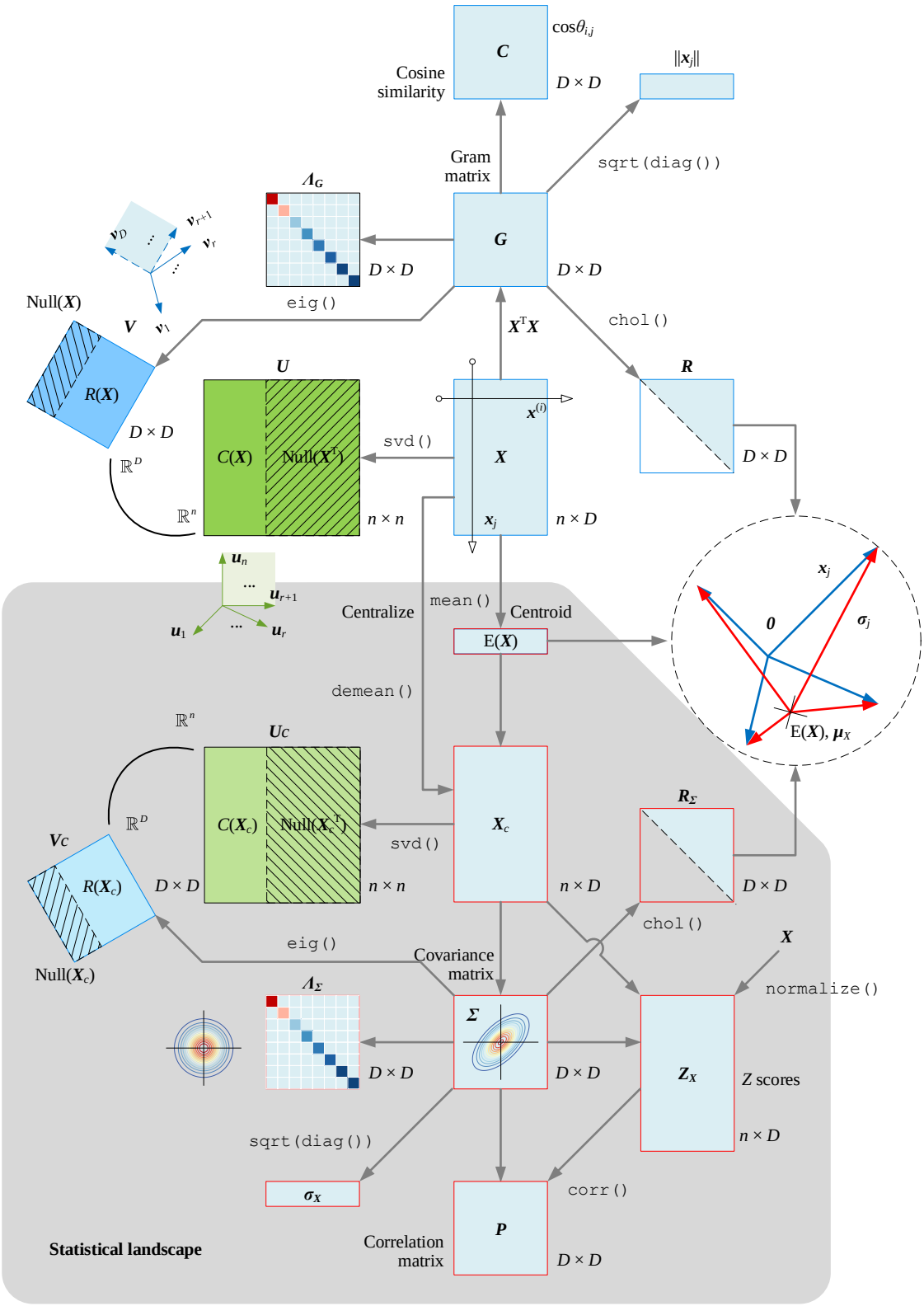


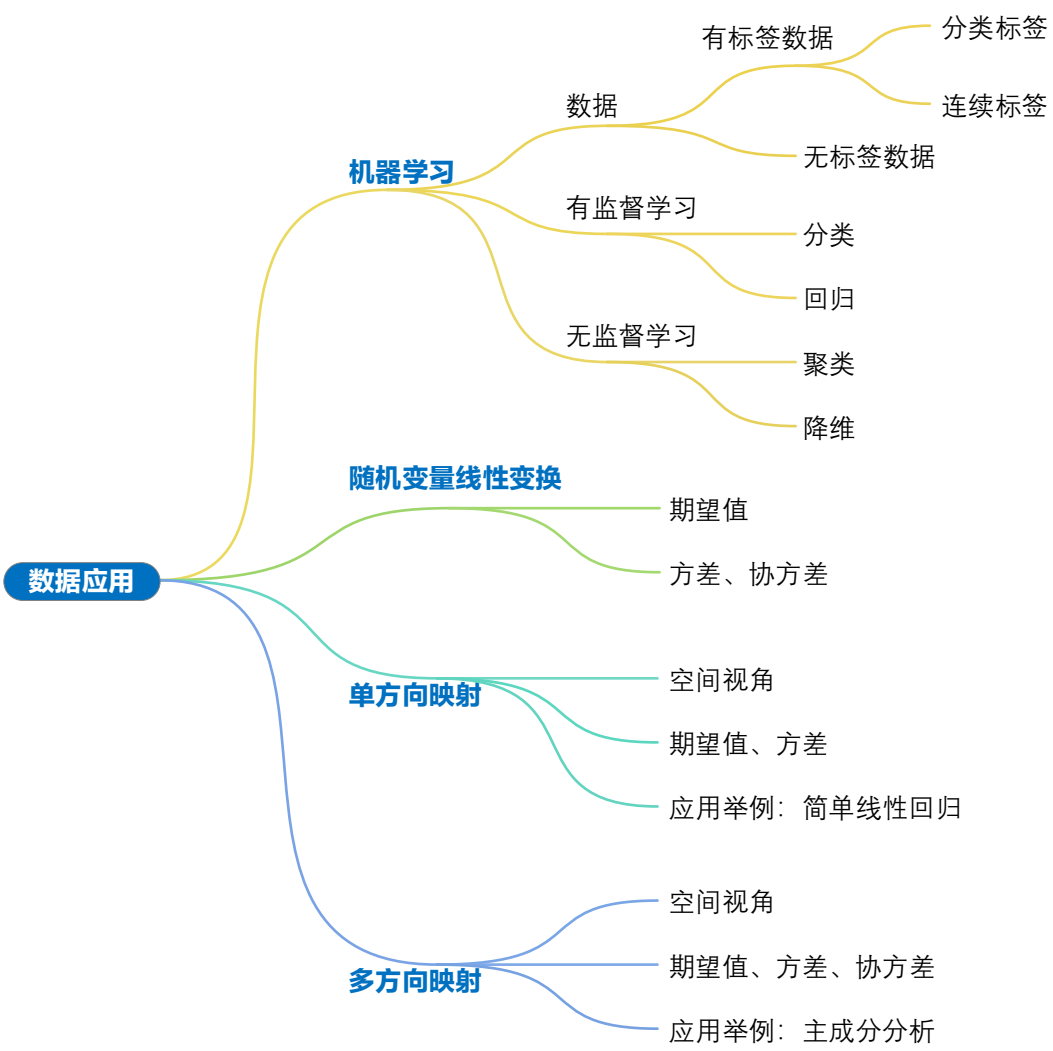
图 17. 总结本章内容的一幅图

25 Selected Use Cases of Data
数据应用

将线性代数工具用于数据科学和机器学习实践

> 琴弦的低吟浅唱中易闻几何；
>
> 天体的星罗棋布上足见音律。
>
> ***There is geometry in the humming of the strings. There is music in the spacing of the spheres.***
>
> —— 毕达哥拉斯 (Pythagoras) | 古希腊哲学家、数学家和音乐理论家 | 570 ~ 495 BC

- `statsmodels.api.add_constant()` 线性回归增加一列常数 1
- `statsmodels.api.OLS()` 最小二乘法函数
- `numpy.linalg.eig()` 特征值分解
- `numpy.linalg.svd()` 奇异值分解
- `sklearn.decomposition.PCA()` 主成分分析函数



25.1 从线性代数到机器学习

本书第 23、24 章，即“数据三部曲”前两章，分别从空间、矩阵分解两个角度总结了本书之前介绍的重要线性代数工具。我们寻找向量空间、完成矩阵分解，并不仅仅因为它们有趣。实际上，本书中介绍的线性代数工具有助于我们用样本数据搭建数据科学、机器学习模型。

在前两章的基础上，本章一方面引出《统计至简》有关多元统计内容，另一方面预告本书线性代数工具在《数据科学》和《机器学习》中几个应用场景。

机器学习

本章首先聊一聊，什么是机器学习？

根据维基百科定义，机器学习算法是一类从数据中自动分析获得规律，并利用规律对未知数据进行预测的算法。

机器学习处理的问题有如下特征：(a) 基于数据，模型需要通过样本数据训练；(b) 黑箱或复杂系统，难以找到**控制方程** (governing equations)。控制方程指的是能够比较准确、完整描述某一现象或规律的数学方程，比如用 $y = ax^2 + bx + c$ 描述抛物线轨迹。

而机器学习处理的数据通常为多特征数据，这就是为什么任何机器学习算法离不开线性代数工具。

有标签数据、无标签数据

根据输出值有无标签，如图 1 所示，数据可以分为**有标签数据** (labelled data) 和**无标签数据** (unlabelled data)。

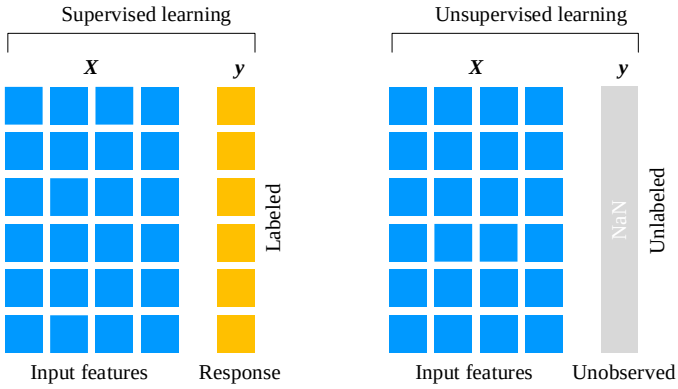


图 1. 根据有无标签分类数据

显然，鸢尾花数据集是有标签数据，因为数据的每一行代表一朵花，而每一朵花都对应一个特定的鸢尾花类别 (图 2 最后一列)，这个类别就是标签。

Index	Sepal length X_1	Sepal width X_2	Petal length X_3	Petal width X_4	Species C
1	5.1	3.5	1.4	0.2	Setosa C_1
2	4.9	3	1.4	0.2	
3	4.7	3.2	1.3	0.2	
...	...	...	...	...	
49	5.3	3.7	1.5	0.2	
50	5	3.3	1.4	0.2	
51	7	3.2	4.7	1.4	Versicolor C_2
52	6.4	3.2	4.5	1.5	
53	6.9	3.1	4.9	1.5	
...	...	...	...	...	
99	5.1	2.5	3	1.1	
100	5.7	2.8	4.1	1.3	
101	6.3	3.3	6	2.5	Virginica C_3
102	5.8	2.7	5.1	1.9	
103	7.1	3	5.9	2.1	
...	...	...	...	...	
149	6.2	3.4	5.4	2.3	
150	5.9	3	5.1	1.8	

图 2. 鸢尾花数据表格，单位为厘米 (cm)

很多场景，样本数据并没有标签。举个例子，图 3 所示为 2020 年度中 9 支股票的每个营业日股价数据。图 3 中数据共有 253 行，每行代表一个日期几只股票股价水平。

列方向来看，表格共有 10 列，第 1 列为营业日日期，其余 9 列每列为股价数据。从**时间序列** (timeseries) 角度来看，图 3 中第一列时间点起到一个时间先后排序作用。图 3 数据显然没有类似图 2 标签。本系列丛书《数据科学》一册将专门讲解时间序列。

此外，本书很多应用场景中，我们并不考虑鸢尾花数据的标签；也就是说，我们将鸢尾花标签一列删除，得到无标签数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{150\times 4}$。

Date	TSLA	TSM	COST	NVDA	FB	AMZN	AAPL	NFLX	GOOGL
2-Jan-2020	86.05	58.26	281.10	239.51	209.78	1898.01	74.33	329.81	1368.68
3-Jan-2020	88.60	56.34	281.33	235.68	208.67	1874.97	73.61	325.90	1361.52
6-Jan-2020	90.31	55.69	281.41	236.67	212.60	1902.88	74.20	335.83	1397.81
7-Jan-2020	93.81	56.60	280.97	239.53	213.06	1906.86	73.85	330.75	1395.11
8-Jan-2020	**98.43**	**57.01**	**284.19**	**239.98**	**215.22**	**1891.97**	**75.04**	**339.26**	**1405.04**
9-Jan-2020	96.27	57.48	288.75	242.62	218.30	1901.05	76.63	335.66	1419.79
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
30-Dec-2020	694.78	108.49	373.71	525.83	271.87	3285.85	133.52	524.59	1736.25
31-Dec-2020	705.67	108.63	376.04	522.20	273.16	3256.93	132.49	540.73	1752.64

图 3. 股票收盘股价数据

有标签数据：分类、连续

有标签数据中，标签数值可以是**分类** (categorical)，也可以是**连续** (continuous)。

分类标签很好理解，比如鸢尾花数据的标签有三类 setosa、virginica、versicolor。它们可以用数字 0、1、2 来代表。

而有些数据的标签是连续的。本系列丛书《数学要素》一册中鸡兔同笼的回归问题中，鸡兔数量就是个好例子。横轴鸡的数量是回归问题的自变量；纵轴的兔子数量是因变量，就是连续标签。

再举个例子，用图 3 中 9 只股价来构造一个投资组合，目标是跟踪标普 500 涨跌；这时，标普 500 同时期的数据就是连续标签，显然这个标签对应的数据为连续数值。

有监督学习、无监督学习

根据数据是否有标签，机器学习可以分为两大类：

- **有监督学习** (supervised learning) 训练有标签值样本数据并得到模型，通过模型对新样本数据标签进行标签推断。
- **无监督学习** (unsupervised learning) 训练没有标签值的数据，并发现样本数据的结构。

四大类

如图 4 所示，根据标签类型，机器学习还可进一步细分成四大类问题。

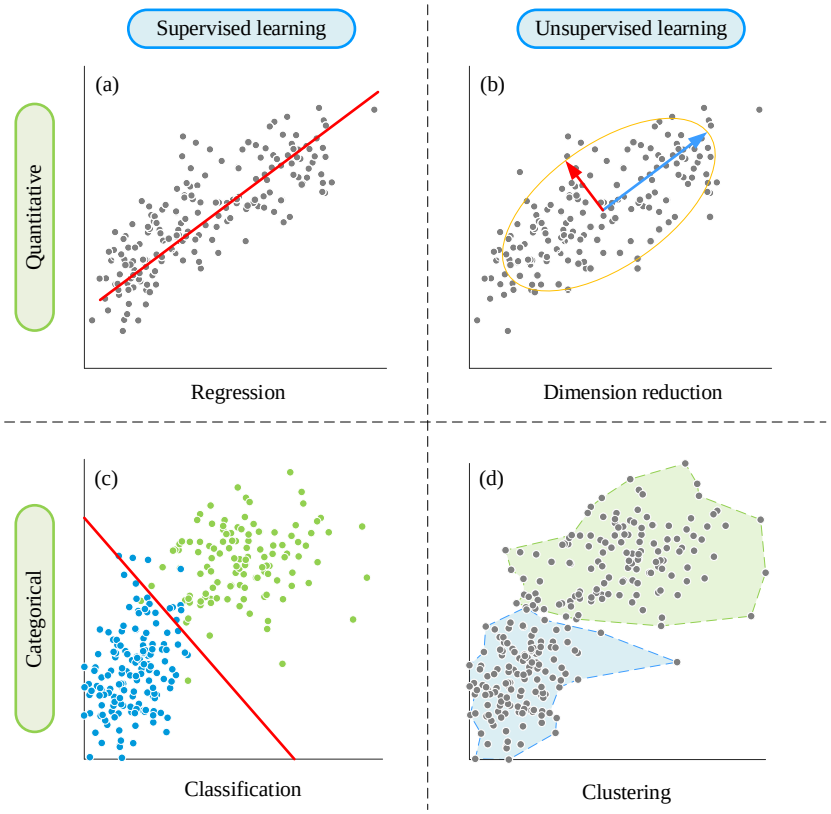


图 4. 根据数据是否有标签、标签类型细分机器学习算法

有监督学习中，如果标签为连续数据，对应的问题为**回归** (regression)，如图 4 (a)。如果标签为分类数据，对应的的问题则是**分类** (classification)，如图 4 (c)。

无监督学习中，样本数据没有标签。如果目标是寻找规律、简化数据，这类问题叫做**降维** (dimension reduction)，比如主成分分析目的之一就是找到数据中占据主导地位的成分，如图 4 (b)。如果模型的目标是根据数据特征将样本数据分成不同的组别，这种问题叫做**聚类** (clustering)，如图 4 (b)。

实际上，数据科学和机器学习本来不分家，但是为了方便大家学习，作者根据图 4 所示规律将内容分成《数据科学》和《机器学习》两册。

《数据科学》主要解决图 4 (a) 和 (b) 两图对应的回归以及降维问题。

《机器学习》则关注图 4 (c) 和 (d) 所示分类和聚类问题，难度有所提高。

本系列丛书《数学要素》、《矩阵力量》、《统计至简》这三册为《数据科学》和《机器学习》提供了数学工具。特别地，本册《矩阵力量》提供的线性代数工具，是所有数学工具从一元到多元的推手，比如多元微积分、多元概率统计、多元优化等等。

本章下文就试图把几何、线性代数、概率统计、机器学习应用这几个元素串起来，让大家领略线性代数工具无处不在的力量。

25.2 从随机变量的线性变换说起

本节将随机变量的线性变换，和向量的仿射变换联系起来。这一节内容相对来说有一定难度，但是极其重要。本节是多元统计的理论基础。

本系列丛书《统计至简》一册还会深入探讨本节内容。

线性变换

如果 X 为一个随机变量，对 X 进行函数变换，可以得到其他的随机变量 Y:

$$Y = h(X) \tag{1}$$

特别地，如果 $h()$ 为线性函数，则 X 到 Y 进行的就是线性变换，比如:

$$Y = h(X) = aX + b \tag{2}$$

其中，a 和 b 为常数。这相当于几何中的缩放、平移两步操作。在线性代数中，上式相当于仿射变换。

(2) 中，Y 的期望和 X 的期望之间关系:

$$\mathrm{E}(Y) = a\,\mathrm{E}(X) + b \tag{3}$$

(2) 中，Y 和 X 方差之间关系：

$$\mathrm{var}(Y) = \mathrm{var}(aX + b) = a^2\,\mathrm{var}(X) \tag{4}$$

二元随机变量

如果 Y 和二元随机变量 (X_1, X_2) 存在如下关系：

$$Y = aX_1 + bX_2 \tag{5}$$

(5) 可以写成：

$$Y = \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} \tag{6}$$

相信大家已经在上式中看到了本书反复讨论的线性映射关系。

Y 和二元随机变量 (X_1, X_2) 期望值之间存在如下关系：

$$\mathrm{E}(Y) = \mathrm{E}(aX_1 + bX_2) = a\,\mathrm{E}(X_1) + b\,\mathrm{E}(X_2) \tag{7}$$

(7) 可以写成如下矩阵运算形式：

$$\mathrm{E}(Y) = \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathrm{E}(X_1) \\ \mathrm{E}(X_2) \end{bmatrix} \tag{8}$$

Y 和二元随机变量 (X_1, X_2) 方差、协方差存在如下关系：

$$\mathrm{var}(Y) = \mathrm{var}(aX_1 + bX_2) = a^2\,\mathrm{var}(X_1) + b^2\,\mathrm{var}(X_2) + 2ab\,\mathrm{cov}(X_1, X_2) \tag{9}$$

(9) 可以写成：

$$\mathrm{var}(Y) = \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathrm{var}(X_1) & \mathrm{cov}(X_1, X_2) \\ \mathrm{cov}(X_1, X_2) & \mathrm{var}(X_2) \end{bmatrix}}_{\Sigma} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \tag{10}$$

相信大家已经在上式中看到了如下协方差矩阵：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \mathrm{var}(X_1) & \mathrm{cov}(X_1, X_2) \\ \mathrm{cov}(X_1, X_2) & \mathrm{var}(X_2) \end{bmatrix} \tag{11}$$

也就是说，(10) 可以写成：

$$\mathrm{var}(Y) = \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \tag{12}$$

D 维随机变量

如果 D 维随机变量 $\boldsymbol{\zeta} = [Z_1, Z_2, \ldots, Z_D]^T$ 服从多元高斯分布 $N(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I})$，即均值为 $\boldsymbol{0}$，协方差矩阵为单位矩阵：

$$\boldsymbol{\zeta} = \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \\ \vdots \\ Z_D \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\zeta}} = \mathrm{E}(\boldsymbol{\zeta}) = \boldsymbol{0} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathrm{var}(\boldsymbol{\zeta}) = \boldsymbol{I}_{D\times D} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{bmatrix} \tag{13}$$

其中，希腊字母 $\boldsymbol{\zeta}$ 读作 zeta。

而 D 维随机变量 $\boldsymbol{\chi} = [X_1, X_2, \ldots, X_D]^T$ 和 $\boldsymbol{\zeta}$ 存在如下线性关系：

$$\boldsymbol{\chi} = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_D \end{bmatrix} = \boldsymbol{V}^T\boldsymbol{\zeta} + \boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{V}^T \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \\ \vdots \\ Z_D \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_D \end{bmatrix} \tag{14}$$

⚠ 注意，$\boldsymbol{\chi}$ 为列向量，列向量元素个数为 D，即 D 行。

$\boldsymbol{\chi}$ 的期望值 (即质心) 为：

$$\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\chi}} = \mathrm{E}(\boldsymbol{\chi}) = \boldsymbol{\mu} \tag{15}$$

注意，我们在此约定 $\mathrm{E}(\boldsymbol{\chi})$ 为列向量。求期望值运算符 $\mathrm{E}(\bullet)$ 作用于列向量 $\boldsymbol{\chi}$，结果还是列向量。而 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 代表 $\mathrm{E}(\bullet)$ 作用于数据矩阵 $\boldsymbol{X}$。$\boldsymbol{X}$ 的每一列代表一个随机变量，因此 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 为行向量。

$\boldsymbol{\chi}$ 的协方差为：

$$\begin{aligned} \mathrm{var}(\boldsymbol{\chi}) = \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\chi}} &= \mathrm{cov}(\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\chi}) \\ &= \mathrm{E}\left((\boldsymbol{\chi} - \mathrm{E}(\boldsymbol{\chi}))(\boldsymbol{\chi} - \mathrm{E}(\boldsymbol{\chi}))^T\right) \\ &= \frac{(\boldsymbol{\chi} - \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\chi}})(\boldsymbol{\chi} - \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\chi}})^T}{n} = \boldsymbol{V}^T \frac{\boldsymbol{\zeta}\boldsymbol{\zeta}^T}{n} \boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}^T \boldsymbol{I}_{D\times D} \boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}^T\boldsymbol{V} \end{aligned} \tag{16}$$

也就是说 $\boldsymbol{\chi}$ 服从 $N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{VV})$。

⚠ 注意，(16) 计算总体方差，因此分母为 n。此外注意 $\boldsymbol{\zeta}\boldsymbol{\zeta}^T$ 转置 ^{T} 所在位置，有别于本书前文计算数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的协方差矩阵时遇到的 $\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}$。

如果 $\boldsymbol{\chi}$ 和 $\boldsymbol{\gamma} = [Y_1, Y_2, \ldots, Y_D]^T$ 满足如下线性映射关系：

$$\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{\chi} \tag{17}$$

$\boldsymbol{\gamma}$ 的期望值 (即质心) 为：

$$\boldsymbol{\mu}_{\gamma} = \mathrm{E}(\boldsymbol{\gamma}) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{\mu} \tag{18}$$

$\boldsymbol{\gamma}$ 的协方差为：

$$\mathrm{var}(\boldsymbol{\gamma}) = \boldsymbol{\Sigma}_{\gamma} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{\Sigma}_{\chi}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \tag{19}$$

也就是说 $\boldsymbol{\gamma}$ 服从 $N(\boldsymbol{A\mu}, \boldsymbol{A\Sigma_{\chi}A})$。

相信很多读者对本节内容已经感到云里雾里，下面几节展开讲解本节内容。

25.3 单方向映射

随机变量视角

D 个随机变量，X_1、X_2 … X_D，通过如下组合构造随机变量 Y：

$$Y = v_1X_1 + v_2X_2 + \cdots + v_DX_D \tag{20}$$

举个例子，制作八宝粥时，用到如下八种谷物——大米 (X_1)、小米 (X_2)、糯米 (X_3)、紫米 (X_4)、绿豆 (X_5)、红枣 (X_6)、花生 (X_7)、莲子 (X_8)。v_1、v_2 … v_D 相当于八种谷物的配比。

向量视角

从向量角度看 (20)：

$$\hat{\boldsymbol{y}} = v_1\boldsymbol{x}_1 + v_2\boldsymbol{x}_2 + \cdots + v_D\boldsymbol{x}_D \tag{21}$$

(21) 中 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 头上“戴帽子”为了呼应下一节的线性回归，避免混淆。如图 5 所示，(21) 就是线性组合。

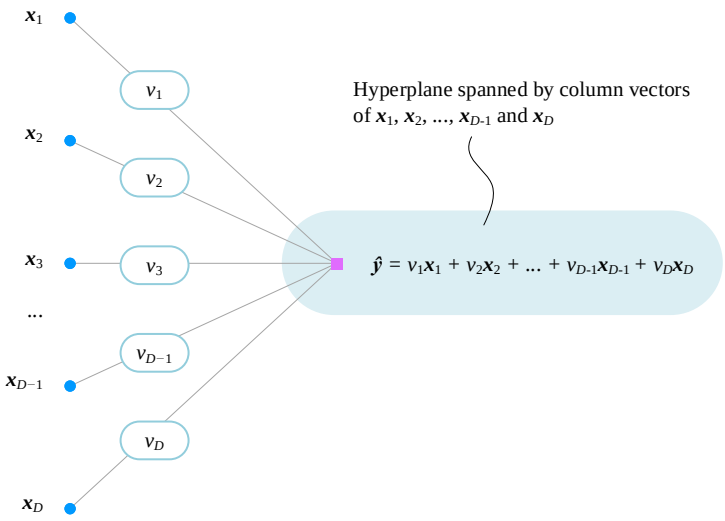


图 5. $\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}_2$ … $\boldsymbol{x}_D$ 线性组合

令 $\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D]$，(21) 相当于 $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}$ 向量映射，得到列向量 $\hat{\boldsymbol{y}}$：

$$\hat{\boldsymbol{y}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \boldsymbol{v} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v} \tag{22}$$

特别地，如果 $\boldsymbol{v}$ 为单位向量，上式就是正交投影。

空间视角

如图 6 所示，从空间角度，span($\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D$) 张成超平面 H，而 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 在超平面 H 中。$\hat{\boldsymbol{y}}$ 的坐标就是 $(v_1, v_2, \ldots, v_D)$。

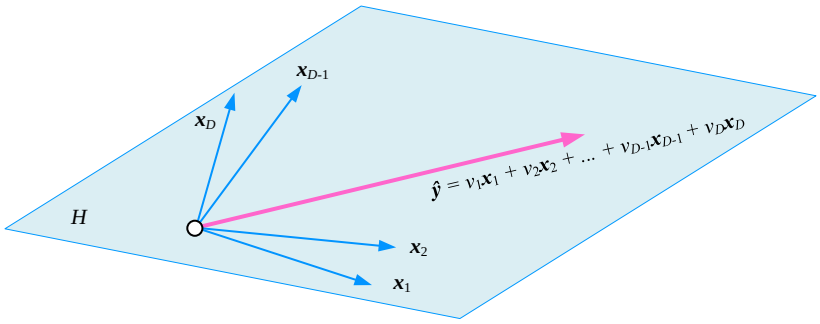


图 6. $\hat{\boldsymbol{y}}$ 在超平面 H 中

行向量视角

本章前文说的是列向量视角，我们下面再看行向量视角。数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 中的每一行对应行向量 $\boldsymbol{x}^{(i)}$，$\boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{v} = \hat{y}^{(i)}$ 相当于 D 维坐标映射到 span($\boldsymbol{v}$) 得到一个点。

请大家回忆本书第 10 章讲过的用张量积完成“二次投影”。

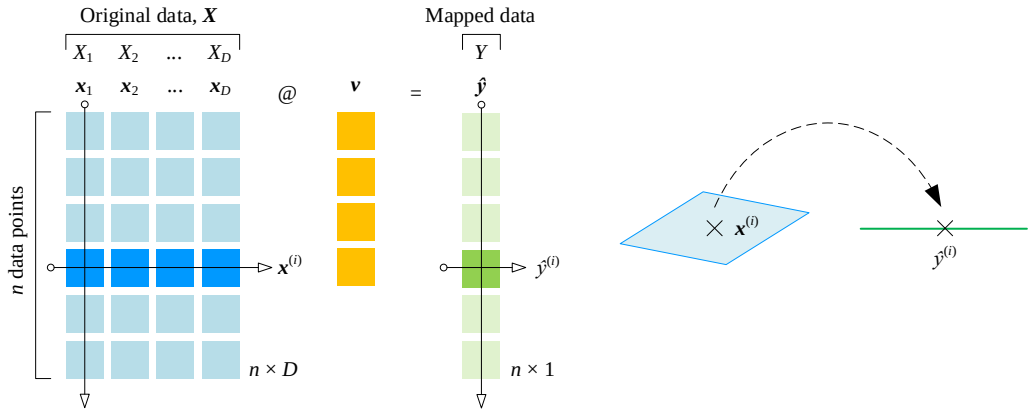


图 7. 数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}$ 映射的行向量视角

期望值

下面用具体数据举例说明如何计算 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 的期望值。图 8 所示热图对应数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}$ 映射运算过程。

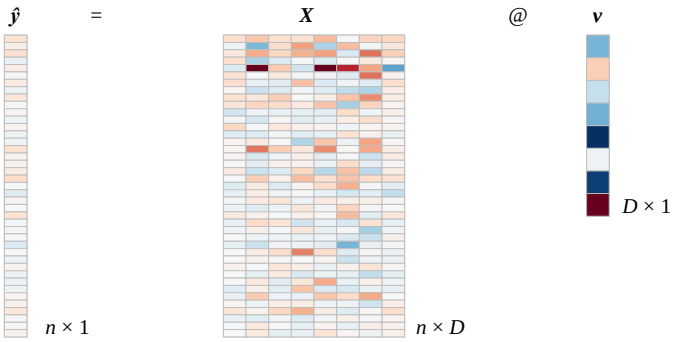


图 8. 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}$ 映射热图

根据上一节内容，列向量 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 期望值 $\mathrm{E}(\boldsymbol{y})$ 和矩阵 $\boldsymbol{X}$ 期望值 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 关系为：

$$\mathrm{E}(\hat{\boldsymbol{y}}) = \mathrm{E}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}) = \mathrm{E}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{v} \tag{23}$$

其中，$\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 为行向量：

$$\mathrm{E}(\boldsymbol{X}) = \begin{bmatrix} \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_1) & \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_2) & \cdots & \mathrm{E}(\boldsymbol{x}_D) \end{bmatrix} \tag{24}$$

计算 $\mathrm{E}(\hat{\boldsymbol{y}})$ 过程热图如图 9 所示。

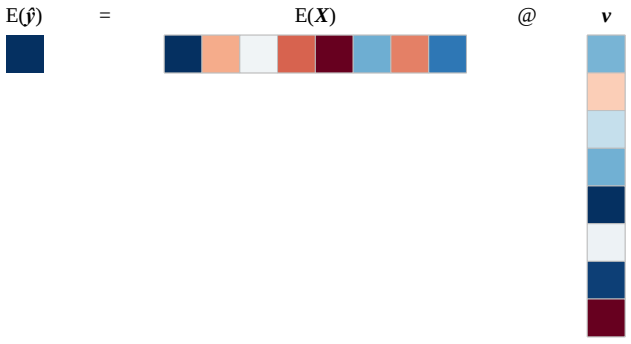


图 9. 计算 $\mathrm{E}(\hat{\boldsymbol{y}})$ 矩阵运算热图

方差

方差 $\mathrm{var}(\hat{\boldsymbol{y}})$ 和数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{X}}$ 关系为：

$$
\begin{aligned}
\operatorname{var}(\hat{\boldsymbol{y}}) &= \frac{\left(\hat{\boldsymbol{y}}-\mathrm{E}(\hat{\boldsymbol{y}})\right)^{\mathrm{T}}\left(\hat{\boldsymbol{y}}-\mathrm{E}(\hat{\boldsymbol{y}})\right)}{n-1} \\
&= \frac{\left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}-\mathrm{E}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{v}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}-\mathrm{E}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{v}\right)}{n-1} \\
&= \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\underbrace{\frac{\left(\boldsymbol{X}-\mathrm{E}(\boldsymbol{X})\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{X}-\mathrm{E}(\boldsymbol{X})\right)}{n-1}}_{\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{X}}}\boldsymbol{v} \\
&= \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{v}
\end{aligned}
\tag{25}
$$

图 10 所示为计算 var($\hat{\boldsymbol{y}}$) 矩阵热图。

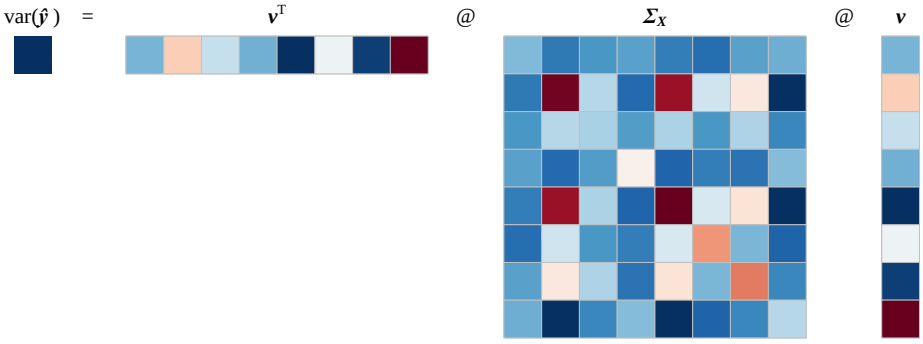


图 10. 计算 var($\hat{\boldsymbol{y}}$) 矩阵运算热图

几何视角

图 11 所示为几何视角下的上述映射过程。注意，图 11 假设样本数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 服从二元高斯分布 $N(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}, \boldsymbol{\Sigma})$，因此我们用椭圆代表它的分布。

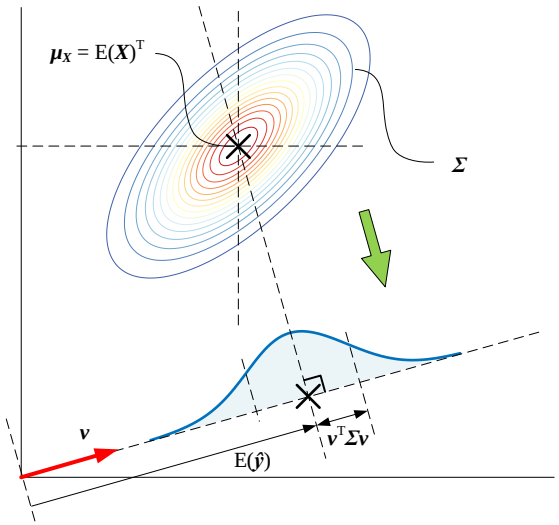


图 11. 服从二元高斯分布的数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}$ 映射得到 $\hat{\boldsymbol{y}}$

25.4 线性回归

线性回归 (linear regression) 是最为常用的回归算法。这种模型利用线性关系建立因变量与一个或多个自变量之间的联系。

简单线性回归 (Simple Linear Regression, SLR) 为一元线性回归模型，是指模型中只含有一个自变量 (x) 和一个因变量 (y)，即 $y = b_0 + b_1 x_1 + \varepsilon$。

多元线性回归 (multivariate regression) 模型则引入多个自变量 ($x_1, x_2, \ldots, x_D$)，即回归分析中引入多个因子解释因变量 (y)。多元线性回归模型的数学表达式如下：

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + ... + b_D x_D + \varepsilon \tag{26}$$

其中，b_0 为截距项；$b_1, b_2, \ldots, b_D$ 代表自变量系数；ε 为残差项；D 为自变量个数。

用向量代表具体值，(26) 可以写成：

$$\underset{\hat{y}}{\boldsymbol{y} = \underbrace{b_0 \boldsymbol{1} + b_1 \boldsymbol{x}_1 + b_2 \boldsymbol{x}_2 + \cdots + b_D \boldsymbol{x}_D}} + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{27}$$

⚠ 注意，全 $\boldsymbol{1}$ 列向量也代表一个方向。而 $\boldsymbol{y}$ 代表监督学习中的连续标签。

换一种方式表达 (27)：

$$\underset{\hat{y}}{\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{b}} + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{28}$$

其中，

$$\boldsymbol{X}_{n\times(D+1)} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{1} & \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{1,1} & \cdots & x_{1,D} \\ 1 & x_{2,1} & \cdots & x_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n,1} & \cdots & x_{n,D} \end{bmatrix}_{n\times(D+1)}, \quad \boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_D \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon^{(1)} \\ \varepsilon^{(2)} \\ \vdots \\ \varepsilon^{(n)} \end{bmatrix} \tag{29}$$

⚠ 注意，(29) 中设计矩阵 $\boldsymbol{X}$ 包含全 $\boldsymbol{1}$ 列向量，也就是说这个 $\boldsymbol{X}$ 有 $D + 1$ 列。

线性组合

图 12 所示为多元 OLS 线性回归数据关系，图中 $\boldsymbol{y}$ 就是连续标签构成的列向量。

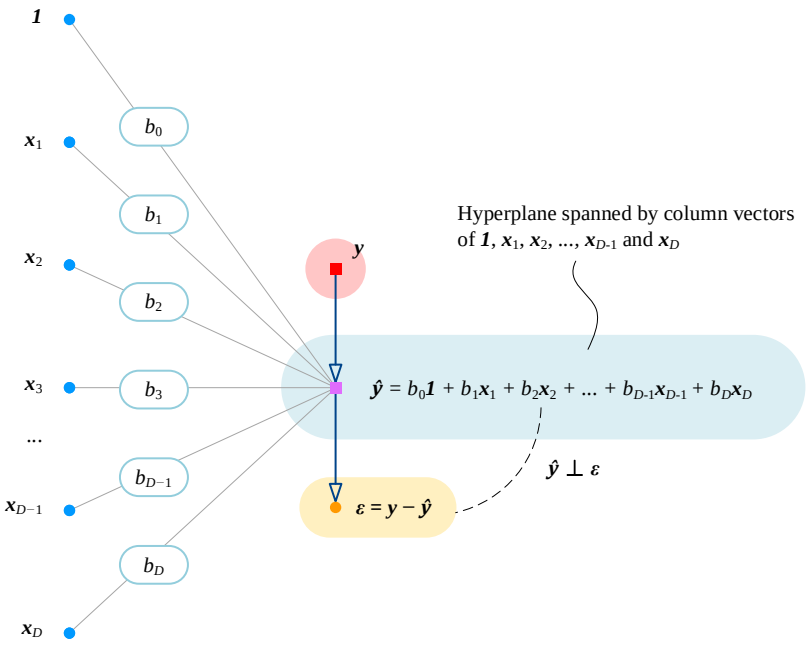


图 12. 多元 OLS 线性回归数据关系

投影视角

预测值构成的列向量 $\hat{\boldsymbol{y}}$，通过下式计算得到：

$$\hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{b} \tag{30}$$

⚠ 注意，这里我们用了“戴帽子”的 $\hat{\boldsymbol{y}}$，它代表对 $\boldsymbol{y}$ 的估计。$\boldsymbol{y}$ 和 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 形状相同，两者之差为残差。

预测值向量 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 是自变量向量 $\boldsymbol{1}, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D$ 的线性组合。从空间角度来看，$[\boldsymbol{1}, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D]$ 构成一个超平面 $H = \text{span}(\boldsymbol{1}, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D)$。$\hat{\boldsymbol{y}}$ 是 $\boldsymbol{y}$ 在超平面 H 上的投影。

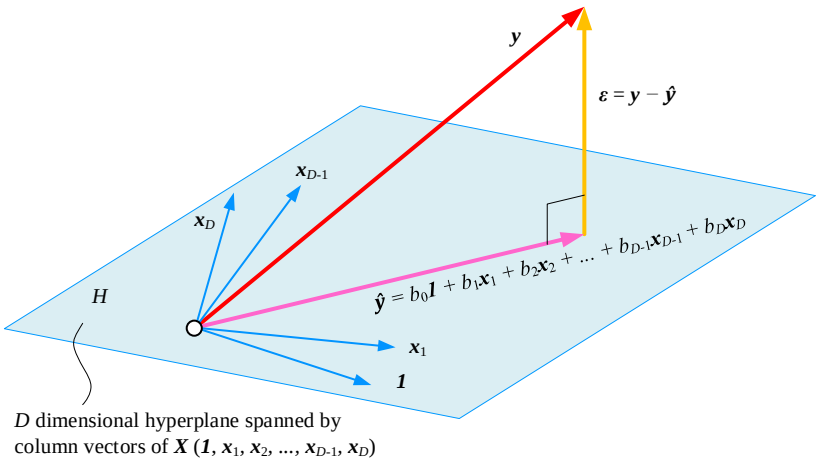


图 13. 几何角度解释多元 OLS 线性回归

而 $\boldsymbol{y}$ 和 $\hat{\boldsymbol{y}}$ 的差对应残差项 $\boldsymbol{\varepsilon}$：

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{b} \tag{31}$$

如图 13 所示，残差向量 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 垂直于 span($\boldsymbol{1}$, $\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2$, …, $\boldsymbol{x}_D$)：

$$\boldsymbol{\varepsilon} \perp \boldsymbol{X} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{0} \tag{32}$$

将 (31) 代入 (32) 得到：

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{b}\right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{33}$$

求解得到 $\boldsymbol{b}$：

$$\boldsymbol{b} = \left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\right)^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{34}$$

本书中，我们已经不止一起提到 (34)。请大家注意从数据、向量、几何、空间、优化等视角理解 (34)。此外，$\left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\right)^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 叫做 $\boldsymbol{X}$ 的广义逆，或伪逆。还请大家注意，只有 $\boldsymbol{X}$ 为列满秩时，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 才存在逆。

QR 分解

利用 QR 分解结果求解 $\boldsymbol{b}$。把 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}$ 代入 (34) 得到：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{b} &= \left(\left(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \underbrace{\left(\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}\right)^{-1}}_{\boldsymbol{I}}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ &= \boldsymbol{R}^{-1}\underbrace{\left(\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}}_{\boldsymbol{I}}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\end{aligned} \tag{35}$$

奇异值分解

类似地，利用 SVD 分解结果，$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{b}$ 可以整理为：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{b} &= \left(\left(\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \underbrace{\left(\left(\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}\,\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}}_{\boldsymbol{I}}\left(\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ &= \left(\left(\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ &= \left(\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\underbrace{\left(\left(\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}}_{\boldsymbol{I}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \left(\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\end{aligned} \tag{36}$$

也就是说，对比 SVD 分解 ($\boldsymbol{X} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$) 和 QR 分解 ($\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}$)，$\boldsymbol{U}$ 可以视作 $\boldsymbol{Q}$，因为两者都是正交矩阵；而 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 可以视作 $\boldsymbol{R}$。

虽然 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{Q}$ 都是正交矩阵，两者从本质上是不同的。请大家自行回忆上一章内容，对比两种分解。

实际上，我们不需要大费周章，直接将 QR 分解或 SVD 分解结果直接代入 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{b}$ 等式便可以求得 $\boldsymbol{b}$。

优化视角

下面以本节多元线性回归为例，介绍如何利用**最小二乘法** (Ordinary Least Squares, OLS)，即最小化误差的平方和，寻找最佳参数 $\boldsymbol{b}$。

残差项平方和可以写成：

$$\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\varepsilon} \tag{37}$$

将 (31) 带入 (37)，展开得到：

$$\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{b})^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}})(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{b}) = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} - \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} + \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} \tag{38}$$

上式，$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 都是标量，转置不影响结果：

$$\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} \tag{39}$$

因此 (38) 可以写成：

$$\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} - 2\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} + \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} \tag{40}$$

构造最小化问题，令目标函数 $f(\boldsymbol{b})$ 为：

$$f(\boldsymbol{b}) = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} - 2\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} + \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} \tag{41}$$

$f(\boldsymbol{b})$ 对向量 $\boldsymbol{b}$ 求一阶导为 $\boldsymbol{0}$ 得到如下等式：

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{b})}{\partial \boldsymbol{b}} = -2\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} + 2\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{0} \tag{42}$$

整理 (42)，得到：

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{43}$$

通过优化视角，我们也得到了(33)。

此外，$f(\boldsymbol{b})$ 对向量 $\boldsymbol{b}$ 求二阶导得到黑塞矩阵：

$$\frac{\partial^2 f(\boldsymbol{b})}{\partial \boldsymbol{b} \partial \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}} = 2\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} \tag{44}$$

如果 $\boldsymbol{X}$ 列满秩，它的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 正定。因此，满足 (43) 的鞍点 $\boldsymbol{b}$ 为极小值点。进一步，$f(\boldsymbol{b})$ 为二次型，可以判定 $\boldsymbol{b}$ 为最小值点。

本系列丛书《统计至简》一册将介绍多元线性回归和条件概率之间关系。

25.5 多方向映射

矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$ 两个不同方向投影：

$$\boldsymbol{y}_1 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{1,1} \\ v_{2,1} \\ \vdots \\ v_{D,1} \end{bmatrix} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_1, \quad \boldsymbol{y}_2 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{1,2} \\ v_{2,2} \\ \vdots \\ v_{D,2} \end{bmatrix} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_2 \tag{45}$$

还是用八宝粥的例子，(45) 相当于两个不同配方的八宝粥。

合并 (45) 两个等式，得到：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{Y}_{n\times 2} &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{y}_1 & \boldsymbol{y}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix} \\ &= \boldsymbol{X}_{n\times D}\boldsymbol{V}_{D\times 2} \end{aligned} \tag{46}$$

图 14 所示为上述矩阵运算示意图。请大家自行从向量空间视角分析上式。

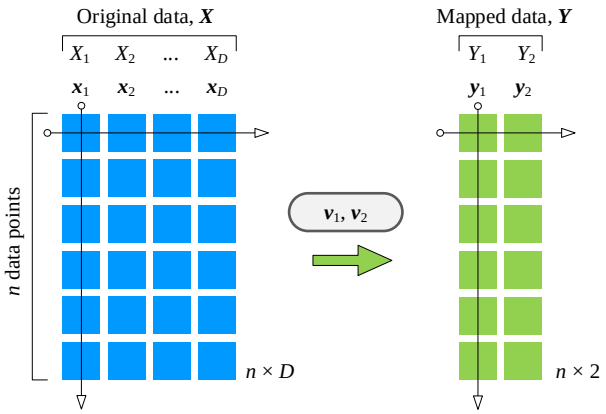


图 14. 数据朝两个方向映射

图 15 所示为数据 $\boldsymbol{X}$ 朝两个方向映射对应的运算热图。

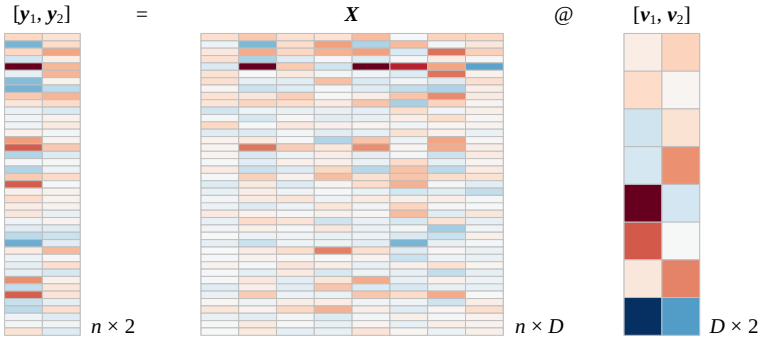


图 15. 数据 $\boldsymbol{X}$ 朝两个方向映射对应的运算热图

期望值

期望值 $[\mathrm{E}(\boldsymbol{y}_1), \mathrm{E}(\boldsymbol{y}_2)]$ 和期望值向量 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 关系为：

$$\begin{bmatrix}\mathrm{E}(\boldsymbol{y}_1) & \mathrm{E}(\boldsymbol{y}_2)\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\mathrm{E}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{v}_1 & \mathrm{E}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{v}_2\end{bmatrix} = \mathrm{E}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{V} \tag{47}$$

比较 (18) 和 (47)，两个等式不同点在于转置。(18) 中随机变量向量为列向量，而上式中 $\mathrm{E}(\boldsymbol{X})$ 为行向量。

图 16 所示为计算期望值向量 $[\mathrm{E}(\boldsymbol{y}_1), \mathrm{E}(\boldsymbol{y}_2)]$ 的热图。

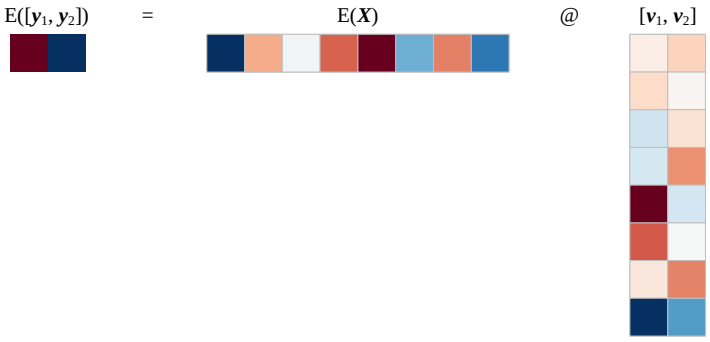


图 16. 计算期望值 $[\mathrm{E}(\boldsymbol{y}_1), \mathrm{E}(\boldsymbol{y}_2)]$ 矩阵运算热图

协方差

$[\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2]$ 协方差为：

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}} = \begin{bmatrix}\sigma_{Y1}^2 & \rho_{Y1,Y2}\sigma_{Y1}\sigma_{Y2} \\ \rho_{Y1,Y2}\sigma_{Y1}\sigma_{Y2} & \sigma_{Y2}^2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\end{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{X}} \begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2\end{bmatrix} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{V} \tag{48}$$

(19) 和 (48) 也差在转置运算。注意，上式中 $\boldsymbol{V}$ 并非方阵。

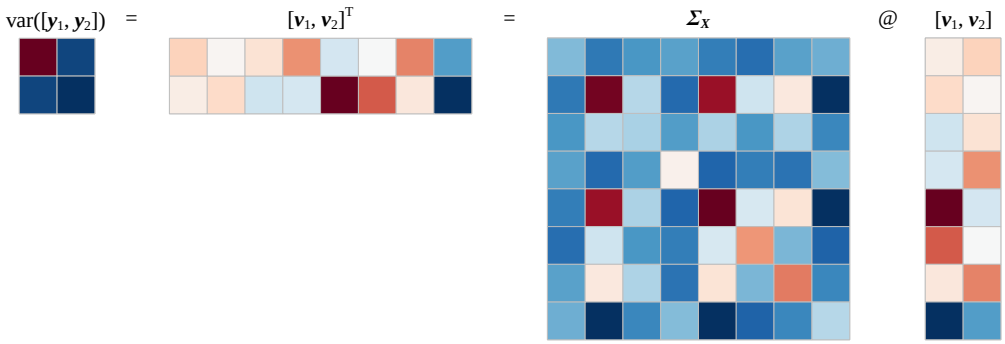


图 17. 计算 $[\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2]$ 协方差矩阵运算热图

25.6 主成分分析

主成分分析 (principal component analysis, PCA) 最初由**卡尔·皮尔逊** (Karl Pearson) 在 1901 提出。主成分分析就是多方向映射。

通过线性变换，PCA 将多维数据投影到一个新的正交坐标系，把原始数据中的最大方差成分提取出来。PCA 也是数据降维的重要方法之一。

如图 18 所示，PCA 的一般步骤如下：

- 对原始数据 $\boldsymbol{X}_{n \times D}$ 作**标准化** (standardization) 处理，得到 z 分数 $\boldsymbol{Z}_{\boldsymbol{X}}$；
- 计算 z 分数 $\boldsymbol{X}_z$ 协方差矩阵，即原始数据 $\boldsymbol{X}$ 的相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P}$；
- 计算 $\boldsymbol{P}$ 特征值 λ_i 与特征向量矩阵 $\boldsymbol{V}_{D \times D}$；
- 对特征值 λ_i 从大到小排序，选择其中特征值最大的 p 个特征向量作为主成分方向；
- 将标准化数据投影到规范正交基 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_p]$ 构建的新空间中，得到 $\boldsymbol{Y}_{n \times p}$。

上述 PCA 流程仅仅是几种技术路线之一，本节最后会列出六种常用 PCA 技术路线。

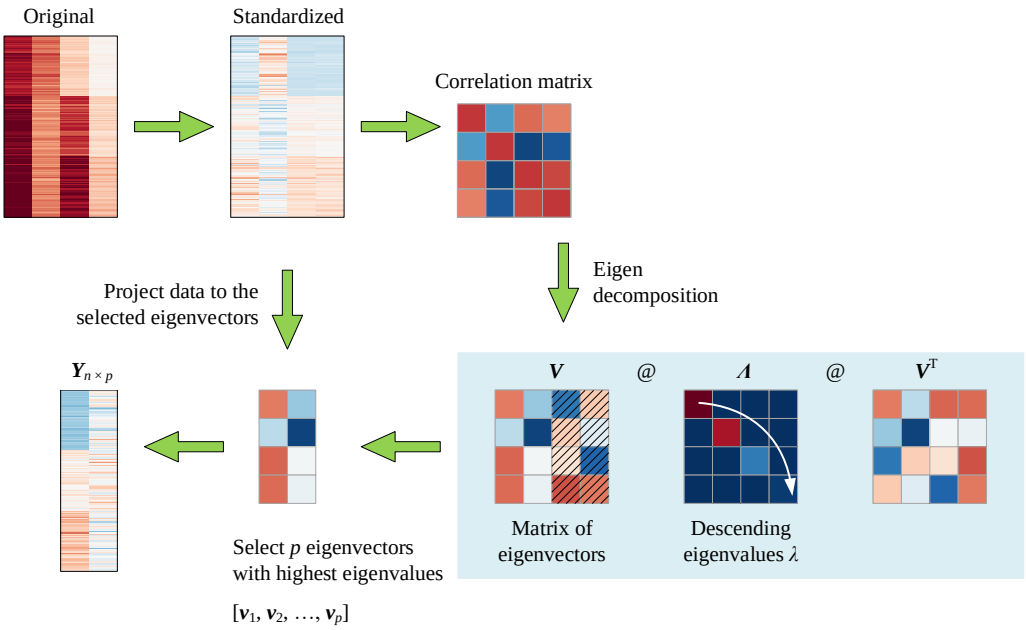


图 18. 主成分分析过程，基于特征值分解

数据标准化中包括去均值，这样新数据每个特征的均值为 0。这相当于把数据的质心移到原点。而标准化还包括用均方差完成“缩放”，以防止不同特征上方差差异过大。

原始数据各个特征方差差别不大时，不需要对 $\boldsymbol{X}$ 标准化，只需要中心化获得 $\boldsymbol{X}_c$ 即可。

作为重要的降维工具，PCA 可以显著减少数据的维数，同时保留数据中对方差贡献最大的成分。另外对于多维数据，PCA 可以作为一种数据可视化的工具。PCA 结果还可以用来构造回归模型。本系列丛书《数据科学》将深入介绍这些话题。

线性组合

如图 19 所示，主成分分析过程本质上上也是线性组合，即 $\boldsymbol{X}_{n\times D}$ ($\boldsymbol{X}_c$ 或 $\boldsymbol{Z}_x$) 线性组合组合得到 $\boldsymbol{Y}_{n\times D}$ 列向量，并选取结果中 1 ~ p 列列向量作为主成分。

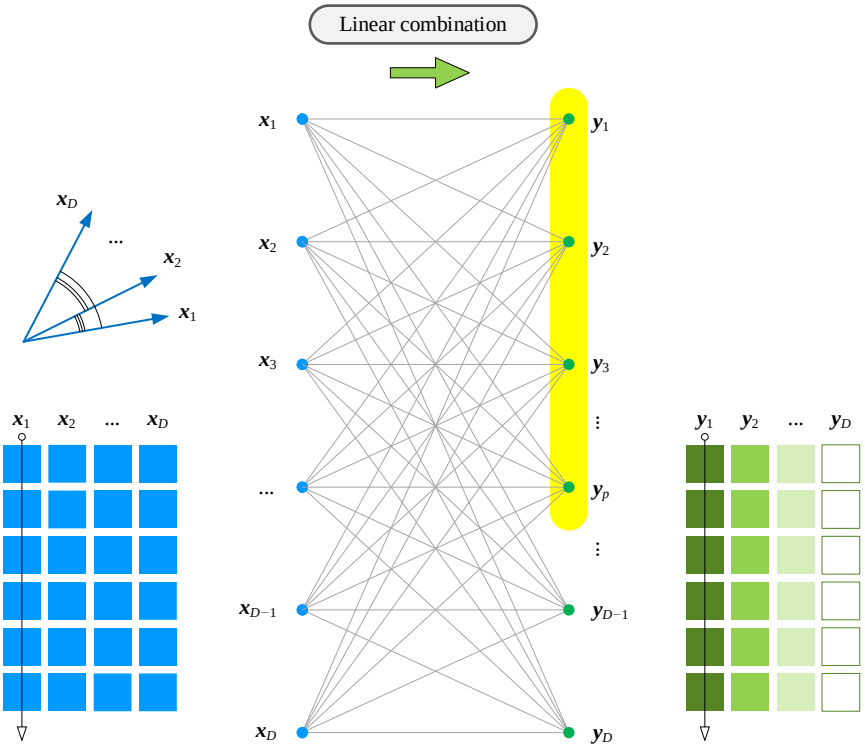


图 19. 线性组合

六条技术路线

表 1 总结了 PCA 六条主要技术路线，其中用到了奇异值分解、特征值分解两种矩阵分解工具。矩阵分解的对象对应六种不同矩阵，这六种矩阵都衍生自原始数据矩阵 $\boldsymbol{X}$。

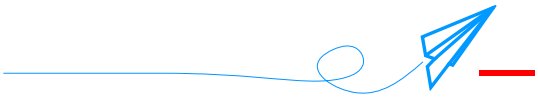
表 1 还通过颜色告诉我们，这六条技术路线本质上就是三种路线。比如，对原始数据 $\boldsymbol{X}$ 奇异值分解，等价于对其格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 特征值分解。

我们将在《统计至简》一册探讨这六条技术路线的区别和联系。

表 1. 六条 PCA 技术路线

对象	方法	结果
原始数据矩阵 $\boldsymbol{X}$	奇异值分解	$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{U_X S_X V_X}^{\mathrm{T}}$
格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$	特征值分解	$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{V_X \Lambda_X V_X}^{\mathrm{T}}$
中心化数据矩阵 $\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X})$	奇异值分解	$\boldsymbol{X}_c = \boldsymbol{U}_c \boldsymbol{S}_c \boldsymbol{V}_c^{\mathrm{T}}$

协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma} = \frac{(\boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X}))^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X}))}{n-1}$	特征值分解	$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{V}_c\boldsymbol{\Lambda}_c\boldsymbol{V}_c^{\mathrm{T}}$
标准化数据 (z 分数) $\boldsymbol{Z}_X = (\boldsymbol{X} - \mathrm{E}(\boldsymbol{X}))\boldsymbol{D}^{-1}$, $\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(\mathrm{diag}(\boldsymbol{\Sigma}))^{\frac{1}{2}}$	奇异值分解	$\boldsymbol{Z}_X = \boldsymbol{U}_Z\boldsymbol{S}_Z\boldsymbol{V}_Z^{\mathrm{T}}$
相关性系数矩阵 $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{D}^{-1}$, $\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(\mathrm{diag}(\boldsymbol{\Sigma}))^{\frac{1}{2}}$	特征值分解	$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{V}_Z\boldsymbol{\Lambda}_Z\boldsymbol{V}_Z^{\mathrm{T}}$



本章是“数据三部曲”的最后一章，也是本书的最后一章。

通过这一章内容，作者希望能给大家提供一个更高的视角，让大家看到代数、线性代数、几何、概率统计、微积分、优化问题之间的联系，也同时展望线性代数工具在数据科学、机器学习领域的应用。

作者希望大家看完本册后，能对线性代数的印象彻底改观。

向量、矩阵、矩阵乘法、矩阵分解、向量空间等等不再是不知所云的线性代数概念，它们是解决实际问题无坚不摧的刀枪剑戟。

总有一天，我们会忘记线性代数的细枝末节；但是，那一天到来时，希望我们还能记得这几句话：

有数据的地方，必有矩阵！

有矩阵的地方，更有向量！

有向量的地方，就有几何！

有几何的地方，皆有空间！

有数据的地方，定有统计！

让我们在《统计至简》一册，不见不散！

“鸢尾花书”的整体布局

数学

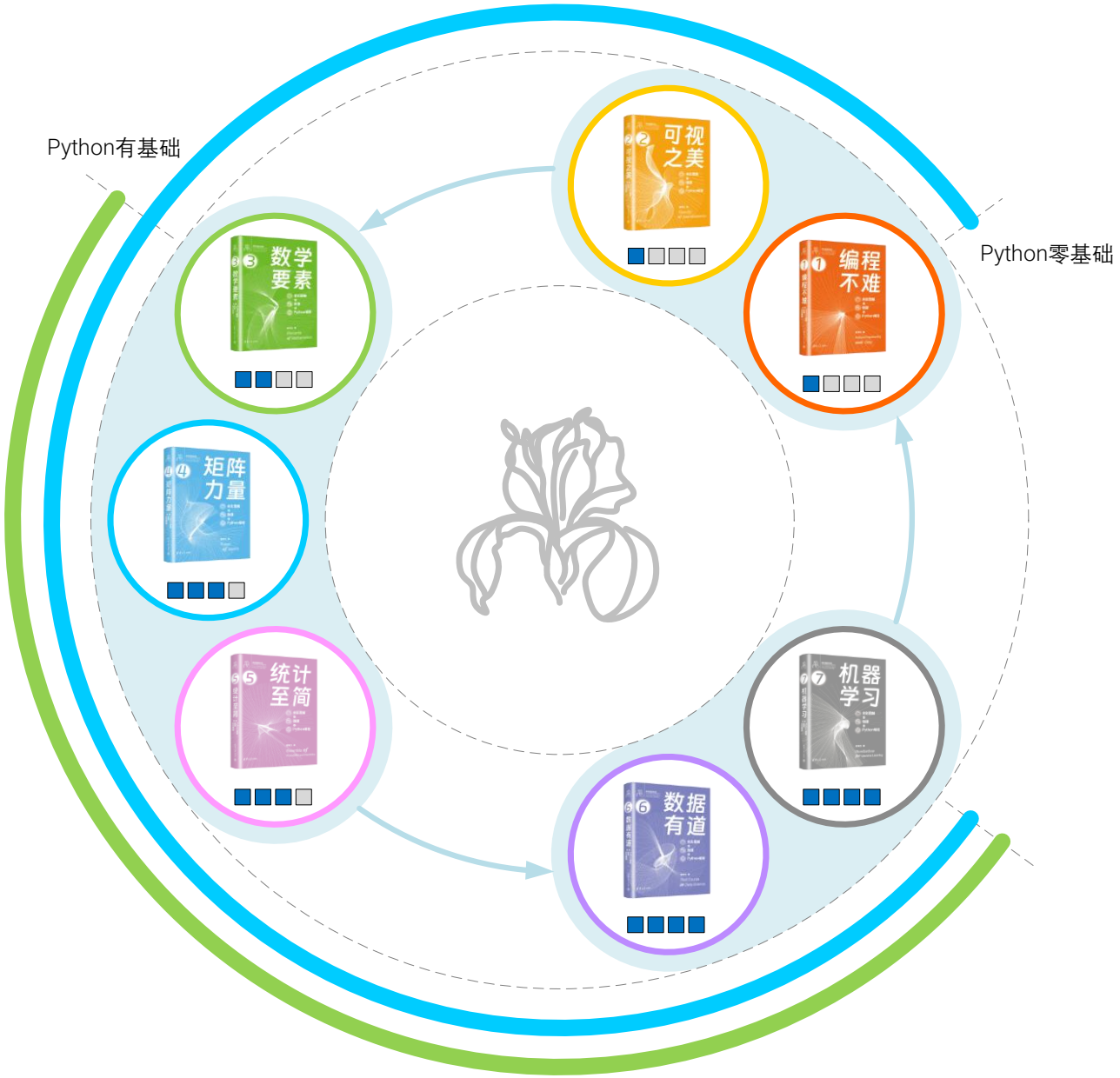
数学基础　线性代数　概率统计

Python编程　数据可视化　回归、降维　分类、聚类

工具　实践

数学 + Python编程 + 可视化 + 机器学习实践

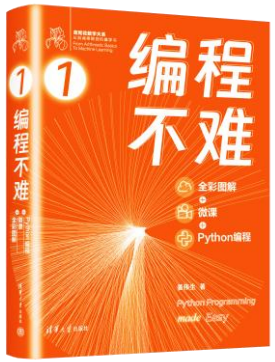
“鸢尾花书”的学习顺序



分册进度状态

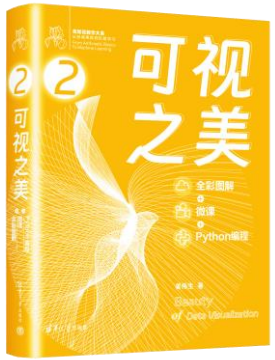
	草稿、Python	打磨、视频	清华社五审五校	上架
1 编程不难 	~50%			
2 可视之美 	~100%	2023, 10		
3 数学要素 	100%	完成	完成	完成
4 矩阵力量 	100%	完成	完成	完成
5 统计至简 	100%	2023, 07	2023, 08	2023, 09
6 数据有道 	80%	2024年初		
7 机器学习 	80%	2024年初		

Book 1《编程不难》



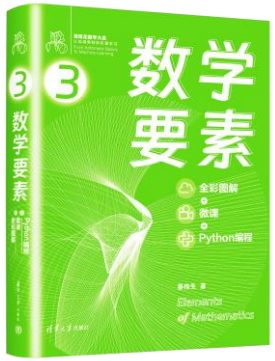
- 编程不难
  - 预备
    - 介绍
    - JupyterLab
    - Spyder
  - 语法
    - 基础
    - 数据类型
    - 运算
    - 循环
    - 函数
    - 面向对象编程
  - 绘图
    - 基础
    - 二维
    - 三维
  - 数组
    - 基础
    - 索引和切片
    - 常见运算
    - 变形
    - 数组操作
    - 线性代数
  - 符号数学
    - 代数
    - 微积分
    - 线性代数进阶
  - 数值计算
    - 代数进阶
    - 概率统计
    - 算法
  - 数据科学
    - 数据帧
    - 索引和切片
    - 常见运算
    - 规整
    - 时间序列
    - 统计分析
  - 机器学习
    - 综述
    - 回归
    - 降维
    - 分类
    - 聚类
    - 神经网络

Book 2《可视之美》



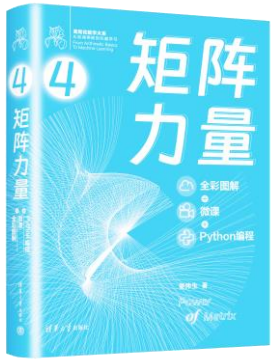
- 《可视之美》
  - 图说
    - 数学 + 艺术
    - 说图
  - 美化
    - 布局
    - 装饰
    - 风格
    - 媒介
  - 彩色
    - 色彩
    - 色彩空间
    - 色谱
  - 二维
    - 平面散点
    - 平面线图
    - 平面填充
    - 极坐标
    - 各种网格
    - 平面等高线
    - 热图
    - 非矢量图片
  - 三维
    - 三维散点
    - 三维线图
    - 网格曲面
    - 三维等高线
    - 箭头图
    - 三角网格
  - 数学之美
    - 平面几何
    - 立体几何
    - 距离
    - 平面几何变换
    - 立体几何变换
    - 贝塞尔曲线
    - 函数
    - 二次型
    - 复数
    - 分形
    - 网络图
    - 数据
    - 模式 + 随机

Book 3《数学要素》



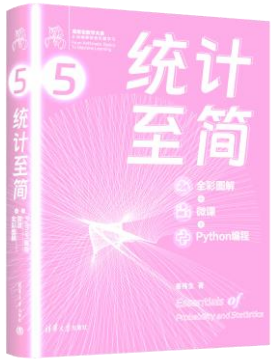
- 数学要素
  - 基础
    - 算数
    - 几何
    - 代数
  - 坐标系
    - 二维
    - 三维
  - 解析几何
    - 距离
    - 圆锥曲线
  - 函数
    - 可视化
    - 代数函数
    - 超越函数
    - 二元函数
    - 数列
  - 微积分
    - 导数
    - 偏导数
    - 微分
    - 积分
    - 优化入门
  - 概率统计
    - 概率
    - 统计
  - 线性代数
    - 向量
    - 鸡兔同笼三部曲

Book 4《矩阵力量》



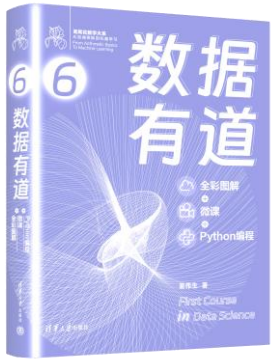
- 矩阵力量
  - 向量
    - 定义
    - 运算
    - 范数
  - 矩阵
    - 定义
    - 运算
    - 分块矩阵
  - 向量空间
    - 定义
    - 几何变换
    - 投影
    - 数据投影
  - 矩阵分解
    - 各种分解
    - Cholesky分解
    - 特征值分解
    - 奇异值分解
  - 微积分
    - 多元微分
    - 拉格朗日乘子法
  - 空间几何
    - 直线到超平面
    - 曲线
    - 曲面
  - 数据
    - 多元统计入门
    - 数据空间
    - 数据分解
    - 数据应用

Book 5《统计至简》



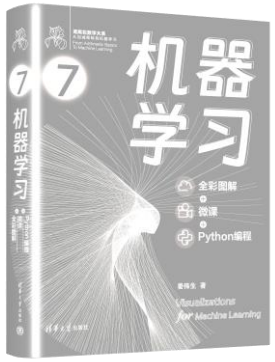
- 统计至简
  - 统计
    - 概率统计全景
    - 统计描述
  - 概率
    - 古典概率模型
    - 离散随机变量
    - 离散分布
    - 连续随机变量
    - 连续分布
    - 条件概率
  - 高斯
    - 一元
    - 二元
    - 多元
    - 条件
    - 协方差矩阵
  - 随机
    - 随机变量的函数
    - 蒙特卡洛模拟
  - 频率派
    - 频率统计推断
    - 概率密度估计
  - 贝叶斯派
    - 贝叶斯分类
    - 贝叶斯统计推断
    - 马尔科夫链
  - 椭圆
    - 马氏距离
    - 线性回归
    - 主成分分析

Book 6《数据有道》



- 数据有道
  - 数据处理
    - 缺失值
    - 离群值
    - 数据转换
    - 插值
  - 时间数据
    - 时间数据
    - 移动窗口
    - 随机过程入门
  - 回归
    - 回归分析
    - 多元线性回归
    - 正则化
    - 贝叶斯回归
    - 非线性回归
  - 降维
    - 主成分分析
    - 正交回归
    - 主元回归
    - 典型相关分析

Book 7《机器学习》


7
机器学习
全彩图解
微课
Python编程
Visualizations for Machine Learning


机器学习
有监督学习
k近邻
距离
朴素贝叶斯
高斯朴素贝叶斯
高斯判别分析
支持向量机
核技巧
决策树
高斯过程
回归
无监督学习
k均值聚类
高斯混合模型
最大期望算法
层次聚类
密度聚类
谱聚类
降维

开源资源

PDF书稿、代码：https://github.com/Visualize-ML

微课视频：https://space.bilibili.com/513194466

信息发布：https://www.zhihu.com/people/jamestong-xue

专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com