

29

Rayleigh Quotient

瑞利商

用几何视角呈现一个“复杂”的线性代数概念



天地间唯一的英雄主义——参破尘世真相，依旧热爱生活。

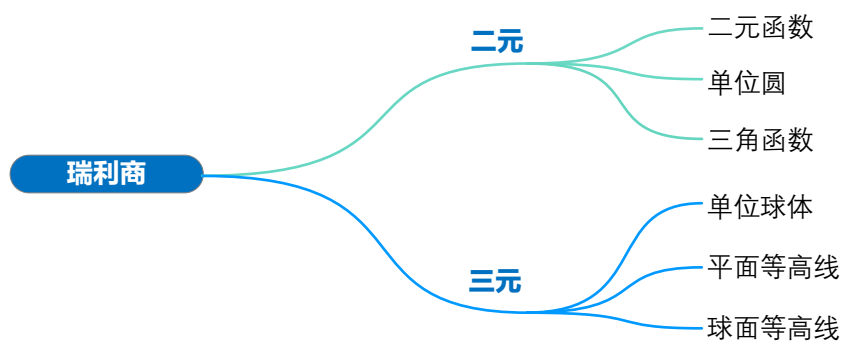
There is only one heroism in the world: to see the world as it is, and to love it.

—— 罗曼·罗兰 (Romain Rolland) | 法国作家、诺贝尔文学奖得主 | 1866 ~ 1944



```

< numpy.linalg.eig() 特征值分解
< sympy.abc import x 定义符号变量 x
< sympy.cos() 符号运算中余弦
< sympy.exp() 符号自然指数
< sympy.lambdify() 将符号表达式转化为函数
< sympy.simplify() 简化代数式
< sympy.sin() 符号运算中正弦
< sympy.symbols() 定义符号变量
  
```



本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

29.1 什么是瑞利商？

在线性代数众多工具中，**瑞利商** (Rayleigh quotient) 通常是个恐怖的存在。一方面，瑞利商的形式非常不友好（如图 1）；另外一方面，瑞利商又常常和特征值分解、优化问题等数学概念联系在一起，这给瑞利商又增加了一层神秘面纱。

➡ 《矩阵力量》第 14 章将专门讲解瑞利商。

本章也是用几何视角给大家提供“观察”瑞利商的各种可视化方案，为大家揭秘这个看似复杂的数学概念背后简单的几何直觉！

假设 \mathbf{x} 为一个 3 行、1 列的列向量，即 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$ ；矩阵 \mathbf{Q} 为 3×3 的**对称矩阵** (symmetric

matrix)。如图 1 给出的例子所示，分子上 $\mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x}$ 的结果是一个**标量** (scalar)；而分母上 $\mathbf{x}^T \mathbf{x}$ 也是一个标量。这样 R 也是一个标量。

举一个简单例子，如果 $\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 2 & \\ & & 3 \end{bmatrix}$ ，分子可以整理成 $x_1^2 + 2x_2^2 + 3x_3^2$ ，而分母则为 $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$ ；这样瑞利商则为分式 $R = \frac{x_1^2 + 2x_2^2 + 3x_3^2}{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$ 。

显然图 1 中分母不能为 0，也就是说 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \neq \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{0}$ 。也就是说 x_1, x_2, x_3 不能同时为 0。这限制

条件很重要很重要。

下面，我们就先从二元的情况开始用几何视角深入理解瑞利商。

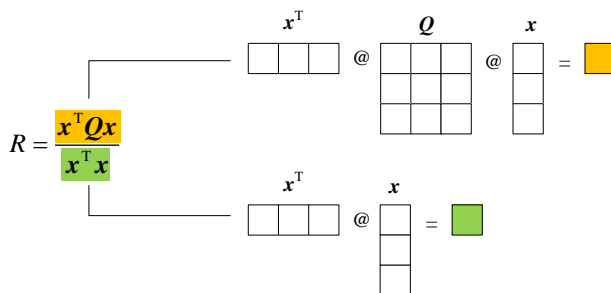


图 1. 瑞利商， \mathbf{x} 为一个 3 行、1 列的列向量

29.2 二元瑞利商

显然，我们可以把瑞利商看成是一个函数。如果 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$ ，对于给定 2×2 对称矩阵 $\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} a & c \\ c & b \end{bmatrix}$ ，瑞利商可以看做是一个二元函数 $f(x_1, x_2) = \frac{ax_1^2 + 2cx_1x_2 + bx_2^2}{x_1^2 + x_2^2}$ ！

如图 14 和图 15 所示，当矩阵 \mathbf{Q} 为不同值时，我们可以看到瑞利商二元函数 $f(x_1, x_2)$ 的平面等高线和网格曲面。

细心的读者可能已经发现，图 14 和图 15 中的矩阵 \mathbf{Q} 实际上展现的是不同的正定性。这些图的颜色映射对应的取值范围完全相同，都是 $[-2, 2]$ 。利用统一的颜色映射，我们可以看到不同矩阵 \mathbf{Q} 对应的二元函数 $f(x_1, x_2)$ 的最大、最小值变化。

观察图 14 和图 15 中 8 幅子图，我们似乎发现了正定性和瑞利商之间的关系。举个例子，如图 14 (a) 所示，对于正定矩阵，二元函数 $f(x_1, x_2)$ 的取值都是正值。对于半正定矩阵，二元函数 $f(x_1, x_2)$ 的取值大于等于 0。

图 2 所示为用 Streamlit 搭建的展示二元瑞利商的 App。

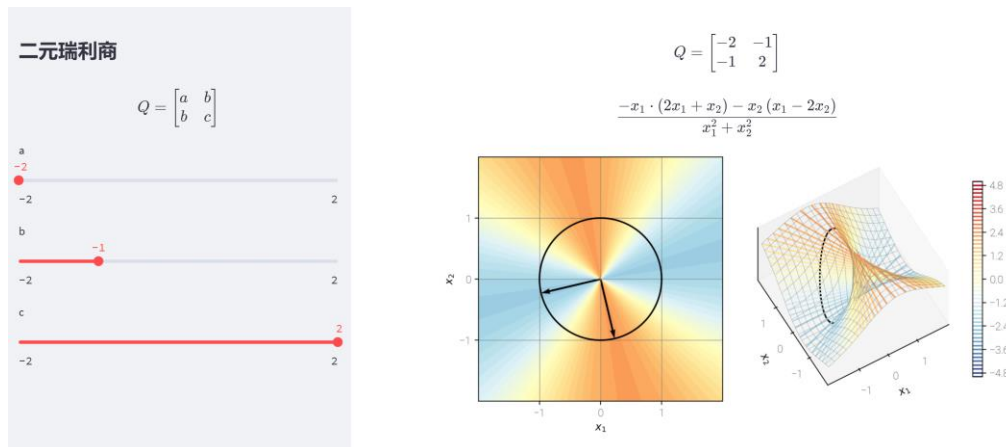


图 2. 展示二元瑞利商的 App, Streamlit 搭建 | `Streamlit_Circle_Rayleigh_Quotient.py`

Bk_2_Ch29_01.ipynb 绘制，大家在这个文件中可以看到二元函数 $f(x_1, x_2)$ 最大最小值直接对应矩阵 \mathbf{Q} 的**特征值** (eigenvalue)。而最大值和最小值的位置又和**特征向量** (eigen vector) 直接相关。这些观察背后的数学原理要留到鸢尾花书《矩阵力量》这本书来讲解了。

29.3 在单位圆上看二元瑞利商

图 14 和图 15 中 8 幅子图给我们带来的惊喜还不止于此。

观察这 8 幅平面等高线，我们发现它们都呈现放射状。射线的中心位于原点。而二元函数 $f(x_1, x_2)$ “似乎”随着射线的角度变化。

为了印证这种猜测，我们在图 14 和图 15 所有子图中都绘制了单位圆。单位圆上的点满足 $x_1^2 + x_2^2 = 1$ 。由于我们猜测二元函数 $f(x_1, x_2)$ 随着射线的角度变化，我们仅仅需要分析 $x_1^2 + x_2^2 = 1$ 上所有点的瑞利商。有了 $x_1^2 + x_2^2 = 1$ 这个约束条件，我们就可以把瑞利商简化为 $f(x_1, x_2) = ax_1^2 + 2cx_1x_2 + bx_2^2$ ！

更有趣的是 $x_1^2 + x_2^2 = 1$ 上的所有点都可以用极坐标 $\begin{cases} x_1 = \cos(\theta) \\ x_2 = \sin(\theta) \end{cases}$ 来表示！

也就是说，我们可以把 $f(x_1, x_2) = ax_1^2 + 2cx_1x_2 + bx_2^2$ 写成一个关于角度 θ 的一元函数！

这想想都让人兴奋！因为我们又多了一个视角来展示、分析瑞利商。

图 16 和图 17 印证了我们的猜测！

而更有趣的是，Bk_2_Ch29_02.ipynb 还利用 sympy 计算得到每一幅子图中的关于角度 θ 的一元函数。这样我们便直接建立了二元瑞利商和三角函数的关系。强烈建议大家把 Bk_2_Ch29_02.ipynb 中计算得到的特征值写在图 16 和图 17 中三角函数曲线的子图上。

请大家在这些三角函数图像找到最大、最小值的角度，并比较图 14 和图 15 向量的角度，看看是否一致。

上述案例中还存在“旋转”这种几何操作。比较图 14 (a) 和 (b)，大家可以发现，这两个案例仅仅在角度上不同。比较图 16 (a) 和 (b) 中的三角函数曲线，我们更容易看到角度关系。而特征值分解可以帮我们找到旋转角度。也请大家比较，图 14 (c) 和 (d)，以及比较图 16 (c) 和 (d)。

而比较图 15 (c) 和 (d)，我们发现两个案例存在“旋转 + 缩放”复合几何操作。在图 17 (c) 和 (d) 上，这种几何操作可以更容易发现。



类似图 2，请大家将 Bk_2_Ch29_02.ipynb 转化为一个 Streamlit App。

29.4 在单位球上看三元瑞利商

有了上一节的经验，我们便有了一个展示三元瑞利商的全新可视化思路——将三元瑞利商投射到 $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$ 这个单位球面上！

这就是图 18！

打个比方，图 18 中单位球可以看做是一个球形“幕布”，而瑞利商就是投影在幕布上的影像。

在 $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$ 这个单位球体上，红色代表瑞利商大，而蓝色代表瑞利商小。



请大家想象一下，二元瑞利商是不是就是图 18 单位球上的套上一个单位圆的“圆环”？请大家试着用 Python 完成这个可视化方案。

BK_2_Ch29_03.ipynb 绘制图 18 所有子图，下面选取其中几段代码聊聊。

图 3 所示为如何计算单位球面 $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$ 上单一点，列向量 \mathbf{x} 的瑞利商。而图 3 整个球面上所有的浅蓝色点是通过球坐标获得的。

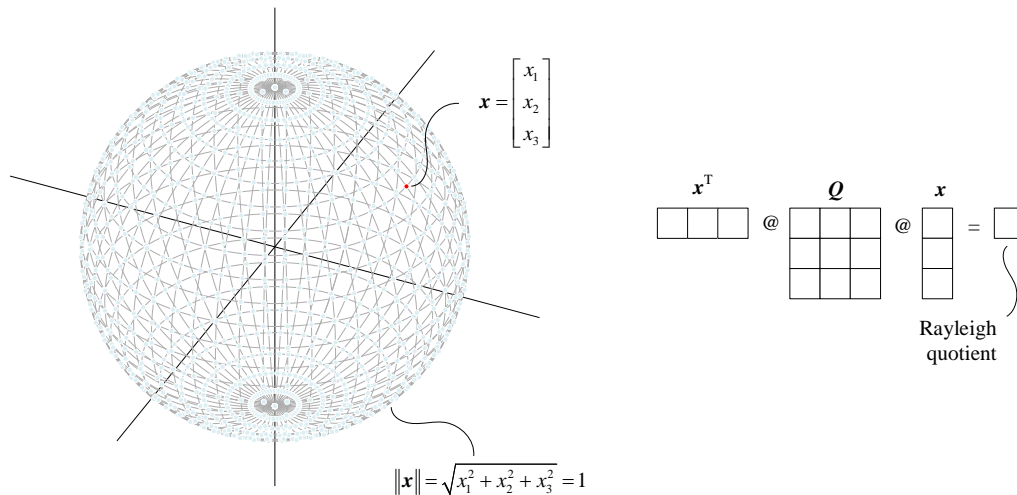


图 3. 计算单一坐标点的瑞利商

代码 1 则计算单位球面上一组点的瑞利商，下面聊聊其中语句。

- a 用 `numpy.column_stack()` 构造坐标点矩阵。注意，每一行代表单位球面上特定点。
- b 定义矩阵 Q 。对于瑞利商，矩阵 Q 为对称矩阵，本章后续会介绍其他 Q 对应的瑞利商。
- c 按照图 4 这个技术路线计算瑞利商。在这个向量化运算中，我们先用矩阵乘法得到一个大方阵；然后，再提取其中主对角线元素，这些元素就是瑞利商。图 5 告诉我们为什么我们只保留主对角线元素。

大家可能已经发现，这个计算瑞利商的过程和本书前文介绍的计算马氏距离的技术路径几乎完全一致！

- d 将一维数组转化为和 X 形状一致的二维数组，以便后续可视化。

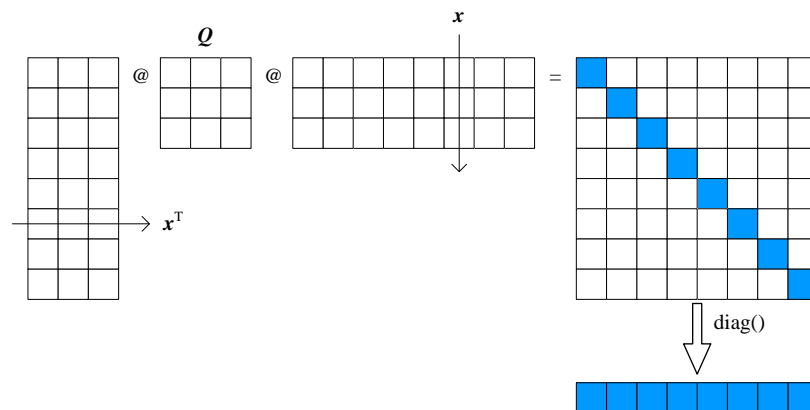


图 4. 计算一组坐标点的瑞利商

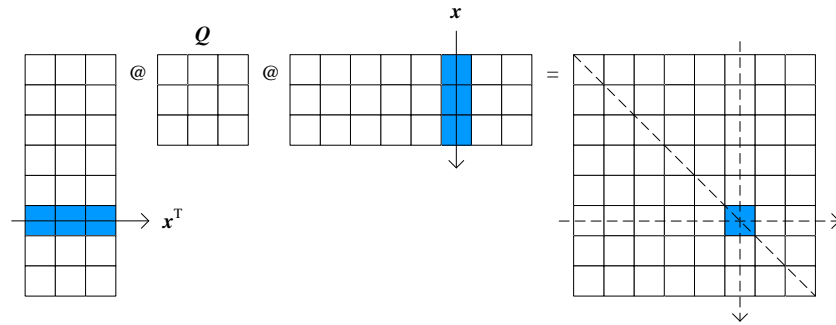


图 5. 为何只保留主对角线元素

```

# 每一行代表一个三维直角坐标系坐标点
# 所有坐标点都在单位球面上
a Points = np.column_stack([X.ravel(), Y.ravel(), Z.ravel()])

# 定义矩阵Q
b Q = np.array([[1, 0.5, 1],
                [0.5, 2, -0.2],
                [1, -0.2, 1]])

# 计算 x^T @ Q @ x
c Rayleigh_Q = np.diag(Points @ Q @ Points.T)
#
d Rayleigh_Q_ = np.reshape(Rayleigh_Q, X.shape)

```

代码 1. 计算瑞利商 | BK_2_Ch29_03.ipynb

图 6 总结了代码 1 的作用，我们计算了单位球面上一组坐标的瑞利商。这些瑞利商用来完成颜色映射，也就是点亮了小彩灯。图 18 所示为利用 `plot_surface()` 可视化瑞利商，请大家在配套代码中自行学习。

BK_2_Ch29_03.ipynb 还展示如何用 Plotly 可视化瑞利商，如图 7 所示。图 8 所示为用 Streamlit 搭建的展示三元瑞利商的 App。

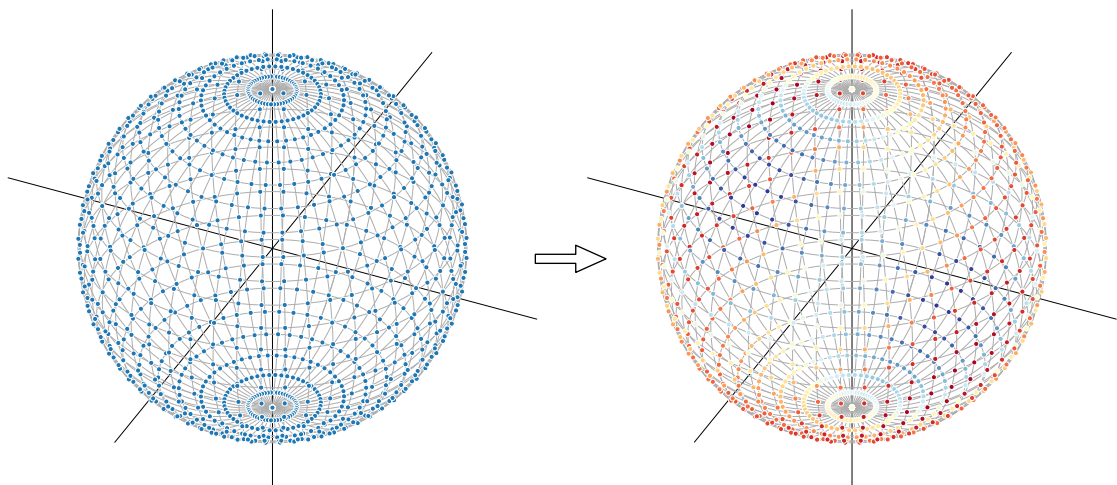
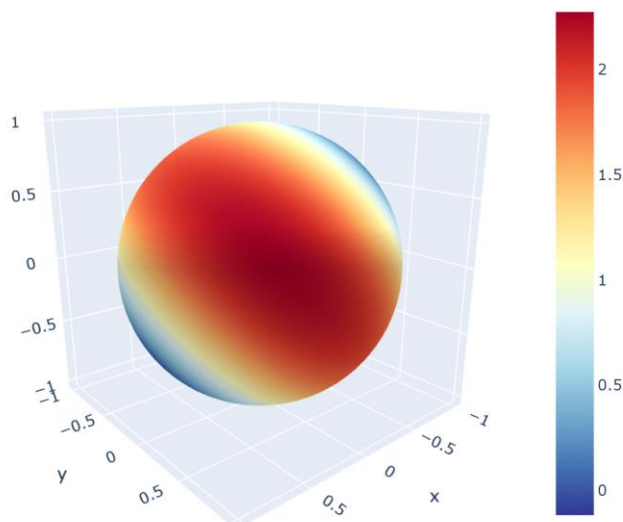

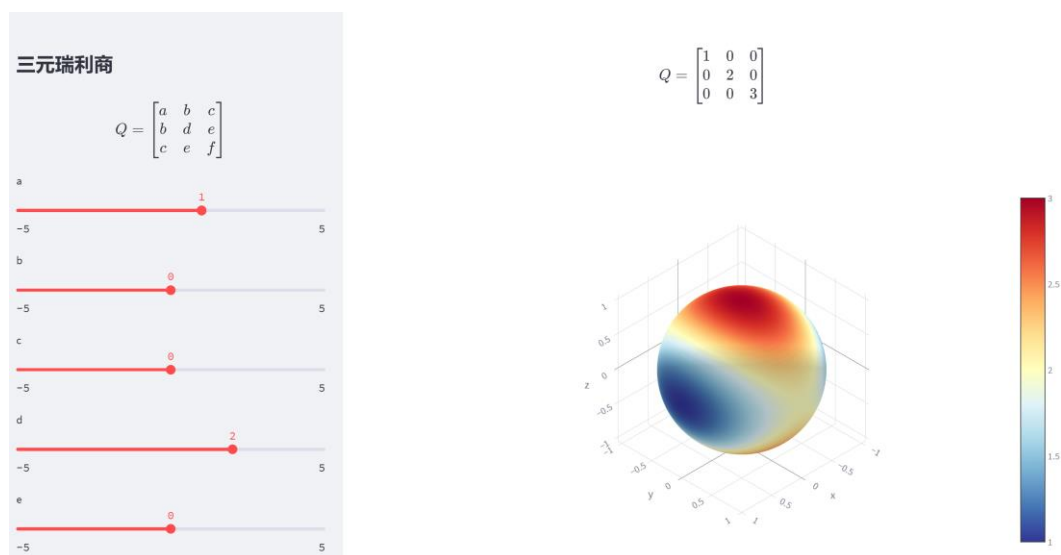


图 6. 用瑞利商点亮每一盏彩灯 |  BK_2_Ch29_03.ipynb图 7. 用 Plotly 可视化瑞利商 |  BK_2_Ch29_03.ipynb图 8. 展示三元瑞利商的 App, Streamlit 搭建 |  Streamlit_Sphere_Rayleigh_Quotient.py

29.5 平面上看三元瑞利商

但是，我们并不满足上述可视化方案。通过本书前文学习，我们知道球坐标中的 θ 、 φ 数据可以织成网格。由于球面半径为定值，这组网格也可以用来定位球面坐标。

如图 9 所示，我们在 θ - φ 平面上用散点展示瑞利商！

这类似于图 10 所示的圆柱形地图投影法。

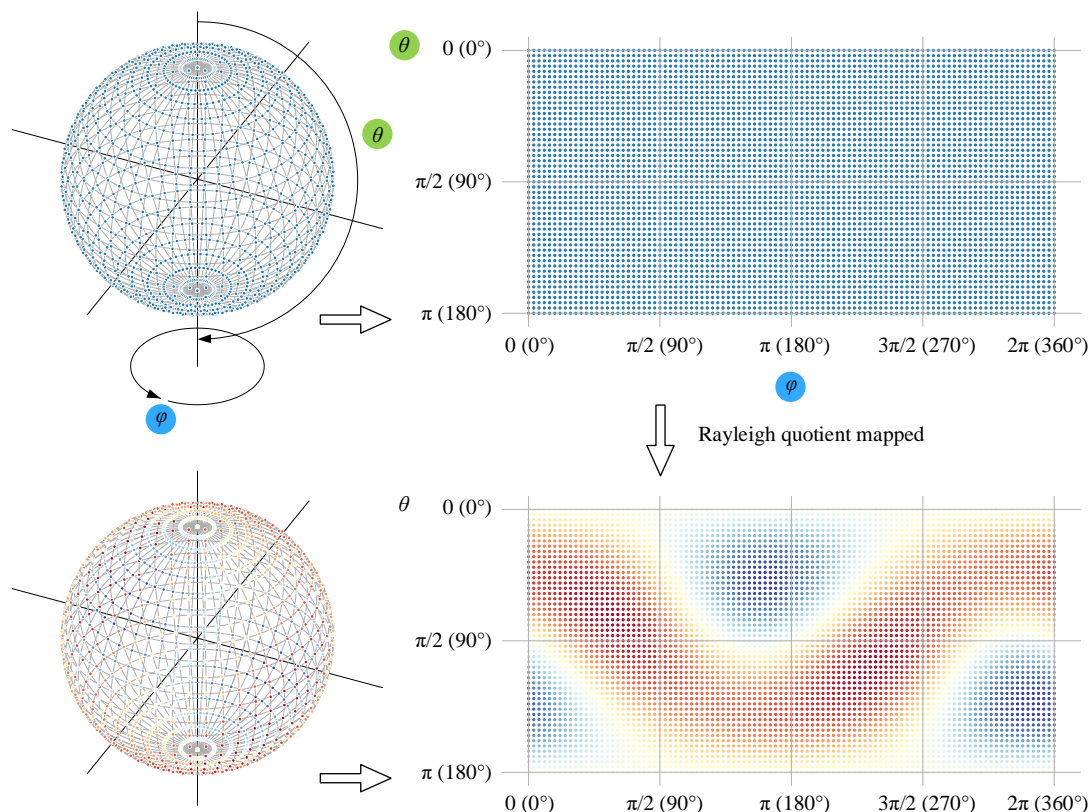
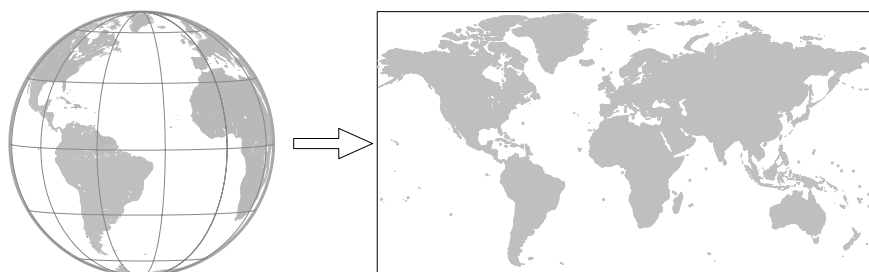
图 9. θ 、 ϕ 网格数据，将球体展开成平面

图 10. 圆柱形地图投影法

这实际上相当于降维，我们把球面上的数据投影到了平面上。这样，我们就可以用本书前文介绍的各种平面可视化方案展示瑞利商，具体如图 11 所示。

在图 11 上，我们清楚地看到了瑞利商的渐变过程，并可以很容易确定瑞利商最大值、最小值的具体位置。

图 12 还用三维等高线 + 网格曲面展示三元瑞利商。观察这幅图大家也可以找到瑞利商最大值、最小值的大概位置。

结合二维和三维可视化方案，我们可以呈现更多瑞利商，如图 19、图 20 所示。

? 大家想象一下图 19、图 20 这些颜色各异的圆球是不是可以看做是本书第 21 章各种二次型“方木块”打磨成的“念珠”？

观察图 11、图 18，大家可能发现单位球面上的颜色也存在某种等高线，请大家思考我们该怎么绘制这种等高线？本章下一节会给出答案。

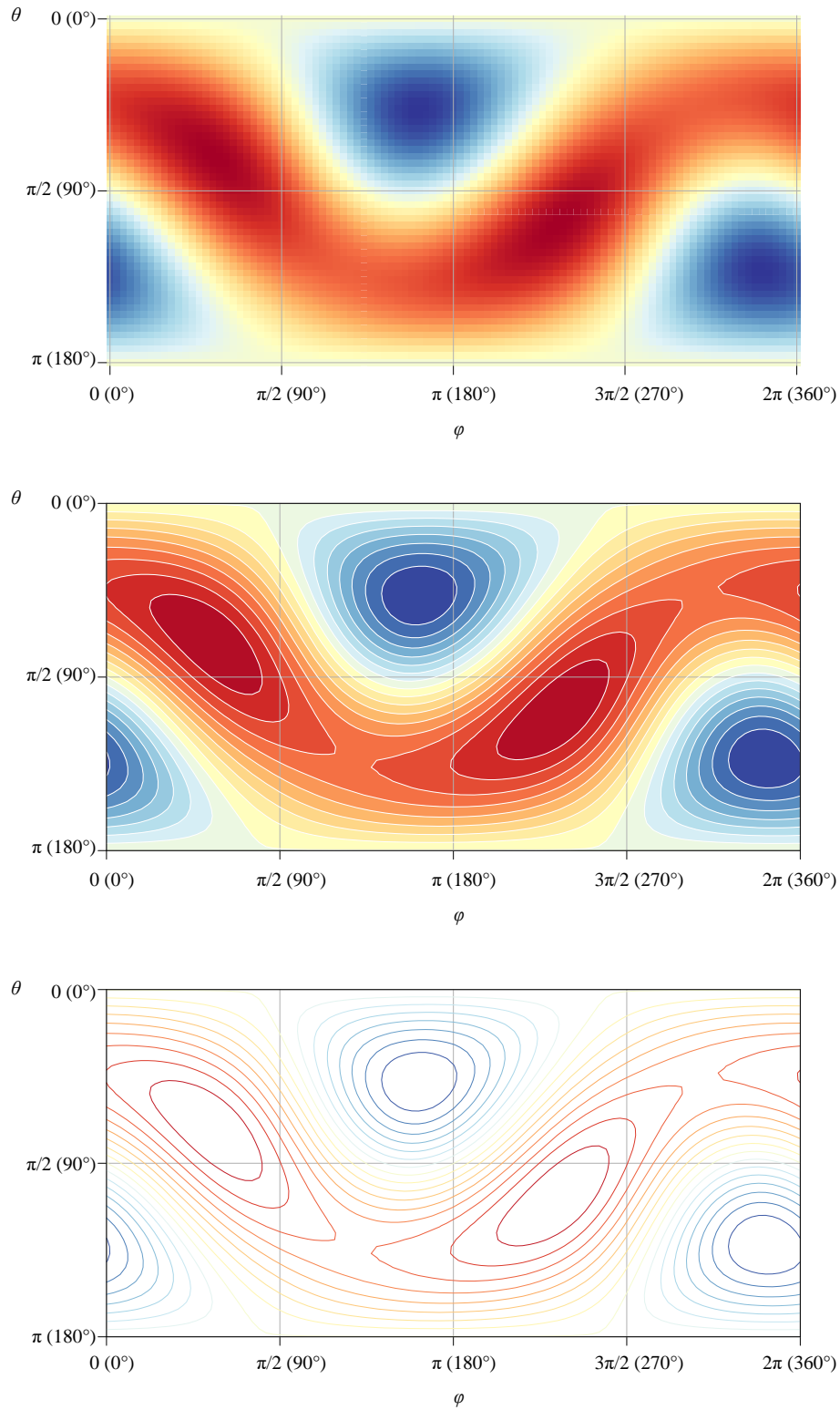



图 11. 用平面可视化方案展示瑞利商 |  BK_2_Ch20_3.ipynb

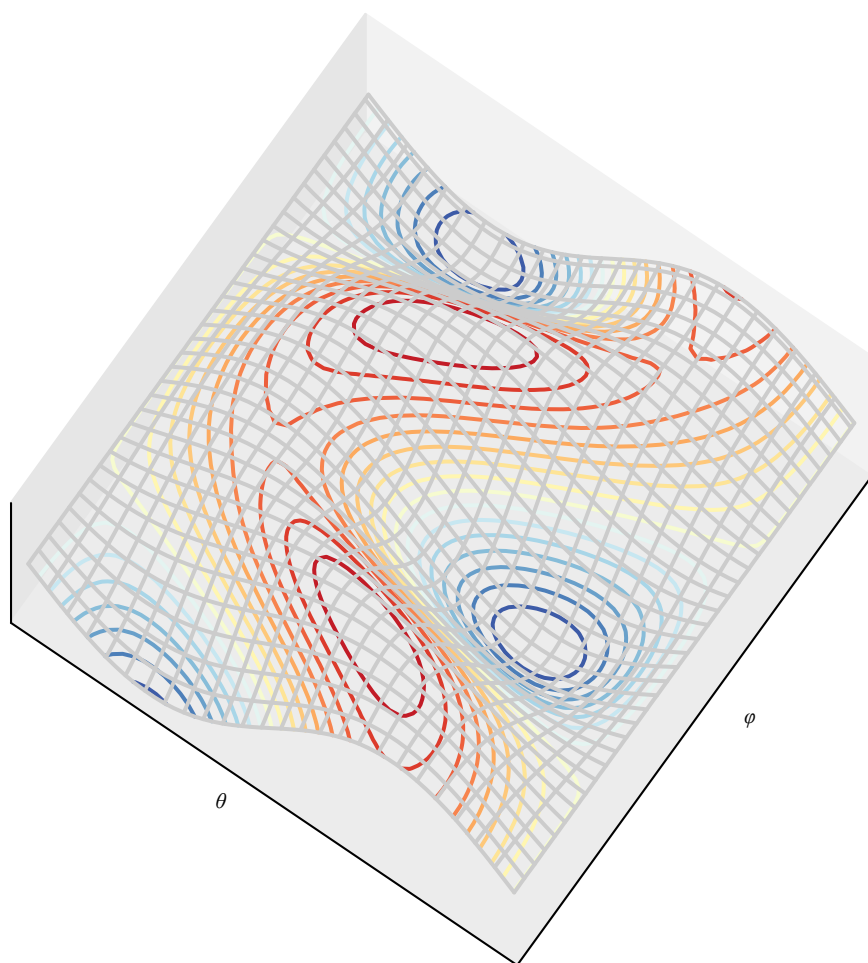

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

图 12. 用三维等高线展示瑞利商 |  BK_2_Ch20_3.ipynb

29.6 球面等高线展示三元瑞利商

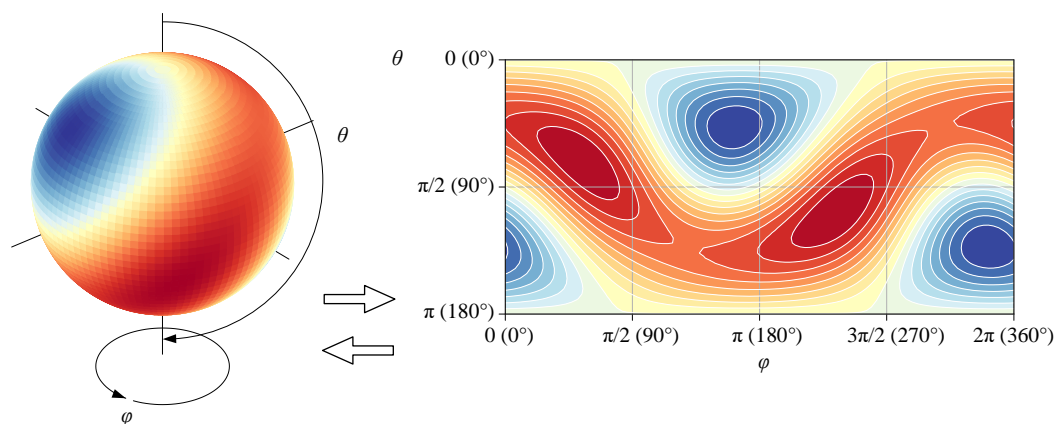
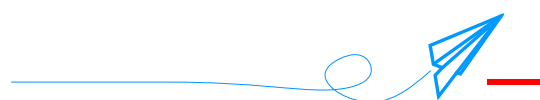
上一节在介绍利用网格曲面可视化瑞利商时，问过一个问题，我们能否在单位球球面上用等高线的形式展示瑞利商。本书前文讲解的提取特定高度等高线坐标可以帮助我们完成这个可视化任务。

如图 13 所示，我们先在 φ - θ 平面上提取瑞利商等高线坐标，然后再反向映射获得对应球面坐标 (x, y, z) 。

Bk_2_Ch29_05.ipynb 绘制图 21，请大家自行学习代码文件。



请大家思考如何把 φ - θ 平面上瑞利商等高线坐标投影到圆柱面上？

图 13. 提取 φ - θ 平面上瑞利商等高线坐标

本章讲解了线性代数中另一个“难啃”的数学概念——瑞利商。

我们从二元瑞利商出发，用二元函数的可视化方案找到瑞利商的规律。并顺藤摸瓜，用单位圆和极坐标来展示二元瑞利商。

然后，我们进一步升维，在单位球体上呈现三元瑞利商；然后根据球坐标，用平面等高线来啊展示三元瑞利商。最后，我们又把三元瑞利商的等高线反向投影到单位球面上。

本章用 Streamlit 创建了两个 App，请大家把其他展示瑞利商的可视化方案也做成瑞利商。

当然，为了掌握瑞利商，我们还需要进一步学习鸢尾花书《矩阵力量》相关内容；但是，相信本章的各种分析过程和可视化方案已经把瑞利商这个概念揉碎，这些几何直觉已经铺平了大家学习瑞利商的道路。

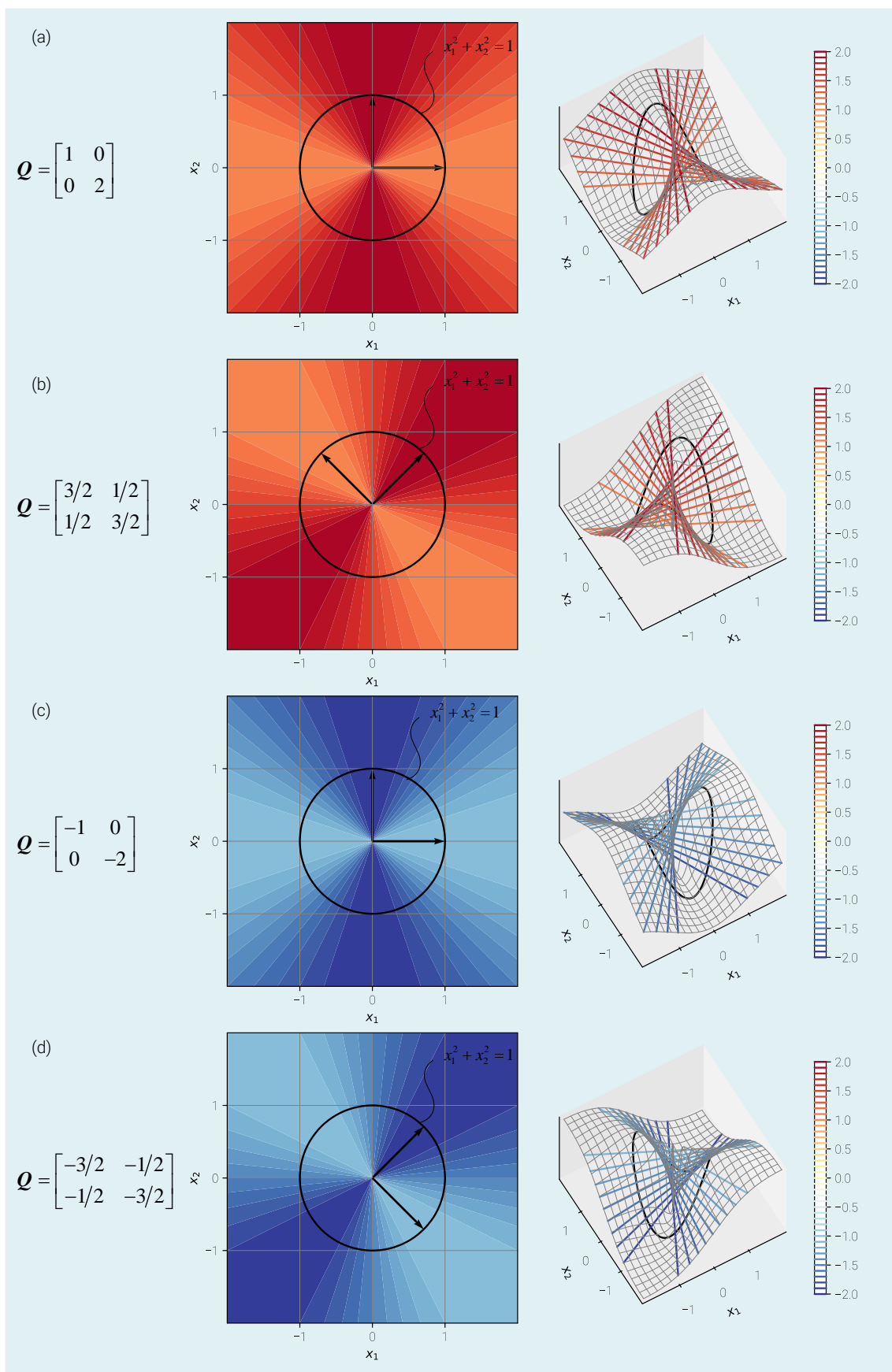


图 14. 二元瑞利商, 第 1 组 | BK_2_Ch29_01.ipynb

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: <https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

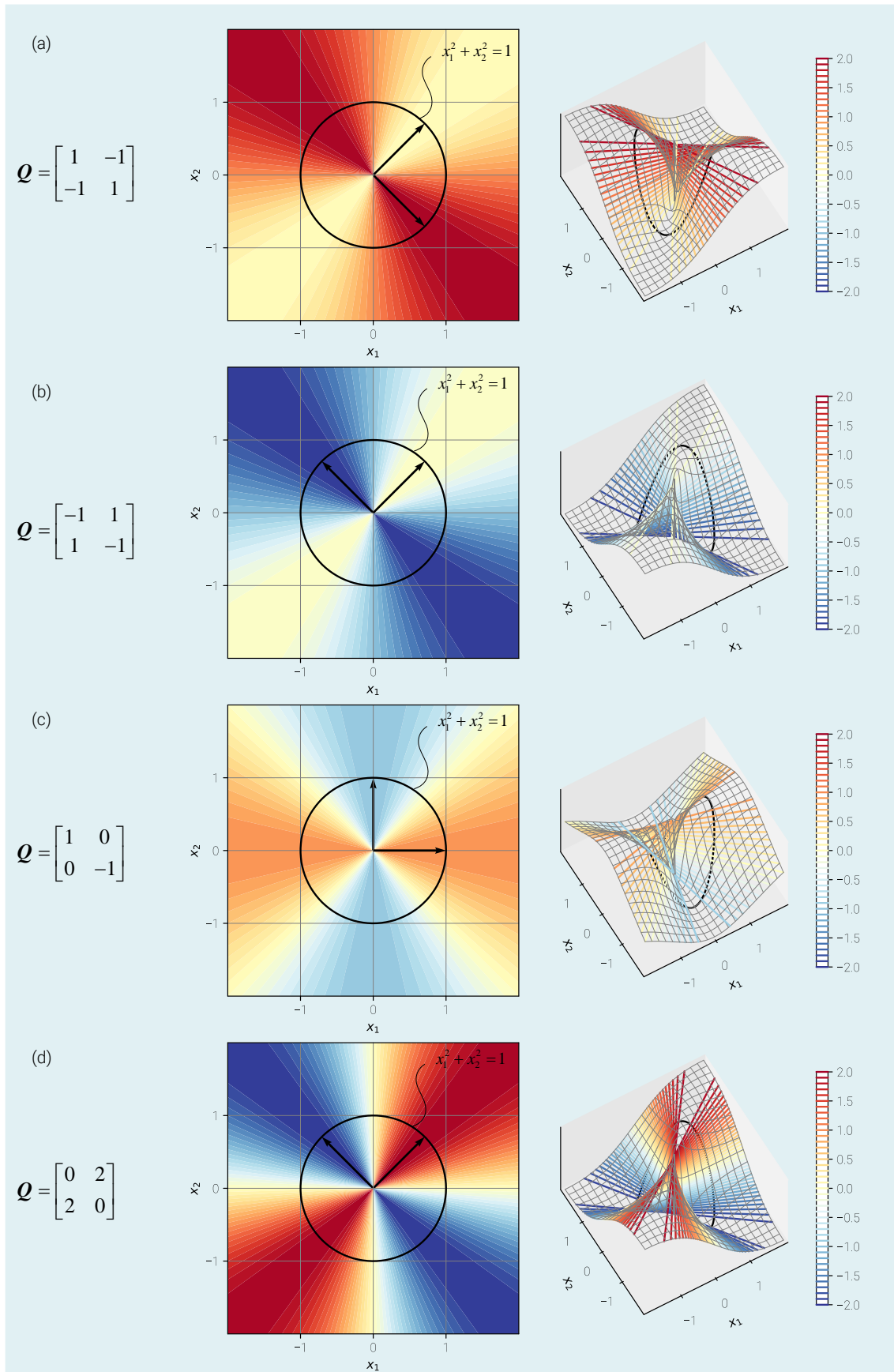


图 15. 二元瑞利商, 第 2 组 | BK_2_Ch29_01.ipynb

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: <https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

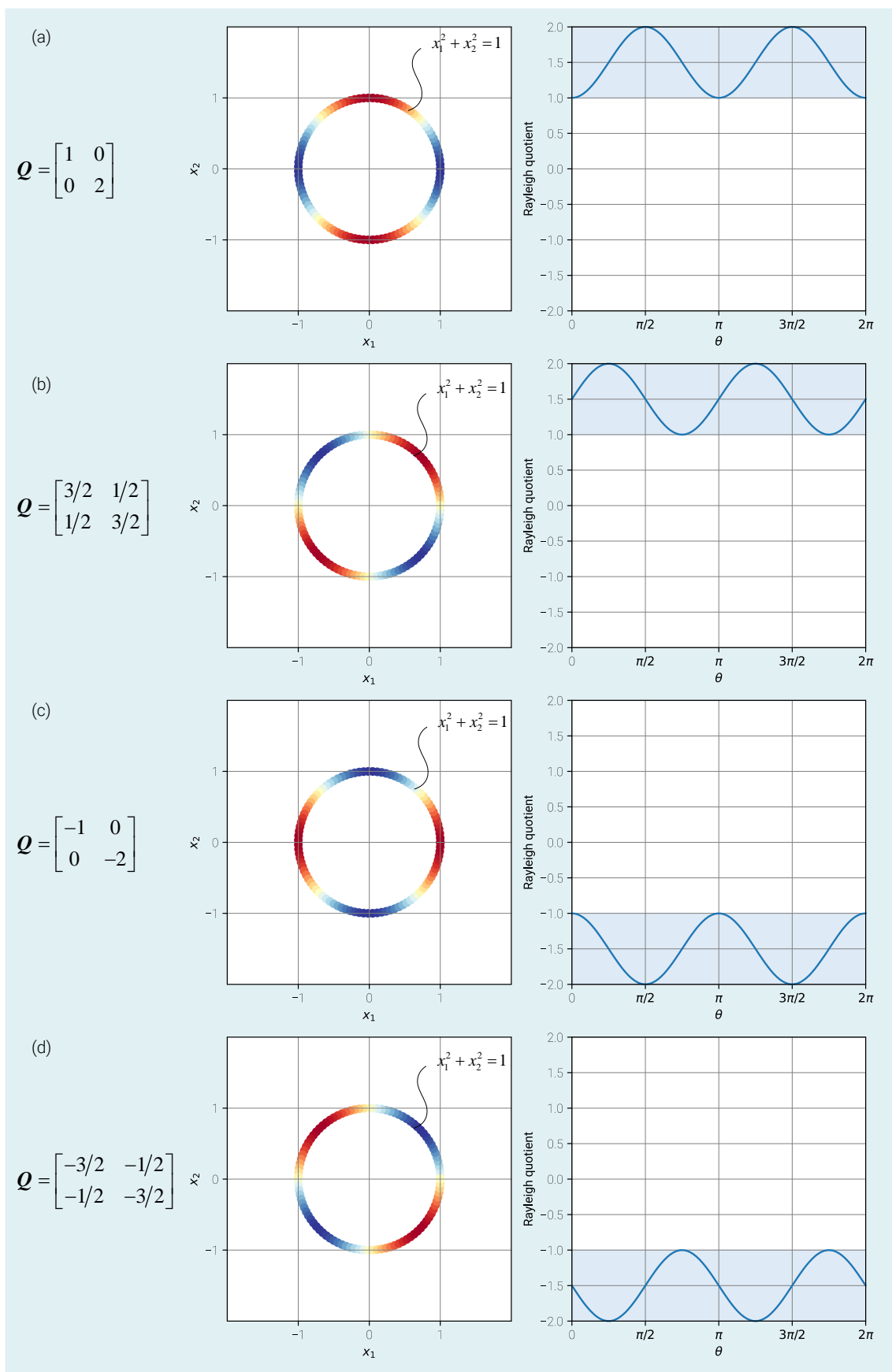


图 16. 单位圆上看二元瑞利商, 第 1 组 | BK_2_Ch29_02.ipynb

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: <https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

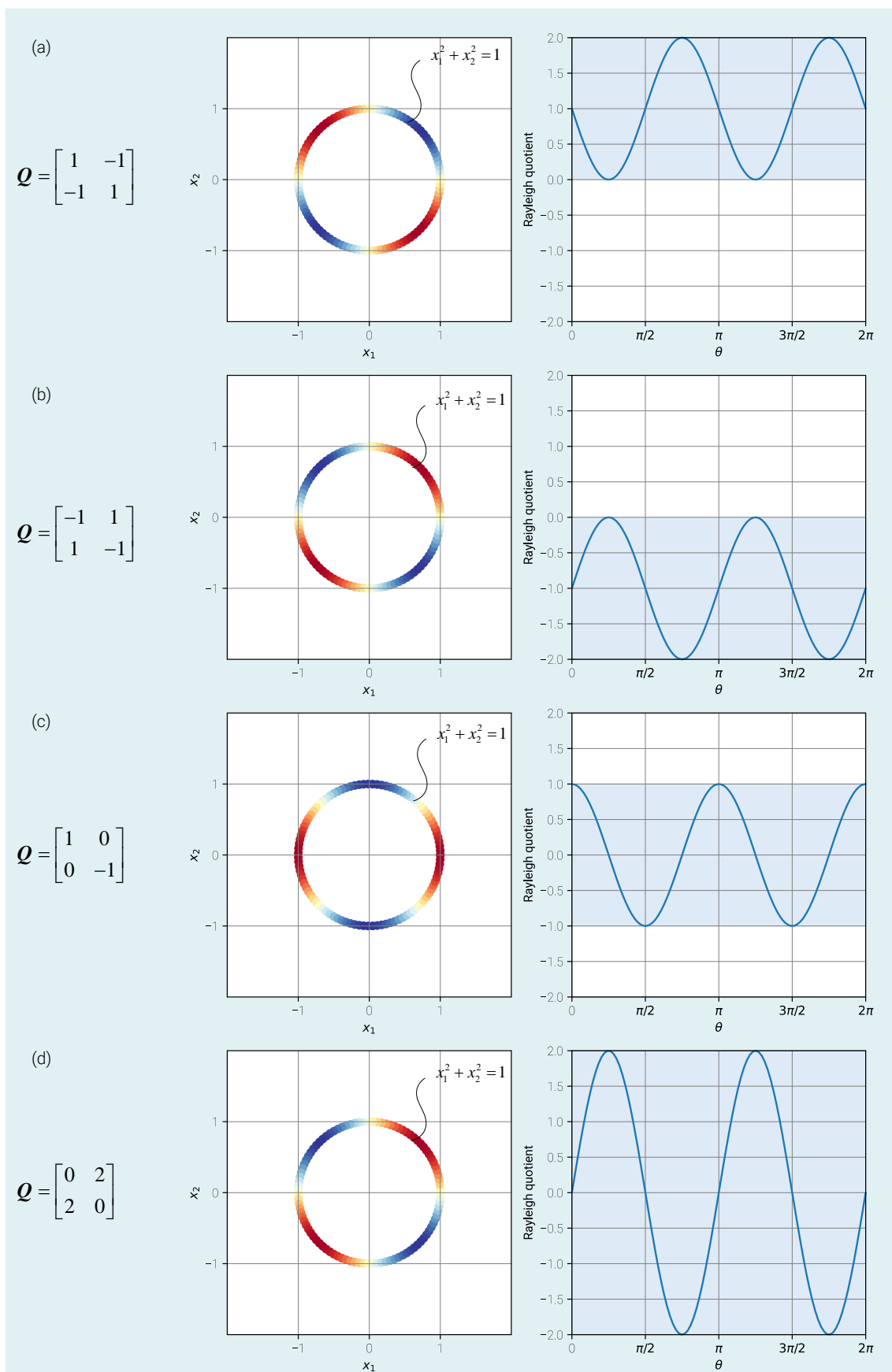


图 17. 单位圆上看二元瑞利商, 第 2 组 | BK_2_Ch29_02.ipynb

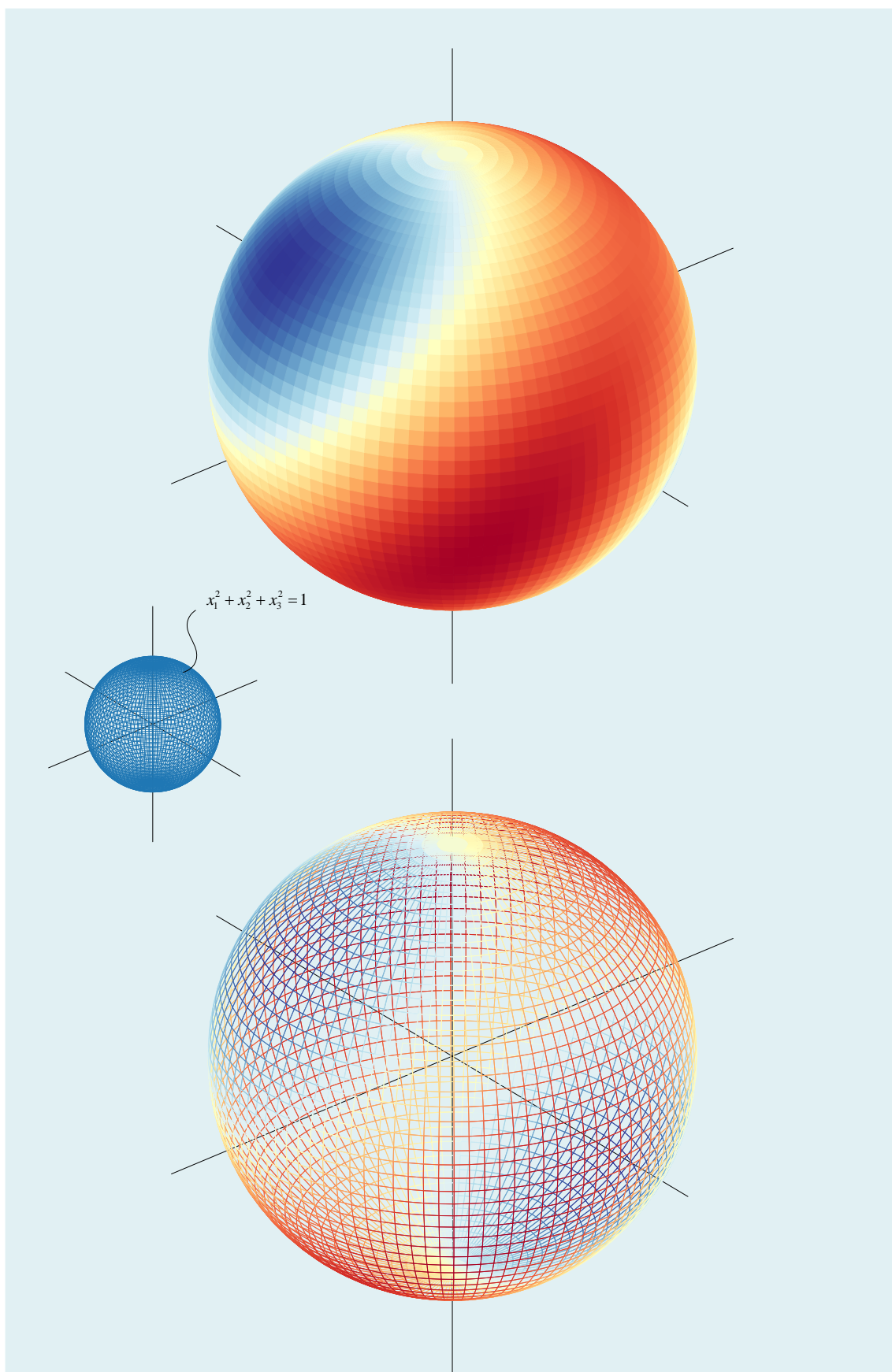
本 PDF 文件为作者草稿, 发布目的为方便读者在移动终端学习, 终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有, 请勿商用, 引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载: <https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: <https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教, 本书专属邮箱: jiang.visualize.ml@gmail.com

图 18. 单位球面上的瑞利商 |  BK_2_Ch29_03.ipynb

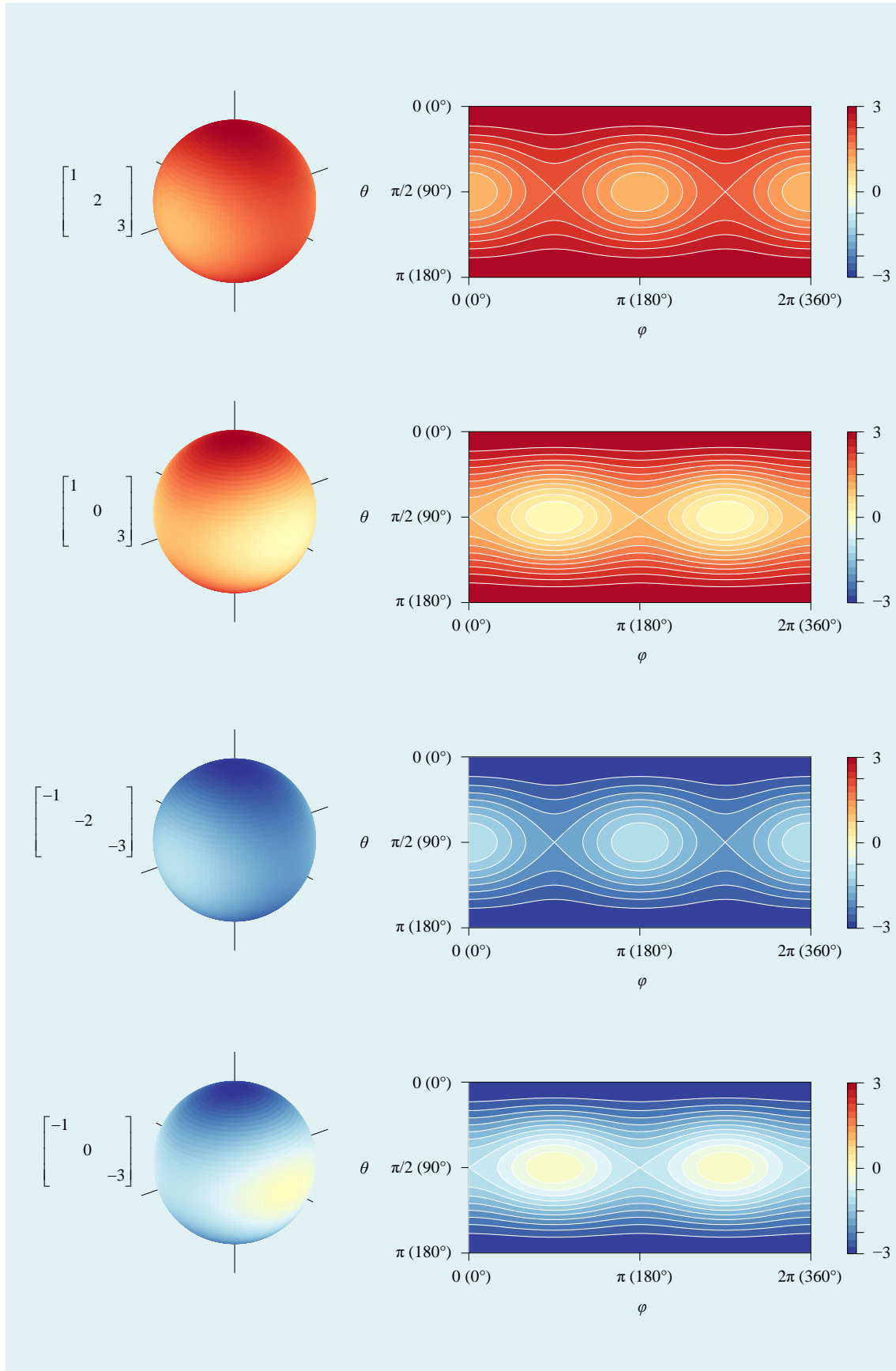

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: <https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

图 19. 单位球面上各种瑞利商, 第 1 组 |  BK_2_Ch29_04.ipynb

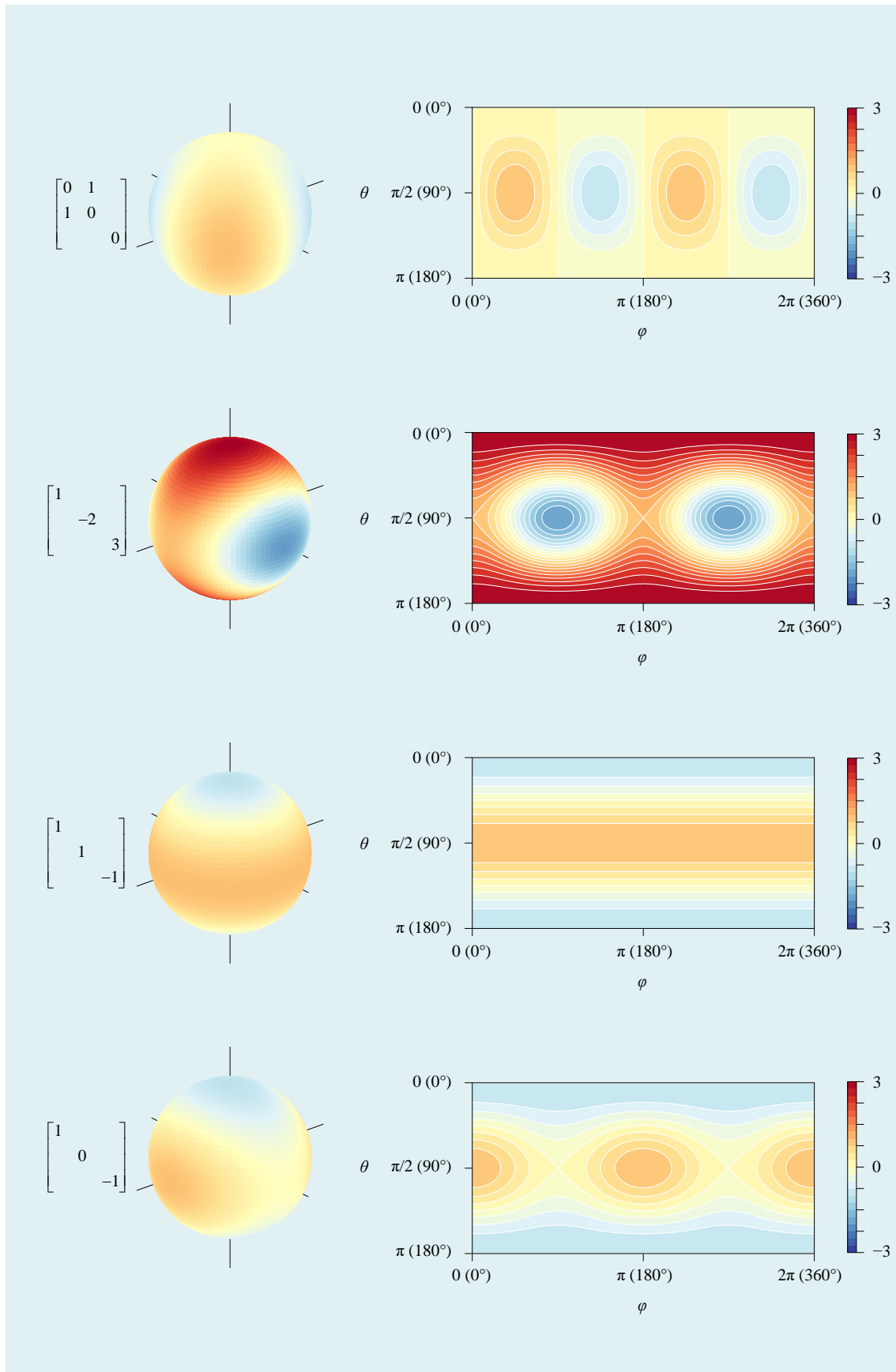

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: <https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

图 20. 单位球面上各种瑞利商, 第 2 组 |  BK_2_Ch29_04.ipynb

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: <https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

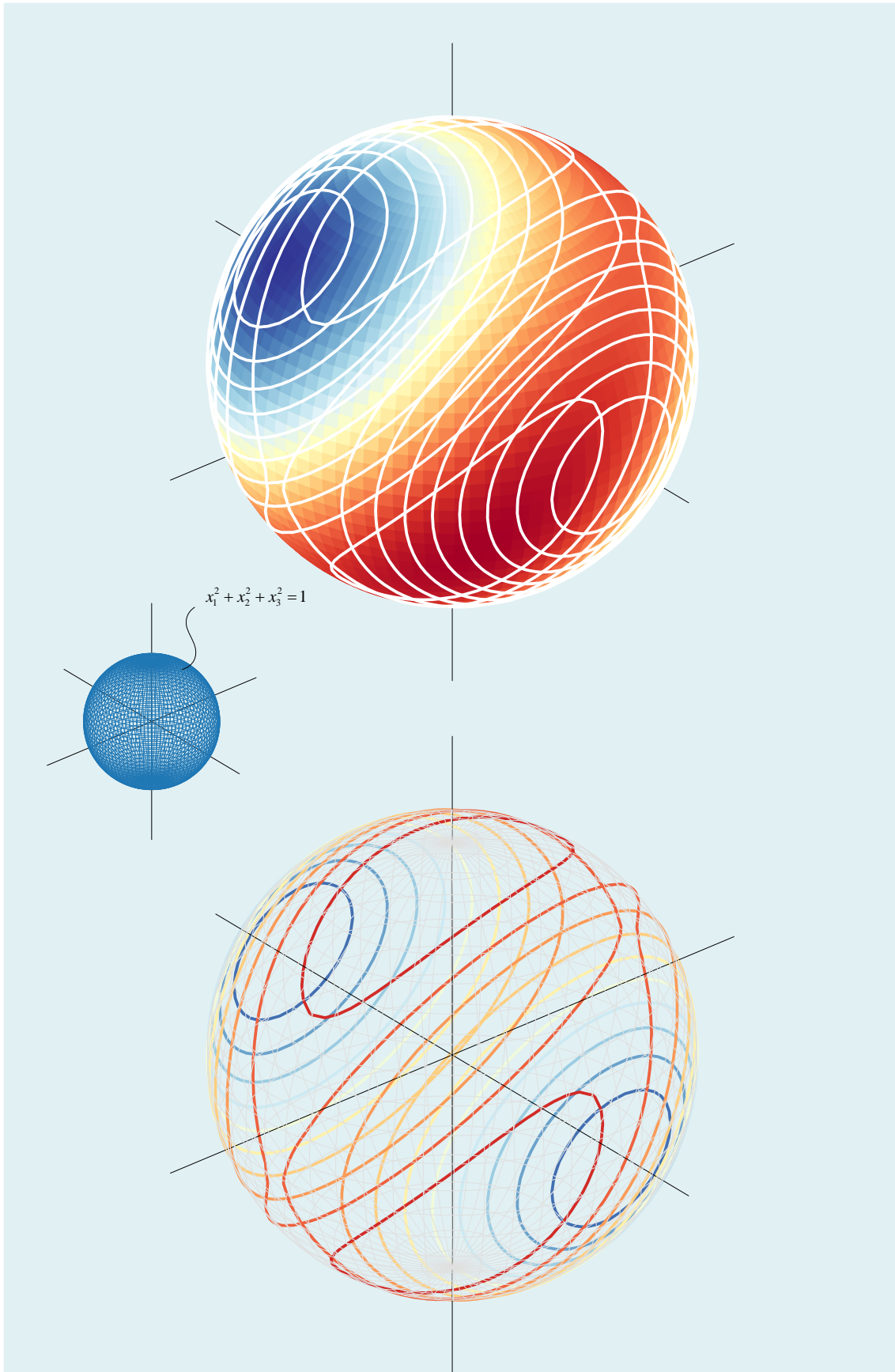



图 21. 球面上的瑞利商等高线 |  BK_2_Ch29_05.ipynb

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: <https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com