4 Matrix 矩阵

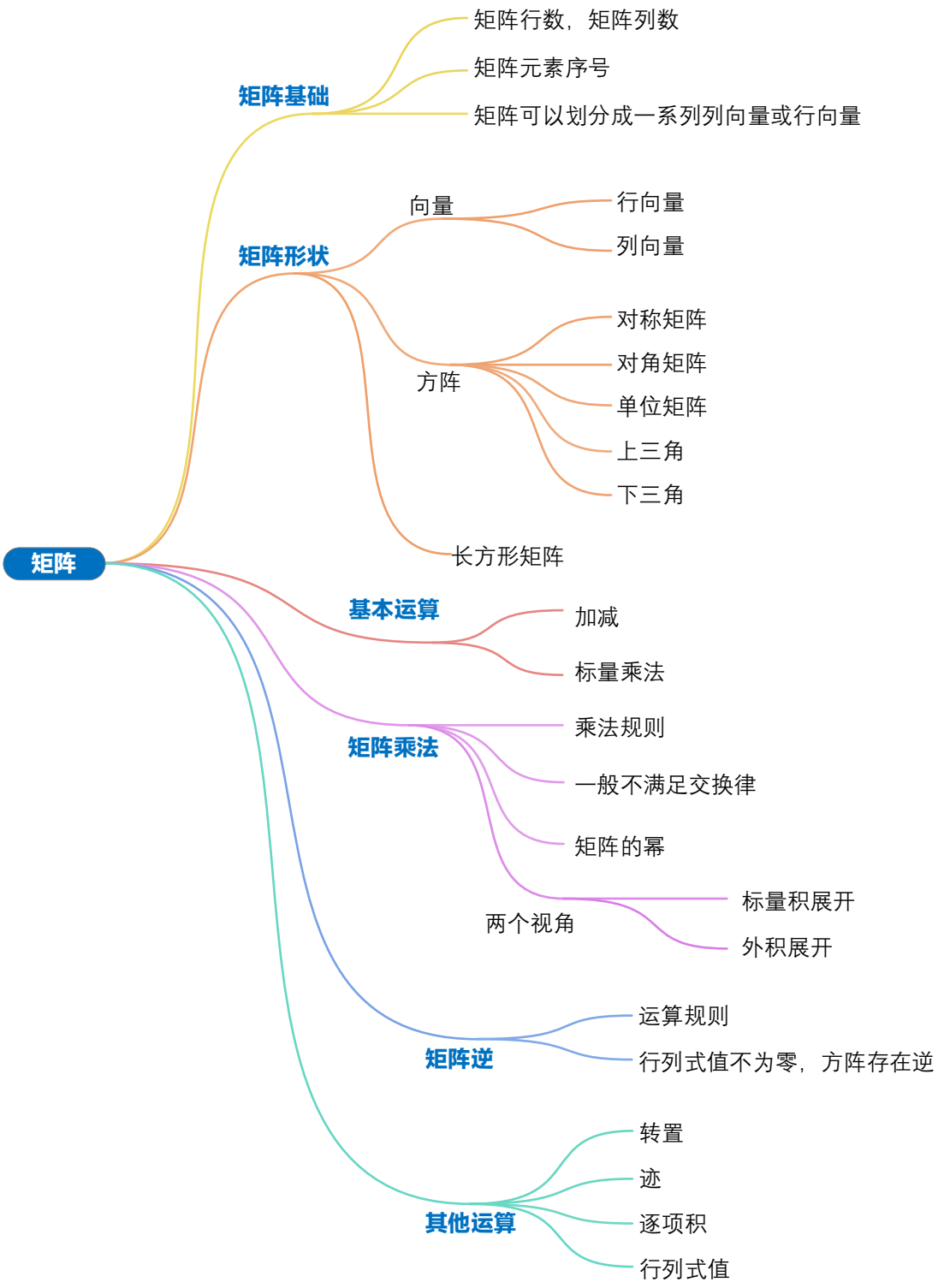
所有矩阵运算都是重要数学工具，都有应用场景

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
- `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：元素按长方型阵列排列

一般来说，矩阵是由标量组成的矩形阵列。但是，矩阵内的元素不仅仅局限于标量，也可以是虚数、符号，乃至数学式。

丛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。一般用 $\boldsymbol{X}$ 来表达原始样本数据矩阵。注意，如果是随机变量构成的列向量，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)。

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》一册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。

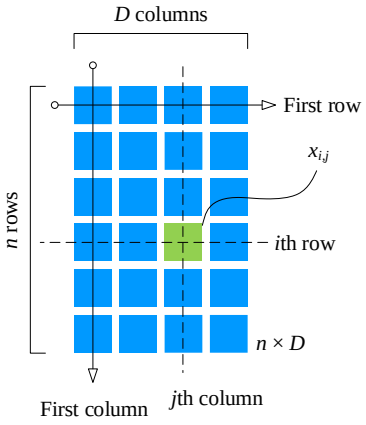


图 1. $n \times D$ 矩阵 $\boldsymbol{X}$

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。

如图 2 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。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：

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

重要的事情多说几遍，以鸢尾花数据集为例，它的每一行代表一朵花。

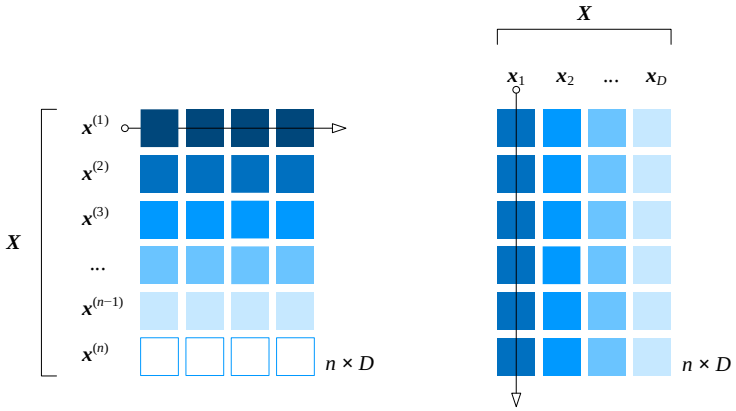


图 2. 矩阵可以看做是由行向量或列向量构造

矩阵 $\boldsymbol{X}$ 也可以写成一组左右放置的列向量：

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

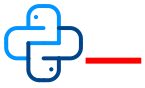
其中，列向量 $\boldsymbol{x}_j$ 为矩阵 $\boldsymbol{X}$ 第 j 列：

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

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，本书默认向量为列向量，除非具体说明。

实际上，上述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，本书后续会深入介绍分块矩阵相关内容。



Bk4_Ch4_01.py 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。

```
# Bk4_Ch4_01.py

import numpy as np

# 2d matrix
A_matrix = np.matrix([[2,4],
                      [6,8]])
print(A_matrix.shape)
print(type(A_matrix))

# 1d array
A_1d = np.array([2,4])
print(A_1d.shape)
print(type(A_1d))

# 2d array
A_2d = np.array([[2,4],
                 [6,8]])
print(A_2d.shape)
print(type(A_2d))

# 3d array
A1 = [[2,4],
      [6,8]]

A2 = [[1,3],
      [5,7]]

A3 = [[1,0],
      [0,1]]
A_3d = np.array([A1,A2,A3])
print(A_3d.shape)
print(type(A_3d))
```

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。

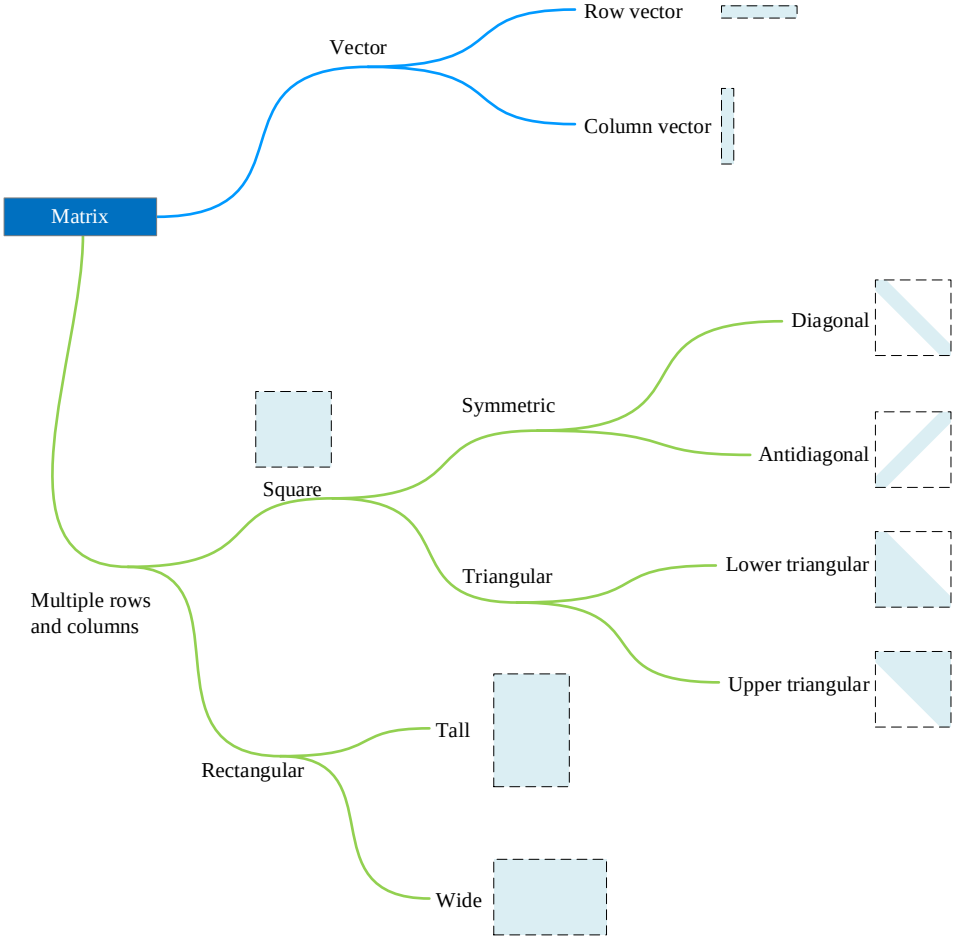


图 3. 几种常见矩阵形状

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。对阵矩阵的右上和左下方向元素以**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。

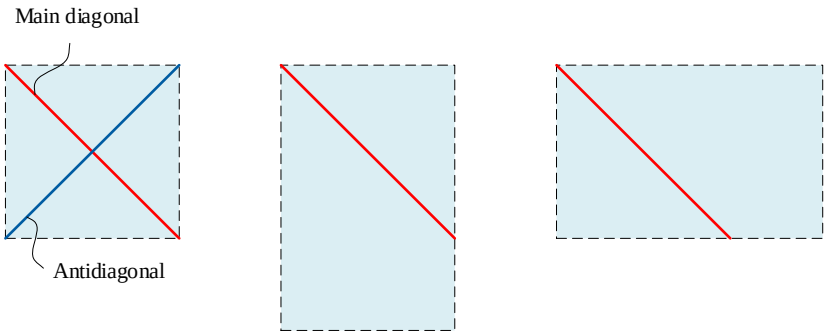


图 4. 主对角线和副对角线

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。

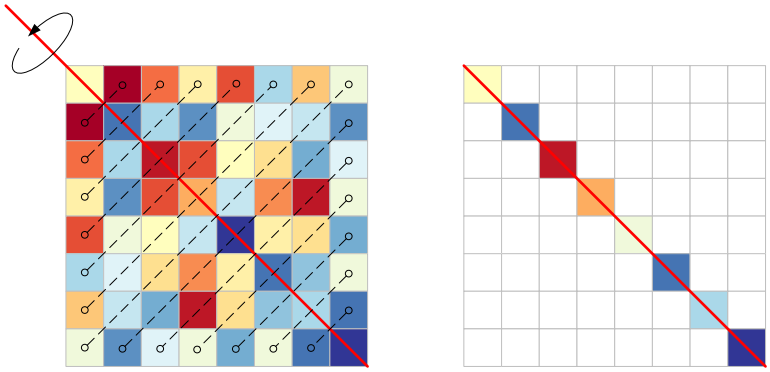


图 5. 对称矩阵和对角矩阵之间关系

请读者注意，不加说明时，本书中的对角矩阵都是方阵；但是，对角矩阵也可以是长方形矩阵，比如如下两例：

$$\begin{bmatrix}1 & & \\ & 2 & \\ & & 3\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}1 & & & \\ & 2 & & \\ & & 3 & \\ & & & \end{bmatrix} \tag{8}$$

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 6 所示，diag($\boldsymbol{A}$) 提取矩阵 $\boldsymbol{A}$ 主对角线元素，结果为列向量。diag($\boldsymbol{a}$) 将向量 $\boldsymbol{a}$ 展成对角阵 $\boldsymbol{B}$，$\boldsymbol{B}$ 主对角线元素依次为向量 $\boldsymbol{a}$ 元素。

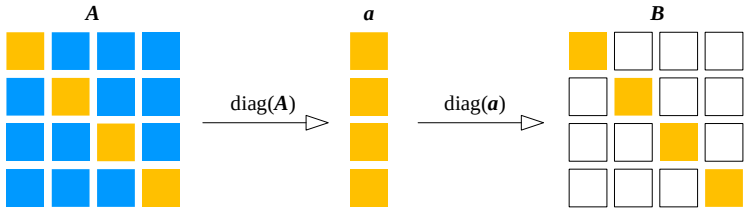


图 6. diag() 函数

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，形似行向量。

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

```
# Bk4_Ch4_02.py

import numpy as np

A = np.matrix([[1,2,3],
               [4,5,6],
               [7,8,9]])

# extract diagonal elements
a = np.diag(A)

# construct a diagonal matrix
A_diag = np.diag(a)
```

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：

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

也有很多文献用 $\boldsymbol{E}$ 代表单位矩阵。

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)：

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

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)：

$$\boldsymbol{L}_{n\times n}=\begin{bmatrix} l_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{2,1} & l_{2,2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n,1} & l_{n,2} & \cdots & l_{n,n} \end{bmatrix} \tag{11}$$

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。本书后续将介绍包括 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”。大家将会在矩阵乘法等内容中看到，我们会通过数学运算现将长方形矩阵“变成”方阵，再进行下一步运算，比如矩阵分解。

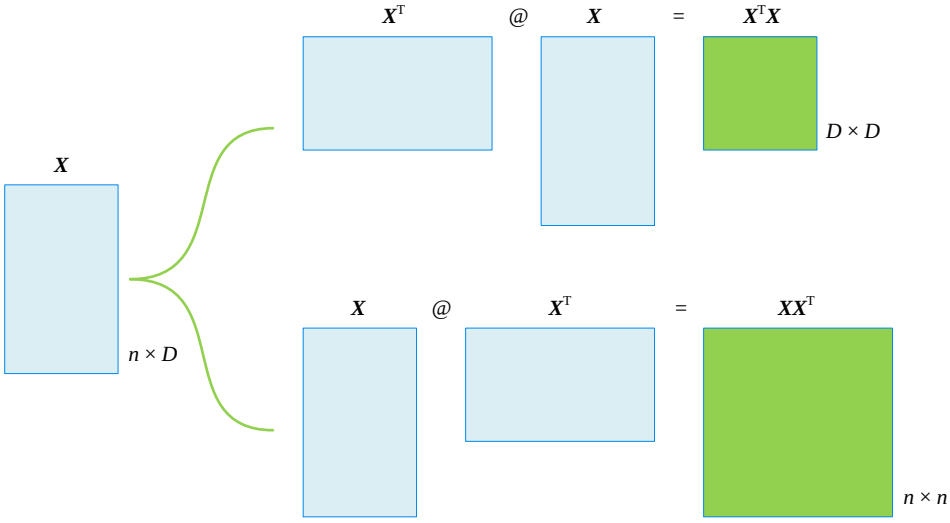


图 7. 将长方形矩阵变成方阵

图 7 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。得到的结果叫格拉姆矩阵 (Gram matrix)，这是本书后文要专门讲解的内容。

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, SVD)，也称 SVD 分解。SVD 分解时本书后面最重要的矩阵分解，没有之一。请大家格外关注。

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：

$$\boldsymbol{A}_{m\times n}+\boldsymbol{B}_{m\times n}=\begin{bmatrix} a_{1,1}+b_{1,1} & a_{1,2}+b_{1,2} & \cdots & a_{1,n}+b_{1,n} \\ a_{2,1}+b_{2,1} & a_{2,2}+b_{2,2} & \cdots & a_{2,n}+b_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1}+b_{m,1} & a_{m,2}+b_{m,2} & \cdots & a_{m,n}+b_{m,n} \end{bmatrix}_{m\times n} \tag{12}$$

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

$$\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A} \tag{13}$$

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

$$\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}+\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}+(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{C})=(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})+\boldsymbol{C} \tag{14}$$

矩阵减法的运算规则和加法一致。

零矩阵

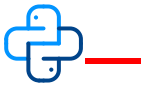
丛书用 $\boldsymbol{O}$ 表示元素全为 0 的矩阵，即**零矩阵** (zero matrix)。

零矩阵具有以下性质：

$$\boldsymbol{A}+\boldsymbol{O}=\boldsymbol{O}+\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A} \tag{15}$$

`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_04.py 介绍如何完成矩阵加减法运算。

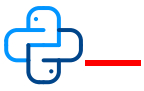
```
# Bk4_Ch4_03.py

import numpy as np

# define matrix
A = np.matrix([[1, 2], [3, 4]])
B = np.matrix([[2, 6], [4, 8]])

# matrix addition
A_plus_B = np.add(A,B)
A_plus_B_2 = A + B


# matrix subtraction
A_minus_B = np.subtract(A,B)
A_minus_B_2 = A - B
```

矩阵标量乘法

矩阵的**标量乘法** (scalar multiplication) 指的是，矩阵乘以某一标量，矩阵的每一个元素均乘以该标量。

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

$$k\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} k \cdot x_{1,1} & k \cdot x_{1,2} & \cdots & k \cdot x_{1,D} \\ k \cdot x_{2,1} & k \cdot x_{2,2} & \cdots & k \cdot x_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k \cdot x_{n,1} & k \cdot x_{n,2} & \cdots & k \cdot x_{n,D} \end{bmatrix} \tag{16}$$



Bk4_Ch4_04.py 如何进行矩阵标量乘法。

```
# Bk4_Ch4_04.py

import numpy as np

k = 2
X = [[1,2],
     [3,4]]

# scalar multiplication
k_times_X = np.dot(k,X)
k_times_X_2 = k*np.matrix(X)
```

4.4 广播原则

NumPy 中的矩阵运算常常使用**广播原则** (broadcasting)。当两个数组的形状并不相同的时候，可以通过扩展数组的方法来实现相加、相减等操作。

矩阵和标量之和

图 8 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，

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} + 2 = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1+2 & 2+2 \\ 3+2 & 4+2 \\ 5+2 & 6+2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 4 \\ 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{bmatrix} \tag{17}$$

上述运算规则也适用于减法。

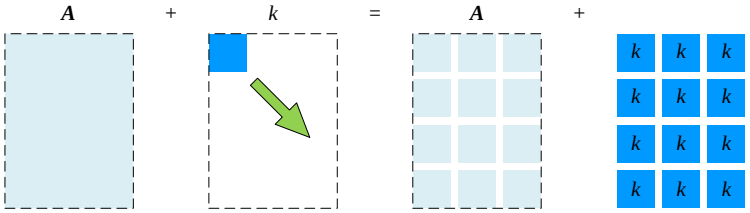


图 8. 广播原则，矩阵加标量

矩阵和列向量之和

一个矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和列向量 $\boldsymbol{c}$ 相加，前提是的 $\boldsymbol{A}$ 行数和 $\boldsymbol{c}$ 行数相同。

如图 9 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。

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

上述规则也同样适用于减法。

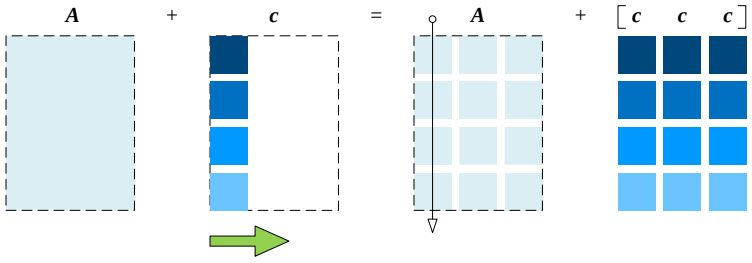


图 9. 广播原则，矩阵加列向量

矩阵和行向量之和

同理，一个矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和行向量 $\boldsymbol{r}$ 相加，前提是的 $\boldsymbol{A}$ 列数和 $\boldsymbol{r}$ 列数相同。如图 10 所示，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和行向量 $\boldsymbol{r}$ 相加，相当于 $\boldsymbol{A}$ 的每一行和 $\boldsymbol{r}$ 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：

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1+2 & 2+1 \\ 3+2 & 4+1 \\ 5+2 & 6+1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 5 & 5 \\ 7 & 7 \end{bmatrix} \tag{19}$$

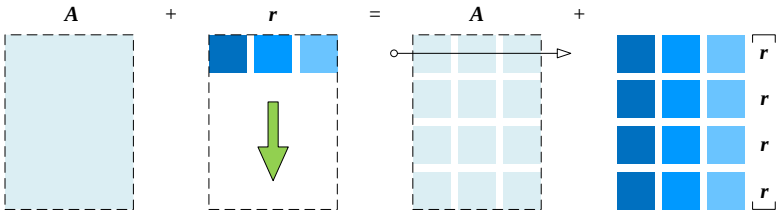


图 10. 广播原则，矩阵加行向量

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 11 所示，列向量 $\boldsymbol{c}$ 自我复制，左右排列得到矩阵和 $\boldsymbol{r}$ 的列数一致；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，

$$\begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 2 & 2 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3+2 & 3+1 \\ 2+2 & 2+1 \\ 1+2 & 1+1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & 4 \\ 4 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \tag{20}$$

调转行、列向量顺序，不影响结果。

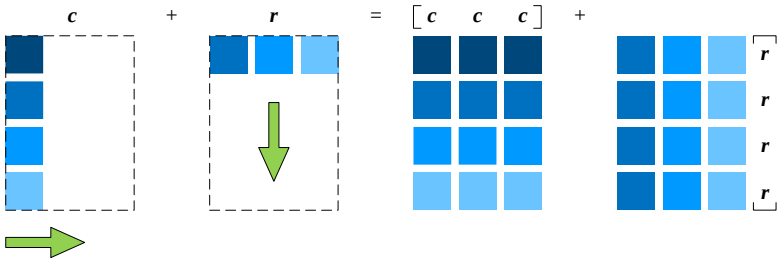
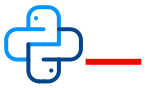


图 11. 广播原则，列向量加行向量



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。

```
# Bk4_Ch4_05.py

import numpy as np

# define matrix
A = np.matrix([[1, 2],
               [3, 4],
               [5, 6]])

# scaler
k = 2;

# column vector c
c = np.array([[3],
              [2],
              [1]])

# row vector r
r = np.array([[2,1]])

# broadcasting principles

# matrix A plus scalar k
A_plus_k = A + k

# matrix A plus column vector c
A_plus_a = A + c

# matrix A plus row vector r
A_plus_r = A + r

# column vector c plus row vector r
c_plus_r = c + r
```

4.5 矩阵乘法：线性代数的核心运算规则

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，规则本身就是一项人类伟大创造！

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 $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{AB}$ 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，

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

为了配合 NumPy 计算，丛书利用 @ 表达矩阵乘法运算符。

矩阵乘法规则

$\boldsymbol{C}$ 的 (i, j) 元素通过 $\boldsymbol{A}$ 第 i 行元素分别乘以 $\boldsymbol{B}$ 的第 j 列元素，再求和得到：

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

用矩阵乘法来表达上式，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。它俩的元素个数都是 D 个。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，本书在分块矩阵一章中，会介绍更多视角。

(24) 也可以写成两个列向量的向量内积，即，

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

图 12 所示为矩阵乘法规则示意图。

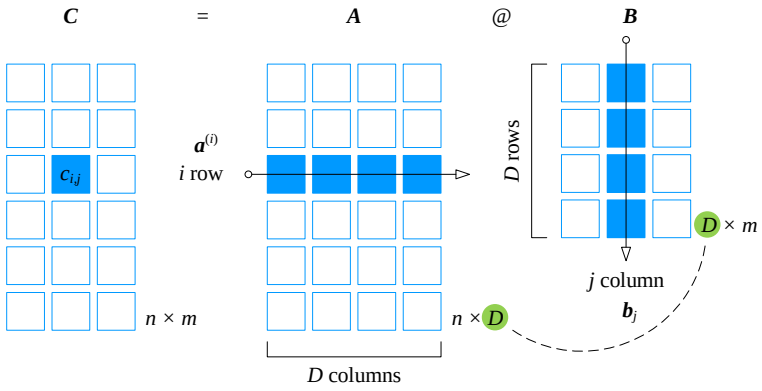


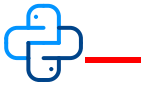
图 12. 矩阵乘法规则

一般情况，矩阵乘法不满足交换律：

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

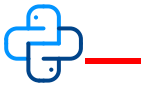
另外，请读者注意以下矩阵乘法规则：

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



Bk4_Ch4_06.py 介绍在 Numpy 中如何进行矩阵乘法运算。

```
# Bk4_Ch4_06.py

import numpy as np

A = np.array([[1, 2],
              [3, 4]])

B = np.array([[2, 4],
              [1, 3]])

# matrix multiplication
A_times_B = np.matmul(A, B)
A_times_B_2 = A@B
```



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() 产生的数据，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@。

请读者运行 Bk4_Ch4_07.py 给出的三个乘法例子，自行比较结果。

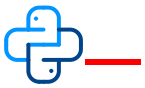
```
# Bk4_Ch4_07.py

import numpy as np

A = np.array([[1, 2]])

B = np.array([[5, 6],
              [8, 9]])

print(A*B)

A = np.array([[1, 2]])

B = np.matrix([[5, 6],
              [8, 9]])

print(A*B)

A = np.matrix([[1, 2]])

B = np.matrix([[5, 6],
              [8, 9]])
```

```
print(A*B)
```

矩阵的幂

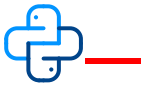
n 阶方阵 (n-square matrix) $\boldsymbol{A}$ 的**矩阵的幂** (powers of matrices) 的幂为：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}^0 &= \boldsymbol{I} \\ \boldsymbol{A}^1 &= \boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{A}^2 &= \boldsymbol{A}\boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{A}^{n+1} &= \boldsymbol{A}^n\boldsymbol{A} \end{aligned} \tag{28}$$



Bk4_Ch4_08.py 展示如何计算矩阵幂。

```
# Bk4_Ch4_08.py

from numpy.linalg import matrix_power as pw
A = np.array([[1., 2.],
              [3., 4.]])

# matrix inverse
A_3 = pw(A,3)
A_3_v3 = A@A@A

# piecewise power
A_3_piecewise = A**3
```



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 是对元素分别平方。请读者比较 Bk4_Ch4_09.py 给出的两个例子。

```
# Bk4_Ch4_09.py

import numpy as np

A = np.matrix([[1,3],
               [2,4]])

print(A**2)

B = np.array([[1,3],
              [2,4]])

print(B**2)
```

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：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{AB} &= \boldsymbol{A} @ \boldsymbol{B} \\
&= \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{2,1} & a_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} \\ b_{2,1} & b_{2,2} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} a_{1,1}b_{1,1} + a_{1,2}b_{2,1} & a_{1,1}b_{1,2} + a_{1,2}b_{2,2} \\ a_{2,1}b_{1,1} + a_{2,2}b_{2,1} & a_{2,1}b_{1,2} + a_{2,2}b_{2,2} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{29}
$$

图 13 所示为两个 2 × 2 矩阵相乘如何得到结果的每一个元素。

下面，我们从两个视角来剖析矩阵乘法。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，请学过的读者也耐心把本节内容扫读一遍。

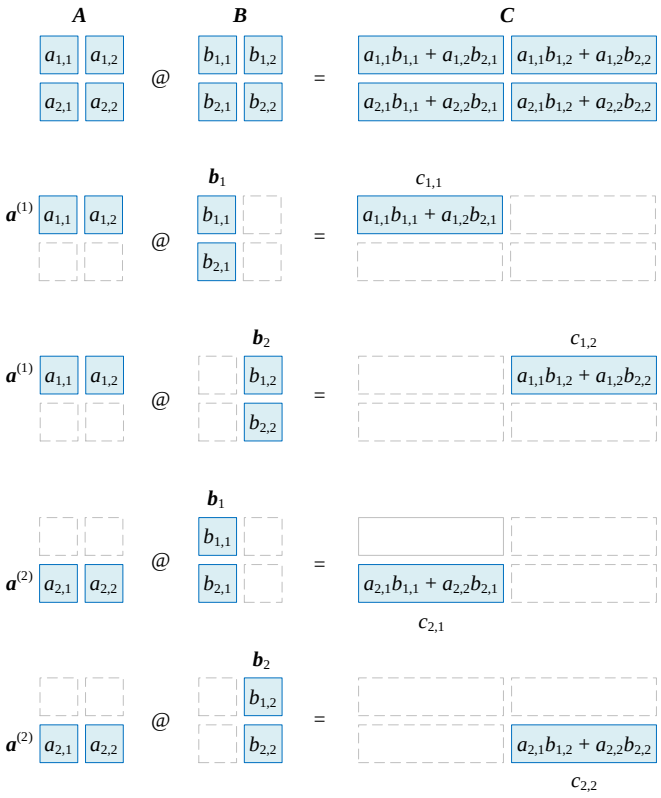


图 13. 矩阵乘法规则，两个 2 × 2 矩阵相乘为例

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 13 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 $c_{i,j}$：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{A} \mathbin{@} \boldsymbol{B} &= \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \end{bmatrix}_{1\times 2} \\ \begin{bmatrix} a_{2,1} & a_{2,2} \end{bmatrix}_{1\times 2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{1,1} \\ b_{2,1} \end{bmatrix}_{2\times 1} & \begin{bmatrix} b_{1,2} \\ b_{2,2} \end{bmatrix}_{2\times 1} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}^{(1)} \\ \boldsymbol{a}^{(2)} \end{bmatrix}_{2\times 1} \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{b}_2 \end{bmatrix}_{1\times 2} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}^{(1)}\boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{a}^{(1)}\boldsymbol{b}_2 \\ \boldsymbol{a}^{(2)}\boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{a}^{(2)}\boldsymbol{b}_2 \end{bmatrix}_{2\times 2} \\
&= \begin{bmatrix} a_{1,1}b_{1,1} + a_{1,2}b_{2,1} & a_{1,1}b_{1,2} + a_{1,2}b_{2,2} \\ a_{2,1}b_{1,1} + a_{2,2}b_{2,1} & a_{2,1}b_{1,2} + a_{2,2}b_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{1,1} & c_{1,2} \\ c_{2,1} & c_{2,2} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{30}
$$

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：

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

观察矩阵乘法的这两个视角十分重要，本书下文还将深入探讨，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)。

如图 14 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 $\boldsymbol{A}'$。注意，为了和求导记号区分，本书仅采用 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 记法。

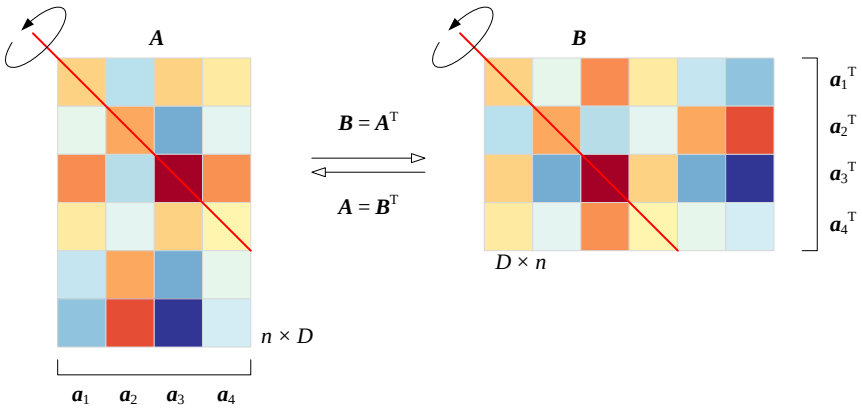


图 14. 矩阵转置

如图 14 所示，将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 写成一组列向量：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{a}_3 & \boldsymbol{a}_4\end{bmatrix} \tag{32}$$

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

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

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

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \tag{34}$$

矩阵转置的几个重要性质如下：

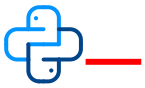
$$\begin{aligned}
&\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}\\
&\left(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\right)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\\
&\left(k\boldsymbol{A}\right)^{\mathrm{T}}=k\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\\
&\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}\right)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\\
&\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}\boldsymbol{C}\right)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}
\end{aligned} \tag{35}$$

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 $\boldsymbol{a}$：

$$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}=a_1b_1+a_2b_2+\cdots+a_nb_n \tag{36}$$

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

$$\|\boldsymbol{a}\|=\sqrt{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}}=\sqrt{\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}} \tag{37}$$



Bk4_Ch4_10.py 计算矩阵转置。

```
# Bk4_Ch4_10.py

import numpy as np

A = np.array([[1, 2],
              [3, 4],
              [5, 6]])

# matrix transpose
A_T = A.transpose()
A_T_2 = A.T
```

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：

$$\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{BA} = \boldsymbol{I} \tag{38}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**逆** (inverse) 写作 $\boldsymbol{A}^{-1}$。矩阵可逆也称**非奇异** (non-singular)。

请读者注意以下和矩阵逆有关的运算规则：

$$\begin{aligned}
\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\right)^{-1} &= \left(\boldsymbol{A}^{-1}\right)^{\mathrm{T}} \\
\left(\boldsymbol{AB}\right)^{-1} &= \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1} \\
\left(\boldsymbol{ABC}\right)^{-1} &= \boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1} \\
\left(k\boldsymbol{A}\right)^{-1} &= \frac{1}{k}\boldsymbol{A}^{-1}
\end{aligned} \tag{39}$$

其中，假设 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$、$\boldsymbol{AB}$ 和 $\boldsymbol{ABC}$ 逆运算存在。

一般情况，

$$\left(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\right)^{-1} \neq \boldsymbol{A}^{-1}+\boldsymbol{B}^{-1} \tag{40}$$

特别地，对于任意 2 × 2 矩阵 $\boldsymbol{A}$：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \tag{41}$$

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

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{|\boldsymbol{A}|}\begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix} \tag{42}$$

其中

$$|\boldsymbol{A}| = ad - bc \tag{43}$$

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

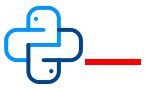
注意，行列式值 $|\boldsymbol{A}|$ 不为 0 时，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 才存在逆。本章后续将详细讲解行列式值计算。

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

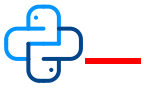
$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{A}^{-1} \tag{44}$$

本书后续还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` 展示如 `Numpy` 如何矩阵逆。



```
# Bk4_Ch4_11.py

from numpy.linalg import inv
A = np.array([[1., 2.],
              [3., 4.]])

# matrix inverse
A_inverse = inv(A)
A_times_A_inv = A@A_inverse
```



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，可以使用 `numpy.linalg.inv()`。

```
# Bk4_Ch4_12.py

import numpy as np

A = np.matrix([[1, 2],
               [3, 4]])

print(A.I)

B = np.array([[1, 2],
              [3, 4]])

print(B.I)
```

4.9 迹：主对角元素之和

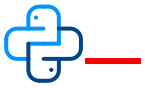
$n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**迹** (trace) 为其主对角线元素之和：

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}) = \sum_{i=1}^{n} a_{i,i} = a_{1,1} + a_{2,2} + \cdots + a_{n,n} \tag{45}$$

举个例子，

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}) = \mathrm{tr}\left(\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 3 & 2 & 4 \\ -2 & 0 & 3 \end{bmatrix}\right) = 1 + 2 + 3 = 6 \tag{46}$$

一个矩阵的迹是其特征值的总和，这个重要的性质，我们会在主成分分析中看到它的应用。



Bk4_Ch4_13.py 介绍如何计算矩阵的迹。

```
# Bk4_Ch4_13.py

import numpy as np
A = np.array([[1, -1, 0],
              [3,  2, 4],
              [-2, 0, 3]])

# calculate trace of A
tr_A = np.trace(A)
```

请大家注意以下有关矩阵迹的性质：

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}) &= \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}) + \mathrm{tr}(\boldsymbol{B}) \\ \mathrm{tr}(k\boldsymbol{A}) &= k \cdot \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}) \\ \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) &= \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}) \\ \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}) &= \mathrm{tr}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}) \end{aligned} \tag{47}$$

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)。

逐项积常常用在矩阵上。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：

$$\boldsymbol{A}_{n\times D} \odot \boldsymbol{B}_{n\times D} = \begin{bmatrix} a_{1,1}b_{1,1} & a_{1,2}b_{1,2} & \cdots & a_{1,D}b_{1,D} \\ a_{2,1}b_{2,1} & a_{2,2}b_{2,2} & \cdots & a_{2,D}b_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1}b_{n,1} & a_{n,2}b_{n,2} & \cdots & a_{n,D}b_{n,D} \end{bmatrix}_{n\times D} \tag{48}$$

图 15 所示为矩阵逐项积运算法则示意图。

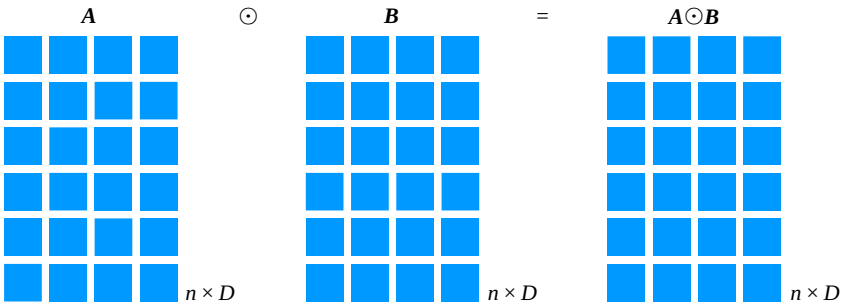


图 15. 矩阵逐项积

Bk4_Ch4_14.py 计算逐项积。

```
# Bk4_Ch4_14.py

import numpy as np

A = np.array([[1,2],
              [3,4]])

B = np.array([[5,6],
              [7,8]])

# Hadamard product
A_times_B_piecewise = np.multiply(A,B)
A_times_B_piecewise_V2 = A*B
```

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)，比如方阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值可以表达为 $|\boldsymbol{A}|$ 或 $\det(\boldsymbol{A})$。如果行列式值非零，方阵则可逆或非奇异。

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。

一阶方阵的行列式值：

$$\left|a_{11}\right| = a_{11} \tag{49}$$

二阶方阵的行列式值：

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \tag{50}$$

几何视角

图 16 给出的是二阶矩阵行列式的几何意义。图中蓝色平行四边形的面积就是 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值，它可以通过整个矩形面积减去四个三角形面积得到，比如下例：

$$\det(\boldsymbol{A}) = \det\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix} = 3\times 4 - 2\times 1 = 10 \tag{51}$$

注意，行列式值可以为零或负值。

行列式值和线性变换有着密切关系，线性变换对面积/体积产生改变的比例就是行列式值。因此，行列式值正、负、零都有其特定的几何内涵，本书后续将展开讲解。

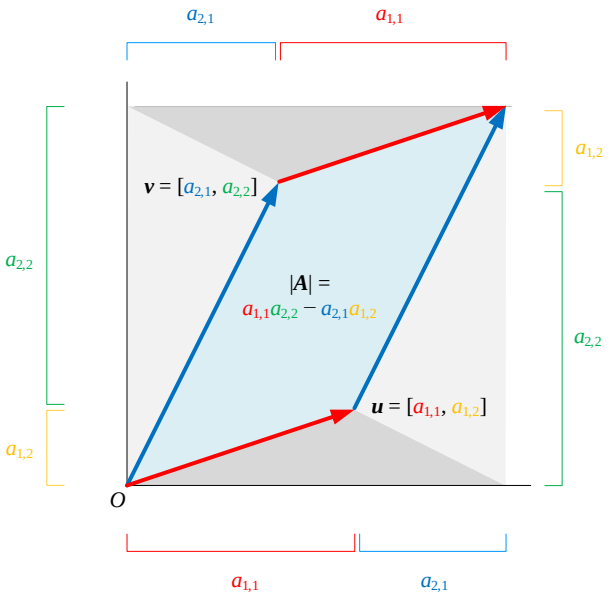


图 16. 二阶矩阵的行列式的几何意义

Bk4_Ch4_15.py 计算行列式值。

```
# Bk4_Ch4_15.py

import numpy as np
A = np.array([[3, 1],
              [2, 4]])

# calculate determinant of A
det_A = np.linalg.det(A)
```

三阶方阵行列式值

三阶方阵的行列式值：

$$\begin{aligned}\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} &= \begin{vmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 & 0 & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} \\ &= a_{11}\begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} - a_{12}\begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} + a_{13}\begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix}\end{aligned} \tag{52}$$

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。

更多性质

特别地，对角阵的行列式值为：

$$\begin{vmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22}a_{33} \tag{53}$$

三角阵的行列式值为：

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} & a_{23} \\ 0 & 0 & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22}a_{33} \tag{54}$$

上述规则也适用于计算下三角矩阵的行列式值。

请读者注意以下行列式性质：

$$\begin{aligned} \det(\boldsymbol{AB}) &= \det(\boldsymbol{A}) \cdot \det(\boldsymbol{B}) \\ \det(c\boldsymbol{A}_{n\times n}) &= c^n \det(\boldsymbol{A}) \\ \det(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) &= \det(\boldsymbol{A}) \\ \det(\boldsymbol{A}^n) &= \det(\boldsymbol{A})^n \\ \det(\boldsymbol{A}^{-1}) &= \frac{1}{\det(\boldsymbol{A})} \end{aligned} \tag{55}$$

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：

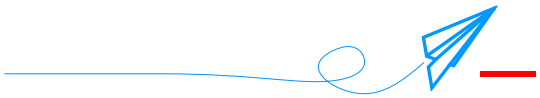
$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b} &= \begin{vmatrix} \boldsymbol{i} & \boldsymbol{j} & \boldsymbol{k} \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} \\
&= \begin{vmatrix} a_2 & a_3 \\ b_2 & b_3 \end{vmatrix}\boldsymbol{i} - \begin{vmatrix} a_1 & a_3 \\ b_1 & b_3 \end{vmatrix}\boldsymbol{j} + \begin{vmatrix} a_1 & a_2 \\ b_1 & b_2 \end{vmatrix}\boldsymbol{k} \\
&= \left(a_2b_3 - a_3b_2\right)\boldsymbol{i} + \left(a_3b_1 - a_1b_3\right)\boldsymbol{j} + \left(a_1b_2 - a_2b_1\right)\boldsymbol{k}
\end{aligned} \tag{56}
$$

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

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{a} &= -2\boldsymbol{i} + \boldsymbol{j} + \boldsymbol{k} \\
\boldsymbol{b} &= \boldsymbol{i} - 2\boldsymbol{j} - \boldsymbol{k}
\end{aligned} \tag{57}
$$

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

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b} &= \begin{vmatrix} \boldsymbol{i} & \boldsymbol{j} & \boldsymbol{k} \\ -2 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & -1 \end{vmatrix} \\
&= \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ -2 & -1 \end{vmatrix}\boldsymbol{i} - \begin{vmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -1 \end{vmatrix}\boldsymbol{j} + \begin{vmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{vmatrix}\boldsymbol{k} \\
&= \boldsymbol{i} - \boldsymbol{j} + 3\boldsymbol{k}
\end{aligned} \tag{58}
$$



本章走马观花地介绍了常见矩阵运算规则，显然不能用四幅图概括主要内容。

本章介绍的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。