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。

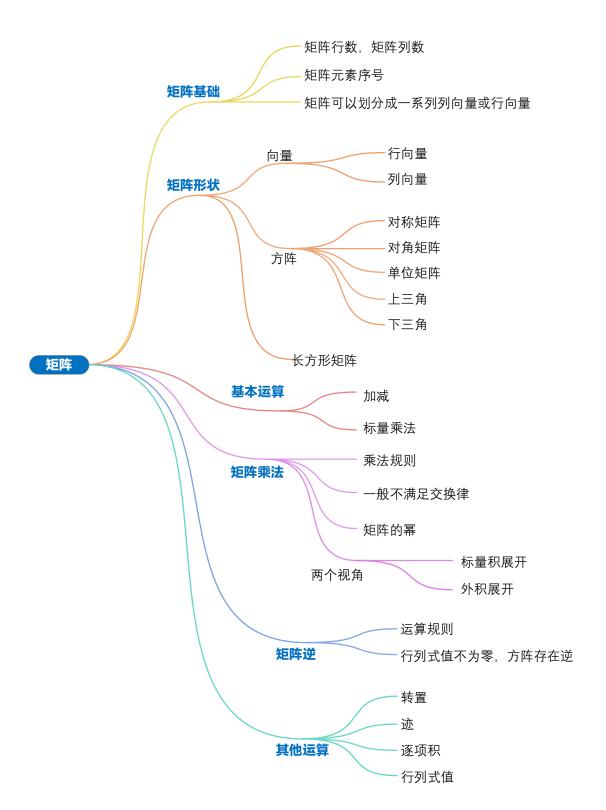
Number rules the universe.

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



- ◀ numpy.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





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

3.1 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 X、V、A、B等。一般用 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 χ ,比如 D 维随机变量 $\chi=[X_1,X_2,...,X_D]^{\mathrm{T}}$ 。

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

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

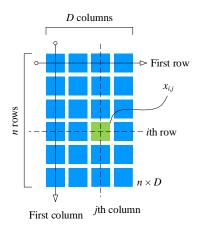


图 1. n×D 矩阵 X

矩阵构造

矩阵 X 中,元素 (element) $x_{i,j}$ 被称作 (i,j) 元素 (ij entry 或 ij 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。

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

如图 2 所示,矩阵 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 X 可以写成一组上下叠放的行向量:

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

其中,行向量 $x^{(i)}$ 为矩阵X第i行,具体为:

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

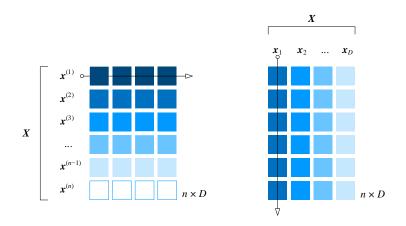


图 2. 矩阵可以看做是由行向量或列向量构造

矩阵 X 也可以写成一组左右放置的列向量:

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

$$(4)$$

其中, 列向量 x_i 为矩阵 X 第 j 列:

$$\boldsymbol{x}_{j} = \begin{bmatrix} x_{1,j} \\ x_{2,j} \\ \vdots \\ x_{n,j} \end{bmatrix}$$
 (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。

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

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 Ch3 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。

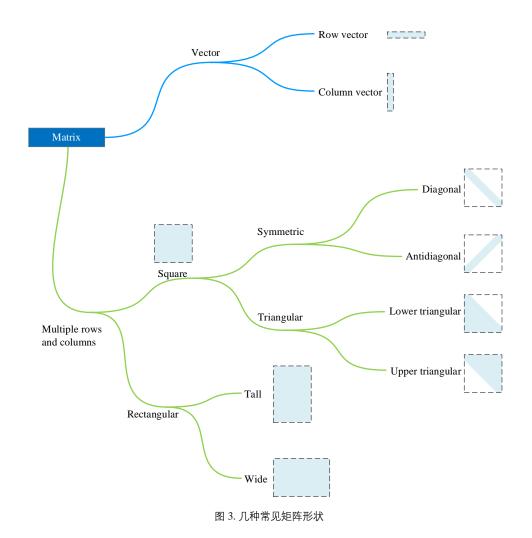
```
# Bk4_Ch3_01.py
import numpy as np
# 2d matrix
A matrix = np.matrix([[2,4],
                       [6,8]])
print(A matrix.shape)
print(type(A_matrix))
# 1d array
A 1d = np.array([2,4])
print(A_1d.shape)
print(type(A_1d))
# 2d array
A_2d = np.array([[2,4]],
                 [6,8]])
print(A 2d.shape)
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))
```

3.2 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。

```
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 3 总结几种常见矩阵形状,本节逐一讲解。



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 A 便是对称矩阵:

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

本章后续将详细介绍转置运算。

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

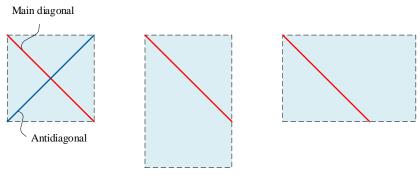


图 4. 主对角线和副对角线

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:

$$\Lambda_{n \times n} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}$$
(7)

图 5 比较对称矩阵和对角矩阵。

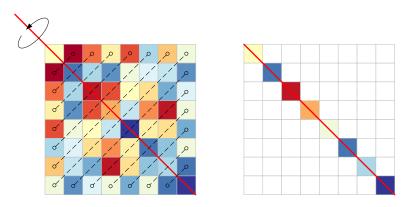


图 5. 对称矩阵和对角矩阵之间关系

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:

$$\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 2 & & \\ & & 3 & & \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 2 & & \\ & & 3 & \\ & & & \end{bmatrix}$$
 (8)

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。

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

本书配套徽课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466

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

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

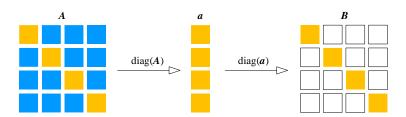


图 6. diag() 函数

Python 中,完成 **diag**() 函数为 numpy.diag()。注意,numpy.diag(A) 提取矩阵 A 对角线元素,结果为一维数组,形似行向量。



Bk4 Ch3 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 I 来表达:

$$I_{n \times n} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$
 (9)

也有很多文献用 E 代表单位矩阵。

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。 代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML 本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466 欢迎大家批评指教,本书专属邮箱: jiang.visualize.ml@gmail.com

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):

$$U_{n \times n} = \begin{bmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & \dots & u_{1,n} \\ 0 & u_{2,2} & \dots & u_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & u_{n,n} \end{bmatrix}$$
(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):

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

提一嘴,如果矩阵 A 为**可逆矩阵** (invertible matrix, non-singular matrix),A 可以通过 LU 分解 变成一个下三角矩阵 L 与一个上三角矩阵 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。

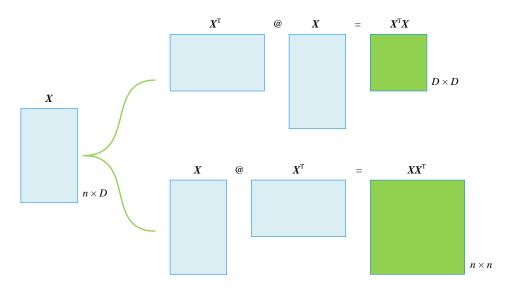


图 7. 将长方形矩阵变成方阵

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 7 所示为将细高数据矩阵 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。

3.3 基本运算:加减和标量乘法

矩阵加减

两个相同大小的矩阵 A 和 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:

$$\mathbf{A}_{m \times n} + \mathbf{B}_{m \times n} = \begin{bmatrix} a_{1,1} + b_{1,1} & a_{1,2} + b_{1,2} & \dots & a_{1,n} + b_{1,n} \\ a_{2,1} + b_{2,1} & a_{2,2} + b_{2,2} & \dots & a_{2,n} + b_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1} + b_{m,1} & a_{m,2} + b_{m,2} & \dots & a_{m,n} + b_{m,n} \end{bmatrix}_{m \times n}$$
(12)

矩阵加法交换律 (commutative property) 指的是:

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

矩阵加法结合律 (associative property) 指的是:

$$A + B + C = A + (B + C) = (A + B) + C$$
 (14)

矩阵减法的运算规则和加法一致。

零矩阵

丛书用 $\mathbf{0}$ 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:

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

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。



本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。

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

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

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

Bk4 Ch3 03.py 介绍如何完成矩阵加减法运算。

```
# Bk4_Ch3_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 X 和标量 k 的乘积 (the product of the matrix X by a scalar k) 写作 kX:

$$kX = \begin{bmatrix} k \cdot x_{1,1} & k \cdot x_{1,2} & \cdots & k \cdot x_{1,D} \\ k \cdot x_{2,1} & k \cdot x_{2,2} & \cdots & k \cdot x_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k \cdot x_{n,1} & k \cdot x_{n,2} & \cdots & k \cdot x_{n,D} \end{bmatrix}$$
(16)



Bk4_Ch3_04.py 如何进行矩阵标量乘法。

3.4 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。

```
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
```

矩阵和标量之和

图 8 所示为,一个矩阵 A 和标量 k 之和,相当于矩阵 A 的每一个元素加 k。比如,

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

上述运算规则也适用于减法。

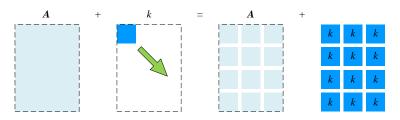


图 8. 广播原则, 矩阵加标量

矩阵和列向量之和

一个矩阵 A 和列向量 c 相加,前提是的 A 行数和 c 行数相同。

如图9所示,矩阵 A 和列向量 c 相加,相当于 A 的每一列和 c 相加。另外一个视角,列向量 c 首先自我复制,左右排列得到和 A 形状相同的矩阵,再和 A 相加。

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

上述规则也同样适用于减法。

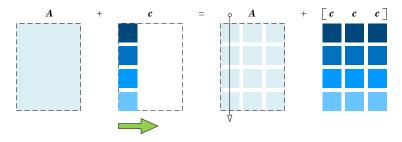


图 9. 广播原则,矩阵加列向量

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

矩阵和行向量之和

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

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

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

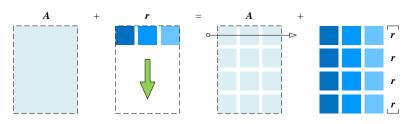


图 10. 广播原则,矩阵加行向量

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 c 自我复制,左右排列得到矩阵和 r 的列数一致;行向量 r 自我复制,上下叠加得到矩阵和 c 的行数一致。然后完成加法运算,

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

调转行、列向量顺序, 不影响结果。

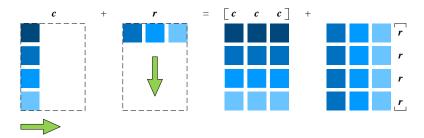


图 11. 广播原则,列向量加行向量

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。

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

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

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



Bk4_Ch3_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 Ch3 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])
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
```

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

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

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 其中,

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

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

$$c_{i,j} = a_{i,1}b_{1,j} + a_{i,2}b_{2,j} + \dots + a_{i,D}b_{D,j}$$
(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, $a^{(i)}$ 是 A 第 i 行元素构成的行向量, b_j 是 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。

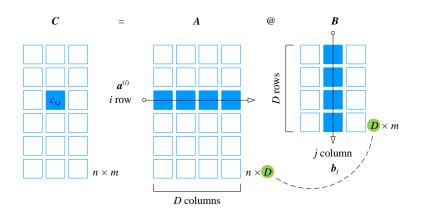


图 12. 矩阵乘法规则

一般情况,矩阵乘法不满足交换律:

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

$$AB \neq BA$$
 (26)

另外, 请读者注意以下矩阵乘法规则:

$$ABC = A(BC) = (AB)C$$

$$k(AB) = (kA)B = A(kB) = (AB)k$$

$$A(B+C) = AB + AC$$
(27)



Bk4 Ch3 06.py 介绍在 Numpy 中如何进行矩阵乘法运算。



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_Ch3_07.py 给出的三个乘法例子,自行比较结果。

```
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
```

print(A*B)

矩阵的幂

n 阶方阵 (n-square matrix) A 的矩阵的幂 (powers of matrices) 的幂为:

```
A^{0} = I
A^{1} = A
A^{2} = AA
A^{n+1} = A^{n}A
(28)
```



Bk4 Ch3 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 是对元素分别平方。请读者比较 Bk4 Ch3 09.py 给出的两个例子。

```
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
```

3.6 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:

$$\mathbf{AB} = \mathbf{A} @ \mathbf{B}
= \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{2,1} & a_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} \\ b_{2,1} & b_{2,2} \end{bmatrix}
= \begin{bmatrix} a_{1,1}b_{1,1} + a_{1,2}b_{2,1} & a_{1,1}b_{1,2} + a_{1,2}b_{2,2} \\ a_{2,1}b_{1,1} + a_{2,2}b_{2,1} & a_{2,1}b_{1,2} + a_{2,2}b_{2,2} \end{bmatrix}$$
(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。

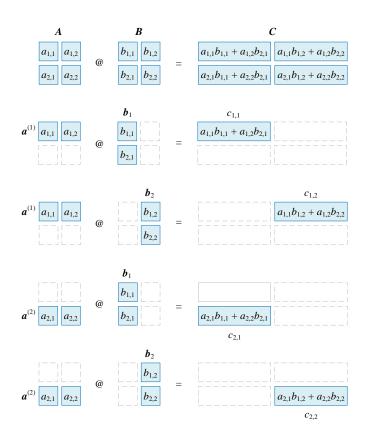


图 13. 矩阵乘法规则,两个 2×2 矩阵相乘为例

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。

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

如图 13 所示,矩阵乘法 AB 中,位于左侧的 A 写成一组行向量;位于右侧的 B 写成一组列向 量。

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

$$\mathbf{AB} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{2,1} & a_{2,2} \end{bmatrix}_{1 \times 2} \begin{bmatrix} b_{1,1} \\ b_{2,1} \end{bmatrix}_{2 \times 1} \begin{bmatrix} b_{1,2} \\ b_{2,2} \end{bmatrix}_{2 \times 1} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \mathbf{a}^{(1)} \\ \mathbf{a}^{(2)} \end{bmatrix}_{2 \times 1} \begin{bmatrix} \mathbf{b}_{1} & \mathbf{b}_{2} \end{bmatrix}_{1 \times 2} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}^{(1)} \mathbf{b}_{1} & \mathbf{a}^{(1)} \mathbf{b}_{2} \\ \mathbf{a}^{(2)} \mathbf{b}_{1} & \mathbf{a}^{(2)} \mathbf{b}_{2} \end{bmatrix}_{2 \times 2}$$

$$= \begin{bmatrix} a_{1,1} b_{1,1} + a_{1,2} b_{2,1} & a_{1,1} b_{1,2} + a_{1,2} b_{2,2} \\ a_{2,1} b_{1,1} + a_{2,2} b_{2,1} & a_{2,1} b_{1,2} + a_{2,2} b_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{1,1} & c_{1,2} \\ c_{2,1} & c_{2,2} \end{bmatrix}$$
(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 AB 中,位于左侧的 A 写成一组列向量;位于右侧的 B 写成一组行向量。如下所 示, 我们把 AB 展开写成矩阵加法:

$$\mathbf{AB} = \mathbf{A} @ \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{1,1} \\ a_{2,1} \end{bmatrix}_{2\times 1} \begin{bmatrix} a_{1,2} \\ a_{2,2} \end{bmatrix}_{2\times 1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} \\ b_{2,1} & b_{2,2} \end{bmatrix}_{1\times 2} \end{bmatrix} \\
= \begin{bmatrix} \mathbf{a}_{1} & \mathbf{a}_{2} \end{bmatrix}_{1\times 2} \begin{bmatrix} \mathbf{b}^{(1)} \\ \mathbf{b}^{(2)} \end{bmatrix}_{2\times 1} = \mathbf{a}_{1}\mathbf{b}^{(1)} + \mathbf{a}_{2}\mathbf{b}^{(2)} = \begin{bmatrix} a_{1,1} \\ a_{2,1} \end{bmatrix}_{2\times 1} @ \begin{bmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} \end{bmatrix}_{1\times 2} + \begin{bmatrix} a_{1,2} \\ a_{2,2} \end{bmatrix}_{2\times 1} @ \begin{bmatrix} b_{2,1} & b_{2,2} \end{bmatrix}_{1\times 2} \\
= \begin{bmatrix} a_{1,1}b_{1,1} & a_{1,1}b_{1,2} \\ a_{2,1}b_{1,1} & a_{2,1}b_{1,2} \end{bmatrix}_{2\times 2} + \begin{bmatrix} a_{1,2}b_{2,1} & a_{1,2}b_{2,2} \\ a_{2,2}b_{2,1} & a_{2,2}b_{2,2} \end{bmatrix}_{2\times 2} \\
= \begin{bmatrix} a_{1,1}b_{1,1} + a_{1,2}b_{2,1} & a_{1,1}b_{1,2} + a_{1,2}b_{2,2} \\ a_{2,1}b_{1,1} + a_{2,2}b_{2,1} & a_{2,1}b_{1,2} + a_{2,2}b_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{1,1} & c_{1,2} \\ c_{2,1} & c_{2,2} \end{bmatrix}$$
(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。

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

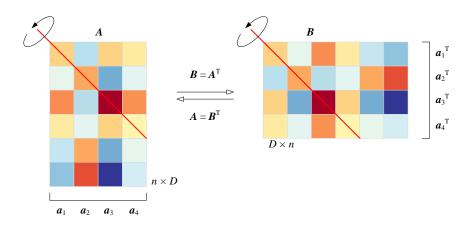


图 14. 矩阵转置

如图 14 所示,将矩阵 A 写成一组列向量:

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

矩阵 A 转置 A^{T} 可以展开写作:

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_{1}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{a}_{2}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{a}_{3}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{a}_{4}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}$$
(33)

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

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

矩阵转置的几个重要性质如下:

$$(\mathbf{A}^{\mathsf{T}})^{\mathsf{T}} = \mathbf{A}$$

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})^{\mathsf{T}} = \mathbf{A}^{\mathsf{T}} + \mathbf{B}^{\mathsf{T}}$$

$$(k\mathbf{A})^{\mathsf{T}} = k\mathbf{A}^{\mathsf{T}}$$

$$(\mathbf{A}\mathbf{B})^{\mathsf{T}} = \mathbf{B}^{\mathsf{T}}\mathbf{A}^{\mathsf{T}}$$

$$(\mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{C})^{\mathsf{T}} = \mathbf{C}^{\mathsf{T}}\mathbf{B}^{\mathsf{T}}\mathbf{A}^{\mathsf{T}}$$
(35)

等长列向量 a 和 b 的标量积等价于 a 的转置乘 b, 或 b 的转置乘 a:

$$\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{a} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \dots + a_n b_n \tag{36}$$

a 的模 (L^2 范数) 也可以写成 a 转置乘自身,再开方:

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

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。

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

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

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



Bk4_Ch3_10.py 计算矩阵转置。

3.8 矩阵逆:相当于除法运算

方阵 A 如果**可逆** (invertible),仅当存在矩阵 B 使得:

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

矩阵 A 的 $\dot{\mathbf{E}}$ (inverse) 写作 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:

$$(\mathbf{A}^{\mathsf{T}})^{-1} = (\mathbf{A}^{-1})^{\mathsf{T}}$$

$$(\mathbf{A}\mathbf{B})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$$

$$(\mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{C})^{-1} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$$

$$(k\mathbf{A})^{-1} = \frac{1}{k}\mathbf{A}^{-1}$$
(39)

其中,假设 $A \times B \times C \times AB$ 和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 A:

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

矩阵 A 的逆 A^{-1} 可以通过下式获得,

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

其中

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

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

|A| 被称作矩阵 A 行列式 (determinant)。

注意, 行列式值 |A| 不为 0 时, 矩阵 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 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 Ch3 11.py 展示如 Numpy 如何矩阵逆。





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_Ch3_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()。

3.9 迹: 主对角元素之和

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

```
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
```

$$\operatorname{tr}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^{n} a_{i,i} = a_{1,1} + a_{2,2} + \dots + a_{n,n}$$
(45)

举个例子,

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

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 Ch3 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:

$$tr(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = tr(\mathbf{A}) + tr(\mathbf{B})$$

$$tr(k\mathbf{A}) = k \cdot tr(\mathbf{A})$$

$$tr(\mathbf{A}^{T}) = tr(\mathbf{A})$$

$$tr(\mathbf{A}\mathbf{B}) = tr(\mathbf{B}\mathbf{A})$$
(47)

3.10 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:

$$\mathbf{A}_{n \sim D} \odot \mathbf{B}_{n \sim D} = \begin{bmatrix} a_{1,1} b_{1,1} & a_{1,2} b_{1,2} & \cdots & a_{1,D} b_{1,D} \\ a_{2,1} b_{2,1} & a_{2,2} b_{2,2} & \cdots & a_{2,D} b_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} b_{n,1} & a_{n,2} b_{n,2} & \cdots & a_{n,D} b_{n,D} \end{bmatrix}_{n \sim D}$$

$$(48)$$

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 所示为矩阵逐项积运算法则示意图。

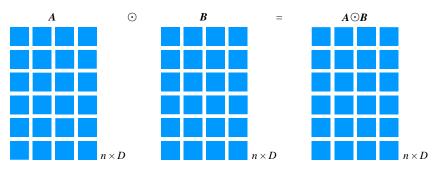


图 15. 矩阵逐项积



Bk4 Ch3 14.py 计算逐项积。

3.11 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 A 的行列式值可以表达为 |A| 或 $\det(A)$ 。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 A 根据一定的规则映射到一个标量。

一阶方阵的行列式值:

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

二阶方阵的行列式值:

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

$$(50)$$

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

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 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:

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

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。

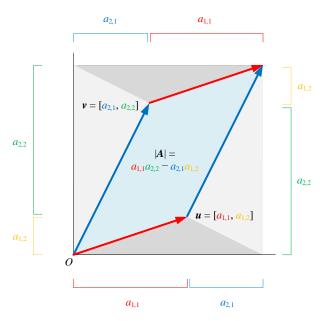


图 16. 二阶矩阵的行列式的几何意义



Bk4_Ch3_15.py 计算行列式值。

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

三阶方阵行列式值

三阶方阵的行列式值:

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

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

$$(52)$$

根据以上规律,可以发现 $n \times n$ 矩阵 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:

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

$$\det(\mathbf{A}\mathbf{B}) = \det(\mathbf{A}) \cdot \det(\mathbf{B})$$

$$\det(c\mathbf{A}_{n \times n}) = c^{n} \det(\mathbf{A})$$

$$\det(\mathbf{A}^{T}) = \det(\mathbf{A})$$

$$\det(\mathbf{A}^{n}) = \det(\mathbf{A})^{n}$$

$$\det(\mathbf{A}^{-1}) = \frac{1}{\det(\mathbf{A})}$$
(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:

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} a_2 & a_3 \\ b_2 & b_3 \end{vmatrix} \mathbf{i} - \begin{vmatrix} a_1 & a_3 \\ b_1 & b_3 \end{vmatrix} \mathbf{j} + \begin{vmatrix} a_1 & a_2 \\ b_1 & b_2 \end{vmatrix} \mathbf{k}$$

$$= (a_2b_3 - a_3b_2)\mathbf{i} + (a_3b_1 - a_1b_3)\mathbf{j} + (a_1b_2 - a_2b_1)\mathbf{k}$$
(56)

还用上一章的例子, 给定a和b向量:

$$a = -2i + j + k$$

$$b = i - 2j - k$$
(57)

 $a \times b$ 结果如下:

$$a \times b = \begin{vmatrix} i & j & k \\ -2 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & -1 \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ -2 & -1 \end{vmatrix} i - \begin{vmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -1 \end{vmatrix} j + \begin{vmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{vmatrix} k$$

$$= i - j + 3k$$
(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。