线性代数

一、基本知识

1. 本书中所有的向量都是列向量的形式：

$$\vec{\mathbf{x}}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T=\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\x_n\end{bmatrix}$$

   本书中所有的矩阵 $\mathbf{X}\in\mathbb{R}^{m\times n}$ 都表示为：

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}x_{1,1}&x_{1,2}&\cdots&x_{1,n}\\x_{2,1}&x_{2,2}&\cdots&x_{2,n}\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\x_{m,1}&x_{m,2}&\cdots&x_{m,n}\end{bmatrix}$$

   简写为：$(x_{i,j})_{m\times n}$ 或者 $[x_{i,j}]_{m\times n}$ 。

2. 矩阵的`F`范数：设矩阵 $\mathbf{A}=(a_{i,j})_{m\times n}$，则其`F`范数为：$||\mathbf{A}||_F=\sqrt{\sum_{i,j}a_{i,j}^2}$ 。

   它是向量的 L_2 范数的推广。

3. 矩阵的迹：设矩阵 $\mathbf{A}=(a_{i,j})_{m\times n}$，则$\mathbf{A}$的迹为： $tr(\mathbf{A})=\sum_i a_{i,i}$。

   迹的性质有：

   - $\mathbf{A}$ 的`F`范数等于$\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ 的迹的平方根：$||\mathbf{A}||_F=\sqrt{tr(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)}$ 。
   - $\mathbf{A}$ 的迹等于$\mathbf{A}^T$ 的迹：$tr(\mathbf{A})=tr(\mathbf{A}^T)$ 。
   - 交换律：假设 $\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{m\times n},\mathbf{B}\in\mathbb{R}^{n\times m}$，则有：$tr(\mathbf{A}\mathbf{B})=tr(\mathbf{B}\mathbf{A})$ 。
   - 结合律：$tr(\mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{C})=tr(\mathbf{C}\mathbf{A}\mathbf{B})=tr(\mathbf{B}\mathbf{C}\mathbf{A})$ 。

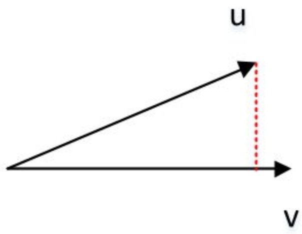
二、向量操作

1. 一组向量 $\vec{\mathbf{v}}_1,\vec{\mathbf{v}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{v}}_n$ 是线性相关的：指存在一组不全为零的实数 $a_1,a_2,\cdots,a_n$，使得：$\sum_{i=1}^n a_i\vec{\mathbf{v}}_i=\vec{\mathbf{0}}$ 。

   一组向量 $\vec{\mathbf{v}}_1,\vec{\mathbf{v}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{v}}_n$ 是线性无关的，当且仅当 $a_i=0,i=1,2,\cdots,n$ 时，才有：$\sum_{i=1}^n a_i\vec{\mathbf{v}}_i=\vec{\mathbf{0}}$ 。

2. 一个向量空间所包含的最大线性无关向量的数目，称作该向量空间的维数。

3. 三维向量的点积：$\vec{\mathbf{u}}\cdot\vec{\mathbf{v}}=u_xv_x+u_yv_y+u_zv_z=|\vec{\mathbf{u}}||\vec{\mathbf{v}}|\cos(\vec{\mathbf{u}},\vec{\mathbf{v}})$ 。



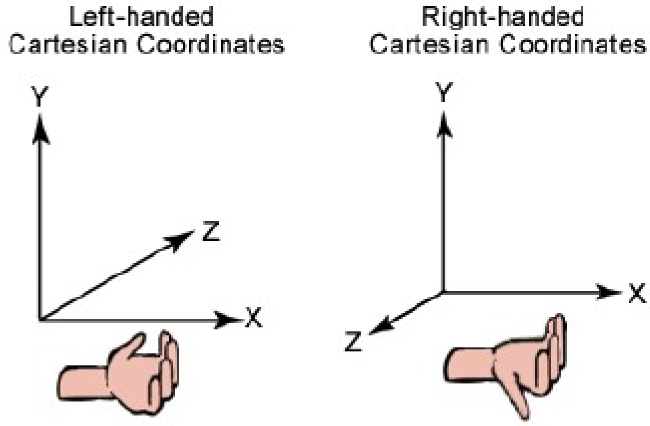
4. 三维向量的叉积：

$$\vec{\mathbf{w}} = \vec{\mathbf{u}} \times \vec{\mathbf{v}} = \begin{bmatrix} \vec{\mathbf{i}} & \vec{\mathbf{j}} & \vec{\mathbf{k}} \\ u_x & u_y & u_z \\ v_x & v_y & v_z \end{bmatrix}$$

其中 $\vec{\mathbf{i}}, \vec{\mathbf{j}}, \vec{\mathbf{k}}$ 分别为 x, y, z 轴的单位向量。

$$\vec{\mathbf{u}} = u_x \vec{\mathbf{i}} + u_y \vec{\mathbf{j}} + u_z \vec{\mathbf{k}}, \quad \vec{\mathbf{v}} = v_x \vec{\mathbf{i}} + v_y \vec{\mathbf{j}} + v_z \vec{\mathbf{k}}$$

- $\vec{\mathbf{u}}$ 和 $\vec{\mathbf{v}}$ 的叉积垂直于 $\vec{\mathbf{u}}, \vec{\mathbf{v}}$ 构成的平面，其方向符合右手规则。
- 叉积的模等于 $\vec{\mathbf{u}}, \vec{\mathbf{v}}$ 构成的平行四边形的面积
- $\vec{\mathbf{u}} \times \vec{\mathbf{v}} = -\vec{\mathbf{v}} \times \vec{\mathbf{u}}$
- $\vec{\mathbf{u}} \times (\vec{\mathbf{v}} \times \vec{\mathbf{w}}) = (\vec{\mathbf{u}} \cdot \vec{\mathbf{w}})\vec{\mathbf{v}} - (\vec{\mathbf{u}} \cdot \vec{\mathbf{v}})\vec{\mathbf{w}}$



5. 三维向量的混合积：

$$\begin{aligned} [\vec{\mathbf{u}}\ \vec{\mathbf{v}}\ \vec{\mathbf{w}}] &= (\vec{\mathbf{u}} \times \vec{\mathbf{v}}) \cdot \vec{\mathbf{w}} = \vec{\mathbf{u}} \cdot (\vec{\mathbf{v}} \times \vec{\mathbf{w}}) \\ &= \begin{vmatrix} u_x & u_y & u_z \\ v_x & v_y & v_z \\ w_x & w_y & w_z \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} u_x & v_x & w_x \\ u_y & v_y & w_y \\ u_z & v_z & w_z \end{vmatrix} \end{aligned}$$

其物理意义为：以 $\vec{\mathbf{u}}, \vec{\mathbf{v}}, \vec{\mathbf{w}}$ 为三个棱边所围成的平行六面体的体积。 当 $\vec{\mathbf{u}}, \vec{\mathbf{v}}, \vec{\mathbf{w}}$ 构成右手系时，该平行六面体的体积为正号。

6. 两个向量的并矢：给定两个向量 $\vec{\mathbf{x}} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T, \vec{\mathbf{y}} = (y_1, y_2, \cdots, y_m)^T$ ，则向量的并矢记作：

$$\vec{\mathbf{x}}\vec{\mathbf{y}} = \begin{bmatrix} x_1 y_1 & x_1 y_2 & \cdots & x_1 y_m \\ x_2 y_1 & x_2 y_2 & \cdots & x_2 y_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_n y_1 & x_n y_2 & \cdots & x_n y_m \end{bmatrix}$$

也记作 $\vec{\mathbf{x}} \otimes \vec{\mathbf{y}}$ 或者 $\vec{\mathbf{x}}\vec{\mathbf{y}}^T$。

三、矩阵运算

1. 给定两个矩阵 $\mathbf{A} = (a_{i,j}) \in \mathbb{R}^{m\times n}, \mathbf{B} = (b_{i,j}) \in \mathbb{R}^{m\times n}$ ，定义：
    - 阿达马积 `Hadamard product` （又称作逐元素积）：

$$\mathbf{A} \circ \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{1,1}b_{1,1} & a_{1,2}b_{1,2} & \cdots & a_{1,n}b_{1,n} \\ a_{2,1}b_{2,1} & a_{2,2}b_{2,2} & \cdots & a_{2,n}b_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1}b_{m,1} & a_{m,2}b_{m,2} & \cdots & a_{m,n}b_{m,n} \end{bmatrix}$$

    - 克罗内积 `Kronnecker product` ：

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{1,1}\mathbf{B} & a_{1,2}\mathbf{B} & \cdots & a_{1,n}\mathbf{B} \\ a_{2,1}\mathbf{B} & a_{2,2}\mathbf{B} & \cdots & a_{2,n}\mathbf{B} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1}\mathbf{B} & a_{m,2}\mathbf{B} & \cdots & a_{m,n}\mathbf{B} \end{bmatrix}$$

2. 设 $\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{a}}, \vec{\mathbf{b}}, \vec{\mathbf{c}}$ 为 n 阶向量， $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{X}$ 为 n 阶方阵，则有：

$$\frac{\partial(\vec{\mathbf{a}}^T\vec{\mathbf{x}})}{\partial\vec{\mathbf{x}}} = \frac{\partial(\vec{\mathbf{x}}^T\vec{\mathbf{a}})}{\partial\vec{\mathbf{x}}} = \vec{\mathbf{a}}$$

$$\frac{\partial(\vec{\mathbf{a}}^T\mathbf{X}\vec{\mathbf{b}})}{\partial\mathbf{X}} = \vec{\mathbf{a}}\vec{\mathbf{b}}^T = \vec{\mathbf{a}} \otimes \vec{\mathbf{b}} \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

$$\frac{\partial(\vec{\mathbf{a}}^T\mathbf{X}^T\vec{\mathbf{b}})}{\partial\mathbf{X}} = \vec{\mathbf{b}}\vec{\mathbf{a}}^T = \vec{\mathbf{b}} \otimes \vec{\mathbf{a}} \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

$$\frac{\partial(\vec{\mathbf{a}}^T\mathbf{X}\vec{\mathbf{a}})}{\partial\mathbf{X}} = \frac{\partial(\vec{\mathbf{a}}^T\mathbf{X}^T\vec{\mathbf{a}})}{\partial\mathbf{X}} = \vec{\mathbf{a}} \otimes \vec{\mathbf{a}}$$

$$\frac{\partial(\vec{\mathbf{a}}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\vec{\mathbf{b}})}{\partial\mathbf{X}} = \mathbf{X}(\vec{\mathbf{a}} \otimes \vec{\mathbf{b}} + \vec{\mathbf{b}} \otimes \vec{\mathbf{a}})$$

$$\frac{\partial[(\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{a}})^T\mathbf{C}(\mathbf{B}\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{b}})]}{\partial\vec{\mathbf{x}}} = \mathbf{A}^T\mathbf{C}(\mathbf{B}\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{b}}) + \mathbf{B}^T\mathbf{C}(\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{a}})$$

$$\frac{\partial(\vec{\mathbf{x}}^T\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}})}{\partial\vec{\mathbf{x}}} = (\mathbf{A}+\mathbf{A}^T)\vec{\mathbf{x}}$$

$$\frac{\partial[(\mathbf{X}\vec{\mathbf{b}}+\vec{\mathbf{c}})^T\mathbf{A}(\mathbf{X}\vec{\mathbf{b}}+\vec{\mathbf{c}})]}{\partial\mathbf{X}} = (\mathbf{A}+\mathbf{A}^T)(\mathbf{X}\vec{\mathbf{b}}+\vec{\mathbf{c}})\vec{\mathbf{b}}^T$$

$$\frac{\partial(\vec{\mathbf{b}}^T\mathbf{X}^T\mathbf{A}\mathbf{X}\vec{\mathbf{c}})}{\partial\mathbf{X}}=\mathbf{A}^T\mathbf{X}\vec{\mathbf{b}}\vec{\mathbf{c}}^T+\mathbf{A}\mathbf{X}\vec{\mathbf{c}}\vec{\mathbf{b}}^T$$

3. 如果 f 是一元函数，则：
    - 其逐元向量函数为：$f(\vec{\mathbf{x}})=(f(x_1),f(x_2),\cdots,f(x_n))^T$ 。
    - 其逐矩阵函数为：

$$f(\mathbf{X})=\begin{bmatrix} f(x_{1,1}) & f(x_{1,2}) & \cdots & f(x_{1,n}) \\ f(x_{2,1}) & f(x_{2,2}) & \cdots & f(x_{2,n}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f(x_{m,1}) & f(x_{m,2}) & \cdots & f(x_{m,n}) \end{bmatrix}$$

    - 其逐元导数分别为：

$$f'(\vec{\mathbf{x}})=(f'(x1),f'(x2),\cdots,f'(x_n))^T$$
$$f'(\mathbf{X})=\begin{bmatrix} f'(x_{1,1}) & f'(x_{1,2}) & \cdots & f'(x_{1,n}) \\ f'(x_{2,1}) & f'(x_{2,2}) & \cdots & f'(x_{2,n}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f'(x_{m,1}) & f'(x_{m,2}) & \cdots & f'(x_{m,n}) \end{bmatrix}$$

4. 各种类型的偏导数：
    - 标量对标量的偏导数：$\frac{\partial u}{\partial v}$ 。
    - 标量对向量（n 维向量）的偏导数：$\frac{\partial u}{\partial \vec{\mathbf{v}}}=(\frac{\partial u}{\partial v_1},\frac{\partial u}{\partial v_2},\cdots,\frac{\partial u}{\partial v_n})^T$ 。
    - 标量对矩阵($m\times n$ 阶矩阵)的偏导数：

$$\frac{\partial u}{\partial \mathbf{V}}=\begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial V_{1,1}} & \frac{\partial u}{\partial V_{1,2}} & \cdots & \frac{\partial u}{\partial V_{1,n}} \\ \frac{\partial u}{\partial V_{2,1}} & \frac{\partial u}{\partial V_{2,2}} & \cdots & \frac{\partial u}{\partial V_{2,n}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial u}{\partial V_{m,1}} & \frac{\partial u}{\partial V_{m,2}} & \cdots & \frac{\partial u}{\partial V_{m,n}} \end{bmatrix}$$

    - 向量（m 维向量）对标量的偏导数：$\frac{\partial \vec{\mathbf{u}}}{\partial v}=(\frac{\partial u_1}{\partial v},\frac{\partial u_2}{\partial v},\cdots,\frac{\partial u_m}{\partial v})^T$ 。
    - 向量（m 维向量）对向量 (n 维向量) 的偏导数（雅可比矩阵，行优先）

$$\frac{\partial \vec{\mathbf{u}}}{\partial \vec{\mathbf{v}}}=\begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial v_1} & \frac{\partial u_1}{\partial v_2} & \cdots & \frac{\partial u_1}{\partial v_n} \\ \frac{\partial u_2}{\partial v_1} & \frac{\partial u_2}{\partial v_2} & \cdots & \frac{\partial u_2}{\partial v_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial u_m}{\partial v_1} & \frac{\partial u_m}{\partial v_2} & \cdots & \frac{\partial u_m}{\partial v_n} \end{bmatrix}$$

      如果为列优先，则为上面矩阵的转置。
    - 矩阵($m\times n$ 阶矩阵)对标量的偏导数

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial v} = \begin{bmatrix} \frac{\partial U_{1,1}}{\partial v} & \frac{\partial U_{1,2}}{\partial v} & \cdots & \frac{\partial U_{1,n}}{\partial v} \\ \frac{\partial U_{2,1}}{\partial v} & \frac{\partial U_{2,2}}{\partial v} & \cdots & \frac{\partial U_{2,n}}{\partial v} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial U_{m,1}}{\partial v} & \frac{\partial U_{m,2}}{\partial v} & \cdots & \frac{\partial U_{m,n}}{\partial v} \end{bmatrix}$$

5. 对于矩阵的迹，有下列偏导数成立：

$$\frac{\partial[tr(f(\mathbf{X}))]}{\partial \mathbf{X}} = (f'(\mathbf{X}))^T$$

$$\frac{\partial[tr(\mathbf{AXB})]}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{A}^T\mathbf{B}^T$$

$$\frac{\partial[tr(\mathbf{AX}^T\mathbf{B})]}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{BA}$$

$$\frac{\partial[tr(\mathbf{A} \otimes \mathbf{X})]}{\partial \mathbf{X}} = tr(\mathbf{A})\mathbf{I}$$

$$\frac{\partial[tr(\mathbf{AXBX})]}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{A}^T\mathbf{X}^T\mathbf{B}^T + \mathbf{B}^T\mathbf{X}\mathbf{A}^T$$

$$\frac{\partial[tr(\mathbf{X}^T\mathbf{BXC})]}{\partial \mathbf{X}} = (\mathbf{B}^T + \mathbf{B})\mathbf{XCC}^T$$

$$\frac{\partial[tr(\mathbf{C}^T\mathbf{X}^T\mathbf{BXC})]}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{BXC} + \mathbf{B}^T\mathbf{XC}^T$$

$$\frac{\partial[tr(\mathbf{AXBX}^T\mathbf{C})]}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{A}^T\mathbf{C}^T\mathbf{XB}^T + \mathbf{CAXB}$$

$$\frac{\partial[tr((\mathbf{AXB} + \mathbf{C})(\mathbf{AXB} + \mathbf{C}))]}{\partial \mathbf{X}} = 2\mathbf{A}^T(\mathbf{AXB} + \mathbf{C})\mathbf{B}^T$$

6. 假设 $\mathbf{U} = f(\mathbf{X})$ 是关于 $\mathbf{X}$ 的矩阵值函数（$f : \mathbb{R}^{m\times n} \to \mathbb{R}^{m\times n}$），且 $g(\mathbf{U})$ 是关于 $\mathbf{U}$ 的实值函数（ $g : \mathbb{R}^{m\times n} \to \mathbb{R}$），则下面链式法则成立：

$$
\frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{X}} = \left(\frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{i,j}}\right)_{m\times n} = \begin{bmatrix} \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{1,1}} & \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{1,2}} & \cdots & \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{1,n}} \\ \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{2,1}} & \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{2,2}} & \cdots & \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{2,n}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{m,1}} & \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{m,2}} & \cdots & \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{m,n}} \end{bmatrix}
$$

$$
= \left(\sum_k \sum_l \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial u_{k,l}} \frac{\partial u_{k,l}}{\partial x_{i,j}}\right)_{m\times n} = \left(tr\left[\left(\frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}}\right)^T \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_{i,j}}\right]\right)_{m\times n}
$$

四、特殊函数

1. 这里给出机器学习中用到的一些特殊函数。

4.1 sigmoid 函数

1. `sigmoid`函数：

$$
\sigma(x) = \frac{1}{1+\exp(-x)}
$$

   - 该函数可以用于生成二项分布的 ϕ 参数。
   - 当 x 很大或者很小时，该函数处于饱和状态。此时函数的曲线非常平坦，并且自变量的一个较大的变化只能带来函数值的一个微小的变化，即：导数很小。

4.2 softplus 函数

1. `softplus`函数：$\zeta(x) = \log(1+\exp(x))$ 。
   - 该函数可以生成正态分布的 σ^2 参数。
   - 它之所以称作`softplus`，因为它是下面函数的一个光滑逼近：$x^+ = \max(0, x)$ 。

2. 如果定义两个函数：

$$
x^+ = \max(0, x) \\
x^- = \max(0, -x)
$$