法律声明

- □本课件包括演示文稿、示例、代码、题库、视频和声音等内容,小象学院和主讲老师拥有完全知识产权的权利;只限于善意学习者在本课程使用,不得在课程范围外向任何第三方散播。任何其他人或机构不得盗版、复制、仿造其中的创意及内容,我们保留一切通过法律手段追究违反者的权利。
- □ 课程详情请咨询
 - 微信公众号:小象
 - 新浪微博: ChinaHadoop

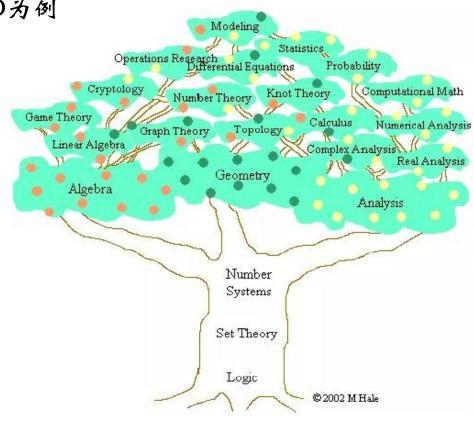


矩阵和线性代数



主要内容

- □ 矩阵
 - 线性代数是有用的:以SVD为例
 - 矩阵的乘法/状态转移矩阵
 - 矩阵和向量组
- □ 特征值和特征向量
 - 对称阵、正交阵、正定阵
 - 数据白化
 - 正交基
 - QR 分解/LFM
- □ 矩阵求导
 - 向量对向量求导
 - 标量对向量求导
 - 标量对矩阵求导



- □ 奇异值分解(Singular Value Decomposition)是一种重要的矩阵分 解方法,可以看做对称方阵在任意矩阵上的推广。
 - Singular:突出的、奇特的、非凡的
 - 似乎更应该称之为"优值分解"
- 假设A是一个m×n阶实矩阵,则存在一个分解使得:

$$A_{m \times n} = U_{m \times m} \Sigma_{m \times n} V_{n \times n}^{T}$$

- 通常将奇异值由大而小排列。这样,Σ便能由A唯一确定了。
- 与特征值、特征向量的概念相对应:
 - Σ 对角线上的元素称为矩阵A的奇异值;
 - U的第i列称为A的关于σi的左奇异向量;
 - V的第i列称为A的关于σi的右奇异向量。

SVD举例 $A_{m \times n} = U_{m \times m} \Sigma_{m \times n} V_{n \times n}^{T}$

□ 已知4×5阶实矩阵A, 求A的SVD分解:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$U = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \Sigma = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{5} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad V^{T} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \sqrt{0.2} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{0.8} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\sqrt{0.8} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{0.2} \end{bmatrix}$$

□ 矩阵U和V都是单位正交方阵: UTU=I, VTV=I

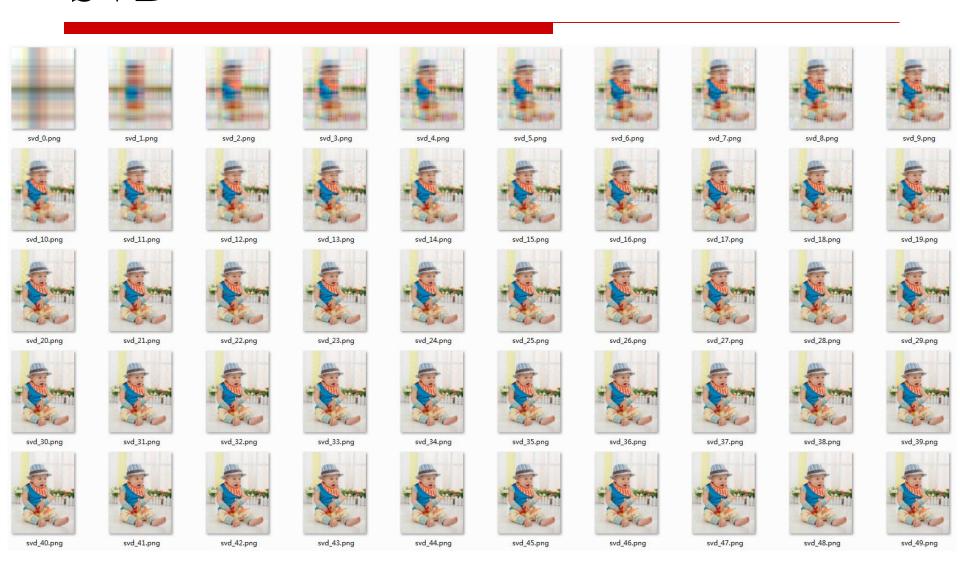
SVD

```
| def restore(sigma, u, v, K): # 奇异值、左特征向量、右特征向量 print K
| m = len(u)
| n = len(v[0])
| a = np.zeros((m, n))
| for k in range(K+1):
| for i in range(m):
| a[i] += sigma[k] * u[i][k] * v[k]
| b = a.astype('uint8')
| Image.fromarray(b).save("svd_" + str(K) + ".png")
```

奇异值分解-效果



SVD



线性代数

- □ 定义: 方阵的行列式
 - 1阶方阵的行列式为该元素本身
 - n阶方阵的行列式等于它的任一行(或列)的各元 素与其对应的代数余子式乘积之和。

方阵的行列式

□1×1的方阵,其行列式等于该元素本身。

$$A = (a_{11}) \qquad |A| = a_{11}$$

□ 2×2的方阵,其行列式用主对角线元素乘积 减去次对角线元素的乘积。

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

$$|A| = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

方阵的行列式

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

□ 根据"主对角线元素聚积减去次对角线元素 的聚积"的原则,得:

$$|A| = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33} - a_{13}a_{22}a_{31}$$

代数余子式

- \square 在一个n阶行列式A中,把(i,j)元素 a_{ij} 所在的第i 行和第j列划去后,留下的n-1阶方阵的行列式叫做元素 a_{ij} 的余子式,记作 M_{ij} 。
- \square 代数余子式: $A_{ij} = (-1)^{i+j} M_{ij}$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \qquad \forall 1 \le j \le n, \ |A| = \sum_{i=1}^{n} a_{ij} \cdot (-1)^{i+j} M_{ij}$$

$$\forall 1 \le i \le n, \ |A| = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} \cdot (-1)^{i+j} M_{ij}$$

 $|A| = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33} - a_{13}a_{22}a_{31}$

伴随矩阵

 \square 对于 $n \times n$ 方阵的任意元素 a_{ij} 都有各自的代数 余子式 $A_{ij} = (-1)^{i+j} M_{ij}$,构造 $n \times n$ 的方阵 A^* :

$$A^* = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} & \cdots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \cdots & A_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{1n} & A_{2n} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

- □ A*称为A的伴随矩阵。
 - 注意A_{ij}位于A*的第j行第i列

方阵的逆 $A \cdot A^{\dagger} = |A| \cdot I$

□ 由前述结论:
$$\forall 1 \leq i \leq n$$
, $|A| = \sum_{i=1}^{n} a_{ij} \cdot (-1)^{i+j} M_{ij}$

$$\square$$
 根据: $\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots \\ a_{n-1} & a_{n-1} & \cdots \end{pmatrix}$

$$A = \begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}$$

人根据:
$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad A^* = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} & \cdots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \cdots & A_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{1n} & A_{2n} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

口 计算:
$$A \cdot A^* = \begin{pmatrix} |A| & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & |A| & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & |A| \end{pmatrix} = |A| \cdot I \Rightarrow A^{-1} = \frac{1}{|A|} A^*$$

思考:该等式有什么用?

范德蒙行列式Vandermonde

□ 证明范德蒙行列式Vandermonde:

$$D_{n} = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_{1} & x_{2} & x_{3} & \cdots & x_{n} \\ x_{1}^{2} & x_{2}^{2} & x_{3}^{2} & \cdots & x_{n}^{2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{1}^{n-1} & x_{2}^{n-1} & x_{3}^{n-1} & \cdots & x_{n}^{n-1} \end{vmatrix} = \prod_{i,j(n \geq i > j \geq 1)} (x_{i} - x_{j})$$

- 提示:数学归纳法
- 注:参考Lagrange/Newton插值法

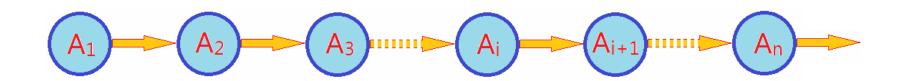
矩阵的乘法

□ A为m×s阶的矩阵, B为s×n阶的矩阵, 那么, C=A×B是m×n阶的矩阵, 其中,

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^{s} a_{ik} b_{kj}$$

矩阵模型

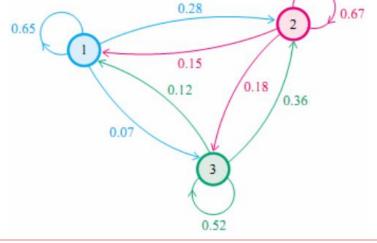
- □考虑某随机过程π,它的状态有n个,用1~n 表示。记在当前时刻t时位于i状态,它在t+1 时刻位于j状态的概率为P(i,j)=P(j|i);
 - 即状态转移的概率只依赖于前一个状态。



举例

□假定按照经济状况将人群分成上、中、下三个阶层,用1、2、3表示。假定当前处于某阶层只和上一代有关,即:考察父代为第i阶层,则子代为第j阶层的概率。假定为如下转移概率矩阵:

P子代(0.65)0.280.07(0.15)0.670.18(0.12)0.360.52



概率转移矩阵

□ 第n+1代中处于第j个阶层的概率为:

$$\pi(X_{n+1} = j) = \sum_{i=1}^{K} \pi(X_n = i) \cdot P(X_{n+1} = j \mid X_n = i)$$

$$\Rightarrow \pi^{(n+1)} = \pi^{(n)} \cdot P$$

- □ 因此,矩阵P即为(条件)概率转移矩阵。
 - 第i行元素表示:在上一个状态为i时的分布概率,即:每一行元素的和为1。
- □ 思考:初始概率分布π对最终分布的影响?

探索: 初始概率π=[0.21, 0.68, 0.1]迭代

第n代	第1阶层	第2阶层	第3阶层
0	0.21	0.68	0.11
1	0.252	0.554	0.194
2	0.27	0.512	0.218
3	0.278	0.497	0.225
4	0.282	0.49	0.226
5	0.285	0.489	0.225
6	0.286	0.489	0.225
7	0.286	0.489	0.225
8	0.286	0.488	0.225
9	0.286	0.489	0.225
10	0.286	0.489	0.225

初始概率 π = [0.75, 0.15, 0.1]的迭代结果

第n代	第1阶层	第2阶层	第3阶层
0	0.75	0.15	0.1
1	0.522	0.347	0.132
2	0.407	0.426	0.167
3	0.349	0.459	0.192
4	0.318	0.475	0.207
5	0.303	0.482	0.215
6	0.295	0.485	0.22
7	0.291	0.487	0.222
8	0.289	0.488	0.225
9	0.286	0.489	0.225
10	0.286	0.489	0.225

- □ 初始概率不同,但经过若干次迭代, π最终 稳定收敛在某个分布上。
- □从而,这是转移概率矩阵P的性质,而非初始分布的性质。事实上,上述矩阵P的n次幂,每行都是(0.286,0.489,0.225), n>20
- \square 如果一个非周期马尔科夫随机过程具有转移概率矩阵P,且它的任意两个状态都是连通的,则 $\lim_{n\to\infty}P_{ij}^n$ 存在,记做 $\lim_{n\to\infty}P_{ij}^n=\pi(j)$ 。

平稳分布

□ 事实上, 下面两种写法等价:

$$\lim_{n\to\infty} P_{ij}^n = \pi(j) \qquad \qquad \lim_{n\to\infty} P^n = \begin{bmatrix} \pi(1) & \pi(2) & \dots & \pi(n) \\ \pi(1) & \pi(2) & \dots & \pi(n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \pi(1) & \pi(2) & \dots & \pi(n) \end{bmatrix}$$

- □ 同时,若某概率分布πP=π, 说明
 - 该多项分布π是状态转移矩阵P的平稳分布;
 - 线性方程xP=x的非负解为π,而Pn唯一,因此π 是线性方程xP=x的唯一非负解。
 - 该问题将在马尔科夫模型中继续探讨。

思考

- □ 根据定义来计算 C=A×B,需要m*n*s次乘法。
 - 即:若A、B都是n阶方阵,C的计算时间复杂度为O(n³)
 - 问:可否设计更快的算法?
- □ 三个矩阵A、B、C的阶分别是 a_0 × a_1 , a_1 × a_2 , a_2 × a_3 , 从而(A×B)×C和A×(B×C)的乘法次数是 $a_0a_1a_2+a_0a_2a_3$ 、 $a_1a_2a_3+a_0a_1a_3$,二者一般情况是不相等的。
 - \blacksquare 问:给定n个矩阵的连乘积: $A_1 \times A_2 \times A_3 \dots \times A_n$,如何添加括号来改变计算次序,使得乘法的计算量最小?

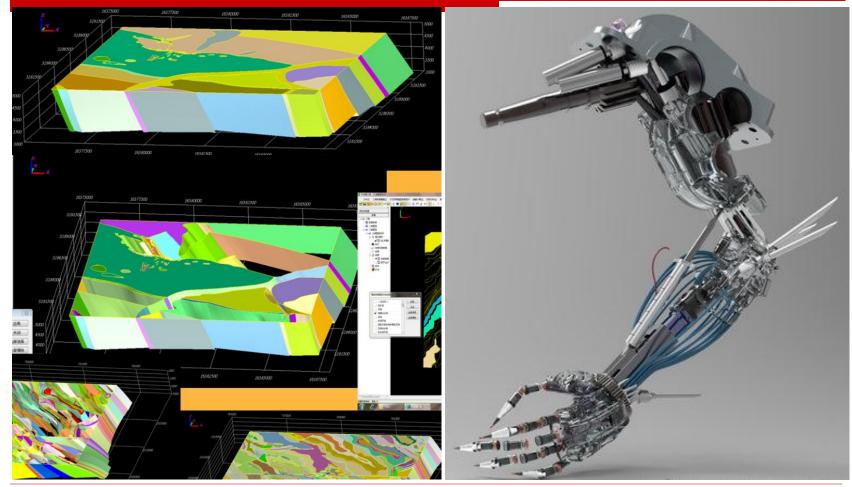
Code

```
//p[0...n]存储了n+1个数,其中,(p[i-1],p[i])是矩阵i的阶;
_//s[i][j]记录A[i...j]从什么位置断开; m[i][j]记录数乘最小值
□ void MatrixMultiply(int* p, int n, int** m, int** s)
     int r, i, j, k, t;
     for (i = 1; i \le n; i++)
         m[i][i] = 0:
     //r个连续矩阵的连乘:上面的初始化,相当于r=1
     for (r = 2; r \le n; r++)
         for (i = 1; i \le n-r+1; i++)
            j=i+r-1;
            m[i][j] = m[i+1][j] + p[i-1]*p[i]*p[j];
            s[i][j] = i;
            for (k = i+1; k < j; k++)
                t = m[i][k] + m[k+1][j] + p[i-1]*p[k]*p[j];
                if(t < m[i][i])
                    m[i][j] = t;
                    s[i][j] = k;
```

矩阵和向量的乘法

- \square A为m×n的矩阵, x为n×1的列向量,则Ax 为m×1的列向量,记 $\vec{y} = A \cdot \vec{x}$
- □由于n维列向量和n维空间的点一一对应,上 式实际给出了从n维空间的点到m为空间点的 线性变换。
 - 旋转、平移(齐次坐标下)
- □特殊的,若m=n,且Ax完成了n维空间内的线性变换。

矩阵和向量的乘法应用



矩阵的秩

- □ 在m×n矩阵A中,任取k行k列,不改变这k²个元素 在A中的次序,得到k阶方阵,称为矩阵A的k阶子 式。
 - 显然, $m \times n$ 矩 阵A的k阶子式有 $C_m^k C_n^k \uparrow$ 。
- □ 设在矩阵A中有一个不等于0的r阶子式D,且所有r+1阶子式(如果存在的话)全等于0,那么,D称为矩阵A的最高阶非零子式,r称为矩阵A的秩,记做R(A)=r。
 - n×n的可逆矩阵,秩为n
 - 可逆矩阵又称满秩矩阵
 - 矩阵的秩等于它行(列)向量组的秩

秩与线性方程组的解的关系

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases} \Rightarrow A\vec{x} = \vec{b}$$

- □ 对于n元线性方程组Ax=b,
 - 无解的充要条件是R(A)<R(A,b)
 - 有唯一解的充要条件是R(A)=R(A,b)=n
 - 有无限多解的充要条件是R(A)=R(A,b)<n

推论

- □ Ax=0有非零解的充要条件是R(A)<n
- □ Ax=b有解的充要条件是R(A)=R(A,b)

向量组等价

- □ 向量b能由向量组 $A:a_1,a_2,...,a_m$ 线性表示的充要条件是矩阵 $A=(a_1,a_2,...a_m)$ 的秩等于矩阵 $B=(a_1,a_2,...a_m,b)$ 的秩。
- □设有两个向量组A:a₁,a₂,...,a_m及B:b₁,b₂,...,b_n,若B组的向量都能由向量组A线性表示,则称向量组B能由向量组A线性表示。若向量组A与向量组B能相互线性表示,则称两个向量组等价。

系数矩阵

- □ 将向量组A和B所构成的矩阵依次记做 $A=(a_1,a_2,...,a_m)$ 和 $B=(b_1,b_2,...,b_n)$, B组能由A组 线性表示,即对每个向量 b_i ,存在 k_{1j} , k_{2j} ,··· k_{mj}
- □ 使得

$$b_{j} = k_{1j}a_{1} + k_{2j}a_{2} + \dots + k_{mj}a_{m} = \begin{pmatrix} a_{1} & a_{2} & \dots & a_{m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_{1j} \\ k_{2j} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$(b_1 \quad b_2 \quad \cdots \quad b_n) = (a_1 \quad a_2 \quad \cdots$$

以而得到系数矩阵K
$$(b_1 \ b_2 \ \cdots \ b_n) = (a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_m) \begin{pmatrix} k_{11} \ k_{12} \cdots k_{1n} \\ k_{21} \ k_{22} \cdots k_{2n} \\ \vdots \ \vdots \ \ddots \ \vdots \\ k_{m1} \ k_{m2} \cdots k_{mn} \end{pmatrix}$$

对C=AB的重认识

- □由此可知,若C=A×B,则矩阵C的列向量能由A的列向量线性表示,B即为这一表示的系数矩阵。
 - 对偶的,若C=A×B,则矩阵C的行向量能由B 的行向量线性表示,A即为这一表示的系数矩阵
- 口 向量组B: $b_1,b_2,...,b_n$ 能由向量组A: $a_1,a_2,...,a_m$ 线性表示的充要条件是矩阵A= $(a_1,a_2,...,a_m)$ 的 秩等于矩阵(A,B)= $(a_1,a_2,...,a_m,b_1,b_2,...,b_n)$ 的秩,即: R(A)=R(A,B)。

正交阵

- □ 若n阶矩阵A满足A^TA=I,成A为正交矩阵, 简称正交阵。
 - A是正交阵的充要条件: A的列(行)向量都是单位向量, 且两两正交。
- □ A是正交阵, x为向量,则A·x称作正交变换。
 - 正交变换不改变向量长度

思考

- □ 若A、B都是n阶正交阵,那么,A×B是正交 阵吗?
- □ 正交阵和对称阵,能够通过何种操作获得一 定意义下的联系?

特征值和特征向量

- □ A是n阶矩阵,若数λ和n维非0列向量x满足 Ax=λx,那么,数λ称为A的特征值,x称为A 的对应于特征值λ的特征向量。
 - 根据定义,立刻得到(A-λI)x=0,令关于λ的多项式|A-λI|为0,方程|A-λI|=0的根为A的特征值;将根λ₀带入方程组(A-λI)x=0,求得到的非零解,即λ₀对应的特征向量。

特征值的性质

- □ 设n阶矩阵 $A=(a_{ij})$ 的特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,...\lambda_n,$ 则
- \square $\lambda_1 + \lambda_2 + ... + \lambda_n = a_{11} + a_{22} + ... + a_{nn}$
- \square $\lambda_1 \lambda_2 ... \lambda_n = |A|$
 - 矩阵A主行列式的元素和,称作矩阵A的迹。

思考

- □ 已知\是方阵A的特征值,
- □则
 - λ²是A²的特征值
 - A可逆时, λ-1是A-1的特征值。
 - 提示:定义

不同特征值对应的特征向量

□ 设 $\lambda_1,\lambda_2,...,\lambda_m$ 是方阵A的m个特征值, $p_1,p_2,...,p_m$ 是依次与之对应的特征向量,若 $\lambda_1,\lambda_2,...,\lambda_m$ 各不相等,则 $p_1,p_2,...,p_m$ 线性无关。

□ 总结与思考

- 不同特征值对应的特征向量,线性无关。
- 若方阵A是对称阵呢?结论是否会加强?
 - □ 协方差矩阵、二次型矩阵、无向图邻接矩阵等:对称阵

引理

- □实对称阵的特征值是实数
 - \blacksquare 设复数 λ 为对称阵A的特征值,复向量x为对应的特征向量,即 $Ax=\lambda x(x\neq 0)$
 - 用 $\overline{\lambda}$ 表示 λ 的共轭复数, 基示X 的共轭复向量, \overline{A} 两 A 是实矩阵,有 \overline{A} = A
 - 下面给出证明过程。

证明

$$\overline{x}^{T}(Ax) = \overline{x}^{T} \lambda x = \lambda \overline{x}^{T} x$$

$$\overline{x}^{T}(Ax) = (\overline{x}^{T} A^{T}) x = (A\overline{x})^{T} x = (\overline{\lambda} \overline{x})^{T} x = \overline{\lambda} \overline{x}^{T} x$$

$$\lambda \overline{x}^T x = \overline{\lambda} \overline{x}^T x \Longrightarrow (\lambda - \overline{\lambda}) \overline{x}^T x = 0$$

$$\bar{x}^T x = \sum_{i=1}^n \bar{x}_i x_i = \sum_{i=1}^n |x_i|^2 \neq 0$$

所以
$$\lambda - \overline{\lambda} = 0 \Rightarrow \lambda = \overline{\lambda}$$

利用上述结论很快得到

□ 将实数λ带入方程组(A-λI)x=0, 该方程组为实系数方程组, 因此, 实对称阵的特征向量可以取实向量。

实对称阵不同特征值的特征向量正交

- \square 令实对称矩阵为A,其两个不同的特征值 $\lambda_1\lambda_2$ 对应的特征向量分别是 $\mu_1\mu_2$;
 - λ₁λ₂ μ₁μ₂都是实数或是实向量。

$$\begin{cases} A\mu_{1} = \lambda_{1}\mu_{1} \\ A\mu_{2} = \lambda_{2}\mu_{2} \Rightarrow \mu_{1}^{T} \underline{A}\mu_{2} = \mu_{1}^{T} \underline{\lambda_{2}\mu_{2}} \end{cases}$$

$$\Rightarrow (A^{T}\mu_{1})^{T}\mu_{2} = \lambda_{2}\mu_{1}^{T}\mu_{2} \Rightarrow (\underline{A}\mu_{1})^{T}\mu_{2} = \lambda_{2}\mu_{1}^{T}\mu_{2}$$

$$\Rightarrow (\underline{\lambda_{1}\mu_{1}})^{T}\mu_{2} = \lambda_{2}\mu_{1}^{T}\mu_{2}$$

$$\Rightarrow \lambda_{1}\mu_{1}^{T}\mu_{2} = \lambda_{2}\mu_{1}^{T}\mu_{2}$$

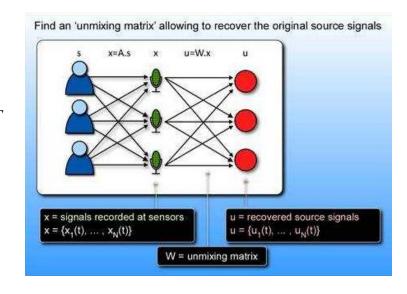
$$\Rightarrow \lambda_{1}\mu_{1}^{T}\mu_{2} = \lambda_{2}\mu_{1}^{T}\mu_{2}$$

$$\xrightarrow{\lambda_{1} \neq \lambda_{2}} \mu_{1}^{T}\mu_{2} = 0$$

最终结论

- $lacksymbol{\square}$ 设A为n阶对称阵,则必有正交阵P,使得 $P^{-1}AP=P^TAP=\Lambda$
 - Λ是以A的n个特征值为对角元的对角阵。
 - 该变换称为"合同变换",A和A互为合同矩阵。
- □在谱聚类、PCA等章节中将会继续讨论

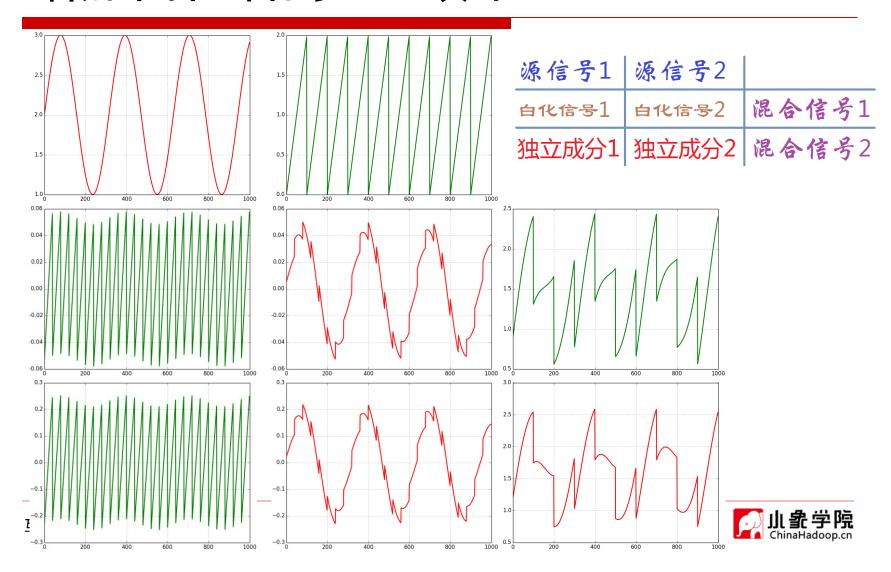
- \square 计算观测数据X的 $n \times n$ 的对称阵 $x \cdot x^T$ 的特征 值和特征向量,用特征值形成对角阵D,特 征向量形成正交阵U,则: $x \cdot x^T = U^T D U$
- $\square \quad \diamondsuit : \quad \widetilde{x} = U^T D^{-0.5} U \cdot x$
- □ 则: $\widetilde{x} \cdot \widetilde{x}^T = (U^T D^{-0.5} U \cdot x) (U^T D^{-0.5} U \cdot x)^T$ $= \left(U^T D^{-0.5} U \cdot x\right) \left(x^T U^T D^{-0.5} U\right)$ $= U^T D^{-0.5} U \cdot (xx^T) \cdot U^T D^{-0.5} U$ $= U^{T} D^{-0.5} U \cdot U^{T} D U \cdot U^{T} D^{-0.5} U = I$



白化Code

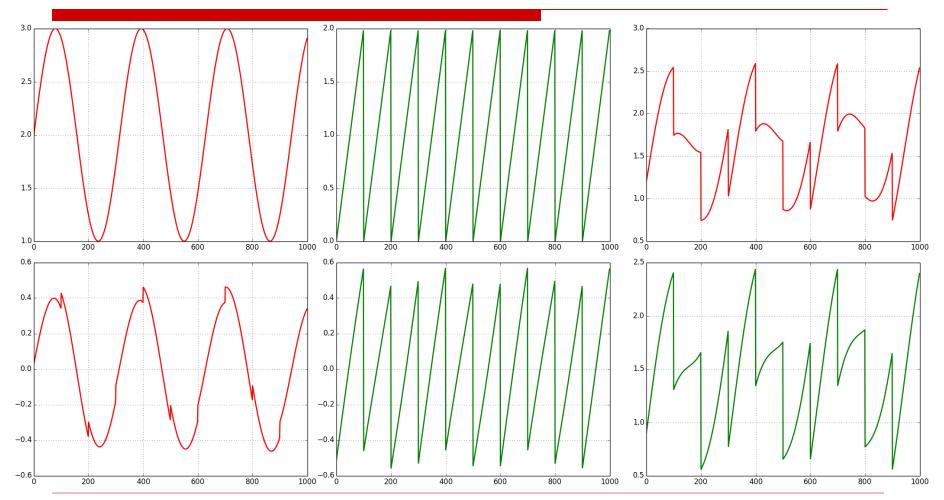
```
def whitening(x):
   m = len(x)
   n = len(x[0])
   # 计算x*x '
   xx = [[0.0]*n for tt in range(n)]
   for i in range(n):
        for j in range(i, n):
            s = 0.0
            for k in range(m):
                s += x[k][i] * x[k][j]
            xx[i][j] = s
            xx[j][i] = s
    # 计算 x*x'的特征值和特征向量
    lamda, egs = np.linalg.eig(xx)
    lamda = [1/math.sqrt(d) for d in lamda]
   # 计算白化矩阵U'D^(-0.5)*U
   t = [[0.0]*n for tt in range(n)]
    for i in range(n):
        for j in range(n):
           t[i][j] = lamda[j] * egs[i][j]
    whiten_matrix = [[0.0]*n for tt in range(n)]
    for i in range(n):
        for j in range(n):
            s = 0.0
            for k in range(n):
                s += t[i][k] * egs[j][k]
           whiten_matrix[i][j] = s
   # 自化x
   wx = [0.0]*n
    for j in range(m):
        for i in range(n):
            s = 0.0
            for k in range(n):
                s += whiten_matrix[i][k] * x[j][k]
           wx[i] = s
        x[j] = wx[:]
```

增加白化后的ICA效果



去均值ICA分离

源信号1 源信号2 混合信号1 独立成分1 独立成分2 混合信号2



正定阵

- □对于n阶方阵A,若任意n阶向量x,都有x^TAx>0,则称A是正定阵。
 - 若条件变成xTAx≥0,则A称作半正定阵
 - 类似还有负定阵,半负定阵。

思考

- □ 给定任意m×n的矩阵A,证明A^TA一定是半正定方阵。
 - 该结论在线性回归中将用到。

正定阵的判定

- □ 对称阵A为正定阵;
- □ A的特征值都为正;
- □ A的顺序主子式大于0;
- □以上三个命题等价。

$$\left(a_{11}
ight)\, \left(egin{array}{ccc} a_{11} & a_{12} & a_{13} \ a_{21} & a_{22} & a_{23} \ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{array}
ight)$$

$$\begin{pmatrix}
a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\
a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn}
\end{pmatrix}$$

例题:

□ 给定凸锥的定义如下:

□ 试证明: n阶半正定方阵的集合为凸锥。

利用定义证明

- □ 若A、B为n阶半正定阵,则 $\forall \vec{z}, \vec{z}^T A \vec{z} \ge 0, \vec{z}^T B \vec{z} \ge 0$
- 以场, $\forall \theta_1, \theta_2 \geq 0$, $\vec{z}^T \cdot (\theta_1 A + \theta_2 B) \cdot \vec{z} = \vec{z}^T \cdot \theta_1 A \cdot \vec{z} + \vec{z}^T \cdot \theta_2 B \cdot \vec{z}$

 $=\theta_1\vec{z}^TA\vec{z}+\theta_2\vec{z}^TB\vec{z}\geq 0$

标准正交基

```
from scipy.linalg import orth
from numpy.linalg import matrix_rank
a = (np.eye(3), np.diag((1., 2., 3.)), np.arange(9, dtype=np.float).reshape((3,3)))
for m in a:
    print m, u'的秩为: ', matrix_rank(m)
    print u'正交基为: \n', orth(m)
```

```
C:\Python27\python.exe D:/Python/MachineLearning/temp/temp.py
[[1, 0, 0, ]
[ 0. 1. 0.]
[0.0.1.]] 的秩为:3
正交基为:
[[ 1. 0. 0.]
[ 0. 1. 0.]
[ 0. 0. 1.]]
[[ 1. 0. 0.]
[ 0. 2. 0.]
[0.0.3.]] 的秩为:3
正交基为:
[[0, 0, 1,]
[ 0. 1. 0. ]
[ 1. 0. 0. ]]
[[ 0. 1. 2.]
[ 3. 4. 5.]
[6.7.8.]] 的秩为:2
正交基为:
[[-0.13511895 0.90281571]
[-0.49633514 0.29493179]
[-0.85755134 -0.31295213]]
```

QR分解

□ 对于m×n的列满秩矩阵A,必有:

$$A_{m\times n} = Q_{m\times n} \cdot R_{n\times n}$$

- □ 其中, Q^T·Q=I(即列正交矩阵), R为非奇异 上三角矩阵。当要求R的对角线元素为正时, 该分解唯一。
- □ 该分解为QR分解。可用于求解矩阵A的特征值、A的逆等问题。

QR分解计算特征值

□ 计算n阶方阵A的特征值:

$$A = Q \cdot R \Rightarrow A_1 = Q^T A Q = R \cdot Q$$

• • •

$$A_k = Q_k \cdot R_k \Longrightarrow A_{k+1} = R_k \cdot Q_k$$

• • •

$$A_K \rightarrow diag\{\lambda_1, \lambda_2, \cdots \lambda_n\}$$

Code

```
def is same(a, b):
   n = len(a)
   for i in range(n):
       if math.fabs(a[i]-b[i]) > 1e-6:
           return False
   return True
if name == " main ":
   a = np.array([0.65, 0.28, 0.07, 0.15, 0.67, 0.18,
                 0.12, 0.36, 0.52
   n = math.sqrt(len(a))
   a = a.reshape((n, n))
   value, v=np.linalg.eig(a)
   times = 0
   while (times == 0) or (not is_same(np.diag(a), v)):
       v = np.diag(a)
       q, r = np.linalg.qr(a)
       a = np.dot(r, q)
       times += 1
       print "正交阵: \n", q
       print "三角阵: \n", r
       print "近似阵: \n", a
   print "次数: ", times, "近似值: ", np.diag(a)
   print "精确特征值: ", value
```

```
正交阵:
[[ -9.9999997e-01 7.96775552e-05 -1.54260931e-08]
 [ -7.96775484e-05 -9.99999962e-01 -2.62680752e-04]
 [ -3.63558527e-08 -2.62680750e-04 9.99999965e-01]]
三角阵:
[[-9.99995561e-01 -2.70043706e-02 2.26002781e-01]
 [ 0.00000000e+00 -5.18490813e-01 -2.01260695e-04]
 [ 0.00000000e+00 0.00000000e+00 3.21511463e-01]]
近似阵:
[[ 9.99997701e-01 2.68653258e-02 2.26009882e-01]
[ 4.13120842e-05 5.18490847e-01 -6.50631315e-05]
[ -1.16888234e-08 -8.44548721e-05 3.21511452e-01]]
正交阵:
[[-9.9999999e-01 4.13121805e-05 4.95968741e-09]
 [ -4.13121791e-05 -9.99999986e-01 1.62885687e-04]
 三角阵:
[[ -9.99997702e-01 -2.68867458e-02 -2.26009875e-01]
[ 0.00000000e+00 -5.18489743e-01 1.26769705e-04]
[ -0.00000000e+00 -0.00000000e+00 3.21511438e-01]]
近似阵:
[[ 9.99998809e-01 2.68086196e-02 -2.26014256e-01]
[ 2.14199426e-05 5.18489757e-01 4.23151455e-05]
 [ 3.75809905e-09 5.23696113e-05 3.21511434e-01]]
正交阵:
[[ -1.00000000e+00 2.14199684e-05 -1.59459985e-09]
[ -2.14199681e-05 -9.99999995e-01 -1.01004056e-04]
[ -3.75810352e-09 -1.01004056e-04 9.99999995e-01]]
三角阵:
[[ -9.99998810e-01 -2.68197256e-02 2.26014254e-01]
[ 0.00000000e+00 -5.18489185e-01 -7.96303223e-05]
[ 0.00000000e+00  0.00000000e+00  3.21511428e-01]]
近似阵:
[[ 9.99999383e-01 2.67754771e-02 2.26016964e-01]
[ 1.11060221e-05    5.18489190e-01    -2.72608113e-05]
 [ -1.20827323e-09 -3.24739582e-05 3.21511427e-01]]
次数: 17 诉似值: [0.99999938 0.51848919 0.32151143]
精确特征值: [1.
                        0.51848858 0.32151142]
```

LFM (Latent Factor Model)

- \square 对于K个隐变量,得、 $A_{m \times n} = U_{m \times k} \cdot V_{n \times k}^T$
- **目标函数**: $J(U,V;A) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} \left(a_{ij} \sum_{r=1}^{k} u_{ir} \cdot v_{jr} \right)^{2} + \lambda \left(\sum_{j=1}^{m} \sum_{r=1}^{k} u_{ir}^{2} + \sum_{j=1}^{n} \sum_{r=1}^{k} u_{jr}^{2} \right)$
- □ 梯度:

$$\begin{cases} \frac{\partial J(U,V;A)}{\partial u_{ir}} = -2 \cdot \left(a_{ij} - \sum_{r=1}^{k} u_{ir} \cdot v_{jr} \right) \cdot v_{jr} + 2\lambda u_{ir} \\ \frac{\partial J(U,V;A)}{\partial v_{jr}} = -2 \cdot \left(a_{ij} - \sum_{r=1}^{k} u_{ir} \cdot v_{jr} \right) \cdot u_{ir} + 2\lambda v_{jr} \end{cases}, 1 \le r \le k$$

Code

```
137 :
                                                     [[ 1.70125975 -0.72225554 0.02099579]
                                                     [-0.33833233 1.97720453 -0.6388722 ]
def inverse(a):
                                                     [-0.15836833 -1.20215954 2.36052786]]
      b = np.zeros_like(a)
                                                     [[ 1.00000000e+00 3.29110765e-09 -3.62326488e-09]
      n = len(a)
                                                     [ 1.46506981e-09 9.99999989e-01 1.16156059e-08]
      c = np.eye(n)
                                                     [ -9.31419677e-10 6.70765854e-09 9.99999993e-01]]
      alpha = 1
      for times in range(200):
                                                     [[ 1.70125975 -0.72225554 0.02099579]
             for i in range(n):
                                             [-0.33833233 1.97720454 -0.6388722 ]
                   for j in range(n):
                                                    [-0.15836833 -1.20215954 2.36052787]]
                          err = c[i][j] -
                                                     [[ 1.00000000e+00 2.89260232e-09 -3.18454021e-09]
                          for k in range(n [ 1.28767115e-09 9.99999991e-01 1.02091250e-08]
                                b[j][k] += a [-8.18638310e^{-10} 5.89545857e^{-09} 9.99999994e^{-01}]
                                                     139 :
      return b.T
                                                     [[ 1.70125975 -0.72225554 0.02099579]
                                                     [-0.33833233 1.97720454 -0.6388722 ]
                                                      [-0.15836833 -1.20215955 2.36052787]]
                                                     [[ 1.00000000e+00 2.54235025e-09 -2.79893872e-09]
                                                     [ 1.13175292e-09 9.99999992e-01 8.97294861e-09]
                                                     [ -7.19513116e-10 5.18160437e-09 9.99999994e-01]]
                                                     [[ 1.70125975 -0.72225554 0.02099579]
                                                     [-0.33833233 1.97720454 -0.6388722 ]
                                                     [-0.15836833 -1.20215955 2.36052787]]
```

真实值:

[[1.70125975 -0.72225555 0.0209958]

[-0.33833233 1.97720456 -0.63887223] [-0.15836833 -1.20215957 2.36052789]]

136 :

[[1.70125975 -0.72225553 0.02099578] [-0.33833233 1.97720453 -0.63887219] [-0.15836833 -1.20215954 2.36052786]]

[[9.9999999e-01 3.74451374e-09 -4.12243131e-09]



向量的导数

- \square A为m×n的矩阵, x为n×1的列向量,则Ax 为m×1的列向量,记 $\vec{y} = A \cdot \vec{x}$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

$$\vec{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad \vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \qquad A \cdot \vec{x} = \begin{pmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n \end{pmatrix}$$

□ 从而,

$$\frac{\partial \vec{y}}{\partial \vec{x}} = \frac{\partial A\vec{x}}{\partial \vec{x}} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{m1} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{m2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} = A^{T}$$

结论与直接推广

□ 向量偏导公式:

$$\frac{\partial A\vec{x}}{\partial \vec{x}} = A^T$$

$$\frac{\partial A\vec{x}}{\partial \vec{x}^T} = A$$

$$\frac{\partial \left(\vec{x}^T A\right)}{\partial \vec{x}} = A$$

□在线性回归中将直接使用该公式。

注意

- □ 关于列向量求导,有文献给出如下方案:
- □ 记x为n×1的列向量,y为m×1的列向量,则:

$$\frac{\partial \vec{y}}{\partial \vec{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial \vec{x}} \\ \vdots \\ \frac{\partial y_m}{\partial \vec{x}} \end{pmatrix} \qquad \frac{\partial y_1}{\partial \vec{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial y_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

□ 以上公式将会导致向量间求导得到"超越矩阵"——矩阵的每个元素仍然是一个矩阵。在实践层面,不利于公式推导,故本课程未采纳。

标量对向量的导数

- □ A为n×n的矩阵, x为n×1的列向量,
- \Box 记 $y = \vec{x}^T \cdot A \cdot \vec{x}$
- 回 同理可得: $\frac{\partial y}{\partial \vec{x}} = \frac{\partial (\vec{x}^T \cdot A \cdot \vec{x})}{\partial \vec{x}} = (A^T + A) \cdot \vec{x}$
- \square 若A为对称阵,则有 $\frac{\partial (\vec{x}^T A \vec{x})}{\partial \vec{x}} = 2A\vec{x}$

推导
$$\frac{\partial y}{\partial \vec{x}} = \frac{\partial (\vec{x}^T \cdot A \cdot \vec{x})}{\partial \vec{x}} = (A^T + A) \cdot \vec{x}$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{bmatrix}$$

口 **记**:
$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \quad \vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

$$\vec{x}^T A \cdot \vec{x} = (x_1 \quad x_2 \quad \cdots \quad x_n) \cdot \left(\sum_{j=1}^n a_{1j} x_j \quad \sum_{j=1}^n a_{2j} x_j \quad \cdots \quad \sum_{j=1}^n a_{n,j} x_j \right)^T$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left(\left(\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_{j} \right) x_{i} \right) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_{i} x_{j}$$

$$\frac{\partial \left(\vec{x}^T A \cdot \vec{x}\right)}{\partial x_i} = \left(\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j\right) + \left(\sum_{j=1}^n a_{ji} x_j\right) = \sum_{j=1}^n \left(a_{ij} + a_{ji}\right) x_j$$

标量对方阵的导数

- □ A为n×n的矩阵, |A|为A的行列式,计算 $\frac{\partial |A|}{\partial A}$ □ 解:根据等式 $\forall 1 \leq i \leq n$, $|A| = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} \cdot (-1)^{i+j} M_{ij}$ □ 有 $\frac{\partial |A|}{\partial a_{ij}} = \frac{\partial \left(\sum_{j=1}^{n} a_{ij} \cdot (-1)^{i+j} M_{ij}\right)}{\partial a_{ij}} = (-1)^{i+j} M_{ij} = A_{ji}^*$
- 口 从而: $\frac{\partial |A|}{\partial A} = (A^*)^T = |A| \cdot (A^{-1})^T$
 - 依据A·A* = A·I, 第二个等式成立;

总结与思考

- □ 线性代数是普适的数学工具,是进一步学习其他内容的基础。
 - 有些机器学习的推导过程使用该工具表述清晰,易于推 广,如线性回归。
 - 重点思考特征值、特征向量和矩阵的关系。
- □ 思考:对于"非线性"问题,线性代数这一工具是 否足够?是否有"非线性代数"?
 - 非线性映射、核函数
- □ 查阅:
 - Schmidt正交化/Givens变换/HouseHolder变换
 - Hessenberg矩阵

参考文献

□ 同济大学数学系编,工程数学线性代数(第五版),高等教育出版社,2007

我们在这里

- □ http://wenda.ChinaHadoop.c.
 - 视频/课程/社区
- □ 微博
 - @ChinaHadoop
 - @邹博_机器学习
- □ 微信公众号
 - 小象学院
 - 大数据分析挖掘



感谢大家!

恳请大家批评指正!