作者	生姜 DrGinger
脚本	生姜 DrGinger
视频	崔崔 CuiCui
开源学习资源	https://github.com/Visualize-ML
平台	https://www.youtube.com/@DrGinger_Jiang https://space.bilibili.com/3546865719052873 https://space.bilibili.com/513194466

2.6 矩阵乘法性质



本节你将掌握的核心技能:

- ▶ 矩阵连乘: 多个几何操作按顺序施加到向量上, 从右向左生效。
- ▶ 连乘转置: 反序, 从行向量视角理解变换。
- ▶ 结合律: 改变括号位置不影响结果, 可优化计算顺序减少运算量。
- ▶ 矩阵分解:将复杂矩阵拆解成基本几何变换,更直观理解其作用。
- ▶ 交换律通常不成立:即使乘积存在,AB、BA也可能有不同几何含义。
- ▶ 特殊情况,交换律成立。
- ▶ 矩阵幂:方阵反复相乘表示相同线性变换多次作用。

有了矩阵乘法几何视角的铺垫,理解矩阵乘法常见性质就变得十分容易了。

矩阵连乘:连续几何变换

若干矩阵顺序相乘,相当于这些几何变换依次作用于几何体上。

以如下三个 2 × 2 矩阵为例

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{C} = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$
 (1)

矩阵 A 对应绕原点旋转 (rotate),B 对应剪切 (shear),C 对应缩放 (scale)。

具体来说, 矩阵 A 对应绕原点逆时针旋转 90 度。

矩阵 B 对应沿 x_1 横轴方向剪切;简单来说,剪切将形状沿某个方向倾斜的变换,使得原本垂直或水平的线段变成倾斜状态,同时保持平行关系不变。

矩阵 C 让横轴缩小为 1/2,纵轴放大至 2 倍。

如果列向量 $x \setminus y$ 均代表平面上一点,如下矩阵乘法

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

$$A @ B @ C @ x = y \tag{2}$$

代表对列向量x先后进行缩放(C)、剪切(B)、旋转(A)。

整个几何变换过程如图1所示。

lacktriangle 请大家格外注意矩阵乘法 ABCx = y 先后顺序,从右向左,即 $C \rightarrow B \rightarrow A$ 。

②请大家手算ABC、CBA、ACB、BAC等等各种排列组合的矩阵乘法结果。

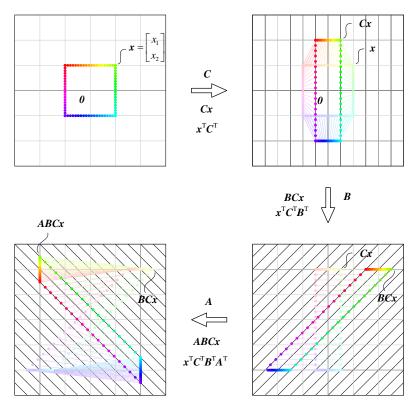
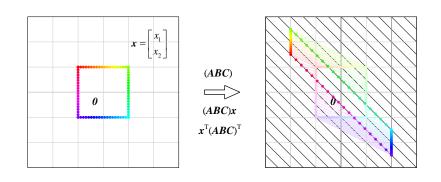


图 1.ABCx = y 对应的分步几何操作

当然,我们也可以先计算 (ABC),然后再把 (ABC) 作为一个整体施加到 x 上。 矩阵乘法(ABC) 相当于复合几何操作, "一步到位"完成几何变换! 具体如图 2 所示。



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

图 2. (ABC)x = y 对应的"一步到位"几何操作

矩阵连乘的转置

矩阵连乘的转置如下几个重要性质值得大家重视:

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

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

$$(A_1 A_2 A_3 \cdots A_k)^{\mathsf{T}} = A_k^{\mathsf{T}} \cdots A_3^{\mathsf{T}} A_2^{\mathsf{T}} A_1^{\mathsf{T}}$$

$$(3)$$

这组性质实际上并不需要"死记硬背"!

以(2)为例,对这个矩阵连乘转置

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} @ \boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} @ \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}} @ \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}$$

$$\tag{4}$$

列向量 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$ 转置后得到行向量 $\mathbf{x}^T = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}$,代表水平面上一点。上式乘法告诉我们,对于行向量,依次施加缩放 (\mathbf{C})、剪切 (\mathbf{B})、旋转 (\mathbf{A}) 几何变换,结果还是如图 1。

结合律

在矩阵运算中,如果有三个矩阵 $A \setminus B \setminus C$ 参与相乘,先将 A 和 B 相乘,再与 C 相乘,或者先将 B 和 C 相乘,再左乘 A,最终的计算结果是相同的

$$(AB)C = A(BC) \tag{5}$$

换句话说,无论我们先计算前两个矩阵的乘积,还是先计算后两个矩阵的乘积,结果都不会受到影响。这一性质可以简化矩阵运算,使我们可以灵活地选择计算顺序,以提高计算效率或便于推导数学公式。本节最后会讲到矩阵连乘中,如何通过结合律提高运算效率。

lacktriangle注意,矩阵先后次序不能变。也就是说,矩阵乘法通常不满足交换律,即lacktriangleAlacktriangle。

怎么理解(5)呢?

还是利用几何视角, (AB)、(BC) 相当于"局部"复合几何变换。

还是以(1)为例,(AB)相当于复合旋转、剪切(剪切再先);(BC)相当于复合剪切、缩放(缩放再先)。

对于平面列向量x, (AB)Cx 相当于对x 先缩放 (C), 然后再(AB), 具体如图 3 所示。

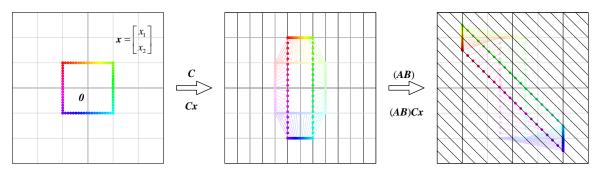


图 3. (AB)Cx = y 对应的分步几何操作

对于平面列向量x, A(BC)x 相当于对x 先 (BC), 然后再旋转 (A), 具体如图 4 所示。 对比图 1、图 2、图 3、图 4,虽然过程中有展开,有合并,我们发现它们的结果是完全一致的。

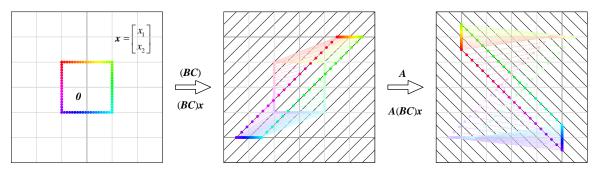


图 4. A(BC)x = y 对应的分步几何操作

矩阵分解

给定矩阵A

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 5/4 & -3/4 \\ -3/4 & 5/4 \end{bmatrix} \tag{6}$$

如图 5 所示,Ax = y 显然不是我们不熟悉的几何变换。

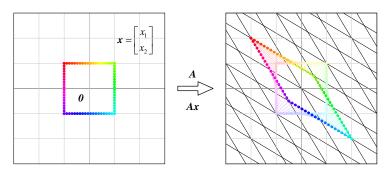


图 5. Ax = y 对应的几何操作

要想理解 Ax = y,需要通过矩阵分解 (matrix decomposition) 把图 5 拆解成我们熟悉的几何变换。

简单来说,矩阵分解将一个矩阵分解成几个矩阵的连乘。可以这样理解,矩阵分解是矩阵连乘的逆操作。

几何角度来看,一个"复杂"几何操作可以分解为若干"我们熟悉的"几何操作。

比如,如图 6 所示,我们可以把矩阵 A 拆解成"旋转 \rightarrow 缩放 \rightarrow 旋转",对应的矩阵乘法为

$$\begin{bmatrix} 5/4 & -3/4 \\ -3/4 & 5/4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}$$
(7)

需要大家注意的是,图6中两个旋转方向正好相反。

(7) 对应的分解叫特征值分解 (Eigen Value Decomposition, EVD); 确切地说,由于矩阵 A 为对称矩阵,这个分解为谱分解 (spectral decomposition)。

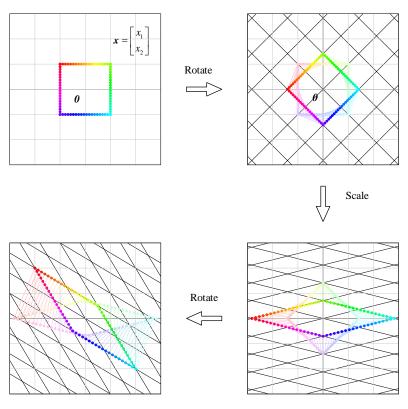


图 6. 把 A 分解成"旋转 \rightarrow 缩放 \rightarrow 旋转"

再如,如图 7 所示,我们可以把矩阵 A 拆解成"剪切 \rightarrow 缩放 \rightarrow 剪切",对应的矩阵乘法为

$$\begin{bmatrix} 5/4 & -3/4 \\ -3/4 & 5/4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -0.6 & 1 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1.25 & 0 \\ 0 & 0.8 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1 & -0.6 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$
 (8)

需要大家注意的是,图7中一个剪切沿横轴,另一个沿纵轴。

(8) 这个分解叫做 LDL 分解,和它类似的分解还有 LU 分解、Cholesky 分解。

不同矩阵分解对应不同的算法,它们也都有各自的几何解读,本书后文将介绍各种常见矩阵分解。

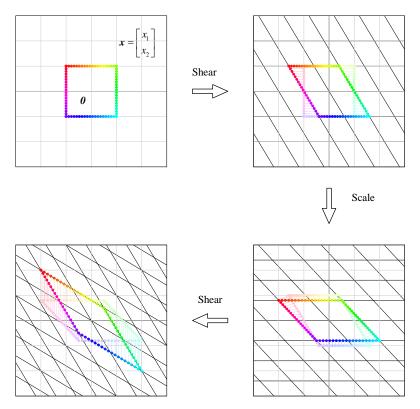


图 7. 把 A 分解成"剪切 \rightarrow 缩放 \rightarrow 剪切"

一般情况,AB不等于BA

本书前文提过,即便矩阵乘法 AB、BA 都存在,一般情况

$$AB \neq BA$$
 (9)

比如, AB、BA 结果的矩阵形状可能不同。

即便AB、BA形状相同,两者代表的几何变换也可能不同。

给定如下矩阵A、B

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \tag{10}$$

矩阵 A 对应缩放, B 对应剪切。

矩阵乘法 ABx 代表先对 x 进行剪切 (B), 再进行缩放 (A), 具体如图 8 所示。

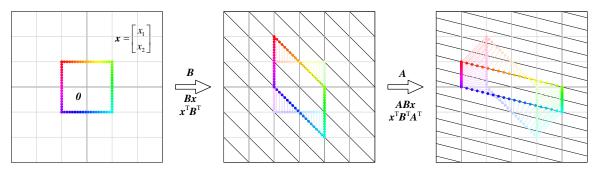


图 8.ABx = y 对应的分步几何操作

矩阵乘法 BAx 代表先对 x 进行缩放 (A), 再进行剪切 (B), 具体如图 9 所示。

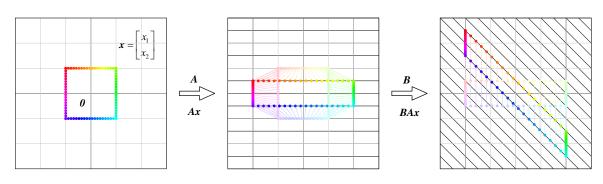


图 9. BAx = y 对应的分步几何操作

特殊情况,AB = BA

有一些特殊情况,矩阵乘法AB = BA。下面让我们聊聊。

首先,如果A、B 都是形状相同的单位矩阵 I,显然 AB = BA。单位矩阵 I 意味着几何体没有任何几何变化。

如果 2×2 矩阵 $A \setminus B$ 都是缩放矩阵,比如

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2/3 \end{bmatrix} \tag{11}$$

计算一下, 大家会发现

$$AB = BA \tag{12}$$

如图 10 所示,哪怕调换缩放矩阵 A、B 的先后,最后的结果完全一致。

? 请大家计算 (11) 中矩阵乘法 AB、BA。

这说明,这种特殊情况矩阵乘法满足交换律。

再看个例子。

给定 2×2 矩阵 $A \setminus B$ 都是沿纵轴剪切矩阵,比如

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 3/2 & 1 \end{bmatrix} \tag{13}$$

如图 11 所示,显然 ABx 和 BAx 结果完全一致。

? 请大家计算 (13) 中矩阵乘法 **AB**、**BA**。

看第三个例子。

给定 2×2 矩阵 $A \times B$ 都绕原点旋转矩阵,比如

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix}$$
 (14)

如图 12 所示,显然 ABx 和 BAx 结果完全一致。

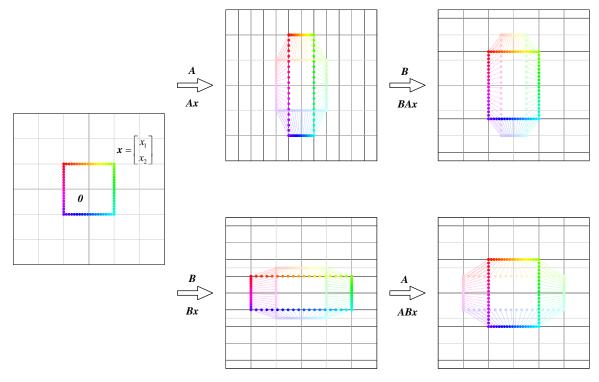


图 10.2×2 矩阵 $A \times B$ 都是缩放矩阵, AB = BA

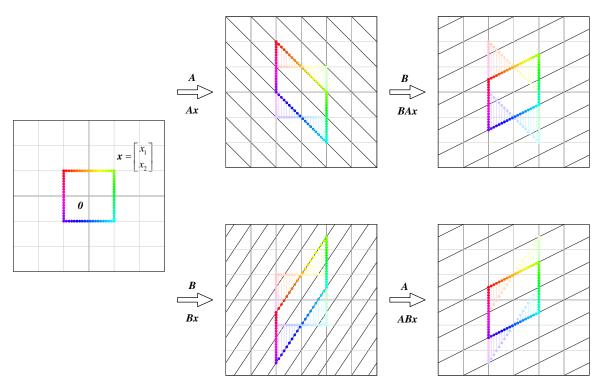


图 11.2×2 矩阵 $A \times B$ 都是沿纵轴方向剪切矩阵, AB = BA

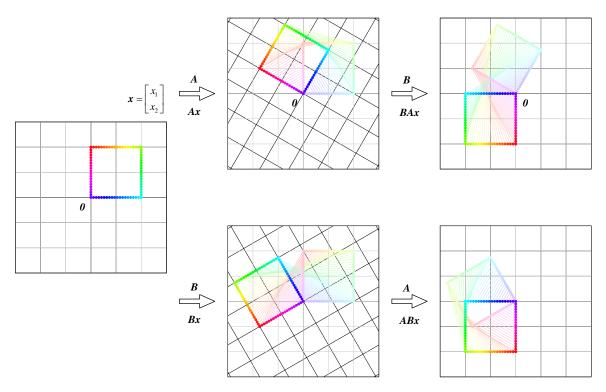


图 12.2 × 2 矩阵 $A \setminus B$ 都是绕原点旋转矩阵, AB = BA

本书后续将会从这些几何变化机理角度讲解上述特殊矩阵乘法。

矩阵幂

矩阵幂 (power of a matrix) 指的是方阵 A 的多次乘积,

$$\mathbf{A}^{0} = \mathbf{I}$$

$$\mathbf{A}^{1} = \mathbf{A}$$

$$\mathbf{A}^{k} = \underbrace{\mathbf{A} @ \mathbf{A} @ \cdots @ \mathbf{A}}_{k \text{ times}}$$

$$(15)$$

注意,矩阵幂的前提是矩阵必须是方阵。如果不是方阵,则矩阵的乘法无法进行多次迭代,因为矩阵维度无法匹配。

此外,上式中k可以为负整数,此时要求矩阵A可逆。

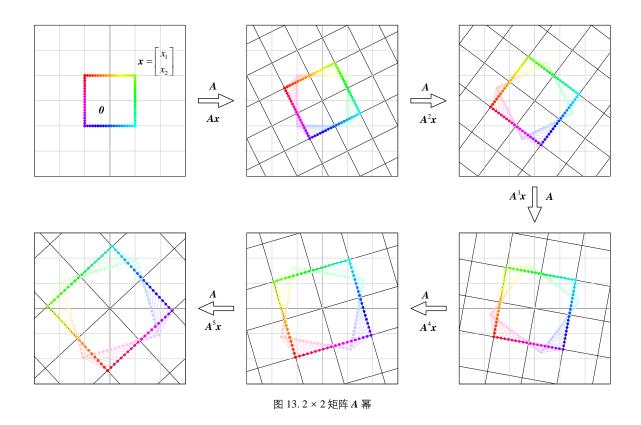
几何角度来看, 矩阵幂可以解释为线性变换 A 的反复作用,

$$\mathbf{A}^{k}\mathbf{x} = \mathbf{A}\left(\mathbf{A}^{k-1}\mathbf{x}\right) \tag{16}$$

举个例子,给定矩阵 A 如下

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & -1/2 \\ -1/2 & 1 \end{bmatrix} \tag{17}$$

如图 13 所示,矩阵 A 连续作用在向量 $x \perp (A^k x)$ 让平面几何形状放大的同时不断旋转。



AB = O

如果 $A \setminus B$ 矩阵乘积为零矩阵,即AB = O,不意味着 $A \setminus B$ 为零矩阵;也不意味着BA = O。

举个例子,给定 2×2 矩阵 $A \setminus B$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{18}$$

如图 14 所示,ABx 让正方形"坍塌"到原点。

但是, BA 结果并不是零矩阵;如图15所示,正方形发生了降维。

(18) 对应的 AB、BA 两个矩阵乘法。

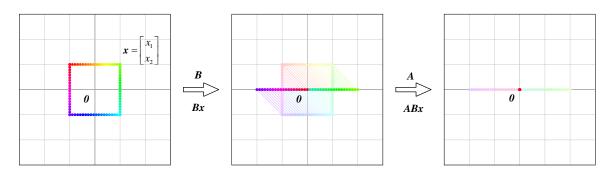


图 14.2 × 2矩阵 A、B矩阵乘积为零矩阵, AB = O

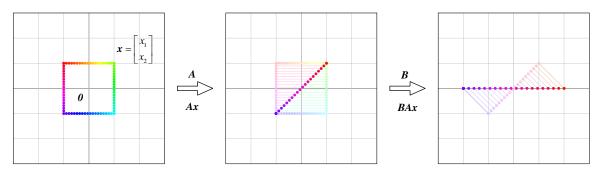


图 15.2 \times 2 矩阵 $A \times B$ 矩阵乘积为零矩阵, BA 不为 O

此外,如果A = B,则AC = BC或CA = CB。

除非 C 可逆,否则,AC = BC 不能得出 A = B。

复杂度

举个例子,如下5个矩阵相乘

$$A_{m \times p_1} A_{p_1 \times p_2} A_{p_2 \times p_3} A_{p_3 \times p_4} A_{p_5 \times n} \tag{19}$$

如下图所示,所有中间维度都会在计算过程中消去,只保留首尾维度 m 和 n。

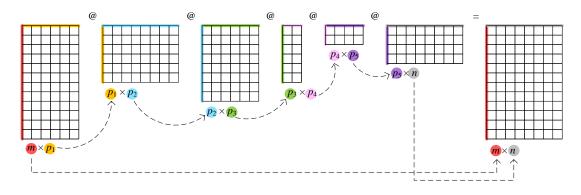


图 16. 矩阵连乘

然而,实际计算时,连乘的顺序会显著影响计算效率,因为矩阵乘法的复杂度取决于矩阵的大小及 乘法顺序。

矩阵乘法的复杂度描述的是完成矩阵乘法所需的计算步骤数。复杂度依赖于矩阵的维度以及计算中 涉及的加法与乘法次数。由于总计算量主要由乘法主导,本节提到的复杂度只考虑乘法次数。

举个例子,对于两个矩阵 $A(m \times p)$ 和 $B(p \times n)$,矩阵乘法 C = AB 结果 C 中每个元素是通过 A 的一行和 B 的一列的向量内积计算得到。这意味着,计算每个元素需要 p 次乘法和 p-1 次加法。

矩阵乘法 C = AB 有 $m \times n$ 个元素,每个元素需要 p 次乘法运算。因此,总复杂度为 $m \times n \times p$ 。

下面,让我们看一个例子。如下图所示,四个矩阵连乘,它们分别是 A (5 × 10)、B (10 × 4)、C (4 × 20)、D (20 × 5)。下面,我们比较两种矩阵乘法顺序;请大家自行分析其他可能顺序及复杂度。

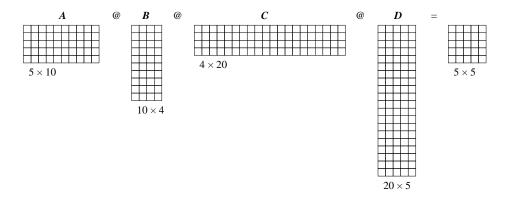


图 17. 优化矩阵连乘顺序

第一种就按照 ABCD 的先后顺序,即((A @ B) @ C) @ D; 第二种,根据乘法结合律,我们先计算 AB 再算 CD,最后将两个结果乘在一起,即(A @ B) @ (C @ D)。

第一种矩阵连乘的分步复杂度为:

- ▶ 第1步, A @ B 复杂度为 200 (5 × 10 × 4)。
- **▶ 第2步**, ((**A** @ **B**) @ **C**)复杂度为 400 (5 × 4 × 20); (**A** @ **B**)形状为 5 × 4。
- ▶ 第3步, ((A @ B) @ C) @ D 复杂度为 500 (5 × 20 × 5) (A @ B) @ C)的形状为 5 × 20。

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

第一种矩阵连乘的总复杂度为 1100 (200 + 400 + 500)。

第二种矩阵连乘的分步复杂度为:

- ▶ 第1步, A @ B 复杂度为 200 (5 × 10 × 4)。
- **▶ 第2步**, *C* @ *D* 复杂度为 400 (4 × 20 × 5)。
- 第3步, (A @ B) @ (C @ D)复杂度 100 (5×4×5); (A @ B)形状为 5×4, (C @ D)形状为 4×5。

第二种矩阵连乘的总复杂度为 700 (200 + 400 + 100)。

这个例子告诉我们,在矩阵连乘的运算中,选择适当的计算顺序至关重要。优先在计算过程中消去 较大的中间维度,能够显著减少后续运算量,从而大幅降低整体复杂度。

优化计算顺序不仅仅是一种数学技巧,它还是高效完成大规模线性代数任务的重要基础。特别是在机器学习和数据科学中,矩阵运算广泛用于训练模型、处理高维数据以及计算特征分解。通过优化矩阵乘法顺序,可以显著提高计算性能,尤其是在处理神经网络的前向传播和反向传播时。

此外,现代优化方法还包括利用矩阵的结构特性。例如,稀疏矩阵可以大幅减少非零元素的参与,提高运算速度;块矩阵能够在分块计算中充分利用并行计算资源。这些方法为矩阵运算的进一步优化提供了多样化的工具和思路,推动了线性代数在计算领域的广泛应用。优化计算顺序、利用结构特性和先进算法,共同构成了高效矩阵运算的理论与实践框架。



请大家用 DeepSeek/ChatGPT 等工具完成本节如下习题。

- **Q1.** 用随机正整数发生器生成四个 2×2 矩阵 $A \times B \times C \times D$,自己写 Python 代码计算所有全排列矩阵 (比如 $A \otimes B \otimes D \otimes C$) 的连乘结果。
- **Q2.** 如下矩阵 A 沿横轴缩放, B 代表沿纵轴方向缩放, 是否满足 AB = BA

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}$$

Q3. 如下矩阵 A 沿横轴剪切,B 代表沿纵轴剪切,是否满足 AB = BA

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Q4. 若干沿横轴剪切矩阵,请计算矩阵乘法 ABCD,有什么规律

Q5. 给定如下不同矩阵 A, 请计算 A^8 , 并从几何角度解释线性变换的作用。

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

```
\begin{bmatrix} -1 & 0 \end{bmatrix}
```