模式识别

第1讲绪论、数学基础

2018~2019学年



课程说明

- 模式识别:是研究分类识别理论与方法的一门学科,其研究目标是,建造能自动进行事物识别与分类的智能机器系统,以代替人工分类与识别工作。
- **学科性质**: 既是人工智能领域的重要研究分支,也是实现机器智能所必不可少技术手段; 综合性、交叉性很强。
- 理论基础: 线性代数、概率论、数理统计、矩阵计算、最优化方法、信号处理、计算机科学, 乃至神经物理学等。
- 应用领域:字符识别(手写、印刷)、语音识别、图像识别 (指纹、人脸、虹膜、车牌)、信息推荐、文本分析(邮件 过滤)、工业检测(次品)、故障诊断、医疗诊断(心电 图)、网络安全、信用卡欺诈检测等。

内容安排

- 一、绪论、数学基础(第1讲)
- 二、聚类分析(第2讲)
- 三、判别函数分类法(几何分类法)(第3、4讲)
- 四、统计决策分类法(概率分类法)(第5、6讲)
- 五、特征提取与选择(第7讲)
- 六、模糊模式识别 (第8讲)
- 七、神经网络模式识别 (第9讲)

参考教材

- 齐敏等,**模式识别导论**,清华大学出版社, 2009年 简明扼要,条理清晰。适合教学型阅读。本课程教材。
- 孙即祥等,**现代模式识别**(第二版),国防科大出版社,**2003**年 分析详尽,推导完备。适合研究型阅读。**本课程主要参考**。
- 边肇祺,张学工,**模式识别**(第二版),清华大学出版社, 2000年 比较系统整理了相关理论与方法。本课程学习参考。根据需要选择阅读。
- R. O. Duda等,**模式分类**(第二版),李宏东等译,机械工业出版社, 2012年(原书2001年出版)

本学科的**教材经典**,部分内容更适合**研究型参考**。叙述逻辑连贯,有思想深度,内容也很多。如果希望彻底弄懂一些重点难点概念缘由或算法原理(而不满足于仅仅了解算法步骤),也包括开展后续相关研究,**学有余力或有较高学习目标的同学可参阅**。

- 模式识别工具(互联网)
- 模式识别文献(互联网)

学习要求

- ■补足**矩阵计算、概率统计、最优化**相关知识;
- ■牢固掌握基本概念、重要原理及其算法步骤;
- ■运用重要算法对简单实例进行**手工演算求解**;
- ■熟记重点算法与指标的**计算公式和推导过程**;
- ■熟记重点概念与算法的原理图及其丰富含义;
- ■能为后续科研工作打下必要的**专业理论基础**。

分级学习目标

- L. 拿学分: 掌握课堂所讲内容, 做好作业与考试。
- II. 拿学分+学概念: (Ⅰ) +多读教材,多做笔记。
- Ⅲ. 拿学分+学概念+懂原理: (Ⅱ) +多做习题、多做推导。

模式识别是一门综合性交叉性很强的学科,每一讲内容都有很多专著、都可单独开课,不同基础的同学其学习难度也不同。因此,课堂学习只能作为一个内容引导、初步了解,真正学好需要课后完整认真地阅读、理解和解题,以求真正熟记概念、弄懂原理、熟悉步骤,形成自己的知识框架。

一、绪论

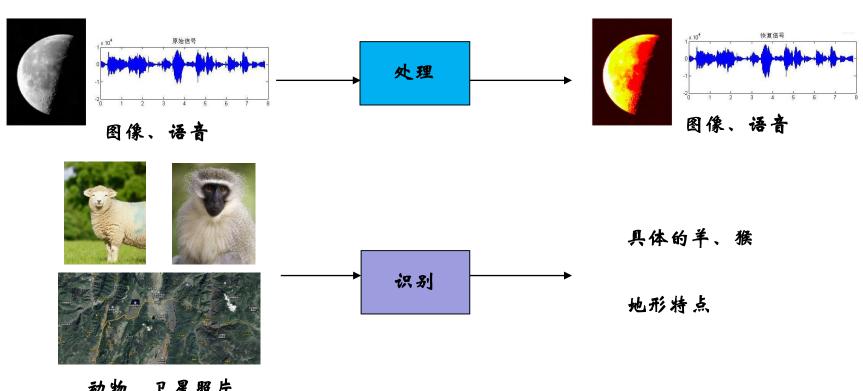
- **样本**(sample):一个具体的研究对象,具有一个或多个可观测量。
- 特征(features):能从某个方面对样本进行描述、刻画或表达的可观测量(数值型、结构型)。多个特征通常用矢量表示——特征矢量。
- 模式 (pattern): 样本特征矢量的观测值,是抽象样本的数值代表。 在这个意义上,"样本"与"模式"说的是同一件事情。
- 类别、类属、模式类(class):指在一定合理颗粒度下、有实际区分意义的基础上,主观或客观地被归属于"同一类"的客观对象(样本、模式)的类别代号。数学上一般处理为整数。
- 样本集(sample set): 多个样本的集合。训练集、验证集、测试集。
- 已知样本(known samples,example): 事先知道类别标号的样本。
- 未知样本(unknown samples):指特征已知、但类别标号未知的样本,也称:待分样本、待识样本。
- ——机器学习: 称已知样本为**样例**,未知样本为**实例**。
- 模式识别(pattern recognition):基于样本和应用目的设计分类器;并对性能进行验证,进行必要优化;最后用分类器对未知类属样本进行类属判定。识别,不是宽泛的认识或理解,而是对类别判定。

模式识别系统的组成

- 训练集:样本的集合,用它来设计开发模式分类器。在有监督分类中,已知类别样本的集合,在无监督分类中,是未知类别样本的集合。但都被用来提取"关于各类之间的分类知识",即使这些样本本身没有类别信息,仍然隐含着某种分类信息!
- 验证集: 既可以认为是宽泛的训练集中的一部分,也可以理解为独立于训练集的有监督样本集。在一次特定的模型训练过程中,两者不重合;但是在多次模型训练(伴随不同模型超参数设置),两者之间是可以交换部分数据的。其作用在于:通过对特定超参数或特定子模型的设置后,对训练后的模型进行"交付前测试",以便从多个交付模型中选择泛化性能最优者。
- 测试集:在设计与调优分类系统时没有用过的独立样本集。
- **系统评价原则**: 为了更好地对模式识别系统性能进行评价,必须使用一组独立于训练集的测试集对系统进行测试与评价。

模式识别系统的组成

"处理"与"识别"两个概念的区别

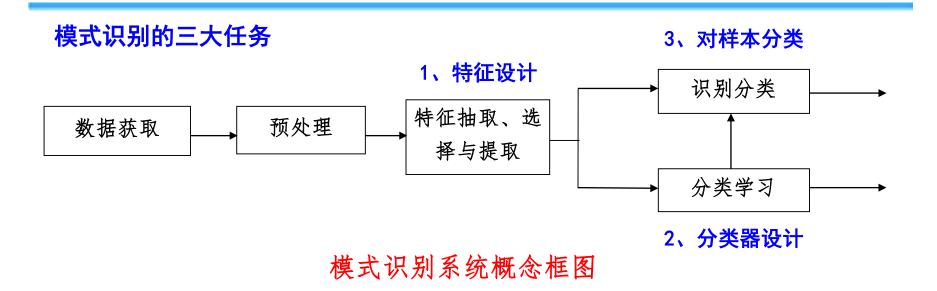


动物、卫星照片

处理:输入与输出是同样性质的数值或特征。

识别:输入的是对象特征,输出的是它的分类和描述。

模式识别系统的组成



模式识别系统的主要环节:

- 特征抽取: 特征数据的采集。如长度测量、波形测量、…
- 特征选择: 选择尽可能少、且更有利于分类的特征。含特征变换(提取)
- 分类学习: 利用样本集建立分类和识别规则, 即分类器设计
- 识别分类:对所获得样本按建立的分类规则进行分类识别

模式识别方法的分类

- 模式识别:按理论基础划分
 - 统计模式识别: 以模式特征的概率分布为基础进行统计分析
 - 结构模式识别: 以形式语言理论对模式的结构特征进行分析
 - 模糊模式识别: 以模糊数学理论与方法进行的模式分类
 - 神经网络模式识别:以人工神经网络理论与方法为基础
 - ◆ 人工智能模式识别: 以逻辑推理与专家系统理论为基础
- 统计模式识别:按任务类型划分
 - ▼类分析 (Clustering Analysis) ——简称: 聚类
 - 简单聚类方法: 最大最小距离法
 - 层次聚类方法: 分裂式、凝聚式
 - 动态聚类方法: C-均值, ISODATA
 - 判别分析(Discriminatory Analysis)——简称: 分类
 - 几何分类法(判别函数分类法):线性、分段线性、二次、支持向量机
 - 概率分类法(统计决策分类法): 判别式Discriminative、生成式Generative
 - 近邻分类法(几何分类法和概率分类法的一种融合方法)

模式识别方法的分类

- 模式识别:按实现方式划分
 - 有监督分类:有已知类别的样本集用于分类器设计。需要有足够的 先验知识。一般就指判别分析。
 - 无监督分类:用不知类别的样本集进行分类器设计。需要某种意义的先验知识和人工判断。主要指聚类分析,还包括降维、流形学习、MDS等探索性数据分析方法。

模式识别简要历史

- 1950年代Noam Chemsky 提出形式语言理论,美籍华人付京荪提出句法结构模式识别。
- 1960年代L.A. Zadeh提出了模糊集理论,模糊模式识别理论得到了较广泛的应用。
- 1980年代Hopfield提出神经元网络模型理论。近些年人工神经网络NN (Neural Networks)在模式识别和人工智能上得到较广泛的应用。
- 1990年代Vapnik等人提出的小样本学习理论,支持向量机 SVM (Support Vector Machines)得到了很大的重视。

模式识别的几个学派

- (1)符号学派,又称为逻辑主义、心理学派或计算机学派, 其原理主要为物理符号系统假设和有限合理性原理。决策树 方法,专家系统。
- (2) 连接学派,又称为仿生学派或生理学派,其主要原理为神经网络及神经网络间的连接机制与学习算法。ANN。
- (3) 进化学派。
- (4)贝叶斯学派: HMM, 概率图模型。
- (5) 类推学派: kNN, 支持向量机。

二、聚类分析

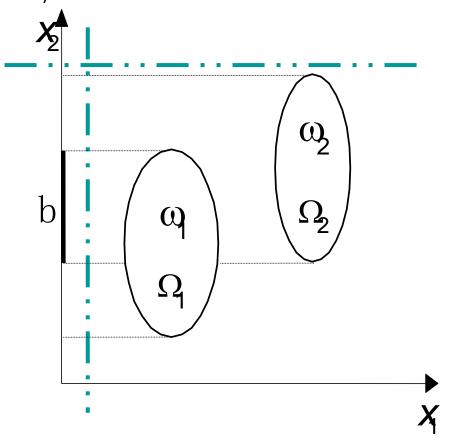
- 2.1 相似性聚类的概念
- 2.2 相似性测度和聚类准则
- 2.3 基于距离阈值的聚类算法
- 2.4 层次聚类法
- 2.5 动态聚类法
- 2.6 聚类结果评价

2.1 相似性聚类的概念

- 无监督学习: 使用不知类别的样本集进行分类器设计
 - 基于概率密度函数估计的方法(不讲)
 - 基于样本间相似性度量的方法(聚类分析)
- **聚类分析**: 是指在没有太多先验知识的情况下,按"物以类聚"思想,根据模式间的**某种相似性**,对样本进行分类。因此也称为相似性聚类
 - 训练前,甚至没有确切的类别数目和类别定义,需要根据待分类样本集的实际特征分布情况与分类活动的应用目的,通过训练样本来学习出类别数目和"类别的操作定义",同时为训练样本分配类别
 - 一般需要迭代多次才会得出有意义的结果
 - "物以类聚"原则展开说就是:"同类样本间的相似性 大于 不同类样本间的相似性"。
 - 聚类方法的有效性: 取决于**分类算法**与样本**特征分布**的匹配
 - 从方法丰富性与成熟度看,与判别分析(分类)方法相比,聚类方 法更多利用直观思想和启发式方法,方法较多,但是缺乏完整稳定 的聚类理论基础

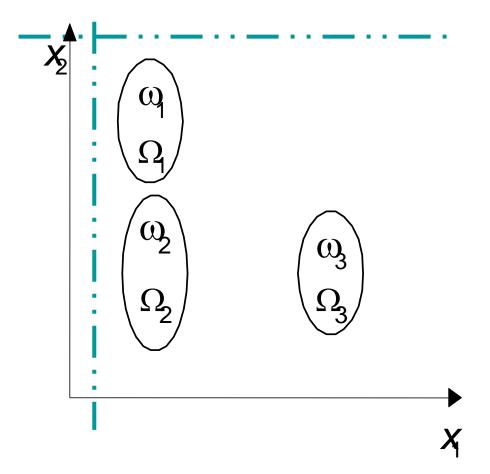
特征设计对聚类分析的影响

- (1) 特征选取不当使分类无效
 - 如果选择 X_2 作为分类特征,则在重叠区无法区分 α 和 α 2。这两类
 - 如果选择 X_1 作为分类特征,则可以很容易区分 Ω 和 Ω_2 这两类



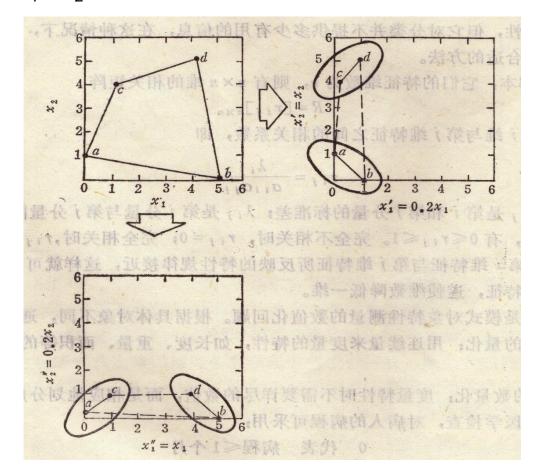
特征设计对聚类分析的影响

- (2) 特征选取不足使分类无效
 - 不管选择 X_1 还是 X_2 作为分类特征,都无法单独区分这三类
 - \bullet 但是,如果选择(X_1, X_2)作为分类特征,则可以区分这三类

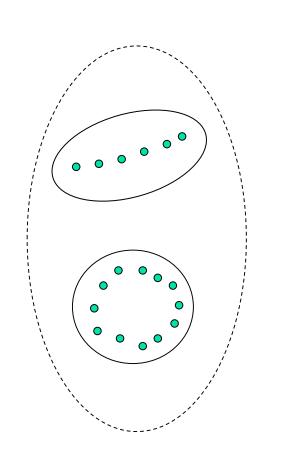


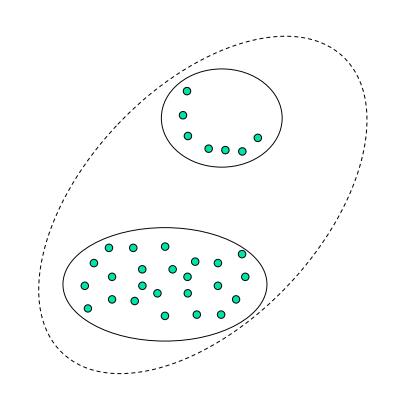
量纲不同,聚类结果可能不同

- 初始: *a,b,c,d* 属于4个不同的类(左上角)。
- 当 x_1 的量纲变大导致数值变小时(右上角),a,b成为一类,c,d成为一类。
- 当 x_2 的量纲变大导致数值变小时(左下角),a,c成为一类,b,d成为一类。
- 当然,如果x₁和x₂的量纲按照相同尺度同时变化,则不影响聚类结果



相似性(距离)测度不同,聚类结果也不同





粗聚类则为2类,细聚类则为4类

影响聚类方法有效性的几个因素

综上可见:

- 选择什么特征?
- 选择多少个特征?
- 选择什么样的量纲?
- 选择什么样的距离测度?

对分类结果都会产生极大影响。

2.2 相似性测度和聚类准则

- **相似性测度**: 衡量模式之间相似性的一种量度。
- 由n个特征值组成的n维向量 $X = [x_1, x_2,, x_n]^T$,称为该模式(样本)的特征矢量。它相当于特征空间中的一个点,以特征空间中的点间距离作为模式相似性的测量,作为模式归类依据,距离越小,越"相似"。
- 复习一下:

$$\mathbf{YY}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 & y_2 & y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1^2 & y_1 y_2 & y_1 y_3 \\ y_2 y_1 & y_2^2 & y_2 y_3 \\ y_3 y_1 & y_3 y_2 & y_3^2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{Y}^{\mathrm{T}}\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_1 & y_2 & y_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 = \|\mathbf{Y}\|^2$$

1. 欧氏距离(Euclidean,欧几里德)

设 X_1 、 X_2 为两个n维模式样本

$$\boldsymbol{X}_{1} = [x_{11}, x_{12},, x_{1n}]^{T}$$
 $\boldsymbol{X}_{2} = [x_{21}, x_{22},, x_{2n}]^{T}$

欧氏距离定义为:

$$D(X_1, X_2) = ||X_1 - X_2|| = \sqrt{(X_1 - X_2)^T (X_1 - X_2)}$$
$$= \sqrt{(x_{11} - x_{21})^2 + \dots + (x_{1n} - x_{2n})^2}$$

距离越小,越相似。

注意:

- 各特征维上应当是相同的物理量;
- 注意同类物理量的量纲应该一样。

2. 马氏距离(Mahalanobis,马哈拉诺比斯)

平方表达式:
$$D^2 = (X - M)^T C^{-1} (X - M)$$

式中, X: 模式向量; M: 均值向量;

C: 该类模式总体的协方差矩阵。

对
$$n$$
维向量: $X = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$ $M = \begin{bmatrix} m_1 \\ \vdots \\ m_n \end{bmatrix}$

$$C = E\{(X - M)((X - M))^{T}\}$$

$$= E\{\begin{bmatrix} (x_{1} - m_{1}) \\ (x_{2} - m_{2}) \\ \vdots \\ (x_{n} - m_{n}) \end{bmatrix} [(x_{1} - m_{1}) \quad (x_{2} - m_{2}) \quad \cdots \quad (x_{n} - m_{n})]\}$$

2. 马氏距离

$$= \begin{bmatrix} E(x_1 - m_1)(x_1 - m_1) & E(x_1 - m_1)(x_2 - m_2) & \cdots & E(x_1 - m_1)(x_n - m_n) \\ E(x_2 - m_2)(x_1 - m_1) & E(x_2 - m_2)(x_2 - m_2) & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ E(x_n - m_n)(x_1 - m_1) & \cdots & E(x_n - m_n)(x_n - m_n) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \sigma_{11}^2 & \sigma_{12}^2 & \cdots & \sigma_{1n}^2 \\ \sigma_{21}^2 & \ddots & \sigma_{jk}^2 & \vdots \\ \vdots & \vdots & \sigma_{kk}^2 & \vdots \\ \sigma_{n1}^2 & \cdots & \cdots & \sigma_{nn}^2 \end{bmatrix}$$

马氏距离:在各分量特征维度计算样本模式与均值模式的距离上,剔除了该维度上模式类的方差影响——方差大,说明模式取值变化大,因此计算距离时要用方差归一化,这样得出的分量模式与均值模式的距离才具有比较意义。

优点:排除了模式样本之间的相关性影响。

特例: 当C=1时,马氏距离退化为欧氏距离。

3. 明氏距离(Minkowski, 闵可夫斯基)

n维模式向量 X_i 、 X_i 间的明氏距离表示为:

$$D_m(\boldsymbol{X}_i, \boldsymbol{X}_j) = \left[\sum_{k=1}^n \left| x_{ik} - x_{jk} \right|^m \right]^{\frac{1}{m}}$$

式中, x_{ik} 、 x_{ik} 分别表示 x_{i} 和 x_{i} 的第x个分量。也称为 x_{i} m-范数。

当*m*=2时,明氏距离为欧氏距离。

当*m*=1时:

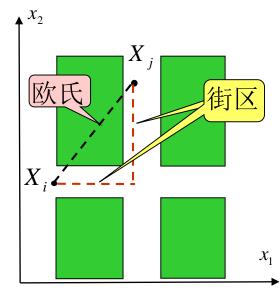
$$D_1(X_i, X_j) = \sum_{k=1}^{n} |x_{ik} - x_{jk}|$$

称为 "街区" 距离 ("City block" distance)、

曼哈顿距离。

示例: 当*k*=2时: 图中

$$D_1(X_i, X_j) = |x_{i1} - x_{j1}| + |x_{i2} - x_{j2}|$$



4. 汉明距离 (Hamming)

设 X_i 、 X_i 为n维二值模式(分量取值1或-1)样本向量,则

汉明距离:
$$D_h(X_i, X_j) = \frac{1}{2} \left(n - \sum_{k=1}^n x_{ik} \cdot x_{jk} \right)$$

式中, x_{ik} 、 x_{jk} 分别表示 X_i 和 X_j 的第k个分量。

说明:汉明距离中的**求和式**,表达的是两个二值向量之间,**同值分量数与不同值分量数之差**;显然,这个求和式表示的差值越大,表示两个向量越相似,于是求和式的负值也就越小,因此求和式的负值可表示距离,取值于(-n, n)。为更直观表达,用最大值n加上这个差值的负值并除以2,取值于(0, n)。

- ——0:表示两模式向量的各个分量都相同;
- ——n: 表达两模式向量的各个分量都不同;
- ——*n/4*:表示两模式向量中,取值相同的分量数比取值不同的分量数多*n/2*。因为此时:取值相同的分量数为(3/4)*n*,取值相同的分量数为(1/4)*n*。

5. 角度相似性函数

$$S(\boldsymbol{X}_{i}, \boldsymbol{X}_{j}) = \frac{\boldsymbol{X}_{i}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}_{j}}{\|\boldsymbol{X}_{i}\| \cdot \|\boldsymbol{X}_{j}\|}$$

定义为:模式向量 X_i , X_i 之间夹角的余弦。

测度基础:以两矢量的方向是否相近作为考虑的基础,矢量长度并不重要。设

$$\vec{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)', \vec{y} = (y_1, y_2, ..., y_n)'$$

注意:该测度对坐标系的旋转和尺度的缩放是不变的,但对一般的线形变换和坐标系的平移不具有不变性。

6. Tanimoto测度(广义Jaccard系数)

用于0-1型二值特征情况,定义:

$$S(X_{i}, X_{j}) = \frac{X_{i}^{\mathsf{T}} X_{j}}{X_{i}^{\mathsf{T}} X_{i} + X_{j}^{\mathsf{T}} X_{j} - X_{i}^{\mathsf{T}} X_{j}}$$

$$= \frac{X_{i}, X_{j} \geq \text{间均具有某特征的数目}}{X_{i} \text{和} X_{j} + \text{有某种特征的分量总数}}$$

如果把记1为"有某种特征",记0为"无某种特征",则Tanimoto测度的分子表达的是两特征向量之间"都具有某种特征"的分量数,分母表达的则是,在两个向量中"至少有一个向量的分量有某种特征"的分量数。

相似性测度函数的共同点都涉及到把两个相比较的向量 X_i , X_j 的分量值组合起来,但怎样组合并无普遍有效的方法,对具体的模式分类,需视情况作适当选择。

相关数学基础

- M1 齐次线性方程组的求解(基础解系)
- M2 向量的内积、方阵的特征分解
- M3 向量范数与矩阵范数
- M4 多元函数对矩阵变量的求导
- M5 矩阵的QR分解与奇异值分解
- M6 投影矩阵、广义逆矩阵、正定矩阵 (概率论与数理统计: 自行复习)

M1-线性方程组求解(一) 齐次线性方程组解的性质

1. 解向量的概念

设有齐次线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = 0 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = 0 \\ \dots & \dots & \dots \end{cases}$$

$$(1)$$

$$a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = 0$$

若记

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

则上述方程组(1)可写成向量方程

$$Ax = 0$$
.

若 $x_1 = \xi_{11}, x_2 = \xi_{21}, \dots, x_n = \xi_{n1}$ 为方程 Ax = 0 的

解,则

$$x = \xi_1 = \begin{pmatrix} \xi_{11} \\ \xi_{21} \\ \vdots \\ \xi_{n1} \end{pmatrix}$$

称为方程组(1) 的**解向量**,它也就是向量方程 (2)的解.

2. 齐次线性方程组解的性质

(1) 若 $x = \xi_1, x = \xi_2$ 为 Ax = 0 的解,则

$$x = \xi_1 + \xi_2$$

也是 Ax=0 的解.

(2) 若 $x = \xi_1$ 为 Ax = 0的解,k 为实数,则 $x = k\xi_1$ 也是Ax = 0的解。

由以上两个性质可知,方程组的全体解向量所组成的集合,对于加法和数乘运算是封闭的,因此构成一个向量空间,称此向量空间为齐次线性方程组 Ax = 0 的解空间.

M1-线性方程组求解(二)基础解系及其求法

1. 基础解系的定义

 $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_t$ 称为齐次线性方程组Ax = 0的基础解系,如果

- $(1)\eta_1,\eta_2,\cdots,\eta_t$ 是Ax=0的一组线性无关的解;
- (2)Ax = 0的任一解都可由 $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_t$ 线性表

出.

如果 $\eta_1,\eta_2,\dots,\eta_t$ 为齐次线性方程组Ax=0的一组基础解系,那么,Ax=0的通解可表示为

$$x = k_1 \eta_1 + k_2 \eta_2 + \dots + k_t \eta_t$$

其中 k_1,k_2,\cdots,k_{n-r} 是任意常数.

2. 齐次线性方程组基础解系的求法

设齐次线性方程组的系数矩阵为A,并不妨设A的前r个列向量线性无关.于是A可化为

$$A \sim egin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 & b_{11} & \cdots & b_{1,n-r} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & 1 & b_{r1} & \cdots & b_{r,n-r} \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

$$Ax = 0 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 & b_{11} & \cdots & b_{1,n-r} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & 1 & b_{r1} & \cdots & b_{r,n-r} \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = 0$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} x_1 = -b_{11}x_{r+1} - \dots - b_{1,n-r}x_n \\ \dots \\ x_r = -b_{r1}x_{r+1} - \dots - b_{r,n-r}x_n \end{cases}$$

现对 x_{r+1}, \dots, x_n 取下列 n-r 组数:

$$\begin{pmatrix} x_{r+1} \\ x_{r+2} \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \cdots, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

分别代入
$$\begin{cases} x_1 = -b_{11}x_{r+1} - \dots - b_{1,n-r}x_n \\ \dots \\ x_r = -b_{r1}x_{r+1} - \dots - b_{r,n-r}x_n \end{cases}$$

依次得
$$\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -b_{11} \\ \vdots \\ -b_{r1} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -b_{12} \\ \vdots \\ -b_{r2} \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} -b_{1,n-r} \\ \vdots \\ -b_{r,n-r} \end{pmatrix}.$$

从而求得原方程组的 n-r 个解:

$$\xi_{1} = \begin{pmatrix}
-b_{11} \\
\vdots \\
-b_{r1} \\
1 \\
0 \\
\vdots \\
0
\end{pmatrix}, \quad \xi_{2} = \begin{pmatrix}
-b_{12} \\
\vdots \\
-b_{r2} \\
0 \\
1 \\
\vdots \\
0
\end{pmatrix}, \quad \cdots, \quad \xi_{n-r} = \begin{pmatrix}
-b_{1,n-r} \\
\vdots \\
-b_{r,n-r} \\
0 \\
\vdots \\
1
\end{pmatrix}.$$

M2-向量内积与方阵的特征分解(一)向量的内积

1 向量内积的定义

定义 设有n维向量

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix},$$

令 $[x,y] = x_1y_1 + x_2y_2 + \cdots + x_ny_n, [x,y]$ 称为向量 x与y的内积.

内积的矩阵表示

$$[x, y] = \chi^T y,$$

其中x, y都是列向量.

内积满足下列运算规律(其中x,y,z为n维向量, λ 为实数):

- (1)[x,y]=[y,x];
- $(2)[\lambda x, y] = \lambda[x, y];$
- (3)[x+y,z] = [x,z] + [y,z].

2 向量的长度

定义 令

$$||x|| = \sqrt{[x,x]} = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2},$$

 $\|x\|$ 称为n维向量x的长度(或范数).

向量的长度具有下列性质:

- (1)非负性 当 $x \neq 0$ 时, |x| > 0; 当x = 0时, |x| = 0;
- $(2) 齐次性 ||\lambda x|| = |\lambda||x||;$
- (3)三角不等式 $||x+y|| \le ||x|| + ||y||$.

当|x|=1时,称x为单位向量.

向量的内积满足施瓦茨不等式

$$[x,y]^2 \leq [x,x][y,y],$$

从而有
$$\frac{[x,y]}{\|x\|\|y\|} \le 1, \quad (\|x\|\|y\| \ne 0 \text{时}).$$

3 向量的夹角

定义 当 $|x|\neq 0, |y|\neq 0$ 时,

$$\theta = \arccos \frac{[x, y]}{\|x\| \|y\|}$$

称为n维向量x与y的夹角.

当[x,y]=0时,称向量x与y正交. 若x=0,则x与任何向量都正交

4 正交向量组的性质

所谓正交向量组,是指一组两两正交的非零向量.向量空间的基若是正交向量组,就称为正交基.

定理 若n维向量 a_1,a_2,\cdots,a_r 是一组两两正交的非零向量,则 a_1,a_2,\cdots,a_r 线性无关.

定义 设n维向量 e_1,e_2,\cdots,e_r 是向量空间 $V(V \subset \mathbb{R}^n)$ 的一个基,如果 e_1,e_2,\cdots,e_r 两两正交,则称 e_1,e_2,\cdots,e_r 是V的一个规范正交基

若 e_1,e_2,\cdots,e_r 是V的一个规范正交基,那么V中任一向量a都可表为

$$a = \lambda_1 e_1 + \lambda_2 e_2 + \dots + \lambda_r e_r,$$

 $\lambda_i = e_i^T a = [a, e_i], (i = 1, 2, \dots, r).$

施密特正交化方法

其中

设 a_1,a_2,\cdots,a_r 是向量空间V的一个基,要求V的一个规范正交基,只需把 a_1,a_2,\cdots,a_r 这个基规范正交化.

第一步 正交化

取
$$b_1 = a_1;$$

$$b_2 = a_2 - \frac{[b_1, a_2]}{[b_1, b_1]} b_1;$$

 $b_r = a_r - \frac{[b_1, a_r]}{[b_1, b_1]} b_1 - \frac{[b_2, a_r]}{[b_2, b_2]} b_2 - \dots - \frac{[b_{r-1}, a_r]}{[b_{r-1}, b_{r-1}]} b_{r-1}$.
则 b_1, b_2, \dots, b_r 两两正交,且与 a_1, a_2, \dots, a_r 等价.

第二步 单位化

取
$$e_1 = \frac{1}{\|b_1\|} b_1, e_2 = \frac{1}{\|b_2\|} b_2, \dots, e_r = \frac{1}{\|b_r\|} b_r$$
,就得

V的一个规范正交基

5 正交矩阵与正交变换

定义 如果n阶矩阵A满足

$$A^T A = E \qquad (\square A^{-1} = A^T),$$

那么称4为正交矩阵.

方阵 A 为正交矩阵的充分必要条件是 A 的行(列)向量都是单位向量,且两两正交.

正交矩阵A的n个列(行)向量构成向量空间 R^n 的一个规范正交基

定义 若P为正交矩阵,则线性变换y = Px称为正交变换.

正交变换的特性在于保持线段的长度不变.

设y = Px为正交变换,则有

$$||y|| = \sqrt{y^T y} = \sqrt{x^T P^T P x} = \sqrt{x^T x} = ||x||.$$

M2-向量内积与方阵的特征分解 (二)方阵的特征值和特征向量

定义 设A是n阶矩阵,如果数 λ 和n维非零列向量x使关系式

$$Ax = \lambda x$$

成立,那么,这样的数 λ 称为方阵A的特征值,非零向量x称为A的对应于特征值 λ 的特征向量.

 $|A - \lambda E| = 0$ 称为方阵A的特征方程.

 $f(\lambda) = |A - \lambda E|$ 称为方阵A的特征多项式

n阶方阵A有n个特征值.若 $A = (a_{ij})$ 的特征值为

$$\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$$
,则有

$$(1) \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_n = a_{11} + a_{22} + \cdots + a_{nn};$$

$$(2) \lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_n = |A|.$$

1、有关特征值的一些结论

设 $\lambda \neq A = (a_{ij})_{n \times n}$ 的特征值,则

- $(1)\lambda$ 也是 A^{T} 的特征值;
- $(2) \lambda^k$ 是 A^k 的特征值(k为任意自然数); $\varphi(\lambda)$ 是 $\varphi(A)$ 的特征值.其中 $\varphi(\lambda) = a_0 + a_1 \lambda + \dots + a_m \lambda^m$, $\varphi(A) = a_0 E + a_1 A + \dots + a_m A^m$.
- (3)当A可逆时, $\frac{1}{\lambda}$ 是 A^{-1} 的特征值; $\frac{1}{\lambda}\cdot |A|$ 是 A^* 的特征值.

2、有关特征向量的一些结论

定理 设 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ 是方阵 Λ 的m个特征值, p_1, p_2, \dots, p_m 依次是与之对应的特征向量,如果 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ 各不相等,则 p_1, p_2, \dots, p_m 线性无关. 即属于不同特征值的特征向量是线性无关的

定理 属于同一个特征值的特征向量的非零线性 组合仍是属于这个特征值的特征向量.

3、特征值与特征向量的求法

第一步 计算A 的特征多项式;

第二步 求出特征方程的全部根,即得A 的全部特征值;

第三步 将每一个特征值代入相应的线性方程组, 求出基础解系, 即得该特征值的特征向量.

例 计算3阶实矩阵
$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 4 \\ 2 & 0 & 2 \\ 4 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$
的全部特征值

和特征向量.

 \mathbf{m} 第一步 计算 \mathbf{A} 的特征多项式

$$f(\lambda) = |\lambda E - A| = \begin{vmatrix} \lambda - 3 & -2 & -4 \\ -2 & \lambda & -2 \\ -4 & -2 & \lambda - 3 \end{vmatrix}$$
$$= (\lambda - 8)(\lambda + 1)^{2}.$$

第二步 求出特征多项式 (λ) 的全部根,即A的全部特征值.

令 $f(\lambda) = 0$,解之得 $\lambda_1 = 8$, $\lambda_2 = \lambda_3 = -1$,为A的全部特征值.

第三步 求出 A 的全部特征向量

 $all_{\lambda_1} = 8$,求相应线性方程组 $(\lambda_1 E - A)x = 0$ 的一个基础解系

$$\begin{cases} 5x_1 - 2x_2 - 4x_3 = 0, \\ -2x_1 + 8x_2 - 2x_3 = 0, \\ -4x_1 - 2x_2 + 5x_3 = 0, \end{cases}$$

化简求得此方程组的一个基础解系

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

属于 $\lambda_1 = 8$ 的全部特征向量为 $k_1\alpha_1(k_1 \neq 0$ 为实数).

同理对 $\lambda_2 = \lambda_3 = -1$,求相应线性方程组($\lambda_2 E - A$)x = 0的一个基础解系:

$$\begin{cases}
-4x_1 - 2x_2 - 4x_3 = 0, \\
-2x_1 - x_2 - 2x_3 = 0, \\
-4x_1 - 2x_2 - 4x_3 = 0,
\end{cases}$$

求解得此方程组的一个基础解系:

$$\alpha_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \qquad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

于是A的属于 $\lambda_2 = \lambda_3 = -1$ 的全部特征向量为 $k_2\alpha_2 + k_3\alpha_3$, k_2,k_3 是不全为零的实数.

从而A的全部特征向量为 $k_1\alpha_1$; $k_2\alpha_2+k_3\alpha_3$,这里 $k_1\neq 0$ 为实数, k_2 , k_3 是不全为零的实数.

定义 设A, B都是n阶矩阵,若有可逆矩阵P,使 $P^{-1}AP = B$,

则称B = A的相似矩阵,或说矩阵A = B相似.

对A进行运算 $P^{-1}AP$ 称为对A进行相似变换,

可逆矩阵P称为把A变成B的相似变换矩阵

矩阵之间的相似具有(1)自反性; (2)对称性; (3)传递性.

1、有关相似矩阵的性质

(1)若A = B相似,则A = B的特征多项式相同,从而A = B的特征值亦相同。

(2)若A与对角矩阵

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

相似,则 $\lambda_1,\lambda_2,\dots,\lambda_n$ 是A的n个特征值.

(3)若
$$A = PB P^{-1}$$
,则 $A^k = P B^k P^{-1}$,

$$\varphi(A) = P\varphi(B) P^{-1}.$$

特别地,若有可逆阵P,使 $P^{-1}AP = \Lambda$ 为对角阵, 则有 $A^k = P \Lambda^k P^{-1}, \varphi(A) = P \varphi(\Lambda) P^{-1}$.

- (4) A 能对角化的充分必要条件是 A 有 n 个线性无关的特征向量.
 - (5) A 有n个互异的特征值,则A与对角阵相似.

2、实对称矩阵的相似矩阵

- (1)实对称矩阵的特征值为实数.
- (2)实对称矩阵的属于不同特征值的特征向量必正交.
- (3)若 λ 是实对称矩阵 Λ 的r重特征值,则对应 λ 的必有r个线性无关的特征向量
- (4)实对称矩阵必可对角化即若A为n阶实对称阵,则必有正交阵P,使得 $P^{-1}AP = \Lambda$,其中 Λ 是以A的n个特征值为对角元素的对角阵.

M2-向量内积与方阵的特征分解(四)二次型

定义 含有n个变量 x_1, x_2, \dots, x_n 的二次齐次函数

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + \dots$$

$$+ a_{nn}x_n^2 + 2a_{12}x_1x_2 + 2a_{13}x_1x_3 + \dots$$

$$+ 2a_{n-1,n}x_{n-1}x_n$$

称为二次型.

二次型可记作 $f = x^T A x$,其中 $A^T = A \cdot A$ 称为二次型f的矩阵,f称为对称阵A的二次型,对称阵A的秩称为二次型f的秩.

二次型与它的矩阵是一一对应的.

当 a_{ij} 是复数时,f称为复二次型,当 a_{ij} 是实数时,f称为实二次型.

正定二次型

定义 设有实二次型 $f(x) = x^T Ax$,如果对任何 $x \neq 0$,都有f(x) > 0(显然f(0) = 0),则称f为正定二次型,并称对称矩阵A是正定的;如果对任何 $x \neq 0$,都有f(x) < 0,则称f为负定二次型,并称对称矩阵A是负定的.

M3-向量范数与矩阵范数(一)向量范数

定义:如果V是数域K上的线性空间,且对于V的任

- 一向量x,对应一个实数值 |x|,满足以下三个条件
 - 1) 非负性: $||x|| \ge 0$, 且 $||x|| = 0 \Leftrightarrow x = 0$
 - 2) 齐次性: $||kx|| = |k| \cdot ||x||$, $\forall k \in K$
 - 3) 三角不等式: $||x+y|| \le ||x|| + ||y||$

则称 |x| 为V上向量x的范数,简称为向量范数。

注意: 2)中|k| 当K 为实数时为绝对值, 当K 为复数域时为复数的模。

向量的范数具有下列简单性质:

(1)
$$\stackrel{\text{def}}{=} ||x|| \neq 0$$
 $||x|| \neq 1$ $||x|| = 1$ $||x|| = 1$

(2)
$$\forall x \in V$$
 , $||-x|| = ||x||$ $||-x|| = |-1|||x|| = ||x||$

(3)
$$\forall x, y \in V$$
 , $||x|| - ||y|| \le ||x - y||$

$$||x|| = ||(x - y) + y|| \le ||x - y|| + ||y|| \Rightarrow ||x|| - ||y|| \le ||x - y||$$

(4)
$$\forall x, y \in V$$
, $||x|| - ||y|| \le ||x - y||$

$$||x|| = ||(x-y)+y|| \le ||x-y|| + ||y|| \implies ||x|| - ||y|| \le ||x-y||$$

同样
$$||y|| - ||x|| \le ||y - x|| = ||x - y||$$

例1: 线性空间 C^n , 设 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in C^n$

1: $\|\mathbf{x}\|_{1} = \sum |\xi_{i}|$ 是一种向量范数,记为1-范数

2: $\|x\| = \sqrt{(x,x)}$ 是一种向量范数,记2-范数

3: $\|x\| = \max_{i} |x_{i}|$ 是一种向量范数,记为 ∞ -范数

4:
$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \quad \left(1 \le p < \infty\right)$$

是一种向量范数,记为p-范数或 l_p 范数

例2:线性空间V''中,任取它的一组基 $x_1, ..., x_n$ 则对于任意向量x,它可以表示为

$$x = \xi_1 x_1 + \dots + \xi_n x_n$$

与 $\alpha = (\xi_1, \dots, \xi_n)^T \in C^n$ 是同构的
所以 $\|x\|_p = \|\alpha\|_p$ 是 V^n 中元素x的 p 一范数

例3: C[a,b]为闭区间 [a,b]上的所有实连续函数所成线性空间,可以验证以下定义式均满足范数条件

$$||f(x)||_{1} = \int_{a}^{b} f(x)dt \qquad ||f(x)||_{\infty} = \max_{t \in [a,b]} |f(x)|$$

$$||f(x)||_{p} = \left(\int_{a}^{b} |f(x)|^{p} dt\right)^{\frac{1}{p}}, 1$$

例4:设A为n阶实对称正定矩阵,对 $x \in Rn$, $\mathbb{E} \mathbb{E} \|\mathbf{x}\|_{A} = (\mathbf{x}^{T} A \mathbf{x})^{1/2}$ 称为加权范数或椭圆范数 由正定矩阵定义可知 $\|x\|_4 = 0 \Leftrightarrow x = 0$; $\|x\|_4 \neq 0 \Leftrightarrow x \neq 0$ 对任意数 $\alpha \in \mathbb{R}$, 有 $\|\alpha x\|_{A} = \sqrt{(\alpha x)^{T} A \alpha x} = \sqrt{\alpha^{2} x^{T} A x} = |\alpha| \sqrt{x^{T} A x} = |\alpha| \|x\|_{A}$ 由 A正定且实对称 ⇒∃ 正交矩阵Q,使得 $Q^{T}AQ = diag(\lambda_{1}, \dots, \lambda_{n}), \quad \lambda_{i} > 0, i = 1, \dots, n$ 定义 $B = diag(\sqrt{\lambda_1}, \dots, \sqrt{\lambda_n})Q^T$ 可得 $A = B^T B$ $||x + y||_A = ||B(x + y)||_2 \le ||Bx||_2 + ||By||_2 = ||x||_A + ||y||_A$

M3-向量范数与矩阵范数(二)向量范数的等价性

定义:有限维线性空间 V'' 中任意两个向量范数 $\|x\|_{\alpha}$ 和 $\|x\|_{\beta}$,如果存在着正常数 c_1 和 c_2 ,使得 $c_1\|x\|_{\beta} \le \|x\|_{\alpha} \le c_2\|x\|_{\beta}$ ($\forall x \in V''$)则称范数 $\|x\|_{\alpha}$ 与 $\|x\|_{\beta}$ 等价

(1) 自反性:
$$\mathbf{1} \cdot \|\mathbf{x}\|_{\alpha} \leq \|\mathbf{x}\|_{\alpha} \leq \mathbf{1} \cdot \|\mathbf{x}\|_{\alpha}, \forall \mathbf{x} \in V^n$$

(2) 对称性:
$$\frac{1}{c} \|x\|_{\alpha} \le \|x\|_{\beta} \le \frac{1}{c} \|x\|_{\alpha}, \forall x \in V^n$$

(3) 传递性:
$$c_1 \|x\|_{\beta} \le \|x\|_{\alpha} \le c_1 \|x\|_{\beta}$$
 $\forall x \in V^n$ $c_3 \|x\|_{\gamma} \le \|x\|_{\alpha} \le c_4 \|x\|_{\gamma}$ $\Rightarrow c_5 \|x\|_{\gamma} \le \|x\|_{\alpha} \le c_6 \|x\|_{\gamma}$

定理:有限维线性空间中任意两个向量范数都等价。

证明思路 1)范数等价为等价关系,满足传递性;

- 2)任意范数为坐标函数的连续函数;
- 3)在单位超球面上有大于零的极大极小值, 与2-范数等价。

M3-向量范数与矩阵范数 (三)矩阵范数

定义: 矩阵空间 $C^{m\times n}$ 中, $\forall A \in C^{m\times n}$, 定义实数值 |A| ,且满足以下条件

- 1)正定条件: $||A|| \ge 0$, 且 $||A|| = 0 \Leftrightarrow A = 0_{m \times n}$
- 2) 齐次条件: $||kA|| = |k| \cdot ||A||$, $\forall k \in K$
- 3)三角不等式: $||A + B|| \le ||A|| + ||B||$, $B \in C^{m \times n}$ 则称||A||为A的广义范数。

若对于 $C^{m\times n}$, $C^{n\times l}$ 及 $C^{m\times n}$ 上的同类广义矩阵范数有

4)相容条件: $||AB|| \le ||A|| ||B||$, $B \in C^{n \times l}$

则称|A|为A的范数。

定义:设 $C^{m\times n}$ 的矩阵函数 $\|A\|_{M}$, C^{m} 与 C^{n} 中的同类范数 $\|x\|_{V}$,若 $\|Ax\|_{V} \leq \|A\|_{M} \|x\|_{V}$ 则称矩阵范数 $\|A\|_{M}$ 与向量范数 $\|x\|_{V}$ 相容

M3-向量范数与矩阵范数(四)矩阵的从属范数

定理:对 C'''与 C''上的同类向量范数 $\|x\|_{V}$,定义 $\|A\| = \max_{\|x\|_{V} = 1} \|Ax\|_{V}$ $(\forall A_{m \times n}, x \in C^{n})$ 则 $\|A\|$ 是 $C'''^{m \times n}$ 中矩阵A 的范数,且 $\|A\|$ 与 $\|x\|_{V}$ 相容 $\|A\|$ 称为由 $\|x\|_{V}$ 导出的矩阵范数(或称为从属范数)

等价定义:
$$\max_{\|x\|_{V}=1} \|Ax\|_{V} = \max_{x \neq \theta} \frac{\|Ax\|_{V}}{\|x\|_{V}}$$

注:

(1) 一般的矩阵范数: $:: I = I \cdot I$

$$||I|| \le ||I|| \cdot ||I||$$
 $\therefore ||I|| \ge 1$

例如:
$$||I||_{m1} = n$$
, $||I||_{F} = \sqrt{n}$

- (2) 矩阵的从属范数: $||I|| = \max_{\|x\|_v = 1} |Ix||_v = 1$
- (3) 常用的从属范数:

$$\|x\|_{V} \quad \|x\|_{1} \quad \|x\|_{2} \quad \|x\|_{\infty}$$
 $\|A\|_{M} \quad \|A\|_{1} \quad \|A\|_{2} \quad \|A\|_{\infty}$

定理:设 $A = (a_{ij})_{m \times n}$,则

(1) 列和范数:
$$||A||_1 = \max_j \left\{ \sum_{i=1}^m |a_{ij}| \right\}$$

(2) 谱范数:
$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_1}, \lambda_1 = \max\{\lambda(A^H A)\}$$

(3) 行和范数:
$$\|A\|_{\infty} = \max_{i} \left\{ \sum_{j=1}^{m} |a_{ij}| \right\}$$

M4-多元函数对矩阵变量的求导

(一)数量函数关于向量(矩阵)的微分

定义1 设
$$y = f(X) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

对 x_1, x_2, \dots, x_n 有偏导数,定义 $y = f(X)$
对向量 $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ 的导数为

$$\frac{df}{dX} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right)^T = gradf,$$
而数量函数 $y = f(X)$ 对向量 $X^T = (x_1, x_2, \dots, x_n)$

的导数定义为

$$\frac{df}{dX^{T}} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_{1}}, \frac{\partial f}{\partial x_{2}}, \cdots, \frac{\partial f}{\partial x_{n}}\right) \circ \mathbb{R} \times \left(\frac{df}{dX^{T}}\right)^{T} = \frac{df}{dX} \circ$$

一般地,若
$$y = f(X) =$$
 $f(x_{11}, x_{12}, \dots, x_{1n}, x_{21}, x_{22}, \dots, x_{2n}, \dots, x_{m1}, x_{m2}, \dots, x_{mn})$ 对每个 x_{ij} 有偏导数,则定义 $y = f(X)$ 对矩阵 $X = (x_{ij})_{m \times n}$ 的导数为

$$\frac{df}{dX} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f}{\partial x_{12}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{1n}} \\ \frac{\partial f}{\partial x_{21}} & \frac{\partial f}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{2n}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{mn}} \end{pmatrix} \circ$$

性质1 设f(X), g(X)为矩阵X的

数量函数,如果 $\frac{df}{dX}$ 及 $\frac{dg}{dX}$ 存在,则

$$(1)\frac{d}{dX}[f(X)+g(X)] = \frac{df(X)}{dX} + \frac{dg(X)}{dX};$$

$$(2)\frac{d}{dX}[f(X)g(X)] = f(X)\frac{dg(X)}{dX} + g(X)\frac{df(X)}{dX}$$

例1 设自变量矩阵及其数量函数分别为

解 由于
$$\frac{\partial f}{\partial x_{ii}} = 2x_{ij}$$

$$(i = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, n)$$

$$\frac{dy}{dX} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_{ij}}\right)_{m \times n} = \left(2x_{ij}\right)_{m \times n} = 2X$$

性质2 设
$$X = (x_{ij})_{m \times n}$$
, $B = (b_{ij})_{n \times m}$,

$$A = (a_{ij})_{m \times m}$$
, \mathbb{N}

$$(1)\frac{d}{dX}tr(XX^T) = 2X;$$

$$(2)\frac{d}{dX}tr(BX) = \frac{d}{dX}tr(X^TB^T) = B^T;$$

$$(3)\frac{d}{dX}tr(XAX^{T}) = (A + A^{T})X_{\circ}$$

例2 设
$$y = f(X) = k^{T}X = \sum_{j=1}^{n} k_{j}x_{j}$$
,其中,

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T, \quad k = (k_1, k_2, \dots, k_n)^T,$$

$$\frac{dy}{dX}$$
.

解:
$$\frac{dy}{dx_j} = \frac{d(\sum_{j=1}^n k_j x_j)}{dx_j} = k$$

$$\frac{dy}{dX} = \left(\frac{\partial y}{\partial x_1}, \frac{\partial y}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial y}{\partial x_n}\right)^T = R$$

例3 设二次型
$$y = f(X) =$$

$$X^T A X = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} x_i x_j, 其中,$$

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$$
, $A = (a_{ij})_{n \times n}$,

且
$$A^T = A$$
,求 $\frac{dy}{dX}$ 。

解 因为
$$\frac{dy}{dX} = \left(\frac{\partial y}{\partial x_1}, \frac{\partial y}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial y}{\partial x_n}\right)^T$$

故只需求出 $\frac{\partial y}{\partial x_{k}}$, $k = 1, 2, \dots, n$ 即可。

曲于
$$y = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_i x_j = \sum_{i \neq k} \sum_{j \neq k} a_{ij} x_i x_j +$$

$$2\sum_{i\neq k}a_{ik}x_i + a_{kk}x_k^2, \quad \text{ix} \frac{\partial y}{\partial x_k} = 2\sum_{i\neq k}a_{ik}x_i + 2a_{kk}x_k$$

$$=2\sum_{i=1}^{n}a_{ik}x_{i}=2\sum_{i=1}^{n}a_{kj}x_{j}, \text{M} \text{ in } \frac{dy}{dX}=2AX_{\circ}$$

例 14:
$$A \in R^{m \times n}, b \in R^m$$
, 若 $x \in R^n$ 使得 $||Ax - b||_2 = \min$, 则 $A^T A x = A^T b$ 解: $f(x) = ||Ax - b||_2^2 = (Ax - b)^T (Ax - b)$

$$f(x) = ||Ax - b||_{2}^{2} = (Ax - b)^{T} (Ax - b)$$

$$= x^{T} A^{T} A x - 2b^{T} A x + b^{T} b$$

$$g(x) = b^{T} A x = b_{1} \sum_{j=1}^{n} a_{1j} \xi_{j} + \dots + b_{m} \sum_{j=1}^{n} a_{mj} \xi_{j}$$

$$\frac{dg}{dx} = \begin{bmatrix} \frac{\partial g}{\partial \xi_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial g}{\partial \xi_n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 a_{11} + \dots + b_m a_{m1} \\ \vdots \\ b_1 a_{1n} + \dots + b_m a_{mn} \end{bmatrix} = A^T b$$

$$\frac{df}{dx} = 2A^{T}Ax - 2A^{T}b = 0 \implies A^{T}Ax = A^{T}b$$

【注】
$$r(A^TA) = r(A) \Rightarrow r(A^TA|A^Tb) = r(A^TA) \Rightarrow A^TAx = A^Tb$$
 有解

M4-多元函数对矩阵变量的求导 <u>(二)向量函数对向量(矩阵)</u>的导数

定义2 设 $a_1(X)$, $a_2(X)$,…, $a_m(X)$ 对 x_i (i=1,2,...,n) 的偏导数都存在,定义向量函数 $a^T(X)$ 对X的导数为一个 $n \times m$ 阶矩阵,它的第i列向量就是 $a_i(X)$ 对X的导

数, 即
$$\frac{da^{T}(X)}{dX} = \begin{bmatrix} \frac{\partial a_{1}(X)}{\partial x_{1}} & \frac{\partial a_{2}(X)}{\partial x_{1}} & \cdots & \frac{\partial a_{m}(X)}{\partial x_{1}} \\ \frac{\partial a_{1}(X)}{\partial x_{2}} & \frac{\partial a_{2}(X)}{\partial x_{2}} & \cdots & \frac{\partial a_{m}(X)}{\partial x_{2}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial a_{1}(X)}{\partial x_{n}} & \frac{\partial a_{2}(X)}{\partial x_{n}} & \cdots & \frac{\partial a_{m}(X)}{\partial x_{n}} \end{bmatrix}_{n \times m}$$

同理, a(X)对 X^T 的导数定义为

$$\frac{da(X)}{dX^{T}} = \begin{pmatrix}
\frac{\partial a_{1}(X)}{\partial x_{1}} & \frac{\partial a_{1}(X)}{\partial x_{2}} & \cdots & \frac{\partial a_{1}(X)}{\partial x_{n}} \\
\frac{\partial a_{2}(X)}{\partial x_{1}} & \frac{\partial a_{2}(X)}{\partial x_{2}} & \cdots & \frac{\partial a_{2}(X)}{\partial x_{n}} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial a_{m}(X)}{\partial x_{1}} & \frac{\partial a_{m}(X)}{\partial x_{2}} & \cdots & \frac{\partial a_{m}(X)}{\partial x_{n}}
\end{pmatrix}_{m \times n}$$

显然有:
$$(1)\frac{da^T(X)}{dX} = \left\lceil \frac{da(X)}{dX^T} \right\rceil^T, (2)\frac{dX}{dX^T} = I_n = \frac{dX^T}{dX}$$

性质2 设A为 $s \times m$ 阶常数矩阵,f(X)为向量X的数量函数,a(X),b(X)为X的m维列向量函

数,则(1)
$$\frac{d}{dX}$$
[$a^{T}(X)+b^{T}(X)$]= $\frac{da^{T}(X)}{dX}+\frac{db^{T}(X)}{dX}$;

$$(2)\frac{d}{dX}\left[f(X)a^{T}(X)\right] = \frac{df(X)}{dX}a^{T}(X) + f(X)\frac{da^{T}(X)}{dX};$$

$$(3)\frac{d}{dX^{T}}\left[Aa(X)\right] = A\frac{da(X)}{dX^{T}};$$

$$(4)\frac{d}{dX}\left[a^{T}(X)b(X)\right] = \frac{da^{T}(X)}{dX}b(X) + \frac{db^{T}(X)}{dX}a(X);$$

$$(5)\frac{d}{dX^{T}}\left[a^{T}(X)b(X)\right] = b^{T}(X)\frac{da(X)}{dX^{T}} + a^{T}(X)\frac{db(X)}{dX^{T}}.$$

例15:
$$x = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_n \end{bmatrix}, F(x) = [f_1(x), f_2(x), \dots, f_l(x)]$$

$$\frac{dF}{dx} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \xi_1} & \dots & \frac{\partial f_l}{\partial \xi_1} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_1}{\partial \xi_n} & \dots & \frac{\partial f_l}{\partial \xi_n} \end{bmatrix}$$

例16:
$$A = (a_{ij})_{n \times n}$$
, $x = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_n \end{bmatrix}$

$$\frac{d(Ax)}{dx^{T}} = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} = A$$

$$Ax = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{n} a_{1j} \xi_{j} \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^{n} a_{nj} \xi_{j} \end{bmatrix}$$

M5-矩阵的QR分解与奇异值分解 (一)方阵的正交三角分解(QR分解)

定理6: $A_{m\times n}$ 可逆 \Rightarrow \exists 正交矩阵Q,可逆上三角矩阵R,使得A=QR。

证明: $A = (a_1, a_2, \dots, a_n)$ 可逆 $\Rightarrow a_1, a_2, \dots, a_n$ 线性无关, 正交化后可得:

$$\begin{cases} b_1 = a_1 \\ b_2 = a_2 - k_{21}b_1 \\ \vdots \\ b_n = a_n - k_{n,n-1}b_{n-1} - \dots - k_{n1}b_1 \end{cases} \begin{cases} a_1 = b_1 \\ a_2 = k_{21}b_1 + b_2 \\ \vdots \\ a_n = k_{n1}b_1 + \dots + k_{n,n-1}b_{n-1} + b_n \end{cases}$$

$$(a_1, a_2, \dots, a_n) = (b_1, b_2, \dots, b_n)K$$

$$= (q_1, q_2, \dots, q_n) \begin{bmatrix} |b_1| & & & \\ |b_2| & & \\ & \ddots & & \\ & |b_n| \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & k_{21} & \cdots & k_{n1} \\ 1 & \cdots & k_{n2} \\ & \ddots & \vdots \\ & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\diamondsuit Q = (q_1, q_2, \dots, q_n), R = \begin{bmatrix} |b_1| & & & \\ |b_2| & & \\ & \ddots & & \\ & |b_n| & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & k_{21} & \cdots & k_{n1} \\ 1 & \cdots & k_{n2} \\ & \ddots & \vdots \\ & & 1 \end{bmatrix}$$

则
$$A=QR$$
,其中 $q_i=\frac{b_i}{|b_i|}$ $(i=1,2,\dots,n)$

定理7: $A_{m\times n}$ 列满秩 \Rightarrow ∃矩阵 $Q_{m\times n}$ 满足 $Q^HQ=I$,

可逆上三角矩阵 $R_{n\times n}$,使得A=QR。

M5-矩阵的QR分解与奇异值分解 (二)奇异值分解(SVD)

- 一、预备知识
- (1) ∀A_{m×n}, (A^HA)_{n×n} 是 Hermite (半) 正定矩阵.

$$\forall x \neq 0, x^{\mathrm{H}} A^{\mathrm{H}} A x = (Ax)^{\mathrm{H}} (Ax) = |Ax|^2 \geq 0$$

(2) 齐次方程组 Ax = 0 与 $A^{H}Ax = 0$ 同解

若
$$Ax = 0$$
,则 $A^{H}Ax = 0$;

(3) $\operatorname{rank} A = \operatorname{rank}(A^{H}A)$

$$\begin{split} S_1 &= \big\{ \! x \mid Ax = 0 \big\}, \quad S_2 &= \big\{ \! x \mid A^{\mathrm{H}}Ax = 0 \big\} \\ S_1 &= S_2 \Rightarrow \dim S_1 = \dim S_2 \quad \Rightarrow n - r_A = n - r_{A^{\mathrm{H}}A} \\ \Rightarrow r_A &= r_{A^{\mathrm{H}}A} \end{split}$$

(4) $A = O_{m \times n} \iff A^{\mathrm{H}} A = O_{n \times n}$

必要性. 左乘即得;

充分性 $r_A = r_{A^H_A} = 0 \Rightarrow A = 0$

二、正交对角分解

定理15: $A_{n\times n}$ 可逆 \Rightarrow ∃酉矩阵 $U_{n\times n},V_{n\times n}$, 使得

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma}_{1} & & \\ & \ddots & \\ & & \boldsymbol{\sigma}_{n} \end{bmatrix}^{\Delta} = \boldsymbol{D} \quad \left(\boldsymbol{\sigma}_{i} > \boldsymbol{0}\right)$$

三、奇异值分解

$$A_{m \times n} \in C_r^{m \times n} (r \ge 1) \Rightarrow A^H A \in C_r^{n \times n} + \mathbb{E}$$

 A^HA 的特征值: $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r \geq \lambda_{r+1} = \cdots = \lambda_n = 0$

$$A$$
的奇异值: $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$, $i = 1, 2, \cdots n$

特点: (1) A的奇异值个数等于A的列数

(2) A的非零奇异值个数等于 rank A

定理16:
$$A_{m\times n}\in C_r^{m\times n}(r\geq 1), \Sigma_r=\begin{bmatrix}\sigma_1\\&\ddots\\&\sigma_r\end{bmatrix}$$
 \Rightarrow

存在酉矩阵 $U_{m \times m}$ 及 $V_{n \times n}$, 使得 $U^{\mathrm{H}}AV = \begin{bmatrix} \Sigma_{r} & O \\ O & O \end{bmatrix}_{m \times n} \stackrel{\Delta}{=} D$

[注]: 称 $A = UDV^H$ 为A的奇异值分解

- (1) *U与V*不唯一;
- (2) U的列为 AA^H 的特征向量,V的列为 A^HA 的特征向量
- (3) 称U的列为A的左奇异向量,称V的列为A的右 奇异向量.

文理17: $A_{m\times n} \in C_r^{m\times n} (r \ge 0)$ 的奇异值分解 $A=U \begin{bmatrix} \Sigma & O \\ O & O \end{bmatrix} V^H$

中, 划分 $U=(u_1,u_2,\dots,u_m),V=(v_1,v_2,\dots,v_n)$, 则有

- (1) $N(A) = \operatorname{span}\{v_{r+1}, v_{r+2}, \dots, v_n\};$
- (2) $R(A) = \text{span}\{u_1, u_2, \dots, u_r\};$
- (3) $A = \sigma_1 u_1 v_1^{\mathrm{H}} + \sigma_2 u_2 v_2^{\mathrm{H}} + \dots + \sigma_r u_r v_r^{\mathrm{H}}$

M6-投影矩阵、广义逆矩阵(一)投影矩阵

1、投影变换

定义:向量空间 C^n 中,子空间L与M满足 $C^n = L \oplus M$,对 $\forall x \in C^n$,分解式 $x = y + z, y \in L, z \in M$ 唯一。称变换 $T_{L,M}(x) = y$ 为沿着M到L的投影

性质(1): $T_{L,M}$ 是线性变换

性质(2): $R(T_{L,M}) = L, N(T_{L,M}) = M$

性质(3): $\forall x \in L \Rightarrow T_{L,M}(x) = x \quad \forall x \in M \Rightarrow T_{L,M}(x) = \theta$

[注] $T_{L,M}$ 是L中的单位变换 $T_{L,M}$ 是M中的零变换

2、投影矩阵

定义: 取线性空间 C^n 的基为 $e_1,e_2,...,e_n$ 时,元素x与它的坐标"形式一致"。称 $T_{L,M}$ 在该基下的矩阵记为投影矩阵 $P_{L,M}$

性质(4):
$$T_{L,M}(x) = y \Leftrightarrow P_{L,M}x = y$$

$$x \in L \Rightarrow T_{L,M}(x) = x \Rightarrow P_{L,M}x = x$$

$$x \in M \Rightarrow T_{L,M}(x) = \theta \Rightarrow P_{L,M}x = \theta$$

4、正交投影变换

欧氏空间 C^n 中,子空间L给定,取 $M = L^{\perp}$,则 $C^n = L \oplus M$

正交投影变换 $T_L = T_{L,M}$; 正交投影矩阵 $P_L = P_{L,M}$

定理2: 方阵 $P = P_L \Leftrightarrow P^2 = P, P^H = P$

4、正交投影矩阵的确定办法

M6-投影矩阵、广义逆矩阵(二)广义逆矩阵

定义:对 $A_{m\times n}$ 若有 $X_{n\times m}$ 满足Penrose方程

$$(1) \quad AXA = A \qquad (2) \quad XAX = X$$

$$(2) XAX = X$$

(3)
$$(AX)^H = AX$$
 (4) $(XA)^H = XA$

$$(4) \left(XA \right)^H = XA$$

称X为A的M-P逆,记作A+.(Moore 1920, Penrose1955)

例如 $A_{m\times n}$ 可逆, $X=A^{-1}$ 满足P-方程: $A^{+}=A^{-1}$

$$A = O_{m \times n}, X = O_{n \times m}$$

$$A = O_{m \times n}, X = O_{n \times m}$$
 满足P-方程: $O_{m \times n}^+ = O_{n \times m}$

$$A = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, X = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, X = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$
 满足P-方程: $A^{+} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$

例5: 设 $A \in C_r^{m \times n}$ 的奇异值分解为 $A = U \begin{bmatrix} \Sigma_r & O \\ O & O \end{bmatrix}_{m \times n} V^H$

则
$$A^+ = V \begin{bmatrix} \Sigma_r^{-1} & O \\ O & O \end{bmatrix}_{n \times m} U^H$$

直接验证即可。

进一步的有

$$A = (U_s, U_n) \begin{bmatrix} \Sigma_r & O \\ O & O \end{bmatrix}_{m \times n} (V_s, V_n)^H$$

$$=U_{s}\Sigma_{r}V_{s}^{H}$$

式子中,下标s改为r,n改为n-r。

$$A^+ = V_s \Sigma_r^{-1} U_s^H$$

定理10: (1)
$$r_{A^+} = r_A$$

$$(2) \left(A^{+}\right)^{+} = A$$

(3)
$$\left(A^{H}\right)^{+} = \left(A^{+}\right)^{H} \qquad \left(A^{T}\right)^{+} = \left(A^{+}\right)^{T}$$

(4)
$$(A^{H}A)^{+} = A^{+}(A^{H})^{+} (AA^{H})^{+} = (A^{H})^{+}A^{+}$$

(5)
$$A^{+} = (A^{H}A)^{+} A^{H} = A^{H} (AA^{H})^{+}$$

(6)
$$R(A^+) = R(A^H), N(A^+) = N(A^H)$$

M6-投影矩阵、广义逆矩阵(三)正定矩阵

正定矩阵

定义: 令A是n阶Hermite矩阵,若对任意复n维列向量 $x \neq 0$,都有 $x^H Ax \geq 0$ 则称A为Hermite非负定矩阵,简称为非负定矩阵。对任意复n维列向量 $x \neq 0$,都有 $x^H Ax > 0$

称为Hermite正定矩阵,简称为正定矩阵

性质(1): 若A正定,且k为正常数,则kA正定

性质(2): 若 $A \setminus B$ 正定,则A + B正定

性质(3): 若A正定,则 A^{-1} 正定

正定矩阵的判断准则

Hermite矩阵A是正定矩阵 $\longrightarrow A$ 的特征值都为正数 因为如果 $Ax = \lambda x$, 则有



$$0 < x^{H} A x = x^{H} \lambda x = \lambda x^{H} x = \lambda \|x\|^{2}$$

一定有 $\lambda > 0$ 。反之,必然存在酉矩阵U,使得

$$A = U\Lambda U^H$$
, $\Lambda = diag(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$

因为 $\lambda_i > 0$,且对任意 $x \neq 0$ 有 $Ux = y \neq 0$

从而
$$x^H A x = (U^H y)^H A (U^H y) = y^H U A U^H y = y^H \Lambda y > 0$$

所以A是正定的

Hermite矩阵A是非负定矩阵 \longleftarrow A的特征值都为非负数



Hermite矩阵A是正定矩阵(非负定)





 $\operatorname{tr} A > \lambda_i(A), \quad (or \operatorname{tr} A \ge \lambda_i(A)) \quad i = 1, \dots, n$



$$A = P^H P$$

 $A = P^H P$ P是n阶非奇异矩阵(矩阵)



$$A = B^2$$

 $A = B^2$ B是n阶正定矩阵(非负定矩阵)



A的n个顺序主子式为正数(非负数)

- ■A,C是正定矩阵,且AC=CA,则AC为正定矩阵
- ■A是正定矩阵,C是非负定矩阵,且AC=CA,
- A , B 是 n 阶 Hermite 矩 阵 , 若 A B 为 正 定 矩 阵 (非 负 定 矩 阵) , 则 称 A 大 于 B , 记 为 A > B . (A 不 小 于 B 记 A ≥ B) 也 可 记 为 B < A . (B ≤ A)
- $A \ge B$ 的充要条件是,对任意复n维列向量x都有 $x^H Ax \ge x^H Bx$

对A, B是实对角阵时, $A = diag(a_1, a_2, \dots, a_n)$

 $B = diag(b_1, b_2, \dots, b_n)$, 则有 $a_i \ge b_i$

课后作业

- ■见另文。
- ■下次上课前提交。
- ■最好使用电子档。

End of This Part