

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

## 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  $2 \times 2$  矩阵为例

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

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

具体来说，矩阵  $\mathbf{A}$  对应绕原点逆时针旋转 90 度。

矩阵  $\mathbf{B}$  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  $\mathbf{C}$  让横轴缩小为  $1/2$ ，纵轴放大至 2 倍。

如果列向量  $\mathbf{x}$ 、 $\mathbf{y}$  均代表平面上一点，如下矩阵乘法

$$\mathbf{A} @ \mathbf{B} @ \mathbf{C} @ \mathbf{x} = \mathbf{y}$$

(2)

代表对列向量  $\mathbf{x}$  先后进行缩放 ( $\mathbf{C}$ )、剪切 ( $\mathbf{B}$ )、旋转 ( $\mathbf{A}$ )。

整个几何变换过程如图 1 所示。

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



请大家手算  $\mathbf{ABC}$ 、 $\mathbf{CBA}$ 、 $\mathbf{ACB}$ 、 $\mathbf{BAC}$  等等各种排列组合的矩阵乘法结果。

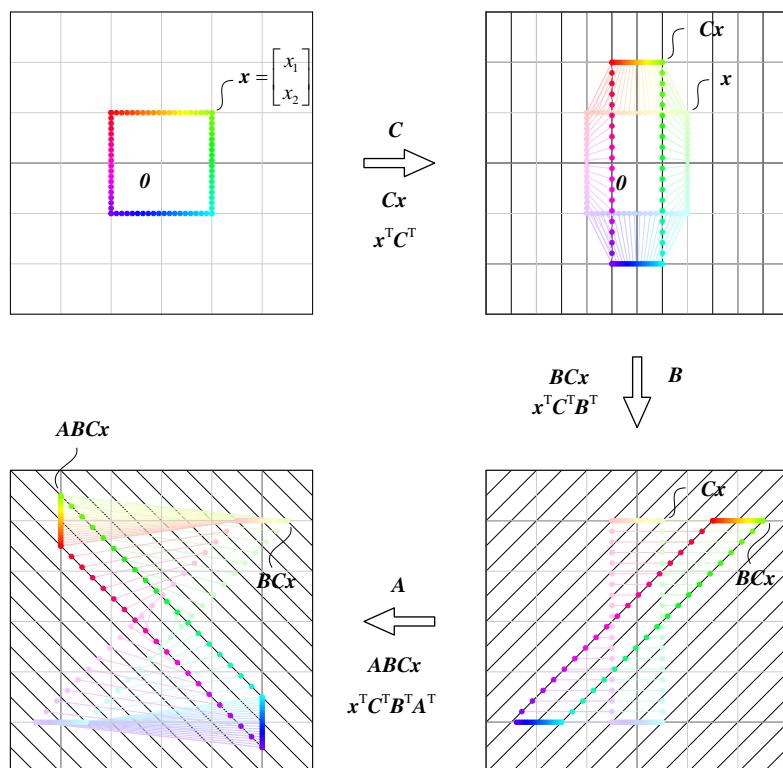


图 1.  $\mathbf{ABCx} = \mathbf{y}$  对应的分步几何操作

当然，我们也可以先计算  $(\mathbf{ABC})$ ，然后再把  $(\mathbf{ABC})$  作为一个整体施加到  $\mathbf{x}$  上。

矩阵乘法( $\mathbf{ABC}$ )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。

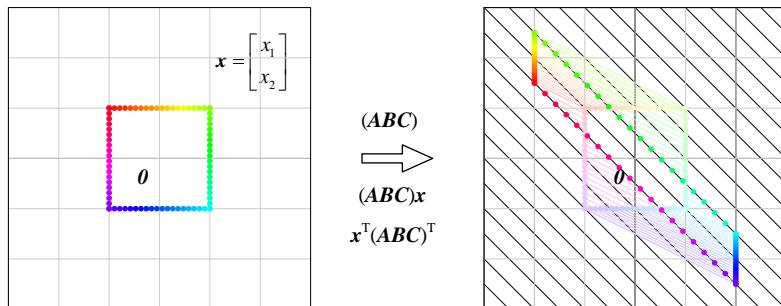


图 2.  $(ABC)x = y$  对应的“一步到位”几何操作

## 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：

$$\begin{aligned} (\mathbf{AB})^T &= \mathbf{B}^T \mathbf{A}^T \\ (\mathbf{ABC})^T &= \mathbf{C}^T \mathbf{B}^T \mathbf{A}^T \\ (\mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 \mathbf{A}_3 \cdots \mathbf{A}_k)^T &= \mathbf{A}_k^T \cdots \mathbf{A}_3^T \mathbf{A}_2^T \mathbf{A}_1^T \end{aligned} \quad (3)$$

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

$$\mathbf{x}^T @ \mathbf{C}^T @ \mathbf{B}^T @ \mathbf{A}^T = \mathbf{y}^T \quad (4)$$

列向量  $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$  转置后得到行向量  $\mathbf{x}^T = [x_1 \ x_2]$ ，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  $\mathbf{A}$ 、 $\mathbf{B}$ 、 $\mathbf{C}$  参与相乘，先将  $\mathbf{A}$  和  $\mathbf{B}$  相乘，再与  $\mathbf{C}$  相乘，或者先将  $\mathbf{B}$  和  $\mathbf{C}$  相乘，再左乘  $\mathbf{A}$ ，最终的计算结果是相同的

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

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。

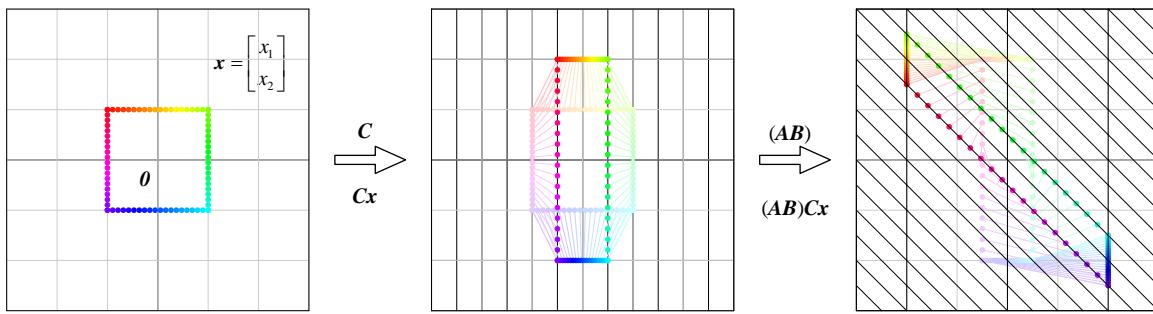
**⚠ 注意**，矩阵先后次序不能变。也就是说，矩阵乘法通常不满足交换律，即  $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$ 。

怎么理解 (5) 呢？

还是利用几何视角， $(\mathbf{AB})$ 、 $(\mathbf{BC})$  相当于“局部”复合几何变换。

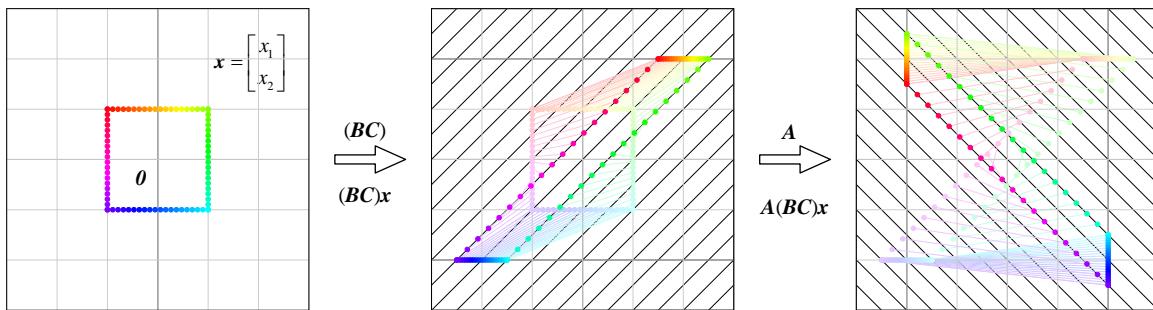
还是以 (1) 为例， $(\mathbf{AB})$  相当于复合旋转、剪切（剪切再先）； $(\mathbf{BC})$  相当于复合剪切、缩放（缩放再先）。

对于平面列向量  $\mathbf{x}$ ， $(\mathbf{AB})\mathbf{Cx}$  相当于对  $\mathbf{x}$  先缩放 ( $\mathbf{C}$ )，然后再  $(\mathbf{AB})$ ，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。

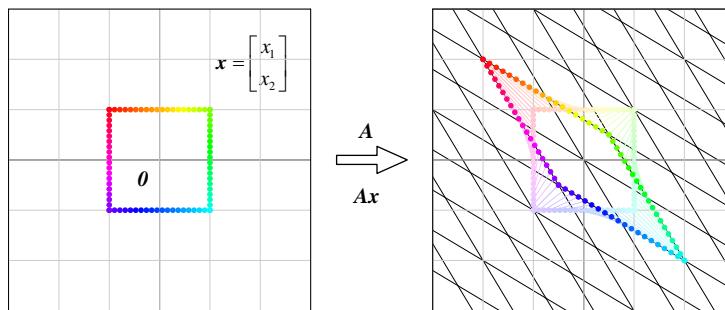
图 4.  $A(BC)x = y$  对应的分步几何操作

## 矩阵分解

给定矩阵  $A$

$$A = \begin{bmatrix} 5/4 & -3/4 \\ -3/4 & 5/4 \end{bmatrix} \quad (6)$$

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  $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$ , 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  $\mathbf{A}$  拆解成“旋转 → 缩放 → 旋转”, 对应的矩阵乘法为

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

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  $\mathbf{A}$  为对称矩阵, 这个分解为谱分解 (spectral decomposition)。

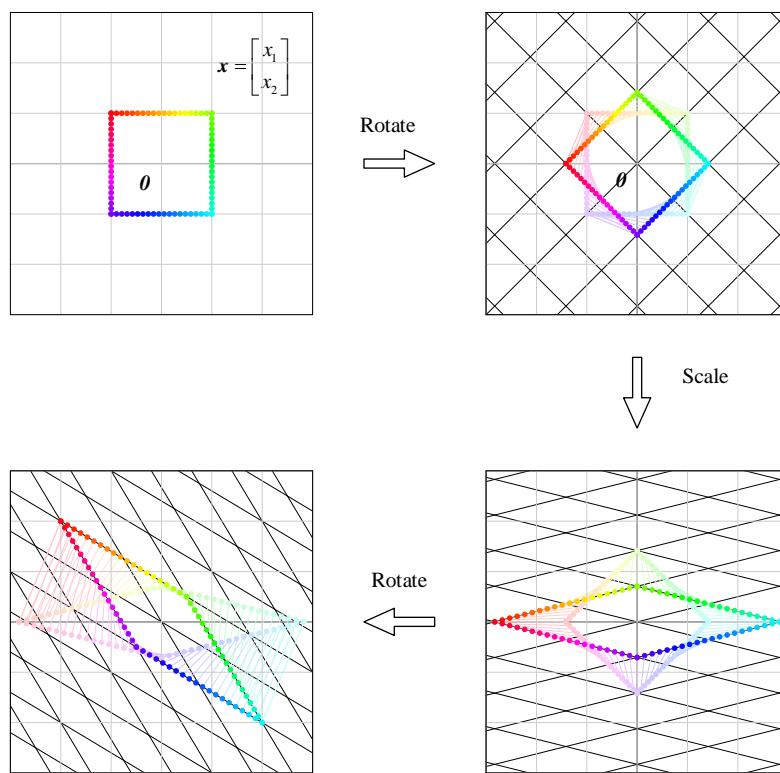


图 6. 把  $\mathbf{A}$  分解成“旋转 → 缩放 → 旋转”

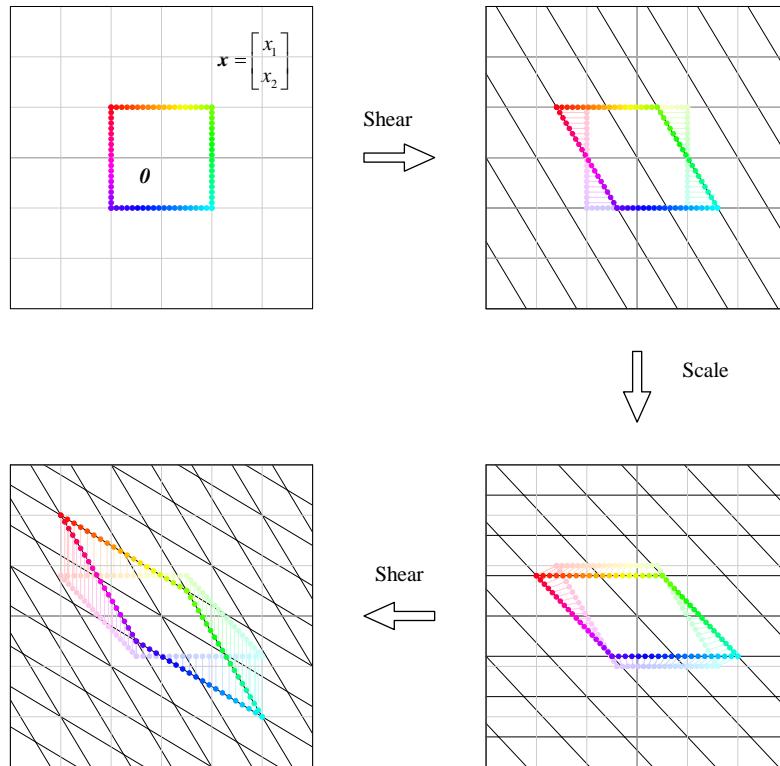
再如, 如图 7 所示, 我们可以把矩阵  $\mathbf{A}$  拆解成“剪切 → 缩放 → 剪切”, 对应的矩阵乘法为

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

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 → 缩放 → 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

$$AB \neq BA \quad (9)$$

比如， $AB$ 、 $BA$  结果的矩阵形状可能不同。

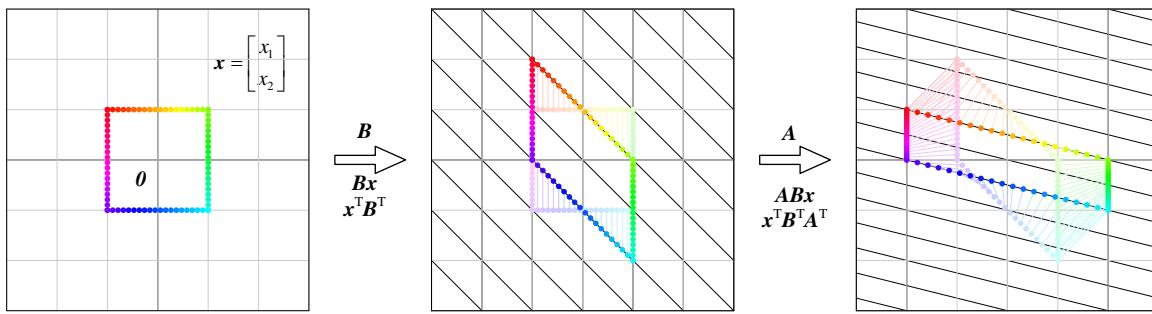
即便  $AB$ 、 $BA$  形状相同，两者代表的几何变换也可能不同。

给定如下矩阵  $A$ 、 $B$

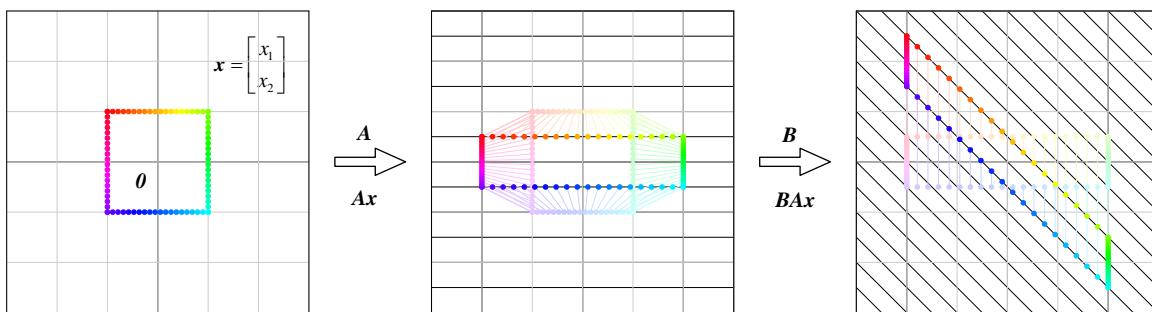
$$A = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (10)$$

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  $2 \times 2$  矩阵  $A$ 、 $B$  都是缩放矩阵，比如

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

计算一下，大家会发现

$$AB = BA \quad (12)$$

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  $2 \times 2$  矩阵  $A$ 、 $B$  都是沿纵轴剪切矩阵，比如

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

如图 11 所示，显然  $\mathbf{ABx}$  和  $\mathbf{BAx}$  结果完全一致。

？请大家计算 (13) 中矩阵乘法  $\mathbf{AB}$ 、 $\mathbf{BA}$ 。

看第三个例子。

给定  $2 \times 2$  矩阵  $\mathbf{A}$ 、 $\mathbf{B}$  都绕原点旋转矩阵，比如

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

如图 12 所示，显然  $\mathbf{ABx}$  和  $\mathbf{BAx}$  结果完全一致。

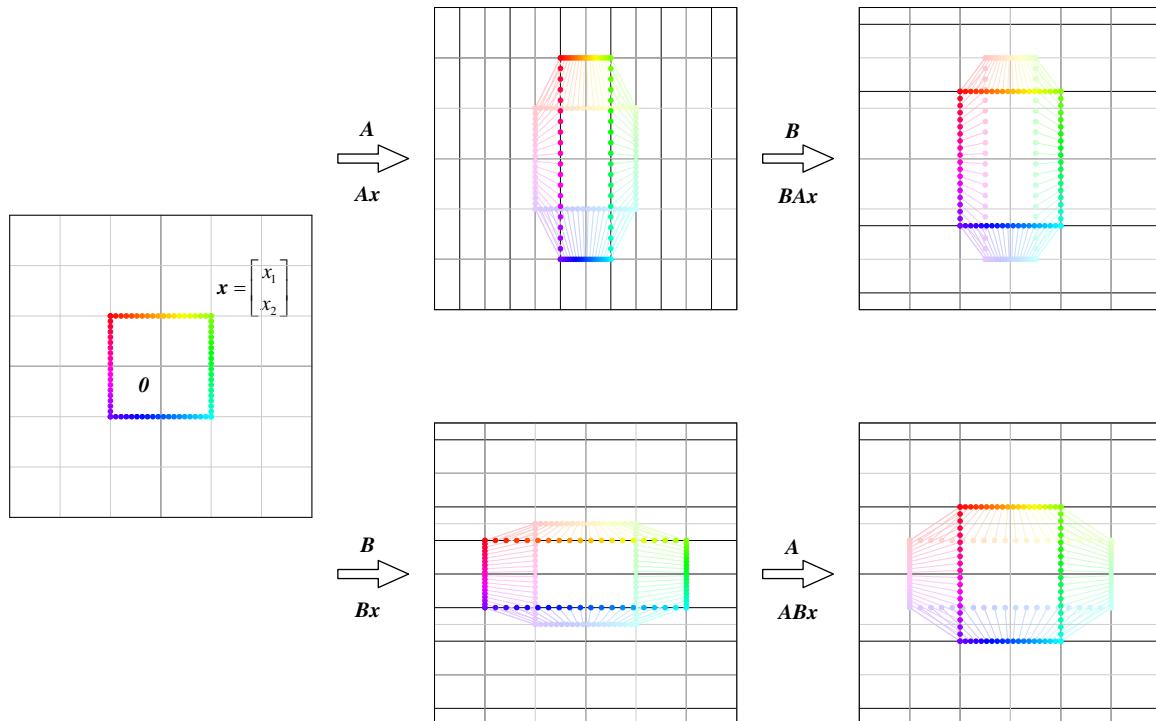
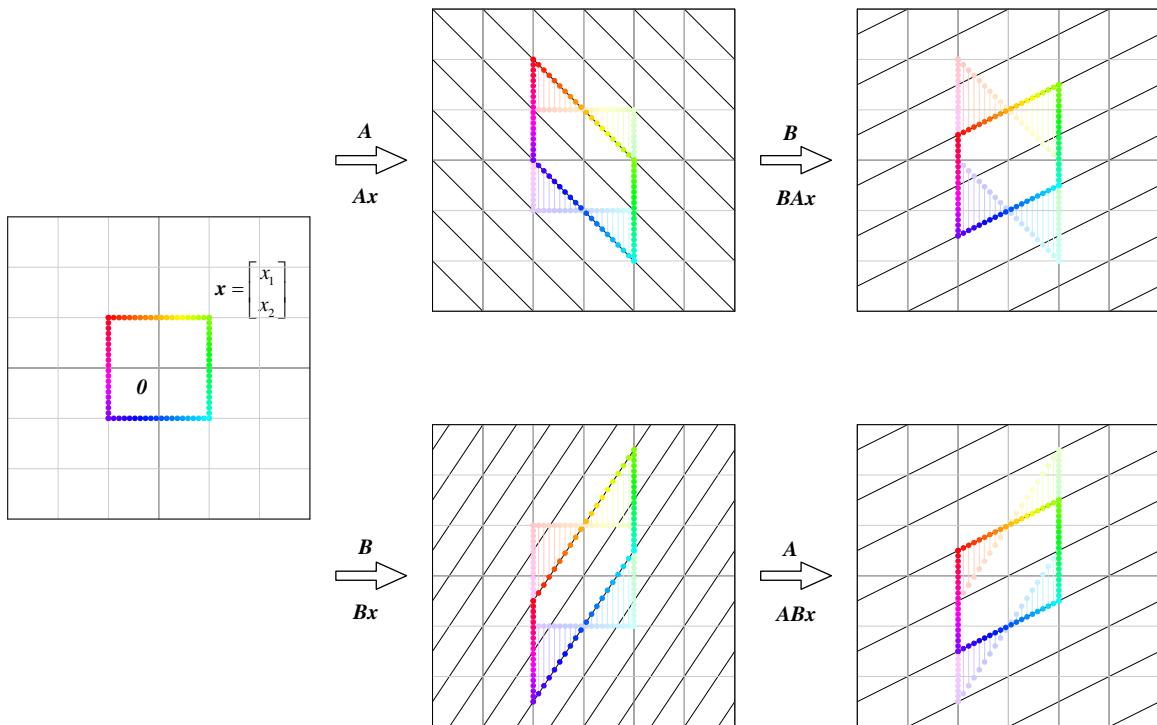
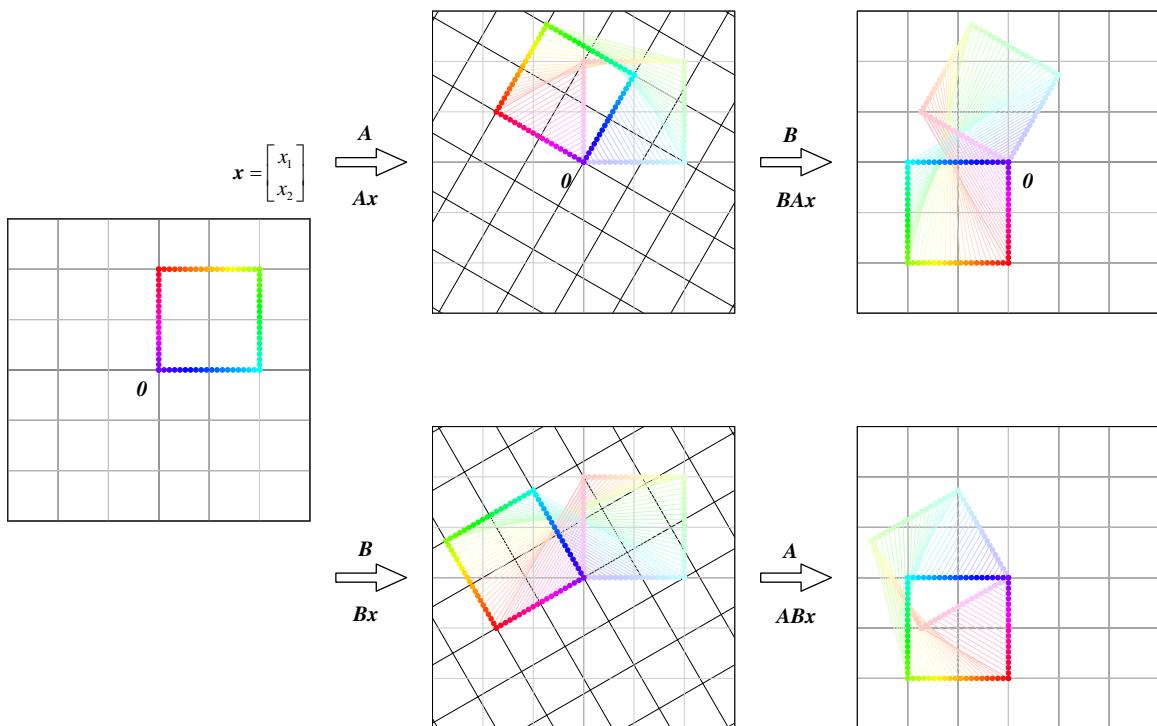


图 10.2  $2 \times 2$  矩阵  $\mathbf{A}$ 、 $\mathbf{B}$  都是缩放矩阵， $\mathbf{AB} = \mathbf{BA}$

图 11.  $2 \times 2$  矩阵  $A$ 、 $B$  都是沿纵轴方向剪切矩阵,  $AB = BA$ 图 12.  $2 \times 2$  矩阵  $A$ 、 $B$  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,

$$\begin{aligned} A^0 &= I \\ A^1 &= A \\ A^k &= \underbrace{A @ A @ \cdots @ A}_{k \text{ times}} \end{aligned} \tag{15}$$

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，

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

举个例子，给定矩阵  $A$  如下

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

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

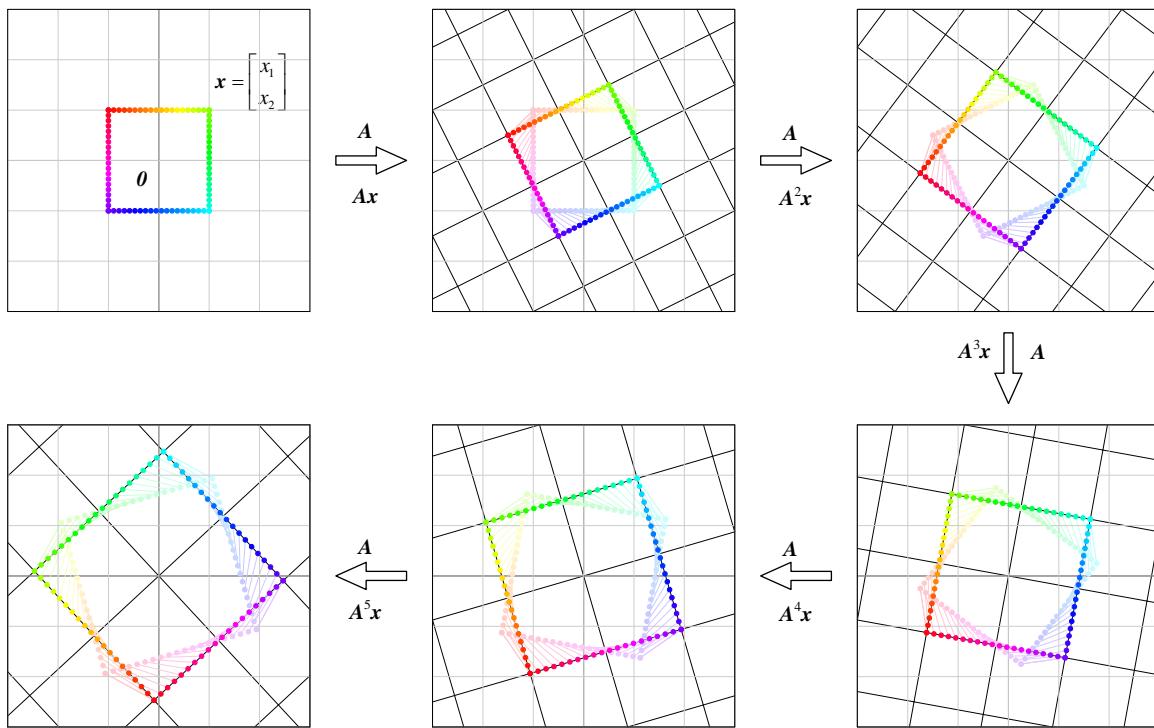


图 13.  $2 \times 2$  矩阵  $A$  幂

$$AB = O$$

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

举个例子，给定  $2 \times 2$  矩阵  $A$ 、 $B$

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

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。



请大家计算 (18) 对应的  $AB$ 、 $BA$  两个矩阵乘法。

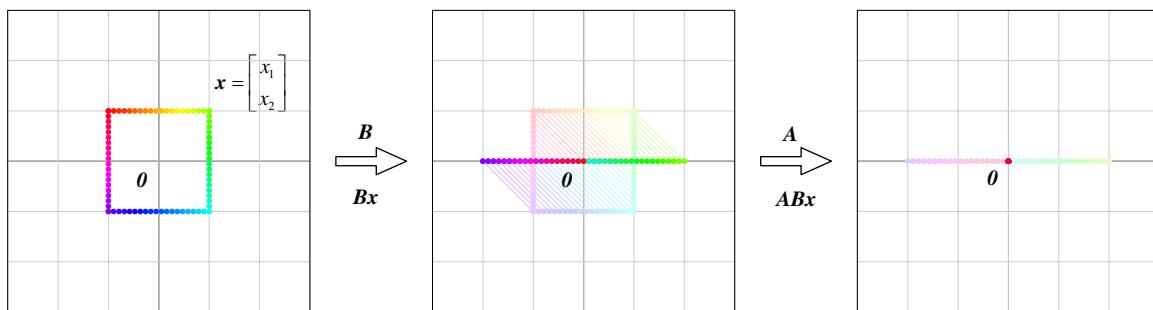


图 14.  $2 \times 2$  矩阵  $A$ 、 $B$  矩阵乘积为零矩阵， $AB = O$

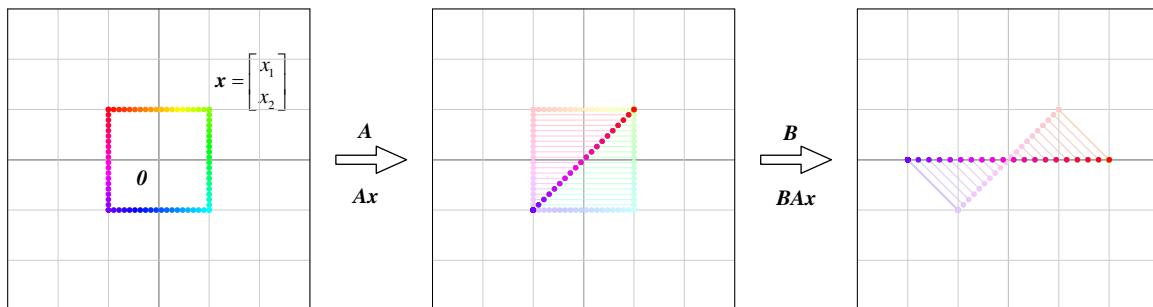


图 15.  $2 \times 2$  矩阵  $A$ 、 $B$  矩阵乘积为零矩阵， $BA$  不为  $O$

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

$$A_{m \times p_1} A_{p_1 \times p_2} A_{p_2 \times p_3} A_{p_3 \times p_4} A_{p_4 \times n} \quad (19)$$

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  $n$ 。

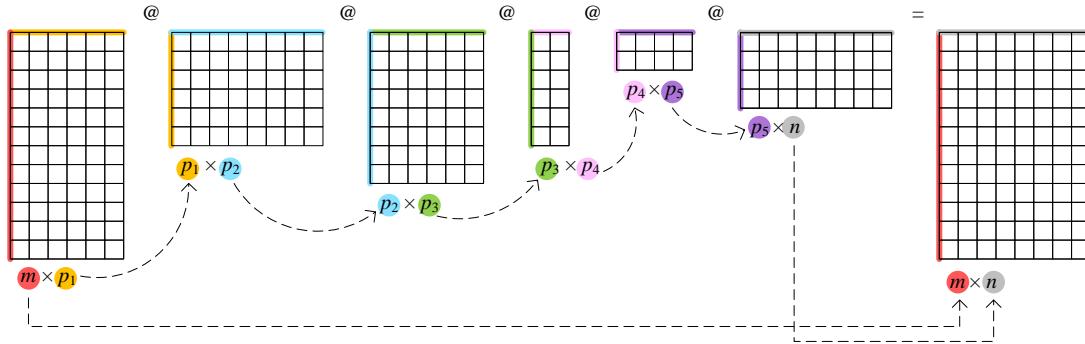


图 16. 矩阵连乘

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  $A (5 \times 10)$ 、 $B (10 \times 4)$ 、 $C (4 \times 20)$ 、 $D (20 \times 5)$ 。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。

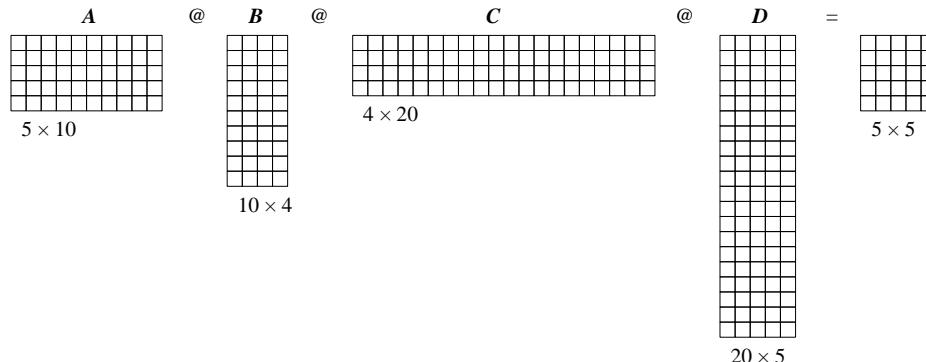


图 17. 优化矩阵连乘顺序

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

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

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  $2 \times 2$  矩阵  $A$ 、 $B$ 、 $C$ 、 $D$ ，自己写 Python 代码计算所有全排列矩阵（比如  $A @ B @ D @ C$ ）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  $AB = BA$

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

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

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

**Q4.** 若干沿横轴剪切矩阵，请计算矩阵乘法  $ABCD$ ，有什么规律

$$\blacktriangleright A = \begin{bmatrix} 1 & k_1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 1 & k_2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad C = \begin{bmatrix} 1 & k_3 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad D = \begin{bmatrix} 1 & k_4 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

**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。

$$\blacktriangleright \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}$$

$$\blacktriangleright \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\blacktriangleright \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\blacktriangleright \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\blacktriangleright \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\blacktriangleright \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\blacktriangleright \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$