33讲线性代数：线性代数到底都讲了些什么

你好，我是黄申。

通过第二模块的学习，我想你对概率统计在编程领域，特别是机器学习算法中的应用，已经有了一定理解。概率统计关注的是随机变量及其概率分布，以及如何通过观测数据来推断这些分布。可是，在解决很多问题的时候，我们不仅要关心单个变量之间的关系，还要进一步研究多个变量之间的关系，最典型的例子就是基于多个特征的信息检索和机器学习。

在信息检索中，我们需要考虑多个关键词特征对最终相关性的影响，而在机器学习中，无论是监督式还是非监督式学习，我们都需要考虑多个特征对模型拟合的影响。在研究多个变量之间关系的时候，线性代数成为了解决这类问题的有力工具。

另一方面，在我们日常生活和工作中，很多问题都可以线性化，小到计算两个地点之间的距离，大到计算互联网中全部网页的PageRank。所以，为了使用编程来解决相应的问题，我们也必须掌握一些必要的线性代数基础知识。因此，我会从线性代数的基本概念出发，结合信息检索和机器学习领域的知识，详细讲解线性代数的运用。

关于线性代数，究竟都需要掌握哪些方面的知识呢？我们今天就来看一看，让你对之后一段时间所要学习的知识有个大体的了解。

向量和向量空间

我们之前所谈到的变量都属于**标量**（Scalar）。它只是一个单独的数字，而且不能表示方向。从计算机数据结构的角度来看，标量就是编程中最基本的变量。这个很好理解，你可以回想一下刚开始学习编程时接触到的标量类型的变量。

和标量对应的概念，就是线性代数中最常用、也最重要的概念，**向量**（Vector），也可以叫作矢量。它代表一组数字，并且这些数字是有序排列的。我们用数据结构的视角来看，向量可以用数组或者链表来表达。

后面的文章里，我会用加粗的小写字母表示一个向量，例如x，而$x_{1}，x_{2}，x_{3}，…，x_{n}$等等，来表示向量中的每个元素，这里面的n就是向量的维。

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

向量和标量最大的区别在于，向量除了拥有数值的大小，还拥有方向。向量或者矢量中的“向”和“矢”这两个字，都表明它们是有方向的。你可能会问，为什么这一串数字能表示方向呢？

这是因为，如果我们把某个向量中的元素看作坐标轴上的坐标，那么这个向量就可以看作空间中的一个点。以原点为起点，以向量代表的点为终点，就能形成一条有向直线。而这样的处理其实已经给向量赋予了代数的含义，使得计算的过程中更加直观。在后面讨论向量空间、向量夹角、矩阵特征值等概念的时候，我会进一步展示给你看。

由于一个向量包含了很多个元素，因此我们自然地就可以把它运用在机器学习的领域。上一个模块，我讲过如何把自然界里物体的属性，转换为能够用数字表达的特征。由于特征有很多维，因此我们可以使用向量来表示某个物体的特征。其中，向量的每个元素就代表一维特征，而元素的值代表了相应特征的值，我们称这类向量为**特征向量**（Feature Vector）。

需要注意的是，这个特征向量和**矩阵的特征向量**（Eigenvector）是两码事。那么矩阵的特征向量是什么意思呢？矩阵的几何意义是坐标的变换。如果一个矩阵存在特征向量和特征值，那么这个矩阵的特征向量就表示了它在空间中最主要的运动方向。如果你对这几个概念还不太理解，也不用担心，在介绍矩阵的时候，我会详细说说什么是矩阵的特征向量。

向量的运算

标量和向量之间可以进行运算，比如标量和向量相加或者相乘时，我们直接把标量和向量中的每个元素相加或者相乘就行了，这个很好理解。可是，向量和向量之间的加法或乘法应该如何进行呢？我们需要先定义向量空间。向量空间理论上的定义比较繁琐，不过二维或者三维的坐标空间可以很好地帮助你来理解。这些空间主要有几个特性：

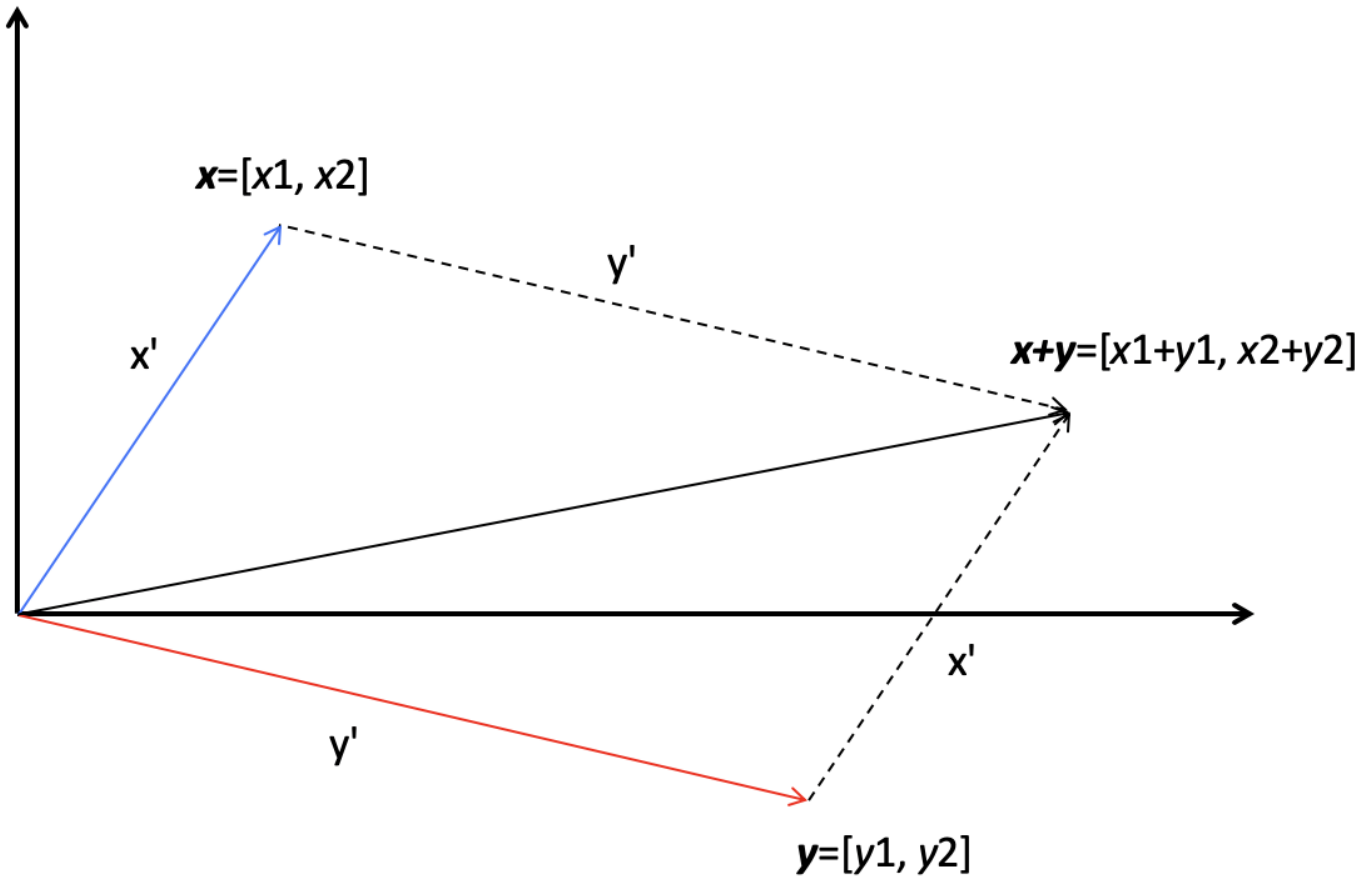
- 空间由无穷多个的位置点组成；
- 这些点之间存在相对的关系；
- 可以在空间中定义任意两点之间的长度，以及任意两个向量之间的角度；
- 这个空间的点可以进行移动。

有了这些特点，我们就可以定义向量之间的加法、乘法（或点乘）、距离和夹角等等。

两个向量之间的加法，首先它们需要维度相同，然后是对应的元素相加。

$$x=\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\x_3\\\vdots\\x_n\end{bmatrix}\qquad y=\begin{bmatrix}y_1\\y_2\\y_3\\\vdots\\y_n\end{bmatrix}\qquad x+y=\begin{bmatrix}x_1+y_1\\x_2+y_2\\x_3+y_3\\\vdots\\x_n+y_n\end{bmatrix}$$

所以说，向量的加法实际上就是把几何问题转化成了代数问题，然后用代数的方法实现了几何的运算。我下面画了一张图，来解释二维空间里，两个向量的相加，看完你就能理解了。



在这张图中，有两个向量x和y，它们的长度分别是x'和y'，它们的相加结果是x+y，这个结果所对应的点相当于x向量沿着y向量的方向移动y'，或者是y向量沿着x向量的方向移动x'。

向量之间的乘法默认是点乘，向量x和y的点乘是这么定义的：

$$xy = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = x_1y_1 + x_2y_2 + x_3y_3 + \ldots + x_ny_n$$

点乘的作用是把相乘的两个向量转换成了标量，它有具体的几何含义。我们会用点乘来计算向量的长度以及两个向量间的夹角，所以一般情况下我们会默认向量间的乘法是点乘。至于向量之间的夹角和距离，它们在向量空间模型（Vector Space Model）中发挥了重要的作用。信息检索和机器学习等领域充分利用了向量空间模型，计算不同对象之间的相似程度。在之后的专栏里，我会通过向量空间模型，详细介绍向量点乘，以及向量间夹角和距离的计算。

矩阵的运算

矩阵由多个长度相等的向量组成，其中的每列或者每行就是一个向量。因此，我们把向量延伸一下就能得到矩阵（Matrix）。

从数据结构的角度看，向量是一维数组，那矩阵就是一个二维数组。如果二维数组里绝大多数元素都是0或者不存在的值，那么我们就称这个矩阵很稀疏（Sparse）。对于稀疏矩阵，我们可以使用哈希表的链地址法来表示。所以，矩阵中的每个元素有两个索引。

我用加粗的斜体大写字母表示一个矩阵，例如X，而$X_{12}，X_{22}，…，X_{nm}$等等，表示矩阵中的每个元素，而这里面的n和m分别表示矩阵的行维数和列维数。

我们换个角度来看，向量其实也是一种特殊的矩阵。如果一个矩阵是n × m维，那么一个n × 1的矩阵也可以称作一个n维列向量；而一个1 × m矩阵也称为一个m维行向量。

同样，我们也可以定义标量和矩阵之间的加法和乘法，我们只需要把标量和矩阵中的每个元素相加或相乘就可以了。剩下的问题就是，矩阵和矩阵之间是如何进行加法和乘法的呢？矩阵加法比较简单，只要保证参与操作的两个矩阵具有相同的行维度和列维度，我们就可以把对应的元素两两相加。而乘法略微繁琐一些，如果写成公式就是这种形式：

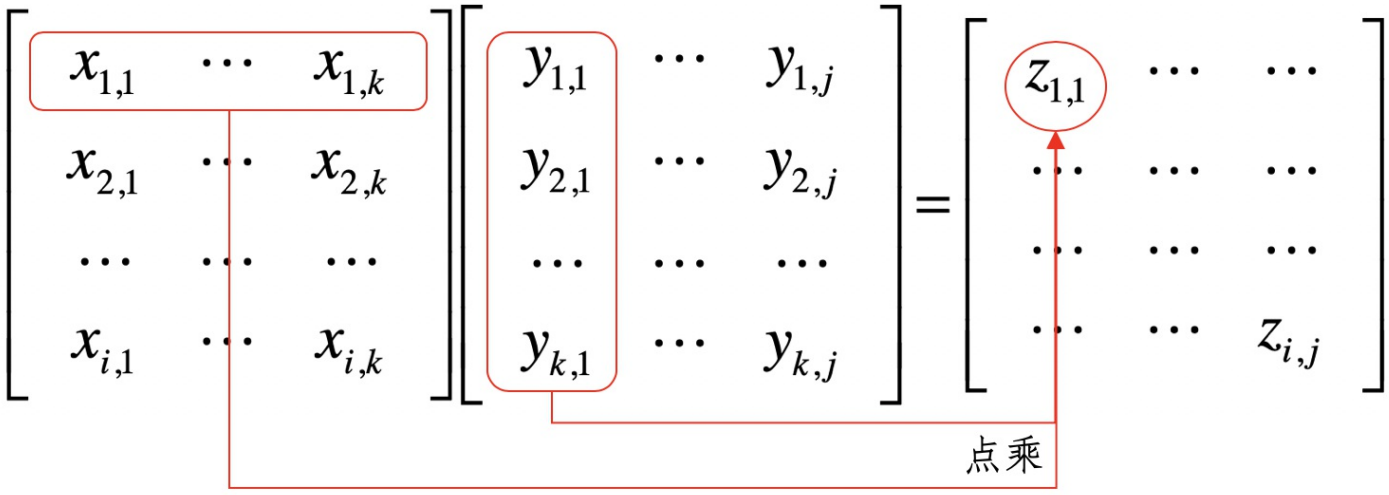
$$Z = XY$$

$$Z_{i,j} = \sum_k X_{i,k} Y_{k,j}$$

其中，矩阵Z为矩阵X和Y的乘积，X是形状为i x k的矩阵，而Y是形状为k × j的矩阵。X的列数k必须和Y的行

数k相等，两者才可以进行这样的乘法。

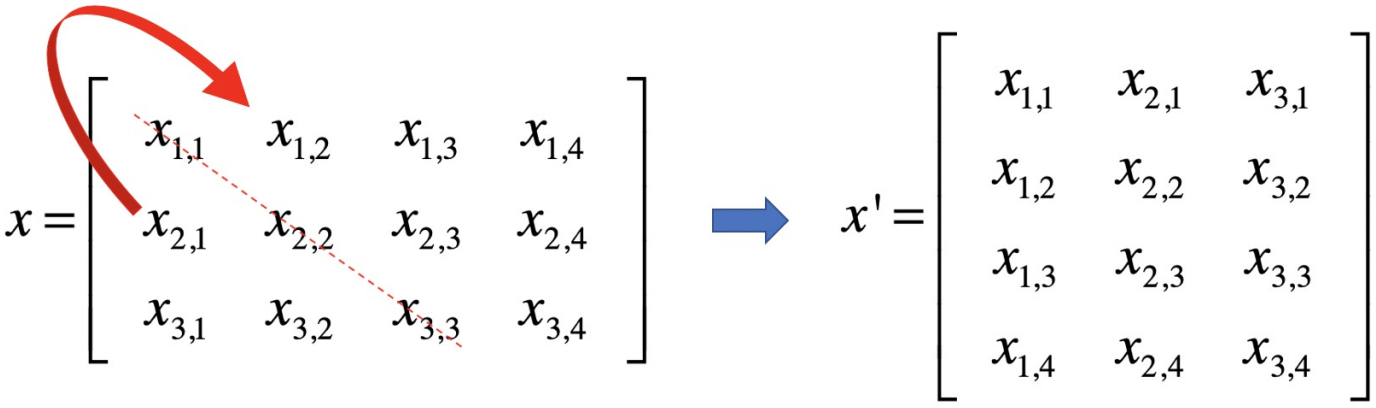
我们可以把这个过程看作矩阵X的行向量和矩阵Y的列向量两两进行点乘，我这里画了张图，你理解了这张图就不难记住这个公式了。



两个矩阵中对应元素进行相乘，这种操作也是存在的，我们称它为元素**对应乘积**，或者Hadamard乘积。但是这种乘法咱们用得比较少，所以你只要知道有这个概念就可以了。

除了加法和乘法，矩阵还有一些其他重要的操作，包括转置、求逆矩阵、求特征值和求奇异值等等。

转置（Transposition）是指矩阵内的元素行索引和纵索引互换，例如X_{ij}就变为X_{ji}，相应的，矩阵的形状由转置前的n × m变为转置后的m × n。从几何的角度来说，矩阵的转置就是原矩阵以对角线为轴进行翻转后的结果。下面这张图展示了矩阵X转置之后的矩阵X'：



除了转置矩阵，另一个重要的概念是逆矩阵。为了理解逆矩阵或矩阵逆（Matrix Inversion），我们首先要理解单位矩阵（Identity Matrix）。单位矩阵中，所有沿主对角线的元素都是1，而其他位置的所有元素都是0。通常我们只考虑单位矩阵为方阵的情况，也就是行数和列数相等，我们把它记做I_{n}，n表示维数。我这里给出一个I_{5}的示例。

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

如果有矩阵X，我们把它的逆矩阵记做X^{-1}，两者相乘的结果是单位矩阵，写成公式就是这种形式：

$$X^{-1}X = I_n$$

特征值和奇异值的概念以及求解比较复杂了，从大体上来理解，它们可以帮助我们找到矩阵最主要的特点。通过这些操作，我们就可以在机器学习算法中降低特征向量的维度，达到特征选择和变换的目的。我会在后面的专栏，结合案例给你详细讲解。

总结

相对于概率统计，线性代数中的基本概念和知识点可能没有那么多。但是对于刚入门的初学者，这些内容理解起来会比较费力。在这一节里，我进行了大致的梳理，帮助你学习。

标量和向量的区别，标量只是单独的一个数，而向量是一组数。矩阵是向量的扩展，就是一个二维数组。我们可以使用哈希表的链地址法表示稀疏矩阵。

标量和向量或矩阵的加法、乘法比较简单，就是把这个标量和向量或矩阵中所有的元素轮流进行相加或相乘。向量之间的加法和矩阵之间的加法，是把两者对应的元素相加。向量之间的相乘分为叉乘和点乘，我在专栏里默认向量乘法为点乘。而矩阵的乘法默认为左矩阵的行向量和右矩阵的列向量两两点乘。

说到这里，你可能还是不太理解线性代数对于编程有什么用处。在这个模块之后的内容中，我会详细介绍向量空间模型、线性方程组、矩阵求特征值和奇异值分解等，在信息检索和机器学习领域中，有怎样的应用场景。

思考题

之前你对线性代数的认识是什么样的呢？对这块内容，你觉得最难的是什么？

欢迎留言和我分享，也欢迎你在留言区写下今天的学习笔记。你可以点击“请朋友读”，把今天的内容分享给你的好友，和他一起精进。

精选留言

之前对线代的认识，熟记各种性质和概念，细心保证计算不出错。模糊的知道三维几何变换。

我觉得从算题来说，求特征值比较难。

大量高阶幂矩阵乘法，会带来计算量大的问题。

2019-03-01 08:40

作者回复

我们可能不一定要精通线代的每个部分，主要从常用的机器学习算法出发，理解一些常见的概念和操作

2019-03-02 01:15

yaya

对线代的基础特征向量，矩阵分解有一定了解，我觉得矩阵就是为了便于书写这样排列的，本质还是运算，不过便于观看和书写，后来计算机中便于存储，后来便于并行，不过矩阵有其特质，这是和它展开的运算式不同的地方

2019-03-04 09:44

李皮皮皮皮皮

线代概念很多，而且定义复杂。特别是到空间那一块。更重要的是不明白实际含义，空记公式和理论，考完试就还给老师了

2019-03-03 19:38

作者回复

我会结合实际案例来讲，帮助你加深理解和记忆。

2019-03-04 03:06

mickey

之前对线代的认识，是在二维空间对点的操作。

觉得最难的是，各种概念、计算、变换、图形的实际意义。

2019-03-01 14:05

作者回复

对，几何和线代的对应是很重要的，可以帮助我们理解

2019-03-02 01:17