

线性代数

一、基本知识

1. 本书中所有的向量都是列向量的形式：

$$\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

本书中所有的矩阵 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 都表示为：

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,n} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{m,1} & x_{m,2} & \cdots & x_{m,n} \end{bmatrix}$$

简写为： $(x_{i,j})_{m \times n}$ 或者 $[x_{i,j}]_{m \times n}$ 。

2. 矩阵的 **F** 范数：设矩阵 $\mathbf{A} = (a_{i,j})_{m \times n}$ ，则其 **F** 范数为： $\|\mathbf{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i,j} a_{i,j}^2}$ 。

它是向量的 L_2 范数的推广。

3. 矩阵的迹：设矩阵 $\mathbf{A} = (a_{i,j})_{m \times n}$ ，则 \mathbf{A} 的迹为： $tr(\mathbf{A}) = \sum_i a_{i,i}$ 。

迹的性质有：

- \mathbf{A} 的 **F** 范数等于 $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ 的迹的平方根： $\|\mathbf{A}\|_F = \sqrt{tr(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)}$ 。
- \mathbf{A} 的迹等于 \mathbf{A}^T 的迹： $tr(\mathbf{A}) = tr(\mathbf{A}^T)$ 。
- 交换律：假设 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ ，则有： $tr(\mathbf{AB}) = tr(\mathbf{BA})$ 。
- 结合律： $tr(\mathbf{ABC}) = tr(\mathbf{CAB}) = tr(\mathbf{BCA})$ 。

二、向量操作

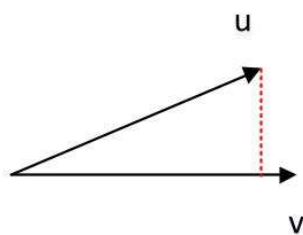
1. 一组向量 $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n$ 是线性相关的：指存在一组不全为零的实数 a_1, a_2, \dots, a_n ，使得：

$$\sum_{i=1}^n a_i \vec{v}_i = \vec{0}。$$

一组向量 $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n$ 是线性无关的，当且仅当 $a_i = 0, i = 1, 2, \dots, n$ 时，才有： $\sum_{i=1}^n a_i \vec{v}_i = \vec{0}$ 。

2. 一个向量空间所包含的最大线性无关向量的数目，称作该向量空间的维数。

3. 三维向量的点积： $\vec{u} \cdot \vec{v} = u_x v_x + u_y v_y + u_z v_z = |\vec{u}| |\vec{v}| \cos(\angle(\vec{u}, \vec{v}))$ 。



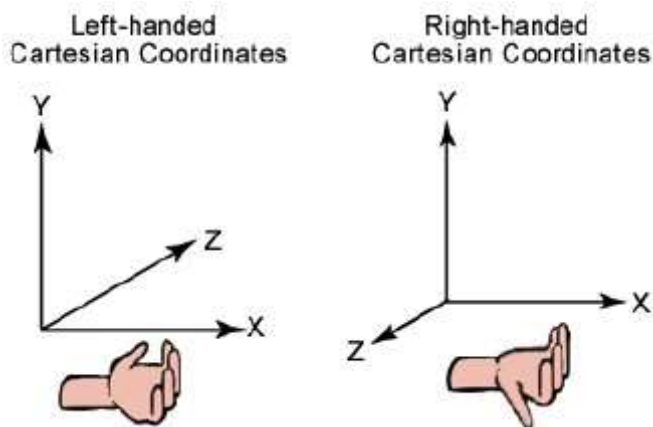
4. 三维向量的叉积:

$$\vec{w} = \vec{u} \times \vec{v} = \begin{bmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ u_x & u_y & u_z \\ v_x & v_y & v_z \end{bmatrix}$$

其中 $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ 分别为 x, y, z 轴的单位向量。

$$\vec{u} = u_x \vec{i} + u_y \vec{j} + u_z \vec{k}, \quad \vec{v} = v_x \vec{i} + v_y \vec{j} + v_z \vec{k}$$

- \vec{u} 和 \vec{v} 的叉积垂直于 \vec{u}, \vec{v} 构成的平面，其方向符合右手规则。
- 叉积的模等于 \vec{u}, \vec{v} 构成的平行四边形的面积
- $\vec{u} \times \vec{v} = -\vec{v} \times \vec{u}$
- $\vec{u} \times (\vec{v} \times \vec{w}) = (\vec{u} \cdot \vec{w})\vec{v} - (\vec{u} \cdot \vec{v})\vec{w}$



5. 三维向量的混合积:

$$\begin{aligned} [\vec{u} \ \vec{v} \ \vec{w}] &= (\vec{u} \times \vec{v}) \cdot \vec{w} = \vec{u} \cdot (\vec{v} \times \vec{w}) \\ &= \begin{vmatrix} u_x & u_y & u_z \\ v_x & v_y & v_z \\ w_x & w_y & w_z \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} u_x & v_x & w_x \\ u_y & v_y & w_y \\ u_z & v_z & w_z \end{vmatrix} \end{aligned}$$

其物理意义为：以 $\vec{u}, \vec{v}, \vec{w}$ 为三个棱边所围成的平行六面体的体积。当 $\vec{u}, \vec{v}, \vec{w}$ 构成右手系时，该平行六面体的体积为正号。

6. 两个向量的并矢：给定两个向量 $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T, \vec{y} = (y_1, y_2, \dots, y_m)^T$ ，则向量的并矢记作：

$$\vec{x}\vec{y} = \begin{bmatrix} x_1 y_1 & x_1 y_2 & \cdots & x_1 y_m \\ x_2 y_1 & x_2 y_2 & \cdots & x_2 y_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_n y_1 & x_n y_2 & \cdots & x_n y_m \end{bmatrix}$$

也记作 $\vec{x} \otimes \vec{y}$ 或者 $\vec{x}\vec{y}^T$ 。

三、矩阵运算

1. 给定两个矩阵 $\mathbf{A} = (a_{i,j}) \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{B} = (b_{i,j}) \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 定义:

◦ 阿达马积 Hadamard product (又称作逐元素积):

$$\mathbf{A} \circ \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{1,1}b_{1,1} & a_{1,2}b_{1,2} & \cdots & a_{1,n}b_{1,n} \\ a_{2,1}b_{2,1} & a_{2,2}b_{2,2} & \cdots & a_{2,n}b_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1}b_{m,1} & a_{m,2}b_{m,2} & \cdots & a_{m,n}b_{m,n} \end{bmatrix}$$

◦ 克罗内积 Kronecker product:

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{1,1}\mathbf{B} & a_{1,2}\mathbf{B} & \cdots & a_{1,n}\mathbf{B} \\ a_{2,1}\mathbf{B} & a_{2,2}\mathbf{B} & \cdots & a_{2,n}\mathbf{B} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1}\mathbf{B} & a_{m,2}\mathbf{B} & \cdots & a_{m,n}\mathbf{B} \end{bmatrix}$$

2. 设 $\vec{x}, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ 为 n 阶向量, $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{X}$ 为 n 阶方阵, 则有:

$$\frac{\partial(\vec{a}^T \vec{x})}{\partial \vec{x}} = \frac{\partial(\vec{x}^T \vec{a})}{\partial \vec{x}} = \vec{a}$$

$$\frac{\partial(\vec{a}^T \mathbf{X} \vec{b})}{\partial \mathbf{X}} = \vec{a} \vec{b}^T = \vec{a} \otimes \vec{b} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

$$\frac{\partial(\vec{a}^T \mathbf{X}^T \vec{b})}{\partial \mathbf{X}} = \vec{b} \vec{a}^T = \vec{b} \otimes \vec{a} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

$$\frac{\partial(\vec{a}^T \mathbf{X} \vec{a})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial(\vec{a}^T \mathbf{X}^T \vec{a})}{\partial \mathbf{X}} = \vec{a} \otimes \vec{a}$$

$$\frac{\partial(\vec{a}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \vec{b})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{X}(\vec{a} \otimes \vec{b} + \vec{b} \otimes \vec{a})$$

$$\frac{\partial[(\mathbf{A}\vec{x} + \vec{a})^T \mathbf{C}(\mathbf{B}\vec{x} + \vec{b})]}{\partial \vec{x}} = \mathbf{A}^T \mathbf{C}(\mathbf{B}\vec{x} + \vec{b}) + \mathbf{B}^T \mathbf{C}(\mathbf{A}\vec{x} + \vec{a})$$

$$\frac{\partial(\vec{x}^T \mathbf{A} \vec{x})}{\partial \vec{x}} = (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T) \vec{x}$$

$$\frac{\partial[(\mathbf{X}\vec{b} + \vec{c})^T \mathbf{A}(\mathbf{X}\vec{b} + \vec{c})]}{\partial \mathbf{X}} = (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T)(\mathbf{X}\vec{b} + \vec{c})\vec{b}^T$$

$$\frac{\partial(\vec{\mathbf{b}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X} \vec{\mathbf{c}})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{A}^T \mathbf{X} \vec{\mathbf{b}} \vec{\mathbf{c}}^T + \mathbf{A} \mathbf{X} \vec{\mathbf{c}} \vec{\mathbf{b}}^T$$

3. 如果 f 是一元函数，则：

- 其逐元向量函数为： $f(\vec{\mathbf{x}}) = (f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_n))^T$ 。
- 其逐矩阵函数为：

$$f(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} f(x_{1,1}) & f(x_{1,2}) & \cdots & f(x_{1,n}) \\ f(x_{2,1}) & f(x_{2,2}) & \cdots & f(x_{2,n}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f(x_{m,1}) & f(x_{m,2}) & \cdots & f(x_{m,n}) \end{bmatrix}$$

- 其逐元导数分别为：

$$f'(\vec{\mathbf{x}}) = (f'(x_1), f'(x_2), \dots, f'(x_n))^T$$

$$f'(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} f'(x_{1,1}) & f'(x_{1,2}) & \cdots & f'(x_{1,n}) \\ f'(x_{2,1}) & f'(x_{2,2}) & \cdots & f'(x_{2,n}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f'(x_{m,1}) & f'(x_{m,2}) & \cdots & f'(x_{m,n}) \end{bmatrix}$$

4. 各种类型的偏导数：

- 标量对标量的偏导数： $\frac{\partial u}{\partial v}$ 。
- 标量对向量 (n 维向量) 的偏导数： $\frac{\partial u}{\partial \vec{\mathbf{v}}} = (\frac{\partial u}{\partial v_1}, \frac{\partial u}{\partial v_2}, \dots, \frac{\partial u}{\partial v_n})^T$ 。
- 标量对矩阵 ($m \times n$ 阶矩阵) 的偏导数：

$$\frac{\partial u}{\partial \mathbf{V}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial V_{1,1}} & \frac{\partial u}{\partial V_{1,2}} & \cdots & \frac{\partial u}{\partial V_{1,n}} \\ \frac{\partial u}{\partial V_{2,1}} & \frac{\partial u}{\partial V_{2,2}} & \cdots & \frac{\partial u}{\partial V_{2,n}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial u}{\partial V_{m,1}} & \frac{\partial u}{\partial V_{m,2}} & \cdots & \frac{\partial u}{\partial V_{m,n}} \end{bmatrix}$$

- 向量 (m 维向量) 对标量的偏导数： $\frac{\partial \vec{\mathbf{u}}}{\partial v} = (\frac{\partial u_1}{\partial v}, \frac{\partial u_2}{\partial v}, \dots, \frac{\partial u_m}{\partial v})^T$ 。
- 向量 (m 维向量) 对向量 (n 维向量) 的偏导数 (雅可比矩阵，行优先)

$$\frac{\partial \vec{\mathbf{u}}}{\partial \vec{\mathbf{v}}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial v_1} & \frac{\partial u_1}{\partial v_2} & \cdots & \frac{\partial u_1}{\partial v_n} \\ \frac{\partial u_2}{\partial v_1} & \frac{\partial u_2}{\partial v_2} & \cdots & \frac{\partial u_2}{\partial v_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial u_m}{\partial v_1} & \frac{\partial u_m}{\partial v_2} & \cdots & \frac{\partial u_m}{\partial v_n} \end{bmatrix}$$

如果为列优先，则为上面矩阵的转置。

- 矩阵 ($m \times n$ 阶矩阵) 对标量的偏导数

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial v} = \begin{bmatrix} \frac{\partial U_{1,1}}{\partial v} & \frac{\partial U_{1,2}}{\partial v} & \cdots & \frac{\partial U_{1,n}}{\partial v} \\ \frac{\partial U_{2,1}}{\partial v} & \frac{\partial U_{2,2}}{\partial v} & \cdots & \frac{\partial U_{2,n}}{\partial v} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial U_{m,1}}{\partial v} & \frac{\partial U_{m,2}}{\partial v} & \cdots & \frac{\partial U_{m,n}}{\partial v} \end{bmatrix}$$

5. 对于矩阵的迹，有下列偏导数成立：

$$\frac{\partial[\text{tr}(f(\mathbf{X}))]}{\partial \mathbf{X}} = (f'(\mathbf{X}))^T$$

$$\frac{\partial[\text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{B})]}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{A}^T \mathbf{B}^T$$

$$\frac{\partial[\text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}^T \mathbf{B})]}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{B}\mathbf{A}$$

$$\frac{\partial[\text{tr}(\mathbf{A} \otimes \mathbf{X})]}{\partial \mathbf{X}} = \text{tr}(\mathbf{A})\mathbf{I}$$

$$\frac{\partial[\text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{B}\mathbf{X})]}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{A}^T \mathbf{X}^T \mathbf{B}^T + \mathbf{B}^T \mathbf{X} \mathbf{A}^T$$

$$\frac{\partial[\text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{B}\mathbf{X}\mathbf{C})]}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{B}\mathbf{X}\mathbf{C} + \mathbf{B}^T \mathbf{X} \mathbf{C}^T$$

$$\frac{\partial[\text{tr}(\mathbf{C}^T \mathbf{X}^T \mathbf{B}\mathbf{X}\mathbf{C})]}{\partial \mathbf{X}} = (\mathbf{B}^T + \mathbf{B})\mathbf{X}\mathbf{C}\mathbf{C}^T$$

$$\frac{\partial[\text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{B}\mathbf{X}^T \mathbf{C})]}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{A}^T \mathbf{C}^T \mathbf{X} \mathbf{B}^T + \mathbf{C} \mathbf{A} \mathbf{X} \mathbf{B}$$

$$\frac{\partial[\text{tr}((\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{B} + \mathbf{C})(\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{B} + \mathbf{C}))]}{\partial \mathbf{X}} = 2\mathbf{A}^T (\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{B} + \mathbf{C})\mathbf{B}^T$$

6. 假设 $\mathbf{U} = f(\mathbf{X})$ 是关于 \mathbf{X} 的矩阵值函数 ($f: \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}^{m \times n}$)，且 $g(\mathbf{U})$ 是关于 \mathbf{U} 的实值函数 ($g: \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}$)，则下面链式法则成立：

$$\begin{aligned} \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{X}} &= \left(\frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{i,j}} \right)_{m \times n} = \begin{bmatrix} \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{1,1}} & \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{1,2}} & \cdots & \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{1,n}} \\ \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{2,1}} & \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{2,2}} & \cdots & \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{2,n}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{m,1}} & \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{m,2}} & \cdots & \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{m,n}} \end{bmatrix} \\ &= \left(\sum_k \sum_l \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial u_{k,l}} \frac{\partial u_{k,l}}{\partial x_{i,j}} \right)_{m \times n} = \left(\text{tr} \left[\left(\frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}} \right)^T \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_{i,j}} \right] \right)_{m \times n} \end{aligned}$$

四、特殊函数

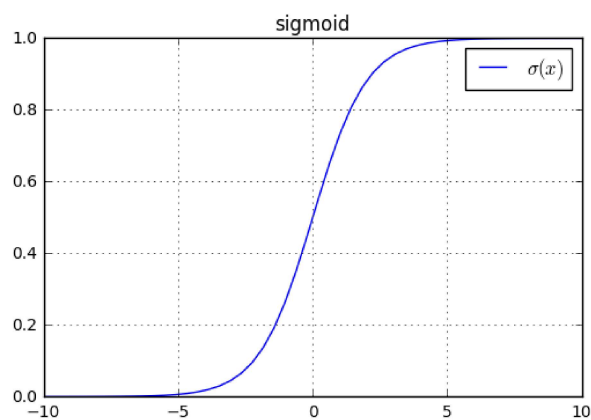
1. 这里给出机器学习中用到的一些特殊函数。

4.1 sigmoid 函数

1. `sigmoid` 函数:

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)}$$

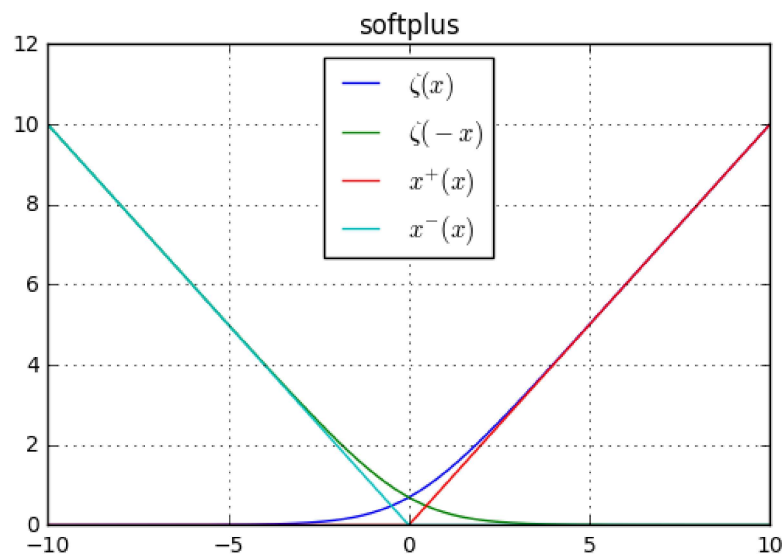
- 该函数可以用于生成二项分布的 ϕ 参数。
- 当 x 很大或者很小时, 该函数处于饱和状态。此时函数的曲线非常平坦, 并且自变量的一个较大的变化只能带来函数值的一个微小的变化, 即: 导数很小。



4.2 softplus 函数

1. `softplus` 函数: $\zeta(x) = \log(1 + \exp(x))$ 。

- 该函数可以生成正态分布的 σ^2 参数。
- 它之所以称作 `softplus`, 因为它是下面函数的一个光滑逼近: $x^+ = \max(0, x)$ 。



2. 如果定义两个函数:

$$x^+ = \max(0, x)$$

$$x^- = \max(0, -x)$$

则它们分布获取了 $y = x$ 的正部分和负部分。

根据定义有： $x = x^+ - x^-$ 。而 $\zeta(x)$ 逼近的是 x^+ ， $\zeta(-x)$ 逼近的是 x^- ， 于是有：

$$\zeta(x) - \zeta(-x) = x$$

3. sigmoid 和 softplus 函数的性质：

$$\sigma(x) = \frac{\exp(x)}{\exp(x) + \exp(0)}$$

$$\frac{d}{dx}\sigma(x) = \sigma(x)(1 - \sigma(x))$$

$$1 - \sigma(x) = \sigma(-x)$$

$$\log \sigma(x) = -\zeta(-x)$$

$$\frac{d}{dx}\zeta(x) = \sigma(x)$$

$$\forall x \in (0, 1), \sigma^{-1}(x) = \log\left(\frac{x}{1-x}\right)$$

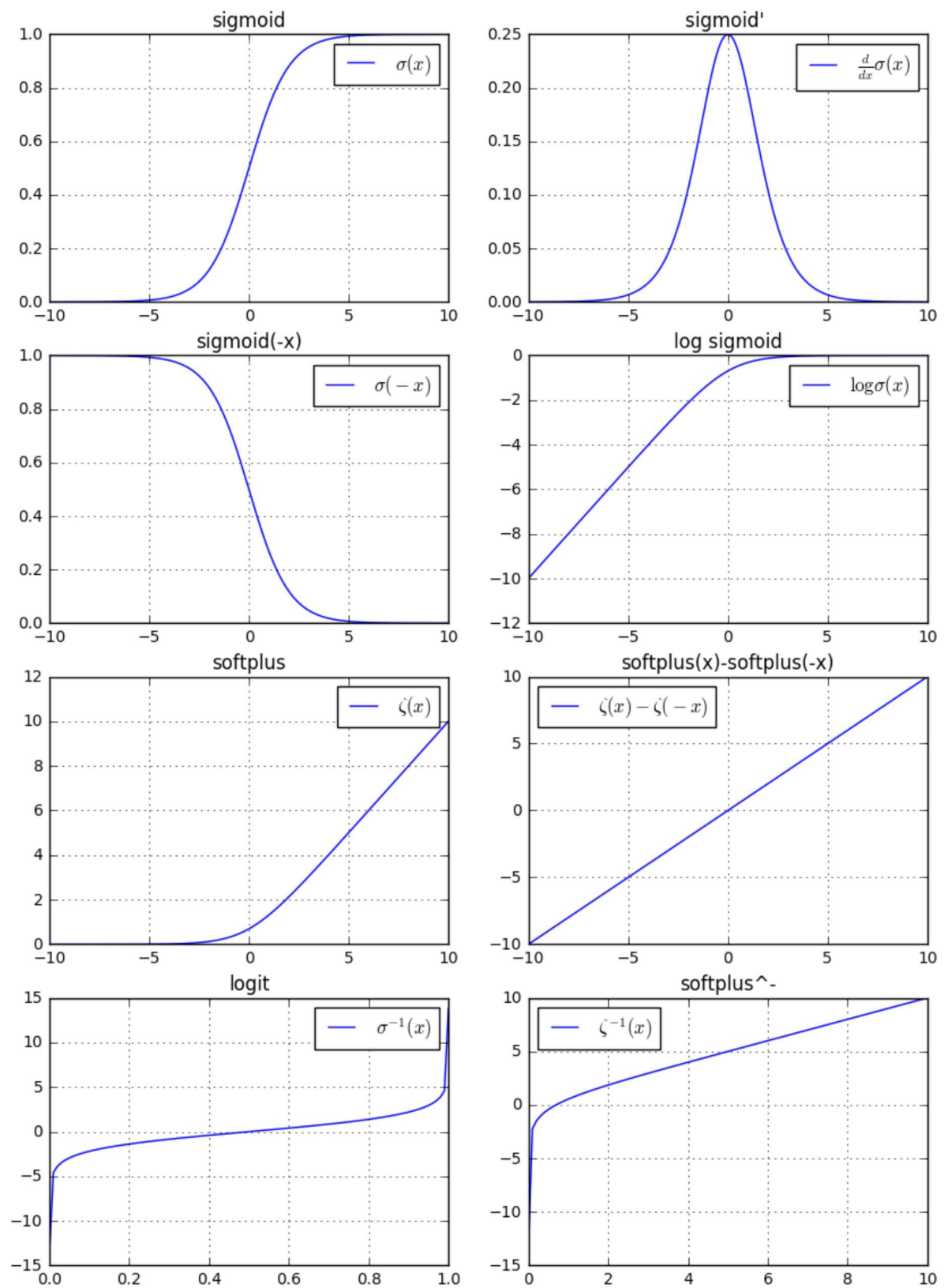
$$\forall x > 0, \zeta^{-1}(x) = \log(\exp(x) - 1)$$

$$\zeta(x) = \int_{-\infty}^x \sigma(y) dy$$

$$\zeta(x) - \zeta(-x) = x$$

其中 $f^{-1}(\cdot)$ 为反函数。

$\sigma^{-1}(x)$ 也称作 logit 函数。

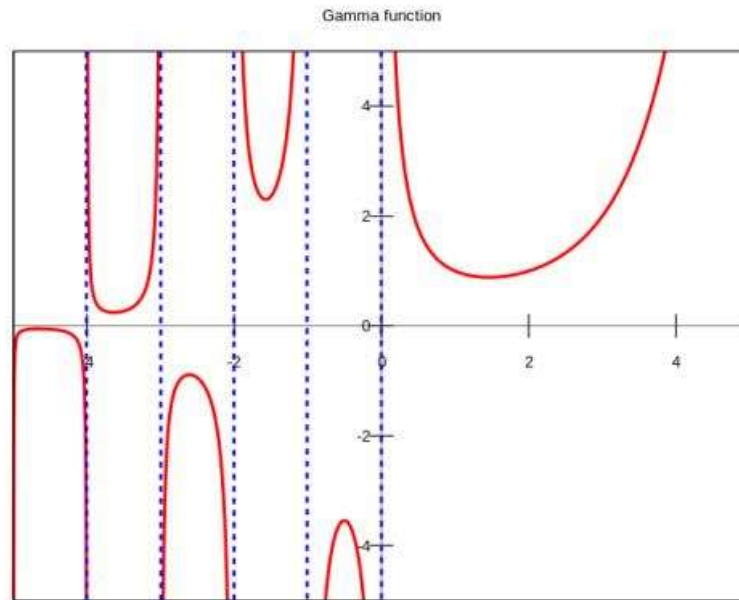


4.3 伽马函数

1. 伽马函数定义为：

$$\Gamma(x) = \int_0^{+\infty} t^{x-1} e^{-t} dt, x \in \mathbb{R}$$

or. $\Gamma(z) = \int_0^{+\infty} t^{z-1} e^{-t} dt, z \in \mathbb{Z}$



性质为：

- 对于正整数 n 有： $\Gamma(n) = (n-1)!$ 。
- $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ ，因此伽马函数是阶乘在实数域上的扩展。
- 与贝塔函数的关系：

$$B(m, n) = \frac{\Gamma(m)\Gamma(n)}{\Gamma(m+n)}$$

- 对于 $x \in (0, 1)$ 有：

$$\Gamma(1-x)\Gamma(x) = \frac{\pi}{\sin \pi x}$$

则可以推导出重要公式： $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$ 。

- 对于 $x > 0$ ，伽马函数是严格凹函数。

2. 当 x 足够大时，可以用 Stirling 公式来计算 Gamma 函数值： $\Gamma(x) \sim \sqrt{2\pi} e^{-x} x^{x+1/2}$ 。

4.4 贝塔函数

1. 对于任意实数 $m, n > 0$ ，定义贝塔函数：

$$B(m, n) = \int_0^1 x^{m-1} (1-x)^{n-1} dx$$

其它形式的定义：

$$B(m, n) = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin^{2m-1}(x) \cos^{2n-1}(x) dx$$

$$B(m, n) = \int_0^{+\infty} \frac{x^{m-1}}{(1+x)^{m+n}} dx$$

$$B(m, n) = \int_0^1 \frac{x^{m-1} + x^{n-1}}{(1+x)^{m+n}} dx$$

2. 性质:

- 连续性: 贝塔函数在定义域 $m > 0, n > 0$ 内连续。
- 对称性: $B(m, n) = B(n, m)$ 。
- 递个公式:

$$B(m, n) = \frac{n-1}{m+n-1} B(m, n-1), \quad m > 0, n > 1$$

$$B(m, n) = \frac{m-1}{m+n-1} B(m-1, n), \quad m > 1, n > 0$$

$$B(m, n) = \frac{(m-1)(n-1)}{(m+n-1)(m+n-2)} B(m-1, n-1), \quad m > 1, n > 1$$

- 当 m, n 较大时, 有近似公式:

$$B(m, n) = \frac{\sqrt{(2\pi)m^{m-1/2}n^{n-1/2}}}{(m+n)^{m+n-1/2}}$$

- 与伽马函数关系:

- 对于任意正实数 m, n , 有:

$$B(m, n) = \frac{\Gamma(m)\Gamma(n)}{\Gamma(m+n)}$$

- $B(m, 1-m) = \Gamma(m)\Gamma(1-m)$ 。