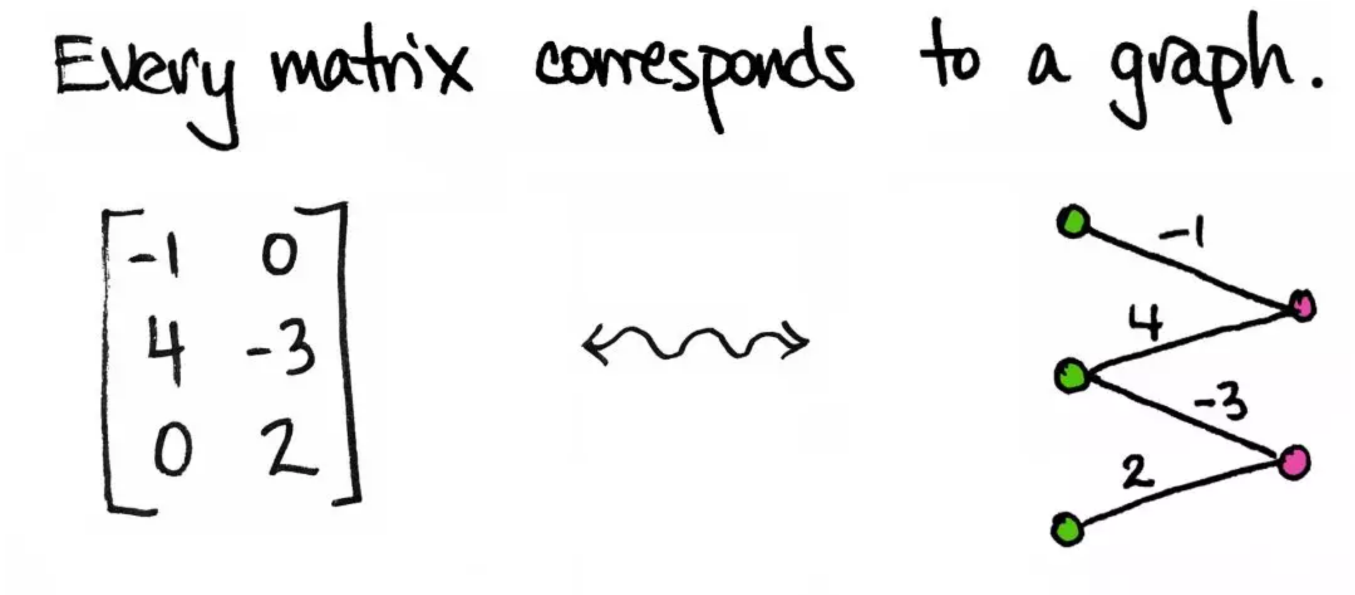
# 手把手教你将矩阵&概率画成图

机器学习研究会订阅号 3月28日

> 要是将每个矩阵和概率都看成对应的「图」会怎么样？本文作者带我们体验了这个简单而有趣的可视化过程。

今天我想分享一个简单的 idea，它既不新颖也不花哨。甚至很多人都有过这个想法。但是无论你有没有这么想过，我都希望你能抽出几分钟和我一起重新感受这个想法。

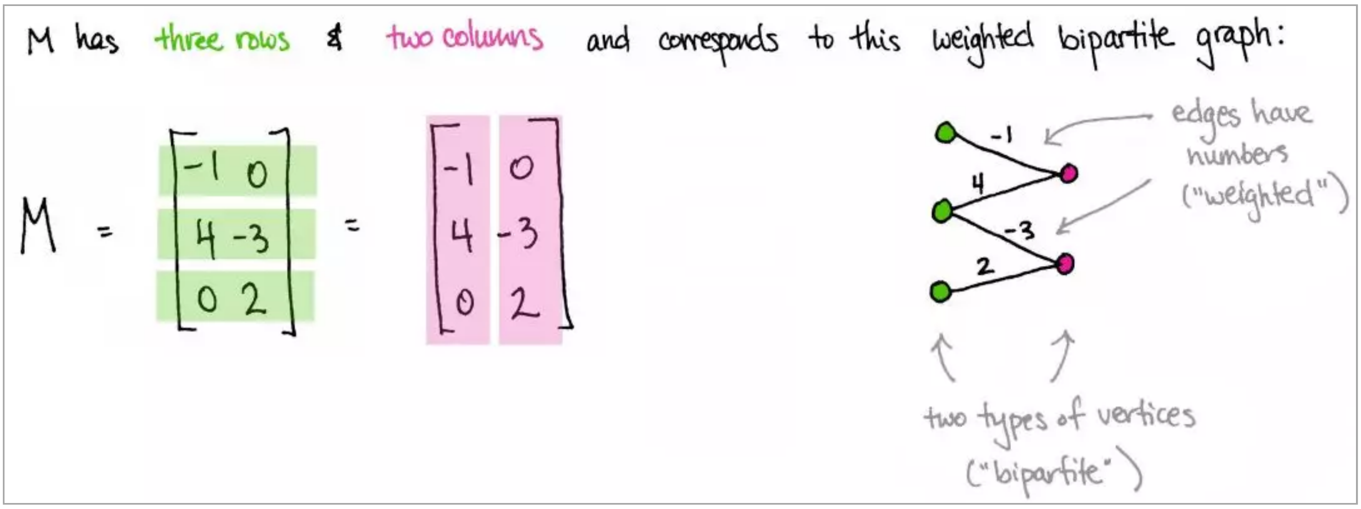
这个想法是这样的：




想法非常简单，但非常实用。

首先严谨地概括这个想法：每个矩阵对应一个加权二分图。所谓「图」是指顶点（点）和线的集合；「二分」是指点有两种不同的类型/颜色;；「加权」是指每条线都有一个数字标记。

上图对应一个 3×23×2 矩阵 M。右侧我画了三个绿点，分别对应矩阵 M 的三行，两个粉点分别对应矩阵 M 的两列。如果对应矩阵 M 中的值非零，就在绿点和粉点间画一条线连接。

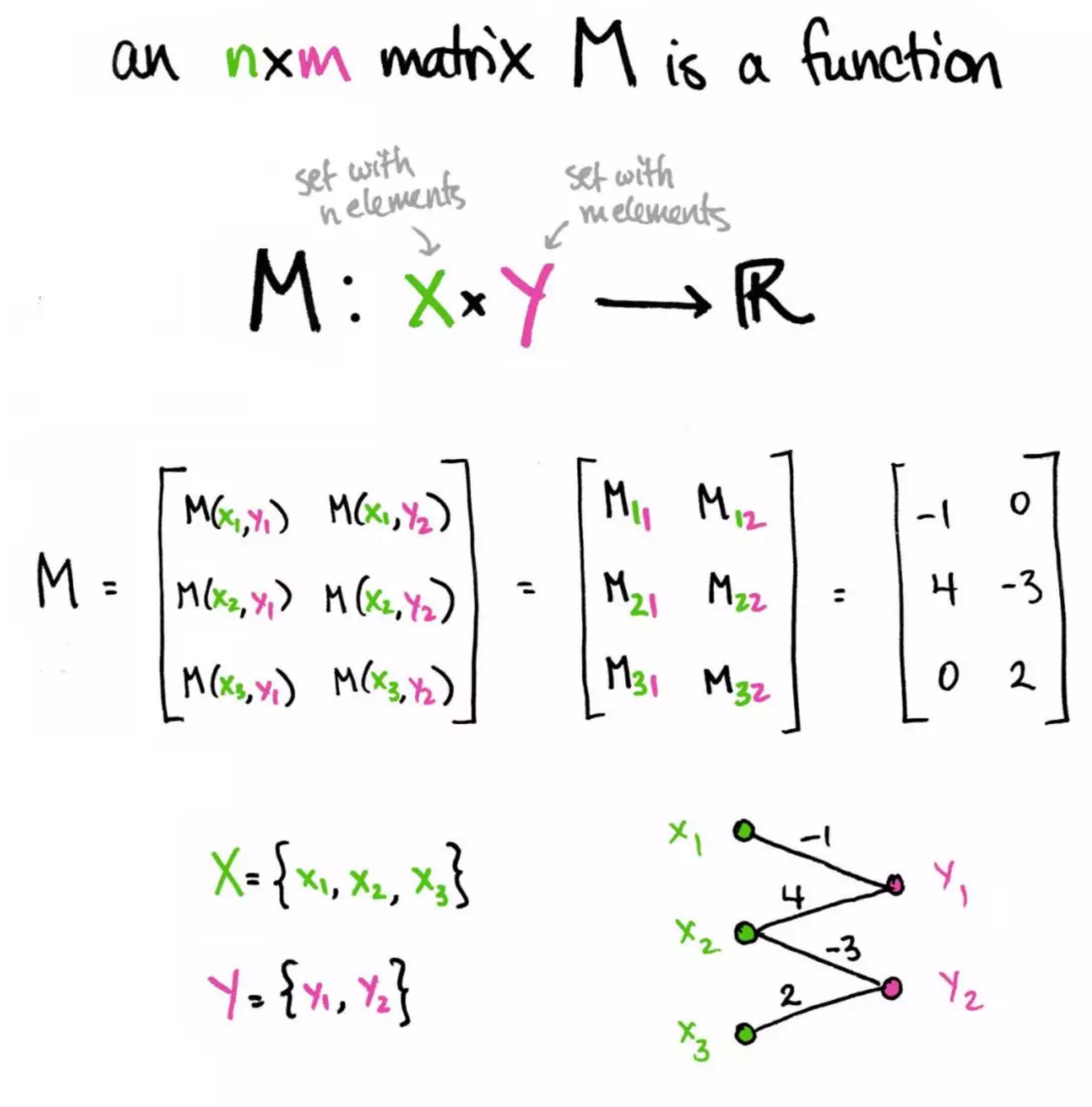



例如，在第二个绿点和第一个粉点间存在一条线，因为 M_21=4，即矩阵 M 第二行第一列的值不为 0。此外，我用非零数字标记了这条线。而第一个绿点和第二个粉点之间没有线连接，因为矩阵的第一行第二列值为零。

更明确的描述如下：

任何矩阵 M 都是 n×m 个数的数组。当然这是常识。但是这样的数组也可以看作函数 M：X×Y→R，其中 X = {x_1，...，x_n}，是一组 n 个元素组成的集合；Y = {y_1，...，y_m}，是一组 m 个元素组成的集合。实际上，如果要描述矩阵 M，那么需要描述第 ij 项的值。换句话说，对于每对 (i,j)，都需要给出一个实数 M_ij。这就是函数的功能啊！函数 M：X×Y→R 关联每对 (x_i,y_j)（如果你愿意，可以去掉字母并将其看作 (i,j)），即实数 M(x_i,y_j)。所以可以将 M(x_i,y_j) 简写为 M_ij。

看，矩阵就是一种函数。



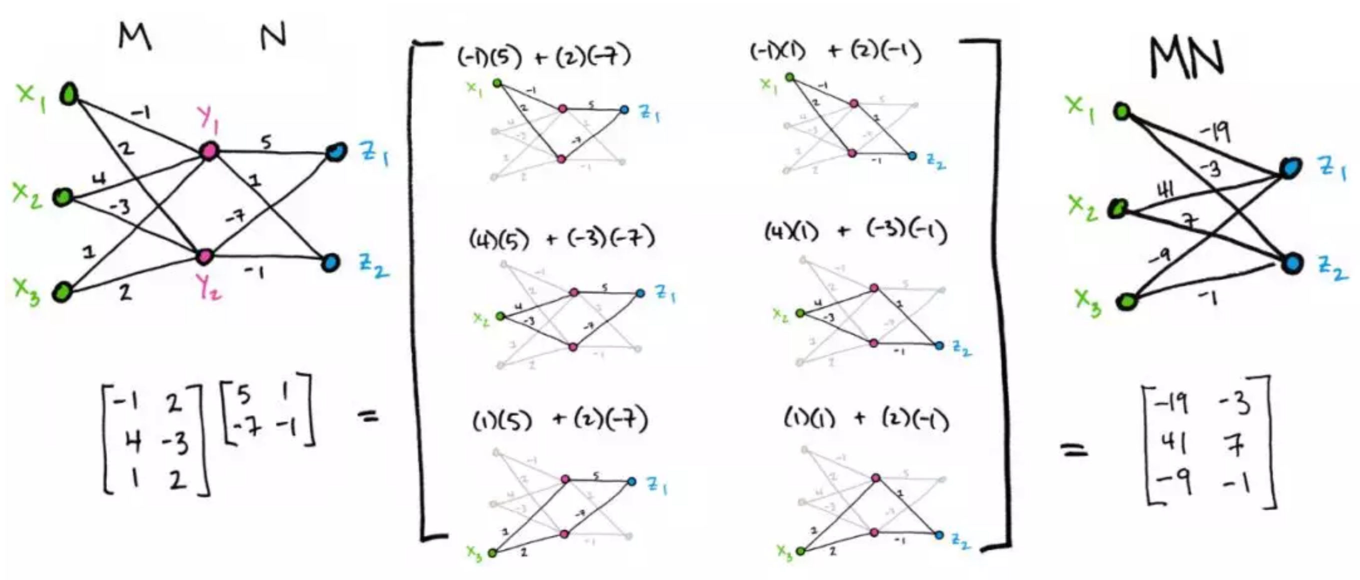

如前所述，我们进一步认为 X 的元素是绿点，而 Y 的元素是粉点。然后矩阵 M 以下图方式与加权二分图相对应：图的顶点有由 X 和 Y 提供的两种不同颜色，并且每个 x_i 和 y_j 之间存在连线，连线由数字 M_ij 标记。但是如果数值为零，那就省略这条边。

每个矩阵对应一个图。

当我们以这种方式可视化矩阵时，神奇的事就发生了。例如...

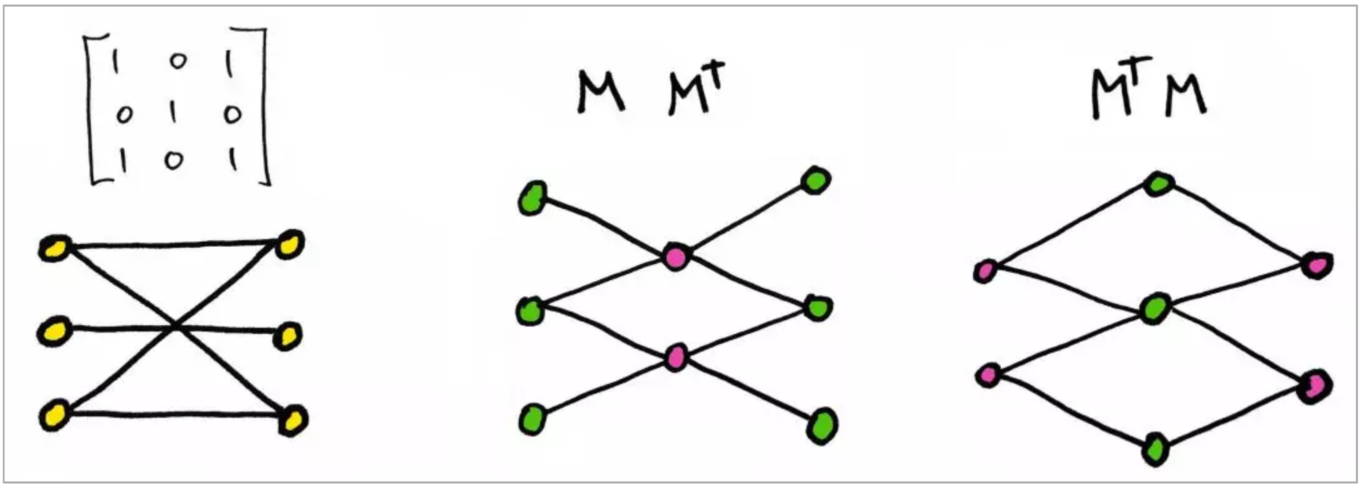
**矩阵乘法即为沿连线向前运算。**

给定两个矩阵（图）M：X×Y→R 和 N：Y×Z→R，我们可以通过将它们的图拼在一起并沿着连线进行乘法运算：MN 的第 ij 项的输入，即连接 x_i 到 z_j 的线的值，是通过将沿 x_i 到 z_j 的各个边相乘并加和得到的。例如：



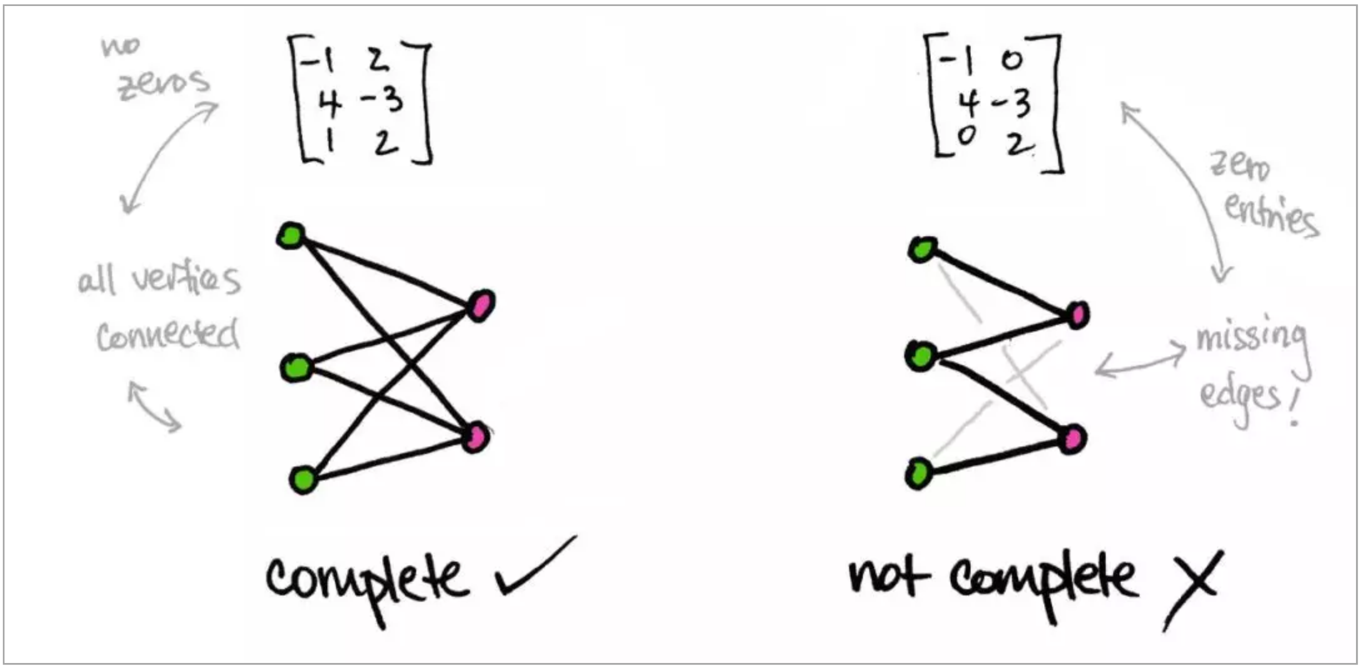

**对称矩阵对应对称图。**

如果一个矩阵等于它的转置，即为对称矩阵。这种对称性常通过矩阵对角线映射得到。但现在可以从图中观察到对称性。尤其对于任何矩阵 M 来说，下图直观地解释了，为什么 MM^T和 M^TM 始终对称！



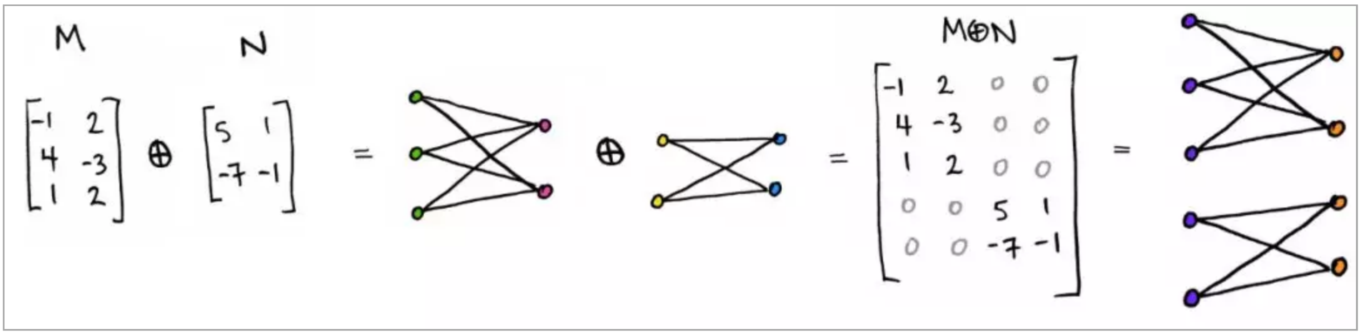

**若矩阵所有项都非零，则对应完全二分图。**

如果一个矩阵的所有元素都不为零，那么它对应的图就没有缺失的连线。这意味着 X 中的每个点都与 Y 的每个点相连。这样的二分图称为完全二分图。




**N 分块矩阵对应独立的 N 个图。**

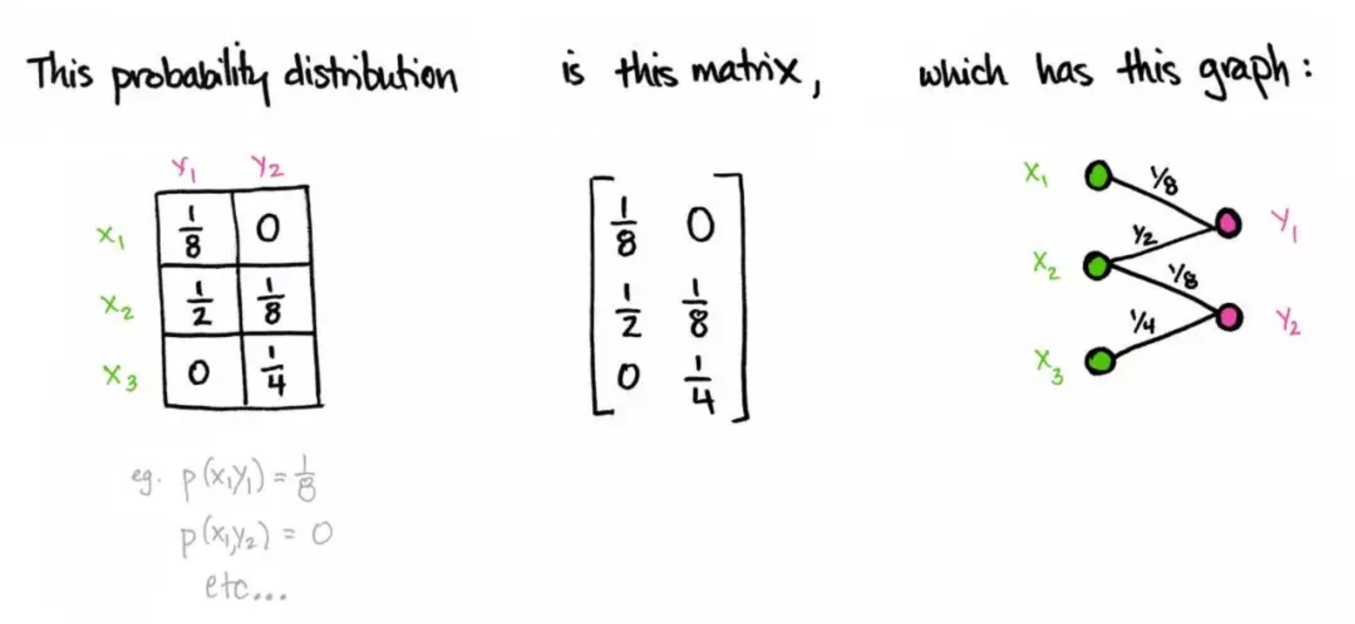
具体来说，由直和得到的分块矩阵对应断开的图。将两个矩阵做直和运算得到更大的数组（与向量直和运算类似），即一个带有全零块的大型分块矩阵。分块矩阵的图通过将原矩阵的图叠加得到。




关于矩阵和图我们能展开更多的讨论，但我想通过一个不同的角度来探讨。事实证明，概率非常适合我们矩阵-图的讨论。这是通过另一个有趣的小事实来实现的：

Every probability distribution $p$ on a product of finite sets $X \times Y$ gives rise to a matrix whose $ij^{th}$ entry is $p(x_i, y_j)$, the probability of $(x_i, y_j)$.

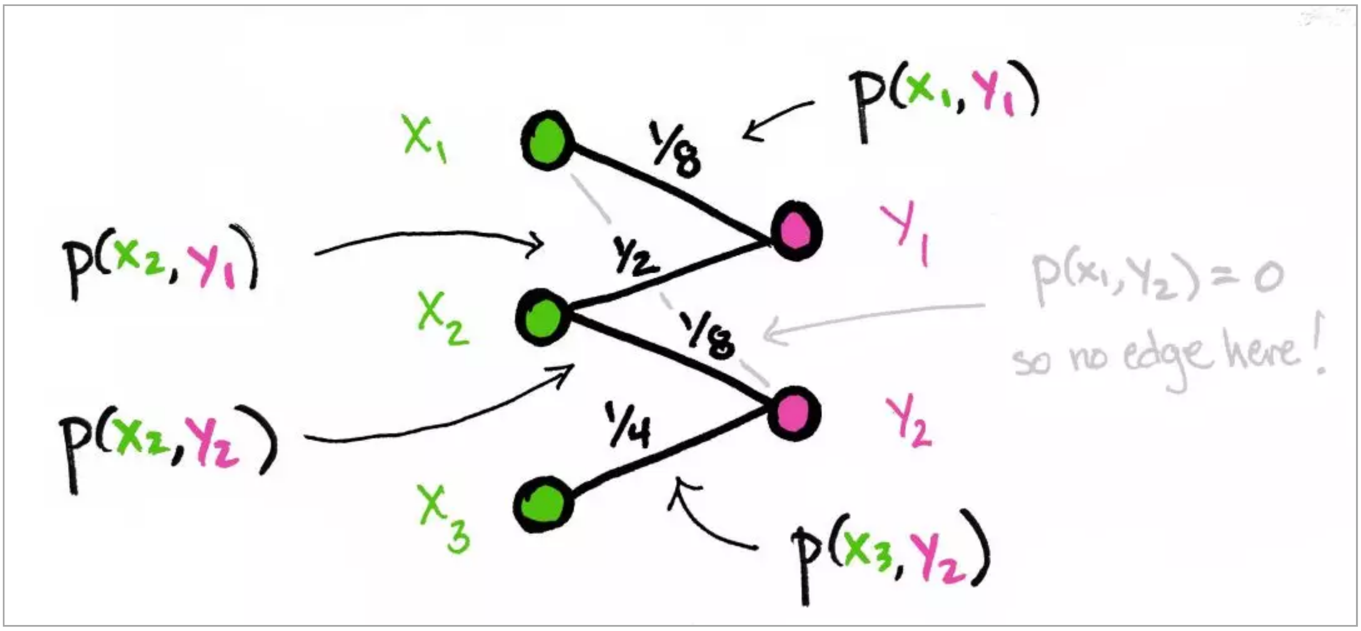
例如：




这样的概率分布图可以让我们更好地分析。

**联合概率**

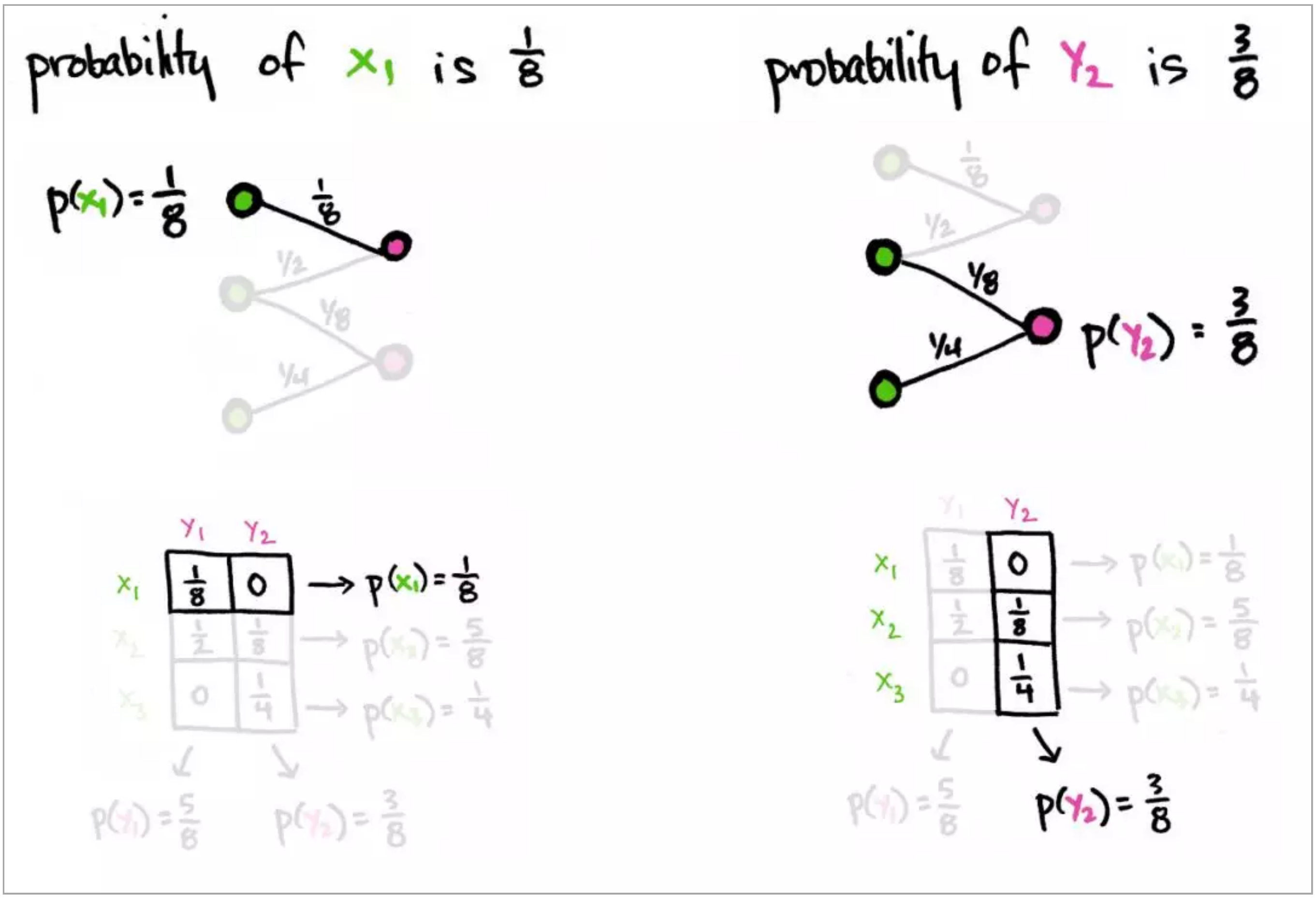
通过架构图中的连线，可以得到联合概率：(x_i,y_j) 的概率是连接 x,y 两点的线的标签。




**边缘概率**

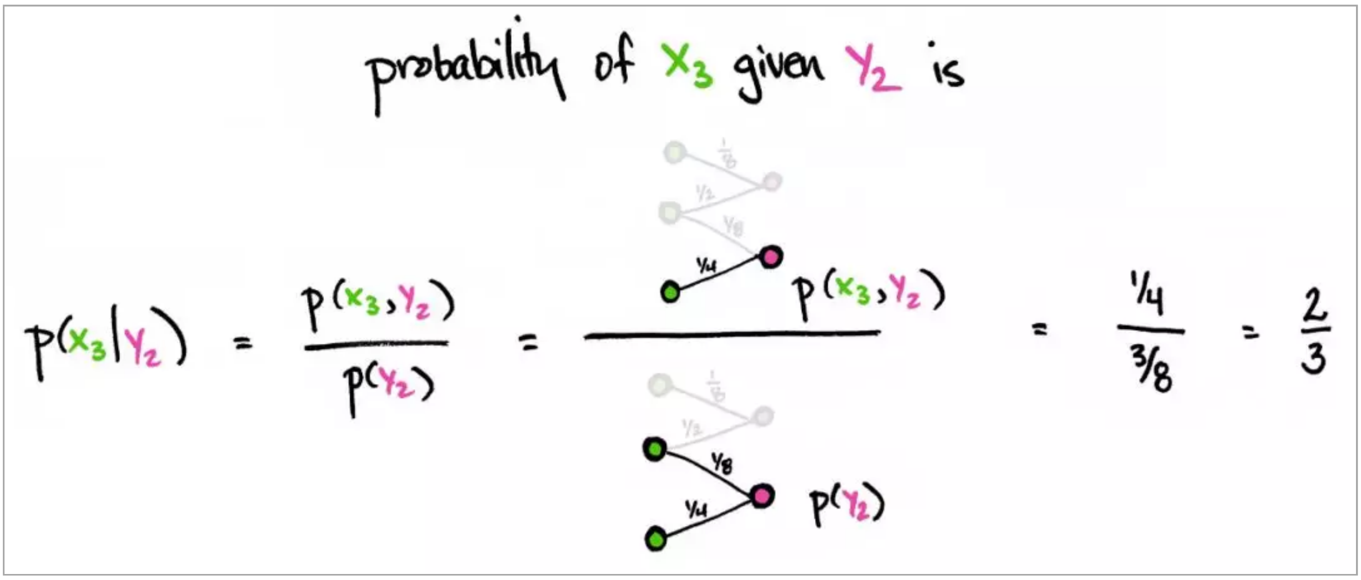
边缘概率是通过沿矩阵的行/列求和得到的（与上图等效）。例如，x_1 的概率 p(x_1)=p(x_1,y_1)+p(x_1,y_2)=1/8+0，这是第一行的总和。同样，y_2 的概率是 p(y_2)=p(x_1,y_2)+p(x_2,y_2)+p(x_3,y_2)=0+1/8+1/4，是第二列的和。

图中，x_i 的边缘概率是以 x_i 为顶点的所有连线的和。类似地，y_j 的边缘概率是以 y_j 为顶点的所有连线的和。




**条件概率**

条件概率是由联合概率除以边缘概率得到的。例如在 y_2 条件下 x_3 的概率 p(x_3|y_2)=p(x_3,y_2)/p(y_2)。从图中可以看出，这是通过将 x_3 和 y_2 的连线除以所有与 y_2 相连的线之和得到的。同样，y_i 下 x_j 的条件概率是两点连线的值除以所有与 x_j 相连的线之和。



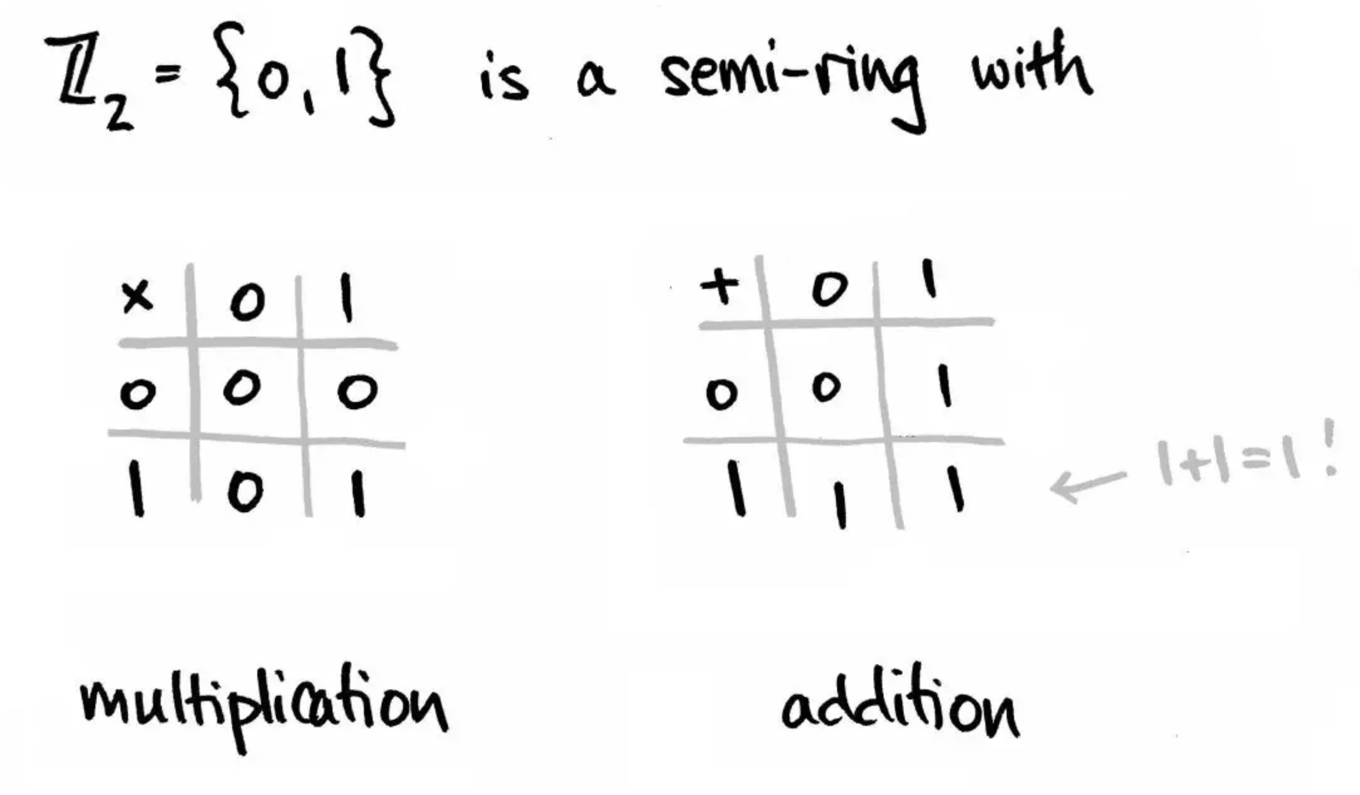

这很简单，对吧？

这里边的原理并不复杂，只是有时用新角度看旧想法是很有用的。

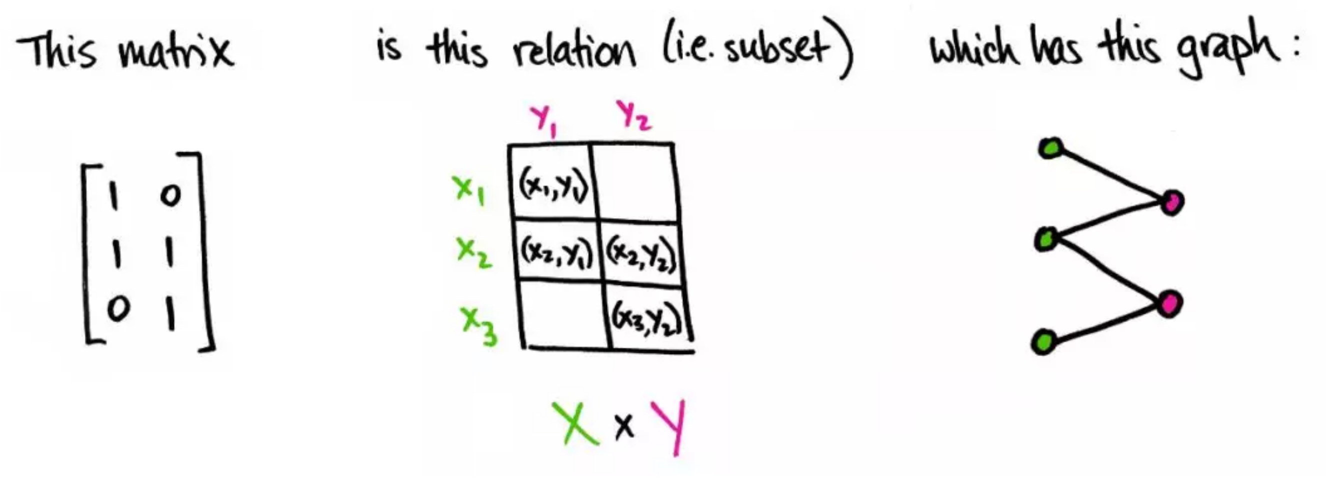
## 关系矩阵

本文的最后是另一个简单而有趣的事实，即：矩阵运算在交换环（communicative ring）上是有意义的。不仅仅是像 R 或 C 等。矩阵相乘甚至不需要负数：矩阵运算在交换半环上是有意义的！（半环是一个没有相反数的环。）

我认为这很好，因为包含两个元素 Z_2 = {0,1} 的集合通过下图的加法和乘法形成一个半环：




为什么会这么好？因为一个矩阵 M:X×Y→Z_2 相当于一个「关系」。「关系」是笛卡尔积 X×Y 的子集 R 的名称。换句话说，每个 Z_2-valued 矩阵定义了一个「关系」，每个关系又定义了一个 Z_2-valued 矩阵：当且仅当 (x_i,y_j) 是 R 子集的元素时，M_ij=1，否则 M_ij=0。

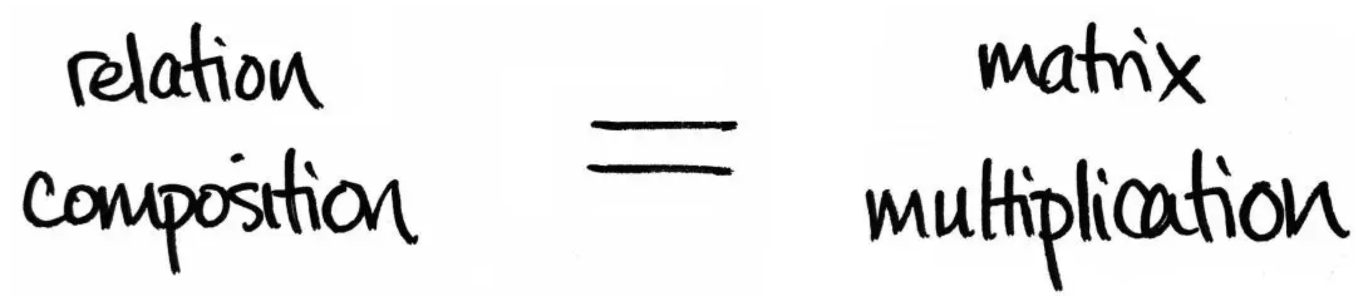



Z_2 中的矩阵图与上面讨论的图完全相同，只是现在所有连线的值都是 0 或 1。如果权重是 0，那和之前一样，我们就不画这条连线了。

（顺便说一句，你现在可以问，「既然每个「关系」对应于 Z_2 中的矩阵，那与「等价关系」相对应的矩阵是什么样的？」我离题了....）

通过将基础（半）环从 R 改为 Z_2，我们改变了解释权重的方式。例如，在上面的概率场景中，我们可以问，「从 x_1 到 y_1 的概率是多少？」答案由对应边的权重而来，在本例中为 12.5%。或者，当矩阵在 Z_2 中取值时，问题变为：「是否可能从 x_1 到 y_1？」如果连线标记为 1，则为「是」，如果标记为 0 则为「否」。（这个想法已经被多次解释了）。

重要的是，「关系」的组合恰好是使用了上面的 Z_2 算法的矩阵乘法。换句话说，给定任意两个关系 R⊂X×Y 和 S⊂Y×Z，存在一个新关系 SR⊂X×Z，包括所有 (x,z)，至少存在一个 y∈Y，其中 (x,y)∈R，(y,z)∈S。这种新关系正是表示 R 和 S 的矩阵乘积所指定的。




这个关于矩阵/关系的小事实绝对是我最喜欢的数学事实之一。一个原因是因为有限集的范畴，「关系」很像有限向量空间和线性映射的范畴。实际上，它更像是有限维 希尔伯特空间的范畴。这意味着许多看似不相干的想法突然变得密切。这些联系可以更加精准，这是一个在范畴理论界经常被分享的故事。

*原文链接：https://www.math3ma.com/blog/matrices-probability-graphs*

想要了解更多资讯，请扫描下方二维码，关注机器学习研究会

转自：机器之心