# 线性代数

## 朱明超

Email: deityrayleigh@gmail.com Github: github.com/MingchaoZhu/DeepLearning

# 1 标量,向量,矩阵,张量

- 1. **标量** (Scalar): 表示一个单独的**数**,通常用斜体小写字母表示,如  $s \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N}$ 。
- 2. **向量** (Vector): 表示**一列数**,这些数有序排列的,可以通过下标获取对应值,通常用粗体小写字母表示:  $x \in \mathbb{R}^n$  ,它表示元素取实数,且有 n 个元素,第一个元素表示为:  $x_1$ 。将向量写成列向量的形式:

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} \tag{1}$$

有时需要向量的子集,例如第 1,3,6 个元素,那么我们可以令集合  $S = \{1,3,6\}$  ,然后用  $\boldsymbol{x}_S$  来表示这个子集。另外,我们用符号 - 表示集合的补集:  $\boldsymbol{x}_{-1}$  表示除  $\boldsymbol{x}_1$  外  $\boldsymbol{x}$  中的所有元素, $\boldsymbol{x}_{-S}$  表示除  $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_3, \boldsymbol{x}_6$  外  $\boldsymbol{x}$  中的所有元素。

3. **矩阵** (Matrix): 表示一个**二维数组**,每个元素的下标由两个数字确定,通常用大写粗体字母表示:  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  ,它表示元素取实数的 m 行 n 列矩阵,其元素可以表示为:  $A_{1,1}, A_{m,n}$ 。我们用:表示矩阵的一行或者一列:  $A_{i,:}$  为第 i 行, $A_{:,j}$  为第 j 列。

矩阵可以写成这样的形式:

$$\begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} \end{bmatrix} \tag{2}$$

有时我们需要对矩阵进行逐元素操作,如将函数 f 应用到 A 的所有元素上,此时我们用  $f(A)_{i,j}$  表示。

4. **张量** (Tensor): **超过二维的数组**,我们用 A 表示张量, $\mathsf{A}_{i,j,k}$  表示其元素(三维张量情况下)。

```
[1]: import numpy as np
```

```
[2]: # 标量
     s = 5
     #向量
     v = np.array([1,2])
     #矩阵
     m = np.array([[1,2], [3,4]])
     # 张量
     t = np.array([
       [[1,2,3],[4,5,6],[7,8,9]],
       [[11,12,13],[14,15,16],[17,18,19]],
       [[21,22,23],[24,25,26],[27,28,29]],
      ])
     print("标量: " + str(s))
     print("向量: " + str(v))
     print("矩阵: " + str(m))
     print("张量: " + str(t))
```

标量: 5 向量: [1 2] 矩阵: [[1 2] [3 4]] 张量: [[[1 2 3] [4 5 6] [7 8 9]] [[11 12 13] [14 15 16] [17 18 19]]

[[21 22 23] [24 25 26]

[27 28 29]]]

#### 2 矩阵转置

矩阵转置 (Transpose) 相当于沿着对角线翻转, 定义如下:

$$A_{i,j}^{\top} = A_{i,j} \tag{3}$$

矩阵转置的转置等于矩阵本身:

$$\left(\boldsymbol{A}^{\top}\right)^{\top} = \boldsymbol{A} \tag{4}$$

转置将矩阵的形状从  $m \times n$  变成了  $n \times m$  。

**向量**可以看成是**只有一列的矩阵**,为了方便,我们可以使用行向量加转置的操作,如: $\mathbf{x} = [x_1, x_2, x_3]^{\mathsf{T}}$ 。

**标量**也可以看成是**一行一列的矩阵**,其转置等于它自身:  $a^{T} = a$  。

[3]: A = np.array([[1.0,2.0],[1.0,0.0],[2.0,3.0]])
A\_t = A.transpose()
print("A:", A)
print("A 的转置:", A\_t)

A: [[1. 2.]

[1. 0.]

[2. 3.]]

A 的转置: [[1. 1. 2.]

[2. 0. 3.]]

### 3 矩阵加法

加法即对应元素相加,要求两个矩阵的形状一样:

$$C = A + B, C_{i,j} = A_{i,j} + B_{i,j}$$

$$\tag{5}$$

数乘即一个标量与矩阵每个元素相乘:

$$\mathbf{D} = a \cdot \mathbf{B} + c, D_{i,j} = a \cdot B_{i,j} + c \tag{6}$$

有时我们允许矩阵和向量相加的,得到一个矩阵,把b加到了A的每一行上,本质上是构造了一个将b按行复制的一个新矩阵,这种机制叫做广播(Broadcasting):

$$C = A + b, C_{i,j} = A_{i,j} + b_j \tag{7}$$

[4]: a = np.array([[1.0,2.0],[3.0,4.0]])
b = np.array([[6.0,7.0],[8.0,9.0]])
print("矩阵相加: ", a + b)

矩阵相加: [[7. 9.] [11. 13.]]

# 4 矩阵乘法

两个矩阵相乘得到第三个矩阵,我们需要  $\boldsymbol{A}$  的形状为  $m \times n$ , $\boldsymbol{B}$  的形状为  $n \times p$ ,得到的矩阵为  $\boldsymbol{C}$  的形状为  $m \times p$ :

$$C = AB \tag{8}$$

具体定义为

$$C_{i,j} = \sum_{k} A_{i,k} B_{k,j} \tag{9}$$

注意矩阵乘法不是元素对应相乘,元素对应相乘又叫  ${f Hadamard}$  乘积,记作  ${f A}\odot {f B}$ 。

向量可以看作是列为 1 的矩阵,两个相同维数的向量 x 和 y 的点乘(Dot Product)或者内积,可以表示为  $x^{\top}y$ 。

我们也可以把矩阵乘法理解为:  $C_{i,j}$  表示 A 的第 i 行与 B 的第 j 列的点积。

```
[5]: m1 = np.array([[1.0,3.0],[1.0,0.0]])
m2 = np.array([[1.0,2.0],[5.0,0.0]])
print("按矩阵乘法规则: ", np.dot(m1, m2))
print("按逐元素相乘: ", np.multiply(m1, m2))
print("按逐元素相乘: ", m1*m2)
v1 = np.array([1.0,2.0])
v2 = np.array([4.0,5.0])
print("向量内积: ", np.dot(v1, v2))
```

按矩阵乘法规则: [[16. 2.]

[ 1. 2.]]

按逐元素相乘: [[1. 6.]

[5. 0.]]

按逐元素相乘: [[1. 6.]

[5. 0.]] 向量内积: 14.0

#### 5 单位矩阵

为了引入矩阵的逆,我们需要先定义单位矩阵 (Identity Matrix):单位矩阵乘以任意一个向量等于这个向量本身。记  $I_n$  为保持 n 维向量不变的单位矩阵,即:

$$I_n \in \mathbb{R}^{n \times n}, \, \forall x \in \mathbb{R}^n, \, I_n x = x$$
 (10)

单位矩阵的结构十分简单,所有的对角元素都为1,其他元素都为0,如:

$$\mathbf{I}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{11}$$

[6]: np.identity(3)

[6]: array([[1., 0., 0.], [0., 1., 0.], [0., 0., 1.]])

#### 6 矩阵的逆

矩阵 A 的逆 (Inversion) 记作  $A^{-1}$ , 定义为一个矩阵使得

$$\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}_n \tag{12}$$

如果  $A^{-1}$  存在,那么线性方程组 Ax = b 的解为:

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{I}_n\mathbf{x} = \mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \tag{13}$$

A 的逆矩阵 [[-2. 1.] [ 1.5 -0.5]]

# 7 范数

通常我们用范数 (norm) 来衡量向量,向量的  $L^p$  范数定义为:

$$\|\boldsymbol{x}\|_{p} = \left(\sum_{i} |x_{i}|^{p}\right)^{\frac{1}{p}}, p \in \mathbb{R}, p \ge 1$$
(14)

 $L^2$  范数,也称欧几里得范数 (Euclidean norm),是**向量 x 到原点的欧几里得距离**。有时也用  $L^2$  范数的平方来衡量向量:  $x^\top x$  。事实上,平方  $L^2$  范数在计算上更为便利,例如它的对 x 梯度的各个分量只依赖于 x 的对应的各个分量,而  $L^2$  范数对 x 梯度的各个分量要依赖于整个 x 向量。

 $L^1$  范数:  $L^2$  范数并不一定适用于所有的情况,它在原点附近的增长就十分缓慢,因此不适用于需要区别 0 和非常小但是非 0 值的情况。 $L^1$  范数 就是一个比较好的选择,它在所有方向上的增长速率都是一样的,定义为:

$$\|\boldsymbol{x}\|_1 = \sum_i |x_i| \tag{15}$$

它经常使用在需要区分 0 和非 0 元素的情形中。

 $L^0$  范数:如果需要衡量向量中非0 元素的个数,但**它并不是一个范数** (不满足三角不等式和数乘),此时 $L^1$  范数可以作为它的一个替代。

 $L^{\infty}$  范数: 它在数学上是向量元素绝对值的最大值, 因此也被叫做 (Max norm):

$$\|\boldsymbol{x}\|_{\infty} = \max_{i} |x_{i}| \tag{16}$$

有时我们想衡量一个矩阵,机器学习中通常使用的是 F 范数 (Frobenius norm),其定义为:

$$\|\mathbf{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i,j} A_{i,j}^2}$$
 (17)

```
[8]: a = np.array([1.0,3.0])
print("向量 2 范数", np.linalg.norm(a,ord=2))
print("向量 1 范数", np.linalg.norm(a,ord=1))
print("向量无穷范数", np.linalg.norm(a,ord=np.inf))
```

向量 2 范数 3.1622776601683795

向量 1 范数 4.0

向量无穷范数 3.0

```
[9]: a = np.array([[1.0,3.0],[2.0,1.0]])
print("矩阵 F 范数", np.linalg.norm(a,ord="fro"))
```

矩阵 F 范数 3.872983346207417

#### 8 特征值分解

如果一个  $n \times n$  矩阵  $\boldsymbol{A}$  有 n 组线性无关的单位特征向量  $\{\boldsymbol{v}^{(1)},\ldots,\boldsymbol{v}^{(n)}\}$  ,以及对应的特征值  $\lambda_1,\ldots,\lambda_n$ 。将这些特征向量按列拼接成一个矩阵:  $\boldsymbol{V}=[\boldsymbol{v}^{(1)},\ldots,\boldsymbol{v}^{(n)}]$ ,并将对应的特征值拼接成一个向量:  $\boldsymbol{\lambda}=[\lambda_1,\ldots,\lambda_n]$  。

A 的特征值分解 (Eigendecomposition) 为:

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\operatorname{diag}(\lambda)\mathbf{V}^{-1} \tag{18}$$

注意:

- 不是所有的矩阵都有特征值分解
- 在某些情况下,实矩阵的特征值分解可能会得到复矩阵

```
特征值: [ 1.61168440e+01 -1.11684397e+00 -3.73313677e-16]
特征值: [ 1.61168440e+01 -1.11684397e+00 -3.73313677e-16]
特征向量: [[-0.23197069 -0.78583024 0.40824829]
[-0.52532209 -0.08675134 -0.81649658]
```

### 9 奇异值分解

奇异值分解 (Singular Value Decomposition, SVD) 提供了另一种分解矩阵的方式,将其分解为奇异向量和奇异值。

与特征值分解相比,奇异值分解更加通用,所有的实矩阵都可以进行奇异值分解,而特征值分解只对某些方阵可以。

奇异值分解的形式为:

$$A = U\Sigma V^{\top} \tag{19}$$

若 A 是  $m \times n$  的,那么 U 是  $m \times m$  的,其列向量称为左奇异向量,而 V 是  $n \times n$  的,其列向量称为右奇异向量,而  $\Sigma$  是  $m \times n$  的一个对角矩阵,其对角元素称为矩阵 A 的奇异值。

事实上,左奇异向量是  $\mathbf{A}\mathbf{A}^{\mathsf{T}}$  的特征向量,而右奇异向量是  $\mathbf{A}^{\mathsf{T}}\mathbf{A}$  的特征向量,非 0 奇异值的平方是  $\mathbf{A}^{\mathsf{T}}\mathbf{A}$  的非 0 特征值。

[11]: A = np.array([[1.0,2.0,3.0], [4.0,5.0,6.0]])

U,D,V = np.linalg.svd(A)

print("U:", U)
print("D:", D)
print("V:", V)

U: [[-0.3863177 -0.92236578]

[-0.92236578 0.3863177 ]]

D: [9.508032 0.77286964]

V: [[-0.42866713 -0.56630692 -0.7039467 ]

[ 0.80596391 0.11238241 -0.58119908]

[ 0.40824829 -0.81649658 0.40824829]]

# 10 PCA (主成分分析)

假设我们有 m 个数据点  $\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(m)} \in \mathbb{R}^n$ ,对于每个数据点  $\mathbf{x}^{(i)}$  ,我们希望找到一个对应的点  $\mathbf{c}^{(i)} \in \mathbb{R}^l, l < n$  去表示它 (相当于对它进行降维),并且让损失的信息量尽可能少。

我们可以将这个过程看作是一个编码解码的过程,设编码和解码函数分别为 f,g ,则有  $f(x) = c,x \approx g(f(x))$ 。考虑一个线性解码函数  $g(c) = Dc, D \in \mathbb{R}^{n \times l}$ ,为了计算方便,我们将这个矩阵的列向量约束为相互正交的。另一方面,考虑到存在尺度放缩的问题,我们将这个矩阵的列向量约束为具有单位范数来获得唯一解。

对于给定的 x ,我们需要找到信息损失最小的  $c^*$  ,即求解:

$$\boldsymbol{c}^{\star} = \arg\min_{\boldsymbol{c}} \|\boldsymbol{x} - g(\boldsymbol{c})\|_{2} = \arg\min_{\boldsymbol{c}} \|\boldsymbol{x} - g(\boldsymbol{c})\|_{2}^{2}$$
(20)

这里我们用二范数来衡量信息的损失。展开之后我们有:

$$\|\boldsymbol{x} - g(\boldsymbol{c})\|_{2}^{2} = (\boldsymbol{x} - g(\boldsymbol{c}))^{\top} (\boldsymbol{x} - g(\boldsymbol{c})) = \boldsymbol{x}^{\top} \boldsymbol{x} - 2\boldsymbol{x}^{\top} g(\boldsymbol{c}) + g(\boldsymbol{c})^{\top} g(\boldsymbol{c})$$
(21)

结合 g(c) 的表达式,忽略不依赖 c 的  $x^{T}x$  项,我们有:

$$c^{\star} = \arg\min_{c} -2x^{\top} Dc + c^{\top} D^{\top} Dc$$

$$= \arg\min_{c} -2x^{\top} Dc + c^{\top} I_{l} c$$

$$= \arg\min_{c} -2x^{\top} Dc + c^{\top} c$$
(22)

这里 D 具有单位正交性。

对 c 求梯度,并令其为零,我们有:

$$\nabla_{c}(-2x^{\top}Dc + c^{\top}c) = 0$$

$$-2D^{\top}x + 2c = 0$$

$$c = D^{\top}x$$
(23)

因此,我们的编码函数为:

$$f(x) = D^{\top}x \tag{24}$$

此时通过编码解码得到的重构为:

$$r(\mathbf{x}) = g(f(\mathbf{x})) = \mathbf{D}\mathbf{D}^{\mathsf{T}}\mathbf{x} \tag{25}$$

接下来求解最优的变换 D 。由于我们需要将 D 应用到所有的  $x_i$  上,所以我们需要最优化:

$$\mathbf{D}^{\star} = \arg\min_{\mathbf{D}} \sqrt{\sum_{i,j} (\mathbf{x}_{j}^{(i)} - r(\mathbf{x}^{(i)})_{j})^{2}}$$

$$s.t. \ \mathbf{D}^{\top} \mathbf{D} = \mathbf{I}_{l}$$
(26)

为了方便,我们考虑 l=1 的情况,此时问题简化为:

$$\mathbf{d}^{\star} = \arg\min_{\mathbf{d}} \sum_{i} (\mathbf{x}_{j}^{(i)} - \mathbf{d}\mathbf{d}^{\top}\mathbf{x}^{(i)})^{2}$$

$$s.t. \ \mathbf{d}^{\top}\mathbf{d} = 1$$

$$(27)$$

考虑 F 范数,并进一步的推导:

$$\mathbf{d}^{\star} = \arg\max_{\mathbf{d}} \operatorname{Tr}(\mathbf{d}^{\top} \mathbf{X}^{\top} \mathbf{X} \mathbf{d})$$

$$s.t. \ \mathbf{d}^{\top} \mathbf{d} = 1$$
(28)

优化问题可以用特征分解来求解。但实际计算时,我们会采用如下方式计算:

PCA 将输入 x 投影表示成 c。 c 是比原始输入维数更低的表示,同时使得元素之间线性无关。假设有一个  $m \times n$  的矩阵 X,数据的均值为零,即  $\mathbb{E}[x] = 0$ ,X 对应的无偏样本协方差矩阵: $\mathrm{Var}[x] = \frac{1}{m-1}X^{\top}X$ 。

PCA 是**通过线性变换找到一个 Var** [c] 是对角矩阵的表示  $c = V^{\top}x$ ,矩阵 X 的主成分可以通过奇异值分解 (SVD) 得到,也就是说主成分是 X 的右奇异向量。假设 V 是  $X = U\Sigma V^{\top}$  奇异值分解的右奇异向量,我们得到原来的特征向量方程:

$$\boldsymbol{X}^{\top}\boldsymbol{X} = (\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\top})^{\top}\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\top} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\top}\boldsymbol{U}^{\top}\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\top} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{2}\boldsymbol{V}^{\top}$$
(29)

因为根据奇异值的定义  $U^{\top}U=I$  。因此 X 的方差可以表示为:  $\mathrm{Var}\left[x\right]=\frac{1}{m-1}X^{\top}X=\frac{1}{m-1}V\Sigma^{2}V^{\top}$ 。

所以 c 的协方差满足:  $\operatorname{Var}[c] = \frac{1}{m-1} C^{\top} C = \frac{1}{m-1} V^{\top} X^{\top} X V = \frac{1}{m-1} V^{\top} V \Sigma^2 V^{\top} V = \frac{1}{m-1} \Sigma^2$ ,因为根据奇异值定义  $V^{\top} V = I$  。c 的协方差是对角的,c 中的元素是彼此无关的。

以 iris 数据为例,展示 PCA 的使用。

```
[12]: import pandas as pd
import numpy as np
from sklearn.datasets import load_iris
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
%matplotlib inline
```

```
[13]: # 载入数据
iris = load_iris()
df = pd.DataFrame(iris.data, columns=iris.feature_names)
df['label'] = iris.target
df.columns = ['sepal length', 'sepal width', 'petal length', 'petal width', 'label']
```

[13]: 2 50 1 50

50

Name: label, dtype: int64

df.label.value\_counts()

# [14]: # 查看数据

0

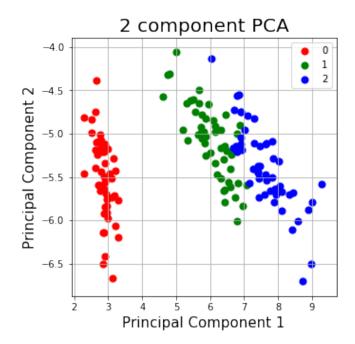
df.tail()

[14]: sepal length sepal width petal length petal width label 6.7 5.2 145 3.0 6.3 5.0 146 2.5 1.9 2 147 6.5 3.0 5.2 2.0 2 6.2 5.4 2.3 148 3.4 2 5.9 5.1 149 3.0 1.8 2

#### [15]: # 查看数据

X = df.iloc[:, 0:4]
y = df.iloc[:, 4]
print("查看第一个数据: \n", X.iloc[0, 0:4])
print("查看第一个标签: \n", y.iloc[0])

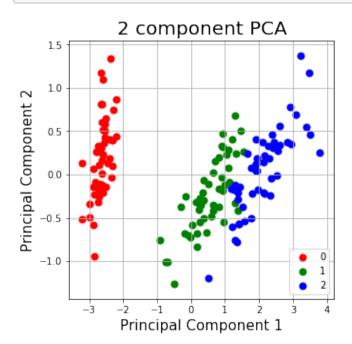
```
查看第一个数据:
      sepal length
                     5.1
     sepal width
                     3.5
     petal length
                     1.4
     petal width
                     0.2
     Name: 0, dtype: float64
     查看第一个标签:
      0
[16]: class PCA():
          def __init__(self):
              pass
          def fit(self, X, n_components):
              n_samples = np.shape(X)[0]
              covariance_matrix = (1 / (n_samples-1)) * (X - X.mean(axis=0)).T.dot(X - X.mean(axis=0))
              # 对协方差矩阵进行特征值分解
              eigenvalues, eigenvectors = np.linalg.eig(covariance_matrix)
              # 对特征值(特征向量)从大到小排序
              idx = eigenvalues.argsort()[::-1]
              eigenvalues = eigenvalues[idx][:n_components]
              eigenvectors = np.atleast_1d(eigenvectors[:, idx])[:, :n_components]
              # 得到低维表示
              X_transformed = X.dot(eigenvectors)
              return X_transformed
[17]: model = PCA()
      Y = model.fit(X, 2)
[18]: | principalDf = pd.DataFrame(np.array(Y),
                                 columns=['principal component 1', 'principal component 2'])
      Df = pd.concat([principalDf, y], axis = 1)
      fig = plt.figure(figsize = (5,5))
      ax = fig.add_subplot(1,1,1)
      ax.set_xlabel('Principal Component 1', fontsize = 15)
      ax.set_ylabel('Principal Component 2', fontsize = 15)
      ax.set_title('2 component PCA', fontsize = 20)
      targets = [0, 1, 2]
      # ['Iris-setosa', 'Iris-versicolor', 'Iris-virginica']
      colors = ['r', 'g', 'b']
      for target, color in zip(targets,colors):
          indicesToKeep = Df['label'] == target
          ax.scatter(Df.loc[indicesToKeep, 'principal component 1']
                     , Df.loc[indicesToKeep, 'principal component 2']
                     , c = color
                     , s = 50)
      ax.legend(targets)
      ax.grid()
```



使用 sklearn 包实现 PCA

```
[19]: from sklearn.decomposition import PCA as sklearnPCA
sklearn_pca = sklearnPCA(n_components=2)
Y = sklearn_pca.fit_transform(X)
```

```
[20]: principalDf = pd.DataFrame(data = np.array(Y), columns = ['principal component 1', 'principal component 2'])
      Df = pd.concat([principalDf, y], axis = 1)
      fig = plt.figure(figsize = (5,5))
      ax = fig.add_subplot(1,1,1)
      ax.set_xlabel('Principal Component 1', fontsize = 15)
      ax.set_ylabel('Principal Component 2', fontsize = 15)
      ax.set_title('2 component PCA', fontsize = 20)
      targets = [0, 1, 2]
      # ['Iris-setosa', 'Iris-versicolor', 'Iris-virginica']
      colors = ['r', 'g', 'b']
      for target, color in zip(targets, colors):
          indicesToKeep = Df['label'] == target
          ax.scatter(Df.loc[indicesToKeep, 'principal component 1']
                     , Df.loc[indicesToKeep, 'principal component 2']
                     , c = color
                     , s = 50)
      ax.legend(targets)
      ax.grid()
```



```
[21]: import numpy, pandas, matplotlib, sklearn
print("numpy:", numpy.__version__)
print("pandas:", pandas.__version__)
```

```
print("matplotlib:", matplotlib.__version__)
print("sklearn:", sklearn.__version__)
```

numpy: 1.14.5
pandas: 0.25.1
matplotlib: 3.1.1
sklearn: 0.21.3