【全面理解多维矩阵运算】多维（三维四维）矩阵向量运算-超强可视化

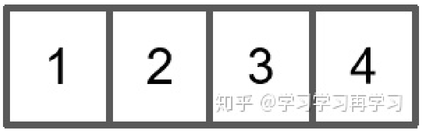
学习学习...
公众号：卓师叔
关注他

纯自己手打，自己画图，希望对大家有帮助～

高维矩阵或者向量的运算，是一个困扰着我很久的问题；在NLP里面经常就会碰到三维，四维的向量运算，矩阵相乘时相当头痛，比如著名的Attention中Q、K、V相乘，实在想不出来四维的到底长什么样，又是怎么相乘的。于是特地写下此文章，记录下个人的学习路程，也希望帮到大家。

1、高维矩阵可视化

一维：首先一维的矩阵非常简单，比如[1,2,3,4]，可以用下图表示



二维：接着来看二维，可用以下代码生成一个二维矩阵，采用keras框架

```
import keras.backend as K
import numpy as np

a = K.constant(np.arange(1, 7), shape=[2,3])
print(K.eval(a))
```

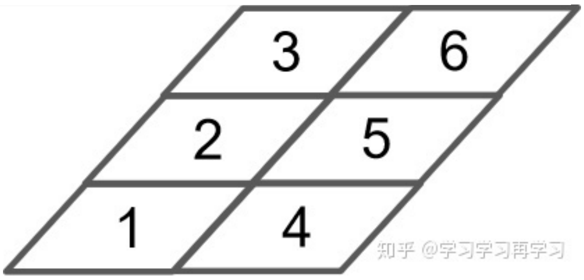
输出为：

```
[[1. 2. 3.]
 [4. 5. 6.]]
```

看维度的小技巧：想知道一个矩阵的维度是几维的，只需要看开头有几个“[”，有1个即为1维，上面的两个就是两维，后面举到的三维和四维的例子，分别是有三个“[”、四个“[”的。

上面这两维可视化长这样：

为了方便后续解释三维和四维，我们把它旋转一个小角度，如下



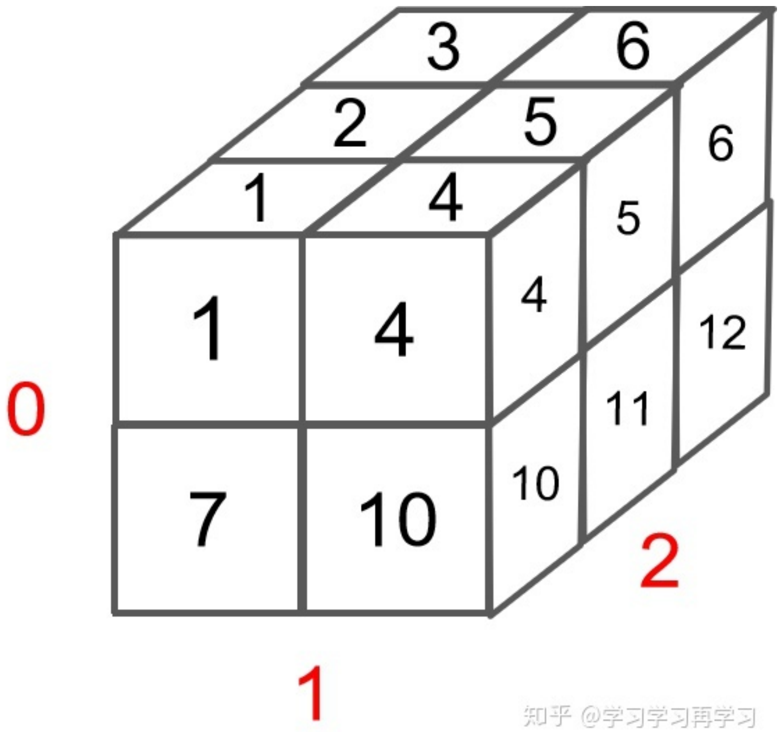
三维：同样可用以下代码生成一个三维矩阵

```
a = K.constant(np.arange(1, 13), shape=[2,2,3])
print(K.eval(a))
```

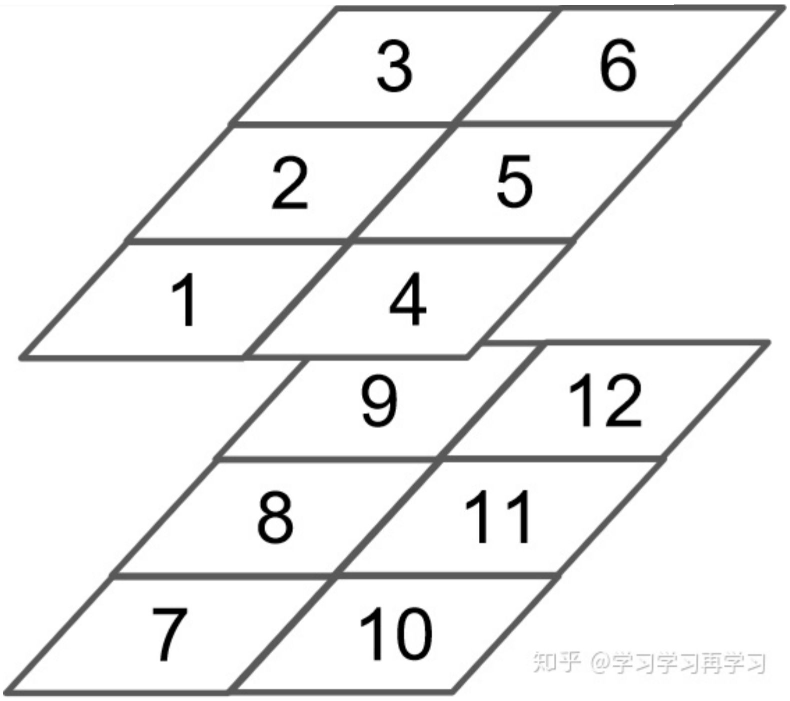
输出为：

```
[[[ 1.  2.  3.]
  [ 4.  5.  6.]]
 [[ 7.  8.  9.]
  [10. 11. 12.]]]
```

因为输出的结果有三个“[”，所以是三维的矩阵。这是一个shape=[2,2,3]的三维矩阵，可视化如下



分片看一下！



认真看数据的分布：三维的其实就类似于上面的二维堆起来后的样子，[[1. 2. 3.] [4. 5. 6.]]在上半部分，[[7. 8. 9.] [10. 11. 12.]]在下半部分，两个堆叠起来后就是最终三维的样子。

结论：shape=[2,2,3]的三维矩阵，可以视为2个shape=[2,3]的二维矩阵堆叠在一起！！最后两维才是有数据的矩阵，前面的维度只是矩阵的排列而已！

注意上图中**红色的0,1,2**，表示的是输出的三个维度，在可视化中的位置。

总结怎么画三维：

1. 先根据shape画出一个三维，shape=[2,2,3]分别对应着可视化中**红色的0,1,2**中小格子的个数
2. 填充两维，在可视化中分别是1,2这两个维度上，把数据填充上，也就是上半部分的[[1. 2. 3.] [4. 5. 6.]]
3. 填充剩余部分的[[7. 8. 9.] [10. 11. 12.]]，并堆叠在一起形成三维。

所以以后一看到三维的，就马上想起这张图，后续很有用。

四维：同样可用以下代码生成一个四维矩阵

```
a = K.constant(np.arange(1, 25), shape=[2,2,2,3])
print(K.eval(a))
```

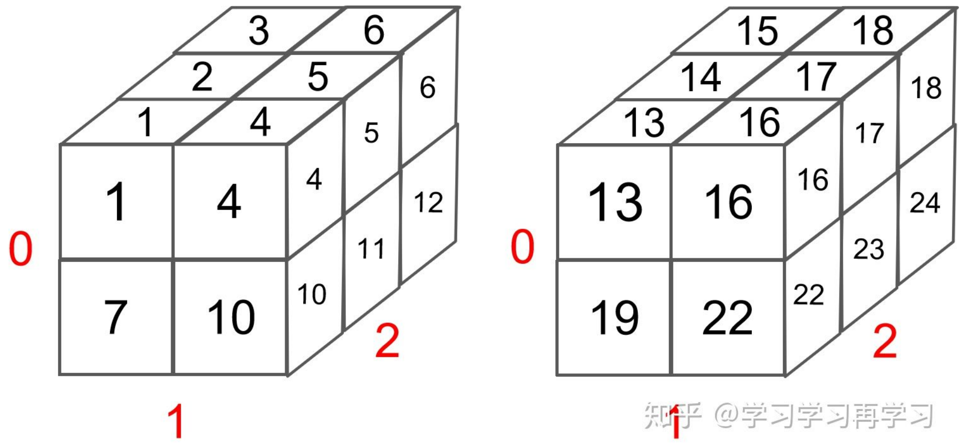
输出为：

```
[[[[ 1.  2.  3.]
   [ 4.  5.  6.]]

  [[ 7.  8.  9.]
   [10. 11. 12.]]]


 [[[13. 14. 15.]
   [16. 17. 18.]]

  [[19. 20. 21.]
   [22. 23. 24.]]]]
```

在我们理解了三维后，就可以很容易的四维

结论：shape=[2,2,2,3]的四维矩阵，可以视为2个shape=[2,2,3]的三维矩阵堆叠在一起！！然后三维的最后是用二维的堆叠组成的！！第一个2表示的是batchsize！！最后两维才是有数据的矩阵，前面的维度只是矩阵的排列而已！

长这样，就是2个三维的



是不是很容易理解！

2、高维矩阵运算

从上面可以得出**结论：所有大于二维的，最终都是以二维为基础堆叠在一起的！！**

所以在矩阵运算的时候，其实最后都可以转成我们常见的二维矩阵运算，遵循的原则是：在多维矩阵相乘中，需最后两维满足shape匹配原则，最后两维才是有数据的矩阵，前面的维度只是矩阵的排列而已！

举个例子：比如两个三维的矩阵相乘，分别为shape=[2,2,3]和shape=[2,3,2]

```
a =
[[[ 1.  2.  3.]
  [ 4.  5.  6.]]
 [[ 7.  8.  9.]
  [10. 11. 12.]]]

b =
[[[ 1.  2.]
  [ 3.  4.]
  [ 5.  6.]]

 [[ 7.  8.]
  [ 9. 10.]
  [11. 12.]]]
```

上面说了，a可以表示成2个shape=[2,3]的矩阵，b可以表示成2个shape=[3,2]的矩阵，前面的额表示的是矩阵排列情况。

计算的时候把a的第一个shape=[2,3]的矩阵和b的第一个shape=[3,2]的矩阵相乘，得到的shape=[2,2]，即

同理，再把a，b个字的第二个shape=[2,3]的矩阵相乘，得到的shape=[2,2]。

$$\begin{matrix}[[7. & 8. & 9.] \\ [10. & 11. & 12.]]\end{matrix} * \begin{matrix}[[7. & 8.] \\ [9. & 10.] \\ [11. & 12.]]\end{matrix}$$

最终把结果堆叠在一起，就是2个shape=[2,2]的矩阵堆叠在一起，结果为：

```
[[[ 22.   28.]
  [ 49.   64.]]

 [[220. 244.]
  [301. 334.]]]
```

也就是shape=[2,2,3]和shape=[2,3,2]矩阵相乘，最后答案的shape为：**把第一维表示矩阵排情况的2，直接保留作为结果的第一维，再把后面两维的通过矩阵运算，得到shape=[2,2]的矩阵，合起来结果shape=[2,2,2]。**

四维的同理！拆成多个三维矩阵来运算即可！！

需要注意的是，四维中，**前两维是矩阵排列，相乘的话保留前的最大值。**

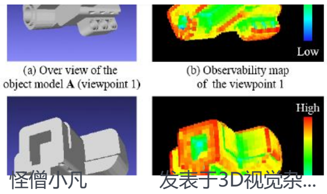
比如a：shape=[2,1,4,5]，b：shape=[1,1,5,4]相乘，输出的结果中，前两维保留的是[2,1]，最终结果shape=[2,1,4,4]

纯手打，觉得好的欢迎点赞收藏！

作者：卓师叔，爱书爱金融的NLPer

微信公众号：卓师叔

发布于 2020-12-21



怪僧小凡 发表于3D视觉系...

意向量，可以通过标准正交基来表示。通俗来讲，就是用坐标系来表示。不过表示这个向量的不是x轴和y轴坐标，而是二维的基向量。我们

太阳与风

矩阵相乘
的
几何意义

稻草人

篇：矩阵 …的
变换T的处 …
具体的线性变换的
向量的变化过程，

李旻 发

4 条评论

切换为时间排序

写下你的评论...

陈佳锋 05-13

正好看不懂torch.bmm()，666

2

硅谷谷主 07-08

官方解释在这：Broadcasting semantics

赞

lyh 06-03

通俗易懂

赞

「已注销」 04-13

大赞，666

赞

赞同 38 ▼ 4 条评论 分享 喜欢 收藏 申请转载 ···