机器学习（L02）：线性代数复习

授课教师：王贝伦 / 助教：张嘉琦，周嘉莹，黄旭

1 定义

- 标量
  标量是一个数字，无方向。

- 向量
  一行或者一列数字，用加粗的小写字母表示。默认为列向量。
  实空间 $\mathbb{R}^n$ 中的向量是 n 个实数的有序集合

- 矩阵
  $m \times n$ 的矩阵有 m 行 n 列，每个元素都为一个数
  矩阵通常表示为：

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix}$$

  方阵是行数与列数相等的矩阵。

- 特殊矩阵
  对角矩阵

$$\begin{bmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{bmatrix}$$

  上三角阵

$$\begin{bmatrix} a & b & c \\ 0 & d & e \\ 0 & 0 & f \end{bmatrix}$$

  下三角阵

$$\begin{bmatrix} a & 0 & 0 \\ b & c & 0 \\ d & e & f \end{bmatrix}$$

  单位矩阵

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

  对称矩阵

$$\begin{bmatrix} a & b & c \\ b & d & e \\ c & e & f \end{bmatrix}$$

- 矩阵的行表示与列表示
  $\mathbf{A}$ 的第 j 列表示为 a_j 或 $A_{:,j}$：

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} | & | & & | \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ | & | & & | \end{bmatrix}$$

  $\mathbf{A}$ 的第 i 行表示为 a_i^T 或 $A_{i,:}$：

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} — & a_1^T & — \\ — & a_2^T & — \\ & \vdots & \\ — & a_n^T & — \end{bmatrix}$$

编程实现

本讲义主要介绍使用 Python 和 numpy 库来实现对矩阵的操作。首先是如何定义一个矩阵，以及如何直接定义特殊的矩阵。

```python
import numpy as np
# 定义一个向量
# np.array()返回一个ndarray类型
a = np.array([1, 2, 3])
print(a)
# Output:
# [1 2 3]

# 定义一个普通矩阵
A = np.array([
  [1, 2, 3],
  [4, 5, 6],
  [7, 8, 9]
])
print(A)
# Output:
# [[1 2 3]
#  [4 5 6]
#  [7 8 9]]

# 定义一个单位矩阵
I = np.identity(2, dtype=int)
print(I)
# Output:
# [[1 0]
#  [0 1]]

# 定义一个对角矩阵
D = np.diag([1, 2, 3])
print(D)
# Output:
# [[1 0 0]
#  [0 2 0]
#  [0 0 3]]

# 定义一个全为0的矩阵
Z = np.zeros((2, 2))
print(Z)
# Output:
# [[0. 0.]
#  [0. 0.]]

# 定义一个全为1的矩阵
O = np.ones((2, 2))
print(O)
# Output:
# [[1. 1.]
#  [1. 1.]]
```

2 矩阵运算

2.1 转置

将矩阵的行与列翻转
例如：

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} a & c \\ b & d \end{bmatrix}$$

矩阵转置的性质

- $(\mathbf{A}^T)^T = \mathbf{A}$
- $(\mathbf{AB})^T = B^T A^T$
- $(\mathbf{A}+\mathbf{B})^T = A^T + B^T$

编程实现

```python
import numpy as np
A = np.array([
  [1, 2, 3],
  [4, 5, 6],
  [7, 8, 9]
])
B = A.T
print(B)
# Output:
# [[1 4 7]
#  [2 5 8]
#  [3 6 9]]
```

2.2 加减

矩阵必须是相同大小，即相同行数相同列数
矩阵进行逐元素加减运算
例如：

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 7 & 10 \\ 8 & 11 \\ 9 & 12 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 & 12 \\ 11 & 15 \\ 14 & 18 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 7 & 10 \\ 8 & 11 \\ 9 & 12 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -6 & -8 \\ -5 & -7 \\ -4 & -6 \end{bmatrix}$$

编程实现

```python
import numpy as np
A = np.array([
  [1, 2],
  [3, 4],
  [5, 6]
])
B = np.array([
  [7, 10],
  [8, 11],
  [9, 12]
])
# 加法
C = A + B
print(C)
# Output:
# [[ 8 12]
#  [11 15]
#  [14 18]]

# 减法
C = A - B
print(C)
# Output:
# [[-6 -8]
#  [-5 -7]
#  [-4 -6]]
```

2.3 乘法

矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 和矩阵 $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n\times p}$ 的乘积为

$$\mathbf{C} = \mathbf{AB} \in \mathbb{R}^{m\times p}$$

其中

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} b_{kj}$$

例如：

$$\begin{bmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 9 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 5 \\ 3 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 30 & 66 \\ 36 & 81 \\ 42 & 96 \end{bmatrix}$$

矩阵能够相乘的前提条件是矩阵 $\mathbf{A}$ 的列数必须等于矩阵 $\mathbf{B}$ 的行数
矩阵乘法的性质：

- 矩阵乘法不具有交换律，$\mathbf{AB}$ 不一定等于 $\mathbf{BA}$
- 矩阵乘法在满足前提条件下可以连乘
- 矩阵乘法具有结合律，即 $\mathbf{A}(\mathbf{BC}) = (\mathbf{AB})\mathbf{C}$
- $(\mathbf{AB})^T = B^T A^T$
- $\mathbf{AI} = \mathbf{IA} = \mathbf{A}$，$\mathbf{I}$ 为单位矩阵

矩阵乘法的特殊情况

- 标量与矩阵相乘
  乘积为每个元素乘以标量的矩阵。例如：

$$3.5 \times \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3.5 & 7.0 \\ 10.5 & 14.0 \\ 17.5 & 21.0 \end{bmatrix}$$

- 向量点乘（内积）
  两个向量相同位置的元素乘积之和
  假设

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 5 \\ 2 \\ 8 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{a}^T = \begin{bmatrix} 3 & 4 & 6 \end{bmatrix}$$

  它们的内积为

$$\mathbf{a}^T\mathbf{b} = \mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 3 & 4 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 \\ 2 \\ 8 \end{bmatrix} = 71 = \mathbf{b}^T\mathbf{a}$$

- 张量积（外积）
  列向量乘以行向量，结果为包含两个向量中每对元素乘积的矩阵
  假设

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \\ 6 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 5 \\ 2 \\ 8 \end{bmatrix}$$

  则

$$\mathbf{ab}^T = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \\ 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 & 2 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 15 & 6 & 24 \\ 20 & 8 & 32 \\ 30 & 12 & 48 \end{bmatrix}$$

- **矩阵与向量相乘 (1)**
  矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 乘向量 $x \in \mathbb{R}^n$，乘积为 $y = \mathbf{A}x \in \mathbb{R}^m$
  若 $\mathbf{A}$ 用行向量表示，则

$$
y = \mathbf{A}x = \begin{bmatrix} — & a_1^T & — \\ — & a_2^T & — \\ & \vdots & \\ — & a_m^T & — \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} a_1^T x \\ a_2^T x \\ \vdots \\ a_m^T x \end{bmatrix}
$$

- **矩阵与向量相乘 (2)**
  若 $\mathbf{A}$ 用列向量表示，则

$$
y = \mathbf{A}x = \begin{bmatrix} | & | & & | \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ | & | & & | \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}
$$

$$
= \begin{bmatrix} | \\ a_1 \\ | \end{bmatrix} x_1 + \begin{bmatrix} | \\ a_2 \\ | \end{bmatrix} x_2 + \cdots + \begin{bmatrix} | \\ a_n \\ | \end{bmatrix} x_n
$$

  可以看出，y 是矩阵 $\mathbf{A}$ 的列向量的线性组合。

- **矩阵与向量相乘 (3)**
  向量 $x \in \mathbb{R}^m$ 乘矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$，乘积为 $y = \mathbf{A}x \in \mathbb{R}^n$
  若 $\mathbf{A}$ 用列向量表示，则

$$
y^T = x^T\mathbf{A} = x^T \begin{bmatrix} | & | & & | \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ | & | & & | \end{bmatrix}
$$

$$
= \begin{bmatrix} x^T a_1 & x^T a_2 & \cdots & x^T a_n \end{bmatrix}
$$

- **矩阵与向量相乘 (4)**
  若 $\mathbf{A}$ 用行向量表示，则

$$
y^T = x^T\mathbf{A} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} — & a_1^T & — \\ — & a_2^T & — \\ & \vdots & \\ — & a_m^T & — \end{bmatrix}
$$

$$
= x_1 \begin{bmatrix} — & a_1^T & — \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} — & a_2^T & — \end{bmatrix} + \ldots
$$

$$
+ x_m \begin{bmatrix} — & a_m^T & — \end{bmatrix}
$$

编程实现

```python
import numpy as np
# 矩阵乘法
A = np.array([
  [1, 4, 7],
  [2, 5, 8],
  [3, 6, 9]
])
B = np.array([
  [1, 4],
  [2, 5],
  [3, 6]
])
C = A @ B
print(C)
# Output:
# [[30 66]
#  [36 81]
#  [42 96]]

# 标量乘矩阵
C = 2 * B
print(C)
# Output:
# [[ 2  8]
#  [ 4 10]
#  [ 6 12]]

# 向量点乘
a = np.array([3, 4, 6])
b = np.array([5, 2, 8])
c = a @ b
print(c)
# Output:
# 71

# 张量积
# 需要将一维ndarray转化成二维ndarray
c = a.reshape(3, 1) @ b.reshape(1, 3)
print(c)
# Output:
# [[15  6 24]
#  [20  8 32]
#  [30 12 48]]

# 矩阵乘以向量
c = A @ a
print(c)
# Output:
# [61 74 87]
```

2.4 范数

2.4.1 向量范数

向量范数是用来衡量一个向量的“长度”最常用的范数有 L_1 范数，L_2 范数和 L_∞ 范数

- L_1 范数

$$
\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|
$$

- L_2 范数

$$
\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2} = \sqrt{x^T x}
$$

- L_∞ 范数

$$
\|x\|_\infty = \max_i |x_i|
$$

- L_p 范数

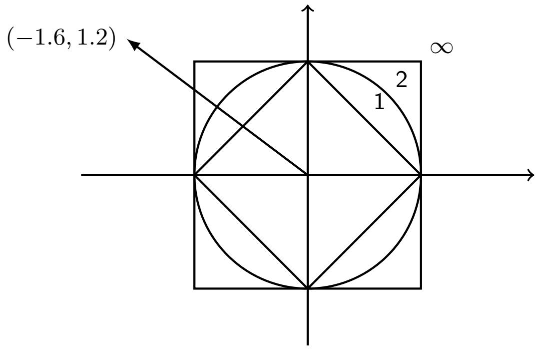
$$
\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}
$$

例如有向量 $x = (-1.6, 1.2)$，则

$$
\|x\|_1 = 2.8 \quad \|x\|_2 = 2.0 \quad \|x\|_\infty = 1.6
$$

通常向量范数满足

$$
\|x\|_1 \geq \|x\|_2 \geq \|x\|_\infty
$$



更广义的范数是指将向量映射到实数的任何函数 $g()$，并满足以下条件：

- 非负性：$\forall\ x \in \mathbb{R}^n$，$g(x) \geq 0$
- 严格正定性：$\forall\ x \in \mathbb{R}^n$，若 $g(x) = 0$，则 $x = 0$
- 齐次性：$\forall\ x \in \mathbb{R}^n, a \in \mathbb{R}$，$g(ax) = |a|g(x)$
- 三角不等式：$\forall\ x, y \in \mathbb{R}^n$，$g(x+y) \leq g(x) + g(y)$

编程实现

np.linalg.norm() 的第一个参数为一维向量时，第二个参数便是 L_p 范数的 p

```python
import numpy as np
a = np.array([-1.6, 1.2])
# L1范数
np.linalg.norm(a, 1)
# Output:
# 2.8

# L2范数（默认）
np.linalg.norm(a)
# Output:
# 2.0

# L-infinity范数
np.linalg.norm(a, np.inf)
# Output:
# 1.6
```

2.4.2 正交与单位正交

定义：向量正交

对于向量 $u, v \in \mathbb{R}^n$，如果 $u \cdot v = 0$，且 $\|u\|_2 \neq 0$，$\|v\|_2 \neq 0$，那么称向量 u 和 v 是正交的。

定义：向量单位正交

对于向量 $u, v \in \mathbb{R}^n$，如果 $u \cdot v = 0$，且 $\|u\|_2 = 1$，$\|v\|_2 = 1$，那么称向量 u 和 v 是单位正交的。

定义：正交矩阵

正交矩阵是一个方阵，其元素为实数，且行向量与列向量皆为正交的单位向量。

正交矩阵具有如下性质：

- $\mathbf{A}\mathbf{A}^T = \mathbf{A}^T\mathbf{A} = \mathbf{I}$，即 $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^T$
- $\|\mathbf{A}v\| = \|v\|$，单位矩阵乘一个向量不改变结果向量的长度，可以理解为旋转操作
- $\mathbf{A}^{-1}$ 和 $\mathbf{A}^T$ 也为正交矩阵
- $|\mathbf{A}| = \pm 1$

2.4.3 矩阵范数

此部分仅介绍一些常见的矩阵范数。

- **p-范数诱导的矩阵范数**

  也称为诱导 p-范数

$$\|\mathbf{A}\|_p = \max_{x \neq 0} \frac{\|\mathbf{A}x\|_p}{\|x\|_p}$$

  当 $p = 1$ 时：

$$\|\mathbf{A}\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^{m} |a_{ij}|$$

  可以看出矩阵的 1-范数就等于每列元素绝对值之和的最大值。

  当 $p = \infty$ 时：

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$$

  可以看出矩阵的 ∞-范数就等于每行元素绝对值之和的最大值。

  当 $p = 2$（欧几里得范数）时，诱导的矩阵范数就是谱范数。矩阵 $\mathbf{A}$ 的谱范数是 $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ 的最大特征值的平方根，特征值会在后面的部分介绍

$$\|\mathbf{A}\|_2 = \sqrt{\lambda_{max}(\mathbf{A}^T\mathbf{A})}$$

- **F-范数**

$$\|\mathbf{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2}$$

  F-范数通常比诱导范数容易计算，因此也较为常用。

编程实现

np.linalg.norm() 的第一个参数为二维矩阵时，第二个参数是诱导 p-范数的 p

```python
import numpy as np
a = np.array([
  [0, 3, 4],
  [1, 6, 4]
])
# 诱导1范数
np.linalg.norm(a, 1)
# Output:
# 9.0

# 诱导infinity范数
np.linalg.norm(a, np.inf)
# Output:
# 11.0

# 诱导2范数
np.linalg.norm(a, 2)
# Output:
# 8.704570789056772

# F-范数（默认）
np.linalg.norm(a)
# Output:
# 8.831760866327848
```

2.5 行列式

矩阵 $\mathbf{A}$ 的行列式记为 $|\mathbf{A}|$ 或 $\det(\mathbf{A})$

定义：行列式的直接定义

一个 n 阶方阵 $\mathbf{A}$ 的行列式为

$$\det(\mathbf{A}) = \sum_{\sigma \in S_n} \operatorname{sgn}(\sigma) \prod_{i=1}^{n} a_{i,\sigma(i)}$$

其中 S_n 是 $(1, 2, \ldots, n)$ 的全排列的集合，$\operatorname{sgn}(\sigma)$ 表示排列 σ 的逆序符号，即逆序为偶数时为 $+1$，逆序为奇数时为 -1。

例如 2 阶方阵 $\mathbf{A}$ 的行列式为

$$|\mathbf{A}| = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

定义：余子式

对一个 n 阶行列式 M，划去 M 的第 i 行和第 j 列元素后形成的 $n-1$ 阶行列式叫作 M 关于元素 m_{ij} 的余子式，记作 M_{ij}。

定义：代数余子式

M 关于元素 m_{ij} 的代数余子式记作 C_{ij}。

$$C_{ij} = (-1)^{(i+j)} \cdot M_{ij}$$

由此我们可以得到行列式的递归定义

定义：行列式的递归定义

一个 n 阶行列式 M，
当 $n = 1$ 时，$M = m_{11}$；
当 $n \geq 2$ 时，$M = \sum_{i=1}^{n} m_{ik}C_{ik}$，$1 \leq k \leq n$

行列式的性质：

- $\det(\mathbf{I}_n) = 1$
- $\det(\mathbf{A}^T) = \det(\mathbf{A})$
- $\det(\mathbf{A}^{-1}) = [\det(\mathbf{A})]^{-1}$
- $\det(\mathbf{AB}) = \det(\mathbf{A}) \times \det(\mathbf{B})$

```python
import numpy as np
# 求行列式
a = np.array([
  [1, 2],
  [3, 4]
])
b = np.linalg.det(a)
print(b)
# Output:
# -2.0000000000000004
```

2.6 逆矩阵

定义：逆矩阵

给定一个 n 阶方阵 $\mathbf{A}$，若存在一 n 阶方阵 $\mathbf{B}$，使得 $\mathbf{AB} = \mathbf{BA} = \mathbf{I}_n$，则称 $\mathbf{A}$ 是可逆的，且 $\mathbf{B}$ 是 $\mathbf{A}$ 的逆矩阵，记作 $\mathbf{A}^{-1}$。

2.6.1 可逆矩阵的性质

- 若方阵 $\mathbf{A}$ 可逆，则称 $\mathbf{A}$ 为非奇异方阵，反之则为奇异方阵
- $\mathbf{A}$ 可通过初等行变换转化为单位矩阵
- $\mathbf{A}$ 可通过初等列变换转化为单位矩阵
- $|\mathbf{A}| \neq 0$
- $\mathbf{A}$ 满秩（秩会在后面部分介绍），即 $\operatorname{rank}(\mathbf{A}) = n$
- $(\mathbf{A}^{-1})^{-1} = \mathbf{A}$
- k 是不为 0 的标量，$(k\mathbf{A})^{-1} = k^{-1}\mathbf{A}^{-1}$
- $(\mathbf{A}^T)^{-1} = (\mathbf{A}^{-1})^T$
- $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 都是 $n \times n$ 的可逆矩阵，则 $(\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$
- $|\mathbf{A}^{-1}| = |\mathbf{A}|^{-1}$

2.6.2 逆矩阵求法

伴随矩阵法

定义：伴随矩阵

一个 n 阶方阵 $\mathbf{A}$ 第 i 行第 j 列的代数余子式为 C_{ij}，则 $\mathbf{A}$ 的伴随矩阵的第 j 行第 i 列的元素值等于 C_{ij}，记作 $\mathbf{A}^*$。

如果矩阵 $\mathbf{A}$ 可逆，则

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{\mathbf{A}^*}{|\mathbf{A}|}$$

通过计算伴随矩阵和行列式，可以求得逆矩阵。例如

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

则

$$\mathbf{A}^* = \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix} \qquad |\mathbf{A}| = ad - bc$$

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{d}{ad-bc} & \frac{-b}{ad-bc} \\ \frac{-c}{ad-bc} & \frac{a}{ad-bc} \end{bmatrix}$$

初等变换法

如果矩阵 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 互逆，则有 $\mathbf{AB} = \mathbf{BA} = \mathbf{I}$，根据可逆矩阵的性质，$\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 均可通过初等行变换或初等列变换变为单位矩阵。由于对矩阵 $\mathbf{A}$ 施以初等行变换（初等列变换）就相当于在 $\mathbf{A}$ 的左边（右边）乘以相应的初等矩阵，所以我们可以同时对 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{I}$ 施以相同的初等行变换（初等列变换）。这样当 $\mathbf{A}$ 被变为 $\mathbf{I}$ 时，$\mathbf{I}$ 就被变为 $\mathbf{A}$ 的逆矩阵 $\mathbf{B}$。

例如

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$$

对 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{I}$ 一起进行初等行变换

$$\begin{bmatrix}1&2\\3&4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}\xrightarrow{r_2-3r_1}\begin{bmatrix}1&2\\0&-2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0\\-3&1\end{bmatrix}\xrightarrow{-\frac{1}{2}r_2}$$

$$\begin{bmatrix}1&2\\0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0\\\frac{3}{2}&-\frac{1}{2}\end{bmatrix}\xrightarrow{r_1-2r_2}\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-2&1\\\frac{3}{2}&-\frac{1}{2}\end{bmatrix}$$

则 $\mathbf{A}^{-1}=\begin{bmatrix}-2&1\\\frac{3}{2}&-\frac{1}{2}\end{bmatrix}$

2.6.3 逆矩阵用于求线性方程组

解线性方程组

$$\begin{cases}a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n=b_1\\a_{21}x_1+a_{22}x_2+\cdots+a_{2n}x_n=b_2\\\cdots\cdots\\a_{n1}x_1+a_{n2}x_2+\cdots+a_{nn}x_n=b_n\end{cases}$$

可以表示成矩阵乘法

$$\mathbf{A}x=b$$

其中

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}a_{11}&\cdots&a_{1n}\\\vdots&\ddots&\vdots\\a_{n1}&\cdots&a_{nn}\end{bmatrix}\quad x=\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\x_n\end{bmatrix}\quad b=\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\\vdots\\b_n\end{bmatrix}$$

若矩阵 $\mathbf{A}$ 可逆，则等式两边同左乘一个 $\mathbf{A}^{-1}$

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}x=\mathbf{A}^{-1}b$$

由此得到

$$x=\mathbf{A}^{-1}b$$

例如求

$$\begin{bmatrix}1&2\\3&4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}5\\6\end{bmatrix}$$

那么解为：

$$\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-2&1\\\frac{3}{2}&-\frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}5\\6\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-4\\\frac{9}{2}\end{bmatrix}$$

2.6.4 伪逆矩阵

对于非方阵的矩阵，存在广义逆矩阵，也成为伪逆。此部分仅介绍单边逆矩阵。对于一个 $m\times n$ 的矩阵 $\mathbf{A}$ 且为满秩矩阵，若 $m>n$ 则用左逆矩阵，若 $m<n$ 则用右逆矩阵。

- 左逆矩阵为 $\mathbf{A}_l^{-1}=(\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T$，也就是 $\mathbf{A}_l^{-1}\mathbf{A}=\mathbf{I}_n$
- 右逆矩阵为 $\mathbf{A}_r^{-1}=\mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-1}$，也就是 $\mathbf{A}\mathbf{A}_r^{-1}=\mathbf{I}_m$

编程实现

```python
import numpy as np

# 求逆矩阵
a = np.array([
  [1, 2],
  [3, 4]
])
b = np.linalg.inv(a)
print(b)
# Output:
# [[-2.   1. ]
#  [ 1.5 -0.5]]

# 求伪逆矩阵
a = np.array([
  [1, 2],
  [3, 4],
  [5, 6]
])
b = np.linalg.pinv(a)
print(b)
# Output:
# [[-1.33333333 -0.33333333  0.66666667]
#  [ 1.08333333  0.33333333 -0.41666667]]
```

3 矩阵的秩

3.1 向量线性相关性

定义：向量线性相关与线性不相关

如果等式

$$\alpha_1x_1+\alpha_2x_2+\cdots+\alpha_nx_n=\mathbf{0}\tag{1}$$

只有在 $\alpha_1=\alpha_2=\cdots=\alpha_n=0$ 时才成立，那么这一组向量 $\{x_1,x_2\cdots,x_n\}$ 之间**线性不相关**。反之，如果 $\exists\, i$，$\alpha_i\neq 0$ 使得等式 (1) 成立，那么这组向量之间**线性相关**。

向量的线性相关性可以通过对公式 (1) 进行行化简来验证。假设我们有两个向量

$$x_1=\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix},\quad x_2=\begin{bmatrix}-3\\2\end{bmatrix}$$

和两个对应的线性变换系数 α_1,α_2。我们解线性方程组

$$\begin{bmatrix}1&-3\\1&2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1\\\alpha_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\end{bmatrix}$$

化简为

$$\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1\\\alpha_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\end{bmatrix}$$

所以，$\alpha_1=\alpha_2=0$。那么我们就验证得到 x_1 与 x_2 线性不相关。

3.2 矩阵的秩

定义：矩阵的秩

矩阵的秩就是矩阵中线性不相关的列（行）向量的个数。

根据选择行向量或列向量的不同，矩阵的秩也分为列秩和行秩两种。以上一节中的两个向量为例，假设 x_1 和 x_2 作为组成一个矩阵的两个列

$$X=\begin{bmatrix}1&-3\\1&2\end{bmatrix}$$

由于矩阵 X 的两个列线性不相关，那么 X 的列秩就为 2。行秩与列秩类似，需要考虑线性不相关的行向量的个数。

一般来说，对于任意大小的一个矩阵，它的行秩与列秩是相等的。我们通常通过行化简来获得列向量的线性不相关性，也就是用列秩来代表矩阵的秩。矩阵 X 的秩表示为 $\text{rank}(X)$。特别地，对于一个 $m \times n$ 大小的矩阵 $X \in \mathbb{R}^{m\times n}$，如果 $\text{rank}(X) = \min(m, n)$，那么我们就说矩阵 X 是满秩的。

一个矩阵的秩还有另外一种定义，即行列式非 0 的最大子方阵的行数。假设我们有一个矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 5 & 2 & 14 \\ 3 & 9 & 6 & 21 \\ 8 & 10 & 7 & 28 \\ 1 & 2 & 9 & 5 \end{bmatrix}$$

因为 $\det(A) = 0$ 而

$$\det\left(\begin{bmatrix} 4 & 5 & 2 \\ 3 & 9 & 6 \\ 8 & 10 & 7 \end{bmatrix}\right) = 63 \neq 0$$

所以 $\text{rank}(A) = 3$。

3.3 矩阵的秩的相关性质

对于矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 和方阵 $B \in \mathbb{R}^{n\times n}$，

- $\text{rank}(A) \le \min(m, n)$。
- $\text{rank}(AB) \le \min(\text{rank}(A), \text{rank}(B))$
- $\text{rank}(B) = n$ 当且仅当 B 不是奇异矩阵，即 B 可逆。
- $\text{rank}(B) = n$ 当且仅当 $\det(B) \neq 0$，即 B 满秩。

3.4 用线性方程组解释矩阵的秩

矩阵的秩表示的是它对应的多元方程组中真正有用的方程个数。我们考虑这样一个有 n 个变量，n 个方程的方程组

$$\begin{cases} \alpha_{11}x_1 + \alpha_{12}x_2 + \cdot + \alpha_{1n}x_n = b_1 \\ \cdots \quad \cdots \quad \cdots \quad \cdots \\ \alpha_{n1}x_1 + \alpha_{n2}x_2 + \cdot + \alpha_{nn}x_n = b_n \end{cases} \tag{2}$$

众所周知，要解出 n 个变量 $x_1, \cdots, x_n$，我们至少需要 n 个方程。然而有时候这 n 个方程并不是都有用。考虑如下这个方程组

$$\begin{cases} x_1 - 1x_2 - 3x_3 - x_4 = 1 \\ x_1 - x_2 + 2x_3 - x_4 = 3 \\ 4x_1 - 4x_2 + 3x_3 - 2x_4 = 10 \\ 2x_1 - 2x_2 - 11x_3 + 4x_4 = 0 \end{cases} \tag{3}$$

这个方程组通过变量替换可以化简为

$$\begin{cases} x_1 - 1x_2 - 3x_3 - x_4 = 1 \\ 5x_3 - 2x_4 = 2 \\ 0 = 0 \\ 0 = 0 \end{cases} \tag{4}$$

因此这个线性方程组中虽然有四个方程，但其中只有两个方程有用。因为我们所知道的有用的方程数少于未知的变量数，这个方程组有无穷多个解。回顾我们之前所说的验证向量线性不相关的过程，其实就是在排除“无用”的方程。具体来说，考虑方程组 (3) 中前两个方程式，并将它们表示成向量

$$v_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ -3 \\ -1 \end{bmatrix} \quad \text{和} \quad v_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix}$$

解 $k_1v_1 + k_2v_2 = \mathbf{0}$ 可得 $k_1 = k_2 = 0$，这说明这两个列向量之间线性不相关。而如果我们考虑前三个或前四个方程式对应的列向量，可以证明 $-v_1 - 3v_2 + v_3 = 0$ 与 $-3v_1 + v_2 + 0v_3 + v_4 = 0$, 这说明前三个列向量或前四个列向量组成的向量组是线性相关的。因此通过验证线性不相关性，我们证明了方程组 (3) 中只有两个方程包含了不同的信息，也就是只有两个方程式有用的。这与我们用变量替换解方程组得到的结果相同。

在之前我们就已经说过，矩阵的秩就是它线性不相关的列向量的个数（在这个例子里是 2）。这说明一个矩阵的秩体现的是它对应的方程组中有用的方程数量。因此矩阵的秩说明了线性方程组的可解性以及解的唯一性。

3.5 编程实现

在 Python 中，**numpy** 库提供了相应的函数：

```python
import numpy as np
A = np.array([
    [4,5,2,14],
    [3,9,6,21],
    [8,10,7,28],
    [1,2,9,5]
])
print('rank(A):', np.linalg.matrix_rank(A))
# Output: rank(A): 3

```

4 特征值以及特征向量

4.1 特征值，特征向量

定义：矩阵特征值以及特征向量

对于一个方阵 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$，存在一个向量 $x \in \mathbb{R}^n$ 以及一个标量 λ，使得

$$Ax = \lambda x \tag{5}$$

其中 x 称为特征向量，λ 称为特征值。

一个矩阵的特征值需要通过解 $\det(A - \lambda \mathbf{I}) = 0$ 来求得。假设我们有一个矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0.7 \end{bmatrix}$$

则

$$\det\left(\begin{bmatrix}0.8-\lambda & 0.3\\ 0.2 & 0.7-\lambda\end{bmatrix}\right)=\lambda^2-\frac{3}{2}\lambda+\frac{1}{2}=(\lambda-1)(\lambda-\frac{1}{2})$$

因此，矩阵 A 有两个特征值 $\lambda_1=1,\ \lambda_2=\frac{1}{2}$。然后通过公式 (5) 可以解得对应的特征向量。

$$(A-\mathbf{I})x_1=\begin{bmatrix}0.8-1 & 0.3\\ 0.2 & 0.7-1\end{bmatrix}x_1=0$$

$$(A-\frac{1}{2}\mathbf{I})x_2=\begin{bmatrix}0.8-0.5 & 0.3\\ 0.2 & 0.7-0.5\end{bmatrix}x_2=0$$

解得 $x_1=[0.6,0.4]^\top$，$x_2=[1,-1]^\top$。

4.2 特征值及特征向量的性质

对于一个方阵 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 和它的特征值 λ 以及对应的特征向量 x，有如下几个性质:

- $A^kx=\lambda^kx$。也就是说 A 的 k 次方（$k>0$）与 A 有相同的特征向量，但是特征值是 A 的特征值的 k 次方。
- 如果 A 的特征值都非 0，则 A^{-1} 的特征值为 $\frac{1}{\lambda}$。
- 如果 $Ax=\lambda x$，那么 $(A+c\mathbf{I})x=(\lambda+c)x$。
- A 可逆当且仅当它的所有特征值都非 0。

4.3 特征值及特征向量的简单解释

对于一个向量 x，乘以矩阵 A 就是对向量 x 在空间中做变换。一般来说，对向量进行空间变换都会使得向量的长度和方向发生改变。但是如 $Ax=\lambda x$ 所表示的，有一些 x 做空间变换之后方向并没有改变，只是长度发生了变化，其中 λ 就是长度变化的系数。A 的特征向量体现的是 A 的变换效果最强的那几个方向。因此我们可以认为这些特征向量代表了变换矩阵 A，所以称它们为 “特征” 向量。一般来说，我们可能会选择特征值较大几个特征向量来进行研究。

4.4 编程实现

numpy 同样提供了求矩阵特征值的函数:

```python
import numpy as np
A = np.array([
    [0.8, 0.3],
    [0.2, 0.7]
])
eigenval=  np.linalg.eigvals(A)
print('Eigenvalues:', eigenval)
# Output: Eigenvalues: [1.  0.5]
```

5 矩阵的迹

5.1 矩阵的迹

定义：矩阵的迹

对于一个方阵 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$，它的迹定义为对角线上所有元素之和，表示为

$$\text{tr}(A)=\sum_{i=1}^{n}A_{ii}\tag{6}$$

比如，对于矩阵

$$A=\begin{bmatrix}0.8 & 0.3\\ 0.2 & 0.7\end{bmatrix}$$

有 $\text{tr}(A)=0.8+0.7=1.5$。除了上述的定义之外，一个方阵的迹还等于这个方阵的特征值之和。即假设方阵 A 有 N 个特征值 $\lambda_1,\cdots,\lambda_N$，则

$$\text{tr}(A)=\sum_{k=1}^{N}\lambda_k\tag{7}$$

对于矩阵 $A=\begin{bmatrix}0.8 & 0.3\\ 0.2 & 0.7\end{bmatrix}$，我们已经证明了它有两个特征值 $\lambda_1=1,\ \lambda_2=0.5$，它的迹为 $\text{tr}(A)=1+0.5=1.5$。

5.2 矩阵的迹的性质

对于方阵 $A,B,C,D\in\mathbb{R}^{n\times n}$，矩阵的迹有如下几个性质:

- $\text{tr}(A+B)=\text{tr}(A)+\text{tr}(B)$。
- $\text{tr}(cA)=c\text{tr}(A)$。
- 一个矩阵和它的转置的迹相等：$\text{tr}(A)=\text{tr}(A^T)$。
- $\text{tr}(AB)=\text{tr}(BA)$，但是 $\text{tr}(AB)\neq\text{tr}(A)\text{tr}(B)$。
- $\text{tr}(A^TB)=\text{tr}(AB^T)=\text{tr}(B^TA)=\text{tr}(BA^T)$。
- 循环性质：$\text{tr}(ABCD)=\text{tr}(BCDA)=\text{tr}(CDAB)=\text{tr}(DABC)$。

5.3 编程实现

利用 numpy 提供的函数计算一个方阵的迹的代码实现如下:

```python
import numpy as np
A = np.array([
    [0.8, 0.3],
    [0.2, 0.7]
])
print('tr(A):', np.trace(A))
# Output: tr(A): 1.5
```

6 矩阵对角化

6.1 可对角矩阵

如果一个矩阵是对角矩阵（即除了对角线上的元素，其他元素都为 0），那么与这个矩阵的相关运算会变得非常简单。因此，在线性代数中，为了后续运算的方便，我们可以先将一个矩阵转化为对角矩阵。然而并不是所有矩阵都可以转化为对角矩阵。我们先定义什么样的矩阵可以转化为对角形式。

定义：可对角矩阵

对于一个方阵 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$，如果存在一个可逆矩阵 P 使得 $P^{-1}AP$ 是对角矩阵，那么就称矩阵 A 是可对角化的。

6.2 矩阵对角化

矩阵的对角化需要用到特征值及特征向量。假设我们有一个 n 阶方阵，并且这个方阵有 n 个不同的特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ 以及对应的特征向量 $x_1, x_2, \cdots, x_n$。那么矩阵 A 对角化时对应的变换矩阵 P 的形式为以特征向量为列组成的矩阵

$$P = [x_1 \mid x_2 \mid \cdots \mid x_n]$$

我们以矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 2 & -4 & 2 \end{bmatrix}$$

为例。矩阵 A 具有三个不同的特征值 $\lambda_1 = 3$，$\lambda_2 = 2$ 和 $\lambda_3 = 1$。相应的特征向量为

$$x_1 = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 2 \end{bmatrix},\quad x_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix},\quad x_3 = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}$$

现在设 P 是以这些特征向量作为列的矩阵，则 P 对角化了 A。通过简单的计算我们可以验证

$$P^{-1}AP = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 2 & -4 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

6.3 矩阵对角化的本质

假设矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 对角化后的结果为 $\tilde{A} = P^{-1}AP$。矩阵 A 是在一组标准正交基 $(1, 0, \cdots, 0)$，$(0, 1, 0, \cdots, 0)$，$\cdots$，$(0, \cdots, 0, 1)$ 上定义的。而经过变换后，$\tilde{A}$ 是在由特征向量组成的基 x_1，x_2，$\cdots$，x_n 上所定义的。矩阵 P 就是基变换矩阵。因此，原矩阵 A 和对角化的矩阵 $\tilde{A}$ 是同一种线性变化在不同基上的描述。在用后一种基描述线性变换时，这个线性变换就只是伸缩变换。当 A 没有 n 个线性无关的特征向量时，这些特征向量就不能作为 $\mathbb{R}^n$ 空间中的一组基。

6.4 编程实现

numpy 同样没有提供对矩阵直接进行对角化的函数，但是利用特征值以及特征向量我们可以对矩阵进行对角化。注意在代码的第 8 行，numpy 计算得到的特征向量并非普通意义上的特征向量，所以利用这些特征向量来对角化得到的是上三角矩阵。因此在第 10 行中对于 $P^{-1}AP$ 计算得到的结果，需要提取对角线上的元素来完成对角化的过程。

```
1  import numpy as np
2
3  A = np.array([
4      [1,2,0],
5      [0,3,0],
6      [2,-4,2]
7  ])
8  eigval, eigvec = np.linalg.eig(A)
9
10 diag_A = np.diag(
11     np.linalg.inv(eigvec) @ np.diag(eigval) @ eigvec
12 )
13 print('对角化后的矩阵为：\n', np.diag(diag_A))
14 # Output: 对角化后的矩阵为：
15 #            [[3. 0. 0.]
16 #             [0. 2. 0.]
17 #             [0. 0. 1.]]
18
```

7 矩阵的正定性

7.1 正定矩阵

定义：正定矩阵

一个矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$，如果对于任何非 0 向量 x，都满足 $x^T Ax > 0$，则称矩阵 A 为正定矩阵。

一个正定矩阵的特征值都为正，因此可以通过计算特征值来判断一个矩阵是否正定。还是以矩阵 $A = \begin{bmatrix} 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0.7 \end{bmatrix}$ 为例，由于它的特征值为 1 和 0.5，则矩阵 A 是一个正定矩阵。

另外还有一种方法，可以通过计算矩阵的各阶顺序主子式的行列式来判断正定性。如果一个矩阵的各阶顺序主子式都大于 0，则矩阵正定。以上述矩阵 A 为例，它的一阶顺序主子式为

$$\det([0.8]) = 0.8 > 0$$

，它的二阶顺序主子式为

$$\det(\begin{bmatrix} 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0.7 \end{bmatrix}) = 0.5 > 0$$

这种正定判别方法也可以说明一个正定矩阵的行列式一定大于 0。

7.2 半正定矩阵

半正定矩阵的定义与正定矩阵类似。

定义：半正定矩阵

一个矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$，如果对于任何非 0 向量 x，都满足 $x^T Ax \geq 0$，则称矩阵 A 为半正定矩阵。

一个半正定矩阵的特征值都非负。

7.3 正定/半正定矩阵性质

对于正定矩阵，有以下性质：

- 如果矩阵 A, B 都为正定矩阵，那么矩阵 $A+B$ 也是正定矩阵。
- 如果 A 是正定矩阵，则存在一个矩阵 C，满足 $A = C^2$。
- 如果 A 是正定矩阵，则矩阵的 k 次幂 A^k 也是正定矩阵。
- 如果 A 是正定矩阵，则存在一个可逆矩阵 C，使得 $B = C^T AC$ 也是正定矩阵。

类似的，对于半正定矩阵，有如下性质：

- 如果矩阵 A, B 都为半正定矩阵，那么矩阵 $A+B$ 也是半正定矩阵。
- 如果 A 是半正定矩阵，则存在一个非负实数 h，使得 $B = hA$ 也为半正定矩阵。

7.4 矩阵正定性的直观理解

正定矩阵可以类比于是实数空间中的正数，而半正定矩阵则可类比为实数空间中的非负数。假设有一个正定矩阵 A，向量经过 A 的空间变化后成为 $Y = AX$。我们可以算出变化后的向量 Y 与原向量之间的夹角的余弦值为 $\cos(\theta) = \frac{X^TY}{||X||_2 \cdot ||Y||_2} = \frac{X^TAX}{||X||_2 \cdot ||AX||_2} > 0$。这说明任意一个向量经过 A 的变换之后与原向量的夹角小于 90 度。

在实数空间中，正数乘以任意一个数会产生"正向"的扩大效应。相对应地，一个正定矩阵会对向量产生"正向"的变换。半正定矩阵与非负数的关系也类似。

7.5 编程实现

numpy 并未直接提供判断矩阵正定性的函数，但是根据相关性质，我们可以通过判断特征值的正负性来判断正定性：

```python
import numpy as np

# 判断矩阵是否为正定矩阵
def isPositiveDefinite(mat):
    return np.all(np.linalg.eigvals(mat) > 0)

# 判断矩阵是否为半正定矩阵
def isPositiveSemidefinite(mat):
    return np.all(np.linalg.eigvals(mat) >= 0)

A = np.array([
    [0.8, 0.3],
    [0.2, 0.7]
])
B = np.array([
    [0, 0],
    [0, 2]
])

print('A是正定矩阵:', isPositiveDefinite(A))
print('A是半正定矩阵:', isPositiveSemidefinite(A))
print('B是正定矩阵:', isPositiveDefinite(B))
print('B是半正定矩阵:', isPositiveSemidefinite(B))
# Output: A是正定矩阵: True
#         A是半正定矩阵: True
#         B是正定矩阵: False
#         B是半正定矩阵: True

```

8 格拉姆矩阵 (Gram matrix)

定义：格拉姆矩阵

对于一组向量 $x_1, x_2, \cdots, x_n$，它们对应的格拉姆矩阵为

$$G(x_1, \cdots, x_n) = \begin{bmatrix} <x_1, x_1> & <x_1, x_2> & \cdots & <x_1, x_n> \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ <x_n, x_1> & <x_n, x_2> & \cdots & <x_n, x_n> \end{bmatrix} \tag{8}$$

其中 $<\cdot,\cdot>$ 是求两个向量的内积。

格拉姆矩阵 G 是半正定的。只有向量组 $x_1, \cdots, x_n$ 之间是线性不相关时，矩阵 G 才是正定的，即 $\det(G) > 0$。因此，我们可以用格拉姆矩阵的行列式来判断向量组的线性不相关性。

9 向量/矩阵求导

9.1 标量关于标量的导数

我们先回顾一下求一个标量函数关于标量的导数。

定义：标量关于标量的导数

假设有函数 $f(x): \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$，则函数 $f(x)$ 关于 x 的导数可以表示为

$$f'(x) = \frac{\partial f(x)}{\partial x} \tag{9}$$

以 $f(x) = x^2$ 为例，我们有 $f'(x) = \frac{\partial f(x)}{\partial x} = 2x$。$f'(x)$ 有许多性质，常用的有如下几个：

- $\forall\ \alpha \in \mathbb{R}$，$\frac{\partial \alpha f(x)}{\partial x} = \alpha \frac{\partial f(x)}{\partial x}$。
- 如果有另一个函数 $g(x): \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$，则 $\frac{\partial f(x) + g(x)}{\partial x} = \frac{\partial f(x)}{\partial x} + \frac{\partial g(x)}{\partial x}$。
- $\frac{\partial x^k}{\partial x} = kx^{k-1}$。
- 如果有另一个函数 $g(x): \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$，则 $\frac{\partial f(x)g(x)}{\partial x} = g(x)\frac{\partial f(x)}{\partial x} + f(x)\frac{\partial g(x)}{\partial x}$。
- $\frac{\partial e^x}{\partial x} = e^x$，$\frac{\partial a^x}{\partial x} = \log(a)e^x$ 和 $\frac{\partial \log x}{\partial x} = \frac{1}{x}$。

9.2 标量关于向量的导数

定义：标量关于向量的导数

假设有向量 $x=[x_1,\cdots,x_n]^\top$，函数 $f(x):\mathbb{R}^n\mapsto\mathbb{R}$，则函数 $f(x)$ 关于 x 的导数表示为

$$\nabla_x f(x)=\frac{\partial f(x)}{\partial x}=\left[\frac{\partial f(x)}{\partial x_1},\frac{\partial f(x)}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial f(x)}{\partial x_n}\right]^\top \tag{10}$$

以 $x=[x_1,x_2]$ 且 $f(x)=x_1^2+x_2^2$ 为例，$\nabla_x f(x)=[2x_1,2x_2]^\top$。

9.3 标量关于矩阵的导数

标量关于矩阵的导数与标量关于向量的导数类似。

定义：标量关于矩阵的导数

假设有矩阵 $X=\begin{bmatrix}x_{11}&\cdots&x_{1n}\\ \vdots&\ddots&\vdots\\ x_{m1}&\cdots&x_{mn}\end{bmatrix}$，函数 $f(X):\mathbb{R}^{m\times n}\mapsto\mathbb{R}$，则函数 $f(X)$ 关于 X 的导数表示为

$$\nabla_X f(X)=\frac{\partial f(X)}{\partial X}=\begin{bmatrix}\partial f(x)/\partial x_{11}&\cdots&\partial f(x)/\partial x_{1n}\\ \vdots&\ddots&\vdots\\ \partial f(x)/\partial x_{m1}&\cdots&\partial f(x)/\partial x_{mn}\end{bmatrix} \tag{11}$$

以 $X=\begin{bmatrix}x_{11}&x_{12}\\ x_{21}&x_{22}\end{bmatrix}$ 且 $f(X)=x_{11}^2+x_{12}^2+x_{21}^2+x_{22}^2$ 为例，则 $\nabla_x f(X)=\begin{bmatrix}2x_{11}&2x_{12}\\ 2x_{21}&2x_{22}\end{bmatrix}$。

9.4 向量关于标量的导数

定义：向量关于标量的导数

假设有标量 x，函数 $f(x):\mathbb{R}\mapsto\mathbb{R}^n$，则函数 $f(x)$ 关于 x 的导数表示为

$$\nabla_x f(x)=\frac{\partial f(x)}{\partial x}=\left[\frac{\partial f(x)_1}{\partial x},\frac{\partial f(x)_n}{\partial x},\cdots,\frac{\partial f(x)_n}{\partial x}\right]^\top \tag{12}$$

以 $f(x)=[x^2,x^3]^\top$ 为例，$\nabla_x f(x)=[\frac{\partial x^2}{\partial x},\frac{\partial x^3}{\partial x}]^\top=[2x,3x^2]^\top$。

9.5 向量关于向量的导数

定义：向量关于向量的导数

假设有向量 $x=[x_1,x_2,\cdots,x_n]^\top$，函数 $f(x):\mathbb{R}^n\mapsto\mathbb{R}^m$，则函数 $f(x)$ 关于 x 的导数表示为

$$\nabla_x f(x)=\frac{\partial f(x)}{\partial x}=\begin{bmatrix}\frac{\partial f(x)_1}{x_1}&\cdots&\frac{\partial f(x)_1}{x_n}\\ \vdots&\ddots&\vdots\\ \frac{\partial f(x)_m}{x_1}&\cdots&\frac{\partial f(x)_m}{x_n}\end{bmatrix} \tag{13}$$

以 $x=[x_1,x_2,x_3]^\top$，$f(x)=[x_1^2,x_2^2,x_3^2]^\top$ 为例，则

$$\nabla_x f(x)=\begin{bmatrix}2x_1&0&0\\ 0&2x_2&0\\ 0&0&2x_3\end{bmatrix} \tag{14}$$

9.6 矩阵关于标量的导数

定义：矩阵关于标量的导数

假设有标量 x，函数 $f(x):\mathbb{R}\mapsto\mathbb{R}^{m\times n}$，则函数 $f(x)$ 关于 x 的导数表示为

$$\nabla_x f(x)=\frac{\partial f(x)}{\partial x}=\begin{bmatrix}\frac{\partial f(x)_{11}}{\partial x}&\cdots&\frac{\partial f(x)_{1n}}{\partial x}\\ \vdots&\ddots&\vdots\\ \frac{\partial f(x)_{m1}}{\partial x}&\cdots&\frac{\partial f(x)_{mn}}{\partial x}\end{bmatrix} \tag{15}$$

以 $f(x)=\begin{bmatrix}x&x^2\\ x^3&x^4\end{bmatrix}$ 为例，则 $\nabla_x f(x)=\begin{bmatrix}1&2x\\ 3x^2&4x^3\end{bmatrix}$。

9.7 编程实现

在编程实现向量/矩阵的求导时，需要先自己手动计算出所需的导数表达形式，然后根据具体的变量值来计算导数值。这里以第9.6节提到的矩阵关于标量的导数为例，用 Python 实现为：

```python
import numpy as np

# (1,1) 位置对应的导数函数: 1
def f_11(x):
    return 1

# (1,2) 位置对应的导数函数: 2x
def f_12(x):
    return 2*x

# (2,1) 位置对应的导数函数: 3x^2
def f_21(x):
    return 3*x**2

# (2,2) 位置对应的导数函数: 4x^3
def f_22(x):
    return 4*x**3
```

```python

# 构建导数函数矩阵
deri_funcs = [[f_11, f_12],[f_21,f_22]]
row_num = 2
col_num = 2

#计算x=2时对应的导数值
x = 2
deri_values = np.array([
    [deri_funcs[i][j](x) for j in range(col_num)]
    for i in range(row_num)
])
print('x=2时, f(x)关于x的导数为: \n', deri_values)

# x=2时, f(x)关于x的导数为:
#       [[ 1  4]
#       [12 32]]

```

引用

[1] Strang, G., Strang, G., Strang, G., & Strang, G. (1993). Introduction to linear algebra (Vol. 3). Wellesley, MA: Wellesley-Cambridge Press.

[2] Oliphant, T. E. (2006). A guide to NumPy (Vol. 1). Trelgol Publishing USA.

版权声明