法律声明

- 本课件包括演示文稿、示例、代码、题库、视频和声音等内容，小象学院和主讲老师拥有完全知识产权的权利；只限于善意学习者在本课程使用，不得在课程范围外向任何第三方散播。任何其他人或机构不得盗版、复制、仿造其中的创意及内容，我们保留一切通过法律手段追究违反者的权利。

- 课程详情请咨询
  - 微信公众号：小象
  - 新浪微博：ChinaHadoop

矩阵和线性代数

小象学院 ChinaHadoop.cn

邹博

主要内容

- 矩阵
  - 线性代数是有用的：以SVD为例
  - 矩阵的乘法/状态转移矩阵
  - 矩阵和向量组
- 特征值和特征向量
  - 对称阵、正交阵、正定阵
  - 数据白化
- 矩阵求导
  - 向量对向量求导
  - 标量对向量求导
  - 标量对矩阵求导

SVD的提法

$$\left(A^T \cdot A\right)v_i = \lambda_i v_i \Rightarrow \begin{cases} \sigma_i = \sqrt{\lambda_i} \\ u_i = \dfrac{1}{\sigma_i} A \cdot v_i \end{cases} \Rightarrow A = U\Sigma V^T$$

- 奇异值分解(Singular Value Decomposition)是一种重要的矩阵分解方法，可以看做对称方阵在任意矩阵上的推广。
  - Singular：突出的、奇特的、非凡的
  - 似乎更应该称之为“优值分解”
- 假设A是一个m×n阶实矩阵，则存在一个分解使得：

$$A_{m\times n} = U_{m\times m}\Sigma_{m\times n}V_{n\times n}^T$$

  - 通常将奇异值由大而小排列。这样，Σ便能由A唯一确定了。
- 与特征值、特征向量的概念相对应：
  - Σ对角线上的元素称为矩阵A的奇异值；
  - U的第i列称为A的关于σ_i的左奇异向量；
  - V的第i列称为A的关于σ_i的右奇异向量。

SVD举例 $A_{m\times n}=U_{m\times m}\Sigma_{m\times n}V^T_{n\times n}$

- 已知4×5阶实矩阵A，求A的SVD分解：

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

$$U=\begin{bmatrix}0&0&1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\\1&0&0&0\end{bmatrix}\quad \Sigma=\begin{bmatrix}4&0&0&0&0\\0&3&0&0&0\\0&0&\sqrt{5}&0&0\\0&0&0&0&0\end{bmatrix}\quad V^T=\begin{bmatrix}0&1&0&0&0\\0&0&1&0&0\\\sqrt{0.2}&0&0&0&\sqrt{0.8}\\0&0&0&1&0\\\sqrt{0.8}&0&0&0&-\sqrt{0.2}\end{bmatrix}$$

- 矩阵U和V都是单位正交方阵：$U^TU=I$， $V^TV=I$

SVD

```python
def restore(sigma, u, v, K): # 奇异值、左特征向量、右特征向量
    print K
    m = len(u)
    n = len(v[0])
    a = np.zeros((m, n))
    for k in range(K+1):
        for i in range(m):
            a[i] += sigma[k] * u[i][k] * v[k]
    b = a.astype('uint8')
    Image.fromarray(b).save("svd_" + str(K) + ".png")
```

奇异值分解-效果

线性代数

- 定义：方阵的行列式
  - 1阶方阵的行列式为该元素本身
  - n阶方阵的行列式等于它的任一行(或列)的各元素与其对应的代数余子式乘积之和。

方阵的行列式

- 1×1的方阵，其行列式等于该元素本身。

$$A=(a_{11}) \qquad |A|=a_{11}$$

- 2×2的方阵，其行列式用主对角线元素乘积减去次对角线元素的乘积。

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

$$|A|=a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}$$

方阵的行列式

- 3×3的方阵：

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

$$A=\left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{array}\right)$$

- 根据“主对角线元素乘积减去次对角线元素的乘积”的原则，得：

$$|A|=a_{11}a_{22}a_{33}+a_{12}a_{23}a_{31}+a_{13}a_{21}a_{32}-a_{11}a_{23}a_{32}-a_{12}a_{21}a_{33}-a_{13}a_{22}a_{31}$$

代数余子式

- 在一个n阶行列式A中,把(i,j)元素a_{ij}所在的第i行和第j列划去后，留下的n-1阶方阵的行列式叫做元素a_{ij}的**余子式**，记作M_{ij}。
- 代数余子式：$A_{ij}=(-1)^{i+j}M_{ij}$

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

$$\forall 1\le j\le n,\ |A|=\sum_{i=1}^{n} a_{ij}\cdot(-1)^{i+j}M_{ij}$$

$$\forall 1\le i\le n,\ |A|=\sum_{j=1}^{n} a_{ij}\cdot(-1)^{i+j}M_{ij}$$

$$|A|=a_{11}a_{22}a_{33}+a_{12}a_{23}a_{31}+a_{13}a_{21}a_{32}-a_{11}a_{23}a_{32}-a_{12}a_{21}a_{33}-a_{13}a_{22}a_{31}$$

伴随矩阵

- 对于n×n方阵的任意元素a_{ij}都有各自的代数余子式 $A_{ij}=(-1)^{i+j}M_{ij}$ ，构造n×n的方阵A*：

$$A^*=\begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} & \cdots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \cdots & A_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{1n} & A_{2n} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

- A*称为A的伴随矩阵。
  - 注意A_{ij}位于A*的第j行第i列

方阵的逆 $A\cdot A^*=|A|\cdot I$

- 由前述结论：$\forall 1\le i\le n,\ |A|=\sum_{j=1}^{n} a_{ij}\cdot(-1)^{i+j}M_{ij}$
- 根据：

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \qquad A^*=\begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} & \cdots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \cdots & A_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{1n} & A_{2n} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

- 计算：

$$A\cdot A^*=\begin{pmatrix} |A| & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & |A| & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & |A| \end{pmatrix}=|A|\cdot I \Rightarrow A^{-1}=\frac{1}{|A|}A^*$$

  - 思考：该等式有什么用？

范德蒙行列式Vandermonde

- 证明范德蒙行列式Vandermonde：

$$D_n = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 & \cdots & x_n \\ x_1^2 & x_2^2 & x_3^2 & \cdots & x_n^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_1^{n-1} & x_2^{n-1} & x_3^{n-1} & \cdots & x_n^{n-1} \end{vmatrix} = \prod_{i,j(n \ge i > j \ge 1)} \left(x_i - x_j\right)$$

  - 提示：数学归纳法
  - 注：参考Lagrange/Newton插值法

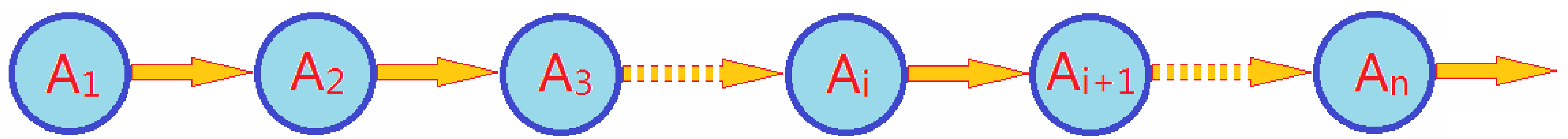
矩阵的乘法

- A为m×s阶的矩阵，B为s×n阶的矩阵，那么，C=A×B是m×n阶的矩阵，其中，

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

矩阵模型

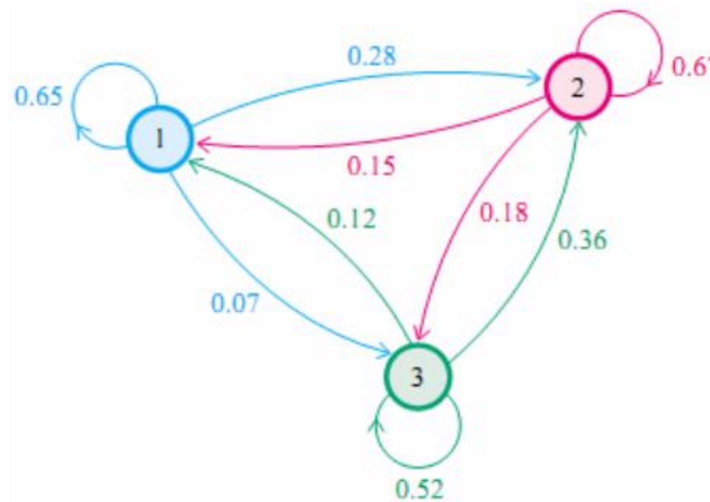
- 考虑某随机过程π，它的状态有n个，用1~n表示。记在当前时刻t时位于i状态，它在t+1时刻位于j状态的概率为P(i,j)=P(j|i)：
  - 即状态转移的概率只依赖于前一个状态。



举例

- 假定按照经济状况将人群分成上、中、下三个阶层，用1、2、3表示。假定当前处于某阶层只和上一代有关，即：考察父代为第i阶层，则子代为第j阶层的概率。假定为如下转移概率矩阵：

$$
\begin{array}{cc}
P & \text{子代} \\
\text{父代} & \begin{bmatrix} 0.65 & 0.28 & 0.07 \\ 0.15 & 0.67 & 0.18 \\ 0.12 & 0.36 & 0.52 \end{bmatrix}
\end{array}
$$



概率转移矩阵

- 第n+1代中处于第j个阶层的概率为：

$$\pi\left(X_{n+1}=j\right)=\sum_{i=1}^{K}\pi\left(X_{n}=i\right)\cdot P\left(X_{n+1}=j \mid X_{n}=i\right)$$

$$\Rightarrow \pi^{(n+1)}=\pi^{(n)}\cdot P$$

- 因此，矩阵P即为(条件)概率转移矩阵。
  - 第i行元素表示：在上一个状态为i时的分布概率，即：每一行元素的和为1。
- 思考：初始概率分布π对最终分布的影响？

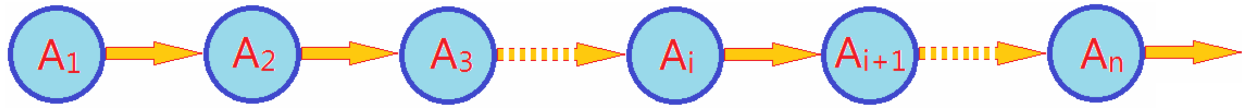
探索：初始概率π= [0.21, 0.68, 0.1]迭代

第n代	第1阶层	第2阶层	第3阶层
0	0.21	0.68	0.11
1	0.252	0.554	0.194
2	0.27	0.512	0.218
3	0.278	0.497	0.225
4	0.282	0.49	0.226
5	0.285	0.489	0.225
6	0.286	0.489	0.225
7	0.286	0.489	0.225
8	0.286	0.488	0.225
9	0.286	0.489	0.225
10	0.286	0.489	0.225

初始概率π= [0.75, 0.15, 0.1]的迭代结果

第n代	第1阶层	第2阶层	第3阶层
0	0.75	0.15	0.1
1	0.522	0.347	0.132
2	0.407	0.426	0.167
3	0.349	0.459	0.192
4	0.318	0.475	0.207
5	0.303	0.482	0.215
6	0.295	0.485	0.22
7	0.291	0.487	0.222
8	0.289	0.488	0.225
9	0.286	0.489	0.225
10	0.286	0.489	0.225

平稳分布



- 初始概率不同，但经过若干次迭代，π最终稳定收敛在某个分布上。
- 从而，这是转移概率矩阵P的性质，而非初始分布的性质。事实上，上述矩阵P的n次幂，每行都是(0.286,0.489,0.225)，n>20
- 如果一个非周期马尔科夫随机过程具有转移概率矩阵P，且它的任意两个状态都是连通的，则 $\lim_{n\to\infty} P_{ij}^n$ 存在，记做 $\lim_{n\to\infty} P_{ij}^n = \pi(j)$。

平稳分布

- 事实上，下面两种写法等价：

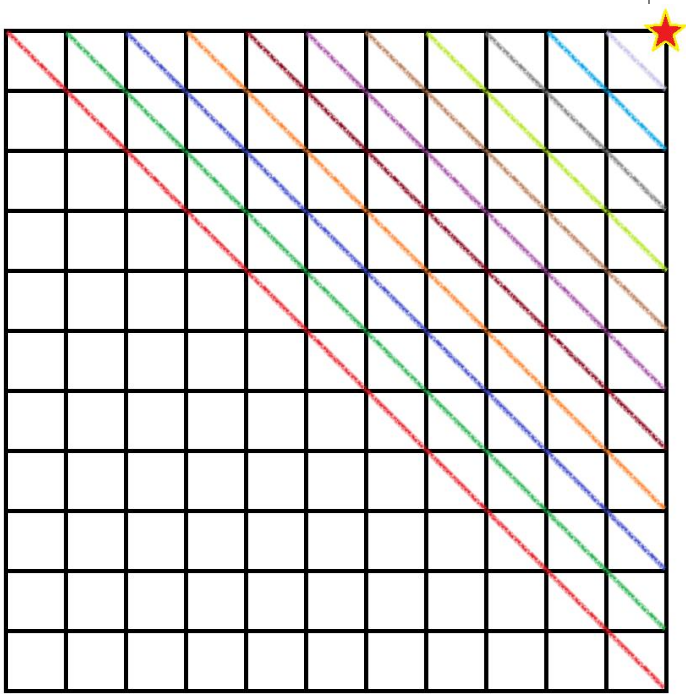
$$\lim_{n\to\infty} P_{ij}^{n} = \pi(j) \qquad \lim_{n\to\infty} P^{n} = \begin{bmatrix} \pi(1) & \pi(2) & \dots & \pi(n) \\ \pi(1) & \pi(2) & \dots & \pi(n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \pi(1) & \pi(2) & \cdots & \pi(n) \end{bmatrix}$$

- 同时，若某概率分布$\pi P=\pi$，说明
  - 该多项分布π是状态转移矩阵P的平稳分布；
  - 线性方程$xP=x$的非负解为π，而P^n唯一，因此π是线性方程$xP=x$的唯一非负解。
  - 该问题将在马尔科夫模型中继续探讨。

思考

- 根据定义来计算 C=A×B，需要m*n*s次乘法。
  - 即：若A、B都是n阶方阵，C的计算时间复杂度为$O(n^3)$
  - 问：可否设计更快的算法？
- 三个矩阵A、B、C的阶分别是$a_0 \times a_1$, $a_1 \times a_2$, $a_2 \times a_3$，从而(A×B)×C和A×(B×C)的乘法次数是$a_0a_1a_2+a_0a_2a_3$、$a_1a_2a_3+a_0a_1a_3$，二者一般情况是不相等的。
  - 问：给定n个矩阵的连乘积：$A_1 \times A_2 \times A_3 \ldots\ldots \times A_n$，如何添加括号来改变计算次序，使得乘法的计算量最小？

Code

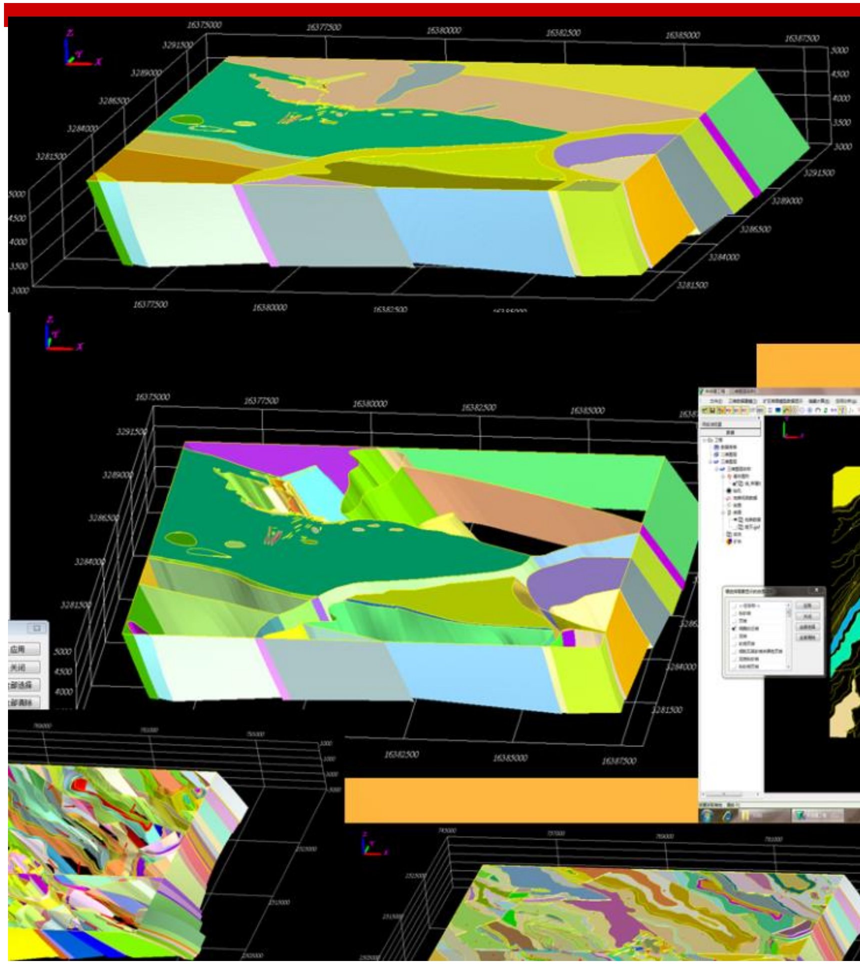


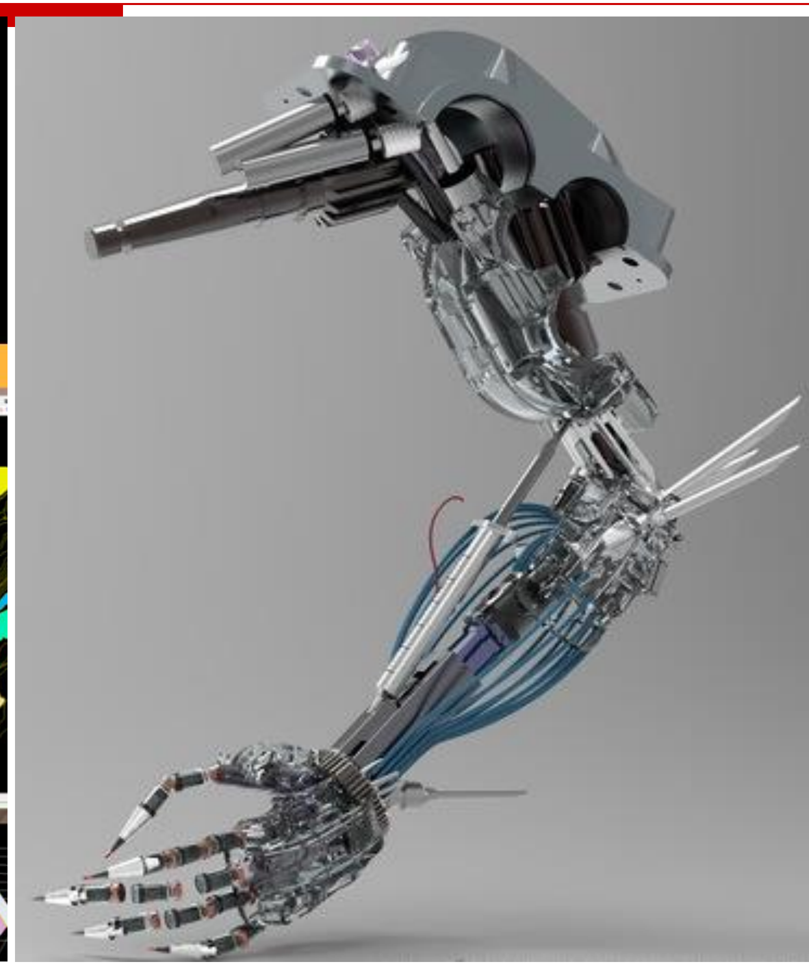
```
//p[0...n]存储了n+1个数，其中，(p[i-1],p[i])是矩阵i的阶；
//s[i][j]记录A[i...j]从什么位置断开；m[i][j]记录数乘最小值
void MatrixMultiply(int* p, int n, int** m, int** s)
{
    int r,i,j,k,t;
    for(i = 1; i <= n; i++)
        m[i][i] = 0;

    //r个连续矩阵的连乘：上面的初始化，相当于r=1
    for(r = 2; r <= n; r++)
    {
        for(i = 1; i <= n-r+1; i++)
        {
            j=i+r-1;
            m[i][j] = m[i+1][j]+ p[i-1]*p[i]*p[j];
            s[i][j] = i;
            for(k = i+1; k < j; k++)
            {
                t = m[i][k] + m[k+1][j] + p[i-1]*p[k]*p[j];
                if(t < m[i][j])
                {
                    m[i][j] = t;
                    s[i][j] = k;
                }
            }
        }
    }
}
```

矩阵和向量的乘法

- A为m×n的矩阵， x为n×1的列向量， 则Ax为m×1的列向量， 记 $\vec{y} = A \cdot \vec{x}$
- 由于n维列向量和n维空间的点一一对应， 上式实际给出了从n维空间的点到m为空间点的线性变换。
  - 旋转、平移(齐次坐标下)
- 特殊的， 若m=n， 且Ax完成了n维空间内的线性变换。

矩阵和向量的乘法应用





矩阵的秩

- 在m×n矩阵A中，任取k行k列，不改变这k^2个元素在A中的次序，得到k阶方阵，称为矩阵A的k阶子式。
  - 显然，m×n矩阵A的k阶子式有$C_m^k C_n^k$个。
- 设在矩阵A中有一个不等于0的r阶子式D，且所有r+1阶子式(如果存在的话)全等于0，那么，D称为矩阵A的最高阶非零子式，r称为矩阵A的秩，记做R(A)=r。
  - n×n的可逆矩阵，秩为n
  - 可逆矩阵又称满秩矩阵
  - 矩阵的秩等于它行(列)向量组的秩

秩与线性方程组的解的关系

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \cdots\cdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases} \Rightarrow A\vec{x} = \vec{b}$$

- 对于n元线性方程组Ax=b，
  - 无解的充要条件是R(A)<R(A,b)
  - 有唯一解的充要条件是R(A)=R(A,b)=n
  - 有无限多解的充要条件是R(A)=R(A,b)<n

推论

- Ax=0有非零解的充要条件是R(A)<n
- Ax=b有解的充要条件是R(A)=R(A,b)

向量组等价

- 向量b能由向量组A:$a_1,a_2,\dots,a_m$线性表示的充要条件是矩阵A=$(a_1,a_2,\dots a_m)$的秩等于矩阵B=$(a_1,a_2,\dots a_m,b)$的秩。
- 设有两个向量组A:$a_1,a_2,\dots,a_m$及B:$b_1,b_2,\dots,b_n$，若B组的向量都能由向量组A线性表示，则称向量组B能由向量组A线性表示。若向量组A与向量组B能相互线性表示，则称两个向量组等价。

系数矩阵

- 将向量组A和B所构成的矩阵依次记做 $A=(a_1,a_2,\ldots,a_m)$和$B=(b_1,b_2,\ldots,b_n)$，B组能由A组线性表示，即对每个向量b_j，存在$k_{1j},k_{2j},\cdots k_{mj}$
- 使得

$$b_j = k_{1j}a_1 + k_{2j}a_2 + \cdots + k_{mj}a_m = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_{1j} \\ k_{2j} \\ \vdots \\ k_{mj} \end{pmatrix}$$

- 从而得到系数矩阵K

$$\begin{pmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_{11} & k_{12} & \cdots & k_{1n} \\ k_{21} & k_{22} & \cdots & k_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k_{m1} & k_{m2} & \cdots & k_{mn} \end{pmatrix}$$

对C=AB的重认识

- 由此可知，若C=A×B，则矩阵C的列向量能由A的列向量线性表示，B即为这一表示的系数矩阵。
  - 对偶的，若C=A×B，则矩阵C的行向量能由B的行向量线性表示，A即为这一表示的系数矩阵
- 向量组B: $b_1,b_2,\ldots,b_n$能由向量组A: $a_1,a_2,\ldots,a_m$线性表示的充要条件是矩阵$A=(a_1,a_2,\ldots,a_m)$的秩等于矩阵$(A,B)=(a_1,a_2,\ldots,a_m,b_1,b_2,\ldots,b_n)$的秩，即：$R(A)=R(A,B)$。

正交阵

- 若n阶矩阵A满足$A^TA=I$，成A为正交矩阵，简称正交阵。
  - A是正交阵的充要条件：A的列(行)向量都是单位向量，且两两正交。
- A是正交阵，x为向量，则A·x称作正交变换。
  - 正交变换不改变向量长度

思考

- 若A、B都是n阶正交阵，那么，A×B是正交阵吗？
- 正交阵和对称阵，能够通过何种操作获得一定意义下的联系？

特征值和特征向量

- A是n阶矩阵，若数λ和n维非0列向量x满足Ax=λx，那么，数λ称为A的特征值，x称为A的对应于特征值λ的特征向量。
  - 根据定义，立刻得到$(A-\lambda I)x = 0$，令关于λ的多项式$|A-\lambda I|$为0，方程$|A-\lambda I|=0$的根为A的特征值；将根λ_0带入方程组$(A-\lambda I)x = 0$，求得到的非零解，即λ_0对应的特征向量。

特征值的性质

- 设n阶矩阵$A=(a_{ij})$的特征值为$\lambda_1,\lambda_2,\ldots\lambda_n$,则
- $\lambda_1+\lambda_2+\ldots+\lambda_n=a_{11}+a_{22}+\ldots+a_{nn}$
- $\lambda_1\lambda_2\ldots\lambda_n=|A|$
  - 矩阵A主行列式的元素和，称作矩阵A的迹。

思考

- 已知λ是方阵A的特征值，
- 则
  - λ^2是A^2的特征值
  - A可逆时，λ^{-1}是A^{-1}的特征值。

  - 提示：定义

不同特征值对应的特征向量

- 设$\lambda_1,\lambda_2,\ldots,\lambda_m$是方阵A的m个特征值，$p_1,p_2,\ldots,p_m$是依次与之对应的特征向量，若$\lambda_1,\lambda_2,\ldots,\lambda_m$各不相等，则$p_1,p_2,\ldots,p_m$线性无关。

- 总结与思考
  - 不同特征值对应的特征向量，线性无关。
  - 若方阵A是对称阵呢？结论是否会加强？
    - 协方差矩阵、二次型矩阵、无向图邻接矩阵等：对称阵

引理

- 实对称阵的特征值是实数
  - 设复数λ为对称阵A的特征值，复向量x为对应的特征向量，即$Ax=\lambda x (x \neq 0)$
  - 用 $\bar{\lambda}$ 表示λ的共轭复数，$\bar{x}$ 表示x的共轭复向量，而A是实矩阵，有 $\bar{A} = A$
  - 下面给出证明过程。

证明

- 首先 $A\overline{x}=\overline{A}\overline{x}=\overline{Ax}=\overline{\lambda x}=\overline{\lambda}\overline{x}$
- 因为 $\overline{x}^T(Ax)=\overline{x}^T\lambda x=\lambda\overline{x}^T x$

$$\overline{x}^T(Ax)=\left(\overline{x}^T A^T\right)x=\left(A\overline{x}\right)^T x=\left(\overline{\lambda}\overline{x}\right)^T x=\overline{\lambda}\overline{x}^T x$$

- 从而

$$\lambda\overline{x}^T x=\overline{\lambda}\overline{x}^T x\Rightarrow\left(\lambda-\overline{\lambda}\right)\overline{x}^T x=0$$

- 而

$$\overline{x}^T x=\sum_{i=1}^{n}\overline{x_i}x_i=\sum_{i=1}^{n}\left|x_i\right|^2\neq 0$$

- 所以

$$\lambda-\overline{\lambda}=0\Rightarrow\lambda=\overline{\lambda}$$

利用上述结论很快得到

- 将实数λ带入方程组$(A-\lambda I)x=0$，该方程组为实系数方程组，因此，实对称阵的特征向量可以取实向量。

实对称阵不同特征值的特征向量正交

- 令实对称矩阵为A，它的两个不同的特征值$\lambda_1\lambda_2$对应的特征向量分别是$\mu_1\mu_2$；其中，$\lambda_1\lambda_2$ $\mu_1\mu_2$都是实数或是实向量。
- 则有：$A\mu_1=\lambda_1\mu_1$，　$A\mu_2=\lambda_2\mu_2$
- $(A\mu_1)^T=(\lambda_1\mu_1)^T$，从而：$\mu_1^TA=\lambda_1\mu_1^T$
- 所以：$\mu_1^TA\mu_2=\lambda_1\mu_1^T\mu_2$
- 同时，$\mu_1^TA\mu_2=\mu_1^T(A\mu_2)=\mu_1^T\lambda_2\mu_2=\lambda_2\mu_1^T\mu_2$
- 所以，$\lambda_1\mu_1^T\mu_2=\lambda_2\mu_1^T\mu_2$
- 故：$(\lambda_1-\lambda_2)\mu_1^T\mu_2=0$
- 而$\lambda_1\neq\lambda_2$，所以$\mu_1^T\mu_2=0$，即：μ_1，μ_2正交。

最终结论

- 设A为n阶对称阵，则必有正交阵P，使得

$$P^{-1}AP = P^{T}AP = \Lambda$$

  - Λ是以A的n个特征值为对角元的对角阵。
  - 该变换称为“合同变换”，A和Λ互为合同矩阵。

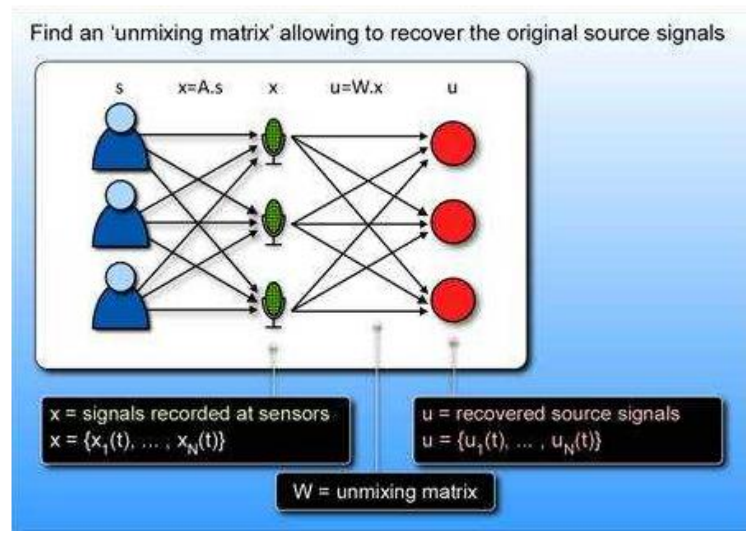
- 在谱聚类、PCA等章节中将会继续讨论

白化/漂白whitening

$$x=\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1,m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{n,m} \end{bmatrix} \stackrel{\Delta}{==} \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_m \end{pmatrix}$$

- 计算观测数据x的n×n的对称阵$x \cdot x^T$的特征值和特征向量，用特征值形成对角阵D，特征向量形成正交阵U，则：$x \cdot x^T = U^T D U$
- 令：$\tilde{x} = U^T D^{-0.5} U \cdot x$
- 则：

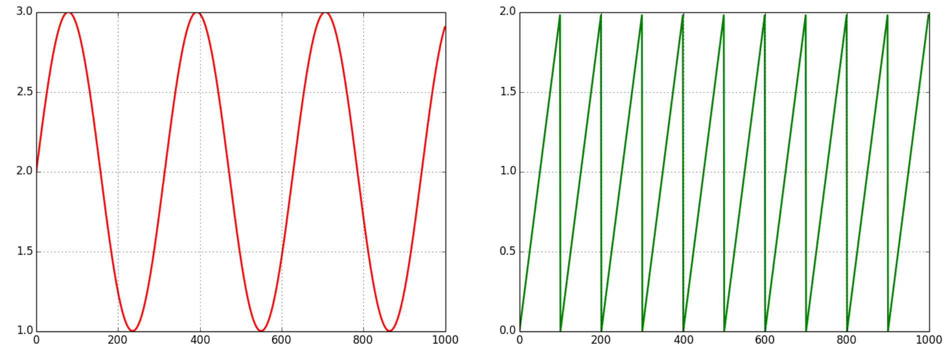
$$\begin{aligned} \tilde{x} \cdot \tilde{x}^T &= \left(U^T D^{-0.5} U \cdot x\right)\left(U^T D^{-0.5} U \cdot x\right)^T \\ &= \left(U^T D^{-0.5} U \cdot x\right)\left(x^T U^T D^{-0.5} U\right) \\ &= U^T D^{-0.5} U \cdot \left(x x^T\right) \cdot U^T D^{-0.5} U \\ &= U^T D^{-0.5} U \cdot U^T D U \cdot U^T D^{-0.5} U = I \end{aligned}$$



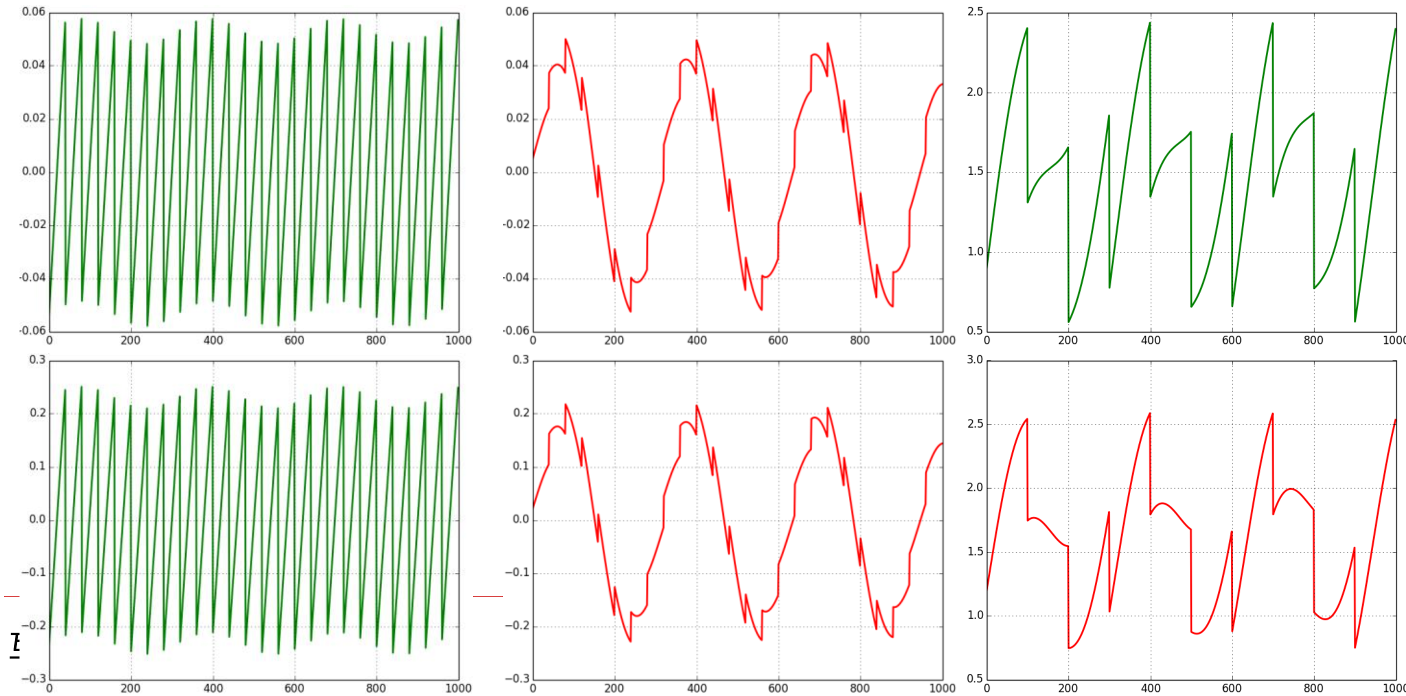
白化Code

```python
def whitening(x):
    m = len(x)
    n = len(x[0])
    # 计算x*x'
    xx = [[0.0]*n for tt in range(n)]
    for i in range(n):
        for j in range(i, n):
            s = 0.0
            for k in range(m):
                s += x[k][i] * x[k][j]
            xx[i][j] = s
            xx[j][i] = s
    # 计算 x*x'的特征值和特征向量
    lamda, egs = np.linalg.eig(xx)
    lamda = [1/math.sqrt(d) for d in lamda]
    # 计算白化矩阵U'D^(-0.5)*U
    t = [[0.0]*n for tt in range(n)]
    for i in range(n):
        for j in range(n):
            t[i][j] = lamda[j] * egs[i][j]
    whiten_matrix = [[0.0]*n for tt in range(n)]
    for i in range(n):
        for j in range(n):
            s = 0.0
            for k in range(n):
                s += t[i][k] * egs[j][k]
            whiten_matrix[i][j] = s
    # 白化x
    wx = [0.0]*n
    for j in range(m):
        for i in range(n):
            s = 0.0
            for k in range(n):
                s += whiten_matrix[i][k] * x[j][k]
            wx[i] = s
        x[j] = wx[:]
```

增加白化后的ICA效果

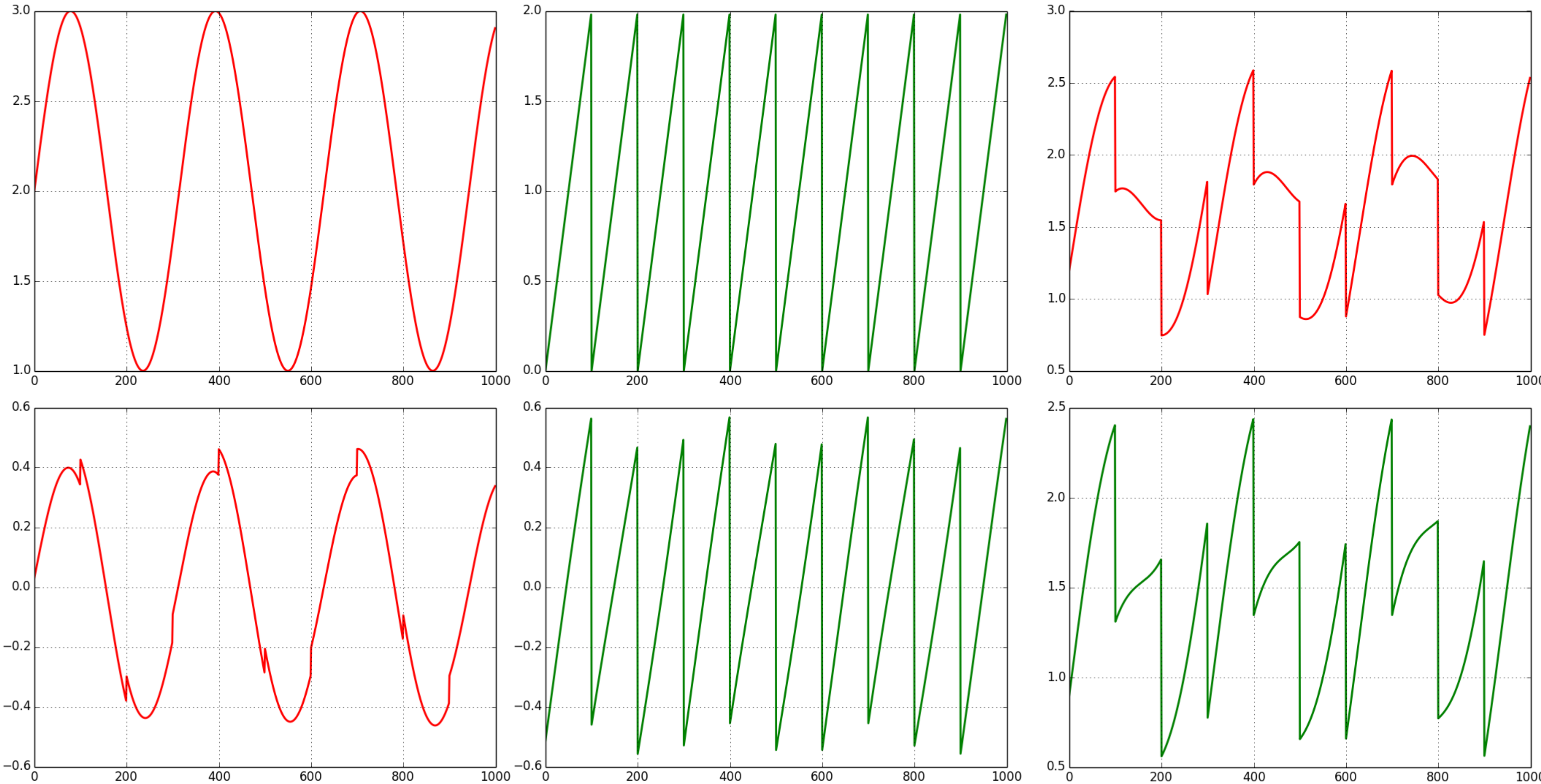


源信号1	源信号2	
白化信号1	白化信号2	混合信号1
独立成分1	独立成分2	混合信号2



去均值ICA分离

源信号1	源信号2	混合信号1
独立成分1	独立成分2	混合信号2



正定阵

- 对于n阶方阵A，若任意n阶向量x，都有$x^TAx>0$，则称A是正定阵。
  - 若条件变成$x^TAx\geq 0$，则A称作半正定阵
  - 类似还有负定阵，半负定阵。

思考

- 给定任意$m \times n$的矩阵A，证明A^TA一定是半正定方阵。
  - 该结论在线性回归中将用到。

正定阵的判定

- 对称阵A为正定阵；
- A的特征值都为正；
- A的顺序主子式大于0；
- 以上三个命题等价。

$$\begin{pmatrix} a_{11} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

例题：

- 给定凸锥的定义如下：

$$C\text{为凸锥} \Leftrightarrow \forall x_1, x_2 \in C, \theta_1, \theta_2 \geq 0, \text{有}\ \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 \in C$$

- 试证明：n阶半正定方阵的集合为凸锥。

利用定义证明

- 若A、B为n阶半正定阵，则

$$\forall \vec{z},\ \vec{z}^T A\vec{z} \ge 0,\ \vec{z}^T B\vec{z} \ge 0$$

- 从而，$\forall \theta_1, \theta_2 \ge 0,$

$$\vec{z}^T \cdot (\theta_1 A + \theta_2 B) \cdot \vec{z} = \vec{z}^T \cdot \theta_1 A \cdot \vec{z} + \vec{z}^T \cdot \theta_2 B \cdot \vec{z}$$

$$= \theta_1 \vec{z}^T A\vec{z} + \theta_2 \vec{z}^T B\vec{z} \ge 0$$

- 即：$\forall \theta_1, \theta_2 \ge 0, \theta_1 A + \theta_2 B$ 为半正定阵。从而，n阶半正定阵的集合为凸锥。

向量的导数

- A为m×n的矩阵，x为n×1的列向量，则Ax为m×1的列向量，记$\vec{y} = A \cdot \vec{x}$
- 思考：$\dfrac{\partial \vec{y}}{\partial \vec{x}} = ?$

推导

- 令

$$A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad \vec{x}=\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad A\cdot\vec{x}=\begin{pmatrix} a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n \\ a_{21}x_1+a_{22}x_2+\cdots+a_{2n}x_n \\ \vdots \\ a_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n \end{pmatrix}$$

- 从而，

$$\frac{\partial\vec{y}}{\partial\vec{x}}=\frac{\partial A\vec{x}}{\partial\vec{x}}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{m1} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{m2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}=A^T$$

结论与直接推广

- 向量偏导公式：

$$\frac{\partial A\vec{x}}{\partial \vec{x}} = A^T$$

$$\frac{\partial A\vec{x}}{\partial \vec{x}^T} = A$$

$$\frac{\partial \left(\vec{x}^T A\right)}{\partial \vec{x}} = A$$

- 在线性回归中将直接使用该公式。

注意

- 关于列向量求导，有文献给出如下方案：
- 记x为n×1的列向量，y为m×1的列向量，则：

$$\frac{\partial \vec{y}}{\partial \vec{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial \vec{x}} \\ \vdots \\ \vdots \\ \frac{\partial y_m}{\partial \vec{x}} \end{pmatrix} \qquad \frac{\partial y_1}{\partial \vec{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \frac{\partial y_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

- 以上公式将会导致向量间求导得到“超越矩阵”——矩阵的每个元素仍然是一个矩阵。在实践层面，不利于公式推导，故本课程未采纳。

标量对向量的导数

- A为n×n的矩阵， x为n×1的列向量，
- 记 $y = \vec{x}^T \cdot A \cdot \vec{x}$
- 同理可得： $$\frac{\partial y}{\partial \vec{x}} = \frac{\partial\left(\vec{x}^T \cdot A \cdot \vec{x}\right)}{\partial \vec{x}} = \left(A^T + A\right) \cdot \vec{x}$$
- 若A为对称阵，则有 $$\frac{\partial\left(\vec{x}^T A \vec{x}\right)}{\partial \vec{x}} = 2A\vec{x}$$

推导 $\frac{\partial y}{\partial \vec{x}} = \frac{\partial\left(\vec{x}^T \cdot A \cdot \vec{x}\right)}{\partial \vec{x}} = \left(A^T + A\right) \cdot \vec{x}$

- 记：

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \qquad \vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

- 有：

$$\vec{x}^T A \cdot \vec{x} = \left(x_1 \quad x_2 \quad \cdots \quad x_n\right) \cdot \left(\sum_{j=1}^{n} a_{1j} x_j \quad \sum_{j=1}^{n} a_{2j} x_j \quad \cdots \quad \sum_{j=1}^{n} a_{n,j} x_j \right)^T$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left(\left(\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \right) x_i \right) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_i x_j$$

- 则：

$$\frac{\partial\left(\vec{x}^T A \cdot \vec{x}\right)}{\partial x_i} = \left(\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \right) + \left(\sum_{j=1}^{n} a_{ji} x_j \right) = \sum_{j=1}^{n} \left(a_{ij} + a_{ji}\right) x_j$$

标量对方阵的导数

- A为n×n的矩阵，|A|为A的行列式，计算 $\frac{\partial|A|}{\partial A}$
- 解：根据等式 $\forall 1\le i\le n,\ |A|=\sum_{j=1}^{n}a_{ij}\cdot(-1)^{i+j}M_{ij}$
- 有 $\frac{\partial|A|}{\partial a_{ij}}=\frac{\partial\left(\sum_{j=1}^{n}a_{ij}\cdot(-1)^{i+j}M_{ij}\right)}{\partial a_{ij}}=(-1)^{i+j}M_{ij}=A_{ji}^{*}$
- 从而：$\frac{\partial|A|}{\partial A}=\left(A^{*}\right)^{T}=|A|\cdot\left(A^{-1}\right)^{T}$
  - 依据 $A\cdot A^{*}=|A|\cdot I$，第二个等式成立；

QR分解

- 对于m×n的列满秩矩阵A，必有：

$$A_{m\times n} = Q_{m\times n} \cdot R_{n\times n}$$

- 其中，$Q^T \cdot Q = I$(即列正交矩阵)，R为非奇异上三角矩阵。当要求R的对角线元素为正时，该分解唯一。
- 该分解为QR分解。可用于求解矩阵A的特征值、A的逆等问题。

利用QR分解计算特征值

- 计算n阶方阵A的特征值：

$$A = Q \cdot R \Rightarrow A_1 = Q^T A Q = R \cdot Q$$

$$\cdots$$

$$A_k = Q_k \cdot R_k \Rightarrow A_{k+1} = R_k \cdot Q_k$$

$$\cdots$$

$$A_K \to diag\{\lambda_1, \lambda_2, \cdots \lambda_n\}$$

Code

```python
def is_same(a, b):
    n = len(a)
    for i in range(n):
        if math.fabs(a[i]-b[i]) > 1e-6:
            return False
    return True


if __name__ == "__main__":
    a = np.array([0.65, 0.28, 0.07, 0.15, 0.67, 0.18,
                  0.12, 0.36, 0.52])
    n = math.sqrt(len(a))
    a = a.reshape((n, n))
    value, v=np.linalg.eig(a)

    times = 0
    while (times == 0) or (not is_same(np.diag(a), v)):
        v = np.diag(a)
        q, r = np.linalg.qr(a)
        a = np.dot(r, q)
        times += 1
        print "正交阵：\n", q
        print "三角阵：\n", r
        print "近似阵：\n", a
    print "次数：", times, "近似值：", np.diag(a)
    print "精确特征值：", value
```

```
正交阵:
[[ -9.99999997e-01   7.96775552e-05  -1.54260931e-08]
 [ -7.96775484e-05  -9.99999962e-01  -2.62680752e-04]
 [ -3.63558527e-08  -2.62680750e-04   9.99999965e-01]]
三角阵:
[[ -9.99995561e-01  -2.70043706e-02   2.26002781e-01]
 [  0.00000000e+00  -5.18490813e-01  -2.01260695e-04]
 [  0.00000000e+00   0.00000000e+00   3.21511463e-01]]
近似阵:
[[  9.99997701e-01   2.68653258e-02   2.26009882e-01]
 [  4.13120842e-05   5.18490847e-01  -6.50631315e-05]
 [ -1.16888234e-08  -8.44548721e-05   3.21511452e-01]]
正交阵:
[[ -9.99999999e-01   4.13121805e-05   4.95968741e-09]
 [ -4.13121791e-05  -9.99999986e-01   1.62885687e-04]
 [  1.16888502e-08   1.62885687e-04   9.99999987e-01]]
三角阵:
[[ -9.99997702e-01  -2.68867458e-02  -2.26009875e-01]
 [  0.00000000e+00  -5.18489743e-01   1.26769705e-04]
 [ -0.00000000e+00  -0.00000000e+00   3.21511438e-01]]
近似阵:
[[  9.99998809e-01   2.68086196e-02  -2.26014256e-01]
 [  2.14199426e-05   5.18489757e-01   4.23151455e-05]
 [  3.75809905e-09   5.23696113e-05   3.21511434e-01]]
正交阵:
[[ -1.00000000e+00   2.14199684e-05  -1.59459985e-09]
 [ -2.14199681e-05  -9.99999995e-01  -1.01004056e-04]
 [ -3.75810352e-09  -1.01004056e-04   9.99999995e-01]]
三角阵:
[[ -9.99998810e-01  -2.68197256e-02   2.26014254e-01]
 [  0.00000000e+00  -5.18489185e-01  -7.96303223e-05]
 [  0.00000000e+00   0.00000000e+00   3.21511428e-01]]
近似阵:
[[  9.99999383e-01   2.67754771e-02   2.26016964e-01]
 [  1.11060221e-05   5.18489190e-01  -2.72608113e-05]
 [ -1.20827323e-09  -3.24739582e-05   3.21511427e-01]]
次数:  17 近似值:  [ 0.99999938   0.51848919   0.32151143]
精确特征值:  [ 1.          0.51848858   0.32151142]
```

总结与思考

- 线性代数是普适的数学工具，是进一步学习其他内容的基础。
  - 有些机器学习的推导过程使用该工具表述清晰，易于推广，如线性回归。
- 重点思考特征值、特征向量和矩阵的关系。
- 查阅：
  - Schmidt正交化/Givens变换/HouseHolder变换
  - Hessenberg矩阵

参考文献

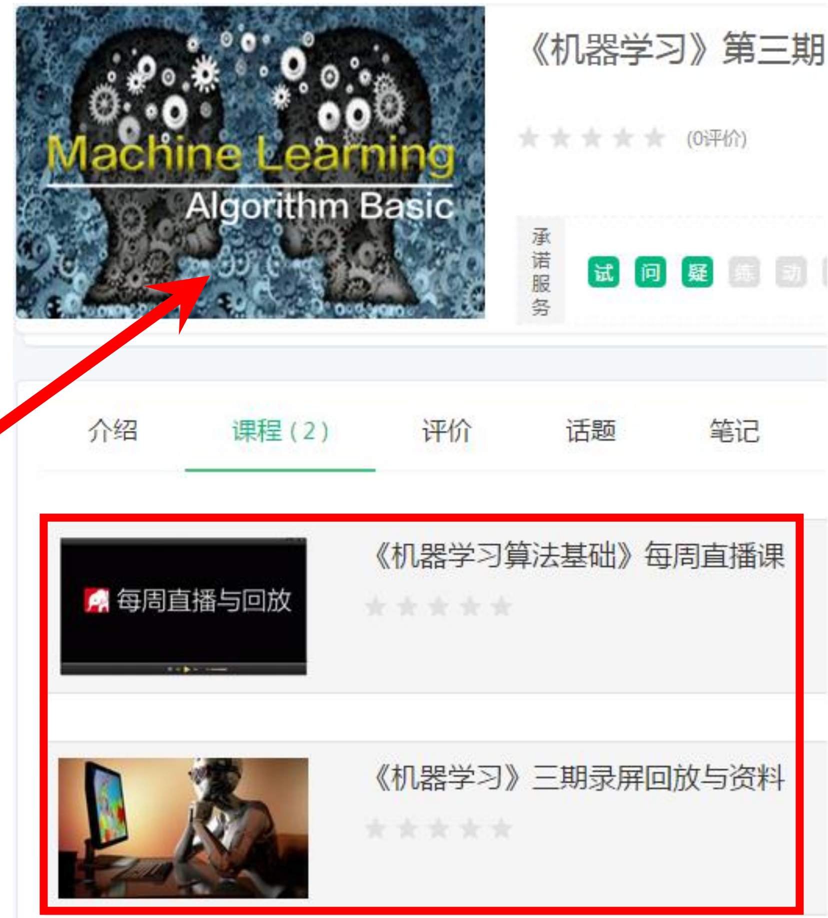
- 同济大学数学系 编， 工程数学线性代数(第五版)， 高等教育出版社， 2007

我们在这里

- http://wenda.ChinaHadoop.cn
  - 视频/课程/社区
- 微博
  - @ChinaHadoop
  - @邹博_机器学习
- 微信公众号
  - 小象
  - 大数据分析挖掘

课程资源

- 直播课的入口
- 录播视频和讲义资料



感谢大家！

恳请大家批评指正！