

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

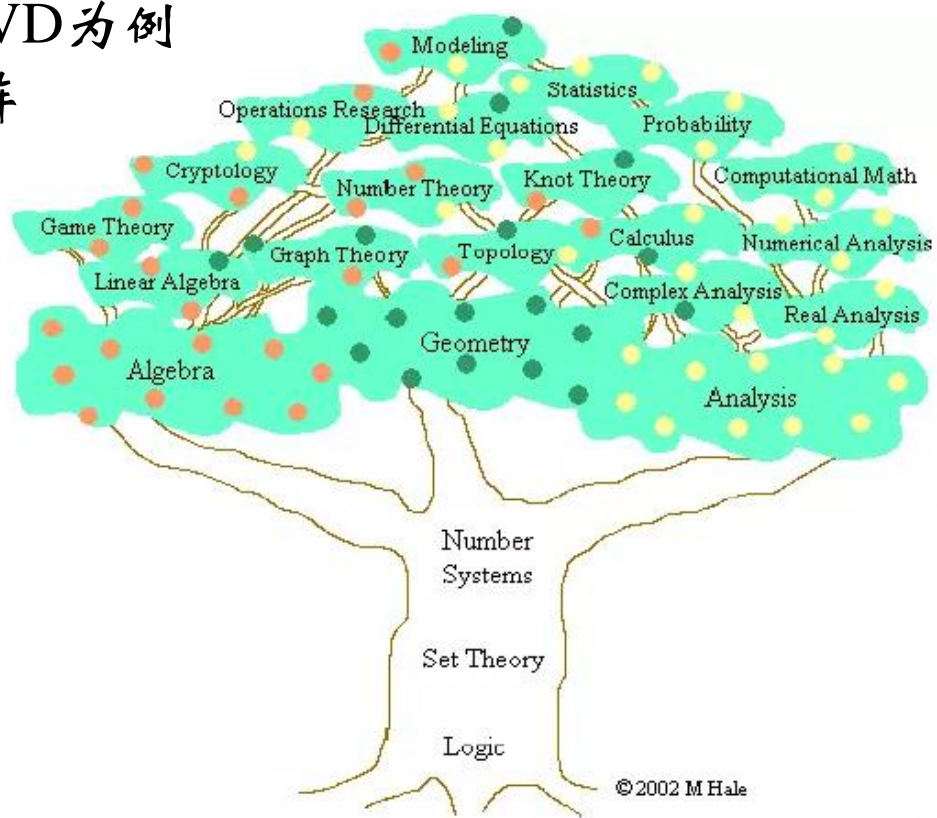
- 线性代数是有用的：以SVD为例
- 矩阵的乘法/状态转移矩阵
- 矩阵和向量组

□ 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

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

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

□ 已知 4×5 阶实矩阵A，求A的SVD分解：

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

$$U = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{5} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$V^T = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \sqrt{0.2} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{0.8} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\sqrt{0.8} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{0.2} \end{bmatrix}$$

□ 矩阵U和V都是单位正交方阵： $U^T U = I$ ， $V^T V = I$

SVD

```
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



SVD



svd_0.png



svd_1.png



svd_2.png



svd_3.png



svd_4.png



svd_5.png



svd_6.png



svd_7.png



svd_8.png



svd_9.png



svd_10.png



svd_11.png



svd_12.png



svd_13.png



svd_14.png



svd_15.png



svd_16.png



svd_17.png



svd_18.png



svd_19.png



svd_20.png



svd_21.png



svd_22.png



svd_23.png



svd_24.png



svd_25.png



svd_26.png



svd_27.png



svd_28.png



svd_29.png



svd_30.png



svd_31.png



svd_32.png



svd_33.png



svd_34.png



svd_35.png



svd_36.png



svd_37.png



svd_38.png



svd_39.png



svd_40.png



svd_41.png



svd_42.png



svd_43.png



svd_44.png



svd_45.png



svd_46.png



svd_47.png



svd_48.png



svd_49.png

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。

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

- 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：

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

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

Diagram illustrating the calculation of the determinant for a 3x3 matrix. The matrix is shown with its elements repeated three times, separated by vertical lines. Blue dashed lines represent the positive terms in the expansion: $a_{11}a_{22}a_{33}$, $a_{12}a_{23}a_{31}$, and $a_{13}a_{21}a_{32}$. Red solid lines represent the negative terms: $a_{11}a_{23}a_{32}$, $a_{12}a_{21}a_{33}$, and $a_{13}a_{22}a_{31}$.

□ 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: $A_{ij} = (-1)^{i+j} M_{ij}$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \quad \forall 1 \leq j \leq n, |A| = \sum_{i=1}^n a_{ij} \cdot (-1)^{i+j} M_{ij}$$
$$\quad \quad \quad \forall 1 \leq i \leq n, |A| = \sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot (-1)^{i+j} M_{ij}$$

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

伴随矩阵

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

□ 根据:

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

□ 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:

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

■ 提示：数学归纳法

■ 注：参考Lagrange/Newton插值法

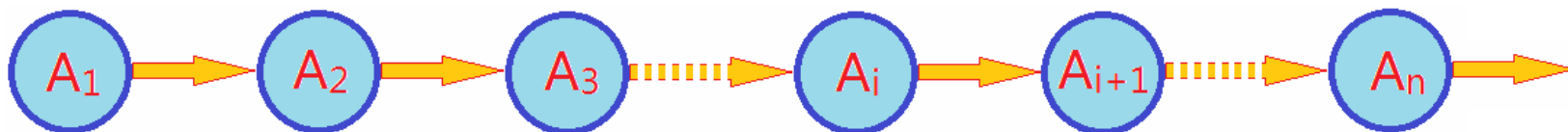
矩阵的乘法

□ A为 $m \times s$ 阶的矩阵，B为 $s \times n$ 阶的矩阵，那么， $C=A \times B$ 是 $m \times n$ 阶的矩阵，其中，

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

矩阵模型

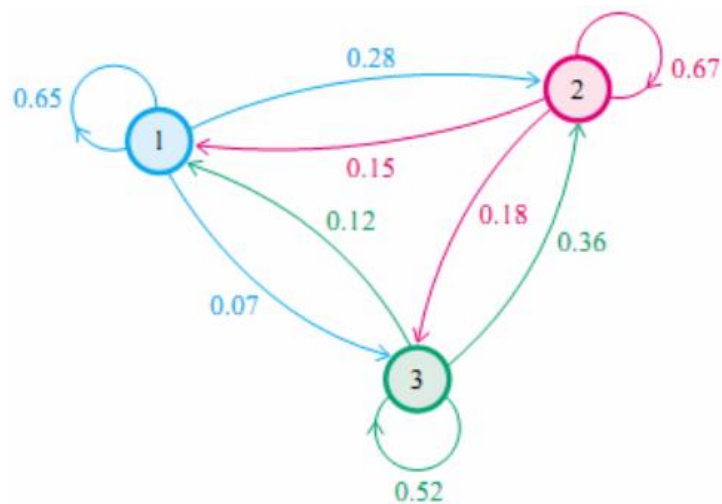
- 考虑某随机过程 π ，它的状态有 n 个，用 $1\sim n$ 表示。记在当前时刻 t 时位于 i 状态，它在 $t+1$ 时刻位于 j 状态的概率为 $P(i,j)=P(j|i)$ ：
 - 即状态转移的概率只依赖于前一个状态。



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：

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



概率转移矩阵

□ 第 $n+1$ 代中处于第 j 个阶层的概率为：

$$\pi(X_{n+1} = j) = \sum_{i=1}^K \pi(X_n = i) \cdot P(X_{n+1} = j | X_n = i)$$

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

□ 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？

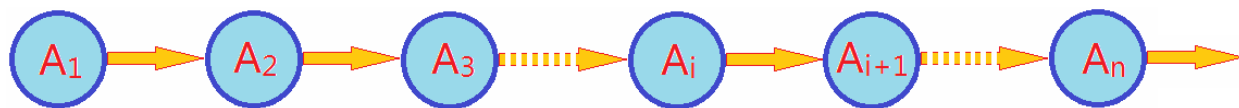
探索：初始概率 $\pi = [0.21, 0.68, 0.1]$ 迭代

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 $\pi = [0.75, 0.15, 0.1]$ 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 $\lim_{n \rightarrow \infty} P_{ij}^n$ 存在，记做 $\lim_{n \rightarrow \infty} P_{ij}^n = \pi(j)$ 。

平稳分布

□ 事实上，下面两种写法等价：

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

□ 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 $\mathbf{x}P = \mathbf{x}$ 的非负解为 π ，而 P^n 唯一，因此 π 是线性方程 $\mathbf{x}P = \mathbf{x}$ 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 $C=A \times B$ ，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 $(A \times B) \times C$ 和 $A \times (B \times C)$ 的乘法次数是 $a_0 a_1 a_2 + a_0 a_2 a_3$ 、 $a_1 a_2 a_3 + a_0 a_1 a_3$ ，二者一般情况是不相等的。
 - 问：给定 n 个矩阵的连乘积： $A_1 \times A_2 \times A_3 \dots \times A_n$ ，如何添加括号来改变计算次序，使得乘法的计算量最小？

Code

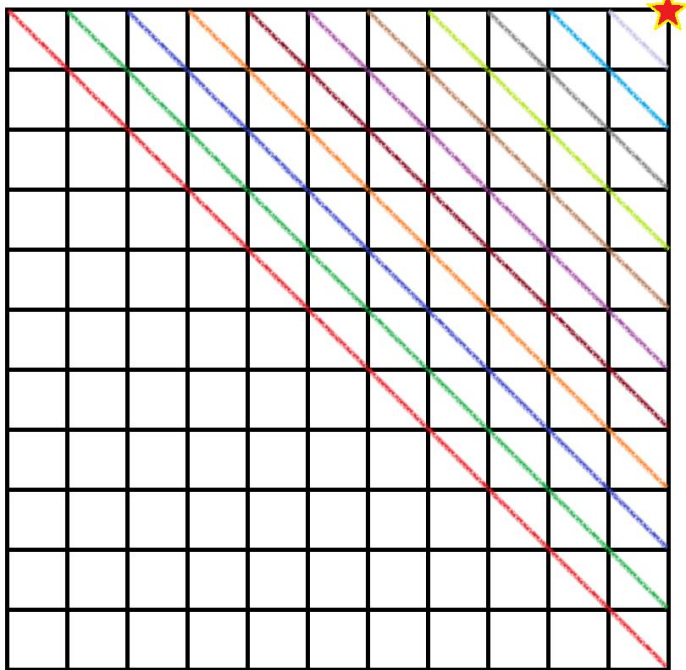
```
//p[0...n]存储了n+1个数，其中，(p[i-1],p[i])是矩阵i的阶；  
//s[i][j]记录A[i...j]从什么位置断开；m[i][j]记录数乘最小值  
void MatrixMultiply(int* p, int n, int** m, int** s)
```

```
{  
    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++)
```

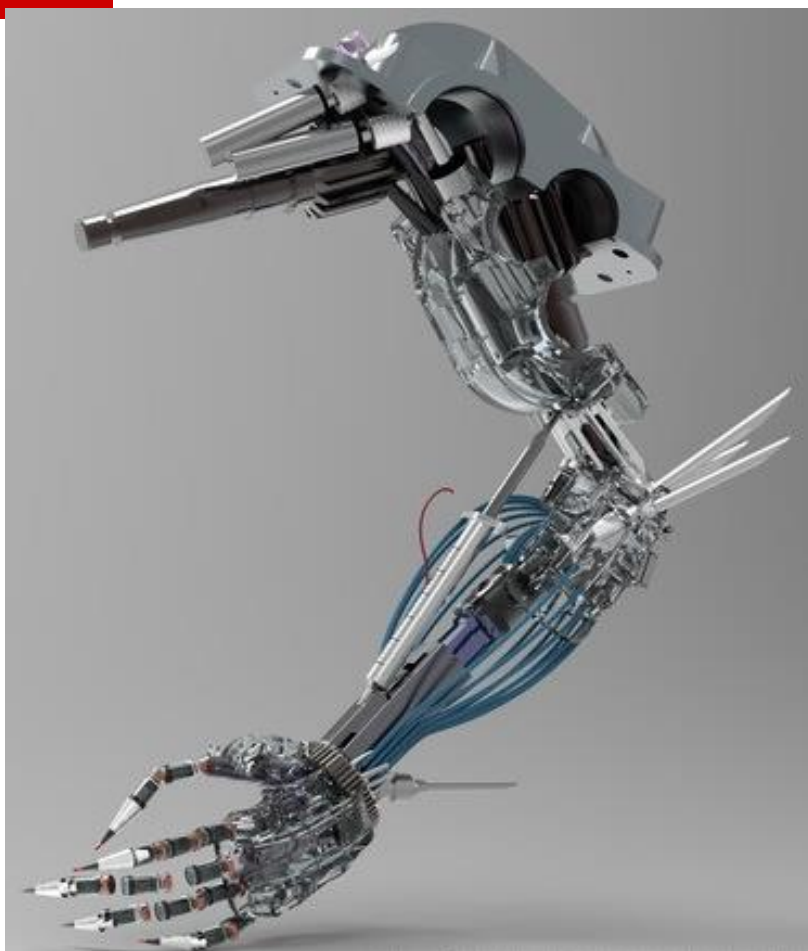
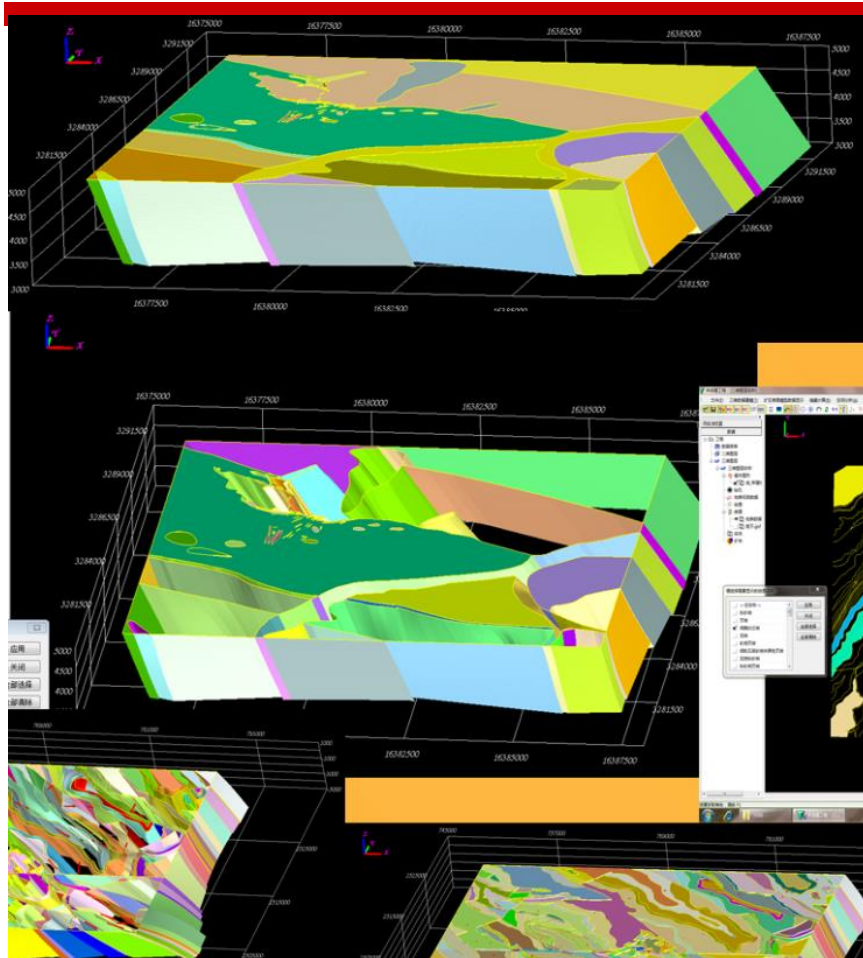
```
{  
    for (i = 1; i <= n-r+1; i++)  
    {  
        j=i+r-1;  
        m[i][j] = m[i+1][j] + p[i-1]*p[i]*p[j];  
        s[i][j] = i;  
        for (k = i+1; k < j; k++)  
        {  
            t = m[i][k] + m[k+1][j] + p[i-1]*p[k]*p[j];  
            if (t < m[i][j])  
            {  
                m[i][j] = t;  
                s[i][j] = k;  
            }  
        }  
    }  
}
```



矩阵和向量的乘法

- A 为 $m \times n$ 的矩阵， \mathbf{x} 为 $n \times 1$ 的列向量，则 $A\mathbf{x}$ 为 $m \times 1$ 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 维空间点的线性变换。
 - 旋转、平移(齐次坐标下)
- 特殊的，若 $m=n$ ，且 $A\mathbf{x}$ 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 $m \times n$ 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， $m \times n$ 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 $R(A)=r$ 。
 - $n \times n$ 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

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

□ 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
 $A=(a_1, a_2, \dots, a_m)$ 和 $B=(b_1, b_2, \dots, b_n)$, B组能由A组
线性表示, 即对每个向量 b_j , 存在 $k_{1j}, k_{2j}, \dots, k_{mj}$

□ 使得

$$b_j = k_{1j}a_1 + k_{2j}a_2 + \dots + k_{mj}a_m = (a_1 \ a_2 \ \dots \ a_m) \begin{pmatrix} k_{1j} \\ k_{2j} \\ \vdots \\ k_{mj} \end{pmatrix}$$

□ 从而得到系数矩阵K

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

对 $C=AB$ 的重认识

- 由此可知，若 $C=A \times B$ ，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 $C=A \times B$ ，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 $B: b_1, b_2, \dots, b_n$ 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 $(A, B)=(a_1, a_2, \dots, a_m, b_1, b_2, \dots, b_n)$ 的秩，即： $R(A)=R(A, B)$ 。

正交阵

- 若 n 阶矩阵 A 满足 $A^T A = I$, 称 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 $A \cdot x$ 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， $A \times B$ 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 $Ax = \lambda x$ ，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 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, 则
- $\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n = a_{11} + a_{22} + \dots + a_{nn}$
- $\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n = |A|$
 - 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 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ 是方阵 A 的 m 个特征值， p_1, p_2, \dots, p_m 是依次与之对应的特征向量，若 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ 各不相同，则 p_1, p_2, \dots, 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 $A\bar{x} = \bar{A}\bar{x} = \overline{Ax} = \bar{\lambda}x = \bar{\lambda}\bar{x}$

□ 因为 $\bar{x}^T(Ax) = \bar{x}^T \lambda x = \lambda \bar{x}^T x$

$$\bar{x}^T(Ax) = (\bar{x}^T A^T)x = (A\bar{x})^T x = (\bar{\lambda}\bar{x})^T x = \bar{\lambda}\bar{x}^T x$$

□ 从而

$$\lambda \bar{x}^T x = \bar{\lambda} \bar{x}^T x \Rightarrow (\lambda - \bar{\lambda}) \bar{x}^T x = 0$$

□ 而

$$\bar{x}^T x = \sum_{i=1}^n \bar{x}_i x_i = \sum_{i=1}^n |x_i|^2 \neq 0$$

□ 所以

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

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，其两个不同的特征值 λ_1, λ_2 对应的特征向量分别是 μ_1, μ_2 ；

■ $\lambda_1, \lambda_2, \mu_1, \mu_2$ 都是实数或是实向量。

$$\begin{aligned} & \begin{cases} A\mu_1 = \lambda_1\mu_1 \\ A\mu_2 = \lambda_2\mu_2 \Rightarrow \mu_1^T A\mu_2 = \mu_1^T \lambda_2\mu_2 \end{cases} \\ & \Rightarrow (A^T \mu_1)^T \mu_2 = \lambda_2 \mu_1^T \mu_2 \Rightarrow (\underline{A\mu_1})^T \mu_2 = \lambda_2 \mu_1^T \mu_2 \\ & \Rightarrow (\underline{\lambda_1 \mu_1})^T \mu_2 = \lambda_2 \mu_1^T \mu_2 \\ & \Rightarrow \lambda_1 \mu_1^T \mu_2 = \lambda_2 \mu_1^T \mu_2 \\ & \xrightarrow{\lambda_1 \neq \lambda_2} \mu_1^T \mu_2 = 0 \end{aligned}$$

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

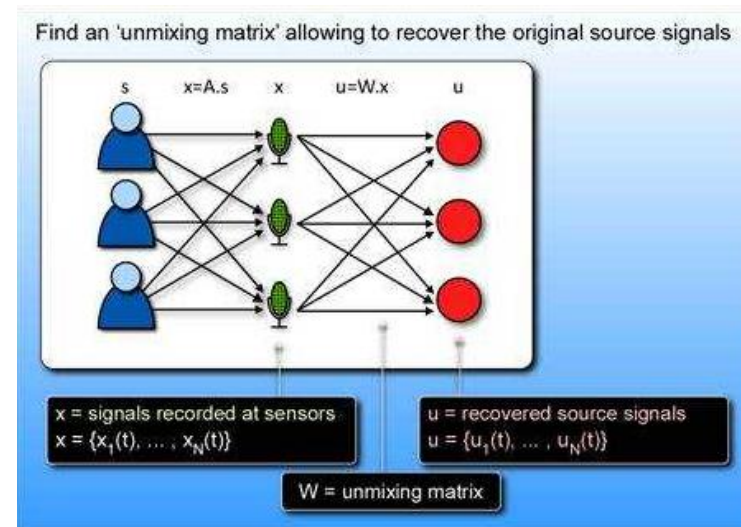
$$x = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1,m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{n,m} \end{bmatrix} \stackrel{\Delta}{=} (x_1 \quad x_2 \quad \cdots \quad x_m)$$

□ 计算观测数据 x 的 $n \times n$ 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：

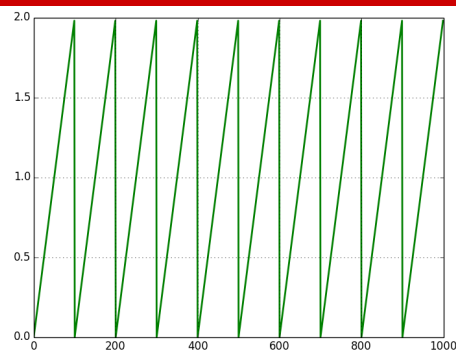
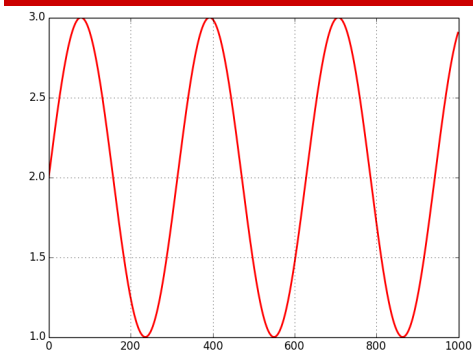
$$\begin{aligned} \tilde{x} \cdot \tilde{x}^T &= (U^T D^{-0.5} U \cdot x) (U^T D^{-0.5} U \cdot x)^T \\ &= (U^T D^{-0.5} U \cdot x) (x^T U^T D^{-0.5} U) \\ &= U^T D^{-0.5} U \cdot (x x^T) \cdot U^T D^{-0.5} U \\ &= U^T D^{-0.5} U \cdot U^T D U \cdot U^T D^{-0.5} U = I \end{aligned}$$



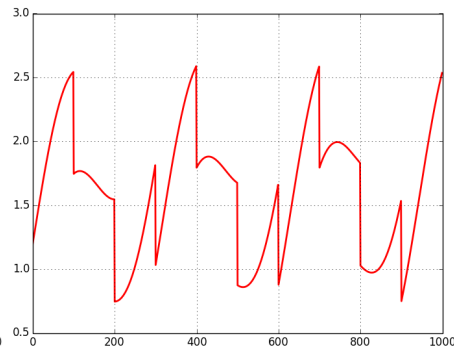
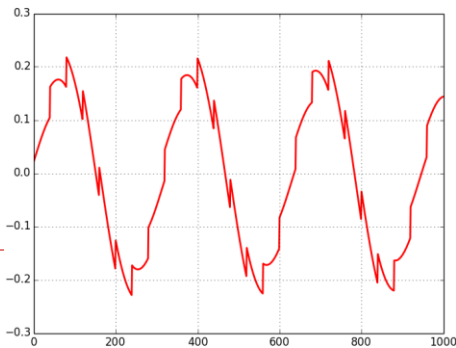
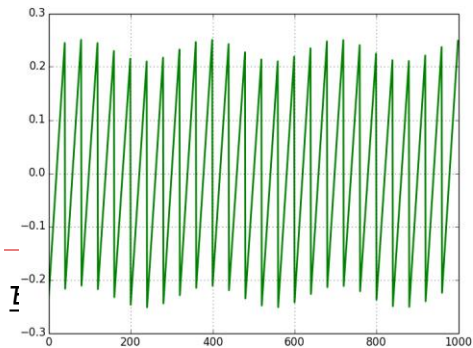
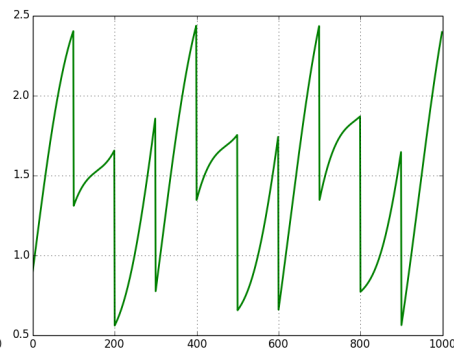
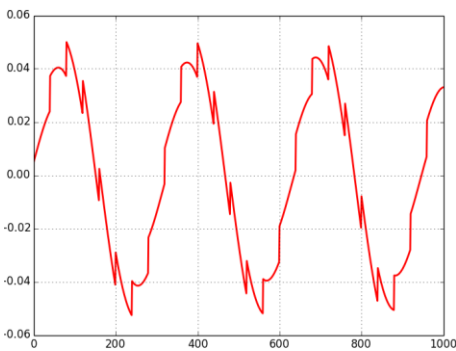
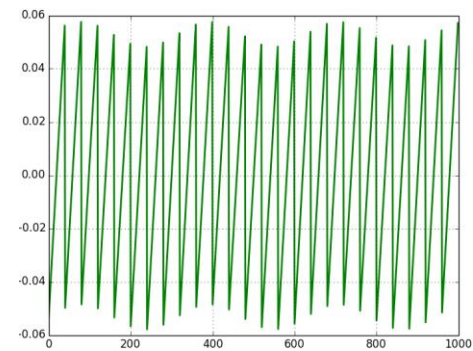
白化Code

```
def whitening(x):
    m = len(x)
    n = len(x[0])
    # 计算  $x \cdot x'$ 
    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  $x \cdot x'$  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

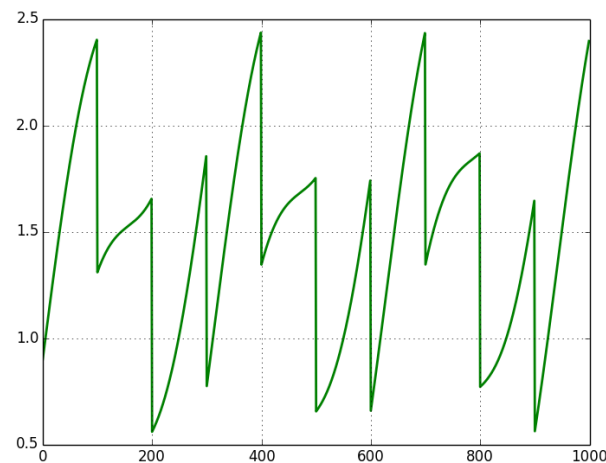
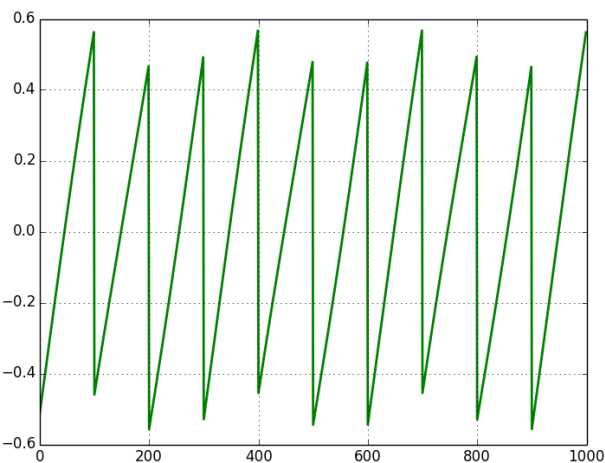
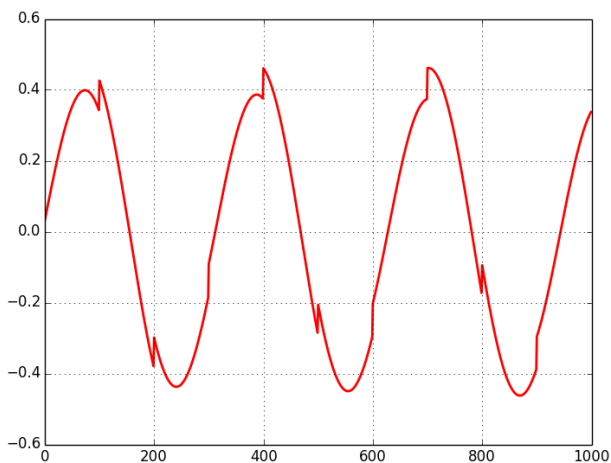
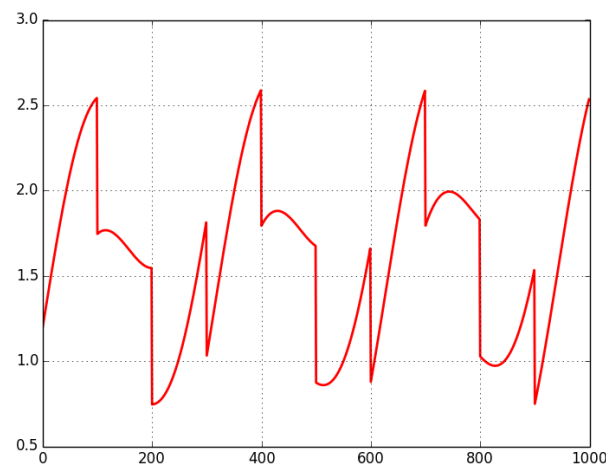
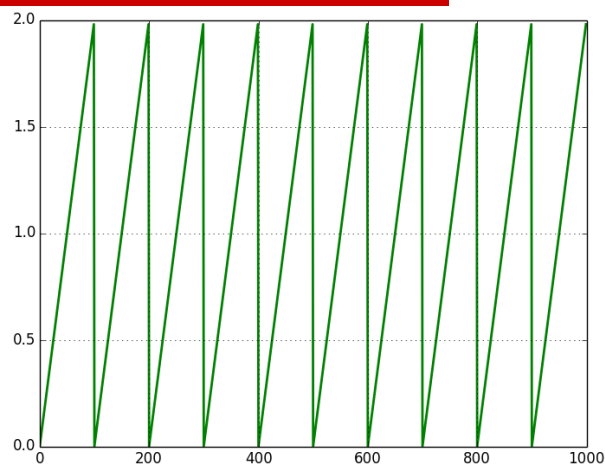
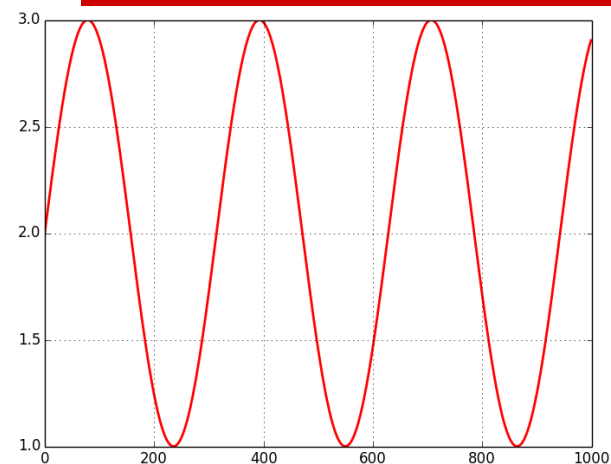
源信号2

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 $x^T A x > 0$ ，则称 A 是正定阵。
- 若条件变成 $x^T A x \geq 0$ ，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 $A^T A$ 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。

$$(a_{11}) \quad \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

例题：

□ 给定凸锥的定义如下：

C 为凸锥 $\Leftrightarrow \forall x_1, x_2 \in C, \theta_1, \theta_2 \geq 0$, 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

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

□ 从而， $\forall \theta_1, \theta_2 \geq 0$,

$$\begin{aligned} \vec{z}^T \cdot (\theta_1 A + \theta_2 B) \cdot \vec{z} &= \vec{z}^T \cdot \theta_1 A \cdot \vec{z} + \vec{z}^T \cdot \theta_2 B \cdot \vec{z} \\ &= \theta_1 \vec{z}^T A \vec{z} + \theta_2 \vec{z}^T B \vec{z} \geq 0 \end{aligned}$$

□ 即： $\forall \theta_1, \theta_2 \geq 0, \theta_1 A + \theta_2 B$ 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 $m \times n$ 的矩阵， \mathbf{x} 为 $n \times 1$ 的列向量，则 $A\mathbf{x}$ 为 $m \times 1$ 的列向量，记 $\vec{y} = A \cdot \vec{x}$
- 思考： $\frac{\partial \vec{y}}{\partial \vec{x}} = ?$

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

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

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

□ 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 \mathbf{x} 为 $n \times 1$ 的列向量， \mathbf{y} 为 $m \times 1$ 的列向量，则：

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

- 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 $n \times n$ 的矩阵， \mathbf{x} 为 $n \times 1$ 的列向量，

□ 记 $y = \vec{x}^T \cdot A \cdot \vec{x}$

□ 同理可得：
$$\frac{\partial y}{\partial \vec{x}} = \frac{\partial (\vec{x}^T \cdot A \cdot \vec{x})}{\partial \vec{x}} = (A^T + A) \cdot \vec{x}$$

□ 若 A 为对称阵，则有
$$\frac{\partial (\vec{x}^T A \vec{x})}{\partial \vec{x}} = 2A\vec{x}$$

推导

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

□ 记：

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

□ 有：

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

□ 则：

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

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

标量对方阵的导数

□ A 为 $n \times n$ 的矩阵， $|A|$ 为 A 的行列式，计算 $\frac{\partial |A|}{\partial A}$

□ 解：根据等式 $\forall 1 \leq i \leq n, |A| = \sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot (-1)^{i+j} M_{ij}$

□ 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： $\frac{\partial |A|}{\partial A} = (A^*)^T = |A| \cdot (A^{-1})^T$

■ 依据 $A \cdot A^* = |A| \cdot I$ ，第二个等式成立；

QR分解

□ 对于 $m \times n$ 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。

QR分解计算特征值

□ 计算n阶方阵A的特征值：

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

...

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

...

$$A_K \rightarrow \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$$

Code

```
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]

LFM (Latent Factor Model)

□ 对于K个隐变量，得： $A_{m \times n} = U_{m \times k} \cdot V_{n \times k}^T$

□ 目标函数：

$$J(U, V; A) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \left(a_{ij} - \sum_{r=1}^k u_{ir} \cdot v_{jr} \right)^2 + \lambda \left(\sum_{i=1}^m \sum_{r=1}^k u_{ir}^2 + \sum_{j=1}^n \sum_{r=1}^k v_{jr}^2 \right)$$

□ 梯度：

$$\begin{cases} \frac{\partial J(U, V; A)}{\partial u_{ir}} = -2 \cdot \left(a_{ij} - \sum_{r=1}^k u_{ir} \cdot v_{jr} \right) \cdot v_{jr} + 2\lambda u_{ir} \\ \frac{\partial J(U, V; A)}{\partial v_{jr}} = -2 \cdot \left(a_{ij} - \sum_{r=1}^k u_{ir} \cdot v_{jr} \right) \cdot u_{ir} + 2\lambda v_{jr} \end{cases}, 1 \leq r \leq k$$

Code

```
def inverse(a):  
    b = np.zeros_like(a)  
    n = len(a)  
    c = np.eye(n)  
    alpha = 1  
    for times in range(200):  
        for i in range(n):  
            for j in range(n):  
                err = c[i][j] -  
                for k in range(n):  
                    b[j][k] += a  
    return b.T
```

```
136 :  
b:  
[[ 1.70125975 -0.72225553  0.02099578]  
 [-0.33833233  1.97720453 -0.63887219]  
 [-0.15836833 -1.20215954  2.36052786]]  
a*b:  
[[ 9.99999999e-01  3.74451374e-09 -4.12243131e-09]  
 [ 1.66690815e-09  9.99999988e-01  1.32158535e-08]  
 [-1.05973856e-09  7.63175290e-09  9.99999992e-01]]  
137 :  
b:  
[[ 1.70125975 -0.72225554  0.02099579]  
 [-0.33833233  1.97720453 -0.6388722 ]  
 [-0.15836833 -1.20215954  2.36052786]]  
a*b:  
[[ 1.00000000e+00  3.29110765e-09 -3.62326488e-09]  
 [ 1.46506981e-09  9.99999989e-01  1.16156059e-08]  
 [-9.31419677e-10  6.70765854e-09  9.99999993e-01]]  
138 :  
b:  
[[ 1.70125975 -0.72225554  0.02099579]  
 [-0.33833233  1.97720454 -0.6388722 ]  
 [-0.15836833 -1.20215954  2.36052787]]  
a*b:  
[[ 1.00000000e+00  2.89260232e-09 -3.18454021e-09]  
 [ 1.28767115e-09  9.99999991e-01  1.02091250e-08]  
 [-8.18638310e-10  5.89545857e-09  9.99999994e-01]]  
139 :  
b:  
[[ 1.70125975 -0.72225554  0.02099579]  
 [-0.33833233  1.97720454 -0.6388722 ]  
 [-0.15836833 -1.20215955  2.36052787]]  
a*b:  
[[ 1.00000000e+00  2.54235025e-09 -2.79893872e-09]  
 [ 1.13175292e-09  9.99999992e-01  8.97294861e-09]  
 [-7.19513116e-10  5.18160437e-09  9.99999994e-01]]  
[[ 1.70125975 -0.72225554  0.02099579]  
 [-0.33833233  1.97720454 -0.6388722 ]  
 [-0.15836833 -1.20215955  2.36052787]]  
真实值:  
[[ 1.70125975 -0.72225555  0.0209958 ]  
 [-0.33833233  1.97720456 -0.63887223]  
 [-0.15836833 -1.20215957  2.36052789]]
```

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。
- 思考：对于“非线性”问题，线性代数这一工具是否足够？是否有“非线性代数”？
 - 非线性映射、核函数
- 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

■ 小象学院

■ 大数据分析挖掘



感谢大家！

恳请大家批评指正！