线性代数初步

邓明格

七月在线

mingge_deng@brown.edu

March 12, 2017

主要内容

文本表示

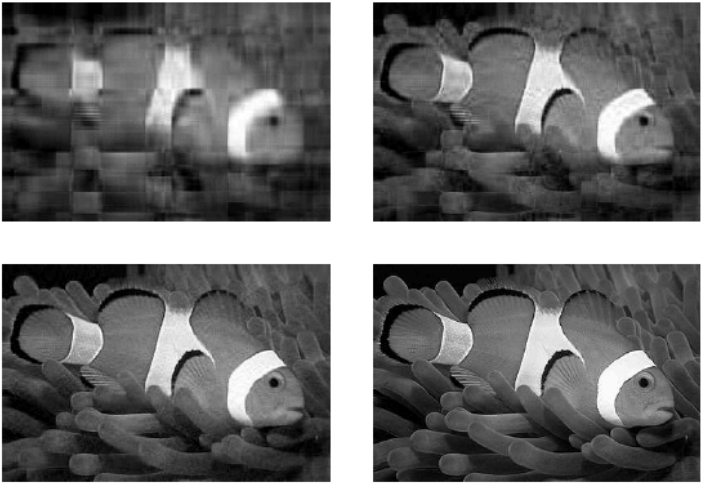
文本:
A (real) vector is just a collection of real numbers, referred to as the components (or, elements) of the vector; $\mathcal{R}^n$ denotes the set of all vectors with n elements. If $x \in \mathcal{R}^n$ denotes a vector, we use subscripts to denote elements, so that x_i is the i-th component of x. Vectors are arranged in a column, or a row. If x is a column vector, x^T denotes the corresponding row vector, and vice-versa.

- 行向量 $c = [5; 3; 3; 4]$ 表示单词列表 $V = \{vector; elements; of; the\}$ 中单词在文本中出现次数。
- 行向量 $x = [1/3, 1/5, 1/5, 4/15]$ 表示单词出现相对频率。
- Frequency-based representation of text documents (bag-of-words).

图像表示

灰度图 / RGB 彩图

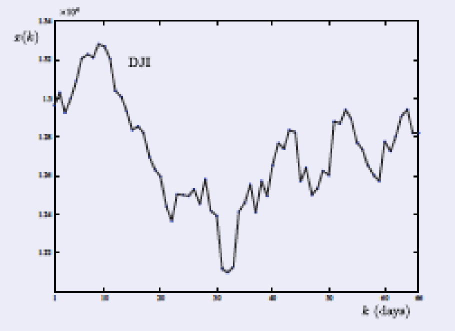
SVD 压缩



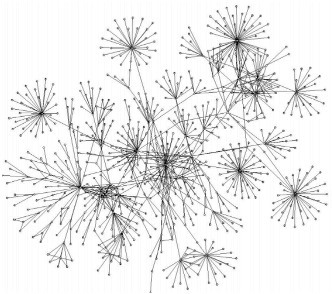
时间序列表示

时间序列：物理量 $X(t)$ 随离散时间 t 变化的序列

$$X(t) = \left[X(1), X(2), ...X(T)\right]^T \in \mathcal{R}^T \tag{1}$$

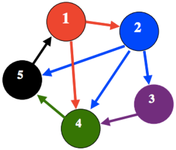


网页排名



- 英特网可以表示为连接图
- 更多访问更高排名

英特网的矩阵表示



$$S = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- **S**: 转移矩阵
- 第 i 行表示：从网页 i 到其他网页的概率
- 第 j 列表示：从其他网页到网页 j 的概率
- 网页排名：特征向量问题

$$\pi^T \mathbf{S} = \pi^T \qquad \pi > 0 \qquad ||\pi||_1 = 1 \tag{2}$$

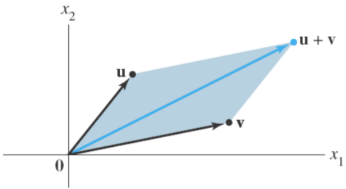
Page Rank 算法

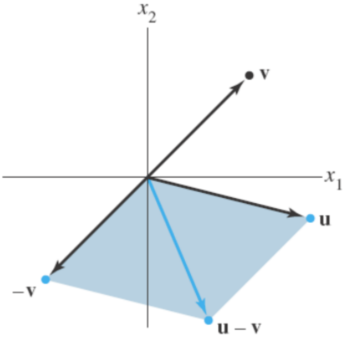
Want π such that $\pi^T \mathbf{S} = \pi^T$

- 随机选取 $x(0)$
- 迭代直到收敛：$x(k+1)^T := x(k)^T \mathbf{S}$
- $\pi = x(t \to \infty)$

- 幂法
- 矩阵乘法的 MapReduce 并行

- 向量加减法，向量与标量数乘，满足交换律，结合律和分配律等
- 向量空间，零向量，单位向量
- 实数向量空间 $\mathcal{R}^n$





线性组合与线性无关

线性组合

向量 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, ..., \mathbf{v}_p \in \mathcal{R}^n$, 标量 $c_1, c_2, ..., c_p$，并且向量 $\mathbf{y} \in \mathcal{R}^n$ 可以表达为

$$\mathbf{y} = c_1\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{v}_2 + ... + c_p\mathbf{v}_p \tag{3}$$

称为 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, ..., \mathbf{v}_p$ 的线性组合，其中标量 $c_1, c_2, \cdots, c_p$ 称为线性组合的系数或权.

线性无关

向量空间的一组元素称为线性无关，如果其中没有向量可表示成有限个其他向量的线性组合，反之称为线性相关.

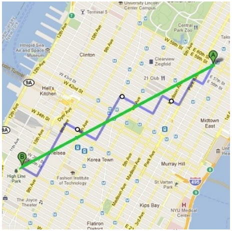
$$c_1\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{v}_2 + ... + c_p\mathbf{v}_p = 0 \qquad \mathit{iff} \qquad c_1 = c_2 = ... = c_p = 0 \tag{4}$$

线性空间的基

基

- 基是线性空间里的一组向量，使得任何一个向量都可以唯一的表示成这组基的线性组合。
- 基向量之间线性无关。
- 基给出了定量描述线性结构的方法 (坐标系)。
- 线性代数的基本问题就是基组的选择问题。

考虑纽约曼哈顿地图，街道用数字编号，非正南正北，如何选取基?



线性生成空间与空间维度

线性生成空间

向量 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, ..., \mathbf{v}_p \in \mathcal{R}^n$, 他们所有线性组合的集合称为向量 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, ..., \mathbf{v}_p$ 的线性生成空间，表示为 $Span\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, ..., \mathbf{v}_p\}$

$$Span\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, ..., \mathbf{v}_p\} = \{\mathbf{y} | \exists c_1, ..., \exists c_2, \mathbf{y} = c_1\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{v}_2 + ... + c_p\mathbf{v}_p\} \quad (5)$$

- $\forall i, \mathbf{v}_i \in Span\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, ..., \mathbf{v}_p\}$
- $\mathbf{0} \in \mathbf{Span}\{\mathbf{v_1}, \mathbf{v_2}, ..., \mathbf{v_p}\}$

空间维度

- 线性空间： $Span\{basis\}$ 基组的线性生成空间
- 空间维度： 基的数量

向量 l_p 范数

向量范数

向量范数是具有“长度”概念的函数，是向量空间到实数的映射
$\|\cdot\|: \mathcal{R}^n \to \mathcal{R}$，并满足

- 正定性：$\| \mathbf{x} \| \leq 0 \quad \| \mathbf{x} \| = 0 \quad iff \quad \mathbf{x} = 0$
- 齐次性：$\| c\mathbf{x} \| = | c | \| \mathbf{x} \|$,
- 三角不等式：$\| \mathbf{x} + \mathbf{y} \| \leq \| \mathbf{x} \| + \| \mathbf{y} \|$

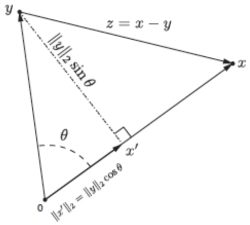
l_p 范数： $\| \mathbf{x} \|_p = (\sum_{i=1}^N |x_i|^p)^{\frac{1}{p}}$

- l_0 范数： 向量中非零元素的个数
- l_1 范数： 向量元素绝对值之和
- l_2 范数： 欧几里德距离 or 欧几里德范数（通常说的距离或者模）
- l_∞ 范数： 所有向量元素绝对值中的最大值
- $l_{-\infty}$ 范数： 所有向量元素绝对值中的最小值

向量范数极其重要： 回归问题的正则化

向量内积，投影

- 从内积到范数 $\| \mathbf{x} \| = \sqrt{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle}$
- 欧式空间 $\mathcal{R}^n$ 标准内积 $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \mathbf{x}^\mathbf{T}\mathbf{y} = \sum_{\mathbf{k=1}}^{\mathbf{n}} \mathbf{x_k y_k}$
- 向量之间的夹角 $\cos\theta = \frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle}{\|\mathbf{x}\|_2 \|\mathbf{y}\|_2}$
- 向量正交（垂直）$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \mathbf{0}$
- 向量平行 $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$ 极大值



向量与向量空间小结

- 向量空间定义及表示（基）
- 向量的度量（范数）

矩阵的理解一：线性空间的元素

- 矩阵：线性空间的元素（折叠的向量）
- 由此可以定义加减，乘，数乘，秩（维度），矩阵范数等等

矩阵的理解二：线性映射

- 线性方程组

$$\begin{aligned} x_1 + 2x_2 - x_3 &= 4 \\ -5x_2 + 3x_3 &= 1 \end{aligned} \tag{6}$$

- 等价矩阵方程

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 0 & -5 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \end{bmatrix}$$

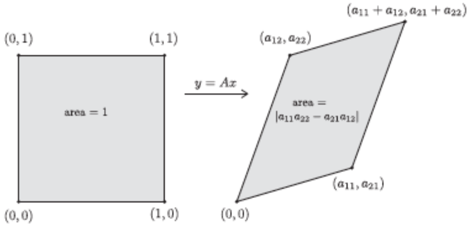
- 线性映射 $\mathbf{V}$ 和 $\mathbf{W}$ 是两个实线性空间，$\mathbf{T} : \mathbf{V} \to \mathbf{W}$ 满足如下条件就是线性映射
  - $T(v1 + v2) = T(v1) + T(v2) \quad \forall v1, v2 \in \mathbf{V}$
  - $T(cv) = cT(v) \quad \forall c \in \mathcal{R}, \quad v \in \mathbf{V}$
- 矩阵：向量（线性空间）到向量（线性空间）的线性映射
- 矩阵（线性函数）V.S 函数
- 由此可以定义矩阵的逆，秩，特征值，特征向量等

矩阵行列式的值

- 方阵 $\forall \mathbf{A} \in \mathcal{R}^{n,n}$, 行列式的值定义为

$$\det(\mathbf{A}) = \sum_{j=1}^{n} (-1)^{i+j} a_{ij} \det \mathbf{A}_{(i,j)} \tag{7}$$

- $\forall \mathbf{A} \in \mathcal{R}^{n,n}$ 为奇异方阵 $\Leftrightarrow$ $\det \mathbf{A} = 0$
- $\forall \mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathcal{R}^{n,n}$ 以及标量 $\alpha \in \mathcal{R}$,
    - $\det \mathbf{A} = \det \mathbf{A}^T$
    - $\det \mathbf{AB} = \det \mathbf{BA} = \det \mathbf{A} \det \mathbf{B}$
    - $\det \alpha \mathbf{A} = \alpha^n \det \mathbf{A}$



矩阵的逆

- $\forall \mathbf{A} \in \mathcal{R}^{n,n}$ 为非奇异方阵 ($\det \mathbf{A} \neq 0$), 矩阵的逆定义为存在并唯一的 $n \times n$ 矩阵满足
$$\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I_n} \tag{8}$$
- $\forall \mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathcal{R}^{n,n}$ 为非奇异方阵
  - $\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$
  - $(\mathbf{A}^T)^{-1} = (\mathbf{A}^{-1})^T$
  - $\det \mathbf{A} = \det \mathbf{A}^T = \dfrac{1}{\det \mathbf{A}^{-1}}$

矩阵的秩

- $\forall \mathbf{A} \in \mathcal{R}^{m,n}$, 矩阵 $\mathbf{A}$ 的生成域 (线性变换的值域) 定义为

$$\mathcal{R}(\mathbf{A}) = \{\mathbf{Ax} : \mathbf{x} \in \mathcal{R}^n\} \tag{9}$$

- 矩阵 $\mathbf{A}$ 的生成域为一个线性子空间，其维度极为矩阵 $\mathbf{A}$ 的秩。
- 矩阵 $\mathbf{A}$ 的列秩是 A 的线性独立的纵列的极大数目, 行秩是 $\mathbf{A}$ 的线性独立的横行的极大数目。矩阵的列秩和行秩总是相等的，并等于矩阵 $\mathbf{A}$ 的秩 $rank(\mathbf{A})$。
- $1 \leq rank(\mathbf{A}) \leq min(m, n)$
- 矩阵的秩等于其非零特征值的个数
- Google 网页排名问题

矩阵的特征值，特征向量

- $\lambda \in \mathcal{C}$ 为方阵 $\mathbf{A} \in \mathcal{R}\mathbf{n}, \mathbf{n}$ 的特征值，满足 $\exists \mathbf{u} \in \mathcal{C}^{\mathbf{n}}, \mathbf{u} \neq \mathbf{0}$, 并且 $\mathbf{Au} = \lambda \mathbf{u}$，或者 $(\lambda \mathbf{I_n} - \mathbf{A})\mathbf{u} = \mathbf{0}$), $\mathbf{u}$ 为对应的特征向量。
- 特征值为矩阵 $\mathbf{A}$ 的特征多项式的根 $p(\lambda) = \det(\lambda \mathbf{I_n} - \mathbf{A}) = \mathbf{0}$
- 特征向量构成正交基组
- 对比函数的傅立叶级数（其他正交级数）展开

矩阵范数

是矩阵所在线性空间到实数的映射 $\|\cdot\|: \mathcal{R}^{n,m} \to \mathcal{R}$, 并满足

- 正定性: $\| \mathbf{A} \| \leq \mathbf{0} \quad \| \mathbf{A} \| = \mathbf{0} \quad \textbf{iff} \quad \mathbf{A} = \mathbf{0}$
- 齐次性: $\| c\mathbf{A} \| = | \mathbf{c} | \| \mathbf{A} \|$,
- 三角不等式: $\| \mathbf{A} + \mathbf{B} \| \leq \| \mathbf{A} \| + \| \mathbf{B} \|$

诱导范数:

$\| \mathbf{A} \| = \max\{\| \mathbf{Ax} \| | \| \mathbf{x} \| = \mathbf{1}\} = \max\{\| \mathbf{Ax} \| / \| \mathbf{x} \|, \mathbf{x} \neq \mathbf{0}\}$

- 1 范数: $\| \mathbf{A} \|_\mathbf{1} = \max_\mathbf{j} \sum_{\mathbf{i=1}}^{\mathbf{m}} | \mathbf{a_{i,j}} |$ 列向量绝对值之和最大值
- 2 范数: $\| \mathbf{A} \|_\mathbf{1} = \sqrt{\lambda}$, λ 为 $\mathbf{AA^T}$ 的最大特征值，谱范数。
- ∞ 范数: $\| \mathbf{A} \|_\infty = \max_\mathbf{i} \sum_{\mathbf{j=1}}^{\mathbf{n}} | \mathbf{a_{i,j}} |$ 行向量绝对值之和最大值
- F 范数: $\| \mathbf{A} \|_F = \left(\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} | a_{i,j} |^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{tr(\mathbf{A}^T\mathbf{A})}$

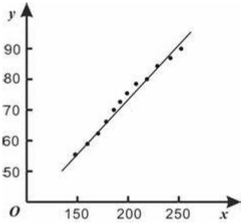
矩阵范数的应用：推荐系统 (Netflix million dollar problem) 的正则化

矩阵论初步总结

- 矩阵可以理解为线性空间的元素
- 矩阵可以理解为线性映射
- 矩阵的逆（线性映射的反函数）
- 矩阵行列式值 (线性变换前后体积比)
- 矩阵的秩（线性映射生成域的维度）
- 矩阵的特征向量（线性映射正交分解的正交基）
- 矩阵的特征值（线性映射正交分解的系数）

线性回归问题

- 线性方程组 ⇔ 等价向量方程 ⇔ 等价矩阵方程。
- 未知数个数大于方程个数（无穷多个解），未知数个数等于方程个数（唯一解），未知数个数小于方程个数（无解）。
- 一般来讲，样本个数大于自参数个数。所以方程个数大于这个方程的未知数个数，方程通常是没有解。
- 如果样本存在误差，如何寻找近似解



线性回归问题

- 模型:$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + ... + \beta_k x_k + \epsilon$, 余项 ϵ 服从正态分布 $N(0, \sigma)$
- 数据: 样本 $(Y_i, X_{i1}, ..., X_{ik}), 1 \leq i \leq n$
- 目的: 估计参数 $\beta_1, ..., \beta_k$

线性空间投影近似

- 矩阵方程： $\mathbf{Y} = \mathbf{X} \cdot \beta + \epsilon$
- 忽略误差项 $\mathbf{Y} = \mathbf{X} \cdot \beta \quad \Rightarrow \quad \beta = \mathbf{X}^{-1}\mathbf{Y}$, 但是 $\mathbf{X}$ 非方阵，且不一定可逆。
- $\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}$ 为方阵，且逆通常存在，回归问题的近似解为（正则方程）

$$\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X} \cdot \beta = \mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{Y} \quad \Rightarrow \quad \beta = (\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{Y} \tag{10}$$

- 向量方程： $\mathbf{Y}$ 为矩阵 $\mathbf{X}$ 列向量的线性组合，其系数为 β，问题转化为求 $\mathbf{Y}$ 在 $\mathbf{X}$ 列向量生成线性空间的坐标。
- $\mathbf{Y}$ 通常不在 $\mathbf{X}$ 列向量生成线性空间中，近似解则为其在此空间投影 $\mathbf{Y}^*$ 的坐标。
- 投影的定义： $\mathbf{X}^{\mathbf{T}} \cdot (\mathbf{X}\beta - \mathbf{Y}) = \mathbf{0}$ (垂直)

最小二乘

- 极小化误差项 $\mathbf{Y}-\mathbf{X}\cdot\beta$
- l_2 范数极小化, $\min L(\beta)=(\mathbf{Y}-\mathbf{X}\cdot\beta)^T\cdot(\mathbf{Y}-\mathbf{X}\cdot\beta)$
- 梯度法求极值

$$\nabla L(\beta)=0 \quad\Rightarrow\quad -2\mathbf{X}^T\mathbf{Y}+2\mathbf{X}^T\mathbf{X}=0 \quad\Rightarrow\quad \beta=(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{Y} \tag{11}$$

极大似然估计

- $\epsilon \sim N(0, \sigma)$，则 $y \sim N(\sum_{j=0}^{k} x_j\beta_j, \sigma)$
- 样本的似然函数:

$$L(\beta) = \prod_{i=1}^{n} \exp\left(\frac{(\sum_{j=0}^{k} x_j\beta_j - y)^2}{2\sigma^2}\right) \tag{12}$$

- 样本的对数似然函数:

$$l(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \frac{(\sum_{j=0}^{k} x_j\beta_j - y)^2}{2\sigma^2} = \frac{1}{2\sigma^2}(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\cdot\beta)^T \cdot (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\cdot\beta) \tag{13}$$

- 优化函数与最小二乘法一致.

梯度下降法

- 正则方程 $\beta = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{Y}$ 几乎不使用，速度太慢
- 梯度下降法求极值, 如果实值函数 $F(\mathbf{x})$ 在点 $\mathbf{x}'$ 处可微且有定义，那么函数 $F(\mathbf{x})$ 在 $\mathbf{x}'$ 点沿着梯度相反的方向 $-\nabla F(\mathbf{x}')$ 下降最快。
- 考虑到这一点，我们可以从函数 $F(\mathbf{x})$ 的局部极小值的初始估计 $\mathbf{x}_0$ 出发，并考虑如下序列 $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots$，使得

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \gamma \nabla F(\mathbf{x}_n) \tag{14}$$

因此可得到 $F(\mathbf{x}_0) \geq F(\mathbf{x}_1) \geq F(\mathbf{x}_2) \geq \ldots$，那么 $(\mathbf{x}_n)$ 将收敛到期望的极值。

- 线性回归问题

$$\beta_j = \beta_j - \gamma \frac{\partial}{\partial \beta_j} L(\beta) = \beta_j - \gamma \sum_{i=1}^{n} (\sum_{j=0}^{k} x_j^{(i)} \beta_j - y^{(i)}) x_j^{(i)} \tag{15}$$

谢谢大家！！

下节课主要内容：

- 线性映射在不同基组下的表示：矩阵的相似变换
- 矩阵的相合变换
- 对称矩阵的正交标准型（重要，协方差矩阵）
- SVD, PCA
- 矩阵分解，数值算法