Introduction to linear algebra

2025-01-04

1 矩阵视角下的线性方程组

$$
\begin{aligned}
2x_1 + 3x_2 &= 8 \\
x_1 - x_2 &= 1
\end{aligned}
$$

Can be represented in matrix form as $Ax = b$:

$$
\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 1 \end{bmatrix}
$$

对线性方程组的求解有两种思路：

1. 行视角，每一个方程代表一条直线，直线的交集即为方程组的解，其本质时把每一行看成一个基向量，然后把目标向量投影，取投影长度。
2. 列视角，对列向量寻找合适的线性组合，得到新向量，其本质时在标准基空间中，取对应的列向量，然后线性组合出目标向量。

$$
x_1 \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} 3 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 1 \end{bmatrix}
$$

从列视角的观点来看，线性方程组有解的条件显然是当目标向量 b 处于所有列向量张成的空间之中之时才有解。

这里涉及到矩阵的乘法，对矩阵的乘法有四种理解：

1. 左乘为行变换，为行的线性组合。
2. 右乘为列变换，为列的线性组合。
3. 行与列点积得到单个元素，$C_{ij} = a_i * c_j$, 元素 c_{ij} 为行 i 与列 j 的点积。
4. 列与行乘积得到矩阵。
5. 分块矩阵。

其中最常用的为列视角，应时刻记住；行视角的观点主要用于用矩阵描述高斯消元法，因为高斯消元法涉及到行的组合。

对于线性方程组的求解而言，消元法是最常见的方法。消元法为将系数矩阵 A 的对角线元素视为为主元（pivot），将主元下方的所有元素通过变换之后为 0，具体的操作方法为用主元之后的每一行减去主元行适当的倍数。

若系数矩阵为方阵且可逆：

1. 每一步消元操作可按消去的元素记为消元矩阵 E_{ij}，为下三角矩阵。
2. 若出现主元为 0 时，则通过行交换与下面的行进行交换，该操作可用矩阵记为置换矩阵 P，置换矩阵 $P^T = P^{-1}$
3. 消元以后则得到上三角阵 U（Upper-triangular matrix）

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

对于计算机而言，在进行高斯消元时，是先对系数矩阵 A 进行消元，然后对 b 进行同样的操作。手工计算时，可将 b 插入 A 最后一列同时进行操作，该矩阵称为增广矩阵（augmented matrix）。

$$Ax = b \rightarrow Ux = c$$

消元矩阵的逆矩阵总是容易求得的，即为抵消原操作 E_{ij} 的矩阵。

对于一般矩阵的逆矩阵的求法，可以使用高斯-若尔当消元法，其本质是同时对多个线性方程组进行消元。

$$E\left[A|I\right]=\left[EA|EI\right]=\left[I|A^{-1}\right]$$

在不涉及行交换的情况下：

$$EA=U\rightarrow A=LU\rightarrow A=LDU$$

从上式中可以看到矩阵的 LU 分解实际上其中的 L 矩阵就是消元矩阵 E 的逆。

若涉及行交换，则:

$$EPA=U\Rightarrow PA=LU(L=E^{-1})$$

L 矩阵优点在于可以直接写入每一步的消元系数。

则原线性方程组可写为：

$$LUx=b$$

设 Ux 为 y，则可先解出 y, 然后再解出 x。

NOTE:

1. 消元矩阵 E_{mm} 以及置换矩阵总是可逆的，实际上对矩阵左乘一个可逆矩阵就是对行进行线性组合，该操作不改变矩阵的零空间以及行空间 $CAx=0\rightarrow Ax=C^{-1}*0=0$。
2. 实际上对于任意 $m*n$ 矩阵，其消元操作以及交换行也都可以用消元矩阵 E_{m*m} 以及置换矩阵 P_{m*m} 表示，此时 $EPA=U$, 这里 U 则为阶梯型矩阵

若对任意矩阵 A_{mn}:

$Ax=0$：

系数矩阵 A 消元以后得到阶梯型矩阵 U，然后进一步简化为行最简形矩阵 R (Reduced row echelon form, rref), 其中主元列数目为 r，自由列数目为 $n-r$。

$$R=\begin{bmatrix}I & F\\ 0 & 0\end{bmatrix}$$

原方程 $Ax=0$ 的求解变为:

$$\begin{bmatrix} I & F \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{\text{pivot}} \\ x_{\text{free}} \end{bmatrix} = 0$$

那么该方程的零空间矩阵 $N = \begin{bmatrix} -F \\ I \end{bmatrix}$，对自由变量其中任意一个赋值为 1, 其它赋值为 0，则可得到一个特解，这些特解的线性空间构成了其零空间。

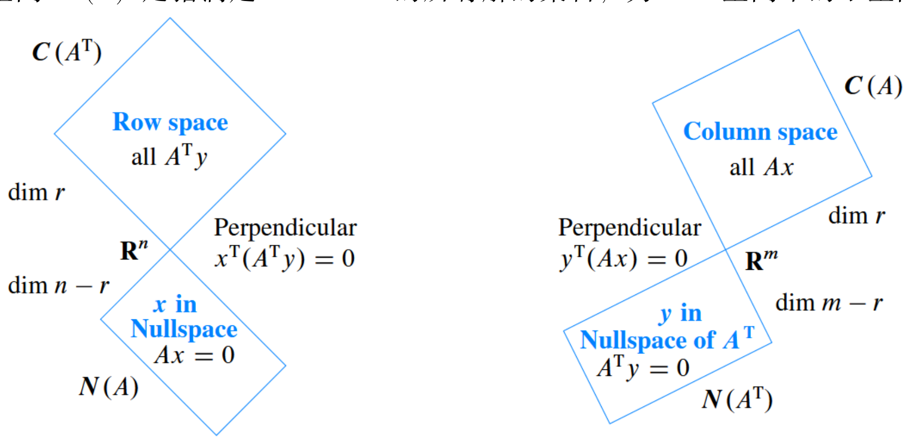
NOTE: 在由 $U \to R$ 的过程中一般涉及到了列的变化，其解的位置也出现了对应的变化，即在得到了零空间矩阵中也要进行对应的行变换。

关于向量空间:

向量空间是对于线性运算封闭的向量集合，并且任何向量空间一定包含零向量。向量空间的子空间为包含于向量空间内的一个向量空间，“子空间”与“子集”的区别在于所有元素在原空间之内就可以称为子集，但是要满足对线性运算封闭的子集才能成为子空间。

关于 $Ax=b, dim(A)=m*n$ 涉及到的向量空间:

1. 列空间 $C(A)$ 是其列向量线性组合所构成的空间, 为 R^m 空间中的子空间。
2. 零空间 $N(A)$ 是指满足 $Ax=0$ 的所有解的集合，为 R^n 空间中的子空间。



所谓零空间是使得列的线性组合为 0 的向量空间，而所谓左零空间实际上是使得行的线性组合为 0 的向量空间，参照上面对矩阵乘法的不同理解。

至于各个子空间是哪个维度空间的子空间实际上完全取决于其向量的长度。

> 对于向量空间，最重要的就是其基与维数，如何找到这些子空间的基与维数就是我们需要关注的。下面的式子给出了关于矩阵 A 四个子空间所有的信息。
>
> $$E_{mm}A_{mn} = R = \begin{bmatrix} I_{r*r} & F_{r*(n-r)} \\ 0_{(m-r)*r} & 0_{(m-r)*(n-r)} \end{bmatrix}, rank = r$$
>
> $$R_{m*n}N_{n*(n-r)} = 0$$
>
> 需要注意的消元操作-行的初等变换，不改变行空间，但是会改变列空间——$(0,1),(1,0)$ 两个向量分别构成一维的空间，但是这两个空间是不同的！

$Ax = b$:

$$x_{\text{complete}} = x_p + x_n, \text{其中} Ax_p = b, Ax_n = 0 \rightarrow A(x_p + x_n) = b$$

x_p 为将所有自由变量赋值为 0 ，得到的特解，x_n 为 $Ax = 0$ 为 A 的零空间的一般向量。

总结：

1. 若 $r = m = n \rightarrow R = I$, 即既没有多余的行，也没有多余的列，只有唯一解。
2. 若 $r = n < m \rightarrow R = \begin{bmatrix} I \\ 0 \end{bmatrix}$, 有多余的行，无解或唯一解。
3. 若 $r = m < n \rightarrow R = \begin{bmatrix} I & F \end{bmatrix}$, 即有多余的列，无穷多解。
4. 若 $r < n, r < m \rightarrow R = \begin{bmatrix} I & F \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$, 即有多余的行与列，无解或者无穷多解。

从上可以看出对于在 2 或者 4 的无解情形下，我们是无法解出线性方程组的；但是实际上对于情况 2，我们可以通过将向量 b 投影到 A 的列空间之中得出一个最优解，而对于投影则涉及到正交的概念。

> 对于两个向量正交则 $x^Ty = y^Tx = 0 \rightarrow ||x||^2 + ||y||^2 = ||x + y||^2$, 其中 $||x||^2 = x^Tx$.
> 之前我们曾提到矩阵的四个子空间，实际上矩阵的行空间和它的零空间是互为正交补的，列空间与左零空间互为正交补。

对于情形 2 无解的情况，要得到最优解，我们需要将 b 投影到 a/A 的方向，下面介绍如何进行投影。

考虑向量 b 在 a 方向上投影的向量为 p，既然其在 a 的方向上，则 $p = ax$，那么 $e = b - p$ 则与 a 向量正交：

$$a^T(b-p)=0 \rightarrow a^T(b-xa)=0 \rightarrow a^Tax=a^Tb$$

解得 $x=\frac{a^Tb}{a^Ta}, p=ax=a\frac{a^Tb}{a^Ta}$，从 p 中我们可以分离出矩阵 $P=\frac{aa^T}{a^Ta}$，该矩阵我们称之为投影矩阵，它将向量 b 投影到 a 的方向。

投影矩阵 P 是一个对称矩阵。显然，考虑到左乘一个矩阵为列的线性组合，投影矩阵既然是把 b 投影到 a 的方向，其显然和 a 有相同的列空间，其秩为 1。另一方面，如果做两次投影则有 $P^2b=Pb$，因为投影一次之后再投影，显然还是在原来的位置。因此矩阵 P 有如下性质：

$$P^2=P, P^T=P$$

Gram-SChmidt 正交化

单位长度为 1，并且彼此正交的向量称之为标准正交向量。如果矩阵 Q 的列向量为标准正交向量，则 $Q^TQ=I$ 。一个标准正交的方正我们称之为“正交矩阵”（orthogonal matrix）。

从两个线性无关的向量开始 a，b 开始其张成了一个空间，我们的目标就是找到一组标准正交的向量 $q1, q2$ 能张成同样的空间。Schmidt 提出如果有一组正交基 A, B, 那么我们令它们除以自己的长度就得到标准正交基。

$$q_1=\frac{A}{||A||}, q_2=\frac{B}{||B||}$$

Gram 提出了只要用向量 b 减去投影到 a 上的向量，即可得到一个与 a 垂直的向量，也就是上面提到的 e 的方向。

$$B=\frac{aa^T}{a^Ta}b$$

如果从三个线性无关的向量 a, b, c 出发，则可以通过从 c 中减去其在 a, b 向量上的投影得到与 a, b 垂直的向量 C。

$$C=c-\frac{aa^Tc}{a^Ta}-\frac{bb^Tc}{b^Tb}$$

施密特正交化的过程可以用矩阵运算的方式表示为 $A=QR$, 此处 R 为上三角矩阵。

$$\begin{bmatrix} a_1 & a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1^T q_1 & a_2^T q_1 \\ a_1^T q_2 & a_2^T q_2 \end{bmatrix}$$

R 矩阵每个元素都是向量点积的值，而实际上点积代表的是 a 向量在 q 向量上的投影长度与 q 的长度的乘积。如果 q 为单位向量则点积就是 a 在 q 方向的投影长度，如果 a 也为单位向量，则点积就是两个向量夹角的余弦值。

结合右乘一个矩阵为列的线性组合，可以看到 R 矩阵每列的元素就是原每个 a 向量在 q 方向的投影长度，称之为权。

将 b 向量投影到 A 矩阵的列空间，则 $p = Ax$

$$A^T(b - Ax) = 0 \rightarrow A^T Ax = A^T b$$

解得 $x = (A^T A)^{-1} A^T b, p = A(A^T A)^{-1} A^T b$, 则投影矩阵 $P = A(A^T A)^{-1} A^T$

将向量 b 投影到列空间 A 与投影到向量 a 的方向的一个特殊点在于，实际上 b 向量是在一个 m 空间之中，而之前提到是四个子空间，列空间与左零空间为正交补，为 m 维空间的子空间，所以将 b 投影到 A 的列空间之中，实际是将 b 分解为两个向量，其中 p 向量在 A 列空间之中，而 e 则在左零空间之中，而将 b 投影到左零空间的矩阵为 $I - P$ 为将其投影到左零空间的投影矩阵。

从 x 解的形式中，我们可以看到，用投影的方法求解线性方程组，需要 $A^T A$ 存在逆矩阵，而其存在逆矩阵的条件就是 A 是列满秩的, 这就是该方法只能用于情形 2 无解的原因。应用投影矩阵求方程组最优解的方法，常用于 “最小二乘法” 拟合曲线。

2 方阵行列式特征值对角化

以下三个性质定义了行列式：

1. $det(I) = 1$
2. 如果交换行列式的两行，行列式的数值会反号。
3. a）如果矩阵某行乘以 t, 则行列式的值要乘上 t。b）行列式是 “矩阵的行” 的线性函数。

从以上三个性质可以推导出下面七条性质：

4. 如果矩阵的两行完全相同，则它的行列式为 0。

5. 从矩阵的某行 k 减去某一行 i 的倍数，并不改变行列式的数值。
6. 如果矩阵 A 的某一行都是 0，则其行列式为 0。
7. 三角阵行列式的值等于其对角线上数值（主元）的乘积。
8. 当且仅当矩阵 A 为奇异矩阵时，其行列式为 0。
9. $det(AB) = det(A)det(B)$.
10. $det(A^T) = det(A)$.

从性质 1，2，3 可以推出 **行列式公式** (Formula for the determinant)：

通过性质 3 对 n 阶矩阵进行拆分，我们可以得到所有只包含 n 个非零元素的行列式，对于二阶行列式，我们从一个拆分为两个，然后拆分为四个。对于三阶方阵，则从一个拆分成三个，然后拆分成九个，最后拆分为 27 个。然而，这些行列式中有很大一部分为 0。

每一个拆分出来的非 0 行列式都是在每行每列只有一个元素，就如同置换矩阵的元素分布，利用性质 3 可以将元素从行列式中提取出来，而置换矩阵的行列式值为 1，或 -1，因此可以给出行列式公式；对于 n 阶方阵，其非 0 行列式的元素个数为 $n!$。

$$det(A) = \sum_{n!} \pm a_{1\alpha} a_{2\beta} ... a_{n\omega}$$

将上面的行列式公式把某一行的元素提取，例如 $a_{11}, a_{12} ...$，则每个元素的系数即为 **代数余子式**，是一个低阶行列式的值，这个低阶行列式是由原矩阵去掉 a_{1j} 所在行和列组成的。

对矩阵中的任意元素 a_{ij} 而言，其代数余子式 (cofactor) C_{ij} 就是矩阵的行列式的公式中 a_{ij} 的系数。C_{ij} 等于原矩阵移除第 i 行，第 j 列后剩余元素组成的 $n-1$ 矩阵的行列式数值乘以 $(-1)^{i+j}$

对于 n 阶方阵，其行列式的代数余子式公式为（按第一行展开）：

$$det(A) = a_{11}C_{11} + a_{12}C_{12} + \cdots + a_{1n}C_{1n}$$

然后实际上对于行列式的求解，消元法更简单高效。

利用行列式以及其伴随矩阵，我们可以得到逆矩阵的公式 $\mathbf{AC^T} = det(\mathbf{A})\mathbf{I}$:

$$\mathbf{AC}^T = \begin{bmatrix} a_{11} & ... & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & ... & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{11} & ... & C_{n1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{n1} & ... & C_{nn} \end{bmatrix}$$

从上式中可以看到对角线上的元素就是行列式按行展开的公式，其值就是行列式 λ，而对于其它元素，例如第二行第一列的元素值，则相当于用 A 的第二行替代第一行得到矩阵 $\mathbf{A}_s$ 的行列式，而由于其有两行相同所以其行列式的值为 0。

通过逆矩阵的公式，我们可以推出 **克莱姆法则**（Cramer's Rule for $\mathbf{x} = \mathbf{A^{-1}b}$）：

对于可逆矩阵 A，方程 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 必然有解 $\mathbf{x} = \mathbf{A^{-1}b}$，将逆矩阵的公式代入其中有：$\mathbf{x} = \mathbf{A^{-1}b} = \frac{\mathbf{C^Tb}}{det(\mathbf{A})}$。

将 C^T 每一行视为一个行向量 $\mathbf{c}_j$，观测该式子可以看到：$\mathbf{x}$ 的每个分量 $x_j = \frac{\mathbf{c}_j\mathbf{b}}{det(\mathbf{A})}$。而 $\mathbf{c}_j$ 实际上是 A 矩阵第 j 列的代数余子式，所以 $\mathbf{c}_j\mathbf{b}$ 可以视为将 A 的第 j 列替换为 b 得到 B_j，然后按该列展开得到的 B_j 行列式的值; 所以 $\mathbf{x_j} = \frac{det(\mathbf{B}_j)}{det(\mathbf{A})}$。

最后，行列式在几何上代表了该矩阵向量构成的平行六面体的体积。

将左乘一个矩阵看作对向量的变换，那么，如果一个变换不改变向量 x 的方向该向量称为 **特征向量**，那么有：

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

上式的含义就是一个矩阵操作，只对一个向量进行放缩，如果上式存在非零解，那么

$$det(A - \lambda I) = 0$$

对于任意的 $n \cdot n$ 矩阵，其具有 n 个特征值（可能存在重复的特征值），其和等于矩阵对角线元素之和，称为迹。其乘积等于矩阵的行列式。

对于对称矩阵而言，其永远具有实数的特征值，并且其特征向量正交；而对于反对称矩阵而言，具有纯虚数的特征值。

如果矩阵没有重特征值，那么其一定有 n 个线性无关的特征向量；如果有重特征值，那么它可能有 n 个线性无关的特征向量，也可能没有。

如果矩阵 A 具有 n 个线性无关的的特征向量，将它们作为列向量可以组成一个可逆方阵 S，并且有：

$$
\begin{aligned}
A\mathbf{S} &= A\begin{bmatrix}\mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & ... & \mathbf{x}_n\end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix}\lambda_1\mathbf{x}_1 & \lambda_2\mathbf{x}_2 & ... & \lambda_n\mathbf{x}_n\end{bmatrix} \\
&= \mathbf{S}\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 & ... & 0 \\ 0 & \lambda_2 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & ... & 0 & \lambda_n\end{bmatrix} \\
&= \mathbf{S}\Lambda
\end{aligned}
$$

那么有:

$$A = S\Lambda S^{-1}$$

特征值给矩阵的幂计算提供了方法:

如果 $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$, 则有 $A^2\mathbf{x} = \lambda A\mathbf{x} = \lambda^2\mathbf{x}$, 说明矩阵 A^2 有着和 A 一样的特征向量，而特征值为 λ^2。写成对角化的形式则有: $A^2 = S\Lambda S^{-1}S\Lambda S^{-1}$。同样的处理可以得到 $A^k = S\Lambda^k S^{-1}$。这说明 A^k 和 A 有相同的特征向量，而特征值为 λ^k。

3 矩阵分解

3.1 $A = LU$

LU 分解将矩阵分解为一个下三角以及上三角矩阵乘积；实际上，对于线性方程组进行高斯消元时，在不设计行交换时，每一次的行变换都可以用一个下三角矩阵表示，那么其乘积以及逆都是下三角矩阵 L，该下三角矩阵，的每一个系数记录了每次操作的消元系数。

$$\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 \\ a_{21} & 1 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & 1\end{bmatrix}$$

如上矩阵表示在对一列进行消元时，进行的操作 $r_2 = r_2 + a_{21}r_1$, $r_3 = a_{31}r_1$；在第二列进行消元时，$r_3 = a_{32}r_2$

3.2 $A = P\Lambda P^{-1}$

考虑方阵 A，A 代表了一个空间变换，空间的变换只对该矩阵的特征向量起到缩放作用。那么 A 所代表的空间变换，我们可以考虑先把向量 x 转化为用矩阵 A 的特征向量构成的基底表示，即 $Q^{-1}x$，其中 Q 为方阵 A 的特征向量构成的矩阵（为什么是 Q^{-1} 而不是 Q? 因为特征向量是从原矩阵求解而来，它们都是在同一视角下的表示，要变化到特征向量的视角则是其逆 Q^{-1})。那么矩阵 A 对这个新的 x，即 $Q^{-1}x$ 的作用就仅仅是缩放（在每个维度上进行缩放)，这个缩放用一个新的矩阵 Σ 表示，其为对角矩阵，对角线上即是对应的特征值，那么现在整个变化记为 $\Sigma Q^{-1}x$。完成变化后，我们回到原来的基的视角，即左乘 Q，整个变化即如下：

$$Ax = Q\Sigma Q^{-1}x \longrightarrow A = Q\Sigma Q^{-1}$$

3.3 $A = U\Sigma V^*$

考虑向量 $\begin{bmatrix} V_1 & V_2 \end{bmatrix}$，其为一组正交的向量，如果其在经历空间变换 M 以后仍然映射为一组正交的向量 $\begin{bmatrix} U_1 & U_2 \end{bmatrix}$。那么，我们直接在向量 $\begin{bmatrix} U_1 & U_2 \end{bmatrix}$ 的方向上选择一组基 $\begin{bmatrix} u_1 & u_2 \end{bmatrix}$，那么向量 $\begin{bmatrix} v_1 & v_2 \end{bmatrix}$，在经历空间变化以后，在基 $\begin{bmatrix} u_1 & u_2 \end{bmatrix}$ 上的表示为，$\begin{bmatrix} u_1 & u_2 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{bmatrix}$。即：

$$M[v_1, v_2] = [u_1, u_2] * \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{bmatrix} \rightarrow MV = U\Sigma \rightarrow M = U\Sigma V^T$$

如此，对于奇异值分解，我们有如下的直观理解：对于矩阵 M, 其对一组向量 V 在变换以后仍然为正交的向量。在进行变换的时候考虑直接转换到向量 V 的视角之下，然后进行缩放 Σ，以及其它变换 E（旋转，投影)，最后变换回原来的视角。即：

$$M = VE\Sigma V^T \rightarrow M = U\Sigma V^T$$

可以看到奇异值与特征值分解的区别在于，选择的视角不同。当选择特征向量视角时，变换只会有缩放即 Σ 变换，当选择任意的正交向量视角时，变换不仅包含缩放还含有旋转以及投影等即 $E\Sigma$。

需要注意的是，虽然对于特征分解以及奇异值分解从视角转换的角度去解释了。但是，矩阵分解同样可以从空间变换的角度理解。例如对于奇异值分解有如下解释：

第一个变换 V^T 将单位正交向量 v_1, v_2 转到水平和垂直方向、Σ 相当于对 v_1, v_2 进行放缩、U 将放缩后的向量旋转到最后的位置。