Linear Algebra





少数据隐含



基本概念

向量 | 既有大小,又有方向的量. 列向量 | $x \in \mathbb{R}^{n \times 1}, x = [x_1, x_2, \cdots, x_n]^T$ 行向量 | $x^T \in \mathbb{R}^{1 \times n}, x^T = [x_1, x_2, \cdots, x_n]$ 矩阵 | $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 元素记为 a_{ij} .

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1^T \\ a_2^T \\ \vdots \\ a_m^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix}.$$

如果m=n, 那么矩阵A称为**方阵**.

方阵的行列式 | 方阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 的行列式为 $\det(A) : \mathbb{R}^{n \times n} \to \mathbb{R}$,按行展开为

$$\det(A) = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1j} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{\underline{i-1}1} & \cdots & a_{\underline{i-1}j} & \cdots & a_{\underline{i-1}n} \\ a_{i1} & \cdots & a_{ij} & \cdots & a_{in} \\ a_{\underline{i+1}1} & \cdots & a_{\underline{i+1}j} & \cdots & a_{\underline{i+1}n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nj} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} = (-1)^{i-1} \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1j} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{\underline{i-1}1} & \cdots & a_{\underline{i-1}j} & \cdots & a_{\underline{i-1}n} \\ a_{\underline{i+1}1} & \cdots & a_{\underline{i+1}j} & \cdots & a_{\underline{i+1}n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nj} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}$$
$$= (-1)^{i-1} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} (-1)^{1+j} M_{ij} = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} (-1)^{i+j} M_{ij} = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} A_{ij}.$$

其中 M_{ij} 为 a_{ij} 的余子式, A_{ij} 为 a_{ij} 的代数余子式. 行列式为零的方阵为奇异方阵.

矩阵的运算

加法 | 行、列数相同的矩阵才能相加,加和结果的行列数保持不变,例如A+B

$$\begin{bmatrix}
a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\
a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn}
\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}
b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\
b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mn}
\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{12} & \cdots & a_{1n} + b_{1n} \\
a_{21} + b_{21} & a_{22} + b_{22} & \cdots & a_{2n} + b_{2n} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
a_{m1} + b_{m1} & a_{m2} + b_{m2} & \cdots & a_{mn} + b_{mn}
\end{bmatrix}$$

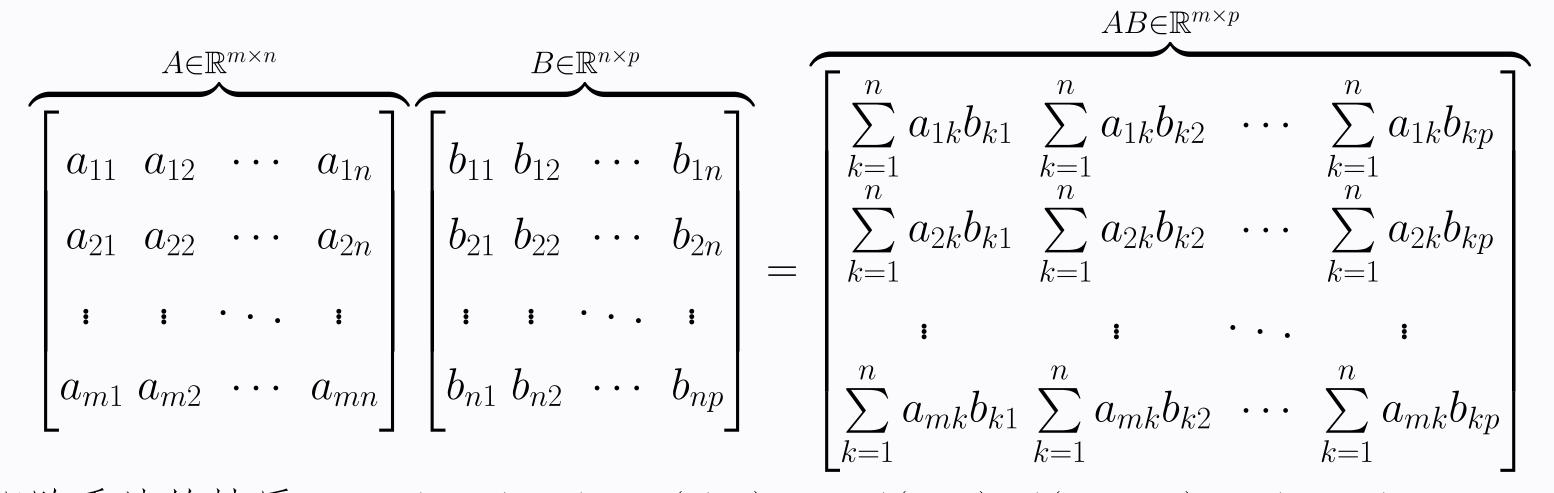
矩阵加法的性质: \checkmark A+B=B+A, \checkmark (A+B)+C=A+(B+C)

数乘 $m \times n$ 矩阵A与任意数 λ 相乘等价于矩阵的每个元素与 λ 相乘

$$\lambda \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda a_{11} & \lambda a_{12} & \cdots & \lambda a_{1n} \\ \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \cdots & \lambda a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda a_{m1} & \lambda a_{m2} & \cdots & \lambda a_{mn} \end{bmatrix}.$$

数乘性质: \checkmark $(c_1A+c_1B)=c_1A+c_2B$ \checkmark c(A+B)=cA+cB \checkmark $c_1(c_2A)=(c_1c_2)A$

乘法 | 任意两个矩阵不能随意相乘,相乘的条件为A的行数等于B的列数.



矩阵乘法的性质: $\checkmark AB \neq BA \checkmark (AB)C = A(BC), A(B+C) = Ab + AC$ 内积 | 给定 $x, y \in \mathbb{R}^{n \times 1}, x^T y$ 为一个标量,称为向量的内积或点积,记为 $\langle x, y \rangle$.

$$x^T y = y^T x = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 & y_2 & \dots & y_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}.$$

矩阵与向量乘积 | 给定 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, x \in \mathbb{R}^{n \times 1}$, 那么乘积为 $y = Ax \in \mathbb{R}^{m \times 1}$. \checkmark 如果将矩阵A写成**列向量**的形式,y表示为

$$y = Ax = \begin{bmatrix} a_1 \ a_2 \cdots a_n \end{bmatrix} \begin{vmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 \end{bmatrix} x_1 + \begin{bmatrix} a_2 \end{bmatrix} x_2 + \cdots + \begin{bmatrix} a_n \end{bmatrix} x_n.$$

✓ 如果将矩阵A写成**行向量**的形式,y表示为

$$y=egin{bmatrix} a_1^T \ a_2^T \ a_m^T \end{bmatrix} & egin{bmatrix} a_1^T x \ a_2^T x \ a_m^T \end{bmatrix} \ .$$

矩阵的操作以及性质

转置 | 将 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 的行和列互换得到新矩阵,记为 $A^T \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $(A_{ij}) = (A^T)_{ji}$. 性质: \checkmark $(A^T)^T = A \checkmark$ $(AB)^T = B^TA^T \checkmark$ $(A+B)^T = A^T + B^T$ 求逆 | 方阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 的逆矩阵,记为 A^{-1} ,需要满足 $A^{-1}A = AA^{-1}$. 矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 可逆的**充要条件**: A为方阵,且 $\det(A) = 0$. 如果 $\det(A) \neq 0$,那么 $A^{-1} = \frac{1}{\det(A)}A^*$, $(A^*)_{ij}$ 为 $(A)_{ji}$ 的代数余子式 A_{ji} . A^* 称为A的**伴随方阵**. 性质: (给定 $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 均为非奇异方阵)

行列式的性质 | 单位阵的行列式为1, det(I) = 1.

 $\checkmark t \in \mathbb{R}, A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \det(tA) = t\det(A).$

 $\checkmark A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \det(A) = \det(A^T).$

 $\checkmark A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}, \det(AB) = \det(A)\det(B).$

✓ 当且仅当A为奇异方阵时, $\det(A) = 0$.

✓ 当A为非奇异方阵时, $(\det(A))^{-1} = 1/\det(A)$.

矩阵的迹 | 方阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 的迹,记为 $\mathrm{Tr}(A)$,指的是矩阵对角线位置的元素之和 $\mathrm{Tr}(A) = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}$.

 $\checkmark \operatorname{Tr}(A) = \operatorname{Tr}(A^T) \checkmark \operatorname{Tr}(AB) = \operatorname{Tr}(BA).$

 $\checkmark \operatorname{Tr}(A+B) = \operatorname{Tr}(B+A).$

 $\checkmark \operatorname{Tr}(ABC) = \operatorname{Tr}(CAB) = \operatorname{Tr}(BCA).$

范数 | 一个衡量向量或者矩阵中元素大小的量

✓ 常用的向量范数包括

 ℓ_1 $||x||_1 = \sum_i |x_i|$ 绝对值之和 ℓ_2 $||x||_2 = \sqrt{\sum_i x_i^2}$ 平方和的平方根 $\ell_p ||x||_p = \left(\sum_i |x_i|^p\right)^{1/p}$ 绝对值p次方和的1/p次幂

给定 $a \in \mathbb{R}^{n \times 1}$, $||a||_2 = 1$, a称为**归一化**向量.

✓ 常用的矩阵范数包括

 $\ell_1 \ ||A||_1 = \max_j \sum_i |a_{ij}|$ 列向量元素绝对值和最大值 $\ell_\infty \ ||A||_\infty = \max_i \sum_j |a_{ij}|$ 行向量元素绝对值和最大值 $\ell_\mathcal{F} \ ||A||_\mathcal{F} = \sqrt{\sum_i \sum_i a_{ij}^2}$ 元素平方和的平方根

正交|给定 $a,b \in \mathbb{R}^{n\times 1}$,如果 $x^Ty = 0$,那么向量a,b正交.对于方阵 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 来说,如果A的列向量两两正交,且 ℓ_2 范数为1,那么A为正交阵,数学描述为 $A^TA = I = AA^T$.

正定性 | 对于 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \forall w \in \mathbb{R}^{n \times 1}$, 满足

 $w^T A w > 0$ A为正定矩阵 $w^T A w \geq 0$ A为半正定矩阵

线性无关 | 给定 $\{x_1, x_2, \cdots, x_m\}$ 为 $n \times 1$ 的一组向量,如果 $\forall \lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m \in \mathbb{R}$,

 $\lambda_1 x_1 + \cdots + \lambda_m x_m = \mathbf{0} \iff \lambda_1 = \cdots = \lambda_m = 0.$

一个成为数据科学家的理由

Linear Algebra





数据隐含

那么,向量组 $\{x_1,\cdots,x_m\}$ 线性无关.从相反 的角度来看,如果存在不完全为零的一组数 列 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m$, 使得

$$\lambda_1 x_1 + \dots + \lambda_m x_m = \mathbf{0}.$$

那么 $\{x_1,\cdots,x_m\}$ 线性相关.

极大线性无关组 给定 $S \in \mathbb{R}^{m \times 1}$, S的子 集 $Q = \{x_1, x_2, \cdots, x_m\}$ 线性无关. 如果将S中的 任一向量 x_q 加入Q中所得出的新向量组线性相关, 那么Q称为S的最大线性无关组.

| 基| 给定n维向量空间的一组线性无关向 量 $\{\alpha_1,\dots,\alpha_n\}$, 向量空间中的任一限量 β 都可 以唯一写为下列线性组合的形式

 $\beta = x_1 \alpha_1 + x_2 \alpha_2 + \dots + x_n \alpha_n.$

 $\{\alpha_1,\cdots,\alpha_n\}$ 为 向 量 空 间 中 基, (x_1, x_2, \dots, x_n) 为对应的 β 的坐标.

秩 任一向量组S的一组极大线性无关组所包含的 向量个数, 称为向量组的秩.

任一矩阵A的行向量组的秩称为A的行秩;同 理,A的列向量组的秩称为A的**列秩**.

 $\forall A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 矩阵的行秩等于列秩, 称为矩阵的 秩,记为rank(A).

✓ 给定 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \operatorname{rank}(A) \leq \min(m, n),$ 如 果 $\operatorname{rank}(A) = \min(m, n)$, 那么矩阵A为满秩矩阵.

 \checkmark rank $(A) = \operatorname{rank}(A^T)$.

 \checkmark rank $(A + B) \le \operatorname{rank}(A) + \operatorname{rank}(B)$.

 \checkmark rank $(AB) \le \min(\operatorname{rank}(A), \operatorname{rank}(B)).$

空间

线性空间 | 给定非空集合V, 以及数域F, V称 为F上的线性空间,也称为**向量空间**,满足以下条 件, $\forall a, b, c \in V, \lambda, \mu \in F$

 $\mu(\lambda a) = \lambda(\mu a)$ 1a = aa + b = b + a a + (b + c) = (a + b) + c $\lambda(a+b) = \lambda a + \lambda b \qquad (\lambda + \mu)a = \lambda a + \mu a$ 以及V中存在**零向量** p、**负向量** q

 $\exists p \in V, \forall a \in V, p + a = a + p;$ $\forall a \in V, \exists q \in V, a + q = q + a = \mathbf{0}.$

子空间|给定V是数域F上的线性空间,Y是V的非 空子集,如果Y满足以下条件

 $a, b \in Y \Rightarrow a + b \in Y;$

 $a \in Y, \lambda \in F \Rightarrow \lambda \alpha \in Y.$

那么Y是V的子空间.

量空间 $\mathbb{F}^{n\times 1}$ 中生成的空间,称为A的行空间.

列空间 A的列向量组在 $\mathbb{F}^{n\times 1}$ 中生成的空间.

直和 | 给定 Y_1, \dots, Y_k 为线性空间Y的子集, Y = $Y_1 + \cdots + Y_k$, 如果每个 $y \in Y$ 可以分解为

 $y = y_1 + y_2 + \cdots + y_k, y_i \in Y_i, \forall 1 \le i \le k.$ 而且该形式是唯一的,那么称Y是 Y_1, \dots, Y_k 的直 和,记为 $Y_1 \oplus Y_2 \oplus \cdots \oplus Y_k$.

 $\checkmark Y_1 + Y_2 = Y_1 \oplus Y_2 \iff Y_1 \cap Y_2.$

补空间 给定U是V的子空间,若V的子空间W满 $\mathcal{L}U \oplus W = V$, 那么 $W \in \mathcal{L}U$ 在V中的补空间.

零空间 | 矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 的零空间是所有满足以下 条件的向量组成的空间

 $Null(A) = \{ \alpha \in \mathbb{R}^n | A\alpha = 0 \}.$

欧几里得空间 给定V是 \mathbb{R} 上的线性空间,以 及V上的二元实函数, 完成任意向量a,b到实数内 积 $\langle a,b\rangle$ 的映射,并满足以下条件 $\forall a_1,a_2,b\in V,\lambda\in$

 $\langle a_1 + a_2, b \rangle = \langle a_1, b \rangle + \langle a_2, b \rangle \langle \lambda a, b \rangle = \lambda \langle a, b \rangle$ $\langle b, a_1 + a_2 \rangle = \langle b, a_1 \rangle + \langle b, a_2 \rangle \langle b, \lambda a \rangle = \lambda \langle b, a \rangle$ $\langle b, b \rangle > 0, b \neq \mathbf{0}$ $\langle a, b \rangle = \langle b, a \rangle$

则V称为欧几里得空间,简称**欧式空间**.

希尔伯特空间 带有内积的完备向量空间,是有 限维的欧式空间在无限维的推广.

再生核 | 给定K为定义在X上的希尔伯特空间 \mathcal{H} 中 的一个函数, 其满足

> $\forall x \in X, K(y, x) \in \mathcal{H};$ $\forall x \in X, f \in \mathcal{H}, f(x) = \langle f(\cdot), K(\cdot, x) \rangle_{\mathcal{H}}.$

该函数为 \mathcal{H} 的**再生核函数,** \mathcal{H} 是以K(y,x)为再生核 的希尔伯特空间, 称为再生核希尔伯特空间, 英 文缩写为RKHS.

常用矩阵以及线性变换

单位矩阵 | 指的是对角线位置为1, 其他位置均为0 的方阵,记为 $I \in \mathbb{R}^{n \times n}$,数学描述为

$$I_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

性质: $\forall X \in \mathbb{R}^{m \times n}, AI = A = IA.$

对角矩阵 指的是非对角线位置均为0的矩阵,记 为 $\operatorname{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_n)$.

✓ 单位矩阵 $I = diag(1, 1, \dots, 1)$.

对称矩阵 | 指的是满足 $A = A^T$ 的方阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

✓ $\forall A \in \mathbb{R}^{n \times b}$, $A + A^T$ 是对称矩阵.

二次型 | 给定 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}, x \in \mathbb{R}^{n \times 1}$,标量 $x^T A x$ 称 为二次型,数学描述为 $x^T A x = \sum \sum A_{ij} x_i x_j$.

特征向量 | 给定 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$,如果 $x \in \mathbb{C}^{n \times 1}$ 满足

 $Ax = \lambda x, x \neq 0,$

那么 λ 为A的**特征值**,x为相应的特征向量.

线性映射 | 将任意两个向量空间 $\mathbb{R}^{m\times 1}$, $\mathbb{R}^{n\times 1}$ 通过矩 阵乘法完成的映射

$$\mathcal{A}: \mathbb{R}^{m \times 1} \to \mathbb{R}^{n \times 1}, X = AX.$$

称为线性映射. 更为正式的定义为W,V为数域R上 的线性空间, $A:W\to V$ 为空间之间的映射. A为 线性映射需要满足 $\forall a_1, a_2 \in W, \lambda \in \mathbb{R}$

$$\mathcal{A}(a_1 + a_2) = \mathcal{A}(a_1) + \mathcal{A}(a_2);$$

 $\mathcal{A}(\lambda a) = \lambda \mathcal{A}, \forall a \in W.$

性质: \checkmark $\mathcal{A}(\mathbf{0}_W) = \mathbf{0}_V \checkmark \mathcal{A}(-b) = -\mathcal{A}(b)$ ✓ 若 $b_1, \cdots b_t$ 线性相关, $A(b_1), \cdots A(b_t)$ 线性相关 线性变换 给定V是 \mathbb{R} 上的有限维向量空间,那 ΔV 到自身的映射 $\mathcal{A}:V\to V$ 称为线性变换.

✓ 线性变换也是线性映射 $A: W \rightarrow V, W = V$.

矩阵分解

特征值分解 | 给定矩阵A有特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_k$, 以及对应的线性无关的特征向量 x_1, \cdots, x_k . 令

$$V = \begin{bmatrix} x_1 \ x_2 \cdots x_k \end{bmatrix} U = \operatorname{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_k)$$

因此,则有

$$AV = \begin{bmatrix} \lambda_1 x_{11} & \lambda_2 x_{21} & \cdots & \lambda_k x_{k1} \\ \lambda_1 x_{12} & \lambda_2 x_{22} & \cdots & \lambda_k x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_1 x_{1k} & \lambda_2 x_{2k} & \cdots & \lambda_k x_{kk} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{k1} \\ x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{1k} & x_{2k} & \cdots & x_{kk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_k \end{bmatrix} = VU.$$

 $A = VUV^{-1}$ 称为特征值分解.

SVD分解 $\forall A \in \mathbb{R}^{m \times n}, A = UDV^T.$

其中 $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 为正交方阵, U的列向量为 AA^T 的 特征向量; $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 为正交方阵, U的列向量 为 A^TA 的特征向量; D为 $m \times n$ 的对角矩阵, 形如

$$D = \operatorname{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_r, 0, \cdots, 0)$$

 $\lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \cdots \ge \lambda_r > 0, r = \operatorname{rank}(A)$

 $\lambda_1, \cdots \lambda_r$ 是 $A^T A$ 的特征值的平方根,称为矩 阵A的**奇异值**.

LU分解 $\forall A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 非奇异方阵A可以分解为

$$PA = LU$$
,

其中P为置换矩阵,L为下三角矩阵,主对角位置 的元素取值为1, U为上三角矩阵.

QR分解 $\forall A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 矩阵A可以分解为

 $A = QR, Q \in \mathbb{R}^{m \times m}, R \in \mathbb{R}^{m \times n},$

其中Q为正交矩阵,R为上三角矩阵.

非负矩阵分解 $\forall A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 非负矩阵A分解为

 $A \approx WH, W \in \mathbb{R}^{m \times k}, H \in \mathbb{R}^{k \times n},$

其中W为非负的基矩阵,H为非负的系数矩 阵,H的列向量为A投影到W上获得的向量.