



下载APP



03 | 矩阵：为什么说矩阵是线性方程组的另一种表达？

2020-08-03 朱维刚

重学线性代数

[进入课程 >](#)**讲述：朱维刚**

时长 16:28 大小 15.09M

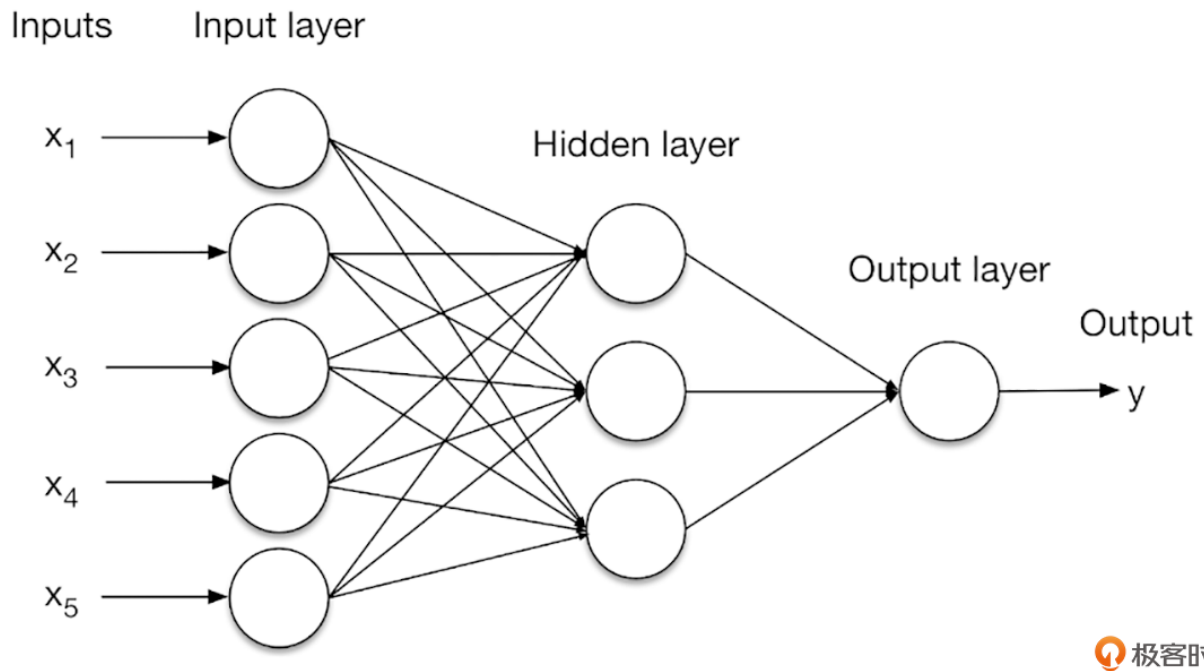


你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我们要讲的内容是“矩阵”。

在开始学习之前，我想先问你个问题，你觉得，学习矩阵有什么用呢？你可以先自己想一想。之后我们讲任何一个知识的时候，你都可以从这个角度出发，自己先思考一下，这样有助于你对所学内容理解得更深刻。

对于刚才那个问题，我的答案很简单，就一句话，从我们程序员的角度去理解的话，**矩阵可以极大地提高计算机的运算效率**。怎么说呢？我给你举一个例子。在机器学习中（特别是深度学习，或者更具体一点，神经网络），并行计算是非常昂贵的。





上图是一个典型的神经网络架构，在这时候，矩阵就能发挥用武之地了，计算 H 隐藏层输出的公式是： $H = f(W \cdot x + b)$ ，其中 W 是权重矩阵， f 是激活函数， b 是偏差， x 是输入层矩阵。而这个计算过程就叫做**向量化**（Vectorization），这也是 GPU 在深度学习中非常重要的原因，因为 GPU 非常擅长做类似矩阵乘之类的运算。

$$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

$$W = \begin{bmatrix} w_1 & w_2 \\ w_4 & w_5 \\ x_3 & w_6 \end{bmatrix}$$

$$H = f \left(\begin{bmatrix} w_1 & w_2 \\ w_4 & w_5 \\ x_3 & w_6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + b \right)$$

不过，矩阵也不仅仅局限于神经网络的应用，同时它也可以用在计算机图形图像的应用中，比如，三维物体从取景到屏幕的显示，就需要经历一系列的空间变换，才能生成二维图像显示在显示器上。在这个计算过程中，我们都需要用到矩阵。

矩阵的基本概念

$$ax + by = c$$

$$\begin{cases} a_1x + b_1y + C_1 = 0 \\ a_2x + b_2y + C_2 = 0 \end{cases}$$

[illegible]
$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

3/16

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} & b_m \end{bmatrix}$$

这样我们就得到了 A 矩阵的增广矩阵 \tilde{A} ，可以表示为 (A, B) ，这里的 B 表示的是方程组常数项所构成的列向量，也就是 $m \times 1$ 的 m 行 1 列矩阵：

$$B = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_m \end{bmatrix}$$

如果设 X 为 $n \times 1$ 的 n 行 1 列矩阵：

$$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}$$

那么线性方程组 A ，就可以表示为 $AX = B$ 的矩阵形式。如果我们再换一种表示形式，设： $a_1, a_2, \dots, a_n, \beta$ 表示增广矩阵 \tilde{A} 的列向量，则线性方程组 A 又可表示为 $a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n = \beta$ 。

线性方程组的矩阵和向量形式都是线性方程组的其他表达形式。在工作中，你可以用它们来简化求解，甚至可以提升计算效率，就如之前提到的神经网络的隐藏层的输出计算、图形图像的三维空间变换。在数学中也是同样的，你可以经常运用它们来简化求解。具体线性方程组求解的内容比较多，我们下一节课再来详细讲解求解过程。

通过前面的讲解，我相信你对矩阵有了一定的了解，现在我们再回头来看看矩阵的定义吧。

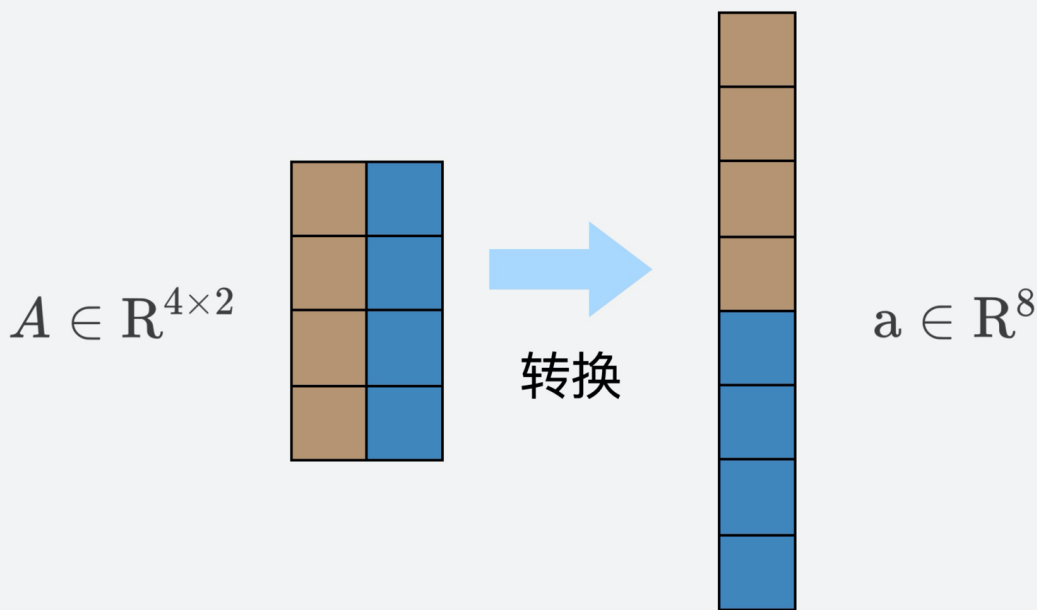
矩阵的定义是：一个 (m, n) 矩阵 A ，是由 $m \times n$ 个元素组成， m 和 n 是实数，其中元素 $a_{ij}, i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n$ 按 m 行 n 列的矩形排布方式后可以形成矩阵 A ：

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

其中 a_{ij} 属于实数 R ，按通常的惯例， $(1, n)$ 矩阵叫做行， $(m, 1)$ 矩阵叫做列，这些特殊的矩阵叫做行或列向量。

定义完矩阵后，我接着讲一个比较有趣的概念，矩阵转换（Matrix transformation）。矩阵转换经常被用在计算机图形图像的转换中，比如，一张彩色图片从 RGB 角度来说的是三维的，如果要转换成灰度图片，也就是一维图片，那就要做矩阵转换。

我们来看一下矩阵转换的过程。设 $R^{m \times n}$ 是实数矩阵 (m, n) 的集合， $A \in R^{m \times n}$ 可以表示成另一种形式 $a \in R^{mn}$ 。我们把矩阵的 n 列堆叠成一个长向量后完成转换。这个转换也叫做 reshape，其实就是重新调整原矩阵的行数、列数和维数，但是元素个数不变。



矩阵的运算

了解了矩阵的基本定义后，我们才能进入矩阵的运算环节，就是矩阵的加和乘。

加运算很简单，两个矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ， $B \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 的加运算其实就是矩阵各自元素的加。

$$A + B = \begin{bmatrix} a_{11} + b_{11} & \dots & a_{1n} + b_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} + b_{m1} & \dots & a_{mn} + b_{mn} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

我推荐你使用 NumPy 的 `einsum` 来高效地做这类运算，因为它在速度和内存效率方面通常可以超越我们常见的 `array` 函数。

```
1 C = np.einsum('il, lj', A, B)
```

[复制代码](#)

接下来，我们一起来看看矩阵的乘。这里你需要注意，矩阵的乘和通常意义上“数之间的乘”不同，矩阵的乘有多种类型，这里我讲三种最普遍，也是在各领域里用得最多的矩阵乘。

1. 普通矩阵乘

普通矩阵乘是应用最广泛的矩阵乘，两个矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ， $B \in \mathbb{R}^{n \times k}$ ，普通矩阵乘可以表示为 $C = AB \in \mathbb{R}^{m \times k}$ ， C 中元素的计算规则是矩阵 A 、 B 对应两两元素乘积之和。

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj}, i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, k$$

我们举例来说明。 C 的第一个元素 $c_{11} = a_{11} \times b_{11} + a_{12} \times b_{21} + a_{13} \times b_{31} = 1 \times 1 + 2 \times 2 + 3 \times 3$ 。

$$C = AB = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 5 \\ 3 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \times 1 + 2 \times 2 + 3 \times 3 & 1 \times 4 + 2 \times 5 + 3 \times 6 \\ 4 \times 1 + 5 \times 2 + 6 \times 3 & 4 \times 4 + 5 \times 5 + 6 \times 6 \end{bmatrix}$$

这里需要特别注意的是，只有相邻阶数匹配的矩阵才能相乘，例如，一个 $n \times k$ 矩阵 A 和一个 $k \times m$ 矩阵 B 相乘，最后得出 $n \times m$ 矩阵 C ，而这里的 k 就是相邻阶数。

$$AB = C$$

但反过来 B 和 A 相乘就不行了，因为相邻阶数 m 不等于 n 。

2. 哈达玛积

哈达玛积理解起来就很简单了，就是矩阵各对应元素的乘积， $c_{ij} = a_{ij} \times b_{ij}$ 。举个例子：

$$C = A * B = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 4 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 * 1 & 2 * 4 \\ 4 * 2 & 5 * 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 8 \\ 8 & 25 \end{bmatrix}$$

哈达玛积其实在数学中不常看到，不过，在编程中哈达玛积非常有用，因为它可以用来同时计算多组数据的乘积，计算效率很高。

3. 克罗内克积

克罗内克积是以德国数学家利奥波德·克罗内克 (Leopold Kronecker) 的名字命名的。它可以应用在解线性矩阵方程和图像处理方面，当然从更时髦的角度说，它还能用在量子信息领域，我们也称之为直积或张量积。

和普通矩阵乘和哈达玛积不同的是，克罗内克积是两个任意大小矩阵间的运算，表示为 $A \times B$ ，如果 A 是一个 $m \times n$ 的矩阵，而 B 是一个 $p \times q$ 的矩阵，克罗内克积则是一个 $mp \times nq$ 的矩阵。

接下来我们需要定义一个**在矩阵的乘法中起着特殊作用的矩阵**，它就是**单位矩阵**。高等代数中，在求解相应的矩阵时，若添加单位矩阵，通过初等变换进行求解，往往可以使问题变得简单。按照百度百科的解释，单位矩阵如同数的乘法中的 1，这种矩阵就被称为单位矩阵。它是个方阵，从左上角到右下角的对角线，也就是主对角线上的元素均为 1，除此以外全都为 0。

在线性代数中，大小为 n 的单位矩阵就是在主对角线上均为 1，而其他地方都是 0 的 $n \times n$ 的方阵，它用 I_n 表示，表达时为了方便可以忽略阶数，直接用 I 来表示：

$$I_1 = [1], I_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, I_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \dots, I_n = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

矩阵的性质

在了解了矩阵加和乘，以及单位矩阵后，我们是时候来看一看矩阵的性质了。了解矩阵的性质是进行矩阵计算的前提，就像我们小时候学加减乘除四则运算法则时那样。所以，这块内容对你来说应该不难，你作为了解就好，重点是之后的运算。

1. 结合律

任意实数 $m \times n$ 矩阵 A ， $n \times p$ 矩阵 B ， $p \times q$ 矩阵 C 之间相乘，满足结合律 $(AB)C = A(BC)$ 。这个很好理解，我就不多说了。

$$\forall A \in R^{m \times n}, B \in R^{n \times p}, C \in R^{p \times q} : (AB)C = A(BC)$$

2. 分配律

任意实数 $m \times n$ 矩阵 A 和 B ， $n \times p$ 矩阵 C 和 D 之间相乘满足分配律 $(A + B)C = AC + BC$ ， $A(C + D) = AC + AD$ 。

$$\forall A, B \in R^{m \times n}, C, D \in R^{n \times p} : (A + B)C = AC + BC, A(C + D) = AC + AD$$

3. 单位矩阵乘

任意实数 $m \times n$ 矩阵 A 和单位矩阵之间的乘，等于它本身 A 。

$$\forall A \in R^{m \times n} : I_m A = A I_n = A$$

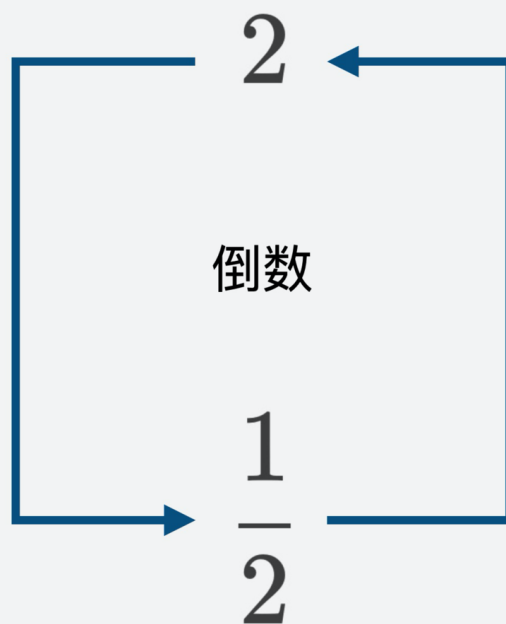
注意，这里的行和列不同， $m \neq n$ 意味着，根据矩阵乘，左乘和右乘单位矩阵也不同，也就是 $I_m \neq I_n$ 。

逆矩阵与转置矩阵

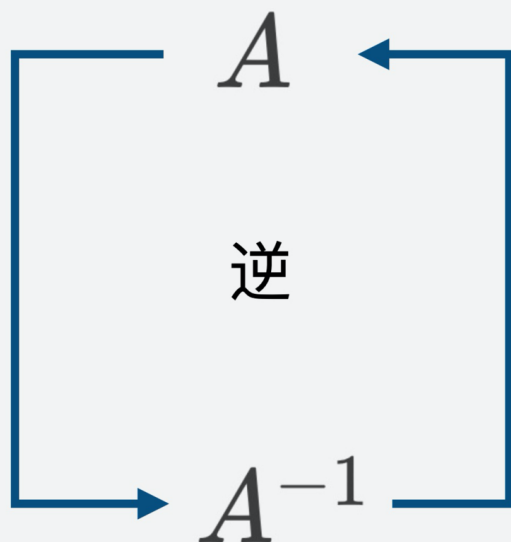
了解矩阵基本概念、运算，以及性质后，我来讲一讲矩阵应用中的两个核心内容——逆矩阵和转置矩阵。逆矩阵和转置矩阵在实际应用中大有用处，比如：坐标系中的图形变换运算。我们先来看下什么是逆矩阵。

逆矩阵

下面这个图你应该非常熟悉了，图中表现的是数字的倒数，2 的倒数是 $\frac{1}{2}$ ， $\frac{1}{2}$ 的倒数是 2。



其实逆矩阵也有着类似的概念，只不过是写法不一样，我们会把逆矩阵写成 A^{-1} 。那为什么不是 $\frac{1}{A}$ 呢？那是因为数字 1 无法被矩阵除。



极客时间

我们知道，2 乘以它的倒数 $\frac{1}{2}$ 等于 1。同样的道理， A 乘以它的逆矩阵 A^{-1} 就等于单位矩阵，即 $A \times A^{-1} = I$ (I 即单位矩阵)，反过来也一样， $A^{-1} \times A = I$ 。

为方便你理解，我用一个 2×2 矩阵 A 来解释一下逆矩阵的算法。首先，我们交换 a_{11} 和 a_{22} 的位置，然后在 a_{12} 和 a_{21} 前加上负号，最后除以行列式 $a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$ 。

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}} \begin{bmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{bmatrix}$$

那我们该如何验证这不是正解呢？

方法其实很简单，记得刚才的公式就行， $A \times A^{-1} = I$ 。现在我们就代入公式来验证一下， A 和它的逆矩阵相乘，通过刚才的算法最终得出的结果是单位矩阵。

$$A \times A^{-1} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{a_{22}}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}} & \frac{-a_{12}}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}} \\ \frac{-a_{21}}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}} & \frac{a_{11}}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}} \end{bmatrix}$$

这里有一点需要特别说明，不是每一个矩阵都是可逆的。如果一个矩阵是可逆的，那这个矩阵我们叫做**非奇异矩阵**，如果一个矩阵是不可逆的，那这个矩阵我们就叫做**奇异矩阵**，而且如果一个矩阵可逆，那它的逆矩阵必然是唯一的。

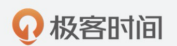
还记得行列式 $a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$ 吗？如果我们要证明矩阵是可逆的，只要证明行列式不等于零就行。更高阶的逆矩阵的算法也是一样的原理。

最后，我想通过一个现实生活中的案例来让你更多地了解逆矩阵。

一个旅游团由孩子和大人组成，去程他们一起做大巴，每个孩子的票价 3 元，大人票价 3.2 元，总共花费 118.4 元。回程一起做火车，每个孩子的票价 3.5 元，大人票价 3.6 元，总共花费 135.2 元。请问旅游团里有多少小孩和大人？

首先，我们设置一些矩阵，组成线性方程 $XA = B$ 。

$$\begin{array}{cc} \text{小孩} & \text{大人} \\ \left[\begin{array}{cc} x_1 & x_2 \end{array} \right] & \left[\begin{array}{cc} 3 & 3.5 \\ 3.2 & 3.6 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{cc} 118.4 & 135.2 \end{array} \right] \end{array}$$



要解 X ，我们就要先计算 A 的逆矩阵 A^{-1} ：

$$A^{-1} = \left[\begin{array}{cc} 3 & 3.5 \\ 3.2 & 3.6 \end{array} \right]^{-1} = \frac{1}{3 \times 3.6 - 3.5 \times 3.2} \left[\begin{array}{cc} 3.6 & -3.5 \\ -3.2 & 3 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{cc} -9 & 8.75 \\ 8 & -7.5 \end{array} \right]$$

接下来再计算 $X = BA^{-1}$ ：

$$\left[\begin{array}{cc} x_1 & x_2 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{cc} 118.4 & 135.2 \end{array} \right] \left[\begin{array}{cc} -9 & 8.75 \\ 8 & -7.5 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{cc} 16 & 22 \end{array} \right]$$

最终，我们得出这个旅游团有 16 个小孩和 22 个大人。

这也是解线性方程组的一种方法，类似这样的计算被广泛应用在各领域中，比如建筑工程、游戏和动画的 3D 效果上。虽然现在有很多程序包封装了这类数学计算的底层实现，但如果你能很好地理解这些概念，就可以为编程或算法调优打下坚实的基础。

Last but not least，方程次序很重要，也就是说， $AX = B$ 和 $XA = B$ 的结果是不同的，这个一定要牢记哦！

转置矩阵

一般伴随逆矩阵之后出现的就是转置矩阵。在计算机图形图像处理中，如果要对一个物体进行旋转、平移、缩放等操作，就要对描述这个物体的所有矩阵进行运算，矩阵转置就是这类运算之一，而矩阵的转置在三维空间中的解释就相当于“得到关于某个点对称的三维立体”。所以，转置矩阵的定义很简单。

将矩阵的行列互换，得到的新矩阵就叫做转置矩阵（transpose）。转置矩阵的行列式不变。我们把 $m \times n$ 矩阵 A 的行列互换，得到转置矩阵 A^T 。

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

$$A^T = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \dots & a_{m1} \\ a_{12} & a_{22} & \dots & a_{m2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{1n} & a_{2n} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

最后，为了方便你理解，我们再总结一下逆矩阵和转置矩阵的性质。你不用死记硬背，重在理解。

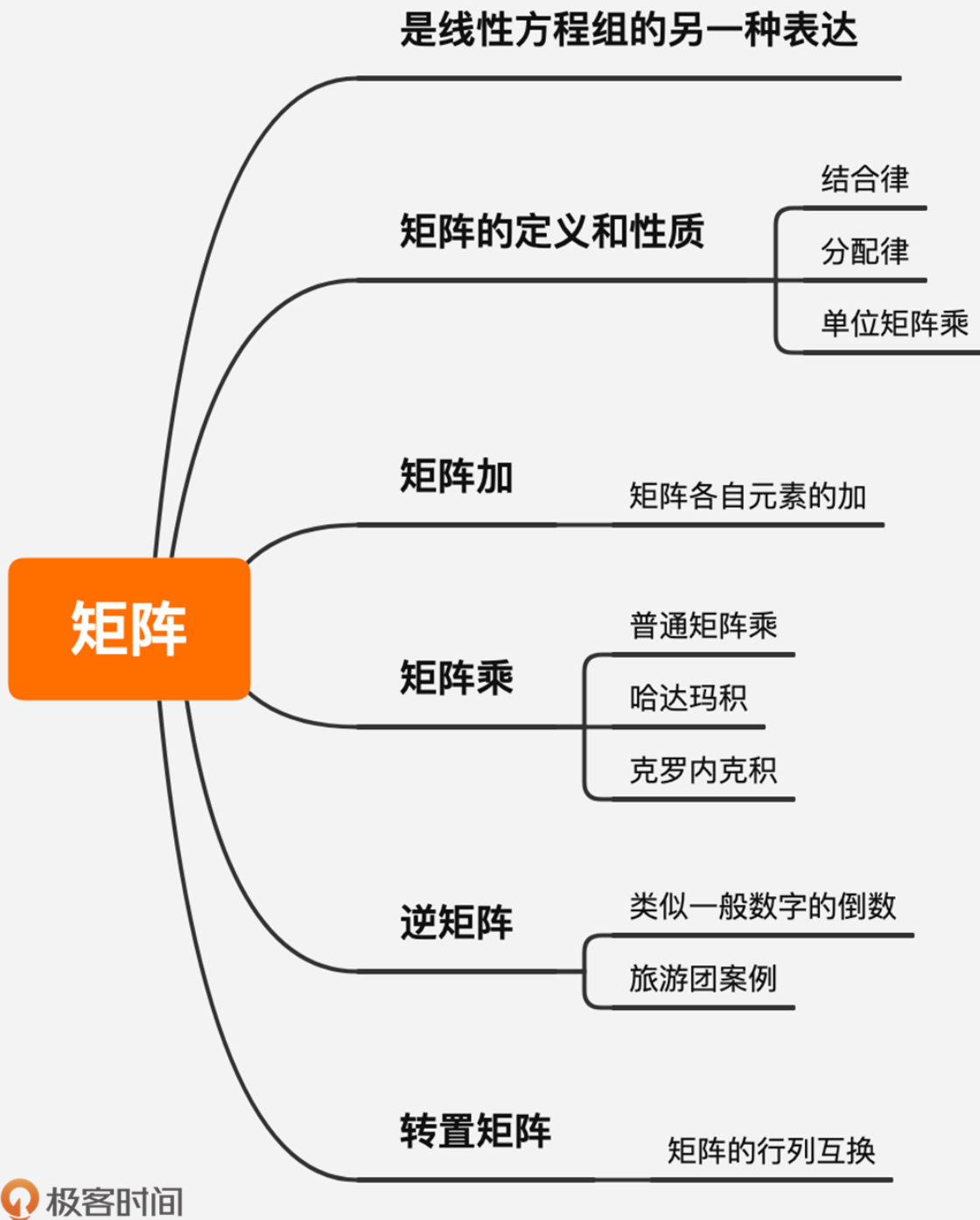
1. 矩阵和自身逆矩阵相乘得单位矩阵， $AA^{-1} = I = A^{-1}A$ ；

2. AB 两矩阵相乘的逆，等于逆矩阵 B 和逆矩阵 A 相乘，这里强调一下乘的顺序很重要， $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$ ；
3. AB 两矩阵相加后的逆矩阵，不等于各自逆矩阵的相加， $(A + B)^{-1} \neq A^{-1} + B^{-1}$ ；
4. 矩阵转置的转置还是它本身， $(A^T)^T = A$ ；
5. AB 两矩阵相加后的转置矩阵，等于各自转置矩阵的相加， $(A + B)^T = A^T + B^T$ ；
6. AB 两矩阵相乘后的转置矩阵，等于转置矩阵 B 和转置矩阵 A 的相乘，这里再次强调乘的顺序很重要， $(AB)^T = B^T A^T$ 。

本节小结

好了，到这里矩阵这一讲就结束了，最后我再带你总结一下前面讲解的内容。

今天的知识，你只需要知道矩阵是线性方程组的另一种表达，了解和掌握矩阵的定义和性质就足够了。当然，矩阵还有很多内容，但我认为掌握了我讲的这些内容后，就为以后的一些矩阵应用场景打下了坚实的数学基础，也是下一讲的解线性方程组的前置知识。



线性代数练习场

对于 10 维列向量 $x = (x_1, \dots, x_{10})^T$ ， $v = (v_1, \dots, v_{10})^T$ ，如果要计算 $y = xx^T (I + vv^T) x$ ，其中 I 是 10 阶单位矩阵。你会怎么做？

友情提醒，这里有多种方式解题。你能不能找到一个最简单的方法来解这道题？虽然结果很重要，但我想说的是过程更重要，而且往往解题过程不同，从计算机角度来说，运算的效率会有极大的不同。

欢迎你在留言区晒出你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

提建议

© 版权归极客邦科技所有，未经许可不得传播售卖。页面已增加防盗追踪，如有侵权极客邦将依法追究其法律责任。

上一篇 02 | 基本概念：线性代数研究的到底是什么问题？

下一篇 04 | 解线性方程组：为什么用矩阵求解的效率这么高？

精选留言 (5)

写留言



Paul Shan

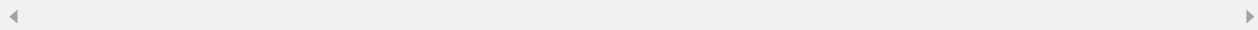
2020-08-03

x' 表示 x 向量的转置， v' 是 v 向量的转置

$$x x'x + x x'v v'x = x(x \cdot x) + x(x \cdot v)(v \cdot x) = x(\|x\|^2 + (x \cdot v)^2)$$

展开

作者回复: 非常厉害，结果还是一个10维向量 :-)



4

3

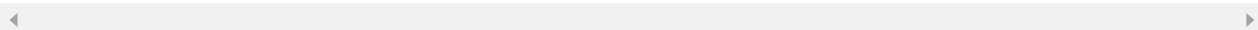


那一刻

2020-08-03

请问老师，关于GPU更适合矩阵计算，文中的例子不是很理解，请您再详细说一下？

作者回复: 你好，那一刻，这个就要涉及到CUDA了，在矩阵乘这块，对于GPU来说，每一次的乘就能开一个线程，而如果用CPU开线程的做法是无法想象的，即使线程比较轻也是耗资源的。



2

2

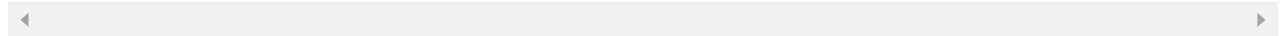
**思致精研_益达**

2020-08-09

老师您好，我对这句话后面的公式推导有点疑惑，原文‘方法其实很简单，记得刚才的公式就行， $\mathrm{A} \times \mathrm{A}^{-1} = \mathrm{I}$ 。现在我们就代入公式来验证一下，A和它的逆矩阵相乘，通过刚才的算法最终得出的结果是单位矩阵。’后面公式推倒里面有几处x，想不出这x的作用，可以解释一下在这的作用吗，还是这部分是存在是笔误呢

展开 ∨

作者回复: 你好，思致精研_益达，公式里的推导不是x是乘，比如： $a_{12} * (-a_{21})$ ，可能加个括号看起来更好，我让排版同学调整一下。

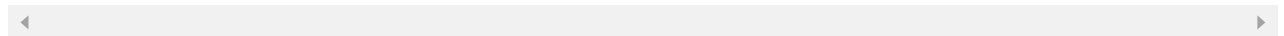
**思致精研_益达**

2020-08-08

老师这块我不理解。文章中说道：‘计算 H 隐藏层输出的公式是： $H = f(Wx + b)$ ，其中 W 是权重矩阵，f 是激活函数，b 是偏差，x 是输入层矩阵。’里面的W跟x代表的意义我知道，但是文字下解释说 $x = [x_1 x_2]$ ，以及 $W = [w_1 w_2 w_4 w_5 w_3 w_6]$ 。这些 x_1 及一直到 w_6 代表的实际意思是什么，您老师可以介绍一下吗

展开 ∨

作者回复: 你好，思致精研_益达，不好意思造成无解，文章中这部分X、W和H可能是排版问题，我让负责排版的同学修改一下，你就能看到正确的了，其实这里表达的都是矩阵。

**qinsi**

2020-08-03

矩阵乘法满足 结合律，一般不满足 交换律

展开 ∨

作者回复: 你好，qinsi，谢谢你的指正，是结合律，我立即修改。

