线性代数基础

机器学习版

VCG

数据的表示: 向量与空间

向量

- \triangleright 在机器学习中,向量 $\mathbf{v} = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n]^T$
 - ▶作为数据点 (Data Point)
 - ▶ n 维特征空间中的一个位置
 - ▶静态的视角
 - ▶作为空间矢量 (Geometric Vector)
 - ▶从原点出发,具有方向和长度的箭头
 - ▶定义了空间中的一个"运动"或"位移"
 - ▶动态的视角

向量的线性无关

【线性组合】给定 \mathbb{R}^n 中向量 \mathbf{v}_1 , …, \mathbf{v}_p 和标量 c_1 , …, c_p , 向量 $\mathbf{y} = c_1 \mathbf{v}_1 + \dots + c_p \mathbf{v}_p$

称为向量 \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 , …, \mathbf{v}_p 以 c_1 , c_2 , …, c_p 为权的线性组合【数乘和加法】

【Span】若 \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 , …, \mathbf{v}_p 是 \mathbb{R}^n 中的向量,Span $\{\mathbf{v}_1$, \mathbf{v}_2 , …, $\mathbf{v}_p\}$ 称为由 \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 , …, \mathbf{v}_p 所生成(张成)的 \mathbb{R}^n 的子集,即,

$$Span\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \cdots, \mathbf{v}_p\} = \{c_1\mathbf{v}_1 + \cdots + c_p\mathbf{v}_p | c_1, c_2, \cdots, c_p 为标量\}$$

向量空间

【向量空间】

- 一个向量空间是由向量构成的非空集合V。且定义了运算:加法和标量乘法。对V中所有向量u,v,w及所有标量c和d,满足
 - u, v之和(表示为u + v)属于V
 - u + v = v + u
 - (u + v) + w = u + (v + w)
 - V中存在一个零向量0,使得u+0=u
 - 对V中每个向量u, 存在V中一个向量-u, 使得u + (-u) = 0
 - u与标量c的标量乘法(记为cu)属于V
 - $c(\mathbf{u} + \mathbf{v}) = c\mathbf{u} + c\mathbf{v}$
 - $(c+d)\mathbf{u} = c\mathbf{u} + d\mathbf{u}$
 - $c(d\mathbf{u}) = (cd)\mathbf{u}$
 - 1u = u

子空间

【子空间】向量空间V的子集H,如果H满足以下三个性质,则成H为V的子空间:

V中的零向量在H中

H对向量加法封闭,即对H中任意向量u, v, 和u + v仍在H中

H对标量乘法封闭,即对H中任意向量u和任意标量c,向量cu仍在H中

子空间的基:线性无关集;标准基

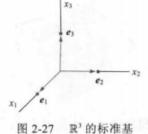
【基】 \mathbb{R}^n 中子空间H的一组基是H中一个线性无关集,它生成H

可逆 $n \times n$ 矩阵的各列构成 \mathbb{R}^n 的一组基,因为它们线性无关,而且生成 \mathbb{R}^n

【标准基 \mathcal{E} 】 $n \times n$ 单位矩阵,它的各列用 \mathbf{e}_1 ,…, \mathbf{e}_n :

$$\mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \cdots, \quad \mathbf{e}_n = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

 $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n\}$ 称为 \mathbb{R}^n 的标准基 \mathcal{E}



数据的操作: 矩阵与线性变换

矩阵: 数据集合 vs. 空间变换

- ▶一个矩阵 A 有两种核心视角
 - ➤数据集合 (Container of Data)
 - ▶每一行或每一列是一个数据样本或特征
 - ▶例如: 一个用户-物品评分矩阵
 - ▶静态的视角
 - ▶线性变换 (Linear Transformation)
 - \triangleright 一个函数,将一个输入向量 x 映射到一个输出向量 y = Ax
 - ▶描述空间运动:将整个输入空间进行旋转、缩放、切变等操作,变成一个新的输出空间
 - ▶动态的,也是线性代数最核心的视角

矩阵向量乘法的本质:基向量的"着陆点

【矩阵与向量乘法】 $m \times n$ 矩阵 $A = [\mathbf{a}_1 \ \mathbf{a}_2 \ \cdots \ \mathbf{a}_n] \cdot \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$,则 $A = \mathbf{x}$ 的积(记为Ax)

$$Ax = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \cdots & \mathbf{a}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n \end{bmatrix} = \mathbf{x}_1 \mathbf{a}_1 + \mathbf{x}_2 \mathbf{a}_2 + \cdots + \mathbf{x}_n \mathbf{a}_n$$

通常把矩阵A当作一种对象,它通过乘法"作用"于向量x,产生的新向量称为Ax。解方程Ax = b,就是要求出所有经过乘以A的"作用"后变为b的向量x

线性变换T的标准矩阵

Ax可以看作是A代表的span $\{e_1, \dots, e_n\}$ 空间中,x作为权重生成的变量

【矩阵变换定理】设 $T: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ 为线性变换,则存在唯一的矩阵A,使得对 \mathbb{R}^n 中一切 \mathbf{x} ,

$$T(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x}$$

事实上,A是 $m \times n$ 矩阵,它的第j列是向量 $\mathbf{T}(\mathbf{e}_i)$,其中 \mathbf{e}_i 是 \mathbb{R}^n 中单位矩阵 \mathbf{I}_n 的第j列:

$$\mathbf{A} = [\mathsf{T}(\mathbf{e}_1) \cdots \mathsf{T}(\mathbf{e}_n)]$$

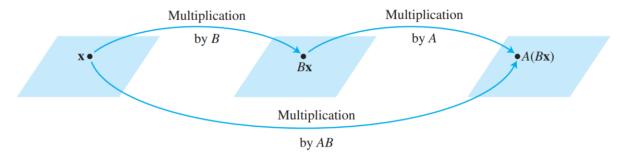
矩阵A称为线性变换T的标准矩阵。

矩阵乘法

【矩阵乘法】矩阵B乘以向量x(将x变换Bx),向量Bx再乘以矩阵A,得A(Bx)。于是,x经复合映射(对应矩阵AB)变换得到A(Bx):

$$A(Bx) = (AB)x$$

【矩阵的组合预算】



矩阵的逆,可逆矩阵,奇异矩阵

【可逆矩阵】一个 $n \times n$ 矩阵A是可逆的,若存在一个 $n \times n$ 矩阵C使

$$CA = I, AC = I$$

其中 $I = I_n = I_n + I_n = I_n$ 上,这时称C是A的逆

若 A可逆,它的逆是唯一的,记为 A $^{-1}$,于是

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I}, \ \ \underline{\mathbf{B}}\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}$$

不可逆矩阵有时称为奇异矩阵,而可逆矩阵也称为非奇异矩阵

坐标系,坐标,线性变换

线性变换

【线性变换】线性变换T将向量空间V中的x映射成向量空间W中唯一向量T(x),且:

$$T(\mathbf{u} + \mathbf{v}) = T(\mathbf{u}) + T(\mathbf{v})$$
, 对V中所有 \mathbf{u} , v均成立 $T(c\mathbf{u}) = cT(\mathbf{u})$, 对V中所有 \mathbf{u} 及所有数 c 均成立

线性无关集

【线性无关集】V中向量的一个指标集 $\{\mathbf v_1, \cdots, \mathbf v_p\}$ 称为线性无关,如果向量方程 $c_1\mathbf v_1 + c_2\mathbf v_2 + \cdots + c_p\mathbf v_p = 0$

只有平凡解(即 $c_1 = 0$, …, $c_p = 0$)

集合 $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p\}$ 称为线性相关,如果方程有一个非平凡的解

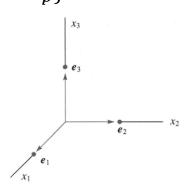
基和标准基

【基】H是向量空间V的子空间。V中一组向量 $\mathcal{B} = \{\mathbf{b}_1, \cdots, \mathbf{b}_p\}$ 称为H的一个基,如果

- ▶ B是一线性无关集。
- ightharpoonup 由**B**生成的子空间与H相同,即 $\mathbf{H} = \operatorname{Span}\{\mathbf{b}_1, \cdots, \mathbf{b}_p\}$

基是:最小的生成集(再小生成不了H); 最大线性无关集(再多一个就不是线性无关)

【标准基】单位矩阵 $\mathbf{I}_n = [\mathbf{e}_1 \cdots \mathbf{e}_n]$, $\mathcal{E} = \{\mathbf{e}_1, \cdots, \mathbf{e}_n\}$ 是 \mathbb{R}^n 中的标准基基 \mathcal{B} 引导了一个新的坐标系, $\{\mathbf{b}_1, \cdots, \mathbf{b}_p\}$ 为基(坐标轴)为在标准坐标系下的表达



坐标系与坐标

对一个向量空间V,指定一个基B:在V上加上一个"坐标系",给V以一个新的"视角"。

【坐标】
$$\mathcal{B} = \{b_1, \dots, b_n\}$$
是V的一个基, 记 $P_{\mathcal{B}} = [b_1 \dots b_n], [x]_{\mathcal{B}} = \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}$ 。如

$$\mathbf{x} = c_1 \mathbf{b}_1 + \dots + c_n \mathbf{b}_n$$
, $\mathbf{P}_{\mathbf{B}}[\mathbf{x}]_{\mathbf{B}}$

则,称向量 $[x]_{\mathcal{B}}$ 为 $x(相对于基\mathcal{B})$ 的坐标向量(或,x的 \mathcal{B} –坐标向量)

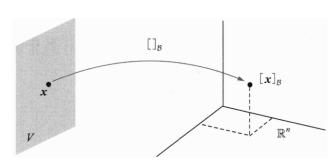
称 $P_{\mathcal{B}}$ 为从 \mathcal{B} 到标准基 \mathcal{E} 的坐标变换矩阵 $P_{\mathcal{E}\leftarrow\mathcal{B}}$ 。【 \mathcal{B} 中的向量,乘以 $P_{\mathcal{B}}$,变换到 \mathcal{E} 】

【坐标映射】 (由 \mathcal{B} 确定的)坐标映射 $x \mapsto [x]_{\mathcal{B}}$:

$$[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}} = \mathbf{P}_{\mathcal{B}}^{-1}\mathbf{x}$$

$$\mathbf{b}_1 = [\mathbf{b}_1]_{\mathcal{E}}$$

【坐标变换矩阵和坐标映射矩阵是逆变换】



基的变换(坐标系变换)

【定理】向量空间V的基 $\mathcal{B} = \{\mathbf{b}_1, \cdots, \mathbf{b}_n\}$ 和 $\mathcal{C} = \{\mathbf{c}_1, \cdots, \mathbf{c}_n\},$

称为由 \mathcal{B} 到 \mathcal{C} 的坐标变换矩阵 $\underset{c \leftarrow \mathcal{B}}{\mathbf{P}}$,将 \mathcal{B} -坐标向量 转成 \mathcal{C} -坐标向量,即

$$[\mathbf{x}]_{\mathcal{C}} = \Pr_{\mathcal{C} \leftarrow \mathcal{B}}[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}}$$

那么

$$\underset{\mathcal{C} \leftarrow \mathcal{B}}{\mathbf{P}} = [[\mathbf{b}_1]_{\mathcal{C}} \quad [\mathbf{b}_2]_{\mathcal{C}} \quad \cdots \quad [\mathbf{b}_n]_{\mathcal{C}}] = \mathbf{P}_{\mathcal{C}}^{-1} \mathbf{P}_{\mathcal{B}}$$

【计算过程】

 $[[\mathbf{x}]_{\mathcal{C}} = \underset{\mathcal{C} \subseteq \mathcal{B}}{\mathbf{P}}[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}}$,两边同时乘以 $P_{\mathcal{C}}$

$$\mathbf{P}_{\mathcal{B}}[[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}} = \mathbf{P}_{\mathcal{C}}\mathbf{P}_{\mathcal{C}\leftarrow\mathcal{B}}[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}}, \ \exists \mathbf{E}_{\mathcal{C}\leftarrow\mathcal{B}}\mathbf{P} = \mathbf{P}_{\mathcal{C}}^{-1}\mathbf{P}_{\mathcal{B}}$$

相当于, \mathcal{B} -坐标到标准坐标,再映射到 \mathcal{C} -坐标

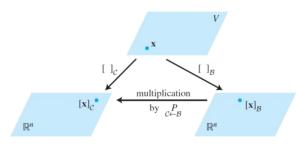


FIGURE 2 Two coordinate systems for V.

特征值与特征向量

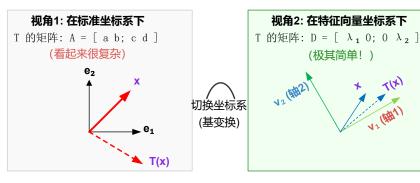
矩阵特征向量和特征值:线性变换内在结构的描述

- ▶特征向量和特征值:描述线性变换核心的,不随观察坐标系改变的性质
 - ▶变换的主轴

变换 T 表现为复杂的剪切和旋转

- ▶特征向量定义了线性变换的"主运动方向"。 $Ax = \lambda x$
- ➤ 空间形变的骨架与自然坐标系 (Natural Coordinate System)
 - ▶标准形状(单位圆)线性变换后变成椭圆,特征向量(不一定正交)为变换骨架
 - ▶变换矩阵A在特征向量组成的"自然"坐标系(变换P)下,变成沿坐标轴缩放的对角矩阵D

同一个变换 T, 在不同坐标系下的观察



变换 T 简化为纯粹的沿轴缩放

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = (\mathbf{P}\mathbf{D}\mathbf{P}^{-1})\mathbf{x}$$

 $\triangleright P^{-1}x$:

▶ 把头歪过来,让视线和物体的主轴对齐, 变换到自然坐标系

 $\triangleright DP^{-1}x$:

▶ 在然坐标系下, 沿着坐标轴缩放

 $> (PDP^{-1})x$

▶ 把头摆正,回到原来的观察角度

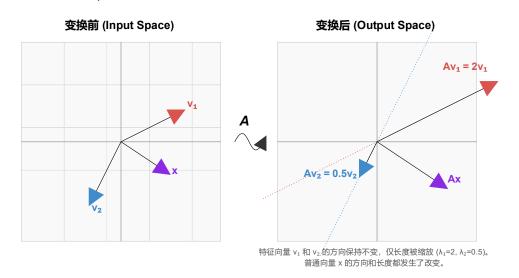
矩阵特征值与特征向量

【特征值与特征向量】A为 $n \times n$ 矩阵, x为非零向量, 若存在数 λ 使

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

有非平凡解x,则称 λ 为A的特征值,x称为对应于 λ 的特征向量

- 1.矩阵与向量相乘是一种线性变换
- 2. 特征向量经过矩阵变换后,方向与原方向保持一致(缩放系数为特征值)



可逆矩阵,正交矩阵

可逆矩阵(Invertible Matrix)

- ightharpoonup方阵 $\mathbf{A}_{n \times n}$ 被称为可逆的(Invertible)或非奇异的(Non-singular)
 - ightharpoonup存在方阵 $B_{n\times n}$,使得AB = BA = I。其中 $I_{n\times n}$ 是单位矩阵。矩阵 $B = A^{-1}$ 是A的逆矩阵(Inverse Matrix)
- ▶【可逆矩阵代表了一种"良好"的、不丢失信息的、可以撤销的线性变换】
- ➤变换 T是双射
 - ▶单射:不同的输入向量x必然映射到不同的输出向量y
 - ▶满射:整个目标空间中的每一个点v都能在输入空间中找到一个对应的点x
 - ightarrow可逆:存在一个逆变换 $T^{-1}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{x}$,可以将变换后的结果完美地还原回去
- ▶变换 T不会"压扁"空间 (det(A) ≠ 0)
 - \triangleright 将 n 维空间映射到 n 维空间,而不是降维到一条线或一个平面。变换后图形的体积不为零

正交矩阵

- ightharpoonup正交矩阵 P 满足 $P^{-1} = P^{T}$ 。显然,正交矩阵是可逆矩阵
- ▶【正交矩阵所代表的线性变换只有旋转或者反射,没有缩放,剪切或形变】
- ▶行向量和列向量是标准正交基
 - ▶任意不同的列向量(或行向量)的点积为 0(互相垂直);列向量(或行向量)模长为1
- ▶行列式的值为 +1 或 -1
 - ▶1,变换保向,代表旋转;-1,变换反向,代表反射或旋转加反射;体积没有变化
- ▶特征值的模长为 1
 - ▶变换不会在任何特征向量方向上进行缩放,与 " 保持长度 " 的几何特性一致
- ▶保持内积 / 点积
 - $\triangleright \mathbf{Q}\mathbf{x} \cdot \mathbf{Q}\mathbf{y} = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$
 - ▶保持向量间的夹角:向量之间的夹角,变换前后不变,没有发生剪切或形变
 - ▶保持向量长度:向量在经过正交变换后不会被拉伸或压缩

相似矩阵,对角化

相似性

【矩阵相似】假如A和B是 $n \times n$ 矩阵,如果存在可逆矩阵P,使得

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P} = \mathbf{B}$$

则称A相似于B。(那么B也相似于A, $A = PBP^{-1}$)

称 $A \cap B$ 是相似的,把 $A \circ oldsymbol{oldsy$

【定理】若 $n \times n$ 矩阵A和B是相似的,那么它们有相同的特征多项式,从而有相同的特征(和相同的重数)

【注】

即使有相同的特征值也可能不相似

相似性与行等价不一样。(假如B行等价于B,则存在可逆矩阵E,使得B = EB。)对矩阵作行变换通常会改变矩阵的特征值

相似矩阵的几何意义

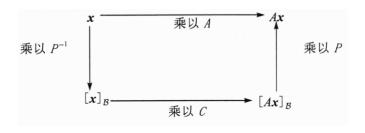
若A相似于C, 即A = PCP^{-1}

$$\mathbf{P} = [\boldsymbol{b}_1 \cdots \boldsymbol{b}_n]$$
, $\boldsymbol{\mathcal{B}} = \{\boldsymbol{b}_1, \cdots, \boldsymbol{b}_n\}$,则P是坐标变换矩阵 $\mathbf{P}_{\mathcal{B}}$,其中

$$x = \mathbf{P}[x]_{\mathcal{B}}, \qquad [x]_{\mathcal{B}} = \mathbf{P}^{-1}x$$

则C是变换 $x \mapsto Ax$ 的B-矩阵【C代表变换在B坐标系下的矩阵】

即,
$$A = PCP^{-1}$$



【几何意义】

相似矩阵为线性变换在不同坐标系下的,不同的矩阵表达形式

对向量的变换,可以看作:转换到 \mathbf{B} 坐标系(\mathbf{P}^{-1}),变换(\mathbf{C}),再回原来坐标系(\mathbf{P})

相似矩阵的不变量: 特征值

- ▶所有相似的矩阵都具有相同的
 - ▶特征值(特征多项式)
 - ▶最重要的不变量!
 - ▶特征值代表了变换在特征向量上的缩放因子。这些"固有"的缩放方向和比例是变换本身的"特征"
 - ▶行列式
 - ▶变换对空间体积的缩放比例
- >矩阵相似性的最终应用和目标,就是对角化
 - ▶希望找到一个"最理想的视角"(由特征向量组成的基),在这个视角下,线性变换的表达 形式变得极其简单(一个对角矩阵)

对角矩阵与对角化

【对角矩阵】对角矩阵(diagonal matrix)是一个主对角线之外的元素皆为0的矩阵。

记作
$$\mathbf{D} = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ \lambda_2, \ \cdots, \ \lambda_n) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \lambda_2 & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

在很多情况下,从分解式 $A = PDP^{-1}$ (其中,D是对角矩阵),能够了解到有关矩阵A的特征值和特征向量的信息

【对角化】如果方阵A相似于对角矩阵,即存在可逆矩阵P和对角矩阵D,使得

$$\mathbf{A} = \mathbf{P}\mathbf{D}\mathbf{P}^{-1}$$

则称A可对角化

对角化矩阵

【对角化】 $A_{n\times n}$ 有n个线性无关的特征向量,则A可对角化 假设A的n个线性无关的特征向量为 \mathbf{v}_1 , $\mathbf{v}_2 \cdots \mathbf{v}_n$ (对应特征值 λ_1 , \cdots , λ_n)

令
$$\mathbf{P} = [\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{v}_n]$$
为特征向量基变换矩阵,对角阵 $\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}$

那么, $\mathbf{AP} = [\mathbf{Av}_1 \quad \mathbf{Av}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{Av}_n]$, $\mathbf{PD} = [\lambda_1 \mathbf{v}_1 \quad \lambda_2 \mathbf{v}_2 \quad \cdots \quad \lambda_n \mathbf{v}_n]$ λ_i 和 \mathbf{v}_i 分别为特征值和特征向量, $\mathbf{Av}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i$,则 $\mathbf{AP} = \mathbf{PD}$

从而
$$\mathbf{A} = \mathbf{P}\mathbf{D}\mathbf{P}^{-1}$$
,于是 \mathbf{A} 对角化矩阵为 $\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}$

【重要结论】

如果一个 n 阶方阵A有 n 个互不相同的特征值,那么它一定可以被对角化任何一个实对称矩阵 ($A = A^{T}$) 都一定可以被对角化