

作者	生姜 DrGinger
脚本	生姜 DrGinger
视频	崔崔 CuiCui
开源学习资源	<a href="https://github.com/Visualize-ML">https://github.com/Visualize-ML</a>
平台	<a href="https://www.youtube.com/@DrGinger_Jiang">https://www.youtube.com/@DrGinger_Jiang</a> <a href="https://space.bilibili.com/3546865719052873">https://space.bilibili.com/3546865719052873</a> <a href="https://space.bilibili.com/513194466">https://space.bilibili.com/513194466</a>

## 3.2 矩阵乘法的第二视角



### 本节你将掌握的核心技能：

- ▶ 外积展开视角：矩阵乘法可以表示为多个外积矩阵之和。
- ▶ 每个外积是秩一矩阵。
- ▶ 秩一矩阵具有行、列倍数关系：体现线性相关性。
- ▶ 零向量外积结果为零矩阵。

矩阵乘法的第二视角是一种将乘法左侧矩阵写成一组列向量、右侧矩阵写成行向量的分解方式。这种视角揭示了矩阵乘法的另一种本质——列向量与行向量的外积之和。通过这种分解，我们可以更深入地理解矩阵乘法的结构和意义。

### 叠加

对于矩阵乘法  $A @ B$ ，如图 1 所示，把左侧矩阵  $A$  写成一组列向量

$$A_{m \times p} = [a_1 \ a_2 \ \dots \ a_p] \quad (1)$$

其中，列向量  $a_k$  ( $k = 1, 2, \dots, p$ ) 的形状为  $m \times 1$ 。

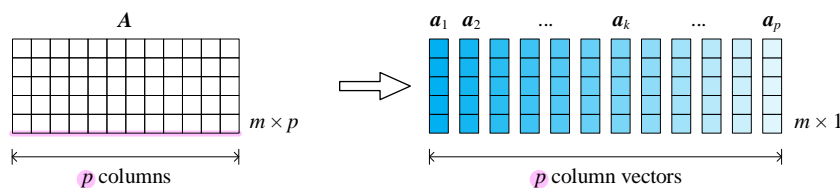


图 1. 把左侧矩阵  $A$  写成一组列向量

如图 2 所示，把右侧矩阵  $B$  写成一组行向量

$$B_{p \times n} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}^{(1)} \\ \mathbf{b}^{(2)} \\ \vdots \\ \mathbf{b}^{(p)} \end{bmatrix} \quad (2)$$

其中，行向量  $\mathbf{b}^{(k)}$  的形状为  $1 \times n$ 。

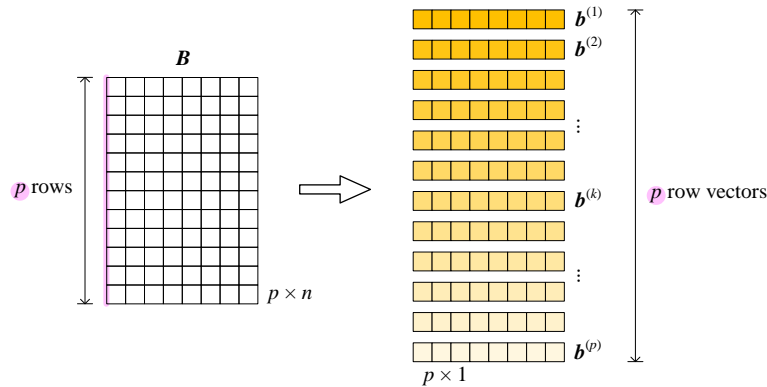


图 2. 把右侧矩阵  $B$  写成一组行向量

这样矩阵乘法  $C = A @ B$  可以写成

$$A_{m \times p} @ B_{p \times n} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \cdots & \mathbf{a}_p \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} \mathbf{b}^{(1)} \\ \mathbf{b}^{(2)} \\ \vdots \\ \mathbf{b}^{(p)} \end{bmatrix} = \mathbf{a}_1 @ \mathbf{b}^{(1)} + \mathbf{a}_2 @ \mathbf{b}^{(2)} + \cdots + \mathbf{a}_p @ \mathbf{b}^{(p)} = \sum_{k=1}^p \mathbf{a}_k @ \mathbf{b}^{(k)} \quad (3)$$

大家是否惊奇地发现，我们把矩阵乘法写成一组相同形状矩阵的求和！具体如图 3 所示。

也就是说矩阵乘法  $A @ B$  转化成了  $p$  个矩阵叠加。而  $p$  对应  $A$  的列数、 $B$  的行数，而  $p$  是那个“消去”的维度。

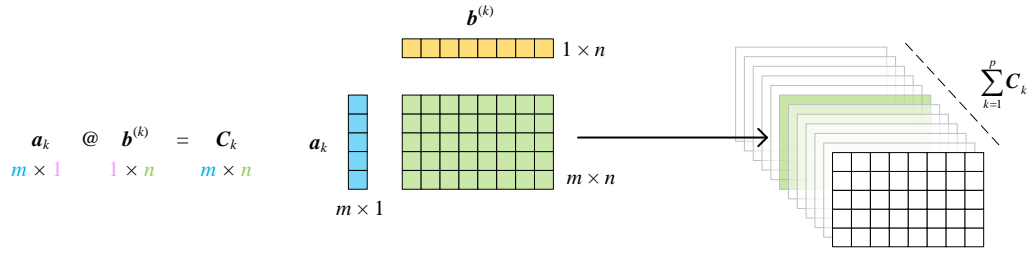
令

$$C_k = \mathbf{a}_k @ \mathbf{b}^{(k)} \quad (4)$$

$C_k$  就是我们上一节提到的外积。此外，我们注意到矩阵  $C$  和  $C_k$  形状完全相同，都是  $m \times n$ 。

从矩阵形状来看， $(m \times 1) @ (1 \times n)$  夹在中间的  $(1)$  被“消去”，矩阵乘法结果的形状为  $(m \times n)$ 。

这便是，矩阵乘法规则的第二视角——**外积展开** (outer product expansion)。

图 3.  $A @ B$  可以写成一组相同形状矩阵的求和

## 第一个例子

回到本章第一节矩阵乘法的例子。

$$A @ B = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 5 \\ 3 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 14 & 32 \\ 32 & 77 \end{bmatrix} \quad (5)$$

左侧矩阵  $A$  写成列向量，右侧矩阵  $B$  写成行向量后， $A @ B$  可以写成

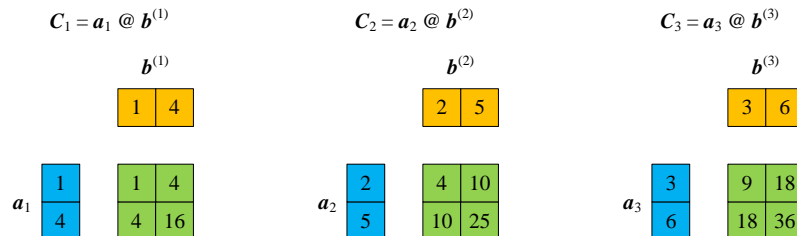
$$A @ B = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b^{(1)} \\ b^{(2)} \\ b^{(3)} \end{bmatrix} = a_1 @ b^{(1)} + a_2 @ b^{(2)} + a_3 @ b^{(3)} \quad (6)$$

代入具体值

$$\begin{aligned} a_1 @ b^{(1)} &= \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \end{bmatrix} @ [1, 4] = \begin{bmatrix} 1 \times 1 & 1 \times 4 \\ 4 \times 1 & 4 \times 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 4 & 16 \end{bmatrix} \\ a_2 @ b^{(2)} &= \begin{bmatrix} 2 \\ 5 \end{bmatrix} @ [2, 5] = \begin{bmatrix} 2 \times 2 & 2 \times 5 \\ 5 \times 2 & 5 \times 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 10 \\ 10 & 25 \end{bmatrix} \\ a_3 @ b^{(3)} &= \begin{bmatrix} 3 \\ 6 \end{bmatrix} @ [3, 6] = \begin{bmatrix} 3 \times 3 & 3 \times 6 \\ 6 \times 3 & 6 \times 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 & 18 \\ 18 & 36 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (7)$$

图 4 所示分别计算  $C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$ 。

从矩阵形状来看， $(2 \times 1) @ (1 \times 2)$  夹在中间的  $(1)$  被“消去”，矩阵乘法结果的形状为  $(2 \times 2)$ 。

图 4. 分别计算  $C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$ 

如图 5 所示，矩阵乘法  $C = A @ B$  可以写成三个矩阵的叠加

$$C = \begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 4 & 16 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 4 & 10 \\ 10 & 25 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 9 & 18 \\ 18 & 36 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 14 & 32 \\ 32 & 77 \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$C_1 = a_1 @ b^{(1)} \quad C_2 = a_2 @ b^{(2)} \quad C_3 = a_3 @ b^{(3)} \quad C$$

图 5.  $C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$  三个矩阵叠加

## 第二个例子

左侧矩阵  $B$  写成列向量，右侧矩阵  $A$  写成行向量后， $B @ A$  可以写成

$$B @ A = \begin{bmatrix} b_1 & b_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \end{bmatrix} = b_1 @ a^{(1)} + b_2 @ a^{(2)} \quad (9)$$

代入具体值

$$\begin{aligned} b_1 @ a^{(1)} &= \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \times 1 & 1 \times 2 & 1 \times 3 \\ 2 \times 1 & 2 \times 2 & 2 \times 3 \\ 3 \times 1 & 3 \times 2 & 3 \times 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 6 \\ 3 & 6 & 9 \end{bmatrix} \\ b_2 @ a^{(2)} &= \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 4 & 5 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \times 4 & 4 \times 5 & 4 \times 6 \\ 5 \times 4 & 5 \times 5 & 5 \times 6 \\ 6 \times 4 & 6 \times 5 & 6 \times 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 16 & 20 & 24 \\ 20 & 25 & 30 \\ 24 & 30 & 36 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (10)$$

图 6 所示分别计算  $D_1$ 、 $D_2$ 。

从矩阵形状来看， $(3 \times 1) @ (1 \times 3)$  夹在中间的  $(1)$  被“消去”，矩阵乘法结果的形状为  $(3 \times 3)$ 。

$$D_1 = b_1 @ a^{(1)} \quad D_2 = b_2 @ a^{(2)}$$

图 6. 分别计算  $D_1$ 、 $D_2$ 

如图 7 所示，矩阵乘法  $D = B @ A$  可以写成两个矩阵的叠加

$$D = b_1 @ a^{(1)} + b_2 @ a^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 6 \\ 3 & 6 & 9 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 16 & 20 & 24 \\ 20 & 25 & 30 \\ 24 & 30 & 36 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 17 & 22 & 27 \\ 22 & 29 & 36 \\ 27 & 36 & 45 \end{bmatrix} \quad (11)$$

$$D_1 = b_1 @ a^{(1)} \quad D_2 = b_2 @ a^{(2)}$$

1	2	3
2	4	6
3	6	9

 $+$ 

16	20	24
20	25	30
24	30	36

 $=$ 

17	22	27
22	29	36
27	36	45

图 7.  $D_1$ 、 $D_2$  两个矩阵叠加

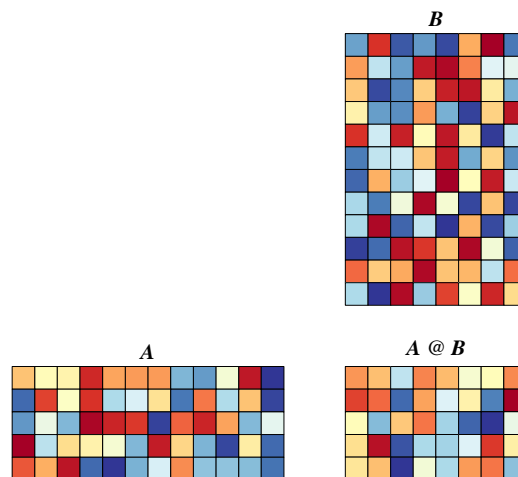
LA\_03\_02\_01.ipynb 以矩阵乘法第二视角完成以上两个矩阵乘法运算，请大家自学。

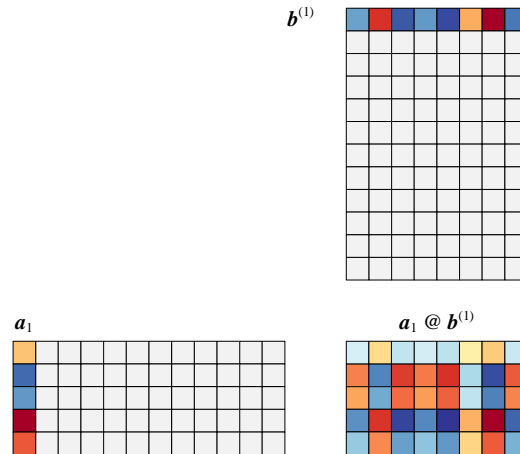
### 热图展示矩阵乘法第二视角

下面让我们用热图来可视化矩阵乘法第二视角。

给定如图 8 所示的矩阵乘法。

图 9 用热图展示如何计算  $a_1 @ b^{(1)}$ 。

图 8. 矩阵乘法  $A @ B$  热图，第一视角

图 9. 热图展示  $a_1 @ b^{(1)}$ 

由于  $A$  有 12 列 ( $B$  有 12 行), 类似  $a_1 @ b^{(1)}$  矩阵乘法一共有 12 个, 如图 10 所示。

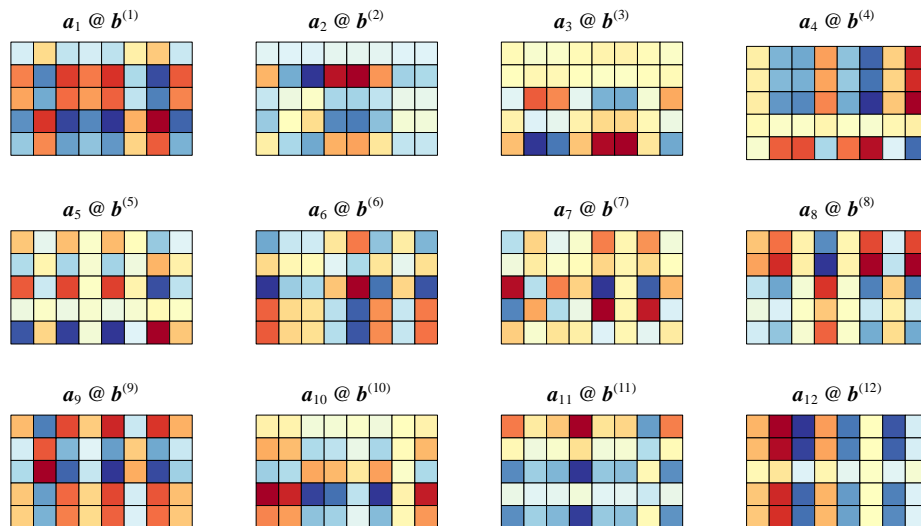
图 10. 12 个  $a_k @ b^{(k)}$ 

图 10 中 12 个矩阵相加的结果为  $A @ B$ 。

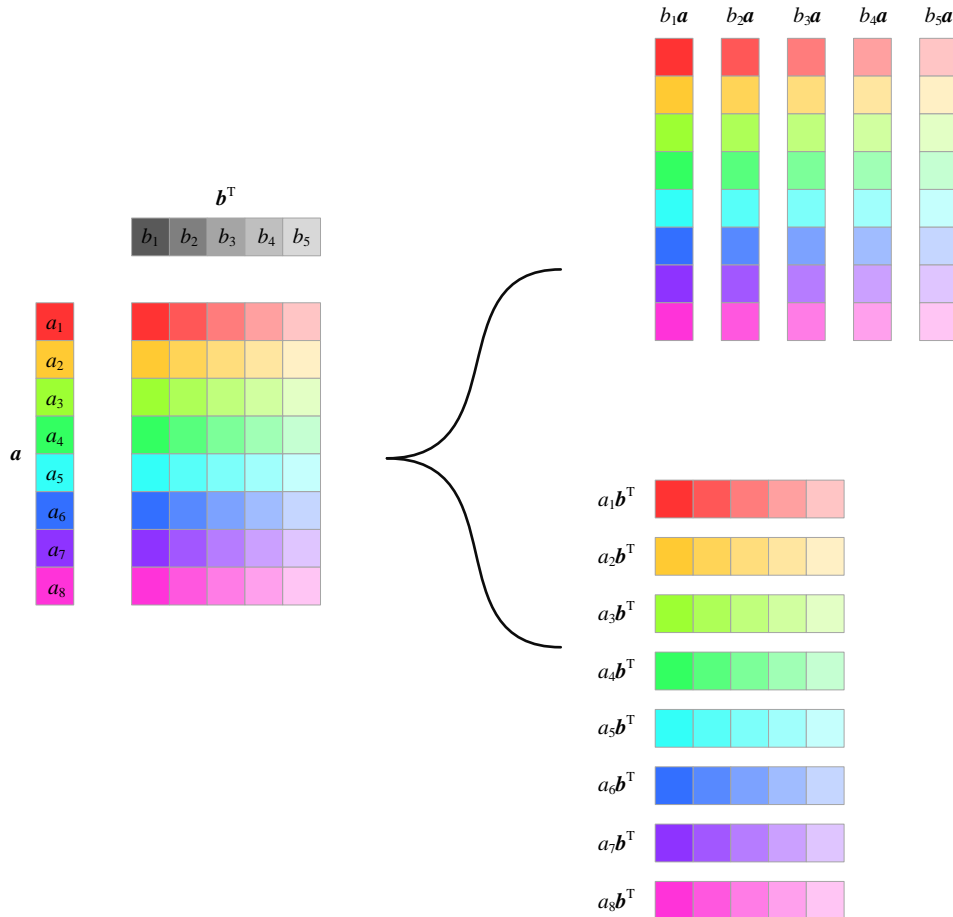


LA\_03\_02\_02.ipynb 绘制如上热图, 请大家自学。

## 倍数关系

如图 11 所示, 给定  $a$ 、 $b$  两个列向量, 矩阵乘法  $a @ b^T$  的行、列存在倍数关系

$$\mathbf{a} @ \mathbf{b}^T = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} @ [b_1 \quad b_2 \quad \cdots \quad b_n] = \begin{bmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 & \cdots & a_1 b_n \\ a_2 b_1 & a_2 b_2 & \cdots & a_2 b_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_m b_1 & a_m b_2 & \cdots & a_m b_n \end{bmatrix} \quad (12)$$

图 11. 矩阵乘法  $\mathbf{a} @ \mathbf{b}^T$  的行、列存在倍数关系

让我们先看  $\mathbf{a} @ \mathbf{b}^T$  的列，即

$$\mathbf{a} @ \mathbf{b}^T = \mathbf{a} @ [b_1 \quad b_2 \quad \cdots \quad b_n] = [b_1 \mathbf{a} \quad b_2 \mathbf{a} \quad \cdots \quad b_n \mathbf{a}] \quad (13)$$

展开之后得到

$$\mathbf{a} @ \mathbf{b}^T = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} [b_1 \quad b_2 \quad \cdots \quad b_n] = \begin{bmatrix} b_1 \times \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} & b_2 \times \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} & \cdots & b_n \times \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad (14)$$

让我们再看  $\mathbf{a} @ \mathbf{b}^T$  的行

$$\mathbf{a} @ \mathbf{b}^T = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} \mathbf{b}^T = \begin{bmatrix} a_1 \mathbf{b}^T \\ a_2 \mathbf{b}^T \\ \vdots \\ a_m \mathbf{b}^T \end{bmatrix} \quad (15)$$

展开之后得到

$$\mathbf{a} @ \mathbf{b}^T = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 \times [b_1 & b_2 & \cdots & b_n] \\ a_2 \times [b_1 & b_2 & \cdots & b_n] \\ \vdots \\ a_m \times [b_1 & b_2 & \cdots & b_n] \end{bmatrix} \quad (16)$$

正因为这种行列倍数关系，我们管  $\mathbf{a} @ \mathbf{b}^T$  这种外积叫做**秩一矩阵** (rank-one matrix)。

秩一矩阵的每一行都是同一个行向量的倍数；秩一矩阵的每一列都是同一个列向量的倍数。

这说明秩一矩阵的行和列之间具有线性相关性，即矩阵的秩 (rank) 为 1。简单来说，矩阵的秩是其行或列向量组的最大线性无关个数，等价于该矩阵中不为零的最大线性无关行、列向量的个数。这是本书后续要深入讲解的话题。

**⚠ 注意**， $\mathbf{a}$  或  $\mathbf{b}$  若为零向量  $\mathbf{0}$ ， $\mathbf{a} @ \mathbf{b}^T$  的结果为零矩阵  $\mathbf{O}$ ；此时，矩阵  $\mathbf{a} @ \mathbf{b}^T$  的秩为 0。

回到前文的例子，大家已经能够看到列向量之间的倍数关系

$$\mathbf{b}_1 @ \mathbf{a}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \times \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} & 2 \times \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} & 3 \times \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad (17)$$

再看行向量之间的倍数关系

$$\mathbf{b}_1 @ \mathbf{a}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \times \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \\ 2 \times \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \\ 3 \times \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad (18)$$

## 自定义 Python 函数计算矩阵乘法：外积视角

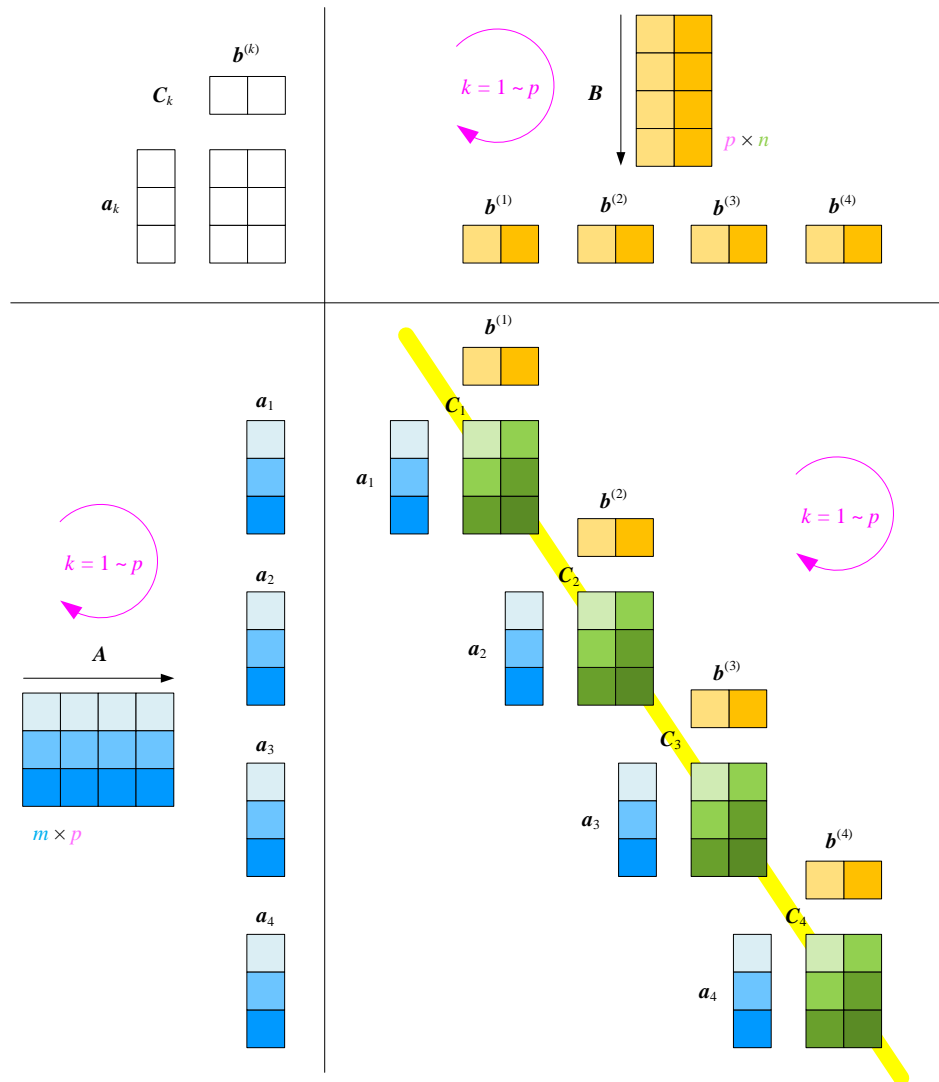
代码 1 通过自定义函数，利用外积视角完成矩阵乘法。下面聊聊其中关键语句。


**a** 定义一个函数，函数名叫 `matrix_multiplication_outer`，意思是“用外积的方式做矩阵乘法”；函数的意思就是“把某一段代码打包成一个工具”，需要输入矩阵  $\mathbf{A}$  和  $\mathbf{B}$ 。

**b** 开启一个循环，从  $k = 0$  一直到  $p$ ，也就是说我们会把  $\mathbf{A}$  的每一列都拿出来一遍，同时也会取出  $\mathbf{B}$  的每一行；这是准备开始一列一列地做“外积”。

$\mathbf{a\_k} = \mathbf{A[:, k]}$  取出矩阵  $\mathbf{A}$  的第  $k$  列，变成一个竖着的列向量； $\mathbf{b\_k} = \mathbf{B[k, :]}$  取出矩阵  $\mathbf{B}$  的第  $k$  行。 $\mathbf{C} += (\mathbf{a\_k} @ \mathbf{b\_k})$  计算内积，把这个矩阵加到结果矩阵  $\mathbf{C}$  上，表示把这一步的贡献累加进去。



图 12. 矩阵乘法  $AB$  规则，外积视角

代码 1. 自定义 Python 函数计算矩阵乘法，外积视角 |  LA\_03\_02\_03.ipynb

```

## 初始化
import numpy as np

## 自定义函数，矩阵乘法第二视角
def matrix_multiplication_outer(A, B):

    # 获取矩阵 A 和 B 的形状
    m, p_A = A.shape
    p_B, n = B.shape

    # 检测矩阵形状是否符合矩阵乘法规则
    if p_A != p_B:
        raise ValueError('Dimensions do not match')

    # 初始化结果矩阵 C，形状 (m, n)，初始值设为 0
    C = np.zeros((m, n))

    for k in range(p_A):
        a_k = A[:, [k]]      # A 的第 k 列，二维数组
        b_k = B[[k], :]      # B 的第 k 行，二维数组
        C += (a_k @ b_k)      # 每次计算外积并加到结果中

    return C

## 矩阵乘法
A = np.array([[1, 2, 3],
              [4, 5, 6]])
B = A.T

## 矩阵乘法
matrix_multiplication_outer(A, B)
matrix_multiplication_outer(B, A)

```



请大家用 DeepSeek/ChatGPT 等工具完成本节如下习题。

**Q1.** 给出如下成对矩阵  $A$  和  $B$ ，分别用矩阵第二视角计算  $A @ B$  和  $B @ A$

▶  $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$ ,  $B = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$

▶  $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 1 \end{bmatrix}$ ,  $B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$

▶  $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ ,  $B = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

▶  $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix}$ ,  $B = A^T$

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：[jiang.visualize.ml@gmail.com](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

**Q2.** 给定如下成对列向量，请大家把矩阵乘法  $\mathbf{a} @ \mathbf{b}^T$  写成行、列倍数关系。

▶  $\mathbf{a} = [1, 2]^T, \mathbf{b} = [1, 2]^T$

▶  $\mathbf{a} = [1, 2]^T, \mathbf{b} = [1, 2, 3]^T$

▶  $\mathbf{a} = [1, 2, 3]^T, \mathbf{b} = [1, 2]^T$

**Q3.** 什么是矩阵的秩，和矩阵的大小有关系吗？

**Q4.** 什么是线性相关？如何从几何角度理解线性相关？

**Q5.** 什么是线性无关？如何从几何角度理解线性无关？