我们检测到你可能使用了 AdBlock 或 Adblock Plus，它的部分策略可能会影响到正常功能的使用（如关注）。
你可以设定特殊规则或将知乎加入白名单，以便我们更好地提供服务。（为什么？）

矩阵求导术（上）

长躯鬼侠
数学爱好者

2,166 人赞同了该文章

矩阵求导的技术，在统计学、控制论、机器学习等领域有广泛的应用。鉴于我看过的一些资料或言之不详、或繁乱无绪，本文来做个科普，分作两篇，上篇讲标量对矩阵的求导术，下篇讲矩阵对矩阵的求导术。本文使用小写字母x表示标量，粗体小写字母 $\boldsymbol{x}$ 表示（列）向量，大写字母X表示矩阵。

首先来琢磨一下定义，标量f对矩阵X的导数，定义为 $\frac{\partial f}{\partial X}=\left[\frac{\partial f}{\partial X_{ij}}\right]$ ，即f对X逐元素求导排成与X尺寸相同的矩阵。然而，这个定义在计算中并不好用，实用上的原因是对函数较复杂的情形难以逐元素求导；哲理上的原因是逐元素求导破坏了**整体性**。试想，为何要将f看做矩阵X而不是各元素 X_{ij} 的函数呢？答案是用矩阵运算更整洁。所以在求导时不宜拆开矩阵，而是要找一个从整体出发的算法。

为此，我们来回顾，一元微积分中的导数（标量对标量的导数）与微分有联系： $df=f'(x)dx$ ；多元微积分中的梯度（标量对向量的导数）也与微分有联系： $df=\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial f}{\partial x_i}dx_i=\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}}^T d\boldsymbol{x}$ ，这里第一个等号是全微分公式，第二个等号表达了梯度与微分的联系：全微分 df 是梯度向量 $\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}}$ (n×1)与微分向量 $d\boldsymbol{x}$ (n×1)的内积；受此启发，我们将矩阵导数与微分建立联系：
$df=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial f}{\partial X_{ij}}dX_{ij}=\text{tr}\left(\frac{\partial f}{\partial X}^T dX\right)$ 。其中tr代表迹(trace)是方阵对角线元素之和，满足性质：对尺寸相同的矩阵A,B， $\text{tr}(A^TB)=\sum_{i,j}A_{ij}B_{ij}$ ，即 $\text{tr}(A^TB)$ 是矩阵A,B的**内积**。与梯度相似，这里第一个等号是全微分公式，第二个等号表达了矩阵导数与微分的联系：全微分 df 是导数 $\frac{\partial f}{\partial X}$ (m×n)与微分矩阵 dX (m×n)的内积。

然后来建立运算法则。回想遇到较复杂的一元函数如 $f=\log(2+\sin x)e^{\sqrt{x}}$ ，我们是如何求导的呢？通常不是从定义开始求极限，而是先建立了初等函数求导和四则运算、复合等法则，再来运用这些法则。故而，我们来创立常用的矩阵微分的运算法则：

1. 加减法： $d(X\pm Y)=dX\pm dY$ ；矩阵乘法： $d(XY)=(dX)Y+XdY$ ；转置： $d(X^T)=(dX)^T$ ；迹： $d\text{tr}(X)=\text{tr}(dX)$ 。
2. 逆： $dX^{-1}=-X^{-1}dXX^{-1}$ 。此式可在 $XX^{-1}=I$ 两侧求微分来证明。
3. 行列式： $d|X|=\text{tr}(X^{\#}dX)$ ，其中 $X^{\#}$ 表示X的伴随矩阵，在X可逆时又可以写作 $d|X|=|X|\text{tr}(X^{-1}dX)$ 。此式可用Laplace展开来证明，详见张贤达《矩阵分析与应用》第279页。
4. 逐元素乘法： $d(X\odot Y)=dX\odot Y+X\odot dY$ ， $\odot$ 表示尺寸相同的矩阵X,Y逐元素相乘。
5. 逐元素函数： $d\sigma(X)=\sigma'(X)\odot dX$ ， $\sigma(X)=[\sigma(X_{ij})]$ 是逐元素标量函数运算， $\sigma'(X)=[\sigma'(X_{ij})]$ 是逐元素求导数。举个例子， $X=\begin{bmatrix}x_{11} & x_{12}\\ x_{21} & x_{22}\end{bmatrix}, d\sin(X)=\begin{bmatrix}\cos x_{11}dx_{11} & \cos x_{12}dx_{12}\\ \cos x_{21}dx_{21} & \cos x_{22}dx_{22}\end{bmatrix}=\cos(X)\odot dX$ 。

我们试图利用矩阵导数与微分的联系 $df=\text{tr}\left(\frac{\partial f}{\partial X}^T dX\right)$ ，在求出左侧的微分 df 后，该如何写成右侧的形式并得到导数呢？这需要一些迹技巧(trace trick)：

1. 标量套上迹： $a=\text{tr}(a)$
2. 转置： $\text{tr}(A^T)=\text{tr}(A)$ 。
3. 线性： $\text{tr}(A\pm B)=\text{tr}(A)\pm\text{tr}(B)$ 。

▲ 赞同 2.2K ▼ 248 条评论 分享 收藏 ···

4. 矩阵乘法交换：$\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$，其中 A 与 B^T 尺寸相同。两侧都等于 $\sum_{i,j} A_{ij}B_{ji}$。
5. 矩阵乘法/逐元素乘法交换：$\text{tr}(A^T(B\odot C)) = \text{tr}((A\odot B)^T C)$，其中 A, B, C 尺寸相同。两侧都等于 $\sum_{i,j} A_{ij}B_{ij}C_{ij}$。

观察一下可以断言，**若标量函数f是矩阵X经加减乘法、逆、行列式、逐元素函数等运算构成，则使用相应的运算法则对f求微分，再使用迹技巧给df套上迹并将其它项交换至dX左侧，对照导数与微分的联系 $df = \text{tr}\left(\frac{\partial f}{\partial X}^T dX\right)$，即能得到导数。**

特别地，若矩阵退化为向量，对照导数与微分的联系 $df = \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}}^T d\boldsymbol{x}$，即能得到导数。

在建立法则的最后，来谈一谈复合：假设已求得 $\frac{\partial f}{\partial Y}$，而Y是X的函数，如何求 $\frac{\partial f}{\partial X}$ 呢？在微积分中有标量求导的链式法则 $\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}$，但这里我们**不能随意沿用标量的链式法则**，因为矩阵对矩阵的导数 $\frac{\partial Y}{\partial X}$ 截至目前仍是未定义的。于是我们继续追本溯源，链式法则是从何而来？源头仍然是微分。我们直接从微分入手建立复合法则：先写出 $df = \text{tr}\left(\frac{\partial f}{\partial Y}^T dY\right)$，再将dY用dX表示出来代入，并使用迹技巧将其他项交换至dX左侧，即可得到 $\frac{\partial f}{\partial X}$。

最常见的情形是 $Y = AXB$，此时 $df = \text{tr}\left(\frac{\partial f}{\partial Y}^T dY\right) = \text{tr}\left(\frac{\partial f}{\partial Y}^T AdXB\right) = \text{tr}\left(B\frac{\partial f}{\partial Y}^T AdX\right) = \text{tr}\left((A^T\frac{\partial f}{\partial Y}B^T)^T dX\right)$，可得到 $\frac{\partial f}{\partial X} = A^T\frac{\partial f}{\partial Y}B^T$。注意这里 $dY = (dA)XB + AdXB + AXdB = AdXB$，由于 A, B 是常量，$dA = 0, dB = 0$，以及我们使用矩阵乘法交换的迹技巧交换了 $\frac{\partial f}{\partial Y}^T AdX$ 与 B。

接下来演示一些算例。特别提醒要依据已经建立的运算法则来计算，不能随意套用微积分中标量导数的结论，比如认为AX对X的导数为A，这是没有根据、意义不明的。

例1：$f = \boldsymbol{a}^T X\boldsymbol{b}$，求 $\frac{\partial f}{\partial X}$。其中 $\boldsymbol{a}$ 是 $m\times 1$ 列向量，X 是 $m\times n$ 矩阵，$\boldsymbol{b}$ 是 $n\times 1$ 列向量，f 是标量。

解：先使用矩阵乘法法则求微分，$df = d\boldsymbol{a}^T X\boldsymbol{b} + \boldsymbol{a}^T dX\boldsymbol{b} + \boldsymbol{a}^T Xd\boldsymbol{b} = \boldsymbol{a}^T dX\boldsymbol{b}$，注意这里的 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ 是常量，$d\boldsymbol{a} = \boldsymbol{0}, d\boldsymbol{b} = \boldsymbol{0}$。由于df是标量，它的迹等于自身，$df = \text{tr}(df)$，套上迹并做矩阵乘法交换：$df = \text{tr}(\boldsymbol{a}^T dX\boldsymbol{b}) = \text{tr}(\boldsymbol{b}\boldsymbol{a}^T dX) = \text{tr}((\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^T)^T dX)$，注意这里我们根据 $\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$ 交换了 $\boldsymbol{a}^T dX$ 与 $\boldsymbol{b}$。对照导数与微分的联系 $df = \text{tr}\left(\frac{\partial f}{\partial X}^T dX\right)$，得到 $\frac{\partial f}{\partial X} = \boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^T$。

注意：这里不能用 $\frac{\partial f}{\partial X} = \boldsymbol{a}^T\frac{\partial X}{\partial X}\boldsymbol{b} = ?$，导数与矩阵乘法的交换是不合法则的运算（而微分是合法的）。有些资料在计算矩阵导数时，会略过求微分这一步，这是逻辑上解释不通的。

例2：$f = \boldsymbol{a}^T\exp(X\boldsymbol{b})$，求 $\frac{\partial f}{\partial X}$。其中 $\boldsymbol{a}$ 是 $m\times 1$ 列向量，X 是 $m\times n$ 矩阵，$\boldsymbol{b}$ 是 $n\times 1$ 列向量，exp表示逐元素求指数，f 是标量。

解：先使用矩阵乘法、逐元素函数法则求微分：$df = \boldsymbol{a}^T(\exp(X\boldsymbol{b})\odot(dX\boldsymbol{b}))$，再套上迹并做交换：$df = \text{tr}(\boldsymbol{a}^T(\exp(X\boldsymbol{b})\odot(dX\boldsymbol{b}))) = \text{tr}((\boldsymbol{a}\odot\exp(X\boldsymbol{b}))^T dX\boldsymbol{b})$ $= \text{tr}(\boldsymbol{b}(\boldsymbol{a}\odot\exp(X\boldsymbol{b}))^T dX) = \text{tr}(((\boldsymbol{a}\odot\exp(X\boldsymbol{b}))\boldsymbol{b}^T)^T dX)$，注意这里我们先根据 $\text{tr}(A^T(B\odot C)) = \text{tr}((A\odot B)^T C)$ 交换了 $\boldsymbol{a}$、$\exp(X\boldsymbol{b})$ 与 $dX\boldsymbol{b}$，再根据 $\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$ 交换了 $(\boldsymbol{a}\odot\exp(X\boldsymbol{b}))^T dX$ 与 $\boldsymbol{b}$。对照导数与微分的联系 $df = \text{tr}\left(\frac{\partial f}{\partial X}^T dX\right)$，得到 $\frac{\partial f}{\partial X} = (\boldsymbol{a}\odot\exp(X\boldsymbol{b}))\boldsymbol{b}^T$。

▲ 赞同 2.2K ▼ 248 条评论 分享 收藏 ···

例3：$f = \text{tr}(Y^TMY), Y = \sigma(WX)$ ，求 $\frac{\partial f}{\partial X}$ 。其中 W 是 $l\times m$ 列向量，X 是 $m\times n$ 矩阵，Y 是 $l\times n$ 矩阵，M 是 $l\times l$ 对称矩阵，σ 是逐元素函数，f 是标量。

解：先求 $\frac{\partial f}{\partial Y}$ ，求微分，使用矩阵乘法、转置法则：
$df = \text{tr}((dY)^TMY) + \text{tr}(Y^TMdY) = \text{tr}(Y^TM^TdY) + \text{tr}(Y^TMdY) = \text{tr}(Y^T(M+M^T)dY)$ ，对照导数与微分的联系，得到 $\frac{\partial f}{\partial Y} = (M+M^T)Y = 2MY$ ，注意这里M是对称矩阵。为求 $\frac{\partial f}{\partial X}$ ，写出 $df = \text{tr}\left(\frac{\partial f}{\partial Y}^T dY\right)$ ，再将dY用dX表示出来代入，并使用矩阵乘法/逐元素乘法交换：
$df = \text{tr}\left(\frac{\partial f}{\partial Y}^T(\sigma'(WX)\odot(WdX))\right) = \text{tr}\left(\left(\frac{\partial f}{\partial Y}\odot\sigma'(WX)\right)^T WdX\right)$ ，对照导数与微分的联系，得到 $\frac{\partial f}{\partial X} = W^T\left(\frac{\partial f}{\partial Y}\odot\sigma'(WX)\right) = W^T((2M\sigma(WX))\odot\sigma'(WX))$ 。

例4【线性回归】：$l = \|X\boldsymbol{w} - \boldsymbol{y}\|^2$ ，求 $\boldsymbol{w}$ 的最小二乘估计，即求 $\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{w}}$ 的零点。其中 $\boldsymbol{y}$ 是 $m\times 1$ 列向量，X 是 $m\times n$ 矩阵，$\boldsymbol{w}$ 是 $n\times 1$ 列向量，l 是标量。

解：这是标量对向量的导数，不过可以把向量看做矩阵的特例。先将向量模平方改写成向量与自身的内积：$l = (X\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y})^T(X\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y})$ ，求微分，使用矩阵乘法、转置等法则：
$dl = (Xd\boldsymbol{w})^T(X\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}) + (X\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y})^T(Xd\boldsymbol{w}) = 2(X\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y})^TXd\boldsymbol{w}$ 。对照导数与微分的联系 $dl = \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{w}}^T d\boldsymbol{w}$ ，得到 $\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{w}} = 2X^T(X\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y})$ 。$\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{w}} = 0$ 即 $X^TX\boldsymbol{w} = X^T\boldsymbol{y}$ ，得到 $\boldsymbol{w}$ 的最小二乘估计为 $\boldsymbol{w} = (X^TX)^{-1}X^T\boldsymbol{y}$ 。

例5【方差的最大似然估计】：样本 $\boldsymbol{x}_1,\dots,\boldsymbol{x}_N \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu},\Sigma)$ ，求方差 Σ 的最大似然估计。写成数学式是：$l = \log|\Sigma| + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N(\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}})^T\Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}})$ ，求 $\frac{\partial l}{\partial \Sigma}$ 的零点。其中 $\boldsymbol{x}_i$ 是 $m\times 1$ 列向量，$\bar{\boldsymbol{x}} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \boldsymbol{x}_i$ 是样本均值，Σ 是 $m\times m$ 对称正定矩阵，l 是标量，log表示自然对数。

解：首先求微分，使用矩阵乘法、行列式、逆等运算法则，第一项是
$d\log|\Sigma| = |\Sigma|^{-1}d|\Sigma| = \text{tr}(\Sigma^{-1}d\Sigma)$ ，第二项是
$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N(\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}})^Td\Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}}) = -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N(\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}})^T\Sigma^{-1}d\Sigma\Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}})$ 。再给第二项套上迹做交换：$\text{tr}\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N(\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}})^T\Sigma^{-1}d\Sigma\Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}})\right) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N\text{tr}((\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}})^T\Sigma^{-1}d\Sigma\Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}}))$
$= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N\text{tr}\left(\Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}})^T\Sigma^{-1}d\Sigma\right) = \text{tr}(\Sigma^{-1}S\Sigma^{-1}d\Sigma)$ ，其中先交换迹与求和，然后将 $\Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}})$ 交换到左边，最后再交换迹与求和，并定义 $S = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N(\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i-\bar{\boldsymbol{x}})^T$ 为样本方差矩阵。得到 $dl = \text{tr}\left((\Sigma^{-1}-\Sigma^{-1}S\Sigma^{-1})d\Sigma\right)$ 。对照导数与微分的联系，有
$\frac{\partial l}{\partial \Sigma} = (\Sigma^{-1}-\Sigma^{-1}S\Sigma^{-1})^T$ ，其零点即 Σ 的最大似然估计为 $\Sigma = S$ 。

例6【多元logistic回归】：$l = -\boldsymbol{y}^T\log\text{softmax}(W\boldsymbol{x})$ ，求 $\frac{\partial l}{\partial W}$ 。其中 $\boldsymbol{y}$ 是除一个元素为1外其它元素为0的 $m\times 1$ 列向量，W 是 $m\times n$ 矩阵，$\boldsymbol{x}$ 是 $n\times 1$ 列向量，l 是标量；log表示自然对数，$\text{softmax}(\boldsymbol{a}) = \frac{\exp(\boldsymbol{a})}{\boldsymbol{1}^T\exp(\boldsymbol{a})}$ ，其中 $\exp(\boldsymbol{a})$ 表示逐元素求指数，$\boldsymbol{1}$ 代表全1向量。

解1：首先将softmax函数代入并写成
$l = -\boldsymbol{y}^T\left(\log(\exp(W\boldsymbol{x})) - \boldsymbol{1}\log(\boldsymbol{1}^T\exp(W\boldsymbol{x}))\right) = -\boldsymbol{y}^TW\boldsymbol{x} + \log(\boldsymbol{1}^T\exp(W\boldsymbol{x}))$ ，这里要注意逐元素log满足等式 $\log(\boldsymbol{u}/c) = \log(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{1}\log(c)$ ，以及 $\boldsymbol{y}$ 满足 $\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{1} = 1$ 。求微分，使用矩阵乘法、逐元素函数等法则：$dl = -\boldsymbol{y}^TdW\boldsymbol{x} + \frac{\boldsymbol{1}^T\left(\exp(W\boldsymbol{x})\odot(dW\boldsymbol{x})\right)}{\boldsymbol{1}^T\exp(W\boldsymbol{x})}$ 。再套上迹并做交换，注意可化简 $\boldsymbol{1}^T\left(\exp(W\boldsymbol{x})\odot(dW\boldsymbol{x})\right) = \exp(W\boldsymbol{x})^TdW\boldsymbol{x}$ ，这是根据等式 $\boldsymbol{1}^T(\boldsymbol{u}\odot\boldsymbol{v}) = \boldsymbol{u}^T\boldsymbol{v}$ ，故
$dl = \text{tr}\left(-\boldsymbol{y}^TdW\boldsymbol{x} + \frac{\exp(W\boldsymbol{x})^TdW\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{1}^T\exp(W\boldsymbol{x})}\right) = \text{tr}(-\boldsymbol{y}^TdW\boldsymbol{x} + \text{softmax}(W\boldsymbol{x})^TdW\boldsymbol{x}) = \text{tr}(\boldsymbol{x}(\text{softmax}(W\boldsymbol{x})-\boldsymbol{y})^TdW)$
。对照导数与微分的联系，得到 $\frac{\partial l}{\partial W} = (\text{softmax}(W$

▲ 赞同 2.2K ▼ 248 条评论 分享 收藏 ···

解2：定义 $\boldsymbol{a} = W\boldsymbol{x}$ ，则 $l = -\boldsymbol{y}^T \log \mathrm{softmax}(\boldsymbol{a})$ ，先同上求出 $\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}} = \mathrm{softmax}(\boldsymbol{a}) - \boldsymbol{y}$ ，再利用复合法则： $dl = \mathrm{tr}\left(\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}}^T d\boldsymbol{a}\right) = \mathrm{tr}\left(\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}}^T dW\boldsymbol{x}\right) = \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{x}\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}}^T dW\right)$ ，得到 $\frac{\partial l}{\partial W} = \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}}\boldsymbol{x}^T$ 。

最后一例留给经典的神经网络。神经网络的求导术是学术史上的重要成果，还有个专门的名字叫做BP算法，我相信如今很多人在初次推导BP算法时也会颇费一番脑筋，事实上使用矩阵求导术来推导并不复杂。为简化起见，我们推导二层神经网络的BP算法。

例7【二层神经网络】： $l = -\boldsymbol{y}^T \log \mathrm{softmax}(W_2\sigma(W_1\boldsymbol{x}))$ ，求 $\frac{\partial l}{\partial W_1}$ 和 $\frac{\partial l}{\partial W_2}$ 。其中 $\boldsymbol{y}$ 是除一个元素为1外其它元素为0的的 $m \times 1$ 列向量， W_2 是 $m \times p$ 矩阵， W_1 是 $p \times n$ 矩阵， $\boldsymbol{x}$ 是 $n \times 1$ 列向量， l 是标量；log表示自然对数， $\mathrm{softmax}(\boldsymbol{a}) = \frac{\exp(\boldsymbol{a})}{\boldsymbol{1}^T \exp(\boldsymbol{a})}$ 同上， σ 是逐元素sigmoid函数 $\sigma(a) = \frac{1}{1+\exp(-a)}$ 。

解：定义 $\boldsymbol{a}_1 = W_1\boldsymbol{x}$ ， $\boldsymbol{h}_1 = \sigma(\boldsymbol{a}_1)$ ， $\boldsymbol{a}_2 = W_2\boldsymbol{h}_1$ ，则 $l = -\boldsymbol{y}^T \log \mathrm{softmax}(\boldsymbol{a}_2)$ 。在前例中已求出 $\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_2} = \mathrm{softmax}(\boldsymbol{a}_2) - \boldsymbol{y}$ 。使用复合法则，

$dl = \mathrm{tr}\left(\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_2}^T d\boldsymbol{a}_2\right) = \mathrm{tr}\left(\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_2}^T dW_2\boldsymbol{h}_1\right) + \underbrace{\mathrm{tr}\left(\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_2}^T W_2 d\boldsymbol{h}_1\right)}_{dl_2}$ ，使用矩阵乘法交换的迹技巧从第一项得到 $\frac{\partial l}{\partial W_2} = \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_2}\boldsymbol{h}_1^T$ ，从第二项得到 $\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{h}_1} = W_2^T\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_2}$ 。接下来对第二项继续使用复合法则来求 $\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_1}$ ，并利用矩阵乘法和逐元素乘法交换的迹技巧：

$dl_2 = \mathrm{tr}\left(\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{h}_1}^T d\boldsymbol{h}_1\right) = \mathrm{tr}\left(\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{h}_1}^T (\sigma'(\boldsymbol{a}_1) \odot d\boldsymbol{a}_1)\right) = \mathrm{tr}\left(\left(\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{h}_1} \odot \sigma'(\boldsymbol{a}_1)\right)^T d\boldsymbol{a}_1\right)$ ，得到 $\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_1} = \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{h}_1} \odot \sigma'(\boldsymbol{a}_1)$ 。为求 $\frac{\partial l}{\partial W_1}$ ，再用一次复合法则：

$dl_2 = \mathrm{tr}\left(\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_1}^T d\boldsymbol{a}_1\right) = \mathrm{tr}\left(\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_1}^T dW_1\boldsymbol{x}\right) = \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{x}\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_1}^T dW_1\right)$ ，得到 $\frac{\partial l}{\partial W_1} = \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_1}\boldsymbol{x}^T$ 。

推广：样本 $(\boldsymbol{x}_1, y_1), \ldots, (\boldsymbol{x}_N, y_N)$ ， $l = -\sum_{i=1}^N \boldsymbol{y}_i^T \log \mathrm{softmax}(W_2\sigma(W_1\boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{b}_1) + \boldsymbol{b}_2)$ ，其中 $\boldsymbol{b}_1$ 是 $p \times 1$ 列向量， $\boldsymbol{b}_2$ 是 $m \times 1$ 列向量，其余定义同上。

解1：定义 $\boldsymbol{a}_{1,i} = W_1\boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{b}_1$ ， $\boldsymbol{h}_{1,i} = \sigma(\boldsymbol{a}_{1,i})$ ， $\boldsymbol{a}_{2,i} = W_2\boldsymbol{h}_{1,i} + \boldsymbol{b}_2$ ，则 $l = -\sum_{i=1}^N \boldsymbol{y}_i^T \log \mathrm{softmax}(\boldsymbol{a}_{2,i})$ 。先同上可求出 $\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_{2,i}} = \mathrm{softmax}(\boldsymbol{a}_{2,i}) - \boldsymbol{y}_i$ 。使用复合法则，

$dl = \mathrm{tr}\left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_{2,i}}^T d\boldsymbol{a}_{2,i}\right) = \mathrm{tr}\left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_{2,i}}^T dW_2\boldsymbol{h}_{1,i}\right) + \underbrace{\mathrm{tr}\left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_{2,i}}^T W_2 d\boldsymbol{h}_{1,i}\right)}_{dl_2} + \mathrm{tr}\left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_{2,i}}^T d\boldsymbol{b}_2\right)$ ，从第一项得到得到 $\frac{\partial l}{\partial W_2} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_{2,i}}\boldsymbol{h}_{1,i}^T$ ，从第二项得到 $\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{h}_{1,i}} = W_2^T\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_{2,i}}$ ，从第三项得到到 $\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{b}_2} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_{2,i}}$ 。接下来对第二项继续使用复合法则，得到 $\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_{1,i}} = \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{h}_{1,i}} \odot \sigma'(\boldsymbol{a}_{1,i})$ 。为求 $\frac{\partial l}{\partial W_1}, \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{b}_1}$ ，再用一次复合法则：

$dl_2 = \mathrm{tr}\left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_{1,i}}^T d\boldsymbol{a}_{1,i}\right) = \mathrm{tr}\left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_{1,i}}^T dW_1\boldsymbol{x}_i\right) + \mathrm{tr}\left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_{1,i}}^T d\boldsymbol{b}_1\right)$ ，得到 $\frac{\partial l}{\partial W_1} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_{1,i}}\boldsymbol{x}_i^T$ ， $\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{b}_1} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{a}_{1,i}}$ 。

解2：可以用矩阵来表示N个样本，以简化形式。定义 $X = [\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N]$ ， $A_1 = [\boldsymbol{a}_{1,1}, \cdots, \boldsymbol{a}_{1,N}] = W_1X + \boldsymbol{b}_1\boldsymbol{1}^T$ ， $H_1 = [\boldsymbol{h}_{1,1}, \cdots, \boldsymbol{h}_{1,N}] = \sigma(A_1)$ ， $A_2 = [\boldsymbol{a}_{2,1}, \cdots, \boldsymbol{a}_{2,N}] = W_2H_1 + \boldsymbol{b}_2\boldsymbol{1}^T$ ，注意这里使用全1向量来扩展维度。先同上求出 $\frac{\partial l}{\partial A_2} = [\mathrm{softmax}(\boldsymbol{a}_{2,1}) - \boldsymbol{y}_1, \cdots, \mathrm{softmax}(\boldsymbol{a}_{2,N}) - \boldsymbol{y}_N]$ 。使用复合法则，

$dl = \mathrm{tr}\left(\frac{\partial l}{\partial A_2}^T dA_2\right) = \mathrm{tr}\left(\frac{\partial l}{\partial A_2}^T dW_2H_1\right) + \underbrace{\mathrm{tr}\left(\frac{\partial l}{\partial A_2}^T W_2dH_1\right)}_{dl_2} + \mathrm{tr}\left(\frac{\partial l}{\partial A_2}^T d\boldsymbol{b}_2\boldsymbol{1}^T\right)$ ，从第一项得到 $\frac{\partial l}{\partial W_2} = \frac{\partial l}{\partial A_2}H_1^T$ ，从第二项得到 $\frac{\partial l}{\partial H_1} = W$

▲ 赞同 2.2K ▼ 248 条评论 分享 收藏 ···

来对第二项继续使用复合法则，得到 $\frac{\partial l}{\partial A_1} = \frac{\partial l}{\partial H_1} \odot \sigma'(A_1)$。为求 $\frac{\partial l}{\partial W_1}, \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{b}_1}$ ，再用一次复合法则：$dl_2 = \text{tr}\left(\frac{\partial l}{\partial A_1}^T dA_1\right) = \text{tr}\left(\frac{\partial l}{\partial A_1}^T dW_1 X\right) + \text{tr}\left(\frac{\partial l}{\partial A_1}^T d\boldsymbol{b}_1 \boldsymbol{1}^T\right)$ ，得到 $\frac{\partial l}{\partial W_1} = \frac{\partial l}{\partial A_1} X^T$ ，$\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{b}_1} = \frac{\partial l}{\partial A_1} \boldsymbol{1}$。

下篇见zhuanlan.zhihu.com/p/24...。

编辑于 2019-05-16

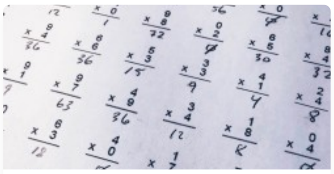
机器学习 矩阵分析 优化

推荐阅读

矩阵求导术（下）

本文承接上篇 https://zhuanlan.zhihu.com/p/24 来讲矩阵对矩阵的求导术。使用小写字母x表示标量，粗体小写字母 \boldsymbol{x} 表示列向量，大写字母X表示矩阵。矩阵对矩阵的求...

长躯鬼侠



深度学习线性代数简明教程

论智 发表于论智

矩阵求导的理解（

《矩阵求导术》重点 量对矩阵的求导一元 对标量）中的导数与 df=f'(x)dx 多元 对向量）中的梯度与 df=\sum_{i=1}^n \

codin... 发表

248 条评论 切换为时间排序

写下你的评论...

精选评论（2）

resurrectcore 2 年前

网上有个pdf叫做 The Matrix Cookbook.

22 查看回复

知乎用户 回复 resurrectcore 2 年前

我看过，相信写这篇文章的人也看过。感觉这里的方法比硬背公式简单，而且对于搞机器学习的这里的够用了

25 查看回复

评论（248）

方不觉 2 年前

nbnb，一直对矩阵求导感觉无从下手，这几条法则比背公式好记多了！

10

resurrectcore 2 年前

网上有个pdf叫做 The Matrix Cookbook.

22

知乎用户 回复 resurrectcore 2 年前

我看过，相信写这篇文章的人也看过。感觉这里的方法比硬背公式简单，而且对于搞机器学习的这里的够用了

▲ 赞同 2.2K ▼ 248 条评论 分享 收藏 ···