**矩阵微分**

**一、**

**1、预先规定**

A’和都代表矩阵转置

ξ代表标量，a代表列向量，A代表矩阵

Φ()代表标量方程输出为标量，f()代表向量方程输出为列向量，F()代表矩阵方程输出为矩阵

矩阵A的shape=(m,n)；矩阵B的shape=(p,q)

**2、公式知识**

[1]矩阵基本运算

[2]矩阵的内积与范数

[3]矩阵的迹

tr (A+B)=tr A + tr B

tr AB=tr BA

[4]矩阵的Kronecker积/张量积

[5]向量化与矩阵化

[6] 一阶实矩阵微分与Jacobian矩阵辨识

**3、核心知识整理**

[1] Jacobian矩阵定义(扩展到输入为矩阵，输出为矩阵)：

[2] 矩阵微分与Jacobian矩阵的关系:

[3] Jacobian矩阵与梯度矩阵的关系:

**4、求导公式**

[1]矩阵求导公式

|  |  |
| --- | --- |
| F(X) | Jacobian矩阵DF(X) |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |

公式来自于《矩阵分析与应用 第二版》P163

[2]一般求导公式

不涉及矩阵的求导公式参考维基百科en.wikipedia.org/wiki/Matrix\_calculus

**5、一般Jacobian矩阵方法（推求导公式的方法）**

[1] 按Jacobian矩阵定义展开，逐个元素求导

[2] 公式求Jacobian矩阵DxΦ(X)的步骤

step1：将 dΦ(X)转化为迹的形式

step2：由dΦ(X)得到DxΦ(X)

[3] 公式求Jacobian矩阵DxF(X)的步骤

step1：求dF(X)

step2：计算d vec F(X)

step3：由d vec F(X)得DxF(X)和∇xF(X)

**6、三种矩阵布局**

矩阵的分子布局Numerator layout与分母布局Denominator layout

并非所有数学教科书和论文在矩阵微分表示方面始终如一。也就是说，有时在同一本书或纸上的不同背景中使用不同的约定。例如，有些选择表示梯度矩阵时使用分母布局，而表示vector-by-vector微分矩阵时使用分子布局

**不同的布局对应的矩阵求导公式不同，求导结果形状也不同。**

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  |  | Scalar φ | | Vector y(size m×1) | | Matrix Y(size m×n) | |
|  |  | Notation | Shape | Notation | Shape | Notation | Shape |
| Scalar ξ | Jacobian |  | scalar |  | m×1 |  | mn×1 |
| 分子分布 | m×1 | m×n |
| 分母分布 | 1×m |  |
| Vector x  (size p×1) | Jacobian |  | 1×p |  | m×p |  | mn×p |
| 分子分布 | 1×p | m×p |  |
| 分母分布 | p×1 | p×m |  |
| Matrix X  (size p×q) | Jacobian |  | 1×pq |  | m×pq |  | mn×pq |
| 分子分布 | q×p |  |  |
| 分母分布 | p×q |  |  |

Jacobian布局：分子(求导公式)决定行数，分母(求导变量)决定列数。

分子布局：不涉及矩阵求导的情况下，分子(求导公式)决定行数，分母(求导变量)决定列数。

分母布局：不涉及矩阵求导的情况下，分子(求导公式)决定列数，分母(求导变量)决定行数。

**二、Jacobian布局细节**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | Scalar variable | Vector variable | Matrix variable |
| Scalar function | φ(ξ) | φ(x) | φ(X) |
| Vector function | f(ξ) | f(x) | f(X) |
| Matrix function | F(ξ) | F(x) | F(X) |

1、标量和向量

dφ(ξ)/dξ（标量/标量）*——>* 标量

dφ(x)/ dx（标量/向量）

标量/列向量*——>*行向量

标量/行向量*——>*行向量

df(ξ)/ dξ（向量/标量）

列向量/标量*——>*列向量

行向量/标量*——>*列向量

df(x)/ dx(向量/向量)

列向量/列向量*——>*

列向量/行向量*——>*

行向量/列向量*——>*

行向量/行向量*——>*

2、标量和矩阵

矩阵/标量*——>*

Jacobian形式

分子布局

标量/矩阵*——>*

Jacobian形式

分子布局

3、向量和矩阵

矩阵/矩阵*——>*

**三、Shape Convention**

1、一般意义下Shape Convention

在具体运算过程中，我们一般希望导数的形状和自变量的形状一致（用于梯度下降）。

所以在shape convention中，为了使导数的形状和自变量的形状一致，求导规则会有相应变化。

所以一些书中会提及“注意，扩展Jacobian矩阵时，当变元是列变量时，我们是对其转置求偏导；当变元非列变量时，我们对其本身求偏导。”

但是记忆不同布局下的不同求导规则太麻烦，不统一。所以本文一致遵循Jacobian求导规则。

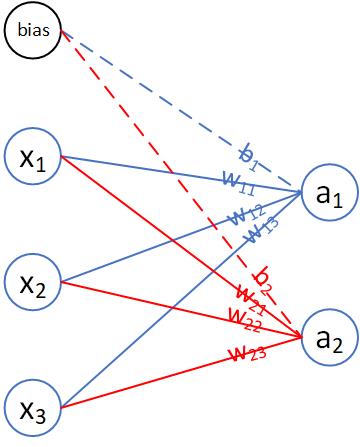
2、Jacobian + Shape Convention

注意到在Jacobian布局中，自变量(分子)数目和Jacobian矩阵列数一致，为了使导数的形状和自变量的形状一致，我们可以将Jacobian矩阵压缩为一行，对应python语句gradient\_vec = np.sum(Jacobian, axis=0)

进一步，还可以将gradient行向量矩阵化，对应python语句gradient = gradient\_vec.reshape(p,-1,order=’F’)

3、举例

以一个二维向量输出为例



实际中我们使用gradient([y1,y2], [x1,x2])函数，gradients(y, x)求导y=f(x), 返回一个list，列表长度和x数量一致，列表中每个元素是对于y进行sum(dy/dx)。由于对y进行sum操作，所以能保证维度和梯度分子一致。

对于节点求导：

对于权重求导

**四、关于Jacobian矩阵**

其实牵涉到矩阵求导的Jacobian矩阵的形状在不同教材中不同

1、

《矩阵分析与应用 第二版》中，区分了。

代表Jacobian矩阵，其形状和分子布局完全一样

2、

《Matrix Differential Calculus with Applications in Statistics and Econometrics 3rd Edition》中

代表了Jacobian矩阵，形状和分子布局有所不同（见书P199或本文 一.6）

本文取后者

**五、参考书籍和博客：**

《Matrix Differential Calculus with Applications in Statistics and Econometrics 3rd Edition》

《矩阵分析与应用 第二版》张贤达

https://zhuanlan.zhihu.com/p/32368246

https://en.wikipedia.org/wiki/Matrix\_calculus