

第三章 矩阵分析及其应用

3.1 矩阵序列与矩阵级数

3.2 矩阵函数

3.3 矩阵的微分与积分

引言：一元多项式 $f(t) = c_0 + c_1 t + \cdots + c_m t^m$

矩阵多项式 $f(A) = c_0 I + c_1 A + \cdots + c_m A^m \quad (\forall A_{n \times n})$

易见， $f(A)$ 是以矩阵为自变量且取值为矩阵的一类函数.

本章研究一般的以矩阵为自变量且取值为矩阵的函数——矩阵函数

3.1 矩阵序列与矩阵级数

1. 矩阵序列

2. 矩阵级数

1. 矩阵序列

设有矩阵序列 $\{A^{(k)}=(a_{ij}^{(k)})\}$ ，若对所有的 i 和 j ，当 k 趋于无穷时， $a_{ij}^{(k)}$ 趋于 a_{ij} ，则称 $\{A^{(k)}\}$ **收敛**，并称矩阵 $A=(a_{ij})$ 是 $\{A^{(k)}\}$ 的**极限**，记做

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)} = A.$$

若对某一组 i 和 j ， $a_{ij}^{(k)}$ 不收敛，则称 $\{A^{(k)}\}$ **发散**。

定理1: 设 $A^{(k)} \in C^{m \times n}$, 设 $\|\cdot\|$ 为任意广义矩阵范数, 则

(1) $A^{(k)}$ 趋于0的充要条件是 $\|A^{(k)}\|$ 趋于0;

(2) $A^{(k)}$ 趋于 A 的充要条件是 $\|A^{(k)} - A\|$ 趋于0。

证明: 利用广义矩阵范数的等价性定理, 仅对 ∞ 范数可以证明。

$$\text{即 } c_1 \|A^{(k)} - A\|_{\infty} \leq \|A^{(k)} - A\| \leq c_2 \|A^{(k)} - A\|_{\infty}$$

类似地, 我们可以定义矩阵收敛的 Cauchy 定义

定义 3.1' 矩阵序列 $\{A^{(k)}\}$ 收敛的充要条件为

对任给 $\varepsilon > 0$ 存在 $N(\varepsilon)$, 当 $k, l \geq N(\varepsilon)$ 时有

$$\|A^{(k)} - A^{(l)}\| < \varepsilon$$

其中 $\|\cdot\|$ 为任意的广义矩阵范数。

$$\text{例 1} \quad \mathbf{A}^{(n)} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{n} & \sin(\frac{1}{n}) \\ e^{-n} & \sum_{k=1}^n \frac{\sin(k)}{k^2} \end{pmatrix}$$

如果直接按定义我们因为求不出 $\mathbf{A}^{(n)}$ 的极限从而很难应用定义 3.1 证明收敛。

$$\text{相反, 由于 } \left| \sum_{k=m+1}^n \frac{\sin(k)}{k^2} \right| \leq \left| \sum_{k=m+1}^n \frac{1}{k^2} \right| \leq \left| \sum_{k=m+1}^n \frac{1}{k(k-1)} \right| \\ < 1/m$$

从而只要 l 充分大, 则当 $m, n > l$ 时就有

$$\left| \sum_{k=m+1}^n \frac{\sin(k)}{k^2} \right| \leq \varepsilon$$

这样 $\mathbf{A}^{(l)}$ 收敛。

性质0 若 $A^{(k)} \rightarrow A$, 则 $\|A^{(k)}\| \rightarrow \|A\|$ 成立。

性质1: 设 $A^{(k)}$ 和 $B^{(k)}$ 分别收敛到 A 和 B , 则

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha A^{(k)} + \beta B^{(k)} = \alpha A + \beta B,$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)} B^{(k)} = AB.$$

证明: 由于矩阵范数的等价性, 我们可以只讨论相容的矩阵范数。

$$\begin{aligned} \|A^{(k)} \cdot B^{(k)} - A \cdot B\| &\leq \|A^{(k)} \cdot B^{(k)} - A \cdot B^{(k)}\| + \|AB^{(k)} - A \cdot B\| \\ &\leq \|A^{(k)} - A\| \cdot \|B^{(k)}\| + \|A\| \cdot \|B^{(k)} - B\| \end{aligned}$$

注意 $\|B^{(k)}\| \rightarrow \|B\|$, 则结论可得。

特别地有

性质 2'. $A^{(k)} \rightarrow A$ 的充要条件为

$$A^{(k)} x \rightarrow Ax, \text{ 对任意 } x \text{ 成立}$$

或者 $y^H A^{(k)} x \rightarrow y^H Ax$, 对任意 x, y 成立.

(在无穷维空间中称为弱收敛, 但在有限维空间中
和一般收敛性定义是等价的)

对于 Hermite(对称)矩阵我们有如下的定理:

设 $A^{(k)}$, $k=1,2,\dots$, 和 A 都为 Hermite 矩阵, 那么

$A^{(k)} \rightarrow A$ 的充要条件为

$$x^H A^{(k)} x \rightarrow x^H Ax, \text{ 对任意 } x \text{ 成立}$$

推论: $A^{(k)}$, $k=1,2,\dots$, 为半正定 Hermite 矩阵, 且单调减少,

即 $A^{(k)} - A^{(k+1)}$ 为半正定 Hermite 矩阵, 那么 $A^{(k)}$ 有极限.

性质2: 设 $A^{(k)}$ 收敛到 A , 且 $A^{(k)}$ 和 A 都可逆, 则

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left(A^{(k)} \right)^{-1} = A^{-1}.$$

证明: 因为 $A^{-1} \cdot (A^{(k)}) \rightarrow I$ 所以存在 K , 当 $k > K$ 时有

$$\|I - A^{-1} \cdot (A^{(k)})\| < 1/2$$

我们有 $(A^{(k)})^{-1} = A^{-1} + (I - A^{-1} \cdot (A^{(k)})) (A^{(k)})^{-1}$

从而 $\|(A^{(k)})^{-1}\| \leq \|A^{-1}\| + \|(I - A^{-1} \cdot (A^{(k)}))\| \cdot \|(A^{(k)})^{-1}\|$

当 $k > K$ 时, 有

$$\|(A^{(k)})^{-1}\| \leq \|A^{-1}\| + 1/2 \cdot \|(A^{(k)})^{-1}\|$$

即 $\|(A^{(k)})^{-1}\| \leq 2 \cdot \|A^{-1}\|$

因为 $A^{-1} - (A^{(k)})^{-1} = A^{-1} (A^{(k)} - A) (A^{(k)})^{-1}$

从而 $\|A^{-1} - (A^{(k)})^{-1}\| \leq \|A^{-1}\| \cdot \|A^{(k)} - A\| \cdot \|(A^{(k)})^{-1}\|$

(当 $k > K$ 时) $\leq \|A^{-1}\| \cdot \|A^{(k)} - A\| \cdot 2\|A^{-1}\|$

(当 $k \rightarrow \infty$ 时) $\rightarrow 0$

由定理 3.1 有 $(A^{(k)})^{-1} \rightarrow A^{-1}$

定义 3.2 矩阵序列 $\{A^{(k)}\}$ 称为有界的, 如果存在常数

$M > 0$, 使得对一切 k 都有

$$|a_{ij}^{(k)}| < M \quad \text{或等价的} \quad \|A^{(k)}\| < M,$$

定理: 有界的矩阵序列 $\{A^{(k)}\}$ 一定有收敛的子列。

定义：设 A 为方阵，且当 k 趋于无穷时， A^k 趋于0，则称 A 为收敛矩阵。

定理2(迭代法基本定理)： A 是收敛矩阵的充要条件是 $\rho(A)<1$ 。

证明：必要性：设 $A^k \rightarrow 0$ ，证明 $\rho(A)<1$ 。

对 A 的任意特征值 λ 和相应的特征向量 x 有 $\lambda x = Ax$ 。

这样我们有 $A^k x = \lambda^k x$

从而有 $|\lambda|^k \cdot \|x\| = \|A^k x\| \leq \|A^k\| \cdot \|x\|$

从而有 $|\lambda|^k \leq \|A^k\| \rightarrow 0$

这样有 $|\lambda|<1$ ，由于 λ 为 A 的任意特征值，

所以 $\rho(A)<1$ ，即必要性得证。

充分性。已知 $\rho(A) < 1$ ，证明 $A^k \rightarrow 0$ 。

取 $\varepsilon = (1 - \rho(A))/2 > 0$ ，由定理 2.10 有，存在某种相容的矩阵范数 $\|\cdot\|_M$ 使得 $\|A\|_M < \rho(A) + \varepsilon < 1$

从而 $\|A^k\|_M \leq (\|A\|_M)^k < (\rho(A) + \varepsilon)^k$

所以当 $k \rightarrow \infty$ 有 $\|A^k\|_M \rightarrow 0$ ，从而 $A^k \rightarrow 0$ 。

定理3： A 是收敛矩阵的充要条件是存在某种矩阵范数满足 $\|A\| < 1$ 。

2. 矩阵级数

矩阵级数 $\sum_{k=0}^{\infty} A^{(k)}$ 收敛到 S ，是指它的部分和序列

$S_N = \sum_{k=0}^N A^{(k)}$ 收敛，且极限为 S 。

显然矩阵级数收敛指每个元素对应的级数收敛。

性质：矩阵级数 $\sum_{i=0}^{\infty} A^{(k)}$ 收敛的充要条件为对任意向量 x ,

向量级数 $\sum_{i=0}^{\infty} A^{(k)} x$ 收敛。

2. 矩阵级数

矩阵级数 $\sum_{k=0}^{\infty} A^{(k)}$ **绝对收敛**到 S ，是指它的部分和序列 $S_N = \sum_{k=0}^N A^{(k)}$ **绝对收敛**，且极限为 S 。

即：每个元素对应的数项级数都是绝对收敛的，则称矩阵级数是**绝对收敛**的。

性质3：若矩阵级数是绝对收敛的，则它一定是收敛的，并且任意调换其项的顺序所得到的级数仍然是收敛的，且其和不变。

性质4: 矩阵级数 $\sum_{k=0}^{\infty} A^{(k)}$ 是绝对收敛的充要条件是 $\sum_{k=0}^{\infty} \|A^{(k)}\|$ 收敛。

性质5: 若矩阵级数 $\sum_{k=0}^{\infty} A^{(k)}$ 是收敛(绝对收敛)的, 那么 $\sum_{k=0}^{\infty} PA^{(k)}Q$ 也是收敛(绝对收敛)的, 且

$$\sum_{k=0}^{\infty} PA^{(k)}Q = P \left(\sum_{k=0}^{\infty} A^{(k)} \right) Q.$$

性质6: 若两个矩阵级数都绝对收敛, 分别收敛到 A, B , 则其Cauchy乘积绝对收敛, 且收敛到 AB 。

证明：由于 $S_1: A^{(1)}+A^{(2)}+\dots+A^{(k)}+\dots$ 绝对收敛的充要条件为正项级数 $\|A^{(1)}\|+\|A^{(2)}\|+\dots+\|A^{(k)}\|+\dots$ 收敛且与排列无关。

我们证明的思路是证明正项级数：

$$\begin{aligned} & \|A^{(1)} B^{(1)}\| + \|A^{(1)} B^{(2)} + A^{(2)} B^{(1)}\| + \dots \\ & + \|A^{(1)} B^{(k)} + A^{(2)} B^{(k-1)} + \dots + A^{(k)} B^{(1)}\| + \dots \end{aligned}$$

收敛。引用魏氏定理，我们仅需验证下列正项级数：

$$\begin{aligned} & \|A^{(1)}\| \cdot \|B^{(1)}\| + \{ \|A^{(1)}\| \cdot \|B^{(2)}\| + \|A^{(2)}\| \cdot \|B^{(1)}\| \} + \dots \\ & + \{ \|A^{(1)}\| \cdot \|B^{(k)}\| + \|A^{(2)}\| \cdot \|B^{(k-1)}\| + \dots + \|A^{(k)}\| \cdot \|B^{(1)}\| \} + \dots \end{aligned}$$

收敛。这由题设

正项级数 $\|A^{(1)}\|+\|A^{(2)}\|+\dots+\|A^{(k)}\|+\dots$

和正项级数 $\|B^{(1)}\|+\|B^{(2)}\|+\dots+\|B^{(k)}\|+\dots$

的收敛性可得。

定理4: 方阵 A 的幂级数 $\sum_{k=0}^{\infty} A^k$ 收敛的充要条件是

$\rho(A) < 1$, 且收敛时的和为 $(I-A)^{-1}$ 。

证明: 必要性. 由于 $I+A+A^2+\dots+A^k+\dots$ 收敛, 从而 $S^{(k)}=I+A+A^2+\dots+A^k$ 收敛。记 $T^{(k)}=I+A+A^2+\dots+A^{k+1}$, $A^{k+1}=T^{(k)}-S^{(k)}$ 收敛, 且 $T^{(k)}-S^{(k)} \rightarrow 0$, 这样我们有 $A^k \rightarrow 0$, 从而 $\rho(A) < 1$.

充分性: 设 $\rho(A) < 1$, $(I-A)^{-1}$ 存在, 由于 $I+A+A^2+\dots+A^k=(I-A)^{-1}-(I-A)^{-1}A^{k+1}$
因 $A^k \rightarrow 0$, 所以 $I+A+A^2+\dots+A^k+\dots \rightarrow (I-A)^{-1}$.

定理5： 若方阵 A 对某一矩阵范数有 $\|A\|<1$ ，则部分和 $I+A+\dots+A^N$ 与和 $(I-A)^{-1}$ 之间的误差为：

$$\left\| (I-A)^{-1} - \sum_{k=0}^N A^k \right\| \leq \frac{\|A\|^{N+1}}{1-\|A\|}.$$

证明： $(I-A)^{-1} - (I+A+A^2+\dots+A^k) = (I-A)^{-1} A^{k+1}$

从而

$$\|(I-A)^{-1} - (I+A+A^2+\dots+A^k)\| = \|(I-A)^{-1} A^{k+1}\|$$

设 $B=(I-A)^{-1} A^{k+1}$, 从而 $(I-A)B=A^{k+1}$ 即

$B=AB+A^{k+1}$, 从而

$$\|B\| \leq \|A\| \cdot \|B\| + \|A^{k+1}\| \leq \|A\| \cdot \|B\| + \|A\|^{k+1}$$

因为矩阵范数 $\|\cdot\|$ 使得 $\|A\|<1$, 所以

$$\|B\| \leq \|A\|^{k+1} / (1-\|A\|) \text{ 成立。}$$

定理6: 设幂级数 $\sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k$ 的收敛半径为 r 。如果方

阵 A 满足 $\rho(A) < r$, 则矩阵幂级数 $\sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k$ 绝对收敛;
若 $\rho(A) > r$, 则矩阵幂级数发散。

证明: 利用绝对收敛的性质。

反之, 设 A 的特征值 λ 满足 $|\lambda| = \rho(A)$, x 为 λ 相应的

特征向量
$$\sum_{k=0}^n c_k (A^k x) = \sum_{k=0}^n c_k (\lambda^k x) = \left(\sum_{k=0}^n c_k \lambda^k \right) x,$$

由于 $\rho(A) > r$, 那么 $\left(\sum_{k=0}^n c_k \lambda^k \right) x$ 发散 (注意 x 为非零向量)

从而 $\sum_{k=0}^n c_k (A^k x)$ 发散, 这样 $\sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k$ 发散。

3.2 矩阵函数

1. 矩阵函数的概念
2. 矩阵函数值的求法

1. 矩阵函数的概念

设一元函数 $f(z)$ 能展开成 z 的幂级数：

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k, \quad |z| < r,$$

则当 n 阶方阵 A 满足 $\rho(A) < r$ 时，矩阵级数 $\sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k$ 收敛，其和称为矩阵函数，记为

$$f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k.$$

性质 1(代入规则): 若 $f(z)$ 能展开为 z 的幂级数,且 $f(z)=g(z)$,
对 $|z| < r$ 成立, 则当 $\rho(A) < r$ 时, $f(A)=g(A)$.

矩阵函数举例：

$$\sin(z)=z-z^3/3!+z^5/5!-\dots$$

$$\text{则 } \sin(\mathbf{A})=\mathbf{I}-\mathbf{A}^3/3!+\mathbf{A}^5/5!-\dots$$

$$\cos(z)=1-z^2/2!+z^4/4!-\dots$$

$$\cos(\mathbf{A})=\mathbf{I}-\mathbf{A}^2/2!+\mathbf{A}^4/4!-\dots$$

$$e^z=1+z+z^2/2!+z^3/3!+\dots$$

$$e^{\mathbf{A}}=\mathbf{I}+\mathbf{A}+\mathbf{A}^2/2!+\mathbf{A}^3/3!+\dots$$

$$\sin^2(z)+\cos^2(z)=1$$

$$\text{可得： } \sin^2(\mathbf{A})+\cos^2(\mathbf{A})=\mathbf{I}$$

性质 2 二元函数 $f(x,y)$ 能展开为 x,y 的幂级数, $f(x,y)=g(x,y)$.

若 $AB=BA$, 则 $f(A,B)=g(A,B)$ (二元函数的代入规则).

2. 矩阵函数值的求法

(a) 待定系数法

给定 A 后，确定首1多项式 $g(\lambda)$ ，满足 $g(A)=0$ 。(特征多项式或最小多项式均可)

设 $f(\lambda)=g(\lambda)q(\lambda)+r(\lambda)$ ，利用待定系数法确定 $r(\lambda)$ 。

则 $f(A)=r(A)$ 。

例1 设

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

求 e^A 和 e^{tA} 。

零化多项式 $\psi(\lambda)$ 的基本假设:

设 n 阶矩阵 A 的特征多项式 $\varphi(\lambda)=\det(\lambda I-A)$. 如果首 1 多项式 $\psi(\lambda)=\lambda^m+b_1\lambda^{m-1}+\dots+b_{m-1}\lambda+b_m$ ($1\leq m\leq n$) 满足:(1) $\psi(A)=0$;(2) $\psi(\lambda)$ 整除 $\varphi(\lambda)$ (矩阵 A 的最小多项式与特征多项式均满足这些条件). 那么, $\psi(\lambda)$ 的零点都是 A 的特征值. 记 $\psi(\lambda)$ 的互异零点为

$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_s$, 相应的重数为 r_1, \dots, r_s ($r_1+r_2+\dots+r_s=m$), 则有 $\psi^{(l)}(\lambda_i)=0$ ($l=0, 1, \dots, r_i-1; i=1, 2, \dots, s$)

这里, $\psi^{(l)}(\lambda)$ 表示 $\psi(\lambda)$ 的 l 阶导数(下同).

带导数的插值问题：

设 $f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k = \psi(z)g(z) + r(z)$. 其中 $r(z)$ 是次数低于 m 的

多项式，于是可由 $f^{(l)}(\lambda_i) = r^{(l)}(\lambda_i)$ 确定 $r(z)$.

利用 $f(A) = \psi(A)g(A) + r(A) = r(A)$.

因此我们的问题就是给定函数 $f(z)$, 由约束条件

$$r^{(l)}(\lambda_i) = f^{(l)}(\lambda_i) \quad l=0,1,\dots,r_i-1; i=1,2,\dots,s$$

确定 $r(z)$ 。

方法1.

基于Sylvster插值公式的矩阵函数求值

定理 设 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_s$ 是 s 个相异复数, 在每个 λ_i 处给定 d_i 个数: $f_{i0}, f_{i1}, \dots, f_{i, d_i-1}$; 记 $\sum_{i=1}^s d_i = m$, 则存在次数小于 m 的多项式 $\varphi(\lambda)$, 使得

$$\varphi(\lambda_i) = f_{i0}, \quad \varphi'(\lambda_i) = f_{i1}, \quad \dots, \quad \varphi^{(d_i-1)}(\lambda_i) = f_{i, d_i-1}$$

其中:

$$\varphi(\lambda) = p_1(\lambda) + p_2(\lambda) + \dots + p_s(\lambda)$$

$$p_i(\lambda) = \alpha_i(\lambda) \psi_i(\lambda), \quad \psi_i(\lambda) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^s (\lambda - \lambda_j)^{d_j}$$

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{j!} \left. \frac{d^j}{d\lambda^j} \left(\frac{\varphi(\lambda)}{\psi_i(\lambda)} \right) \right|_{\lambda=\lambda_i}, \quad j = 0, 1, \dots, d_i - 1$$

由此有，基于Sylvster插值公式的矩阵求值算法：

$$f(A) = \sum_{i=1}^s [\alpha_{i0}I + \alpha_{i1}(A - \lambda_i I) + \cdots \\ + \alpha_{i, d_i-1}(A - \lambda_i I)^{d_i-1}] \psi_i(A)$$

其中

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{j!} \left. \frac{d^j}{d\lambda^j} \left(\frac{f(\lambda)}{\psi_i(\lambda)} \right) \right|_{\lambda=\lambda_i},$$

$$j = 0, 1, \cdots, d_i - 1$$

$$\psi_i(A) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^s (A - \lambda_j I)^{d_j}$$

方法2: 基于广义Newton 插值公式 的矩阵函数求值

Taylor展开式:

若知道函数 $f(x)$ 在 x_0 的函数值和直到 n 阶导数值, 则由 Taylor 展开式可得多项式:

$$\begin{aligned} Tf(x) = & f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + [f''(x_0)/2!](x-x_0)^2 \\ & + [f^{(3)}(x_0)/3!](x-x_0)^3 + \dots + [f^{(n)}(x_0)/n!](x-x_0)^n \end{aligned}$$

使得 $Tf^{(l)}(x_0) = f^{(l)}(x_0), l=0, 1, 2, \dots, n$ 成立.

牛顿展开式：

若知道函数 $f(x)$ 在 $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ 的函数值

则有相应的 Newton 插值公式

$$\begin{aligned} Nf(x) = & f(x_0) + f[x_0, x_1](x-x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x-x_0)(x-x_1) + \dots \\ & + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1}) \end{aligned}$$

使得 $Nf(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, 1, 2, \dots, n$ 成立.

其中 $Nf(x)$ 的项为均差。

均差的定义和简单性质如下：

均差及性质

定义： $f[x_0, x_k] = (f(x_k) - f(x_0)) / (x_k - x_0)$

为 $f(x)$ 关于点 x_0, x_k 的一阶均差；

$f[x_0, x_1, x_k] = (f[x_0, x_k] - f[x_0, x_1]) / (x_k - x_1)$

为二阶均差。一般地，称

$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = (f[x_0, x_1, \dots, x_{k-2}, x_k] - f[x_0, x_1, \dots, x_{k-1}]) / (x_k - x_{k-1})$

为 $f(x)$ 的 k 阶均差。

性质 1. k 阶均差可表为函数值的线性组合；

性质 2. 均差与节点的排列次序无关；

性质 3(均差与导数) 若 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上存在 n 阶导数, 且结点 $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n \in [a,b]$, 则存在 $\xi \in [x^0, x^1]$ 使得

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = f^{(n)}(\xi)/n!$$

成立, 其中 $x^0 = \min\{x_0, x_1, x_2, \dots, x_n\}$, $x^1 = \max\{x_0, x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 。

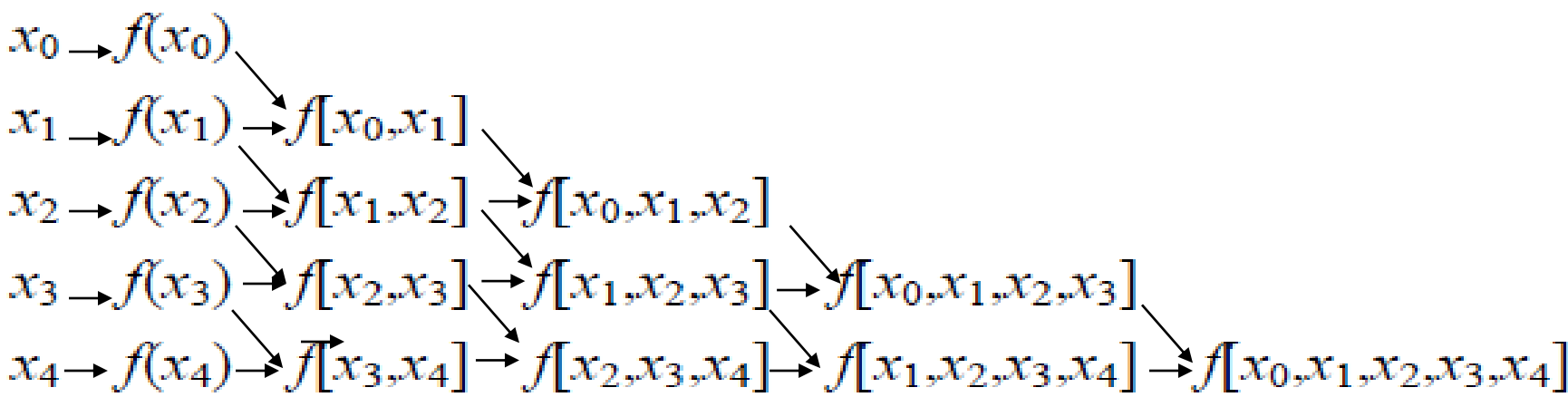
推论: 若 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上存在 n 阶导数, 则对任何 $c \in [a,b]$,

$$f[c, c, \dots, c] = f^{(n)}(c)/n! \quad \text{成立。}$$

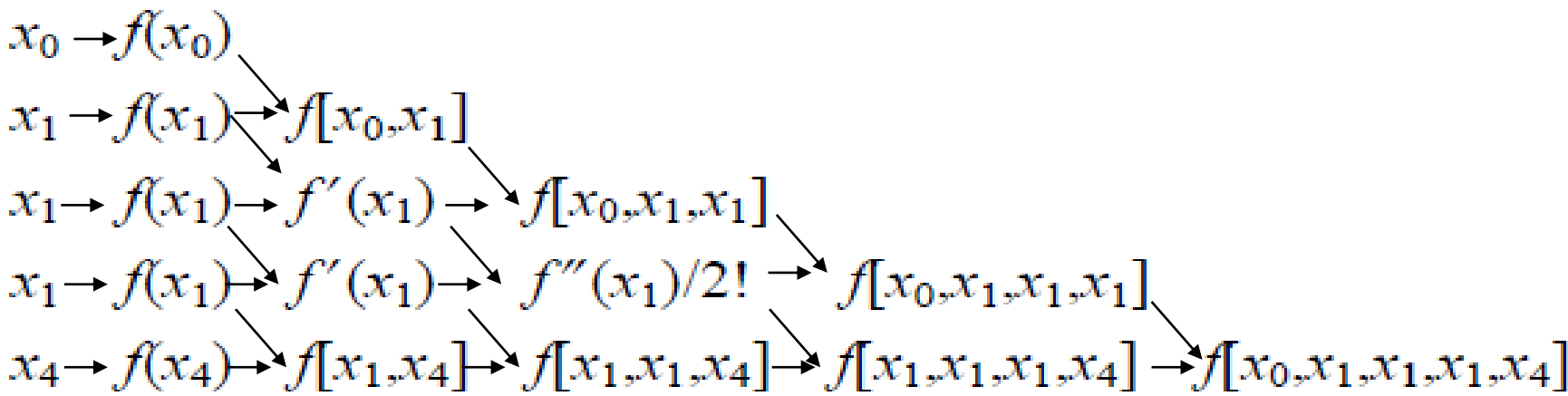
证明: 在性质 3 中令 $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ 同时趋于 c 可得结论。

由此可见 Newton 插值公式可以看作 Tayler 展开式的推广, Tayler 展开式只不过是插值节点重合的情形, 相应的函数值变为导数值而已。

均差的计算:



相应地, 若有 $x_1=x_2=x_3$, 则有



其它的类似. 因此我们可以使用 Newton 插值公式得到满足插值条件的多项式.

例1 设 $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 3 \end{bmatrix}$, 求 $e^{\mathbf{A}t}$.

解 $\varphi(\lambda) = \det(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}) = (\lambda - 2)(\lambda - 5)(\lambda + 1)$

$z \rightarrow f(z) = e^{zt}$

$2 \rightarrow e^{2t}$

$5 \rightarrow e^{5t} \rightarrow (f(5) - f(2))/(5 - 2) = (e^{5t} - e^{2t})/3$
 $-1 \rightarrow e^{-t} \rightarrow (f(-1) - f(5))/(-1 - 5) = (e^{5t} - e^{-t})/6 \rightarrow (e^{5t} - 2e^{2t} + e^{-t})/18$

从而 $f(z) = e^{zt} = \varphi(z)P(z) + r(z)$,

其中 $r(z) = e^{2t} + (z - 2)(e^{5t} - e^{2t})/3 + (z - 2)(z - 5)(e^{5t} - 2e^{2t} + e^{-t})/18$
 $= e^{2t}(1 + (z - 2)/3 - (z - 2)(z - 5)/9)$
 $+ e^{5t}((z - 2)/3 + (z - 2)(z - 5)/18)$
 $+ e^{-t}(z - 2)(z - 5)/18$

$$\begin{aligned}
 f(\mathbf{A}) = e^{\mathbf{A}t} = r(\mathbf{A}) = & e^{2t}(\mathbf{I} + (\mathbf{A} - 2 \cdot \mathbf{I})/3 - (\mathbf{A} - 2 \cdot \mathbf{I})(\mathbf{A} - 5 \cdot \mathbf{I})/9) \\
 & + e^{5t}((\mathbf{A} - 2 \cdot \mathbf{I})/3 + (\mathbf{A} - 2 \cdot \mathbf{I})(\mathbf{A} - 5 \cdot \mathbf{I})/18) \\
 & + e^{-t}(\mathbf{A} - 2 \cdot \mathbf{I})(\mathbf{A} - 5 \cdot \mathbf{I})/18
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 = & e^{2t} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 5/9 & 4/9 & 4/3 \\ 2/3 & -2/3 & 16/9 \end{bmatrix} + e^{5t} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2/9 & -2/9 & 1/3 \\ 1/6 & -1/6 & 1/9 \end{bmatrix} + \\
 & e^{-t} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1/9 & 1/9 & -1/3 \\ -1/6 & 1/6 & -2/9 \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

例 3.5 设 $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 3 \end{bmatrix}$, 求 $e^{\mathbf{A}t}$

解 $\varphi(\lambda) = \det(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}) = (\lambda - 2)^3$

$z \rightarrow f(z) = e^{zt}$

$2 \rightarrow e^{2t}$

$2 \rightarrow e^{2t} \rightarrow f'(2) = te^{2t}$

$2 \rightarrow e^{2t} \rightarrow f'(2) = te^{2t} \rightarrow f''(2)/2! = t^2 e^{2t}/2$

从而 $f(z) = e^{zt} = \varphi(z)P(z) + r(z)$,

其中 $r(z) = e^{2t} + t e^{2t}(z-2) + t^2 e^{2t}(z-2)^2/2$

$f(\mathbf{A}) = e^{\mathbf{A}t} = r(\mathbf{A}) = e^{2t} (\mathbf{I} + t(\mathbf{A} - 2\mathbf{I}) + t^2(\mathbf{A} - 2\mathbf{I})^2/2) = e^{2t} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ t & 1-t & 1 \\ t & -t & 1+t \end{bmatrix}$

例: $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix},$

求 $f(\mathbf{A})$, 其中 $f(z) = z^{16} - z^{10}$ 。

解: 由于 $\det(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}) = (\lambda - 1)^3(\lambda + 1) = \varphi(\lambda)$

求 $r(z)$ 使得 $f(z) = P(z) \varphi(z) + r(z)$, 其中 $f(z) = z^{16} - z^{10}$

$$\begin{array}{lcl}
 z & \longrightarrow & f(z) \\
 1 & \longrightarrow & 0 \\
 1 & \longrightarrow & 0 \longrightarrow f'(1) = 6 \\
 1 & \longrightarrow & 0 \longrightarrow f'(1) = 6 \longrightarrow f''(1)/2! = 75 \\
 -1 & \longrightarrow & 0 \longrightarrow 0 \longrightarrow (0-6)/(-1-1) = 3 \longrightarrow (3-75)/(-1-1) = 36
 \end{array}$$

因此 $r(z) = 0 + 6(z-1) + 75(z-1)^2 + 36(z-1)^3$

从而 $f(\mathbf{A}) = r(\mathbf{A}) = 6(\mathbf{A} - \mathbf{I}) + 75(\mathbf{A} - \mathbf{I})^2 + 36(\mathbf{A} - \mathbf{I})^3$

$$= \begin{bmatrix} 0 & 9 & -9 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

(b) 数项级数求和法

给定 A 后, 确定首1多项式 $g(\lambda)$, 满足 $g(A)=0$ 。(特征多项式或最小多项式均可)

$$A^m + b_1 A^{m-1} + \cdots + b_{m-1} A + b_m I = 0.$$

这表明 A^m 可以用 A^{m-1}, \dots, I 线性表出。

A 的更高次幂也可以用 A^{m-1}, \dots, I 线性表出。

$$\text{利用 } A^m = k_0 I + k_1 A + k_2 A^2 + \cdots + k_{m-1} A^{m-1}$$

例2 设

$$A = \begin{bmatrix} \pi & 0 & 0 & 0 \\ & -\pi & 0 & 0 \\ & & 0 & 1 \\ & & & 0 \end{bmatrix},$$

求 $\sin A$ 。

解 $\varphi(\lambda) = \det(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}) = \lambda^4 - \pi^2 \lambda^2$. 由于 $\varphi(\mathbf{A}) = \mathbf{O}$, 所以

$$\mathbf{A}^4 = \pi^2 \mathbf{A}^2, \mathbf{A}^5 = \pi^2 \mathbf{A}^3, \mathbf{A}^7 = \pi^4 \mathbf{A}^3, \dots. \text{ 于是有}$$

$$\sin \mathbf{A} = \mathbf{A} - \frac{1}{3!} \mathbf{A}^3 + \frac{1}{5!} \mathbf{A}^5 - \frac{1}{7!} \mathbf{A}^7 + \frac{1}{9!} \mathbf{A}^9 - \dots =$$

$$\mathbf{A} - \frac{1}{3!} \mathbf{A}^3 + \frac{1}{5!} \pi^2 \mathbf{A}^3 - \frac{1}{7!} \pi^4 \mathbf{A}^3 + \frac{1}{9!} \pi^6 \mathbf{A}^3 - \dots =$$

$$\mathbf{A} + \left(-\frac{1}{3!} + \frac{1}{5!} \pi^2 - \frac{1}{7!} \pi^4 + \frac{1}{9!} \pi^6 - \dots \right) \mathbf{A}^3 =$$

$$\mathbf{A} + \frac{\sin \pi - \pi}{\pi^3} \mathbf{A}^3 = \mathbf{A} - \pi^{-2} \mathbf{A}^3 =$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

上述过程可以形式化如下：

利用矩阵 A 的零化多项式

$$A^m - k_{m-1}A^{m-1} - \dots - k_2A^2 - k_1A - k_0I = 0 \quad (\text{I})$$

可得

$$A^m = k_0I + k_1A + k_2A^2 + \dots + k_{m-1}A^{m-1}$$

从而

$$A^{m+i} = k_0A^i + k_1A^{i+1} + k_2A^{i+2} + \dots + k_{m-1}A^{m+i-1}, \quad i=0,1,2,\dots \quad (\text{II})$$

成立。

将矩阵 $I, A, A^2, \dots, A^{m-1}, \dots$ 看作向量，定义向量组

$$[A^i, A^{i+1}, \dots, A^{m+i-1}],$$

那么根据(II)式可得

$$[A^{i+1}, A^{i+2}, \dots, A^{m+i}] = [A^i, A^{i+1}, \dots, A^{m+i-1}]Q$$

$$\text{其中 } Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & k_0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & k_1 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & k_{m-2} \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & k_{m-1} \end{pmatrix}$$

称为 A 的零化多项式(I)的友矩阵，可以证明 Q 的特征多项式为(I)

$$[I, A, \dots, A^{m-1}] = [I, A, \dots, A^{m-1}] I = [I, A, \dots, A^{m-1}] Q^0$$

$$[A^1, \dots, A^{m-1}, A^m] = [I, A, \dots, A^{m-1}] Q$$

$$[A^2, \dots, A^m, A^{m+1}] = [A^1, \dots, A^{m-1}, A^m] Q = [I, A, \dots, A^{m-1}] Q^2$$

类推得到

$$[A^i, A^{i+1}, \dots, A^{m+i-1}] = [I, A, \dots, A^{m-1}] Q^i \quad (\text{III})$$

$$i=0, 1, 2, \dots$$

在(III)两边同时乘以 m 维单位向量 $e_1 = (1, 0, 0, \dots, 0)^T$ 可得

$$A^i = [A^i, A^{i+1}, \dots, A^{m+i-1}] e_1 = [I, A, \dots, A^{m-1}] Q^i e_1$$

由此得到基于友矩阵的矩阵函数计算方法:

$$A^i = [I, A, \dots, A^{m-1}] Q^i e_1$$

$$f(A) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i A^i = [I, A, \dots, A^{m-1}] \left(\sum_{i=0}^{\infty} c_i Q^i \right) e_1 = [I, A, \dots, A^{m-1}] f(Q) e_1$$

这时，我们需要计算 $f(Q)$ ，然后得到 $f(Q)e_1$ ，从而得到 $[I, A, \dots, A^{m-1}]$ 的相应系数。当然这样的计算结果本质和待定系数法得到的结果是一样的。

或者可以考虑如下的块计算方法：

$$\begin{aligned}\text{另外,记 } \mathbf{c}^{(0)} &= (c_0, c_1, \dots, c_{m-1})^T, \mathbf{c}^{(1)} = (c_m, c_{m+1}, \dots, c_{2m-1})^T, \dots, \\ \mathbf{c}^{(k)} &= (c_{km}, c_{km+1}, \dots, c_{km+m-1})^T, \dots, \\ P &= Q^m\end{aligned}$$

那么根据(III)式可得

$$[A^{km}, A^{km+1}, \dots, A^{km+m-1}] = [I, A, \dots, A^{m-1}] Q^{km} = [I, A, \dots, A^{m-1}] P^k$$

因此

$$\begin{aligned}f(A) &= \sum_{i=0}^{\infty} c_i A^i = \sum_{k=0}^{\infty} [A^{km}, A^{km+1}, \dots, A^{km+m-1}] \mathbf{c}^{(k)} \\ &= [I, A, \dots, A^{m-1}] \sum_{k=0}^{\infty} P^k \mathbf{c}^{(k)}\end{aligned}$$

因此， $f(A)$ 归结为求 $\sum_{k=0}^{\infty} P^k \mathbf{c}^{(k)}$ 的值，这在某些情形下是可以得到。

(c) 对角形法

假设 A 可对角化，即存在非奇异矩阵 P ，使得

$$P^{-1}AP = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{bmatrix},$$

则

$$f(A) = P \begin{bmatrix} f(\lambda_1) & & \\ & \ddots & \\ & & f(\lambda_n) \end{bmatrix} P^{-1}.$$

例3 设 $A = \begin{bmatrix} 4 & 6 & 0 \\ -3 & -5 & 0 \\ -3 & -6 & 1 \end{bmatrix}$ ，求 e^A ， e^{tA} 和 $\cos A$ 。

解 $\varphi(\lambda) = \det(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}) = (\lambda + 2)(\lambda - 1)^2$. 对应 $\lambda_1 = -2$ 的特征向量 $\mathbf{p}_1 = (-1, 1, 1)^T$; 对应 $\lambda_2 = \lambda_3 = 1$ 的两个线性无关的特征向量 $\mathbf{p}_2 = (-2, 1, 0)^T, \mathbf{p}_3 = (0, 0, 1)^T$. 构造矩阵

$$\mathbf{P} = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3) = \begin{bmatrix} -1 & -2 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

则有

$$\mathbf{P}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ -1 & -2 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{P} = \begin{bmatrix} -2 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{e}^{\mathbf{A}} = \mathbf{P} \begin{bmatrix} \mathbf{e}^{-2} & & \\ & \mathbf{e} & \\ & & \mathbf{e} \end{bmatrix} \mathbf{P}^{-1} = \begin{bmatrix} 2\mathbf{e} - \mathbf{e}^{-2} & 2\mathbf{e} - 2\mathbf{e}^{-2} & 0 \\ \mathbf{e}^{-2} - \mathbf{e} & 2\mathbf{e}^{-2} - \mathbf{e} & 0 \\ \mathbf{e}^{-2} - \mathbf{e} & 2\mathbf{e}^{-2} - 2\mathbf{e} & \mathbf{e} \end{bmatrix}$$

$$e^{tA} = \mathbf{P} \begin{bmatrix} e^{-2t} & & \\ & e^t & \\ & & e^t \end{bmatrix} \mathbf{P}^{-1} = \begin{bmatrix} 2e^t - e^{-2t} & 2e^t - 2e^{-2t} & 0 \\ e^{-2t} - e^t & 2e^{-2t} - e^t & 0 \\ e^{-2t} - e^t & 2e^{-2t} - 2e^t & e^t \end{bmatrix}$$

$$\cos A = \mathbf{P} \begin{bmatrix} \cos(-2) & & \\ & \cos 1 & \\ & & \cos 1 \end{bmatrix} \mathbf{P}^{-1} =$$

$$\begin{bmatrix} 2\cos 1 - \cos 2 & 2\cos 1 - 2\cos 2 & 0 \\ \cos 2 - \cos 1 & 2\cos 2 - \cos 1 & 0 \\ \cos 2 - \cos 1 & 2\cos 2 - 2\cos 1 & \cos 1 \end{bmatrix}$$

4. Jordan 标准型法

设 A 的若当标准形为 J , 则存在可逆矩阵 P 使得

$$\begin{aligned}
 P^{-1}AP = J &= \begin{bmatrix} J_1 & & \\ & \ddots & \\ & & J_s \end{bmatrix}, J_i = \begin{bmatrix} \lambda_i & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda_i & 1 \\ & & & \lambda_i \end{bmatrix}_{m_i \times m_i} \\
 f(J_i) &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k J_i^k = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \begin{bmatrix} \lambda_i^k & C_k^1 \lambda_i^{k-1} & \cdots & C_k^{m_i-1} \lambda_i^{k-m_i+1} \\ & \lambda_i^k & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & C_k^1 \lambda_i^{k-1} \\ & & & \lambda_i^k \end{bmatrix}_{m_i \times m_i} \\
 &= \begin{bmatrix} f(\lambda_i) & \frac{1}{1!} f'(\lambda_i) & \cdots & \frac{1}{(m_i-1)!} f^{(m_i-1)}(\lambda_i) \\ & f(\lambda_i) & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \frac{1}{1!} f'(\lambda_i) \\ & & & f(\lambda_i) \end{bmatrix}_{m_i \times m_i} \quad (*)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 f(\mathbf{A}) &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k \mathbf{P} \mathbf{J}^k \mathbf{P}^{-1} = \mathbf{P} \left(\sum_{k=0}^{\infty} a_k \mathbf{J}^k \right) \mathbf{P}^{-1} = \mathbf{P} \begin{bmatrix} \sum_{k=0}^{\infty} a_k \mathbf{J}_1^k & & \\ & \ddots & \\ & & \sum_{k=0}^{\infty} a_k \mathbf{J}_s^k \end{bmatrix} \mathbf{P}^{-1} \\
 &= \mathbf{P} \begin{bmatrix} f(\mathbf{J}_1) & & \\ & \ddots & \\ & & f(\mathbf{J}_s) \end{bmatrix} \mathbf{P}^{-1} \quad (**)
 \end{aligned}$$

可见，求 $f(\mathbf{A})$ 可转化为求 \mathbf{A} 的若当标准形 \mathbf{J} 及变换矩阵 \mathbf{P} 的问题。

例 3.6 设 $A = \begin{bmatrix} \pi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\pi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$, 求 $\sin A$.

矩阵 A 是一个 Jordan 标准形, 它的三个 Jordan 块为

$$J_1 = \pi, \quad J_2 = -\pi, \quad J_3 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

求得 $\sin J_1 = \sin \pi = 0$ $\sin J_2 = \sin(-\pi) = 0$

$$\sin J_3 = \begin{bmatrix} \sin 0 & \frac{1}{1!} \cos 0 \\ 0 & \sin 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sin A = \begin{bmatrix} \sin J_1 & & & \\ & \sin J_2 & & \\ & & \sin J_3 & \\ & & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

广义矩阵函数

背景:

利用前面的定理3.6及其推论的结果，对于可以展开成幂级数形式的解析函数 $f(z)$ ，它的矩阵函数的定义方式就是在它的幂级数形式中用矩阵 A 替代 z ，就得到了由矩阵幂级数形式的矩阵函数 $f(A)$ 的定义。但是，对于任意给定的函数 $f(z)$ 能够展开成收敛幂级数形式的要求条件很强，一般不容易满足，例如 $f(z)=\ln(z)$ 就不满足。借助于前面讨论的矩阵函数若当标准形求法的公式(*)和(**)，我们可以拓宽矩阵函数的定义如下。

定义 3.8 设 $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 的 Jordan 标准形为 \mathbf{J} , 即有可逆矩阵 \mathbf{P} , 使得

$$\mathbf{P}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{P} = \mathbf{J} = \begin{bmatrix} \mathbf{J}_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \mathbf{J}_s \end{bmatrix}, \quad \mathbf{J}_i = \begin{bmatrix} \lambda_i & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & \lambda_i \end{bmatrix}_{m_i \times m_i}$$

如果函数 $f(z)$ 在 λ_i 处具有直到 m_i-1 阶导数 ($i=1, 2, \dots, s$), 令

$$f(\mathbf{J}_i) = \begin{bmatrix} f(\lambda_i) & \frac{1}{1!} f'(\lambda_i) & \cdots & \frac{1}{(m_i-1)!} f^{(m_i-1)}(\lambda_i) \\ & f(\lambda_i) & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \frac{1}{1!} f'(\lambda_i) \\ & & & f(\lambda_i) \end{bmatrix}_{m_i \times m_i}$$

$$f(\mathbf{A}) = \mathbf{P} \begin{bmatrix} f(\mathbf{J}_1) & & \\ & \ddots & \\ & & f(\mathbf{J}_s) \end{bmatrix} \mathbf{P}^{-1} \quad (**)$$

那么, 称 $f(\mathbf{A})$ 为对应于 $f(z)$ 的矩阵函数。

这样定义的矩阵函数在 $f(z)$ 可展开成幂级数的形式和前面的定义一致, 而当 $f(z)$ 不能展开成幂级数的形式时仍然可以定义, 因此确实拓广了矩阵函数的定义。

例 3.8 设 $f(z) = \frac{1}{z}$, $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$, 求 $f(\mathbf{A})$.

解 \mathbf{A} 是一个 Jordan 块, 其阶数为 4. 计算 $f(2) = \frac{1}{2}$,

$f'(2) = -\frac{1}{4}$, $f''(2) = \frac{1}{4}$, $f'''(2) = -\frac{3}{8}$, 由此可得

$$\frac{1}{\mathbf{A}} = f(\mathbf{A}) = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{8} & -\frac{1}{16} \\ & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{8} \\ & & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} \\ & & & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

定义 3.8' 设 $A \in C^{n \times n}$, $f(z)$ 解析函数, 定义矩阵函数 $f(A)$ 为

$$f(A) = \int_{\partial\Omega} (z \cdot I - A)^{-1} f(z) dz$$

其中 Ω 为包含 A 的全部特征根的单连通区域, 而 $\partial\Omega$ 表示区域的边界。

3.3 矩阵的微分与积分

- 1. 矩阵的微分**
- 2. 矩阵的积分**
- 3. 其他微分概念**
- 4. 应用**

1. 矩阵的微分

如果矩阵 $A(t)=(a_{ij}(t)) \in C^{m \times n}$ 的每个元素 $a_{ij}(t)$ 都是 t 的可微函数，则 $A(t)$ 关于 t 的导数(微商)定义为：

$$\frac{dA(t)}{dt} = A'(t) = \left(a'_{ij}(t) \right)_{m \times n}.$$

性质 3.4.1. $\frac{d}{dt}(\mathbf{A}(t)+\mathbf{B}(t))=\frac{d}{dt}\mathbf{A}(t)+\frac{d}{dt}\mathbf{B}(t)$

性质 3.4.2. $\frac{d}{dt}(A(t)B(t))=\frac{d}{dt}A(t)\cdot B(t)+A(t)\cdot\frac{d}{dt}B(t)$

推论 设 $C(t)=A(t)B(t)$,那么 $dC=dA\cdot B+A\cdot dB$,
其中 $dA=(dA/dt)\cdot dt, dB=(dB/dt) dt$

例(逆矩阵的导数): $\frac{d}{dt}(A(t)^{-1}) = -A(t)^{-1} \frac{d(A(t))}{dt} A(t)^{-1}$

证明: 根据逆矩阵定义

$$A(t) \cdot A(t)^{-1} = E_n$$

等式两边求导, 根据性质2可得

$$\frac{d(A(t))}{dt} A(t)^{-1} + A(t) \frac{d(A(t)^{-1})}{dt} = 0$$

因此

$$\frac{d}{dt}(A(t)^{-1}) = -A(t)^{-1} \frac{d(A(t))}{dt} A(t)^{-1}$$

性质 3.4.3. $\frac{d}{dt}(\alpha(t)\mathbf{A}(t)) = \alpha'(t)\mathbf{A}(t) + \alpha(t) \cdot \frac{d}{dt}\mathbf{A}(t)$

性质 3.4.4. 如果 $\mathbf{A}(t)$ 和 $\frac{d}{dt}\mathbf{A}(t)$ 可交换, $f(z)$ 和 t 无关的一元解析函数,

$$\text{则有 } \frac{d}{dt}f(\mathbf{A}(t)) = f'(\mathbf{A}(t)) \frac{d}{dt}\mathbf{A}(t)$$

特别注意若 $\mathbf{A}(t)$ 和 $\frac{d}{dt}\mathbf{A}(t)$ 不可交换, 则上式不一定成立。

注意, 性质 3.4.4 中的 $f(z)$ 为一元的解析函数, 它不是多元函数, 和后面的多元函数矩阵要加以区别。

性质 4. 如果 $A(t)$ 和 $\frac{d}{dt} A(t)$ 可交换, $f(z)$ 和 t 无关

$$\text{则有 } \frac{d}{dt} f(A(t)) = f(A(t)) \frac{d}{dt} A(t)$$

特别注意若 $A(t)$ 和 $\frac{d}{dt} A(t)$ 不可交换, 则上式不一定成立。

注意, 性质4中的 $f(z)$ 为一元的解析函数, 它不是多元函数, 和后面的多元函数矩阵要加以区别。

证明(形式证明, 数学上不严格):当然, 如果将 $f(z)$ 展开成幂级数形式 $f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k$,

根据假设 $\mathbf{A}(t)$ 和 $\frac{d}{dt} \mathbf{A}(t)$ 可交换可得 $d(\mathbf{A}^k(t))/dt = k \mathbf{A}^{k-1}(t) d(\mathbf{A}(t))/dt$

代入矩阵函数 $d(f(\mathbf{A}(t)))/dt = \sum_{k=1}^{\infty} c_k k \cdot \mathbf{A}^{k-1}(t) \frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} = d\mathbf{A}(t)/dt \cdot f'(\mathbf{A}(t))$ 成立。

例
$$\frac{d(\exp(A \cdot t))}{dt} = A \exp(A \cdot t)$$

证明: 取 $f(z) = \exp(z)$, $\mathbf{A}(t) = A \cdot t$, 应用性质 4 可得结论。

考虑到性质 3.4.4 中, $A(t)$ 和 $\frac{d}{dt}A(t)$ 可交换的条件比较强, 我们可以给出如下的性质。

性质 3.4.5(迹函数求导基本定理). 如果 $A(t)$ 和 $B(t)$ 可交换, $f(z)$ 是与 t 无关的一元解析函数,

$$\text{则有 } \frac{d}{dt} \text{tr}(f(A(t)) B(t)) = \text{tr}(f'(A(t)) \frac{d}{dt} A(t) B(t)) + \text{tr}(f(A(t)) \frac{d}{dt} B(t))$$

证明(形式证明, 数学上不严格): 当然, 如果将 $f(z)$ 展开成幂级数形式 $f(z) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k z^k$,

根据假设 $A(t)$ 和 $B(t)$ 可交换, 因此 对于 $k \geq 0$ 的整数:

$$\begin{aligned}
\text{tr}[d(\mathbf{A}^k(t))/dt \mathbf{B}(t)] &= \text{tr}\left[\sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{A}^i(t) \frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} \mathbf{A}^{k-1-i}(t) \mathbf{B}(t)\right] \\
&= \text{tr}\left[\sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{A}^i(t) \frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} \mathbf{B}(t) \mathbf{A}^{k-1-i}(t)\right] (\text{由 } \mathbf{A}(t) \text{ 和 } \mathbf{B}(t) \text{ 可交换}) \\
&= \text{tr}\left[\sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{A}^{k-1-i}(t) \cdot \mathbf{A}^i(t) \frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} \mathbf{B}(t)\right] (\text{由迹算子可交换性}) \\
&= \text{tr}\left[k \mathbf{A}^{k-1}(t) d(\mathbf{A}(t))/dt \mathbf{B}(t)\right] \quad (\text{I})
\end{aligned}$$

同样

$$\begin{aligned}\operatorname{tr}[d(\mathbf{A}^{-k}(t))/dt \mathbf{B}(t)] &= \operatorname{tr}\left[\sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{A}^{-i}(t) \frac{d\mathbf{A}(t)^{-1}}{dt} \mathbf{A}^{-(k-1-i)}(t) \mathbf{B}(t)\right] \\&= \operatorname{tr}\left[-\sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{A}^{-(i+1)}(t) \frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} \mathbf{A}^{-(k-i)}(t) \mathbf{B}(t)\right] \\&= \operatorname{tr}\left[-\sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{A}^{-(i+1)}(t) \frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} \mathbf{B}(t) \mathbf{A}^{-(k-i)}(t)\right] (\text{由 } \mathbf{A}(t) \text{ 和 } \mathbf{B}(t) \text{ 可交换}) \\&= \operatorname{tr}\left[-\sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{A}^{-(k-i)}(t) \cdot \mathbf{A}^{-(i+1)}(t) \frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} \mathbf{B}(t)\right] (\text{由迹算子可交换性}) \\&= \operatorname{tr}\left[-k \mathbf{A}^{-k-1}(t) d(\mathbf{A}(t))/dt \mathbf{B}(t)\right] \quad (\text{II})\end{aligned}$$

综合(I)和(II)可得, 对于任给的整数 $k \in \mathbf{N}$, 都有

$$\operatorname{tr}[d(\mathbf{A}^k(t))/dt \mathbf{B}(t)] = \operatorname{tr}[k \mathbf{A}^{k-1}(t) d(\mathbf{A}(t))/dt \mathbf{B}(t)]$$

代入矩阵函数得

$$\begin{aligned}\operatorname{tr}[d(f(\mathbf{A}(t)))/dt \mathbf{B}(t)] &= \operatorname{tr}\left[\sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k k \cdot \mathbf{A}^{k-1}(t) \frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} \mathbf{B}(t)\right] \\ &= \operatorname{tr}[f'(\mathbf{A}(t)) d\mathbf{A}(t)/dt \cdot \mathbf{B}(t)] \quad (*)\end{aligned}$$

成立。

其次，我们有

$$\frac{d}{dt} \operatorname{tr}(f(\mathbf{A}(t)) \mathbf{B}(t)) = \operatorname{tr}\left(\frac{d}{dt} f(\mathbf{A}(t)) \mathbf{B}(t)\right) + \operatorname{tr}\left(f(\mathbf{A}(t)) \frac{d}{dt} \mathbf{B}(t)\right) \quad (**)$$

综合以上两式(*)和(**)可得定理成立。

推论 3.4.1. 如果 $f(z)$ 是与 t 无关的一元解析函数，

$$\text{则有 } \frac{d}{dt} \operatorname{tr}(f(\mathbf{A}(t))) = \operatorname{tr}\left(f'(\mathbf{A}(t)) \frac{d}{dt} \mathbf{A}(t)\right)$$

例 3.4.1: 设非奇异矩阵 $A(t)$ 的对 t 可导, 则 $d(|A(t)|)/dt = |A| \operatorname{tr}(A(t)^{-1} \cdot dA(t)/dt)$

证明: 设方阵 $A(t)$ 的 n 个特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, 那么

$$|A(t)| = \lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdots \lambda_n$$

$$\text{因此 } \ln(|A(t)|) = \ln(\lambda_1) + \ln(\lambda_2) + \cdots + \ln(\lambda_n) = \operatorname{tr}[\ln(A(t))]$$

根据迹函数求导基本定理:

$$\frac{d \ln(|A(t)|)}{dt} = \frac{d(\operatorname{tr}[\ln(A(t))])}{dt} = \operatorname{tr}\left[A(t)^{-1} \frac{d}{dt} A(t)\right]$$

因此 $d(|A(t)|)/dt = d(\exp(\ln|A(t)|))/dt = \exp(\ln|A(t)|) d(\ln|A(t)|)/dt = |A| \operatorname{tr}(A(t)^{-1} \cdot dA(t)/dt)$

这个例子的证明我们在下面还需要提到。

2. 矩阵的积分

如果矩阵 $A(t)=(a_{ij}(t)) \in C^{m \times n}$ 的每个元素 $a_{ij}(t)$ 都在 $[t_0, t]$ 上可积, 则称 $A(t)$ 可积, 记为

$$\int_{t_0}^t A(\tau) d\tau = \left(\int_{t_0}^t a_{ij}(\tau) d\tau \right)_{m \times n}.$$

$$(1) \int_{t_0}^t [A(\tau) + B(\tau)] d\tau = \int_{t_0}^t A(\tau) d\tau + \int_{t_0}^t B(\tau) d\tau;$$

$$(2) \int_{t_0}^t [A \cdot B(\tau)] d\tau = A \cdot \left[\int_{t_0}^t B(\tau) d\tau \right];$$

$$\int_{t_0}^t [A(\tau) \cdot B] d\tau = \left[\int_{t_0}^t A(\tau) d\tau \right] \cdot B;$$

$$(3) \frac{d}{dt} \int_{t_0}^t A(\tau) d\tau = A(t);$$

$$(4) \int_{t_0}^{t_1} A'(\tau) d\tau = A(t_1) - A(t_0).$$

3. 其他微分概念

I 函数对矩阵的导数(包括向量)

为了简单起见, 在本节中我们记 \mathbf{e}_i 为第 i 个分量为 1, 而其余分量为 0 的单位列向量, 其维数根据上下文确定, 以后不一一说明。

定义 I.1: 设 $\mathbf{X}=(\xi_{ij})_{m \times n}$, mn 元函数

$$f(\mathbf{X})=f(\xi_{11}, \dots, \xi_{1n}, \xi_{21}, \dots, \xi_{m1}, \dots, \xi_{mn})$$

定义 $f(\mathbf{X})$ 对矩阵 \mathbf{X} 的导数为

$$\frac{df}{d\mathbf{X}} = \left(\frac{\partial f}{\partial \xi_{ij}} \right)_{m \times n} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial \xi_{11}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial \xi_{1n}} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial \xi_{m1}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial \xi_{mn}} \end{bmatrix} \quad (\text{分量形式})$$

$$= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \frac{\partial f}{\partial \xi_{ij}} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^T \quad (\text{代数形式})$$

特别注意在上面的等式中, \mathbf{e}_i 为 m 维列向量而 \mathbf{e}_j 为 n 维列向量, 在本节中我们会经常使用这种约定。

矩阵的元素和矩阵符号的关系

设 $A=(a_{ij})\in C^{m\times n}$, 那么

$$A = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^T$$

$$a_{ij} = \mathbf{e}_i^T A \mathbf{e}_j$$

$$\text{Vec}(A) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij} \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^m A^T \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i = \sum_{j=1}^n \mathbf{e}_j \otimes A \mathbf{e}_j$$

$$a_{ij} = (\mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_i)^T \text{vec}(A)$$

这个关系式实际上可以为我们把一个关于分量的等式转化为关于矩阵-向量的形式。最后一个式子可以由第二个式子结合 $\text{vec}(\bullet)$ 向量化算子的定义推得。

定理 I.1 (函数矩阵的微分形式) 设 $\mathbf{X}=(\xi_{ij})_{m \times n}$, m, n 元函数 $f(\bullet): \mathbb{C}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{C}$:

$$f(\mathbf{X})=f(\xi_{11}, \dots, \xi_{1n}, \xi_{21}, \dots, \xi_{m1}, \dots, \xi_{mn}),$$

那么 $\frac{df}{d\mathbf{X}}=A$ 的充要条件为 $df=\text{tr}(A^T \cdot d\mathbf{X})=\text{tr}(A \cdot d\mathbf{X}^T)$ (微分形式)

证明:根据定义

$$\begin{aligned} df &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \frac{df}{dx_{ij}} dx_{ij} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n e_i^T \frac{df}{d\mathbf{X}} e_j \cdot e_i^T d\mathbf{X} e_j = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n e_j^T \left(\frac{df}{d\mathbf{X}} \right)^T e_i \cdot e_i^T d\mathbf{X} e_j \\ &= \sum_{j=1}^n e_j^T \left(\frac{df}{d\mathbf{X}} \right)^T \left(\sum_{i=1}^m e_i \cdot e_i^T \right) d\mathbf{X} e_j = \sum_{j=1}^n e_j^T \left(\frac{df}{d\mathbf{X}} \right)^T d\mathbf{X} e_j = \text{tr} \left[\left(\frac{df}{d\mathbf{X}} \right)^T d\mathbf{X} \right] \end{aligned}$$

在进行进一步的推导之前, 我们需要如下的一阶全微分的形式不变性原理:

1. 一元函数复合函数的微分法则和一阶微分的形式不变性

设 $y=f(u)$ 及 $u=\phi(x)$ 都可导, 则复合函数 $y=f[\phi(x)]$ 的微分为

$$dy=y'_x dx=f'(u)\phi'(x)dx.$$

于由 $\phi'(x)dx=du$, 所以, 复合函数 $y=f[\phi(x)]$ 的微分公式也可以写成

$$dy=f'(u)du \text{ 或 } dy=y'_u du.$$

由此可见, 无论 u 是自变量还是另一个变量的可微函数, 微分形式 $dy=f'(u)du$ 保持不变. 这一性质称为微分形式不变性. 这性质表示, 当变换自变量时, 微分形式 $dy=f'(u)du$ 并不改变.

2. 多元复合函数微分法则和一阶全微分的形式不变性

复合函数的中间变量均为一元函数的情形

如果函数 $u = \varphi(t)$ 及 $v = \psi(t)$ 都在点 t 可导, 函数 $z = f(u, v)$ 在对应点 (u, v) 具有连续偏导数, 则复合函数 $z = f(\varphi(t), \psi(t))$ 在点 t 可导, 且有

$$\frac{dz}{dt} = \frac{\partial z}{\partial u} \cdot \frac{du}{dt} + \frac{\partial z}{\partial v} \cdot \frac{dv}{dt}$$

因此 $dz = \frac{\partial z}{\partial u} \cdot du + \frac{\partial z}{\partial v} \cdot dv = \frac{dz}{dt} \cdot dt$,

复合函数的中间变量均为多元函数的情形

如果函数 $u = \varphi(x, y)$, $v = \psi(x, y)$ 都在点 (x, y) 具有对 x 及 y 的偏导数, 函数 $z = f(u, v)$ 在对应点 (u, v) 具有连续偏导数, 则复合函数 $z = f[\varphi(x, y), \psi(x, y)]$ 在点 (x, y) 的两个偏导数存在

, 则有 $\frac{\partial z}{\partial x} = \frac{\partial z}{\partial u} \cdot \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial z}{\partial v} \cdot \frac{\partial v}{\partial x}$, $\frac{\partial z}{\partial y} = \frac{\partial z}{\partial u} \cdot \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial v} \cdot \frac{\partial v}{\partial y}$

因为 $du = (\partial u / \partial x)dx + (\partial u / \partial y)dy$, $dv = (\partial v / \partial x)dx + (\partial v / \partial y)dy$,

因此 $dz = (\partial z / \partial x)dx + (\partial z / \partial y)dy = (\partial z / \partial u)du + (\partial z / \partial v)dv$,

全微分形式不变性: 无论 z 是自变量 x 、 y 的函数或中间变量 u 、 v 的函数, 它的全微分形式是一样的, 这个性质叫做全微分形式不变性。

类似地, 可以推广到多次复合函数的情形, 我们称一阶微分的这种性质为一阶微分形式不变性。(高阶微分一般不具有这种性质)

性质 I.1 若 $f(t)=f(\mathbf{x})$, $\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)$ 为向量, 则 $df/dt=d\mathbf{x}^T/dt \cdot df/d\mathbf{x}$.

性质 I.2: 设 $f(\mathbf{X})$ 是以 $m \times n$ 矩阵 \mathbf{X} 的元素为变量的 mn 元函数,
而 \mathbf{X} 又是标量 t 的函数, 则

$$df/dt = \text{tr}(d\mathbf{X}^T/dt \cdot df/d\mathbf{X})$$

证明: 根据一阶微分不变性可得:

$$df = \text{tr} [(df/d\mathbf{X})^T d\mathbf{X}], \quad d\mathbf{X} = (d\mathbf{X}/dt) dt,$$

代入有

$$\begin{aligned} df &= \text{tr} [(df/d\mathbf{X})^T (d\mathbf{X}/dt) dt] = \text{tr} [(df/d\mathbf{X})^T (d\mathbf{X}/dt)] dt \\ &= \text{tr} [(d\mathbf{X}/dt)^T (df/d\mathbf{X})] dt \end{aligned}$$

从而可得结论。

性质 I.3: 关于迹函数的导数

$$d(\text{tr}(X^T A))/dX = A.$$

$$d(\text{tr}(A^T X))/dX = A.$$

$$d(\text{tr}(AX))/dX = A^T.$$

证明: 设 $y = \text{tr}(X^T A)$, 那么 $dy = \text{tr}((dX)^T A) = \text{tr}(A^T dX)$

根据函数矩阵的微分形式可得 $d(\text{tr}(X^T A))/dX = A$.

其余类似。

性质 I.4 设 X 为可逆矩阵, $f(X) = \text{tr}(AX^{-1})$, 其中 A 为常数矩阵, 那么

$$df(X)/dX = -(X^{-1}AX^{-1})^T$$

证明: 令 $Y = X^{-1}$, 那么 $f = \text{tr}[AY]$, 从而 $df = \text{tr}[A \cdot dY]$

根据 $XY = E_n$, 那么 $dX \cdot Y + X \cdot dY = 0$, 因此 $dY = -Y \cdot dX \cdot Y$

代入有 $df = \text{tr}[A \cdot (-Y \cdot dX \cdot Y)] = \text{tr}[-YAY \cdot dX]$

根据性质 I.1(函数矩阵的微分形式) 可得结论。

性质 I.5 (迹函数矩阵求导基本定理). 如果 $f(z)$ 是一元解析函数,

$$y = \text{tr}[f(\mathbf{A})], \text{ 则 } \frac{dy}{d\mathbf{A}} = f'(\mathbf{A})^T$$

证明: 由矩阵导数的代数形式可得

$$\begin{aligned} \frac{dy}{d\mathbf{A}} &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial y}{\partial a_{ij}} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^T = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial \text{tr}[f(\mathbf{A})]}{\partial a_{ij}} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^T = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \text{tr} \left[f'(\mathbf{A}) \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial a_{ij}} \right] \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^T \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \text{tr} \left[f'(\mathbf{A}) \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^T \right] \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^T = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \mathbf{e}_i [\mathbf{e}_j^T f'(\mathbf{A}) \mathbf{e}_i] \mathbf{e}_j^T = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \mathbf{e}_i [\mathbf{e}_i^T f'(\mathbf{A})^T \mathbf{e}_j] \mathbf{e}_j^T \\ &= \sum_{i=1}^n (\mathbf{e}_i \mathbf{e}_i^T) f'(\mathbf{A})^T \sum_{j=1}^n (\mathbf{e}_j \mathbf{e}_j^T) = f'(\mathbf{A})^T \end{aligned}$$

推论 I.1 (迹函数矩阵微分) 如果 $f(z)$ 是一元解析函数, $y = \text{tr}[f(\mathbf{A})]$, 则 $dy = \text{tr}[f'(\mathbf{A})d\mathbf{A}]$

证明: 由性质 I.5 和迹函数的微分形式显然可得。

例 I.1 $f(\mathbf{x})=\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x}$, 则 $df/d\mathbf{x}=(\mathbf{A}+\mathbf{A}^T)\mathbf{x}$,

特别地, 若 \mathbf{A} 为对称矩阵, $g(\mathbf{x})=\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x}/2$,

则 $dg/d\mathbf{x}=\mathbf{A}\mathbf{x}$.

证明: 由于 $df/dx_i=(d\mathbf{x}/dx_i)^T\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{x}^T\mathbf{A}(d\mathbf{x}/dx_i)=e_i^T\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{x}^T\mathbf{A}e_i=e_i^T(\mathbf{A}+\mathbf{A}^T)\mathbf{x}$

$$\text{所以 } df/d\mathbf{x}=\sum_{i=1}^n\frac{df}{dx_i}e_i=\sum_{i=1}^ne_ie_i^T(\mathbf{A}+\mathbf{A}^T)\mathbf{x}=(\mathbf{A}+\mathbf{A}^T)\mathbf{x},$$

另证: $df=(d\mathbf{x})^T\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{x}^T\mathbf{A}(d\mathbf{x})=\mathbf{x}^T\mathbf{A}^T(d\mathbf{x})+\mathbf{x}^T\mathbf{A}(d\mathbf{x})=\text{tr}[(\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{A}^T\mathbf{x})^Td\mathbf{x}]$

根据函数矩阵的微分形式可得 $df/d\mathbf{x}=(\mathbf{A}+\mathbf{A}^T)\mathbf{x}$.

例 I.2 设 $f(X)=\text{tr}((AX^TB+C)^{-1}D)$, 证明

$$df(X)/dX = -B(AX^TB+C)^{-1}D(AX^TB+C)^{-1}A$$

其中 A, B, C, D 为与 X 无关的常数矩阵。

证明: 设 $Y=AX^TB+C$, 那么 $dY=A \cdot dX^T \cdot B$;

根据性质 I.4 可得 $df=\text{tr}[-Y^{-1}DY^{-1} \cdot dY]$,

因此, $df=\text{tr}[-Y^{-1}DY^{-1}A \cdot dX^T \cdot B]=\text{tr}[-BY^{-1}DY^{-1}A \cdot dX^T]$

根据性质 I.1(函数矩阵的微分形式) 可得结论。

表 5.2.1 几种迹函数的微分矩阵与梯度矩阵的对应关系^[296]

迹函数 $f(\mathbf{X})$	微分矩阵 $\mathrm{d}f(\mathbf{X})$	梯度矩阵 $\partial f(\mathbf{X})/\partial \mathbf{X}$
$\mathrm{tr}(\mathbf{X})$	$\mathrm{tr}(\mathbf{I}\mathrm{d}\mathbf{X})$	\mathbf{I}
$\mathrm{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})$	$2\mathrm{tr}(\mathbf{X}^T \mathrm{d}\mathbf{X})$	$2\mathbf{X}$
$\mathrm{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X})$	$\mathrm{tr}(\mathbf{A}\mathrm{d}\mathbf{X})$	\mathbf{A}^T
$\mathrm{tr}(\mathbf{X}^2)$	$2\mathrm{tr}(\mathbf{X}\mathrm{d}\mathbf{X})$	$2\mathbf{X}^T$
$\mathrm{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A}\mathbf{X})$	$\mathrm{tr}(\mathbf{X}^T (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T) \mathrm{d}\mathbf{X})$	$(\mathbf{A} + \mathbf{A}^T) \mathbf{X}$
$\mathrm{tr}(\mathbf{X}\mathbf{A}\mathbf{X}^T)$	$\mathrm{tr}((\mathbf{A} + \mathbf{A}^T) \mathbf{X}^T \mathrm{d}\mathbf{X})$	$\mathbf{X}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^T)$
$\mathrm{tr}(\mathbf{X}\mathbf{A}\mathbf{X})$	$\mathrm{tr}((\mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{X}\mathbf{A})\mathrm{d}\mathbf{X})$	$\mathbf{X}^T \mathbf{A}^T + \mathbf{A}^T \mathbf{X}^T$
$\mathrm{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1})$	$-\mathrm{tr}(\mathbf{X}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{X}^{-1} \mathrm{d}\mathbf{X})$	$-(\mathbf{X}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{X}^{-1})^T$
$\mathrm{tr}(\mathbf{X}\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{B})$	$\mathrm{tr}((\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{B} + \mathbf{B}\mathbf{X}\mathbf{A})\mathrm{d}\mathbf{X})$	$(\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{B} + \mathbf{B}\mathbf{X}\mathbf{A})^T$
$\mathrm{tr}(\mathbf{X}\mathbf{A}\mathbf{X}^T \mathbf{B})$	$\mathrm{tr}((\mathbf{A}\mathbf{X}^T \mathbf{B} + \mathbf{A}^T \mathbf{X}^T \mathbf{B}^T) \mathrm{d}\mathbf{X})$	$\mathbf{B}^T \mathbf{X} \mathbf{A}^T + \mathbf{B} \mathbf{X} \mathbf{A}$

例 I.3 1) 设非奇异矩阵 $A(t)$ 的对 t 可导, 则 $d(|A|)/dt = |A| \operatorname{tr}(A^{-1} \cdot dA/dt)$

2) 对于任给非奇异矩阵 A , $d(\ln|A|)/dA = (A^T)^{-1}$

3) 对于任给 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $d(\ln|\delta I + A^T A|)/dA = 2A(\delta I + A^T A)^{-1}$, 其中 δ 为和矩阵 A 无关的常数。

证明：1) 由于 $d|A|/dt = \sum_{i=1}^n |(a_1, a_2, \dots, \frac{da_i}{dt}, \dots, a_n)|$

$$= |A| \sum_{i=1}^n \frac{|(a_1, a_2, \dots, \frac{da_i}{dt}, \dots, a_n)|}{|A|}$$

考虑线性方程组 $A \cdot x = da_i/dt$, 其中 a_i 为矩阵 A 的第 i 列。

根据 Gramer 法则可得

$$x_i = |(a_1, a_2, \dots, \frac{da_i}{dt}, \dots, a_n)| / |A|$$

另一方面, 我们知道 $x = A^{-1} \cdot da_i/dt$, 所以有

$$x_i = |(a_1, a_2, \dots, \frac{da_i}{dt}, \dots, a_n)| / |A| = e_i^T A^{-1} \frac{da_i}{dt}$$

$$\begin{aligned} \text{因此有 } d|A|/dt &= |A| \sum_{i=1}^n e_i^T A^{-1} \frac{da_i}{dt} = |A| \sum_{i=1}^n e_i^T A^{-1} \frac{dA}{dt} e_i \\ &= |A| \operatorname{tr}(A^{-1} \cdot dA/dt) \end{aligned}$$

$$2). \text{ 由于 } d(|A|)/dA = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{d|A|}{da_{ij}} e_i e_j^T$$

根据 1)的结果我们知道 $d(|A|)/da_{ij} = |A| \operatorname{tr}[A^{-1} \cdot dA/da_{ij}] = |A| \operatorname{tr}[A^{-1} \cdot e_i e_j^T] = |A| e_j^T A^{-1} e_i$

$$\text{因此 } d(|A|)/dA = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |A| e_j^T A^{-1} e_i \cdot e_i e_j^T = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |A| e_i e_i^T (A^{-1})^T e_j e_j^T = |A| (A^{-1})^T$$

$$\text{从而 } d(\ln|A|)/dA = (1/|A|) \cdot d(|A|)/dA = (A^T)^{-1}$$

或者 $\det(A) = \sum_{j=1}^n a_{ij} A_{ij}$, 其中 A_{ij} 为在矩阵 A 中

去掉第 i 行第 j 列的代数余子式。排列 A_{ij} 得如下矩阵

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{bmatrix} \quad \begin{array}{l} \text{则根据代数余子式的定义可得} \\ A (\tilde{A})^T = |A| I \\ \text{因此 } \tilde{A} = |A| (A^T)^{-1}. \end{array}$$

注意 A_{ij} 显然和 a_{ij} 无关, 因此我们有 $d(|A|)/dA = \tilde{A} = |A| (A^T)^{-1}$

$$3) \text{ 由于 } d(|\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}|)/d\mathbf{A} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{d|\mathbf{A}|}{da_{ij}} e_i e_j^T$$

根据 1)的结果我们知道

$$\begin{aligned} d(|\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}|)/da_{ij} &= |\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}| \operatorname{tr}[(\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \cdot d(\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A})/da_{ij}] \\ &= |\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}| \operatorname{tr}[(\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \cdot (e_j e_i^T \mathbf{A} + \mathbf{A}^T e_i e_j^T)] \\ &= |\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}| \{ \operatorname{tr}[(\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \cdot e_j e_i^T \mathbf{A}] + \operatorname{tr}[(\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T e_i e_j^T] \} \\ &= |\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}| \{ [e_i^T \mathbf{A} (\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \cdot e_j + e_j^T (\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T e_i] \} \\ &= 2 \cdot |\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}| e_i^T \mathbf{A} (\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} e_j \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{因此 } d(|\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}|)/d\mathbf{A} &= 2 \cdot |\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}| \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n e_i^T \mathbf{A} (\delta \cdot \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} e_j \cdot e_i e_j^T \\ &= 2 \cdot |\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}| \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n e_i e_i^T \mathbf{A} (\delta \cdot \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} e_j e_j^T \\ &= 2 \cdot |\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}| \left(\sum_{i=1}^m e_i e_i^T \right) \mathbf{A} (\delta \cdot \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \sum_{j=1}^n e_j e_j^T \\ &= 2 \cdot |\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}| \cdot \mathbf{A} (\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \end{aligned}$$

$$\text{从而 } d(\ln|\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}|)/d\mathbf{A} = (1/|\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}|) \cdot d(|\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}|)/d\mathbf{A} = 2 \cdot \mathbf{A} (\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1}$$

另证：记 $\mathbf{B} = \delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}$, $y = \log |\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}| = \ln |\mathbf{B}|$,

因为 $dy/d\mathbf{B} = (\mathbf{B}^T)^{-1}$, 因此 $dy = \text{tr}[(\mathbf{B})^{-1} d\mathbf{B}]$. 考虑到 $d\mathbf{B} = (d\mathbf{A})^T \mathbf{A} + \mathbf{A}^T d\mathbf{A}$, 代入有

$$dy = \text{tr}[(\mathbf{B})^{-1} (d\mathbf{A})^T \mathbf{A}] + \text{tr}[(\mathbf{B})^{-1} \mathbf{A}^T d\mathbf{A}] = \text{tr}[\mathbf{A}(\mathbf{B})^{-1} (d\mathbf{A})^T] + \text{tr}[(\mathbf{B})^{-1} \mathbf{A}^T d\mathbf{A}]$$

$= \text{tr}[2(\mathbf{B})^{-1} \mathbf{A}^T d\mathbf{A}]$, 根据函数矩阵的微分形式得

$dy/d\mathbf{A} = 2\mathbf{A}(\mathbf{B})^{-1} = 2 \cdot \mathbf{A}(\delta \mathbf{I} + \mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1}$. 从而结论得证。

表 5.2.2 几种行列式函数的微分矩阵与梯度矩阵的对应关系^[295]

行列式 $f(\mathbf{X})$	微分矩阵 $df(\mathbf{X})$	梯度矩阵 $\partial f(\mathbf{X})/\partial \mathbf{X}$
$ \mathbf{X} $	$ \mathbf{X} \operatorname{tr}(\mathbf{X}^{-1} d\mathbf{X})$	$ \mathbf{X} \mathbf{X}^{-T}$
$ \mathbf{X}^2 $	$2 \mathbf{X} ^2 \operatorname{tr}(\mathbf{X}^{-1} d\mathbf{X})$	$2 \mathbf{X} ^2 \mathbf{X}^{-T}$
$ \mathbf{X}\mathbf{X}^T $	$2 \mathbf{X}\mathbf{X}^T \operatorname{tr}(\mathbf{X}^T(\mathbf{X}\mathbf{X}^T)^{-1} d\mathbf{X})$	$2 \mathbf{X}\mathbf{X}^T (\mathbf{X}\mathbf{X}^T)^{-1} \mathbf{X}$
$ \mathbf{X}^T \mathbf{X} $	$2 \mathbf{X}^T \mathbf{X} \operatorname{tr}((\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T d\mathbf{X})$	$2 \mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$
$ \mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{B} $	$ \mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{B} \operatorname{tr}(\mathbf{B}(\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{B})^{-1} \mathbf{A} d\mathbf{X})$	$ \mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{B} \mathbf{A}^T (\mathbf{B}^T \mathbf{X}^T \mathbf{A}^T)^{-1} \mathbf{B}^T$
$ \mathbf{X}\mathbf{A}\mathbf{X}^T $	$ \mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X} \operatorname{tr}((\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T (\mathbf{A}^T + \mathbf{A}) d\mathbf{X})$	$ \mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X} (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T) \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X})^{-T}$

前面讨论的函数对矩阵的微分定义没有考虑特殊矩阵的性质,所以有时在公式表达时针对某些特殊矩阵并不能得到很简洁的表达性质。

举例来说,对于对称矩阵 \mathbf{X} 来说,我们考虑函数 $f(\mathbf{X})=\text{tr}(\mathbf{A}^T\mathbf{X})$, 其中 \mathbf{A} 为任意 n 阶矩阵,如果仍然使用前面的关于函数对矩阵的微分定义我们有

$$df/d\mathbf{X}=\sum_{i=1}^m\sum_{j=1}^n\frac{\partial f}{\partial \xi_{ij}}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j^T=\mathbf{A}+\mathbf{A}^T-\mathbf{D}$$

其中 \mathbf{D} 表示 \mathbf{A} 的对角部分构成的对角矩阵。这种表达形式看起来不是很简洁。

这是因为对于对称矩阵 \mathbf{A} 来说,我们有如下关系式

$$\mathbf{A}=\sum_{i=1}^ma_{ii}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i^T+\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^na_{ij}(\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j^T+\mathbf{e}_j\mathbf{e}_i^T)$$

$$a_{ij}=\mathbf{e}_i^T\mathbf{A}\mathbf{e}_j=\mathbf{e}_j^T\mathbf{A}\mathbf{e}_i$$

由前面的讨论，在很多情形下，如果 \mathbf{X} 为 $n \times n$ 对称矩阵， $f(\mathbf{X})$ 为 $n(n-1)/2$ 个变元的函数

$$f(\mathbf{X}) = f(\xi_{11}, \dots, \xi_{1n}, \xi_{22}, \dots, \xi_{2n}, \dots, \xi_{nn})$$

那么定义

$$\frac{df}{d\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial \xi_{11}} & \dots & \frac{1}{2} \frac{\partial f}{\partial \xi_{1n}} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{1}{2} \frac{\partial f}{\partial \xi_{m1}} & \dots & \frac{\partial f}{\partial \xi_{nn}} \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial \xi_{ii}} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i^T + \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i} \frac{1}{2} \frac{\partial f}{\partial \xi_{ij}} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^T$$

这时对于对称矩阵的函数 $f(\mathbf{X}) = \text{tr}(\mathbf{A}^T \mathbf{X})$ ，我们有 $df/d\mathbf{X} = (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T)/2$ ，特别地，当 \mathbf{A} 也为对称矩阵时有 $d(\text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}))/d\mathbf{X} = \mathbf{A}$ 。

II 矩阵函数对矩阵的导数

(主要考虑向量值函数对向量的导数)

为了进行下面的讨论我们引入 A 与 B 的直积定义.

定义 5.9 设 $A=(a_{ij})\in C^{m\times n}, B=(b_{ij})\in C^{p\times q}$, 则称

如下的分块矩阵

$$A\otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & a_{12}B \cdots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B \cdots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B \cdots & a_{mn}B \end{bmatrix} \in C^{mp \times nq} \quad (5.4.1)$$

为 A 与 B 的直积 (Kronecker 积)。

性质 II.1: 如果 A 为 $m \times 1$ 的向量和 B 为 $n \times 1$ 的向量时, 那么

$$A \otimes B^T = A B^T$$

定义 3.13 设 $X=(\xi_{ij})_{m \times n}$ 的 mn 元函数

$$f_{ij}(X)=f_{ij}(\xi_{11}, \dots, \xi_{1n}, \xi_{21}, \dots, \xi_{m1}, \dots, \xi_{mn})$$

定义矩阵

$$F(X)=\begin{bmatrix} f_{11} & \cdots & f_{1s} \\ \vdots & & \vdots \\ f_{r1} & \cdots & f_{rs} \end{bmatrix}$$

对矩阵 X 的导数如下：

$$\frac{dF}{dX}=\begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial \xi_{11}} & \cdots & \frac{\partial F}{\partial \xi_{1n}} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial F}{\partial \xi_{m1}} & \cdots & \frac{\partial F}{\partial \xi_{mn}} \end{bmatrix}=\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^T) \otimes \frac{\partial F}{\partial \xi_{ij}}$$

其中

$$\frac{\partial F}{\partial \xi_{ij}}=\begin{bmatrix} \frac{\partial f_{11}}{\partial \xi_{ij}} & \cdots & \frac{\partial f_{1s}}{\partial \xi_{ij}} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_{r1}}{\partial \xi_{ij}} & \cdots & \frac{\partial f_{rs}}{\partial \xi_{ij}} \end{bmatrix}=\sum_{k=1}^r \sum_{l=1}^s \frac{\partial f_{kl}}{\partial \xi_{ij}} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_l^T$$

特别的，当 \mathbf{F} 为 $m \times 1$ 的向量和 \mathbf{X} 为 $n \times 1$ 的向量时，那么

$$\frac{dF}{dX^T} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \xi_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial \xi_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial \xi_1} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial \xi_n} \end{bmatrix}$$

对于前面的定义我们可以进行形式化的表示为：

$$\frac{dF}{dX} = \left(\frac{1}{dX} \right) \otimes dF$$

性质 II.1:
$$\frac{dF}{dX} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^r \sum_{l=1}^s \frac{df_{kl}}{d\xi_{ij}} (\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^T) \otimes (\mathbf{e}_k \mathbf{e}_l^T)$$

证明: 根据 $\frac{\partial F}{\partial \xi_{ij}} = \sum_{k=1}^r \sum_{l=1}^s \frac{\partial f_{kl}}{\partial \xi_{ij}} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_l^T$ 代入 $\frac{dF}{dX}$ 的定义可得。

实际上有所谓的转换定理

转换定理：设 $\mathbf{X}=(x_{ij})$ 和 $\mathbf{Y}=(y_{ij})$ 分别是 $m \times n$ 和 $p \times q$ 的矩阵， $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ 和 \mathbf{D} 分别为 $p \times m, n \times q, p \times n$ 和 $m \times q$ 的矩阵，它们可以是 \mathbf{X}, \mathbf{Y} 的函数，则如下两条是等价的

$$(1) \quad \frac{\partial Y}{\partial x_{ij}} = \mathbf{A} \mathbf{E}_{ij}(m \times n) \mathbf{B} + \mathbf{C} \mathbf{E}_{ij}^T(m \times n) \mathbf{D}, \quad i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n$$

$$(2) \quad \frac{\partial y_{ij}}{\partial X} = \mathbf{A}^T \mathbf{E}_{ij}(p \times q) \mathbf{B}^T + \mathbf{D} \mathbf{E}_{ij}^T(p \times q) \mathbf{C}, \quad i = 1, \dots, p, j = 1, \dots, q$$

其中 $\mathbf{E}_{ij}(m \times n)$ 表示第 i 行第 j 列元素为 1，而其余元素为 0 的 $m \times n$ 矩阵.

证明：为了简单起见，我们记 e_i 为第 i 个分量为 1, 而其余分量为 0 的单位列向量，其维数根据上下文确定。

首先证明(1)→(2), 实际上

$$\frac{\partial y_{kl}}{\partial x_{ij}} = e_k^T \frac{\partial Y}{\partial x_{ij}} e_l = e_k^T A e_i e_j^T B e_l + e_k^T C e_j e_i^T D e_l = a_{ki} b_{jl} + c_{kj} d_{il}$$

$$\begin{aligned} \text{由于 } \frac{\partial y_{ij}}{\partial X} &= \sum_{s=1}^m \sum_{t=1}^n \frac{\partial y_{ij}}{\partial x_{st}} e_s e_t^T = \sum_{s=1}^m \sum_{t=1}^n (a_{is} b_{tj} + c_{it} d_{sj}) e_s e_t^T \\ &= \sum_{s=1}^m \sum_{t=1}^n (e_s^T A^T e_i e_j^T B^T e_t + e_s^T D e_j e_i^T C e_t) e_s e_t^T \\ &= \sum_{s=1}^m \sum_{t=1}^n e_s e_s^T A^T e_i e_j^T B^T e_t e_t^T + \sum_{s=1}^m \sum_{t=1}^n e_s e_s^T D e_j e_i^T C e_t e_t^T \\ &= \sum_{s=1}^m e_s e_s^T (A^T e_i e_j^T B^T) \sum_{t=1}^n e_t e_t^T + \sum_{s=1}^m e_s e_s^T (D e_j e_i^T C) \sum_{t=1}^n e_t e_t^T \\ &= A^T E_{ij} (p \times q) B^T + D E_{ij}^T (p \times q) C \end{aligned}$$

而证明(2)→(1)是一个类似的过程。

性质 II.2: $y=Wx$, 函数 $f(y)$ 是向量 y 的函数, 其中 $W \in C^{m \times n}$ 和 $x \in C^n$ 无关
则 $dy^T/dx=W^T$, $d(f(y))/dW=d(f(y))/dy \cdot x^T$

性质 II.3: 设 $f(x)$ 是向量 x 的函数, 而 x 又是 u 的函数, 则

$$df/du=dx^T/du \cdot df/dx$$

根据定义 $dx^T/du=(dx^T/du_1, dx^T/du_2, \dots, dx^T/du_n)^T$

其中 $dx^T/du_i=(dx_1/du_i, \dots, dx_n/du_i)$

类似地, 设 $f(x)$ 是向量 x 的函数, 而 x 又是向量 u 的
的向量值函数, u 是 v 的向量值函数, 则

$$df/dv=du^T/dv \cdot dx^T/du \cdot df/dx$$

证明: 由题设 $f(x)$ 是向量 u 的函数, 所以

$$df/dv=du^T/dv \cdot df/du$$

$$\text{而 } df/du=dx^T/du \cdot df/dx$$

从而 $df/dv=du^T/dv \cdot dx^T/du \cdot df/dx$ 成立。

性质 II.4(向量函数关于向量导数的微分形式)

设向量 $y=F(x)$ 是向量 x 的向量值函数, 那么

$$dy=Adx \text{ 的充要条件为 } A=dy/dx^T$$

证明: 根据定义可得结论。

4. 应用

1. 矩阵微分在深度学习中的应用

考虑如下前馈神经网络模型模型的学习问题：

$$u=Wx$$

$$v=\varphi(u) \quad (\text{即 } v_i=\varphi(u_i), \text{ 其中, } \varphi(\cdot) \text{ 为一元可微函数})$$

$$p=Uv$$

$$q=\phi(p) \quad (\text{即 } q_i=\phi(p_i), \text{ 其中, } \phi(\cdot) \text{ 为一元可微函数})$$

$$o=Vq$$

$$e=(1/2) \cdot \|y-o\|^2$$

其中： x, u, v, p, q, o 为向量, W, U, V 为矩阵.

求 $de/dV, de/dU, de/dW$.

解: $de/do = o - y$, $de/dV = de/do \cdot q^T$

$$\begin{aligned} de/dU &= de/dp \cdot v^T = (dq^T/dp)(do^T/dq) \cdot de/do \cdot v^T \\ &= \text{diag}(\phi'(p_i)) V^T de/do \cdot v^T \end{aligned}$$

其中 $\text{diag}(\phi'(p_i)) = \text{diag}((\phi'(p_1), \phi'(p_2), \dots, \phi'(p_n)))$ 为对角矩阵, 后面类似.

$$\begin{aligned} de/dW &= de/du \cdot x^T \\ &= (dv^T/du)(dp^T/dv) \cdot de/dp \cdot x^T \\ &= \text{diag}(\phi'(u_i)) U^T de/dp \cdot x^T \end{aligned}$$

定义 $\delta_3 = o - y$, $\delta_2 = de/dp$, $\delta_1 = de/du$, 那么有

$$\delta_2 = \text{diag}(\phi'(p_i)) V^T \delta_3, \quad \delta_1 = \text{diag}(\phi'(u_i)) U^T \delta_2,$$

这就是在前馈神经网络模型中著名的误差反向传播算法。

其中, x 为网络输入, y 为网络的期望输出, 而 o 则为网络实际输出, δ_3 为误差.

2.在微分方程中的应用:

$$\begin{cases} x_1'(t) = a_{11}x_1(t) + a_{12}x_2(t) + \cdots + a_{1n}x_n(t) + b_1(t) \\ x_2'(t) = a_{21}x_1(t) + a_{22}x_2(t) + \cdots + a_{2n}x_n(t) + b_2(t) \\ \vdots \\ x_n'(t) = a_{n1}x_1(t) + a_{n2}x_2(t) + \cdots + a_{nn}x_n(t) + b_n(t) \end{cases}$$

令

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, x(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ \vdots \\ x_n(t) \end{bmatrix}, b(t) = \begin{bmatrix} b_1(t) \\ \vdots \\ b_n(t) \end{bmatrix},$$

则可以写成矩阵形式:

非齐次微分方程 $x'(t) = A \cdot x(t) + b(t)$

齐次微分方程 $x'(t) = A \cdot x(t)$

定理3： 齐次微分方程 $x'(t) = A \cdot x(t)$ 的通解为：

$$x(t) = e^{tA}c,$$

其中 c 是任意常向量。若再加上初始条件 $x(t_0)=x_0$ ，则其解为

$$x(t) = e^{(t-t_0)A}x_0.$$

例8 设矩阵

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

求满足 $x(0)=[1 \ 0 \ 1]^T$ 的齐次微分方程 $x'(t) = A \cdot x(t)$ 的解。

定理4： 非齐次微分方程 $x'(t) = A \cdot x(t) + b(t)$ 的通解可以表示为：

$$x(t) = x_1(t) + x_2(t),$$

其中 $x_1(t) = e^{tA}c$ 是对应齐次微分方程的通解， $x_2(t)$ 是原非齐次微分方程的一个特解。常向量 c 由初始条件确定。

如何计算一个特解？ **常向量变易法**，即设

$$x_2(t) = e^{tA}c(t),$$

带入原非齐次微分方程有

$$e^{tA}c'(t) = b(t),$$

由此可以解出一个 $c(t)$ ，即得到一个特解。

例9 设

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad b(t) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ e^{2t} \end{bmatrix},$$

求满足初始条件 $x(0) = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ 的非齐次微分方程
 $x'(t) = A \cdot x(t) + b(t)$ 的解。