矩阵求导浅析（一）

倚楼
早睡早起，多看paper，多吃多运动多睡觉

本文主要关注标量函数对矩阵的求导，并提供一种简明直观易操作的矩阵求导方法。

推荐矩阵求导相关的专栏文章：

矩阵求导术（上）

矩阵求导术（下）

机器学习中的矩阵/向量求导

1.内积

向量 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ 的内积定义为

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \mathbf{x}^T \mathbf{y} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i = \mathbf{Tr}\left(\mathbf{x}^T \mathbf{y}\right) = \mathbf{Tr}\left(\mathbf{y}\mathbf{x}^T\right)$$

矩阵的 $\mathbf{X}, \mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 内积定义为

$$\langle \mathbf{X}, \mathbf{Y} \rangle = \mathbf{Tr}\left(\mathbf{X}^T \mathbf{Y}\right) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} X_{ij} Y_{ij}$$

利用Tr的性质 $\mathbf{Tr}\left(\mathbf{AB}\right) = \mathbf{Tr}\left(\mathbf{BA}\right)$ 和内积的定义，读者不难验证

$$\langle \mathbf{AXB}, \mathbf{C} \rangle = \langle \mathbf{X}, \mathbf{A}^T \mathbf{C} \mathbf{B}^T \rangle \qquad (*)$$

由式 $(*)$ 可知，内积一侧的部分元素可以地交换到另一侧相应的位置上，只不过需要取转置。这个规则应用到微分矩阵上，可以大大简化运算。

2.标量函数的偏导数

标量函数 f 满足 $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 或者 $f:\mathbb{R}^{m\times n}\to\mathbb{R}$，则 f 对自变量的偏导数记为

$$\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \left[\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1},\cdots,\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n}\right]^T \in \mathbb{R}^n$$

或者

$$\frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial X_{11}} & \cdots & \frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial X_{1n}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial X_{m1}} & \cdots & \frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial X_{mn}} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times n}$$

3.标量函数的全微分

在多变量函数的微积分中，称多变量函数 $f(x_1,\cdots,x_n)$ 在点 $(x_1,\cdots,x_n)$ 可微分，若 $f(x_1,\cdots,x_n)$ 的全改变量可以写作

$$\begin{aligned}\Delta f(x_1,\cdots,x_n) &= f(x_1+\Delta x_1,\cdots,x_n+\Delta x_n) - f(x_1,\cdots,x_n) \\ &= A_1\Delta x_1+\cdots+A_n\Delta x_n + o(\Delta x_1,\cdots,\Delta x_n)\end{aligned}$$

式中， $A_1,\cdots,A_n$ 与 $\Delta x_1,\cdots,\Delta x_n$ 无关，并且

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = A_1,\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_n} = A_n$$

全改变量 $\Delta f(x_1,\cdots,x_n)$ 的线性主部称为 多变量函数 $f(x_1,\cdots,x_n)$ 的全微分，记为

$$df(x_1,\cdots,x_n) = \frac{\partial f}{\partial x_1}dx_1+\cdots+\frac{\partial f}{\partial x_n}dx_n \qquad (**)$$

记 ， 则式 可以写成

同样地，对于矩阵函数 ， 下述关系式成立

以矩阵函数 为例，若 在点 处可微分，则

类似地，对 也成立。

矩阵微分满足的性质

- **转置:**

- **线性:**

- **迹:**

- **乘法: ,**

例1： 已知 ，求偏导数

将 写成内积形式 ，利用式 $(*)$ ，则

例2： 已知 ，求

将 写成内积形式 ，则

例3： 已知 ，求

将 写成内积形式 ，则

下次更新强大而简洁的链式法则。

参考文献：

1. 《矩阵分析与应用(第2版)》(张贤达)
2. Matrix calculus - Wikipedia

编辑于 2018-06-10

凸优化 机器学习 矩阵运算

\rightarrow R^{m}， 从 x \in R^{n} 映射到 向量 f(x) \in R^{m}， 其雅可比矩阵是 m×n 的矩阵，换句话讲也就是从 R^{n} 到 R^{m}

致Grea... 发表于数学分析

清雅白鹿记

lim0