

1、 A^+ : 若 A 满列秩, 则 $A^+ = L = (A^H A)^{-1} A^H$, 左伪逆矩阵。若 A 满行秩, 则 $A^+ = R = A^H (A A^H)^{-1}$, 右伪逆矩阵。

因为 $\text{Range}(A) = \text{Range}(A A^+ A) \subset \text{Range}(A A^+) \subset \text{Range}(A)$, 所以 $\text{Range}(A A^+) = \text{Range}(A)$, 同时由于 $A A^+ A A^+ = A A^+$ 是幂等矩阵, 所以 $A A^+$ 是 A 列空间的投影。同理, $\text{Range}(A^H) = \text{Range}(A^H (A^+)^H A^H) \subset \text{Range}(A^H (A^+)^H) \subset \text{Range}(A^H)$, 又因为 $\text{Range}(A^H (A^+)^H) = \text{Range}(A^+ A)$, 所以 $\text{Range}(A^+ A) = \text{Range}(A^H)$, 同时由于 $A^+ A A^+ A = A^+ A$ 是幂等矩阵, 所以 $A^+ A$ 是 A^H 列空间的投影, 即 A 行空间的投影。

2、右 Kronecker 积: $A \otimes B = [a_1 B, \dots, a_n B]$ 。左 Kronecker 积: $B \otimes A = [A \otimes B]_{\text{left}} = [A b_1, \dots, A b_q]$ 。广义 Kronecker 积: $\{A_i\}_N \otimes B = [A_1 b^1, \dots, A_N b^N]^T$ 。

3、奇异值分解: $A = U \Sigma V^T$, 左奇异向量: $(A A^T) u_i = \lambda_i u_i$, 右奇异向量: $(A^T A) v_i = \lambda_i v_i$, 奇异值矩阵: $\sigma_i = \frac{A v_i}{u_i}$ 。其中 $U^T U = I, V^T V = I$ 。

几何意义: V 表示原始域的标准正交基, U 表示经过 A 变换后的辅助域的标准正交基。矩阵 A 的作用是将一个向量 X 先在 V 这组正交基向量的空间作旋转, 然后对每个方向进行一定的缩放 (缩放因子就是各个特征值), 最后在 U 这组正交基向量的空间再次作旋转。

4、偏导数: $D_X = \frac{\partial}{\partial X^T}$, $D_X f(X) = \frac{\partial f(X)}{\partial X^T}$ 。

Jacobian 矩阵: $D_X f(X) = \frac{\partial f(X)}{\partial X^T}$, $D_{\text{vec} X} f(X) = \frac{\partial f(X)}{\partial \text{vec} X^T}$, $D_X F(X) = \frac{\partial \text{vec}(F(X))}{\partial (\text{vec} X)^T}$ 。

梯度: $\nabla_X = \frac{\partial}{\partial X}$ 。

微分: $df(X) = \text{tr}(AdX) \Leftrightarrow D_X f(X) = A$ 。

$[\frac{\partial X^T A X}{\partial X^T}]_i = \frac{\partial}{\partial X_i} \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n a_{kl} x_k x_l = \sum_{k=1}^n a_{ki} x_k + \sum_{l=1}^n a_{il} x_l$, $Df(X) = X^T (A + A^T)$ 。
 $[\frac{\partial f(X)}{\partial X^T}]_{ij} = \frac{\partial f(X)}{\partial x_{ji}} = \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m \sum_{p=1}^n \frac{\partial (a_k x_{kp} x_{lp} b_l)}{\partial x_{ji}} = \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m \sum_{p=1}^n [a_k x_{lp} b_l \frac{\partial x_{kp}}{\partial x_{ji}} + a_k x_{kp} b_l \frac{\partial x_{lp}}{\partial x_{ji}}]$

$= \sum_{l=1}^m a_j x_{li} b_l + \sum_{k=1}^m a_k x_{ki} b_j = [X^T b]_i a_j + [X^T a]_i b_j$, $D_X f(X) = X^T (b a^T + a b^T)$ 。

$[\frac{\partial \text{tr}(XB)}{\partial X^T}]_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_{p=1}^m \sum_{l=1}^n x_{pl} b_{lp} = \sum_{p=1}^m \sum_{l=1}^n b_{lp} \frac{\partial x_{pl}}{\partial x_{ji}} = b_{ij}$, $D_X \text{tr}(XB) = B$ 。

$\frac{\partial f_{kl}}{\partial x_{ij}} = \frac{\partial (AXB)_{kl}}{\partial x_{ij}} = \frac{\partial (\sum_{u=1}^m \sum_{v=1}^n a_{ku} x_{uv} b_{vl})}{\partial x_{ij}} = a_{ki} b_{jl}$, $D_X (AXB) = B^T \otimes A$, $D_X (A X^T B) = (B^T \otimes A) K_{mn}$ 。

5、奇异值分解应用令 $M_{n \times p}$ 和 $N_{n \times k}$ 两个矩阵, 考虑约束极小化问题 $\min_{A \in R^{p \times k}} \|M - N A^T\|_F^2$, s.t. $A^T A = I_{k \times k}$ 。假设 $M^T N$ 的截尾 SVD 为 $U D V^T$, 其中 $D = \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_r)$, $r = \text{rank}(M^T N)$, 则优化问题的最优解为 $\hat{A} = U V^T$ 。证明: 由于 $A^A = I$, 所以 $\|M - N A^T\|_F^2 = \text{tr}((M - N A^T)^T (M - N A^T)) = \text{tr}(M^T M) - 2 \text{tr}(M^T N A^T) + \text{tr}(N^T N)$ 。于是, 极小化 $\|M - N A^T\|_F^2$ 只需极大化 $\text{tr}(M^T N A^T)$ 即可。利用 $M^T N$ 的 SVD 有 $\text{tr}(M^T N A^T) = \text{tr}(U D V^T A^T) = \text{tr}(U D A^* T) = \text{tr}(A^* T U D)$, 其中 $A^* = A V$ 。由于 V 是 $k \times r$ 列正交的且 $A^T A = I$, 所以 $A^* T A^* = I_{p \times p}$, 即 A^* 的列正交。既然 D 为正对角元的对角矩阵, 所以 $\text{tr}(A^* T U D)$ 为 $A^* T U$ 的对角元的非负线性组合, 从而当 $A^* T U$ 的对角元均为极大时, $\text{tr}(A^* T U D)$ 才达到极大。而 $A^* T U$ 的对角元分别为 $a_1^* u_1, \dots, a_r^* u_r$ 。由 Cauchy - Schwartz 不等式得 $a_j^* u_j \leq \|a_j^*\| \times \|u_j\| = 1 \times 1 = 1$, 当且仅当 $a_j^* = u_j$ 时等号成立。即当 $A^* = U$ 时 $A^* T U$ 的对角元均达到极大值 1。于是, $A^* = A V$ 得优化问题的极小解即 $\text{tr}(M^T N A^T)$ 的极大解为 $\hat{A} = A^* V^T = U V^T$ 。

6、 L_1 正则化最小二乘问题: $\min_x J(\lambda, x) = \frac{1}{2} \|y - Ax\|_2^2 + \lambda \|x\|_1$ 目标函数梯度为
 $\nabla_X J(\lambda, x) = \frac{\partial J(\lambda, x)}{\partial x_i} = -A^T (y - Ax) + \lambda \nabla_x \|x\|_1 = -c + \lambda \nabla_x \|x\|_1$, $\nabla_x \|x\|_1 = \frac{\partial \|x\|_1}{\partial x_i} = +1, [-1, +1], -1$,
 $c_i = +\lambda, [-\lambda, +\lambda], -\lambda$

7、非负矩阵分解: ①平方 Euclidean 距离最小化乘法: $\min_{A, S} D_E(X \| AS) = \frac{1}{2} \|X - AS\|_F^2$, 其梯度下降算法为:
 $a_{ik} \leftarrow a_{ik} - \mu_{ik} \frac{\partial D_E(X \| AS)}{\partial a_{ik}}$, $s_{kj} \leftarrow s_{kj} - \eta_{kj} \frac{\partial D_E(X \| AS)}{\partial s_{kj}}$, 其中 $\frac{\partial D_E(X \| AS)}{\partial a_{ik}}$ 为 $\frac{\partial D_E(X \| AS)}{\partial A}$ 第 (i, k) 元素,
 $\frac{\partial D_E(X \| AS)}{\partial s_{kj}}$ 为 $\frac{\partial D_E(X \| AS)}{\partial S}$ 第 (k, j) 元素。若 $\mu_{ik} = \frac{a_{ik}}{[A S S^T]_{ik}}$, $\eta_{kj} = \frac{s_{kj}}{[A^T A S]_{kj}}$, 则有以下乘法运算:
 $a_{ik} \leftarrow a_{ik} \frac{[X S^T]_{ik}}{[A S S^T]_{ik}}$, $s_{kj} \leftarrow s_{kj} \frac{[A^T X]_{kj}}{[A^T A S]_{kj}}$ 。

② KL 散度: $D_{KL}(X \| AS) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M (x_{ij} \ln \frac{x_{ij}}{[AS]_{ij}} - x_{ij} + [AS]_{ij})$ 的最小化问题。梯度为
 $\frac{\partial D_{KL}(X \| AS)}{\partial a_{ik}} = \sum_{j=1}^M (-\frac{s_{kj} x_{ij}}{[AS]_{ij}} + s_{kj})$, $\frac{\partial D_{KL}(X \| AS)}{\partial s_{kj}} = \sum_{i=1}^N (-\frac{a_{ik} x_{ij}}{[AS]_{ij}} + a_{ik})$, 从而其梯度下降为
 $a_{ik} \leftarrow a_{ik} - \mu_{ik} \sum_{j=1}^M (-\frac{s_{kj} x_{ij}}{[AS]_{ij}} + s_{kj})$, $s_{kj} \leftarrow s_{kj} - \eta_{kj} \sum_{i=1}^N (-\frac{a_{ik} x_{ij}}{[AS]_{ij}} + a_{ik})$ 。令 $\mu_{ik} = \frac{a_{ik}}{\sum_{j=1}^M s_{kj}}$, $\eta_{kj} = \frac{s_{kj}}{\sum_{i=1}^N a_{ik}}$, 则改写为乘法运算
 $a_{ik} \leftarrow a_{ik} \frac{\sum_{j=1}^M s_{kj} x_{ij} / [AS]_{ij}}{\sum_{j=1}^M s_{kj}}$, $s_{kj} \leftarrow s_{kj} \frac{\sum_{i=1}^N a_{ik} x_{ij} / [AS]_{ij}}{\sum_{i=1}^N a_{ik}}$ 。

8、实对称矩阵的特征值是实数, 证明: 设实对称矩阵 A 的复数特征值为 λ , 对应 n 维非零向量 X , 使得 $A X = \lambda X$ 成立, 设 $\bar{\lambda}$ 为 λ 的共轭复数, 因为 A 是实对称矩阵, 所以 $A = \bar{A} = A^T$, 则 $A \bar{X} = \bar{A} \bar{X} = \bar{A} X = \bar{\lambda} \bar{X} = \bar{\lambda} \bar{X}$, 同时左乘 $\bar{X}^T A X = \bar{X}^T \lambda X = \lambda \bar{X}^T X$, 又因为 $\bar{X}^T A X = \bar{X}^T A^T X = (\bar{A} \bar{X})^T X = (\bar{\lambda} \bar{X})^T X = \bar{\lambda} \bar{X}^T X$, 即 $(\lambda - \bar{\lambda}) \bar{X}^T X = (\lambda - \bar{\lambda}) [\bar{X}, X] = 0$, 又因为非零向量 X 内积 > 0 , 即 $\lambda = \bar{\lambda}$ 。

9、正定矩阵特征值大于 0, 证明: 设正定矩阵 A 有一个非正的特征值 k , 对应非零特征向量 x , 则 $A x = k x$, 但 $x^H A x = k x^H x < 0$, 这与 A 正定矛盾。

10、L 矩阵是半正定矩阵, 证明: 对任意向量 f , 有
 $f^T L f = f^T (D - W) f = f^T D f - f^T W f = \sum_{i=1}^n d_i f_i^2 - \sum_{i,j=1}^n w_{ij} f_i f_j = \frac{1}{2} (\sum_{i=1}^n d_i f_i^2 - 2 \sum_{i,j=1}^n w_{ij} f_i f_j + \sum_{j=1}^n d_j f_j^2)$
 $= \frac{1}{2} [\sum_{i=1}^n (\sum_{j=1}^n w_{ij}) f_i^2 - 2 \sum_{i,j=1}^n w_{ij} f_i f_j + \sum_{j=1}^n (\sum_{i=1}^n w_{ji}) f_j^2] = \frac{1}{2} [\sum_{i=1}^n (\sum_{j=1}^n w_{ij}) f_i^2 - 2 \sum_{i,j=1}^n w_{ij} f_i f_j + \sum_{j=1}^n (\sum_{i=1}^n w_{ij}) f_j^2]$

$= \frac{1}{2} (\sum_{i,j=1}^n w_{ij} f_i^2 - 2 \sum_{i,j=1}^n w_{ij} f_i f_j + \sum_{i,j=1}^n w_{ij} f_j^2) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n w_{ij} (f_i^2 - 2 f_i f_j + f_j^2) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n w_{ij} (f_i - f_j)^2$, 因为矩阵 W 非负, 所以 $f^T L f \geq 0$