矩阵求导

Chen Hu

2021年4月19日

目录

1	函数	与标量	,向量和矩	阵														;	3
	1.1	function	on 为标量 .																3
		1.1.1	input 为标	量															3
		1.1.2	input 为向	量															4
		1.1.3	input 为矩	阵															4
	1.2	functio	on 为向量 .																4
		1.2.1	标量变元																4
		1.2.2	向量变元																4
		1.2.3	矩阵变元																5
	1.3	function	on 为矩阵 .																5
		1.3.1	标量变元																5
		1.3.2	向量变元																5
		1.3.3	矩阵变元				•					•							5
2	矩阵	求导本	质															(6
3	矩阵	求导结	果的布局															(6
	3.1	直观上	活																6
	3.2	向量变	元的实值标	量	函数	f((x)	$, oldsymbol{x}$	=	$[x_1]$	ι,.		$,x_{r}$	$_{n}]^{T}$					7
		3.2.1	行向量偏导	}形:	式 (又和	尔彳	亍僱	锝	卢向	量	形	式))					7

		3.2.2	梯度向量形式 (又称列向量偏导形式)	7
	3.3	矩阵变	艺元的实值标量函数 $f(\boldsymbol{X}), \boldsymbol{X}_{m \times n} = (x_{ij})_{i=1,j=1}^{m,n} \dots$	7
		3.3.1	$vec(\mathbf{X})$	7
		3.3.2	行向量偏导形式 (又称行偏导向量形式)	7
		3.3.3	Jacobian 矩阵形式	7
		3.3.4	梯度向量形式 (又称列向量偏导形式)	8
		3.3.5	梯度矩阵形式	8
4	矩阵	变元的	实矩阵函数 $m{F}(m{X}), m{X}_{m imes n} = (x_{ij})_{i=1,j=1}^{m,n}, m{F}_{p imes q} = (f_{ij})_{i=1}^{p,q}$	
	4.1		an 矩阵形式	,,,
	4.2		· 连形式 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
5	向島	变量的	实值标量函数	10
Ū	5.1		大曲 小里四 级 :式	
	5.2	四个法		11
	J.2		常数求导	
		5.2.2	线性法则	11
		5.2.3	乘积法则	
		5.2.4	商法则	11
	5.3		式	
		5.3.1	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
		5.3.2	公式 2	
		5.3.3	公式 3	12
		5.3.4	公式 4	12
6	矩阵	变元的	实值标量函数	12
	6.1		ス エ ルエー <i>の</i> 式	
	6.2	四个法		13
	0	6.2.1	常数求导	
		6.2.2	线性法则	13
		6.2.3	乘积法则	

6.	几个公式
	6.3.1 公式 1
	6.3.2 公式 2
	6.3.3 公式 3
	6.3.4 公式 4
7 知	的迹 1
7.	定义
7.	性质
8 徘	与全微分 1
9 知	手的微分 1
9.	向量变元的实值标量函数
9.	矩阵变元的实值标量函数
9.	矩阵变元的实矩阵函数
9.	为什么使用矩阵微分求导
	9.4.1 几个性质
	1 函数与标量,向量和矩阵
	虑一个函数 $function(input)$, 针对 function 的类型,input 类型,ī个函数分为九种不同的种类
1.1	function 为标量
	\mathbf{mction} 是一个实值标量函数,用细体小写字母 f 表示
1.1.1	input 为标量
1.	x function 的变元是标量,用细体小写字母 x 表示
2.	· 例
	$f(x) = x + 2 \tag{2}$

1 函数与标量,向量和矩阵

1 函数与标量,向量和矩阵

4

1.1.2 input 为向量

- 1. 称 function 的变元为向量, 用粗体小写字母 x 表示
- 2. 示例: 设 $\mathbf{x} = [x_1, x_2, x_3]^T$

$$f(\mathbf{x}) = a_1 x_1^2 + a_2 x_2^2 + a_3 x_3^2 + a_4 x_1 x_2 \tag{2}$$

1.1.3 input 为矩阵

- 1. 称 function 的变元为矩阵,用粗体的大写字母 X 表示
- 2. 示例: 设 $X_{3\times 2} = (x_{ij})_{i=1,i=1}^{3,2}$

$$f(\mathbf{X}) = a_1 x_{11}^2 + a_2 x_{12}^2 + a_3 x_{21}^2 + a_4 x_{22}^2 + a_5 x_{31}^2 + a_6 x_{32}^2$$
 (3)

1.2 function 为向量

function 是一个实向量函数,用粗体小写字母 f 表示

1.2.1 标量变元

$$\mathbf{f}_{3\times 1}(x) = \begin{bmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ f_3(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x+1 \\ 2x+1 \\ 3x^2+1 \end{bmatrix}$$
(4)

1.2.2 向量变元

- 1. $\diamondsuit x = [x_1, x_2, x_3]^T$
- 2. 示例

$$\mathbf{F}_{3\times 1}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} f_1(\mathbf{x}) \\ f_2(\mathbf{x}) \\ f_3(\mathbf{x}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 + x_2 + x_3 \\ x_1^2 + 2x_2 + x_3 \\ x_1x_2 + x_2 + 2x_3 \end{bmatrix}$$
(5)

1.2.3 矩阵变元

1.
$$\diamondsuit \mathbf{X} = (x_{ij})_{i=1, i=1}^{3,2}$$

2. 示例

$$F_{3\times 1}(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} f_1(\mathbf{X}) \\ f_2(\mathbf{X}) \\ f_3(\mathbf{X}) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} x_{11} + x_{12} + x_{21} + x_{22} + x_{31} + x_{32} \\ 3x_{11} + x_{12} + x_{21} + x_{22} + x_{31} + x_{32} \\ 5x_{11} + x_{12} + x_{21} + x_{22} + x_{31} + x_{32} \end{bmatrix}$$
(6)

1.3 function 为矩阵

1.3.1 标量变元

$$\boldsymbol{F}_{3\times2}(x) = \begin{bmatrix} f_{11}(x) & f_{12}(x) \\ f_{21}(x) & f_{22}(x) \\ f_{32}(x) & f_{32}(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x+1 & 2x+2 \\ x^2+1 & 2x^2+1 \\ x^3+1 & 2x^3+1 \end{bmatrix}$$
(7)

1.3.2 向量变元

1.
$$\diamondsuit x = [x_1, x_2, x_3]^T$$

2. 示例

$$\boldsymbol{F}_{3\times2}(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} f_{11}(\boldsymbol{x}) & f_{12}(\boldsymbol{x}) \\ f_{21}(\boldsymbol{x}) & f_{22}(\boldsymbol{x}) \\ f_{32}(\boldsymbol{x}) & f_{32}(\boldsymbol{x}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1 + x_2 + x_3 & 2x_1 + 2x_2 + x_3 \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 & x_1 + 2x_2 + x_3 \\ 2x_1 + x_2 + 2x_3 & x_1 + 2x_2 + 2x_3 \end{bmatrix}$$
(8)

1.3.3 矩阵变元

1.
$$\diamondsuit \mathbf{X} = (x_{ij})_{i=1, j=1}^{3, 2}$$

2 矩阵求导本质 6

2. 示例

$$F_{3\times2}(X) = \begin{bmatrix} f_{11}(X) & f_{12}(X) \\ f_{21}(X) & f_{22}(X) \\ f_{32}(X) & f_{32}(X) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} x_{11} + x_{12} + x_{21} + x_{22} + x_{31} + x_{32} & 2x_{11} + x_{12} + x_{21} + x_{22} + x_{31} + x_{32} \\ 3x_{11} + x_{12} + x_{21} + x_{22} + x_{31} + x_{32} & 4x_{11} + x_{12} + x_{21} + x_{22} + x_{31} + x_{32} \\ 5x_{11} + x_{12} + x_{21} + x_{22} + x_{31} + x_{32} & 6x_{11} + x_{12} + x_{21} + x_{22} + x_{31} + x_{32} \end{bmatrix}$$
(9)

function 是一个实矩阵函数,用粗体大写字母 F 表示

2 矩阵求导本质

矩阵求导本质就是 function 对每个 f 分别对变元中每个元素逐个求偏导,只不过也写成了向量,矩阵形式而已

3 矩阵求导结果的布局

3.1 直观上看

1. 分子布局: 分子是列向量形式, 分母是行向量形式

$$\frac{\partial \boldsymbol{f}_{2\times 1}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}_{3\times 1}^T} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_3} \end{bmatrix}$$
(10)

2. 分母布局: 分母是列向量形式, 分子是行向量形式

$$\frac{\partial \boldsymbol{f}_{2\times1}^{T}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}_{3\times1}} = \begin{bmatrix}
\frac{\partial f_{1}}{\partial x_{1}} & \frac{\partial f_{2}}{\partial x_{1}} \\
\frac{\partial f_{1}}{\partial x_{2}} & \frac{\partial f_{2}}{\partial x_{2}} \\
\frac{\partial f_{1}}{\partial x_{3}} & \frac{\partial f_{2}}{\partial x_{3}}
\end{bmatrix}$$
(11)

- **3.2** 向量变元的实值标量函数 $f(x), x = [x_1, ..., x_n]^T$
- 3.2.1 行向量偏导形式 (又称行偏导向量形式)

$$D_x f(\mathbf{x}) = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}^T} = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right]$$
(12)

3.2.2 梯度向量形式 (又称列向量偏导形式)

$$\nabla_x f(\mathbf{x}) = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right]^T$$
(13)

- 3.3 矩阵变元的实值标量函数 $f(X), X_{m \times n} = (x_{ij})_{i=1,j=1}^{m,n}$
- 3.3.1 vec(X)
 - 1. 矩阵 X 按列堆栈来向量化
 - 2. 示例

$$vec(\mathbf{X}) = [x_{11}, x_{21}, \dots, x_{m1}, x_{12}, x_{22}, \dots, x_{m2}, \dots, x_{1n}, x_{2n}, \dots, x_{mn}]^T$$
 (14)

- 3.3.2 行向量偏导形式(又称行偏导向量形式)
 - 1. 先把矩阵变元 X 按 vec(X) 向量化,再对该向量变元应用等式 (12)
 - 2. 示例

$$D_{vec(\mathbf{X})}f(\mathbf{X}) = \frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial vec^{T}(\mathbf{X})}$$

$$= \left[\frac{\partial f}{\partial x_{11}}, \frac{\partial f}{\partial x_{21}}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_{m1}}, \frac{\partial f}{\partial x_{12}}, \frac{\partial f}{\partial x_{22}}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_{m2}}, \frac{\partial f}{\partial x_{1n}}, \frac{\partial f}{\partial x_{2n}}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_{mn}}\right]$$
(15)

- 3.3.3 Jacobian 矩阵形式
 - 1. 先把矩阵变元 X 进行转置,再对转置后的每个元素逐个求偏导,结果 布局和转置布局一样

2. 示例

$$D_{\mathbf{X}}f(\mathbf{X}) = \frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}_{m \times n}^{T}}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{m1}} \\ \frac{\partial f}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{m2}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{mn}} \end{bmatrix}_{n \times m}$$

$$(16)$$

3.3.4 梯度向量形式 (又称列向量偏导形式)

- 1. 先把原矩阵变元 X 按 vec 向量化,转变为向量变元,再对该变元使用等式 (13)
- 2. 示例:

$$\nabla_{vec(\boldsymbol{X})} f(\boldsymbol{X}) = \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial vec(\boldsymbol{X})}$$

$$= \left[\frac{\partial f}{\partial x_{11}}, \frac{\partial f}{\partial x_{21}}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_{m1}}, \frac{\partial f}{\partial x_{12}}, \frac{\partial f}{\partial x_{22}}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_{m2}}, \frac{\partial f}{\partial x_{1n}}, \frac{\partial f}{\partial x_{2n}}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_{mn}} \right]^{T}$$
(17)

3.3.5 梯度矩阵形式

- 1. 直接对原矩阵变元 X 每个位置元素逐个求偏导,结果布局和原矩阵 布局一致
- 2. 示例

$$\nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}) = \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}_{m \times n}}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f}{\partial x_{12}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{1n}} \\ \frac{\partial f}{\partial x_{21}} & \frac{\partial f}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{2n}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{mn}} \end{bmatrix}_{m \times n}$$

$$(18)$$

4 矩阵变元的实矩阵函数 F(X), $X_{M\times N}=(X_{IJ})_{I=1,J=1}^{M,N}$, $F_{P\times Q}=(F_{IJ})_{I=1,J=1}^{P,Q}$ 9

4 矩阵变元的实矩阵函数

$$F(X), X_{m \times n} = (x_{ij})_{i=1,j=1}^{m,n}, F_{p \times q} = (f_{ij})_{i=1,j=1}^{p,q}$$

4.1 Jacobian 矩阵形式

1. 先把矩阵变元 X 按 vec 向量化,转换为向量变元

$$vec(\mathbf{X}) = [x_{11}, x_{21}, \dots, x_{m1}, x_{12}, x_{22}, \dots, x_{m2}, \dots, x_{1n}, x_{2n}, \dots, x_{mn}]^T$$
(19)

2. 将实矩阵函数 F 按 vec 向量化,转换为实向量函数

$$vec(F(X)) = [f_{11}(X), f_{21}(X), \dots, f_{m1}(X), f_{12}(X), \dots, f_{m2}(X), \dots, f_{1n}(X), f_{2n}(X), \dots, f_{mn}(X)]^{T}$$
(20)

3. 写出布局为 $pq \times mn$ 的矩阵

(21)

4.2 梯度矩阵形式

5 向量变元的实值标量函数

5.1 函数形式

- 1. 函数形式 $f(x), x = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$
- 2. 使用梯度形式,有

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) = \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}$$

$$= \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right]^T$$
(23)

5.2 四个法则

5.2.1 常数求导

与一元函数求导相同,结果为零向量

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \mathbf{0}_{n \times 1} \tag{24}$$

其中, c 为常数

5.2.2 线性法则

与一元函数求导法则相同: 相加再求导等于求导再相加, 常数提外面

$$\frac{\partial [c_1 f(\mathbf{x}) + c_2 g(\mathbf{x})]}{\partial \mathbf{x}} = c_1 \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} + c_2 \frac{\partial g(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}$$
(25)

其中, c_1, c_2 为常数

5.2.3 乘积法则

与一元函数求导乘积法则相同, 前导后不导加前不导后导

$$\frac{\partial [f(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{x})]}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}g(\boldsymbol{x}) + f(\boldsymbol{x})\frac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}$$
(26)

5.2.4 商法则

与一元函数求导商法则相同,上导下不导减上不导下导除以下的平方

$$\frac{\partial \left[\frac{f(\boldsymbol{x})}{g(\boldsymbol{x})}\right]}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{1}{g^2(\boldsymbol{x})} \left[\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} g(\boldsymbol{x}) - f(\boldsymbol{x}) \frac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\right]$$
(27)

5.3 几个公式

5.3.1 公式 1

$$\frac{\partial(\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{a})}{\partial\boldsymbol{x}} = \frac{\partial(\boldsymbol{a}^T\boldsymbol{x})}{\partial\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{a}$$
 (28)

其中, **a** 为常数向量, **a** = $(a_1, a_2, ..., a_n)^T$

5.3.2 公式 2

$$\frac{\partial (\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = 2\boldsymbol{x} \tag{29}$$

5.3.3 公式 3

$$\frac{\partial (\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} + \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{x} \tag{30}$$

其中, $A_{n\times n}$ 为常数矩阵

5.3.4 公式 4

$$\frac{\partial (\boldsymbol{a}^T \boldsymbol{x} \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{b})}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{a} \boldsymbol{b}^T \boldsymbol{x} + \boldsymbol{b} \boldsymbol{a}^T \boldsymbol{x}$$
 (31)

其中, $\boldsymbol{a} = [a_1, \dots, a_n]^T$, $\boldsymbol{b} = [b_1, \dots, b_n]^T$ 为常数常量

6 矩阵变元的实值标量函数

6.1 函数形式

1. 函数形式

$$f(\mathbf{X}), \mathbf{X}_{m \times n} = (x_{ij})_{i=1, j=1}^{m, n}$$
(32)

2. 使用梯度矩阵形式

$$\nabla_{\mathbf{X}} f(\mathbf{X}) = \frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}_{m \times n}}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f}{\partial x_{12}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{1n}} \\ \frac{\partial f}{\partial x_{21}} & \frac{\partial f}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{2n}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{mn}} \end{bmatrix}_{m \times n}$$

$$(33)$$

6.2 四个法则

6.2.1 常数求导

$$\frac{\partial c}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{0}_{m \times n} \tag{34}$$

6.2.2 线性法则

$$\frac{\partial [c_1 f(\mathbf{X}) + c_2 g(\mathbf{X})]}{\partial \mathbf{X}} = c_1 \frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} + c_2 \frac{\partial g(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}}$$
(35)

6.2.3 乘积法则

$$\frac{\partial [f(\boldsymbol{X})g(\boldsymbol{X})]}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}g(\boldsymbol{X}) + f(\boldsymbol{X})\frac{\partial g(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{x}}$$
(36)

6.2.4 商法则

$$\frac{\partial \left[\frac{f(\boldsymbol{X})}{g(\boldsymbol{X})}\right]}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{1}{g^2(\boldsymbol{X})} \left[\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} g(\boldsymbol{X}) - f(\boldsymbol{X}) \frac{\partial g(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}\right]$$
(37)

6.3 几个公式

6.3.1 公式 1

$$\frac{\partial (\boldsymbol{a}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{b})}{\partial \boldsymbol{X}} = \boldsymbol{a} \boldsymbol{b}^T \tag{38}$$

其中, $\boldsymbol{a}_{m\times 1}, \boldsymbol{b}_{n\times 1}$ 为常数向量, $\boldsymbol{a} = (a_1, a_2, \dots, a_m)^T, \boldsymbol{b} = (b_1, b_2, \dots, b_n)^T$

6.3.2 公式 2

$$\frac{\partial (\boldsymbol{a}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{b})}{\partial \boldsymbol{X}} = \boldsymbol{b} \boldsymbol{a}^T \tag{39}$$

其中, $\boldsymbol{a}_{n\times 1}, \boldsymbol{b}_{m\times 1}$ 为常数向量, $\boldsymbol{a} = (a_1, a_2, \dots, a_n)^T, \boldsymbol{b} = (b_1, b_2, \dots, b_n)^T$

7 矩阵的迹 14

6.3.3 公式 3

$$\frac{\partial (\boldsymbol{a}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{b})}{\partial \boldsymbol{X}} = \boldsymbol{a} \boldsymbol{b}^T \boldsymbol{X} + \boldsymbol{b} \boldsymbol{a}^T \boldsymbol{X}$$
 (40)

其中, $a_{m\times 1}, b_{m\times 1}$ 为常数向量, $a = (a_1, a_2, \dots, a_m)^T, b = (b_1, b_2, \dots, b_m)^T$

6.3.4 公式 4

$$\frac{\partial (\boldsymbol{a}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{b})}{\partial \boldsymbol{X}} = \boldsymbol{X} \boldsymbol{b} \boldsymbol{a}^T + \boldsymbol{X} \boldsymbol{a} \boldsymbol{b}^T$$
 (41)

其中, $a_{n\times 1}, b_{n\times 1}$ 为常数向量, $a = (a_1, a_2, \dots, a_n)^T, b = (b_1, b_2, \dots, b_n)^T$

7 矩阵的迹

7.1 定义

 $n \times n$ 的方阵 $\mathbf{A}_{n \times n}$ 的主对角线元素之和称为矩阵 \mathbf{A} 的迹 (trace), 记为 $tr(\mathbf{A})$

7.2 性质

- 1. 标量的迹: 一个标量 x 可以看作 1×1 的矩阵, 它的迹就是它自己
- 2. 线性法则: 相加再求迹等于求迹再相加, 标量提外面

$$tr(c_1\mathbf{A} + c_2\mathbf{B}) = c_1tr(\mathbf{A}) + c_2tr(\mathbf{B})$$
(42)

- 3. 转置:转置矩阵的迹等于原矩阵的迹
- 4. 乘积的迹的本质对于两个阶数都是 $m \times n$ 的矩阵 $A_{m \times n}, B_{m \times n}$, 其中一个矩阵乘以另一个矩阵的转置的迹,本质上是 $A_{m \times n}, B_{m \times n}$ 两个矩

8 微分与全微分 15

阵对应位置的元素相乘并相加,可以理解为向量点积在矩阵上的推广

$$tr(\mathbf{A}\mathbf{B}^{T}) = \begin{cases} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{12} + \dots + a_{1n}b_{1n} \\ +a_{21}b_{21} + a_{22}b_{22} + \dots + a_{2n}b_{2n} \\ + \dots \\ +a_{m1}b_{m1} + a_{m2}b_{m2} + \dots + a_{mn}b_{mn} \end{cases}$$
(43)

- 5. 交换律:矩阵乘积位置互换,迹不变
- 6. 更多矩阵的交换律:

$$tr(\mathbf{ABC}) = tr(\mathbf{CAB}) = tr(\mathbf{BCA}) \tag{44}$$

7. 熟练使用

$$tr(\mathbf{A}\mathbf{B}^{T}) = tr(\mathbf{B}\mathbf{A}^{T}) = tr(\mathbf{A}^{T}\mathbf{B}) = tr(\mathbf{B}\mathbf{A}^{T})$$
(45)

8 微分与全微分

9 矩阵的微分

9.1 向量变元的实值标量函数

1. 函数形式

$$f(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T \tag{46}$$

2. 全微分

$$df(\mathbf{x}) = \frac{\partial f}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} dx_2 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n} dx_n$$

$$= \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right) \begin{bmatrix} dx_1 \\ dx_2 \\ \vdots \\ dx_n \end{bmatrix}$$
(47)

3. 因为结果是标量,也可以写为迹的形式

$$df(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right) \begin{bmatrix} dx_1 \\ dx_2 \\ \vdots \\ dx_n \end{bmatrix}$$

$$= tr\left(\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right) \begin{bmatrix} dx_1 \\ dx_2 \\ \vdots \\ dx_n \end{bmatrix}\right)$$

$$\begin{pmatrix} dx_1 \\ dx_2 \\ \vdots \\ dx_n \end{pmatrix}$$

$$(48)$$

9.2 矩阵变元的实值标量函数

1. 函数形式

$$f(\mathbf{X}), \mathbf{X}_{m \times n} = (x_{ij})_{i=1, j=1}^{m, n}$$
(49)

2. 全微分

$$df(\mathbf{X}) = \frac{\partial f}{\partial x_{11}} dx_{11} + \frac{\partial f}{\partial x_{12}} dx_{12} + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_{1n}} dx_{1n}$$

$$+ \frac{\partial f}{\partial x_{21}} dx_{21} + \frac{\partial f}{\partial x_{22}} dx_{22} + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_{2n}} dx_{2n}$$

$$+ \dots$$

$$+ \frac{\partial f}{\partial x_{m1}} dx_{m1} + \frac{\partial f}{\partial x_{m2}} dx_{m2} + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_{mn}} dx_{mn}$$

$$(50)$$

3. 上式其实就是矩阵 $\left(\frac{\partial f}{\partial x_{ij}}\right)_{i=1,j=1}^{m,n}$ 与矩阵 $(dx_{ij})_{i=1,j=1}^{m,n}$ 对应位置的元素

相乘并相加,从等式(43)可以看出,上式可以写为两个矩阵相乘的迹

$$df(\mathbf{X}) = \frac{\partial f}{\partial x_{11}} dx_{11} + \frac{\partial f}{\partial x_{12}} dx_{12} + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_{1n}} dx_{1n}$$

$$+ \frac{\partial f}{\partial x_{21}} dx_{21} + \frac{\partial f}{\partial x_{22}} dx_{22} + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_{2n}} dx_{2n}$$

$$+ \dots$$

$$+ \frac{\partial f}{\partial x_{m1}} dx_{m1} + \frac{\partial f}{\partial x_{m2}} dx_{m2} + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_{mn}} dx_{mn}$$

$$= tr(\begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f}{\partial x_{21}} & \dots & \frac{\partial f}{\partial x_{m1}} \\ \frac{\partial f}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f}{\partial x_{22}} & \dots & \frac{\partial f}{\partial x_{m2}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f}{\partial x_{2n}} & \dots & \frac{\partial f}{\partial x_{mn}} \end{bmatrix}_{n \times m} \begin{bmatrix} dx_{11} & dx_{12} & \dots & dx_{1n} \\ dx_{21} & dx_{22} & \dots & dx_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ dx_{m1} & dx_{m2} & \dots & dx_{mn} \end{bmatrix}_{m \times n}$$

$$(51)$$

9.3 矩阵变元的实矩阵函数

1. 函数形式

$$F(X), F_{p \times q} = (f_{ij})_{i=1}^{p,q}, X_{m \times n} = (x_{ij})_{i=1}^{m,n}$$
 (52)

2. 全微分: 设 $f_{ij}(X)$ 可微

$$d\mathbf{F}_{p\times q}(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} df_{11}(\mathbf{X}) & f_{12}(\mathbf{X}) & \dots & f_{1q}(\mathbf{X}) \\ df_{21}(\mathbf{X}) & f_{22}(\mathbf{X}) & \dots & f_{2q}(\mathbf{X}) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ df_{p1}(\mathbf{X}) & f_{p2}(\mathbf{X}) & \dots & f_{pq}(\mathbf{X}) \end{bmatrix}_{p\times q}$$

$$(53)$$

- 3. 四个法则
 - 常数矩阵的矩阵微分

$$d\mathbf{A}_{m\times n} = 0_{m\times n} \tag{54}$$

• 线性法则

$$d(c_1 \mathbf{F}(\mathbf{X}) + c_2 \mathbf{G}(\mathbf{X})) = c_1 d\mathbf{F}(\mathbf{X}) + c_2 d\mathbf{G}(\mathbf{X})$$
 (55)

• 乘积法则

$$d(F(X)G(X)) = d(F(X))G(X) + F(X)d(G(X))$$
(56)

其中, $F_{p\times q}(X)$, $G_{q\times s}(X)$

• 转置法则: 转置的矩阵微分等于矩阵微分的转置

$$d\mathbf{F}_{p\times q}^{T}(\mathbf{X}) = (d\mathbf{F}_{p\times q}(\mathbf{X}))^{T}$$
(57)

9.4 为什么使用矩阵微分求导

- 1. 对于矩阵变元的实值标量函数的全微分
- 2. 对于等式 (51), 在 trace 中, 左边的矩阵就是

$$D_{\mathbf{X}}f(\mathbf{X}) = \frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}_{m \times n}^{T}}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{m1}} \\ \frac{\partial f}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{m2}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{mn}} \end{bmatrix}_{n \times m}$$

$$(58)$$

- 3. 右边的矩阵就是 dX_{mn}
- 4. 因此,矩阵变元的实值标量函数的全微分,可以写为

$$df(\mathbf{X}) = tr(\frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}^{T}} d\mathbf{X})$$
 (59)

5. 只需要将一个矩阵变元的实值标量函数的全微分写成等式 (59) 就可以得到 $\frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}^T}$

9.4.1 几个性质

1. 夹层饼

$$d(\mathbf{AXB}) = \mathbf{A}d(\mathbf{X})\mathbf{B} \tag{60}$$

其中, $A_{p\times m}, B_{n\times q}$ 是常数矩阵

- 2. 行列式 $d|\mathbf{X}| = |\mathbf{X}|tr(\mathbf{X}^{-1}d\mathbf{X}) = tr(|\mathbf{X}|\mathbf{X}^{-1}d\mathbf{X})$, 其中 $\mathbf{X}_{n\times n}$
 - 行列式是一个实值标量函数,可以应用等式 (59)
 - 将 |X| 按照元素 x_{ij} 所在的第 i 行展开

$$|X| = x_{i1}A_{i1} + x_{i2}A_{i2} + \dots + x_{in}A_{in}$$
 (61)

• 对元素 x_{ij} 的偏导,即为该元素对应的代数余子式

$$\frac{\partial |\mathbf{X}|}{\partial x_{ij}} = A_{ij} \tag{62}$$

• 行列式对矩阵求导的结果为

$$\frac{\partial |\mathbf{X}|}{\partial \mathbf{X}^{T}} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{21} & \dots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \dots & A_{n2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{1n} & A_{2n} & \dots & A_{nn} \end{bmatrix} = \mathbf{X}^{*}$$
(63)

• X* 为伴随矩阵,和逆矩阵关系为

$$\boldsymbol{X}^{-1} = \frac{\boldsymbol{X}^*}{|\boldsymbol{X}|} \tag{64}$$

• 于是有

$$d|\mathbf{X}| = tr(\frac{\partial |\mathbf{X}|}{\partial \mathbf{X}^{T}} d\mathbf{X})$$

$$= tr(|\mathbf{X}|\mathbf{X}^{-1} d\mathbf{X}) = |\mathbf{X}| tr(\mathbf{X}^{-1} d\mathbf{X})$$
(65)

- 3. 逆矩阵 $d(\boldsymbol{X}^{-1}) = -\boldsymbol{X}^{-1}d(\boldsymbol{X})\boldsymbol{X}^{-1}$, 其中 $\boldsymbol{X}_{n\times n}$
 - $XX^{-1} = E$
 - 对上式取微分,有

$$d(X)X^{-1} + Xd(X^{-1}) = 0 (66)$$

• 对上式左乘 X^{-1} 可证