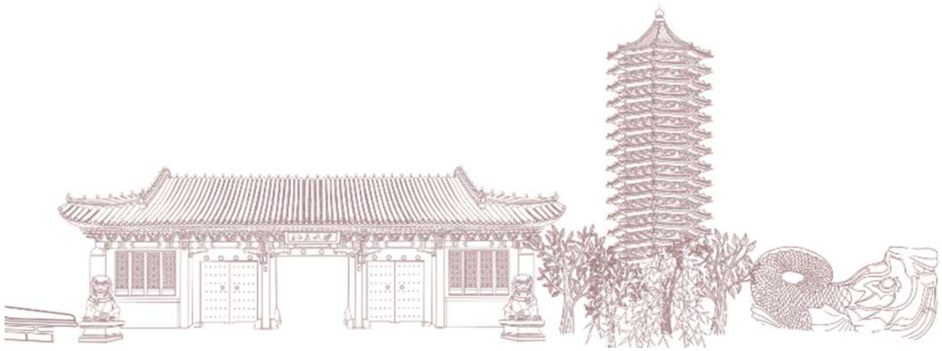
北京大學
PEKING UNIVERSITY

图形学中的数学

GAMES001: Mathematics in Computer Graphics

2024 年春季



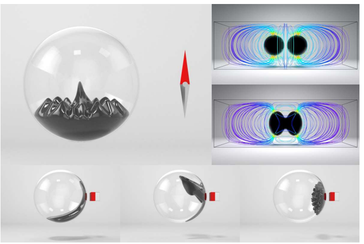
指导教师

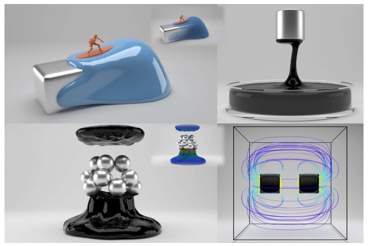
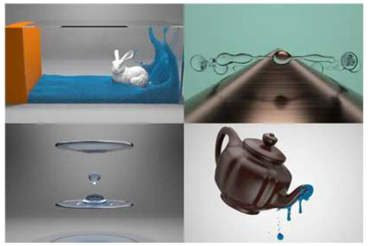
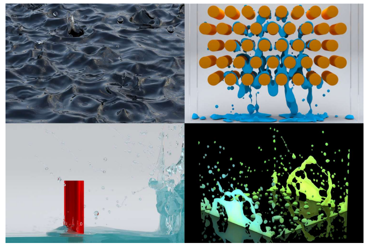
http://baoquanchen.info/

- 陈宝权 教授
  - 北京大学智能学院副院长
  - 研究领域: 计算机图形学、三维视觉与可视化
  - 中国计算机学会会士，中国图象图形学学会会士, IEEE Fellow, IEEE Visualization Academy
  - 在 ACM SIGGRAPH, IEEE VIS, ACM Transactions on Graphics (TOG), IEEE Transactions on Visualization and Graphics (TVCG) 等国际会议和期刊发表论文 200 余篇

讲者介绍

- 倪星宇
  - 北京大学四年级博士生（直博）
  - 研究方向: 物理模拟
  - 北京大学首届“图灵班” (2020) 毕业生
  - 第 32 届 NOI 金牌（国家集训队）
- 阮良旺
  - 北京大学三年级博士生（直博）
  - 研究方向: 物理模拟
  - 北京大学第二届 (2021) “图灵班”毕业生
  - 第 33 届 CPhO 金牌（国家集训队）



助教介绍

- 陶凝骁
  - 北京大学2020级元培学院本科生
  - 第36届CPhO金牌（国家集训队）
  - taoningxiao@gmail.com
- 王瑞诚
  - 北京大学2020级元培学院本科生
  - 第33届CChO金牌（国家集训队）
  - wrc0326@outlook.com
- 朱岳宸
  - 北京大学2020级"图灵班"本科生
  - 第36届CPhO金牌（国家集训队）
  - zhuyuechen01@gmail.com
- 于程
  - 北京大学2020级信息学院本科生
  - chengyupku@163.com

课程大纲

北京大學 PEKING UNIVERSITY

- Part I: 几何与代数
  - 1 线性代数基础
  - 2 计算几何
  - 3 旋转变换
  - 4 主成分分析与奇异值分解
- Part II: 数值方法
  - 5 插值、拟合与采样
  - 6 谱分析与傅里叶变换
  - 7 概率论 (I)
  - 8 概率论 (II)
- Part III: 微分方程求解
  - 9 场论初步
  - 10 古典微分几何
  - 11 微分方程
  - 12 线性系统
- Part IV: 优化与拓扑
  - 13 最优化
  - 14 机器学习 (I)
  - 15 机器学习 (II)
  - 16 拓扑

参考书目

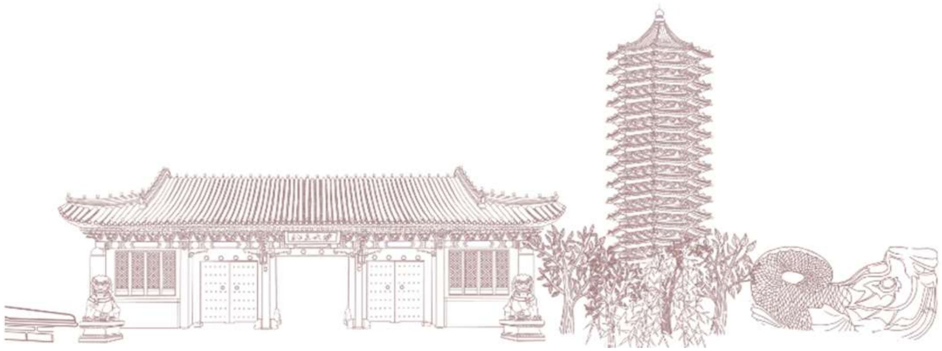
- [1] Daniel Cohen-Or, Chen Greif, Tao Ju, Niloy J. Mitra, Ariel Shamir, Olga Sorkine-Hornung, and Hao (Richard) Zhang. 2015. A Sampler of Useful Computational Tools for Applied Geometry, Computer Graphics, and Image Processing (1st. ed.). A. K. Peters, Ltd., USA.
- [2] Eric Lengyel. 2011. Mathematics for 3D Game Programming and Computer Graphics, Third Edition (3rd. ed.). Course Technology Press, Boston, MA, USA. （《3D游戏与计算机图形学中的数学方法》，詹海生译，北京：清华大学出版社，2016年。）
- [3] Avrim Blum, John Hopcroft, and Ravindran Kannan. 2020. Foundations of Data Science. Cambridge University Press, UK.

线性代数基础

Fundamentals of Linear Algebra

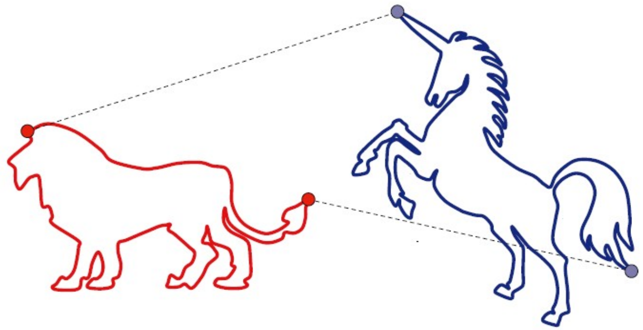
本章主讲：倪星宇

2024年3月4日

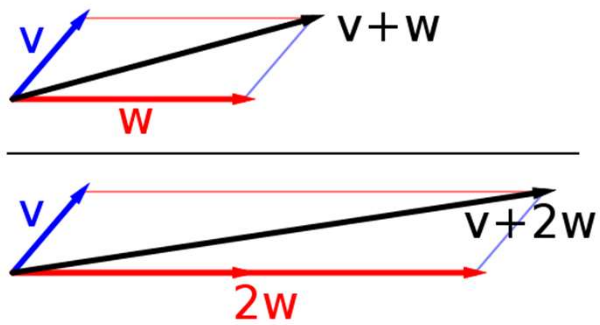


向量 (Vector)

- 图形学的基本研究对象：点的位置、法向……
  - 从本质上说，均为向量



- 什么是向量
  - 中学数学/物理：既有大小又有方向的量
    - 运算满足平行四边形法则
  - 线性代数：向量空间（线性空间）的元素
    - 运算满足公理化定义



向量空间 (Vector Space)

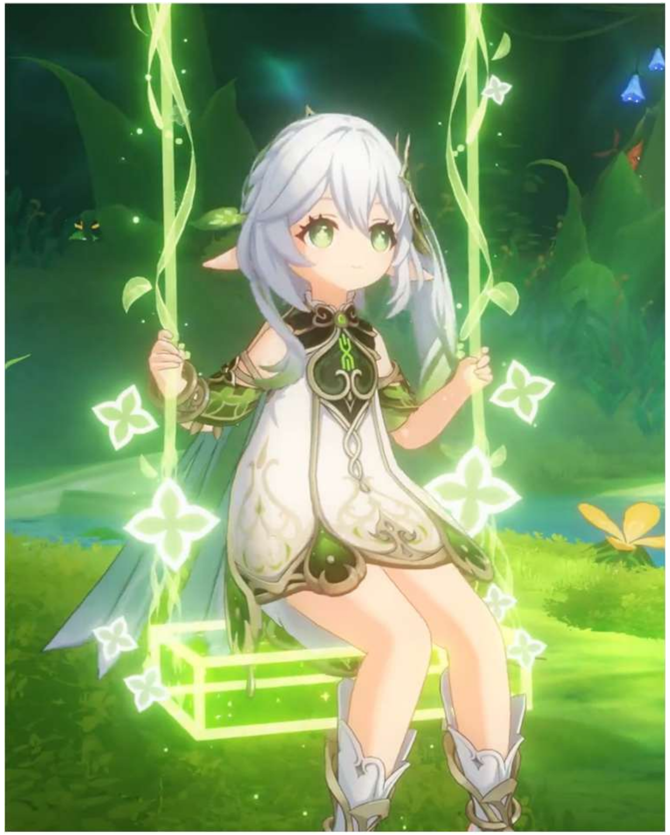
- 数域 F 上的向量空间：带有向量加法和标量乘法的非空集合 V
  - 向量加法结合律：$\boldsymbol{u}+(\boldsymbol{v}+\boldsymbol{w})=(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v})+\boldsymbol{w}$
  - 向量加法交换律：$\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}+\boldsymbol{u}$
  - 向量加法单位元：$\boldsymbol{v}+\boldsymbol{0}=\boldsymbol{v}$
  - 向量加法逆元：$\boldsymbol{v}+(-\boldsymbol{v})=\boldsymbol{0}$
  - 标量乘法与数域乘法的结合律：$a(b\boldsymbol{v})=(ab)\boldsymbol{v}$
  - 标量乘法单位元：$1\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}$
  - 标量乘法对向量加法的分配律：$a(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v})=a\boldsymbol{u}+a\boldsymbol{v}$
  - 标量乘法对数域加法的分配律：$(a+b)\boldsymbol{v}=a\boldsymbol{v}+b\boldsymbol{v}$
- 在图形学应用中，数域 F 一般取为实数域 $\mathbb{R}$，其它选择包括复数域 $\mathbb{C}$ 等

线性组合 (Linear Combination)

- 线性相关/无关 (Linearly dependent/independent)
  - 定义在向量集合 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ 上
  - 线性相关：数域 F 中存在不全为 0 的一组数 $a_1, a_2, a_3, \ldots, a_n$ 使得
    - $a_1\boldsymbol{u}_1 + a_2\boldsymbol{u}_2 + a_3\boldsymbol{u}_3 + \cdots + a_n\boldsymbol{u}_n = 0$
    - $\boldsymbol{u}_1 = -\frac{a_2}{a_1}\boldsymbol{u}_2 - \frac{a_3}{a_1}\boldsymbol{u}_3 - \cdots - \frac{a_n}{a_1}\boldsymbol{u}_n$ $(a_1 \neq 0)$ 说明 $\boldsymbol{u}_1$ 是 $\boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3, \ldots, \boldsymbol{u}_n$ 的线性组合
  - 线性无关：数域 F 中不存在不全为 0 的这样一组数
- 向量空间的维度
  - 空间内能找出的线性无关的向量的个数的最大值，记为 $\dim V$
  - $\dim V$ 个线性无关的向量构成空间的一组基矢 (basis vectors)
    - 任意空间中的向量可以**唯一**表示为这组基矢的线性组合（反证法给出唯一性）
    - 线性组合的系数 (coefficients) 被称为该矢量在这组基下的坐标 (coordinates)

图形学研究的维度

- 低维向量和向量空间（2D~4D）
  - 物理空间：Mesh、曲线、点云的坐标及导数
    - 欧几里得空间 (x, y, z)
    - 闵可夫斯基空间 (x, y, z, ict)
  - 颜色空间：RGB, CMYK
    - 作业：为什么颜色空间可以构成向量空间?
- 高维向量和向量空间
  - 灰度数字图像上所有像素值组成的向量
    - 1920×1080 的灰度数字图像维度达到 200 万
  - 二维或三维图形的所有自由度组成的向量
    - 《原神》中纳西妲运动的顶点自由度数为 45459
    - SIGGRAPH 水体模拟求解的向量维度一般在 10^6 至 10^7



线性映射 (Linear Mapping)

- $f: V \to W$
  - V, W 均为向量空间
  - $f(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}) = f(\boldsymbol{u}) + f(\boldsymbol{v})$
  - $f(\alpha \boldsymbol{v}) = \alpha f(\boldsymbol{v})$
  - 推论（如何证明?）
    - $f(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$
    - $f(a\boldsymbol{u} + b\boldsymbol{v}) = af(\boldsymbol{u}) + bf(\boldsymbol{v})$
- 低维空间的线性映射
  - 缩放、旋转是线性映射
  - 平移不是线性映射
  - ** 仿射变换 (affine transformation) = 缩放、旋转 + 平移

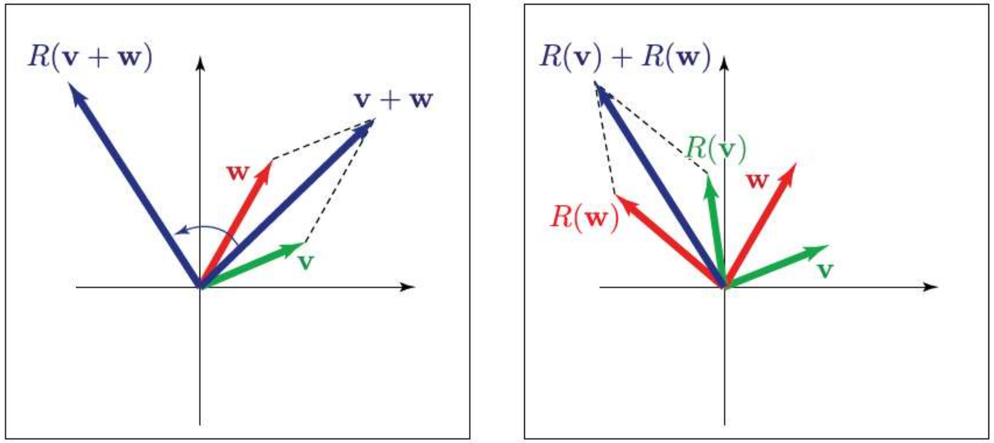


Figure 2.10: Rotation is a linear operator.

矩阵 (Matrix)

- 什么是矩阵
  - ✗ 二维数字阵列 (2D array)
  - ✓ 对线性映射的一种表示
    - https://www.bilibili.com/video/BV1ys411472E/ （** 强烈推荐）
- 矩阵运算的意义
  - 矩阵与向量的乘法
    - 给出向量在新的空间（经过矩阵对应的线性变换后的空间）里的坐标
  - 矩阵的乘法
    - 对空间的多次相继变换的合成
- 方阵
  - $n \times n$ 的矩阵，暗示变换前与变换后的空间有相同的维度；单位矩阵 $\boldsymbol{E}$

矩阵单目运算

- 转置 (Transpose) $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$：$\boldsymbol{A}$ 的所有元素的下标行、列互换
  - 意义：矩阵对应的线性变换在对偶空间里的逆变换对应的矩阵
  - 性质：$(\boldsymbol{AB})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$

复数域上的共轭矩阵：转置 + 共轭
记为 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$

- 行列式 (Determinant) $\det \boldsymbol{A} = |\boldsymbol{A}|$
  - 意义：矩阵对应的线性变换对空间的拉伸程度的度量（物体经过变换前后的体积比）
  - 定义：在 n 阶方阵中选 n 个元素使得每行每列各有一个元素被选出，求其乘积
    - 再将不同选择方案的乘积乘以正负 1（由选择方法的奇偶性决定）加和
  - 计算方法
    - 低维矩阵：n 条主对角线分别计算乘积的和，减去 n 条次对角线分别计算乘积的和
    - 高维矩阵：高斯消元后取对角线元素的积
  - 性质：转置不变；交换行（列）取反

矩阵单目运算

- 迹 (Trace) $\operatorname{tr}\boldsymbol{A}$：矩阵的对角线元素之和
  - 意义：矩阵的特征值之和
  - 性质：$\operatorname{tr}\boldsymbol{A}=\operatorname{tr}\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\right)$；$\operatorname{tr}\boldsymbol{AB}=\operatorname{tr}\boldsymbol{BA}$；$\operatorname{tr}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})=\operatorname{tr}(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A})$
- 逆 (Inversed) $\boldsymbol{A}^{-1}$：满足 $\boldsymbol{AA}^{-1}=\boldsymbol{E}$ 的矩阵
  - 意义：矩阵对应的线性变换的逆变换的矩阵；矩阵的特征值之积
  - 求解：伴随矩阵法；高斯消元法
  - 性质：$(\boldsymbol{AB})^{-1}=\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1}$；$|\boldsymbol{A}||\boldsymbol{A}^{-1}|=1$
- 伴随 (Adjugated) $\boldsymbol{A}^{*}$：由 $\boldsymbol{A}$ 的每个元素的代数余子式 A_{ij} 构成的矩阵
  - 代数余子式 $A_{ij}=(-1)^{i+j}M_{ij}$；M_{ij} 为余子式，即删去第 i 行第 j 列后的行列式值
  - 性质：$\boldsymbol{AA}^{*}=\boldsymbol{A}^{*}\boldsymbol{A}=|\boldsymbol{A}|\boldsymbol{E}$

特征值 (Eigenvalue)

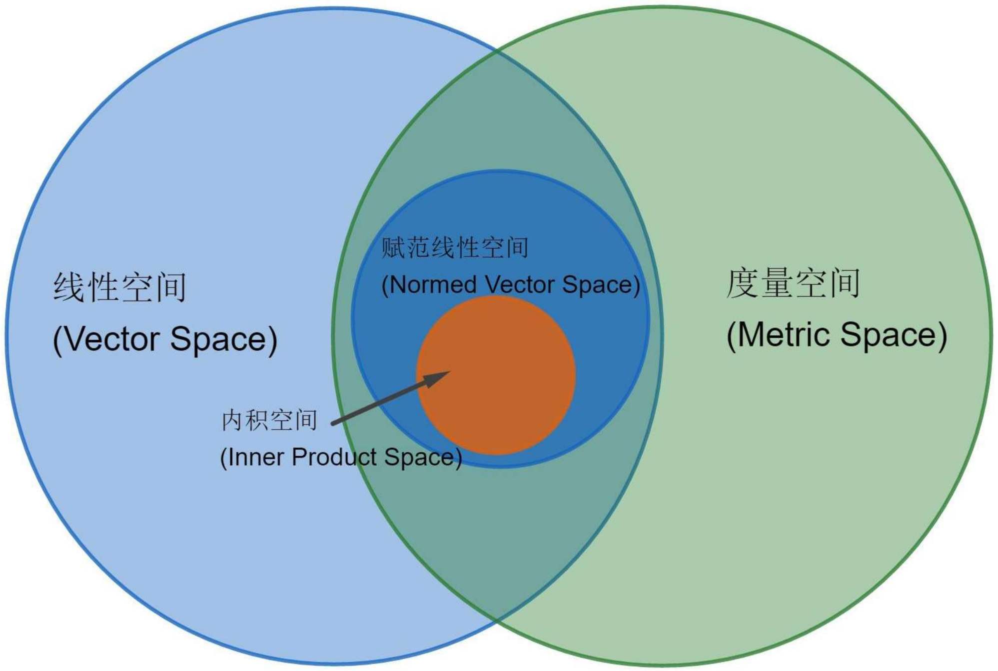
- 对于某些向量 $\boldsymbol{u}$ 满足 $\lambda\boldsymbol{u} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{u}$ 的数 λ 称为特征值（$\boldsymbol{A}$ 为 n 阶方阵）
  - 这些向量 $\boldsymbol{u}$ 称为特征向量，每个特征值对应的特征向量构成向量子空间
    - $\lambda\boldsymbol{u} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{u}, \lambda\boldsymbol{v} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{v} \Longrightarrow \lambda(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}) = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v})$
  - 求解特征值：$(\lambda\boldsymbol{E} - \boldsymbol{A})\boldsymbol{u} = 0$
    - 想得到关于 $\boldsymbol{u}$ 的非零解，则 $|\lambda\boldsymbol{E} - \boldsymbol{A}| = 0$，该行列式对应于一元 n 次方程组
  - 特征值的意义：对于某些向量，特定线性变换的作用效果与数乘等价
- 矩阵多项式的特征值
  - $f(\boldsymbol{A}) = c_k\boldsymbol{A}^k + c_{k-1}\boldsymbol{A}^{k-1} + \cdots + c_1\boldsymbol{A} + c_0\boldsymbol{E}$
    - 若 λ 是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，则 $f(\lambda)$ 必为 $f(\boldsymbol{A})$ 的特征值
    - 设 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$；则 $f(\boldsymbol{A})$ 的全部特征值由 $f(\lambda_1), f(\lambda_2), \dots, f(\lambda_n)$ 给出
  - 重要应用：最大特征值称为谱半径 (spectral radius)；最大最小特征值之比称为条件数

赋范 (Normed) 向量空间

- 度量空间 vs. 向量空间
  - 向量空间中的元素不能比大小
  - 对于集合 V，定义度量函数 $d: V \times V \to \mathbb{R}$，设 $x, y, z \in V$
    - $d(x, y) \geq 0$（非负性）
    - $d(x, y) = 0$ 当且仅当 $x = y$（不可区分者的同一性）
    - $d(x, y) = d(y, x)$（对称性）
    - $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z)$（三角不等式）
  - 定义了度量函数的集合 V 称为度量空间 (metric space)，度量函数 d 又称为"距离"
- 赋范向量空间 = 向量空间 + 度量函数（$d(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = \|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}\|$）
  - 定义范数 $\|\cdot\|: V \to \mathbb{R}$，设 $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in V$
    - $\|\boldsymbol{u}\| \geq 0$, $\|\boldsymbol{u}\| = 0$ 当且仅当 $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}$ (正定性)；$\|a\boldsymbol{u}\| = |a|\|\boldsymbol{u}\|$ ($a \in \mathbb{R}$) (正齐次性)
    - $\|\boldsymbol{u} + \boldsymbol{v}\| \leq \|\boldsymbol{u}\| + \|\boldsymbol{v}\|$ (次可加性, 三角不等式)

内积空间 (Inner Product Space)

- 内积： $V \times V \to \mathbb{R}$
  - $\boldsymbol{u}$ 与 $\boldsymbol{v}$ 的内积记作 $\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle$
  - $\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle = \overline{\langle \boldsymbol{v}, \boldsymbol{u} \rangle}$
  - $\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} + \boldsymbol{w} \rangle = \langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle + \langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{w} \rangle$
  - $\langle \boldsymbol{u}, a\boldsymbol{v} \rangle = a\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle$
  - $\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{u} \rangle \geq 0$
- 赋范线性空间 vs. 内积空间
  - $d(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}) = \langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{u} \rangle$
  - 范数只给出了向量的长度
  - 内积还给出了向量的夹角



内积与正交

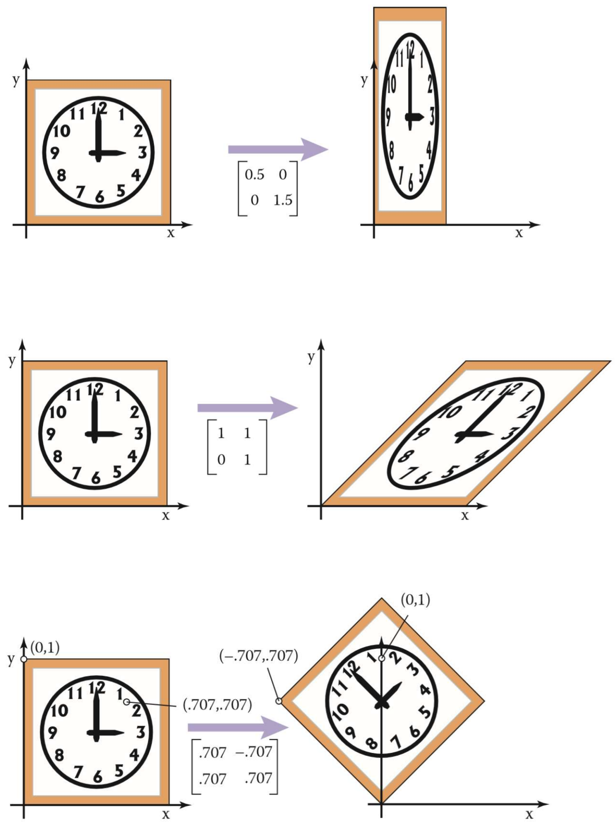
- 正交 (orthogonal) 与单位正交基底
  - 定义两向量的夹角 $\theta_{uv} = \arccos\frac{\langle \boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\rangle}{\sqrt{\langle \boldsymbol{u},\boldsymbol{u}\rangle\langle \boldsymbol{v},\boldsymbol{v}\rangle}}$，当 $\cos\theta_{uv} = 0$ 时称为两向量正交
  - 正交基底：一组两两之间互相正交的向量基底；单位基底：模长均为 1 的向量基底
    - 通过施密特正交化加规范化可以使任意一组基底成为单位正交基底
  - 单位正交基底的性质（设 $\boldsymbol{u} = u_1\boldsymbol{e}_1 + u_2\boldsymbol{e}_2 + u_3\boldsymbol{e}_3, \boldsymbol{v} = v_1\boldsymbol{e}_1 + v_2\boldsymbol{e}_2 + v_3\boldsymbol{e}_3$）
    - $\langle \boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\rangle = \langle u_1\boldsymbol{e}_1 + u_2\boldsymbol{e}_2 + u_3\boldsymbol{e}_3, v_1\boldsymbol{e}_1 + v_2\boldsymbol{e}_2 + v_3\boldsymbol{e}_3\rangle = u_1v_1 + u_2v_2 + u_3v_3$
- 单位正交变换：不改变任意两个向量的内积的变换（保持单位正交基底）
  - 单位正交矩阵：变换对应的矩阵 $\boldsymbol{R}$，满足 $\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{R}^{-1}$；对应于旋转与镜像空间内的旋转
- 笛卡尔坐标系 (Cartesian coordinates)
  - 一组 $\mathbb{R}^n$ 中的单位正交基底加上原点构成的坐标系；成立 $\langle \boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\rangle = \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}$

幺正空间与幺正变换

- 幺正 (unitary) 空间，数学上又译为酉空间
  - 定义了内积的复数域 $\mathbb{C}$ 上的线性空间，内积通过埃尔米特 (Hermite) 函数给出
- 幺正变换，数学上又译为酉变换
  - 将幺正空间中的单位正交基底变换为单位正交基底的变换
    - 单位正交基：亦称为规范正交基、标准正交基
  - 单位正交变换可视为幺正变换在实数域 $\mathbb{R}$ 上的特例
- 幺正空间/变换的应用
  - 量子力学：波函数在复数域上定义
  - 幺正性：算子 (operator) 保内积
  - 线性算子：无限维空间（函数空间）上的线性变换，也存在特征值、内积等概念

低维变换矩阵

- 2D 线性变换
  - $\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}x + a_{12}y \\ a_{21}x + a_{22}y \end{pmatrix}$
  - $\text{scale}(s_x, s_y) = \begin{pmatrix} s_x & 0 \\ 0 & s_y \end{pmatrix}$
  - $\text{shear}_x(s) = \begin{pmatrix} 1 & s \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \text{shear}_y(s) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ s & 1 \end{pmatrix}$
  - $\text{rotate}(\phi) = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix}$

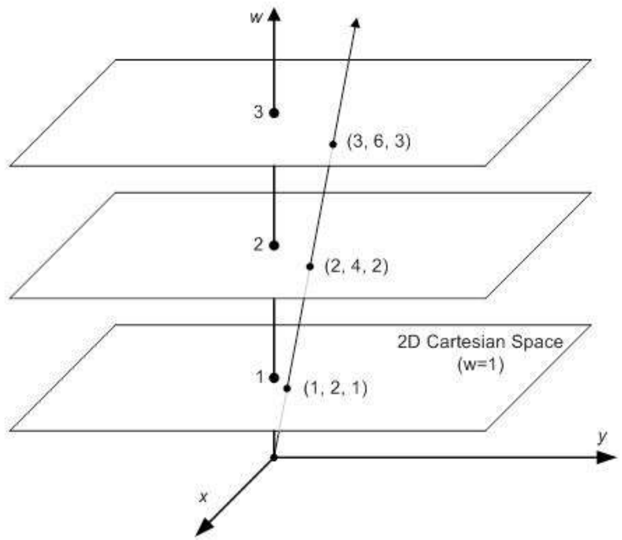


低维变换矩阵

- 3D 线性变换
  - $\text{scale}(s_x, s_y, s_z) = \begin{pmatrix} s_x & 0 & 0 \\ 0 & s_y & 0 \\ 0 & 0 & s_z \end{pmatrix}$
  - $\text{shear}_x(s_y, s_z) = \begin{pmatrix} 1 & s_y & s_z \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
  - $\text{rotate}_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
- 绕任意轴旋转
  - $\boldsymbol{R}^T \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{R}$
  - $\boldsymbol{R}$ 为将旋转轴转为 z 轴的变换矩阵
  - 参见第三讲

齐次 (Homogeneous) 坐标

- 实质：用 $n+1$ 个数表示 n 维坐标
  - 二维：$(x, y, w) \rightarrow \left(\frac{x}{w}, \frac{y}{w}\right)$
  - 三维：$(x, y, z, w) \rightarrow \left(\frac{x}{w}, \frac{y}{w}, \frac{z}{w}\right)$
  - 齐次坐标等比例放缩不影响其表示的 n 维坐标
  - 二维仿射变换
    - $\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & t_x \\ a_{21} & a_{22} & t_y \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}x + a_{12}y + t_x \\ a_{21}x + a_{22}y + t_y \\ 1 \end{pmatrix}$
    - 平移变换是线性变换完成后进行的
  - 默认顺序 (Houdini、Blender 等)：缩放 -> 旋转 -> 平移



矩阵的变换

- 矩阵的变换 vs. 线性变换
  - 矩阵就是线性变换的表示，所以矩阵的变换其实是线性变换的“变换”
- 相似变换
  - 存在可逆矩阵 $\boldsymbol{P}$ 使得 $\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{B}$，称为矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 相似，记作 $\boldsymbol{A}\sim\boldsymbol{B}$
  - 意义：$\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 可以看作同一个线性变换在不同基底下的表象
  - 相似对角化：当存在 n 个线性无关的特征向量时，可以将矩阵相似为一个对角矩阵
    - 在某个特殊的基底下，矩阵对应的线性变换等价于纯缩放变换
- 合同变换
  - 存在可逆矩阵 $\boldsymbol{C}$ 使得 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{C}=\boldsymbol{B}$，称为矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 合同，记作 $\boldsymbol{A}\approx\boldsymbol{B}$
  - 意义：A 与 B 可以看作同一个二次型在不同基底下的表象

二次型

- 二次型 (quadratic form)：n 个变量的二次多项式
  - 示例：圆锥曲线 $Ax^2 + 2Bxy + Cy^2 + 2Dx + 2Ey + F = 0$
    - 矩阵表示 $(x \quad y \quad 1)\begin{pmatrix} A & B & D \\ B & C & E \\ D & E & F \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ 1 \end{pmatrix} = 0$
  - 一般形式：$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = 0$
  - 合同变换后：$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{C}\right)\boldsymbol{x} = 0 \Longrightarrow \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{C}\boldsymbol{x} = 0 \Longrightarrow (\boldsymbol{C}\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{C}\boldsymbol{x}) = 0$
    - 意义：变换基底后的二次型系数
  - 应用
    - 将某任意朝向的椭圆方程转换为标准形式 $\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1$
      - $(x \quad y \quad 1)\begin{pmatrix} 1/a^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/b^2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ 1 \end{pmatrix} = 0$

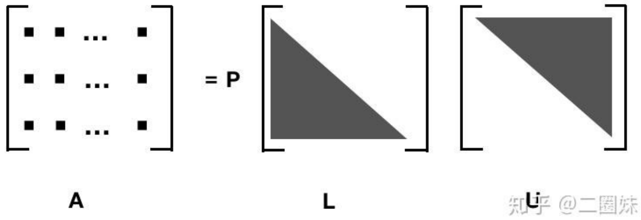
正定矩阵与对称矩阵

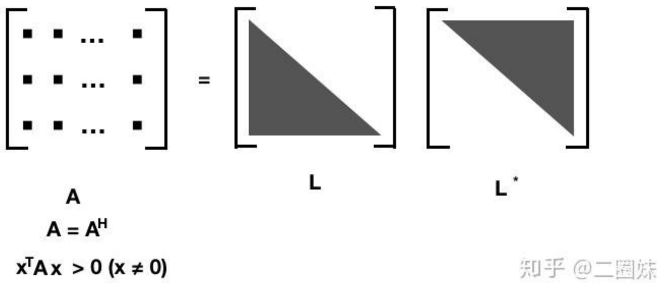
- 正定 (positive definite) 矩阵
  - 定义：满足 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} > 0\ (x \neq 0)$ 的矩阵
  - 意义：可以构建恒取正值的二次型
    - 二元可微函数 $f(x,y)$，其二阶微分 $(\mathrm{d}x \quad \mathrm{d}y)\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathrm{d}x \\ \mathrm{d}y \end{pmatrix}$ 给出沿任意方向的二阶导数
  - 性质：正定矩阵的特征值全为正数（逆命题不成立）
  - 半正定矩阵：满足 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \geq 0\ (x \neq 0)$ 的矩阵
- 实对称矩阵
  - 定义：实数域上的对称矩阵（$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{A}$）
  - 性质：可以被正交矩阵对角化；只要特征值全为正数就是正定的

复数域上的埃尔米特 (Hermitian) 矩阵
满足 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}$

矩阵分解

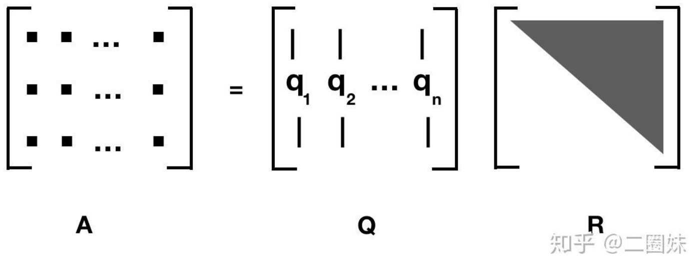
- 矩阵分解 (Decomposition)
  - PLU 分解：$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{PLU}$
    - 要求：方阵
    - $\boldsymbol{P}$ 为初等变换矩阵，$\boldsymbol{L}$ 为下三角矩阵，$\boldsymbol{U}$ 为上三角矩阵
    - 当 P 取单位矩阵时则退化为 LU 分解
    - 应用：高斯消元求解矩阵方程
  - 乔里斯基 (Cholesky) 分解：$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LL}^{\mathrm{H}}$
    - 要求：方阵，正定，实对称/埃尔米特
    - $\boldsymbol{L}$ 为下三角矩阵
    - 应用：高效求解（稀疏）矩阵方程



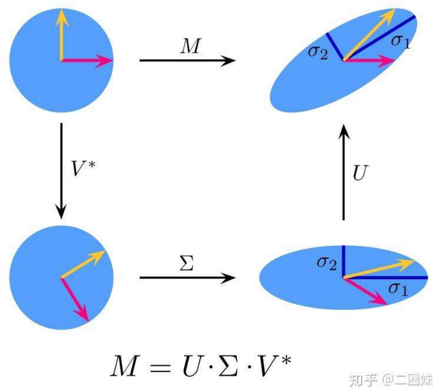


矩阵分解

- 矩阵分解 (Decomposition)
  - QR 分解：$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QR}$
    - 要求：$\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 列满秩，$m \geq n$
    - $\boldsymbol{Q}_{m\times m}$ 为幺正矩阵，$\boldsymbol{R}_{m\times n}$ 为上三角矩阵
    - 非方阵时 $\boldsymbol{R}$ 的下半部分为零矩阵
    - 求解：施密特正交化、吉文斯变换或豪斯霍尔德变换
    - 应用：高效求解（稠密）矩阵方程；分解形变梯度



  - 奇异值分解 (Singular value decomposition, SVD)：$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}}$
    - 要求：$\boldsymbol{A}_{m\times n}$
    - $\boldsymbol{U}_{m\times m}$ 为幺正矩阵，$\boldsymbol{V}_{n\times n}$ 为幺正矩阵，$\boldsymbol{\Sigma}_{m\times n}$ 为对角矩阵
    - 对角矩阵中的元素称为奇异值，均为非负
    - 若 $m = n$，则有 $\sqrt{\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}} = \sqrt{\boldsymbol{V\Sigma}^2\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}} = \boldsymbol{V}|\boldsymbol{\Sigma}|\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$
      - 当 $\boldsymbol{A}$ 为实对称正定矩阵时，特征值与奇异值重合



向量与矩阵的范数

- 向量范数（设 $\boldsymbol{x}$ 维度为 $n \times 1$）
  - L_0 范数：$\|\boldsymbol{x}\|_0 = \sum_{i=1}^{n}[x_i \neq 0]$
  - L_1 范数：$\|\boldsymbol{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n}|x_i| = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_n|$
  - L_2 范数：$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2} = (x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2)^{\frac{1}{2}}$（亦称为 Euclidean/Frobenius 范数）
  - L_p 范数：$\|\boldsymbol{x}\|_p = (|x_1|^p + |x_2|^p + \cdots + |x_n|^p)^{\frac{1}{p}}\ (p \geq 1)$
  - L_∞ 范数：$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max\{|x_1|, |x_2|, \dots, |x_n|\}$

  - ** L_0 范数不能满足正定性、正齐次性、三角不等式
    - 不能构成度量函数；本质上不是范数
    - 不可导；作为优化目标时性能非常低下

向量与矩阵的范数

- 矩阵范数（设 $\boldsymbol{A}$ 维度为 $m \times n$）
  - 诱导范数 (induced norm)
    - $\|\boldsymbol{A}\| = \max\{\|\boldsymbol{Ax}\|: \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n, \|\boldsymbol{x}\| = 1\} = \max\left\{\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}: \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n, \|\boldsymbol{x}\| \neq 0\right\}$
    - 由向量的 L_p 范数可以得到矩阵的诱导 L_p 范数 $\|\boldsymbol{A}\|_p = \max\left\{\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|_p}{\|\boldsymbol{x}\|_p}: \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n, \|\boldsymbol{x}\| \neq 0\right\}$
    - 几何意义：$\boldsymbol{A}$ 作为线性变换所产生的对向量模长的最大放大倍数
    - 诱导范数的相容律：$\|Ax\| \leq \|A\|\|x\|$
      - 证明：$\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \leq \max\left\{\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}: \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n, \|\boldsymbol{x}\| \neq 0\right\} = \|\boldsymbol{A}\|$
    - $\|\boldsymbol{A}\|_1 = \max\limits_{1\leq j\leq n} \sum_{i=1}^{m} |a_{ij}|$（$\boldsymbol{A}$ 的所有列向量的最大绝对值和）
    - $\|\boldsymbol{A}\|_2 = \sigma_{\max}(\boldsymbol{A})$（$\boldsymbol{A}$ 的最大奇异值，故该范数又称为谱范数）
    - $\|\boldsymbol{A}\|_\infty = \max\limits_{1\leq i\leq m} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$（$\boldsymbol{A}$ 的所有行向量的最大绝对值和）

** 作业：如何证明?

向量与矩阵的范数

- 矩阵范数（设 $\boldsymbol{A}$ 维度为 $m \times n$）
  - 元素形式范数 (entrywise norm)
    - 将矩阵降维成向量并使用向量的 L_p 范数
    - $\|\boldsymbol{A}\|_1 = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$（和范数、$L_1$ 范数）
    - $\|\boldsymbol{A}\|_\mathrm{F} = \left(\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2\right)^{\frac{1}{2}} = \operatorname{tr} \boldsymbol{A}^\mathrm{T} \boldsymbol{A}$（Frobenius 范数、Euclidean 范数、Schur 范数、L_2 范数）
    - $\|\boldsymbol{A}\|_\infty = \max\limits_{1 \le i \le m} \max\limits_{1 \le j \le n} |a_{ij}|$（最大范数、$L_\infty$ 范数）
  - 沙滕 (Schatten) 范数：一种不随幺正变换而改变的范数
    - $\|\boldsymbol{A}\|_p = \left(\sum_{i=1}^{\max\{m,n\}} \sigma_i^p\right)^{\frac{1}{p}}$（$\sigma_i$ 为奇异值）
    - $\|\boldsymbol{A}\|_1$ 为奇异值之和，称为核范数 (nuclear norm)
    - $\|\boldsymbol{A}\|_2 = \|\boldsymbol{A}\|_\mathrm{F}$
    - $\|\boldsymbol{A}\|_\infty$ 等价于谱范数

矩阵求导

- 矩阵求导在图形学中的应用
  - 伴随方法中求物理量相对于初始参数的导数（深度学习中求输出相对于输入的导数）
  - 软体仿真中给定势能函数求应力张量（** 作业）

- 分子布局：分母转置
  - $\frac{\partial \boldsymbol{f}_{2\times1}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}_{3\times1}^{\mathrm{T}}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_3} \end{pmatrix}_{2\times3}$

- 分母布局：分子转置
  - $\frac{\partial \boldsymbol{f}_{2\times1}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}_{3\times1}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_3} & \frac{\partial f_2}{\partial x_3} \end{pmatrix}_{3\times2}$

从本质上说，m 个变元的矩阵对 n 个变元的矩阵求导，所得结果为 $m \times n$ 个变元

所谓“布局”，决定了结果的变元按什么规则排列

矩阵求导

- 向量变元的实值标量函数 $f(\boldsymbol{x})$
  - $\boldsymbol{x}_{n\times 1} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^{\mathrm{T}}$
  - $\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) = \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}_{n\times 1}} = \left(\dfrac{\partial f}{\partial x_1}, \dfrac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \dfrac{\partial f}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}}$
  - 运算法则
    - $\dfrac{\partial c}{\partial \boldsymbol{x}} = \mathbf{0}_{n\times 1}$
    - $\dfrac{\partial[c_1 f(\boldsymbol{x}) + c_2 g(\boldsymbol{x})]}{\partial \boldsymbol{x}} = c_1 \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} + c_2 \dfrac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}$
    - $\dfrac{\partial[f(\boldsymbol{x}) g(\boldsymbol{x})]}{\partial \boldsymbol{x}} = \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} g(\boldsymbol{x}) + f(\boldsymbol{x}) \dfrac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}$
    - $\dfrac{\partial\left[\frac{f(\boldsymbol{x})}{g(\boldsymbol{x})}\right]}{\partial \boldsymbol{x}} = \dfrac{1}{g^2(\boldsymbol{x})}\left[\dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} g(\boldsymbol{x}) - f(\boldsymbol{x}) \dfrac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\right]$

- 常用公式
  - 定义
    - $\boldsymbol{a}_{n\times 1}, \boldsymbol{b}_{n\times 1}$ 为常数向量
    - $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 为常数矩阵
  - $\dfrac{\partial(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a})}{\partial \boldsymbol{x}} = \dfrac{\partial(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{a}$
  - $\dfrac{\partial(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = 2\boldsymbol{x}$
  - $\dfrac{\partial(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$
  - $\dfrac{\partial(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})}{\partial \boldsymbol{x}} = \dfrac{\partial(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$

矩阵求导

- 矩阵变元的实值标量函数 $f(\boldsymbol{X})$
  - $\boldsymbol{X}_{m\times n} = (x_{ij})_{i=1,j=1}^{m,n}$
  - $\nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}) = \dfrac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}_{m\times n}} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_{11}} & \cdots & \dfrac{\partial f}{\partial x_{1n}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_{m1}} & \cdots & \dfrac{\partial f}{\partial x_{mn}} \end{pmatrix}$
  - 运算法则
    - $\dfrac{\partial[c_1 f(\boldsymbol{X})+c_2 g(\boldsymbol{X})]}{\partial \boldsymbol{X}} = c_1\dfrac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} + c_2\dfrac{\partial g(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}$
    - $\dfrac{\partial[f(\boldsymbol{X})g(\boldsymbol{X})]}{\partial \boldsymbol{X}} = \dfrac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} g(\boldsymbol{X}) + f(\boldsymbol{X})\dfrac{\partial g(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}$
    - $\dfrac{\partial\left[\frac{f(\boldsymbol{X})}{g(\boldsymbol{X})}\right]}{\partial \boldsymbol{X}} = \dfrac{1}{g^2(\boldsymbol{X})}\left[\dfrac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} g(\boldsymbol{X}) - f(\boldsymbol{X})\dfrac{\partial g(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}\right]$
- 常用公式
  - $\dfrac{\partial(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b})}{\partial \boldsymbol{X}} = \boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$
    - $\boldsymbol{a}_{m\times 1}, \boldsymbol{b}_{n\times 1}$ 为常数向量
  - $\dfrac{\partial(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})}{\partial \boldsymbol{X}} = \boldsymbol{b}\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}$
    - $\boldsymbol{a}_{n\times 1}, \boldsymbol{b}_{m\times 1}$ 为常数向量
  - $\dfrac{\partial(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})}{\partial \boldsymbol{X}} = \boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} + \boldsymbol{b}\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$
    - $\boldsymbol{a}_{m\times 1}, \boldsymbol{b}_{m\times 1}$ 为常数向量
  - $\dfrac{\partial(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{b})}{\partial \boldsymbol{X}} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{b}\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{X}\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$
    - $\boldsymbol{a}_{n\times 1}, \boldsymbol{b}_{n\times 1}$ 为常数向量

矩阵求导

- 矩阵函数的微分
  - 向量变元的实值标量函数 $f(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{x}_{n\times 1} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^{\mathrm{T}}$
    - $\mathrm{d}f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right)\begin{pmatrix}\mathrm{d}x_1\\ \mathrm{d}x_2\\ \vdots\\ \mathrm{d}x_n\end{pmatrix} = \mathrm{tr}\left[\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right)\begin{pmatrix}\mathrm{d}x_1\\ \mathrm{d}x_2\\ \vdots\\ \mathrm{d}x_n\end{pmatrix}\right]$
  - 矩阵变元的实值标量函数 $f(\boldsymbol{X}), \boldsymbol{X}_{m\times n} = \left(x_{ij}\right)_{i=1,j=1}^{m,n}$
    - $\mathrm{d}f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}\left[\begin{pmatrix}\frac{\partial f}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{m1}}\\ \frac{\partial f}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{m2}}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \frac{\partial f}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{mn}}\end{pmatrix}_{n\times m}\begin{pmatrix}\mathrm{d}x_{11} & \mathrm{d}x_{12} & \cdots & \mathrm{d}x_{1n}\\ \mathrm{d}x_{21} & \mathrm{d}x_{22} & \cdots & \mathrm{d}x_{2n}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \mathrm{d}x_{m1} & \mathrm{d}x_{m2} & \cdots & \mathrm{d}x_{mn}\end{pmatrix}_{m\times n}\right]$

矩阵求导

- 矩阵函数的微分
  - 矩阵变元的实矩阵函数 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X}), \boldsymbol{F}_{p\times q} = \left(f_{ij}\right)_{i=1,j=1}^{p,q}, \boldsymbol{X}_{m\times n} = \left(x_{ij}\right)_{i=1,j=1}^{m,n}$
    - $\mathrm{d}\boldsymbol{F}_{p\times q}(\boldsymbol{X}) = \begin{pmatrix} \mathrm{d}f_{11}(\boldsymbol{X}) & \mathrm{d}f_{12}(\boldsymbol{X}) & \cdots & \mathrm{d}x_{1q}(\boldsymbol{X}) \\ \mathrm{d}f_{21}(\boldsymbol{X}) & \mathrm{d}f_{22}(\boldsymbol{X}) & \cdots & \mathrm{d}x_{2q}(\boldsymbol{X}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{d}f_{p1}(\boldsymbol{X}) & \mathrm{d}f_{p2}(\boldsymbol{X}) & \cdots & \mathrm{d}x_{pq}(\boldsymbol{X}) \end{pmatrix}_{p\times q}$
    - 常数微分法则 $\mathrm{d}\boldsymbol{A}_{m\times n} = \boldsymbol{0}_{m\times n}$
    - 微分线性法则 $\mathrm{d}\big(c_1\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X}) + c_2\boldsymbol{G}(\boldsymbol{X})\big) = c_1\mathrm{d}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X}) + c_2\mathrm{d}\boldsymbol{G}(\boldsymbol{X})$
    - 微分乘积法则 $\mathrm{d}[\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{G}(\boldsymbol{X})] = [\mathrm{d}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})]\boldsymbol{G}(\boldsymbol{X}) + \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})[\mathrm{d}\boldsymbol{G}(\boldsymbol{X})]$（** 乘子顺序不能交换）
      - $\mathrm{d}[\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{G}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{H}(\boldsymbol{X})] = [\mathrm{d}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})]\boldsymbol{G}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{H}(\boldsymbol{X}) + \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})[\mathrm{d}\boldsymbol{G}(\boldsymbol{X})]\boldsymbol{H}(\boldsymbol{X}) + \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{G}(\boldsymbol{X})[\mathrm{d}\boldsymbol{H}(\boldsymbol{X})]$
    - 微分转置法则 $\mathrm{d}\boldsymbol{F}_{p\times q}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{X}) = \left[\mathrm{d}\boldsymbol{F}_{p\times q}(\boldsymbol{X})\right]^{\mathrm{T}}$

矩阵求导

- 利用矩阵微分求导
  - $f(\boldsymbol{X}), \boldsymbol{X}_{m\times n} = \left(x_{ij}\right)_{i=1,j=1}^{m,n}$
    - $\mathrm{d}\boldsymbol{X}_{m\times n} = \begin{pmatrix} \mathrm{d}x_{11} & \mathrm{d}x_{12} & \cdots & \mathrm{d}x_{1n} \\ \mathrm{d}x_{21} & \mathrm{d}x_{22} & \cdots & \mathrm{d}x_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{d}x_{m1} & \mathrm{d}x_{m2} & \cdots & \mathrm{d}x_{mn} \end{pmatrix}_{m\times n}$
    - $\dfrac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}_{m\times n}^T} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{m1}} \\ \frac{\partial f}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{m2}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{mn}} \end{pmatrix}_{n\times m}$
      - 分子布局

- $\mathrm{d}(\boldsymbol{AXB}) = \boldsymbol{A}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{B}$
  - $A_{p\times m}, B_{n\times q}$ 为常数矩阵

$$\mathrm{d}f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}\left[\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right]$$

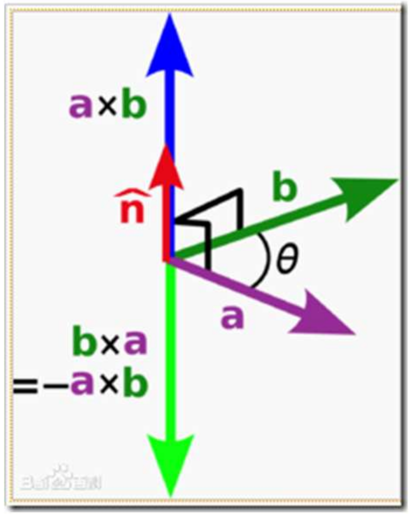
矩阵求导

- 利用矩阵微分求导
  - $f(\boldsymbol{X}), \boldsymbol{X}_{n\times n} = (x_{ij})_{i=1,j=1}^{n,n}$
    - $|\boldsymbol{X}| = x_{i1}A_{i1} + x_{i2}A_{i2} + \cdots + x_{in}A_{in}$ ($\forall i$, A_{ij} 为代数余子式) $\Longrightarrow \frac{\partial|\boldsymbol{X}|}{\partial x_{ij}} = A_{ij}$
    - $\frac{\partial|\boldsymbol{X}|}{\partial \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}} = \boldsymbol{X}^* = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{12} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{1n} & A_{2n} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}_{n\times n}$ ($\boldsymbol{X}^*$ 即伴随矩阵, $\boldsymbol{X}^{-1} = \boldsymbol{X}^*/|\boldsymbol{X}|$)
    - $\mathrm{d}f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}\left[\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right]$ 中代入 $f(\boldsymbol{X}) = |\boldsymbol{X}| \Longrightarrow \mathrm{d}|\boldsymbol{X}| = \mathrm{tr}(|\boldsymbol{X}|\boldsymbol{X}^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{X}) = |\boldsymbol{X}|\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{X})$
    - $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{-1} = \boldsymbol{E} \Longrightarrow (\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{X}^{-1} + \boldsymbol{X}\mathrm{d}(\boldsymbol{X}^{-1}) = \boldsymbol{0} \Longrightarrow \mathrm{d}(\boldsymbol{X}^{-1}) = -\boldsymbol{X}^{-1}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{X}^{-1}$
  - 例：证明 $\frac{\partial\,\mathrm{t}\,(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} = 2\boldsymbol{X}$
    - $\mathrm{d}\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}[(\mathrm{d}\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}] + \mathrm{tr}[\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})] = 2\,\mathrm{tr}[\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})] = \mathrm{tr}[(2\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}})\mathrm{d}\boldsymbol{X}]$

内积、外积、向量积

PEKING UNIVERSITY 北京大学

- 内积（标量积）
  - $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \rangle = \|\boldsymbol{a}\| \|\boldsymbol{b}\| \cos\theta$
  - 向量的内积得到一个标量，其值为向量模长之积乘以夹角余弦
- 叉积（向量积）
  - $\|\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}\| = \|\boldsymbol{a}\| \|\boldsymbol{b}\| \sin\theta, \boldsymbol{a} \cdot (\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}) = 0, \boldsymbol{b} \cdot (\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}) = 0$
  - 向量的叉积得到一个向量
    - 方向垂直于原来的两个向量，正反由右手螺旋定则确定
    - 大小为向量模长之积乘以夹角正弦
    - 二维（伪）：$(a_x, a_y) \times (b_x, b_y) = a_x b_y - b_x a_y$
    - 三维：$(a_x, a_y, a_z) \times (b_x, b_y, b_z) = \begin{vmatrix} \boldsymbol{e}_x & \boldsymbol{e}_y & \boldsymbol{e}_z \\ a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \end{vmatrix}$



内积、外积、向量积

- 叉积（向量积）
  - 叉乘矩阵
    - 反对称矩阵（$\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{0}$）
    - $\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}0 & -a_z & a_y\\ a_z & 0 & -a_x\\ -a_y & a_x & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b_x\\ b_y\\ b_z\end{pmatrix}$
- 外积（张量积）
  - $\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b}=\boldsymbol{A}=\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{H}}$
    - $\begin{pmatrix}a_x\\ a_y\\ a_z\end{pmatrix}(b_x \quad b_y \quad b_z)=\begin{pmatrix}a_xb_x & a_xb_y & a_xb_z\\ a_yb_x & a_yb_y & a_yb_z\\ a_zb_x & a_zb_y & a_zb_z\end{pmatrix}$（实数域上的矩阵表示）
    - 性质：$\mathrm{tr}(\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b})=\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$

克罗内克 (Kronecker) 积

$$\boldsymbol{A}_{m\times n}\otimes\boldsymbol{B}_{p\times q}=\begin{pmatrix}a_{11}\boldsymbol{B} & \cdots & a_{1n}\boldsymbol{B}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{m1}\boldsymbol{B} & \cdots & a_{mn}\boldsymbol{B}\end{pmatrix}$$

张量 (Tensor)

- 协变 (covariant) 与逆变 (contravariant)
  - 在向量空间中，基底是人为给定的，本质的东西是向量本身；协/逆变是对分量而言的
  - 例：三维欧氏空间中的位移 $\boldsymbol{x} = x^1\boldsymbol{e}_1 + x^2\boldsymbol{e}_2 + x^3\boldsymbol{e}_3$
    - 如果 $\boldsymbol{e}_i$ 的模长增大，则坐标 x^i 将相应减小，因此称 x^i 是"逆变"的
    - 如果 $\boldsymbol{e}_i$ 的模长增大，则 $\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{e}_i$ 的模长也会增大，因此 $x_i = \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{e}_i$ 是"协变"的
    - 在一般情况下 $x_i \neq x^i$，可以定义一组新的基底 $\{\boldsymbol{e}^1, \boldsymbol{e}^2, \boldsymbol{e}^3\}$ 使得 $\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{e}^j = \delta_i^j$
      - 克罗内克符号 $\delta_i^j = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases}$
    - 位移也可以用逆变基底展开：$\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{e}^1 + x_2\boldsymbol{e}^2 + x_3\boldsymbol{e}^3$
    - 爱因斯坦求和记号：$\boldsymbol{x} = x_i\boldsymbol{e}^i = x^i\boldsymbol{e}_i$
    - 逆变与协变分量的关系
      - $x_i = \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{e}_i, x^j = \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{e}^j \Rightarrow \boldsymbol{x}_i = \left(x^j\boldsymbol{e}_j\right)\cdot\boldsymbol{e}_i = x^j\left(\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{e}_j\right) = x^j g_{ij}$
      - $g_{ij} = \boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{e}_j$ 称为度规**张量**

张量 (Tensor)

- 从标量、矢量到张量
  - 已知：协变/逆变的概念是由于基底的选取而产生的
  - 标量（0 阶张量）没有"分量"的概念，因此是无所谓协变/逆变的
  - 矢量（1 阶张量）是协变/逆变基底的线性组合，因此只有一个"指标"决定协/逆变
  - 张量（2 阶张量）有两个指标
    - 克罗内克符号 δ_i^j 是 2 阶张量，1 阶逆变，1 阶协变，又称为 (1, 1) 阶混合张量
    - (2, 0) 张量满足 $T^{\mu\nu} = \frac{\partial x^\mu}{\partial \bar{x}^\alpha}\frac{\partial x^\nu}{\partial \bar{x}^\beta}\bar{T}^{\alpha\beta}$
    - (1, 1) 张量满足 $T_\nu^\mu = \frac{\partial x^\mu}{\partial \bar{x}^\alpha}\frac{\partial \bar{x}^\beta}{\partial x^\nu}\bar{T}_\beta^\alpha$ （指标运算的规律?）
    - 问题：矩阵是如何表示线性变换的？
      - 基底不变，更改坐标：矩阵元构成 (2, 0) 阶张量
      - 坐标不变，更改基底：矩阵元构成 (0, 2) 阶张量

张量的运算

- 并矢 (dyadic tensor)
  - 物理上对于两向量张量积的直观理解
    - 例：$\boldsymbol{x} = a\boldsymbol{i} + b\boldsymbol{j}, \boldsymbol{y} = c\boldsymbol{i} + d\boldsymbol{j}$，其并矢为 $\boldsymbol{xy} = ac\boldsymbol{ii} + ad\boldsymbol{ij} + bc\boldsymbol{ji} + bd\boldsymbol{jj}$
  - 与点积的结合律：$\boldsymbol{xy} \cdot \boldsymbol{z} = \boldsymbol{x}(\boldsymbol{y} \cdot \boldsymbol{z}), \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{yz} = (\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y})\boldsymbol{z}$
    - 可以用张量积的矩阵形式证明
  - 分量形式：$t^{ij} = x^i y^j$，是一个 (2, 0) 阶张量
- 张量的并乘
  - (m, n) 阶张量与 (p, q) 阶张量并乘得到 (m+p, n+q) 阶张量
  - 例：$\boldsymbol{x} = x^i e_i, \boldsymbol{y} = y^j e_j$
    - $t^{ij} = x^i y^j$
    - $\boldsymbol{T} = \boldsymbol{xy} = x^i \boldsymbol{e}_i y^j \boldsymbol{e}_j = x^i y^j \boldsymbol{e}_i \boldsymbol{e}_j$（不能交换基底顺序!）

张量的运算

- 张量的缩并
  - 例： $\boldsymbol{T} = x^i y^j z_k \boldsymbol{e}_i \boldsymbol{e}_j \boldsymbol{e}^k$
    - 缩并 $\boldsymbol{e}_j$ 和 $\boldsymbol{e}^k$： $x^i y^j z_k \boldsymbol{e}_i \delta_j^k = x^i y^j z_j \boldsymbol{e}_i$
  - 缩并一般在一对协/逆基矢间展开，利用克罗内克符号，使张量阶数降低 2
  - 缩并后的张量与被缩并基矢独立
    - 三维空间中 $a_i^j \boldsymbol{e}^i \boldsymbol{e}_j$ 的缩并结果为 0 阶张量 $a_1^1 + a_2^2 + a_3^3$，这是一个与基底选取无关的量（迹、特征值）
- 张量的点积
  - 两个张量 $\boldsymbol{T}, \boldsymbol{S}$ 的点积等于它们先联立再缩并的结果
    - 显然对于高阶张量来说，点积的形式有多种
    - 当选择缩并 $\boldsymbol{T}$ 的最后一个基矢和 $\boldsymbol{S}$ 的第一个基矢时，可以记为 $\boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{S}$

张量的运算

- 张量的点积
  - 双点积：两个张量 $\boldsymbol{T}, \boldsymbol{S}$ 的双点积等于它们先联立再缩并两对基矢量的结果
    - 并联式：先缩并 $\boldsymbol{T}, \boldsymbol{S}$ 的倒数第一个基矢；先缩并 $\boldsymbol{T}, \boldsymbol{S}$ 的倒数第二个基矢
      - $\boldsymbol{T}:\boldsymbol{S} = \left(t^{ij}\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_j\right):\left(s_{kl}\boldsymbol{e}^k\boldsymbol{e}^l\right) = t^{ij}s_{kl}\delta_i^k\delta_j^l$
    - 串联式：先缩并 $\boldsymbol{T}, \boldsymbol{S}$ 的中间第一个基矢；先缩并 $\boldsymbol{T}, \boldsymbol{S}$ 的中间第二个基矢
      - $\boldsymbol{T}\cdot\cdot\boldsymbol{S} = \left(t^{ij}\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_j\right)\cdot\cdot\left(s_{kl}\boldsymbol{e}^k\boldsymbol{e}^l\right) = t^{ij}s_{kl}\delta_j^k\delta_i^l$
  - 实例
    - $\boldsymbol{xy}\cdot\boldsymbol{z} = \left(x^iy^j\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_j\right)\cdot\left(z_k\boldsymbol{e}^k\right) = x^iy^jz_k\boldsymbol{e}_i\delta_j^k = x^iy^jz_j\boldsymbol{e}_i = \boldsymbol{x}(\boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{z})$
    - $\boldsymbol{u}\cdot\nabla\boldsymbol{u} = \left(u_i\boldsymbol{e}^i\right)\cdot\left(\left(\boldsymbol{e}_j\frac{\partial}{\partial x^j}\right)\left(u^k\boldsymbol{e}_k\right)\right) = u_i\delta_j^i\frac{\partial u^k}{\partial x^j}\boldsymbol{e}_k = \left(u_i\frac{\partial}{\partial x^i}\right)\left(u^k\boldsymbol{e}_k\right) = (\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u}$
      - 当 $\boldsymbol{u}$ 为速度时，上式是随体导数的重要部分
      - $\frac{\partial}{\partial x_j}$ 可以简记为 ∂_j，$\frac{\partial u^k}{\partial x^j}$ 可以记为 $u^{k,j}$

张量的运算

- 用张量表示叉积
  - 列维—奇维塔 (Levi-Civita) 符号 ϵ_{ijk}
    - $\epsilon_{ijk} = \epsilon_{jk} = \epsilon_{ki} = 1$； $\epsilon_{kji} = \epsilon_{ikj} = \epsilon_{jik} = -1$；下标有重复时为 0
    - 性质：$\epsilon_{ijk}\epsilon^{imn} = \delta_j^m\delta_k^n - \delta_j^n\delta_k^m$； $\epsilon_{jmn}\epsilon^{imn} = 2\delta_j^i$； $\epsilon_{ijk}\epsilon^{ijk} = 6$
    - 一般意义下该符号表达各指标的排列的奇偶性，因此可用来定义行列式
  - $\boldsymbol{x} \times \boldsymbol{y} = \left(x^i\boldsymbol{e}_i\right) \times \left(y^j\boldsymbol{e}_j\right) = x^i y^j \epsilon_{ij}^{\cdot\cdot k}\boldsymbol{e}_k$
    - 在单位正交基底下可以忽略协/逆变，记为$(\boldsymbol{x} \times \boldsymbol{y})_k = x_i y_j \epsilon_{ijk}$
  - 示例：证明 $\|x \times y\|^2 = \|x\|^2\|y\|^2 - (x \cdot y)^2$
    - $\|x \times y\|^2 = x^j y^k \epsilon_{\cdot jk}^{i} x_m y_n \epsilon_i^{\cdot mn} = x^j y^k x_m y_n\left(\delta_j^m\delta_k^n - \delta_j^n\delta_k^m\right) = x^j y^k x_j y_k - x^j y^k x_k y_j$
    - $x^j y^k x_j y_k - x^j y^k x_k y_j = \|x\|^2\|y\|^2 - (x \cdot y)^2$
- ** 张量的本质：对偶线性空间（略）

拓展阅读

- 教科书
  - Sheldon Axler. Linear Algebra Done Right. 2015.
  - Kaare Petersen and Michael Pedersen. The Matrix Cookbook. 2012.
  - 张贤达. 矩阵分析与应用 (第2版).清华大学出版社. 2013.
  - 黄克智, 薛明德, 陆明万. 张量分析 (第3版). 清华大学出版社. 2020.
  - T. 弗兰克尔. 物理几何学导论.世界图书出版公司. 2016. (The Geometry of Physics: An Introduction)
- 网站
  - https://www.3blue1brown.com/
  - https://www.matrixcalculus.org/

作业

- 作业概述
  - 7 道在图形学中有所应用的线性代数证明/计算题
- 作业要求
  - 用 LaTeX/Word 等工具以规范的公式排版书写
    - 字号、字体等格式不限
  - 导出为 PDF 文档
  - 满分为 100 分，达到 60 分为本次作业通过
    - 全部课程作业中通过 80% 者可获得结业认证（优秀者或许会有奖励）
- 作业提交
  - 注册在线课程系统
    - http://cn.ces-alpha.org/course/register/GAMES001/
  - 在 2024 年 4 月 16 日 00:00 前提交作业
    - 每次作业时限为五周