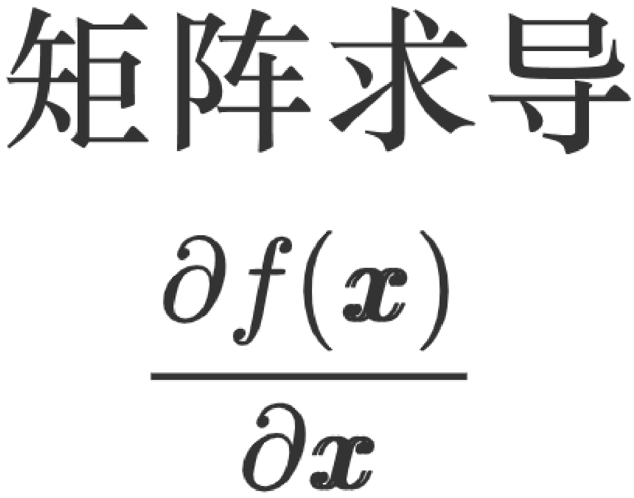


矩阵求导的本质与分子布局、分母布局的本质（矩阵求导——本质篇）

Iterator

0. 前言

在一个多月前，针对有同学关于矩阵求导中分子布局、分母布局**两者的区别**的疑问，我写了如下的这篇答案。

矩阵求导中布局约定，两者布局的意义是什么？
70 赞同 · 7 评论 回答

虽然这篇答案给出了几个结论，但是写的没有很严谨，并没有说明**矩阵求导**的**本质**与**分子布局**、**分母布局**的**本质**。

所以，在接下来这篇文章中，我将**更严谨**地说明**矩阵求导**的本质与**分子布局**、**分母布局**的**本质**。希望对**初学的同学**、**想理解本质的同学**提供一些帮助。

注1：*看懂本文只需了解本科阶段高等数学的**偏导**如何求、本科阶段线性代数的**矩阵**的定义*，***无需任何其他知识。***

注2：*本文若无特殊说明，则约定向量均为**列向量**，如* $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \cdots, x_n]^T$

注3：*本文仅考虑**实数**，不考虑**复数**。*

一. 函数与标量、向量、矩阵[1]

考虑一个函数

$$\text{function}(\text{input})$$

针对 function 的类型、 input 的类型，我们可以将这个函数 funcion 分为不同的种类。

1. function 是一个标量.

我们称 $\mathrm{function}$ 是一个**实值标量函数**。用细体小写字母 f 表示。

1.1 input 是一个标量

我们称 $\mathrm{function}$ 的**变元**是**标量**。用细体小写字母 x 表示。

例1：

$$f(x)=x+2 \tag{e.g.1}$$

1.2 input 是一个向量

我们称 $\mathrm{function}$ 的**变元**是**向量**。用**粗体**小写字母 $\boldsymbol{x}$ 表示。

例2：设 $\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,x_3]^T$

$$f(\boldsymbol{x})=a_1x_1^2+a_2x_2^2+a_3x_3^2+a_4x_1x_2 \tag{e.g.2}$$

1.3 input 是一个矩阵

我们称 $\mathrm{function}$ 的**变元**是**矩阵**。用**粗体**大写字母 $\boldsymbol{X}$ 表示。

例3：设 $\boldsymbol{X}_{3\times 2}=(x_{ij})_{i=1,j=1}^{3,2}$

$$f(\boldsymbol{X})=a_1x_{11}^2+a_2x_{12}^2+a_3x_{21}^2+a_4x_{22}^2+a_5x_{31}^2+a_6x_{32}^2 \tag{e.g.3}$$

2、$\mathrm{function}$ 是一个向量

我们称 $\mathrm{function}$ 是一个**实向量函数** 。用**粗体**小写字母 $\boldsymbol{f}$ 表示。

含义：$\boldsymbol{f}$ 是由若干个 f 组成的一个**向量**。

同样地，变元分三种：**标量、向量、矩阵**。这里的符号仍与上面相同。

2.1 标量变元

例4：

$$\boldsymbol{f}_{3\times 1}(x)=\begin{bmatrix} f_1(x)\\ f_2(x)\\ f_3(x)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix} x+1\\ 2x+1\\ 3x^2+1\end{bmatrix} \tag{e.g.4}$$

2.2 向量变元

例5：设 $\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,x_3]^T$

$$\boldsymbol{f}_{3\times 1}(\boldsymbol{x})=\begin{bmatrix} f_1(\boldsymbol{x})\\ f_2(\boldsymbol{x})\\ f_3(\boldsymbol{x})\end{bmatrix}=\begin{bmatrix} x_1+x_2+x_3\\ x_1^2+2x_2+2x_3\\ x_1x_2+x_2+x_3\end{bmatrix} \tag{e.g.5}$$

2.3 矩阵变元

例6：设 $\boldsymbol{X}_{3\times 2}=(x_{ij})_{i=1,j=1}^{3,2}$

$$\boldsymbol{f}_{3\times 1}(\boldsymbol{X})=\begin{bmatrix} f_1(\boldsymbol{X})\\ f_2(\boldsymbol{X})\\ f_3(\boldsymbol{X})\end{bmatrix}=\begin{bmatrix} x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32}\\ x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32}+x_{11}x_{12}\\ 2x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32}+x_{11}x_{12}\end{bmatrix} \tag{e.g.6}$$

3、function 是一个**矩阵**

我们称 function 是一个**实矩阵函数**。用**粗体**大写字母 $\boldsymbol{F}$ 表示。

含义： $\boldsymbol{F}$ 是由若干个 f 组成的一个**矩阵**。

同样地，变元分三种：**标量、向量、矩阵**。这里的符号仍与上面相同。

3.1 标量变元

例7：

$$\boldsymbol{F}_{3\times2}(x)=\begin{bmatrix} f_{11}(x) & f_{12}(x) \\ f_{21}(x) & f_{22}(x) \\ f_{31}(x) & f_{32}(x) \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} x+1 & 2x+2 \\ x^2+1 & 2x^2+1 \\ x^3+1 & 2x^3+1 \end{bmatrix} \qquad \text{(e.g.7)}$$

3.2 向量变元

例8： 设 $\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,x_3]^T$

$$\boldsymbol{F}_{3\times2}(\boldsymbol{x})=\begin{bmatrix} f_{11}(\boldsymbol{x}) & f_{12}(\boldsymbol{x}) \\ f_{21}(\boldsymbol{x}) & f_{22}(\boldsymbol{x}) \\ f_{31}(\boldsymbol{x}) & f_{32}(\boldsymbol{x}) \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 2x_1+x_2+x_3 & 2x_1+2x_2+x_3 \\ 2x_1+2x_2+x_3 & x_1+2x_2+x_3 \\ 2x_1+x_2+2x_3 & x_1+2x_2+2x_3 \end{bmatrix} \qquad \text{(e.g.8)}$$

3.3 矩阵变元

例9： 设 $\boldsymbol{X}_{3\times2}=(x_{ij})_{i=1,j=1}^{3,2}$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{F}_{3\times2}(\boldsymbol{X})&=\begin{bmatrix} f_{11}(\boldsymbol{X}) & f_{12}(\boldsymbol{X}) \\ f_{21}(\boldsymbol{X}) & f_{22}(\boldsymbol{X}) \\ f_{31}(\boldsymbol{X}) & f_{32}(\boldsymbol{X}) \end{bmatrix} \\ &=\begin{bmatrix} x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32} & 2x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32} \\ 3x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32} & 4x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32} \\ 5x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32} & 6x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32} \end{bmatrix}\end{aligned} \qquad \text{(e.g.9)}$$

4、总结

funtion \ input	标量变元	向量变元	矩阵变元
实值标量函数	$f(x)$	$f(\boldsymbol{x})$	$f(\boldsymbol{X})$
实向量函数	$\boldsymbol{f}(x)$	$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$	$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{X})$
实矩阵函数	$\boldsymbol{F}(x)$	$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$	$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})$

函数与标量、向量、矩阵

二. 矩阵求导的本质

我们在高等数学[2]中学过，对于一个多元函数

例10：

$$f(x_1,x_2,x_3)=x_1^2+x_1x_2+x_2x_3 \qquad \text{(e.g.10)}$$

我们可以将 f 对 x_1,x_2,x_3 的**偏导**分别求出来，**即：**

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} = 2x_1 + x_2 \\ \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} = x_1 + x_3 \\ \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_3} = x_2 \end{cases}$$

矩阵求导也是一样的，**本质就是 function 中的每个 f 分别对变元中的每个元素逐个求偏导，只不过写成了向量、矩阵形式而已。**

对于 $(e.g.10)$ ，我们把得出的3个结果写成**列向量**形式：

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}_{3\times 1}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f}{\partial x_3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1 + x_2 \\ x_1 + x_3 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{1}$$

一个矩阵求导**以列向量形式展开**的雏形就出现了。

当然我们也可以以**行向量形式展开**：

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^T_{3\times 1}} = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \frac{\partial f}{\partial x_3}\right] = [2x_1 + x_2, x_1 + x_3, x_2] \tag{2}$$

所以，如果 function 中有 m 个 f ，变元中有 n 个元素，那么，每个 f 对变元中的每个元素逐个求偏导后，我们就会产生 $m \times n$ 个结果。

这就是矩阵求导的本质。

至于这 $m \times n$ 个结果的布局，是写成行向量，还是写成列向量，还是写成矩阵，就是我们接下来要讨论的事情。

三. 矩阵求导结果的布局

不严谨地说，从**直观**上看：

分子布局，就是分子是**列向量**形式，分母是**行向量**形式，如 (2) 式。如果这里的 function 是**实向量函数** $\boldsymbol{f}_{2\times 1}$ 的话，结果就是 2×3 的矩阵了：

$\begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix}$ 列Vec 行Vec

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

分母布局，就是分母是**列向量**形式，分子是**行向量**形式，如 (1) 式。如果这里的 function 是**实向量函数** $\boldsymbol{f}_{2\times 1}$ 的话，结果就是 3×2 的矩阵了：

$[f_1 \quad f_2]$ 行Vec 列Vec

$$\frac{\partial \boldsymbol{f}^T_{2\times 1}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}_{3\times 1}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_3} & \frac{\partial f_2}{\partial x_3} \end{bmatrix}_{3\times 2} \tag{4}$$

直观上理解了之后，我们针对不同类型的 function ，不同类型的**变元**，给出**严谨**的布局说明。

（这里不讨论标量变元的实值标量函数 $f(x)$ ，因为结果就是一个元素嘛~）

1、向量变元的**实值标量**函数 $f(\boldsymbol{x})$ ，$\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,\cdots,x_n]^T$

1.1 行向量偏导形式（又称**行偏导向量**形式）[3]

$$\mathrm{D}_{\boldsymbol{x}}f(\boldsymbol{x})=\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^T}=\left[\frac{\partial f}{\partial x_1},\frac{\partial f}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_n}\right] \tag{5}$$

行vec

对行vec偏得行vec

对列vec偏得列vec.

1.2 梯度向量形式（又称**列向量偏导**形式、**列偏导向量**形式）[4]

$$\nabla_{\boldsymbol{x}}f(\boldsymbol{x})=\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}=\left[\frac{\partial f}{\partial x_1},\frac{\partial f}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_n}\right]^T \tag{6}$$

列vec

这两种形式**互为转置**。

2、矩阵变元的**实值标量**函数 $f(\boldsymbol{X})$ ，$\boldsymbol{X}_{m\times n}=(x_{ij})_{i=1,j=1}^{m,n}$

先介绍一个符号 $\mathrm{vec}(\boldsymbol{X})$ ，作用是将矩阵 $\boldsymbol{X}$ **按列堆栈**来向量化。

解释一下，$\mathrm{vec}(\boldsymbol{X})$ 就是把矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的第 1 列，第 2 列，直到第 n 列取出来，然后按顺序组成一个**列向量**，即：

$$\mathrm{vec}(\boldsymbol{X})=[\underbrace{x_{11},x_{21},\cdots,x_{m1}}_{\text{col 1}},\underbrace{x_{12},x_{22},\cdots,x_{m2}}_{\text{col 2}},\cdots,\underbrace{x_{1n},x_{2n},\cdots,x_{mn}}_{\text{col 3}}]^T \tag{7}$$

2.1 行向量偏导形式（又称**行偏导向量**形式）[3]

即先把**矩阵**变元 $\boldsymbol{X}$ 按 vec **向量化**，转换成**向量**变元，再对**该向量变元**使用 (5) 式：

$$\begin{aligned}\mathrm{D}_{\mathrm{vec}\boldsymbol{X}}f(\boldsymbol{X})&=\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \mathrm{vec}^T(\boldsymbol{X})}\\&=\left[\frac{\partial f}{\partial x_{11}},\frac{\partial f}{\partial x_{21}},\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_{m1}},\frac{\partial f}{\partial x_{12}},\frac{\partial f}{\partial x_{22}},\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_{m2}},\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_{1n}},\frac{\partial f}{\partial x_{2n}},\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_{mn}}\right]\end{aligned} \tag{8}$$

不经过vec. **2.2 $\mathrm{Jacobian}$ 矩阵**形式[3]

即先把矩阵变元 $\boldsymbol{X}$ 进行**转置**，再对**转置后**的**每个位置**的元素逐个求偏导，结果布局和**转置布局一样**。

$$\begin{aligned}\mathrm{D}_{\boldsymbol{X}}f(\boldsymbol{X})&=\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}_{m\times n}^T}\\&=\begin{bmatrix}\frac{\partial f}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{m1}}\\ \frac{\partial f}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{m2}}\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ \frac{\partial f}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{mn}}\end{bmatrix}_{n\times m}\end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{bmatrix}11 & 12 & 13\\ 21 & & \\ 31 & & \end{bmatrix}^T$$

2.3 梯度向量形式（又称**列向量偏导**形式、**列偏导向量**形式）[4]

即先把**矩阵**变元 $\boldsymbol{X}$ 按 vec **向量化**，转换成**向量**变元，再对**该变元**使用 (6) 式：

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathrm{vec}\boldsymbol{X}}f(\boldsymbol{X})&=\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \mathrm{vec}\boldsymbol{X}}\\&=\left[\frac{\partial f}{\partial x_{11}},\frac{\partial f}{\partial x_{21}},\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_{m1}},\frac{\partial f}{\partial x_{12}},\frac{\partial f}{\partial x_{22}},\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_{m2}},\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_{1n}},\frac{\partial f}{\partial x_{2n}},\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_{mn}}\right]^T\end{aligned} \tag{10}$$

2.4 梯度矩阵形式

直接对原矩阵变元 $\boldsymbol{X}$ 的**每个位置**的元素逐个求偏导，结果布局和**原矩阵布局一样**。

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

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

2.5 一些发现

2.5.1 转置

(8) 式与 (10) 式**互为转置**； (9) 式与 (11) 式**互为转置**。

2.5.2 相等

当**矩阵**变元 $\boldsymbol{X}$ 本身就是一个**列向量** $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \cdots, x_n]^T$ 时， (5) 式、 (8) 式、 (9) 式**相等**； (6) 式、 (10) 式、 (11) 式**相等**；当然，前三个式子与后三个式子**互为转置**。

这一发现说明，对于**向量**变元的**实值标量**函数 $f(\boldsymbol{x})$ ， $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \cdots, x_n]^T$ ，结果布局本质上有两种形式，一种是 Jacobian 矩阵（**已经成行向量了**）形式，一种是**梯度**矩阵（**已经成列向量了**）形式。两种形式**互为转置**。

3、矩阵变元的**实矩阵**函数 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})$ ， $\boldsymbol{X}_{m\times n} = (x_{ij})_{i=1,j=1}^{m,n}$ ， $\boldsymbol{F}_{p\times q} = (f_{ij})_{i=1,j=1}^{p,q}$

3.1 Jacobian 矩阵形式[5]

即先把**矩阵**变元 $\boldsymbol{X}$ 按 vec **向量化**，转换成**向量**变元：

$$\text{vec}(\boldsymbol{X}) = [x_{11}, x_{21}, \cdots, x_{m1}, x_{12}, x_{22}, \cdots, x_{m2}, \cdots, x_{1n}, x_{2n}, \cdots, x_{mn}]^T \tag{7}$$

再把**实矩阵**函数 $\boldsymbol{F}$ 按 vec **向量化**，转换成**实向量**函数：

$$\begin{aligned} &\text{vec}(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})) \\ &= [f_{11}(\boldsymbol{X}), f_{21}(\boldsymbol{X}), \cdots, f_{p1}(\boldsymbol{X}), f_{12}(\boldsymbol{X}), f_{22}(\boldsymbol{X}), \cdots, f_{p2}(\boldsymbol{X}), \cdots, f_{1q}(\boldsymbol{X}), f_{2q}(\boldsymbol{X}), \cdots, f_{pq}(\boldsymbol{X})]^T \end{aligned} \tag{12}$$

这样，我们就把一个**矩阵**变元的**实矩阵**函数 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})$ ，转换成了**向量**变元的**实向量**函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ 。接着，对照 (3) 式写出结果布局为 $pq \times mn$ 的矩阵：

$$
\mathrm{D}_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})=\frac{\partial \mathrm{vec}_{pq\times 1}(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X}))}{\partial \mathrm{vec}^T_{mn\times 1}\boldsymbol{X}}
$$

$$
=\begin{bmatrix}
\frac{\partial f_{11}}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f_{11}}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f_{11}}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f_{11}}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f_{11}}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f_{11}}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f_{11}}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f_{11}}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f_{11}}{\partial x_{mn}} \\
\frac{\partial f_{21}}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{mn}} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{mn}} \\
\frac{\partial f_{12}}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{mn}} \\
\frac{\partial f_{22}}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{mn}} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{mn}} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{mn}} \\
\frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{mn}} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{mn}}
\end{bmatrix}_{pq\times mn} \tag{13}
$$

3.2 梯度矩阵形式[6]

即先把**矩阵**变元 $\boldsymbol{X}$ 按 vec **向量化**，转换成**向量**变元：

$$
\mathrm{vec}(\boldsymbol{X})=[x_{11},x_{21},\cdots,x_{m1},x_{12},x_{22},\cdots,x_{m2},\cdots,x_{1n},x_{2n},\cdots,x_{mn}]^T \tag{7}
$$

再把**实矩阵**函数 $\boldsymbol{F}$ 按 vec **向量化**，转换成**实向量**函数：

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{vec}(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})) \\
&=[f_{11}(\boldsymbol{X}),f_{21}(\boldsymbol{X}),\cdots,f_{p1}(\boldsymbol{X}),f_{12}(\boldsymbol{X}),f_{22}(\boldsymbol{X}),\cdots,f_{p2}(\boldsymbol{X}),\cdots,f_{1q}(\boldsymbol{X}),f_{2q}(\boldsymbol{X}),\cdots,f_{pq}(\boldsymbol{X})]^T
\end{aligned} \tag{12}
$$

这样，我们就把一个**矩阵**变元的**实矩阵**函数 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})$ ，转换成了**向量**变元的**实向量**函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ 。接着，对照 (4) 式写出结果布局为 $mn\times pq$ 的矩阵：

$$
\nabla_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})=\frac{\partial \mathrm{vec}^T_{pq\times 1}(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X}))}{\partial \mathrm{vec}_{mn\times 1}\boldsymbol{X}}
$$

$$
=\begin{bmatrix}
\frac{\partial f_{11}}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{11}} & \cdots & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{11}} & \cdots & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{11}} & \cdots & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{11}} & \cdots & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{11}} \\
\frac{\partial f_{11}}{\partial x_{21}} & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{21}} & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{21}} & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{21}} & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{21}} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial f_{11}}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{m1}} & \cdots & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{m1}} & \cdots & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{m1}} & \cdots & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{m1}} & \cdots & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{m1}} \\
\frac{\partial f_{11}}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{12}} & \cdots & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{12}} & \cdots & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{12}} & \cdots & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{12}} & \cdots & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{12}} \\
\frac{\partial f_{11}}{\partial x_{22}} & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{22}} & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{22}} & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{22}} & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{22}} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial f_{11}}{\partial x_{m2}} & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{m2}} & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{m2}} & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{m2}} & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{m2}} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial f_{11}}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{1n}} & \cdots & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{1n}} & \cdots & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{1n}} & \cdots & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{1n}} & \cdots & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{1n}} \\
\frac{\partial f_{11}}{\partial x_{2n}} & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{2n}} & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{2n}} & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{2n}} & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{2n}} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial f_{11}}{\partial x_{mn}} & \frac{\partial f_{21}}{\partial x_{mn}} & \cdots & \frac{\partial f_{p1}}{\partial x_{mn}} & \frac{\partial f_{12}}{\partial x_{mn}} & \frac{\partial f_{22}}{\partial x_{mn}} & \cdots & \frac{\partial f_{p2}}{\partial x_{mn}} & \cdots & \frac{\partial f_{1q}}{\partial x_{mn}} & \frac{\partial f_{2q}}{\partial x_{mn}} & \cdots & \frac{\partial f_{pq}}{\partial x_{mn}}
\end{bmatrix}_{mn\times pq} \tag{14}
$$

3.3 一些发现

3.3.1 转置

(13) 式与 (14) 式**互为转置**。

当**实矩阵**函数 $\boldsymbol{F}$ 本身是一个**实值标量**函数 f 时，(8) 式、(13) 式**相等**；(10) 式、(14) 式**相等**；当然，前两个式子与后两个式子**互为转置**。

这一发现说明，对于**矩阵**变元的**实值标量**函数 $f(\boldsymbol{X})$ ，$\boldsymbol{X}_{m\times n}=(x_{ij})_{i=1,j=1}^{m,n}$ ，结果布局本质上有四种形式，第一种是 Jacobian 矩阵（**已经成行向量了**）形式，第二种是**梯度**矩阵（**已经成列向量了**）形式，第三种是 Jacobian 矩阵（**就是矩阵**）形式，第四种是**梯度**矩阵（**就是矩阵**）形式。第一种和第二种形式**互为转置**，第三种和第四种形式**互为转置**。

3.3.3 相等2

当**矩阵**变元 $\boldsymbol{X}$ 本身就是一个**列向量** $\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,\cdots,x_n]^T$ 时，同时**实矩阵**函数 $\boldsymbol{F}$ 本身是一个**实值标量**函数 f 时，(5) 式、(8) 式、(9) 式、(13) 式**相等**；(6) 式、(10) 式、(11) 式、(14) 式**相等**；当然，前四个式子与后四个式子**互为转置**。

这一发现仍说明，对于**向量**变元的**实值标量**函数 $f(\boldsymbol{x})$ ，$\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,\cdots,x_n]^T$ ，结果布局本质上有两种形式，一种是 Jacobian 矩阵（**已经成行向量了**）形式，一种是**梯度**矩阵（**已经成列向量了**）形式。两种形式**互为转置**。

4、矩阵变元的**实向量**函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{X})$ 、**向量**变元的**实向量**函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ 、**向量**变元的**实矩阵**函数 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$

这三个都可以看做是**矩阵**变元的**实矩阵**函数 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})$ ，可使用**3、**进行计算（因为向量就是一种特殊的矩阵）。

四. 分子布局、分母布局的本质

看到这里，相信同学们对矩阵求导结果的布局有了很全面的了解了，无非就是**分子的转置、向量化**，**分母的转置、向量化**，它们的**各种组合**而已。

结合上述知识，我们总结：

列对行向

1、分子布局的本质：分子是**标量**、**列向量**、矩阵向量化后的**列向量**；分母是**标量**、列向量**转置**后的**行向量**、矩阵的**转置矩阵**、矩阵向量化后的列向量**转置**后的**行向量**。包含 (5) 式、(8) 式、(9) 式、(13) 式。

行对列向

2、分母布局的本质：分子是**标量**、列向量**转置**后的**行向量**、矩阵向量化后的列向量**转置**后的**行向量**；分母是**标量**、**列向量**、**矩阵自己**、矩阵向量化后的**列向量**。包含 (6) 式、(10) 式、(11) 式、(14) 式。

思考一下，其实我们可以再简洁一些：**谁转置了，就是另一方的布局**。分子转置了，就是分母布局；分母转置了，就是分子布局。

向量求导 or Vec(矩阵)
分子布局：列除行
分母布局：行除列。
矩阵求导 粗用vec · T
标友 · 不T.

最终，我们列一个表格，总结分子布局、分子布局的本质：

分子\分母	标量	列向量	行向量	矩阵自己	矩阵转置
标量	不讨论	*分母布局* (6)式、(10)式	**分子布局** (5)式、(8)式	*分母布局* (11)式	**分子布局** (9)式
列向量	**分子布局** (13)式	无	**分子布局** (13)式	无	无
行向量	*分母布局* (14)式	*分母布局* (14)式	无	无	无

分子布局、分母布局的本质

五. 完

本文到这里就结束了，希望对大家有帮助。如果有时间的话，后面我会再发一篇文章，来进行**若干**

一条有爱的分割线

矩阵求导系列其他文章:

对称矩阵的求导，以多元正态分布的极大似然估计为例（矩阵求导——补充篇） - Iterator的文章 - 知乎

矩阵求导公式的数学推导（矩阵求导——进阶篇） - Iterator的文章 - 知乎

矩阵求导公式的数学推导（矩阵求导——基础篇） - Iterator的文章 - 知乎

参考

1. ^ 张贤达《矩阵分析与应用（第二版）》P143
2. ^ 《高等数学 同济大学第七版 下册》P66
3. ^ a b c 张贤达《矩阵分析与应用（第二版）》P144
4. ^ a b c 张贤达《矩阵分析与应用（第二版）》P146
5. ^ 张贤达《矩阵分析与应用（第二版）》P145
6. ^ 张贤达《矩阵分析与应用（第二版）》P147

编辑于 2020-11-24 10:27

机器学习 线性代数 矩阵分析

文章被以下专栏收录

Iterator的专栏「工科数学」
工科数学的知识

机器学习优质资料汇总
机器学习领域知乎、CSDN上的一些优质回答汇总

论文阅读

67 条评论

切换为时间排序

写下你的评论...

精选评论（3）

Iterator (作者) 回复 陈潜龙 2021-10-27

z3.ax1x.com/2021/10/27/...
z3.ax1x.com/2021/10/27/...

4 查看回复

Iterator (作者) 2021-09-30

知乎的公式渲染好像经常崩溃，有一些比较长的公式会显示不出来，大家可以按照评论区置顶的方法，拿到latex代码后，用typora或者其他支持mathjax的markdown编辑器查看。

1 查看回复

Iterator (作者) 2021-01-12

【如何查看latex代码】

右击公式，选择在新标签页中打开，然后复制url中的/equation?tex= 后面一堆的代码，然后去UrlEncode编码/UrlDecode解码 - 站长工具 这个地方选择UrlDecode，就可以看到latex代码了。（如果代码比较长可以按住shift + end可以直接拖到末尾）例如 zhihu.com/equation?...

复制的内容为： f%28x%29%3Dx%2B2+%5C%5C%5C%5C+%5Ctag%7Be.g.1%7D

6

评论（67）

寂静路灯 2020-12-01

唉，答主不行啊，早发几个月我就不用找各种资料了

18

Iterator (作者) 回复 寂静路灯 2020-12-01

哈哈哈哈，我的四十米大刀差点没收回来

27

没有鱼丸木有粗面 回复 Iterator (作者) 2021-07-19

+1都怪答主不早点发hhh

赞

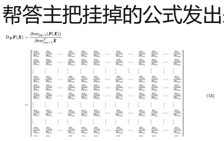
风行 2020-11-16

文本编辑都要还花很多时间，讲的也很清楚。多谢

7

陈潜龙 2021-10-27

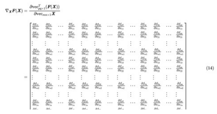
帮答主把挂掉的公式发出来，感谢答主辛苦付出



4

陈潜龙 2021-10-27

帮答主把挂掉的第二个公式发出来，感谢答主辛苦付出，只为提高阅读体验。之前按答主的方法试了一下，只得到了latex，实在太折腾了



3

Micro 2020-11-01

挺好的，不管什么布局，只要自洽就行

2

任乾 2021-11-29

太 tmd 清晰了

1

笑看人生 2020-11-27

谢谢大佬，计量矩阵推导不用怕了

2

不懂 2020-11-19

进阶篇的公式在手机上能显示，但是这个和基础篇显示不出来。。。

2

Iterator (作者) 回复 不懂 2020-11-19

可以呀，我手机web和App都可以显示的，可能是网速的问题?

赞

ohanlon 2021-11-19

万分感谢！请答主收下我的膝盖

赞

晨风 2021-10-12

大佬再接再厉!

赞

Alston 2021-09-30

写的太好了

赞

遥远深空 2021-09-27

谢谢作者，本来在翻压箱底的矩阵分析课本，搜了一下清晰不少。

赞

Eric 2021-09-12

写的挺好，不过最后“分子转置了，就是分母布局；分母转置了，就是分子布局。”和上文的公式矛盾了。。。

赞

zhangxinyan123 2021-09-02

好

赞

SunnyLemon 2021-08-26

爱了，支持!

赞

Joy 2021-08-19

111

▲ 赞同 1623 ▼ 67 条评论 分享 喜欢 收藏 申请转载 ···

vvggyy7531 2021-07-18

网上关于矩阵求导的资料特别乱，也不是说他们讲的是错的，就是不清晰。特别感谢作者，写的特别好，看懂了，省了不少时间~

赞