

矩阵论

2024年秋季学期

第七讲

2024年9月30日

第3章 矩阵微分

第4章 梯度分析与最优化

一阶实矩阵微分：Jacobian矩阵辨识

标量函数的Jacobian矩阵辨识

$$df(\mathbf{x}) = \text{tr}(\mathbf{A}d\mathbf{x}) \quad \longleftrightarrow \quad D_{\mathbf{x}}f(\mathbf{x}) = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}^T} = \mathbf{A}$$

$$df(\mathbf{X}) = \text{tr}(\mathbf{A}d\mathbf{X}) \quad \longleftrightarrow \quad D_{\mathbf{X}}f(\mathbf{X}) = \frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}^T} = \mathbf{A}$$

$$D_{\mathbf{X}}f(\mathbf{X}) = \frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}^T} = \mathbf{A} \quad \longleftrightarrow \quad \nabla_{\mathbf{X}}f(\mathbf{X}) = \mathbf{A}^T$$

习题1：利用矩阵微分证明二次型函数 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ 变元向量 \mathbf{x} 的梯度向量

$$\nabla_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}) = (\mathbf{A}^T + \mathbf{A}) \mathbf{x}$$

习题2：利用Jacobian矩阵辨识，求包含逆矩阵的迹函数 $\text{tr}(\mathbf{A} \mathbf{X}^{-1})$ 的梯度矩阵

一阶实矩阵微分：Jacobian矩阵辨识

示例 已知 $\frac{\partial f}{\partial Y}$ 和 $Y = AXB$, 求 $\frac{\partial f}{\partial X}$?

解 $df = \text{tr} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial Y} \right)^T dY \right] = \text{tr} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial Y} \right)^T A dX B \right] = \text{tr} \left[B \left(\frac{\partial f}{\partial Y} \right)^T A dX \right]$

$$= \text{tr} \left[\left(A^T \frac{\partial f}{\partial Y} B^T \right)^T dX \right],$$


迹的性质：交换顺序

$$\text{得 } \frac{\partial f}{\partial X} = A^T \frac{\partial f}{\partial Y} B^T.$$

一阶实矩阵微分：Jacobian矩阵辨识

示例 已知 $f = \mathbf{a}^T \mathbf{X} \mathbf{b}$, 求 $\frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}}$?

解 $df = d\mathbf{a}^T \mathbf{X} \mathbf{b} + \mathbf{a}^T d\mathbf{X} \mathbf{b} + \mathbf{a}^T \mathbf{X} d\mathbf{b} = \text{tr}[\mathbf{a}^T d\mathbf{X} \mathbf{b}]$


$$0 = \text{tr}[\mathbf{b} \mathbf{a}^T d\mathbf{X}] = \text{tr}[(\mathbf{a} \mathbf{b}^T)^T d\mathbf{X}]$$

得 $\frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{a} \mathbf{b}^T$ 。

笔记 上述两个例子反复应用了 $\text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{B}) = \text{tr}(\mathbf{B}\mathbf{A})$
($\mathbf{A}\mathbf{B}$ 和 $\mathbf{B}\mathbf{A}$ 特征值相同)。

一阶实矩阵微分：Jacobian矩阵辨识

示例 已知 $f = \text{tr}[X^T S X]$, 求 $\frac{\partial f}{\partial X}$?

解 $df = \text{tr}[d(X^T) S X] + \text{tr}[X^T S dX] = \text{tr}[(dX)^T S X] + \text{tr}[X^T S dX]$
 $= \text{tr}[(S X)^T dX] + \text{tr}[X^T S dX] = \text{tr}[2(S X)^T dX]$, 得 $\frac{\partial f}{\partial X} = 2 S X$ 。

示例 已知 $f = \|Ax - b\|_2^2$ (实数域) , 求 $\frac{\partial f}{\partial X}$?

解 $df = d[(Ax - b)^T (Ax - b)] = d(Ax)^T (Ax - b) + (Ax - b)^T A dx$
 $= (Ax - b)^T A dx + (Ax - b)^T A dx = \text{tr} [2(A^T Ax - A^T b)^T dX]$,
得 $\frac{\partial f}{\partial X} = 2A^T Ax - 2A^T b$ 。

Hessian矩阵

定义 假设有一实值函数 $f(x_1, \dots, x_n)$ ，如果 f 的所有二阶偏导数都存在并在定义域内连续，那么函数 f 的**海森矩阵** (Hessian matrix) 为

$$H[f(\mathbf{x})] = \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}^T} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left[\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}^T} \right] \in \mathbb{R}^{m \times m}$$

显然海森矩阵是一个对称矩阵

$$H[f(\mathbf{x})] = \nabla_x^2 f(\mathbf{x}) = \nabla_x (D_x f(\mathbf{x})) \quad [Hf(\mathbf{x})]_{i,j} = \left[\frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}^T} \right]_{i,j} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_j} \right]$$

$$H[f(\mathbf{x})] = \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}^T} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_m \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_m \partial x_m} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times m}$$

示例 $f = x^2 - y^2$, $H_f = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$ 。

共轭梯度

实解析函数：对于实变量域内都是实解析的，但对于复变量不一定是复解析（**全纯**）的。

复解析在现代数学中常用“全纯”代替，复解析函数常称为全纯函数**。**

令复变函数 $f(z)$ 可以用实部 $u(x, y)$ 和虚部 $v(x, y)$ 写作

$$f(z) = u(x, y) + jv(x, y)$$

式中 $z = x + jy$, 并且 $u(x, y)$ 和 $v(x, y)$ 分别是实值函数。

如果 $f(z)$ 在某区域内满足柯西-黎曼方程:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}$$

那么 $f(z)$ 在该区域内解析 (Analytic), 即 $f(z)$ 在该区域内可微。

共轭梯度

形式偏导定义(在复变函数论中，形式偏导 (Formal Partial Derivatives) 的概念需要特别注意，因为复变函数的性质和实变函数的性质有显著不同。)

共轭梯度算子 $\nabla_{z^*} = \frac{\partial}{\partial z^*} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} + j \frac{\partial}{\partial y} \right)$ 利用柯西黎曼条件

梯度算子 $\nabla_z = \frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} - j \frac{\partial}{\partial y} \right)$

共轭梯度

实部与虚部的独立性假设

$$\frac{\partial x}{\partial y} = 0 \quad \text{和} \quad \frac{\partial y}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial z}{\partial z^*} = \frac{\partial x}{\partial z^*} + j \frac{\partial y}{\partial z^*} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial x}{\partial x} + j \frac{\partial x}{\partial y} \right) + j \frac{1}{2} \left(\frac{\partial y}{\partial x} + j \frac{\partial y}{\partial y} \right) = \frac{1}{2} (1 + 0) + j \frac{1}{2} (0 + j)$$

$$\frac{\partial z^*}{\partial z} = \frac{\partial x}{\partial z} - j \frac{\partial y}{\partial z} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial x}{\partial x} - j \frac{\partial x}{\partial y} \right) - j \frac{1}{2} \left(\frac{\partial y}{\partial x} - j \frac{\partial y}{\partial y} \right) = \frac{1}{2} (1 - 0) - j \frac{1}{2} (0 - j)$$



$$\frac{\partial z}{\partial z^*} = 0 \quad \frac{\partial z^*}{\partial z} = 0$$

z 和 z^* 是两个相互独立的变量

共轭梯度

任何一个非全纯的复变函数 $f(z)$ 写成 $f(z, z^*)$ 后, 都变成了全纯函数

单个复变量的梯度

$$\nabla_z f(z, z^*) = \left. \frac{\partial f(z, z^*)}{\partial z} \right|_{z^* = \text{常数}}, \quad \nabla_{z^*} f(z, z^*) = \left. \frac{\partial f(z, z^*)}{\partial z^*} \right|_{z = \text{常数}}$$

单个复变量的微分

$$df(z, z^*) = \frac{\partial f(z, z^*)}{\partial z} dz + \frac{\partial f(z, z^*)}{\partial z^*} dz^*$$

共轭梯度

标量函数的梯度向量和共轭梯度向量

$$\nabla_z f(z, z^*) = \left. \frac{\partial f(z, z^*)}{\partial z} \right|_{z^* = \text{常数向量}} = \left(D_z f(z, z^*) \right)^T$$

$$\nabla_{z^*} f(z, z^*) = \left. \frac{\partial f(z, z^*)}{\partial z^*} \right|_{z = \text{常数向量}} = \left(D_{z^*} f(z, z^*) \right)^T$$

其中梯度算子

$$\nabla_z = \frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} - j \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

共轭梯度算子

$$\nabla_{z^*} = \frac{\partial}{\partial z^*} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} + j \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

共轭梯度

复变元向量的微分

$$df(z, z^*) = \begin{bmatrix} \frac{f(z, z^*)}{\partial z_1} & \dots & \frac{f(z, z^*)}{\partial z_m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dz_1 \\ \vdots \\ dz_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{f(z, z^*)}{\partial z_1^*} & \dots & \frac{f(z, z^*)}{\partial z_m^*} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dz_1^* \\ \vdots \\ dz_m^* \end{bmatrix}$$

$$= \frac{\partial f(z, z^*)}{\partial \mathbf{z}^T} d\mathbf{z} + \frac{\partial f(z, z^*)}{\partial \mathbf{z}^H} d\mathbf{z}^*$$

\mathbf{z} 和 \mathbf{z}^* 是两个相互独立的向量

$$\frac{\partial \mathbf{z}^T}{\partial \mathbf{z}} = \frac{\partial \mathbf{x}^T}{\partial \mathbf{z}} + j \frac{\partial \mathbf{y}^T}{\partial \mathbf{z}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{x}^T}{\partial \mathbf{x}} - j \frac{\partial \mathbf{x}^T}{\partial \mathbf{y}} \right) + j \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{y}^T}{\partial \mathbf{x}} - j \frac{\partial \mathbf{y}^T}{\partial \mathbf{y}} \right) = \mathbf{I}_{m \times m}$$

$$\frac{\partial \mathbf{z}^T}{\partial \mathbf{z}^*} = \frac{\partial \mathbf{x}^T}{\partial \mathbf{z}^*} + j \frac{\partial \mathbf{y}^T}{\partial \mathbf{z}^*} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{x}^T}{\partial \mathbf{x}} + j \frac{\partial \mathbf{x}^T}{\partial \mathbf{y}} \right) + j \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{y}^T}{\partial \mathbf{x}} + j \frac{\partial \mathbf{y}^T}{\partial \mathbf{y}} \right) = \mathbf{O}_{m \times m}$$

第四章：梯度分析与最优化

最优化：极大值或极小值

主要讨论：

- 极值存在的条件（梯度分析）
- 优化算法

典型的优化问题

$\min_{x \in \mathcal{D}} f(x)$ n 维实数空间上的实值函数，逼近原始目标的简化目标函数

无约束优化问题的解决方法涉及计算目标函数的梯度或导数，并使用数值优化算法来找到梯度为零的点或局部最小值/最大值。常见的无约束优化算法包括梯度下降法、牛顿法、拟牛顿法等。

- 梯度下降法：一种迭代方法，每一步沿目标函数梯度的负方向更新变量，直到收敛。
- 牛顿法：利用目标函数的一阶和二阶导数信息来加速寻找最优点，特别适用于二次可微函数。
- 拟牛顿法：牛顿法的变种，不直接计算海森矩阵，而是通过近似来求解，减少了计算量

单变量函数

一个简单的例子是求解二次函数的最小值: $\min f(x) = ax^2 + bx + c$

其中 a, b, c 是常数, 而 x 是变量。通过求解 $f'(x) = 0$, 可以找到最小值点的 x 值。

函数 $f(x)$ 有最小值的条件是什么?

单变量函数

单变量函数的平稳点与极值点

- 全局极小点 $f(x^*) \leq f(x), \quad \forall x \in \mathcal{D}, x \neq x^*$
- 严格全局极小点 $f(x^*) < f(x), \quad \forall x \in \mathcal{D}$
- (开) 邻域 $B_o(c; r) = \{x \mid x \in \mathcal{D}, |x - c| < r\}$ ← 正数
- 闭邻域 $B_c(c; r) = \{x \mid x \in \mathcal{D}, |x - c| \leq r\}$

单变量函数

单变量函数的平稳点与极值点

点 c 称为函数 $f(x)$ 的一个局部极小 (或极大) 点, 若

$$f(c) \leq f(c + \Delta x) \quad \text{或} \quad f(c) \geq f(c + \Delta x)$$

$f(c)$: 极小值 (或极大值)

对满足 $0 < |\Delta x| \leq r$ 的所有 Δx 均成立。

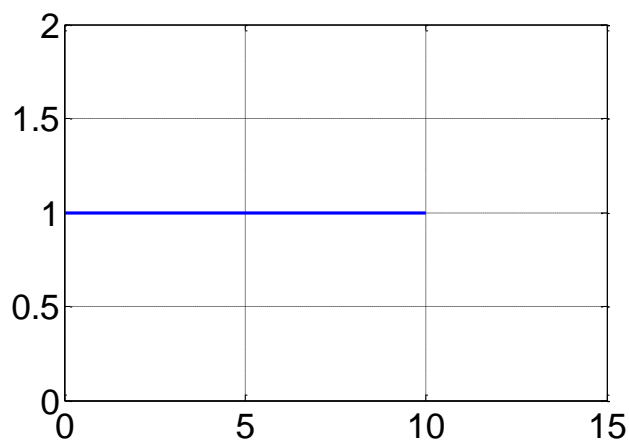
点 c 称为函数 $f(x)$ 的一个严格局部极小点, 若

$$f(c) < f(c + \Delta x)$$

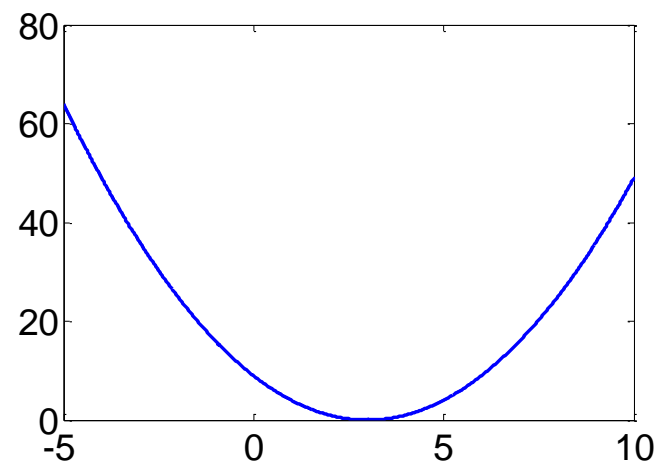
对满足 $0 < |\Delta x| \leq r$ 的所有 Δx 均成立。

单变量函数

单变量函数的平稳点与极值点



(弱) 局部极小点



严格局部极小点

单变量函数

单变量函数的平稳点与极值点

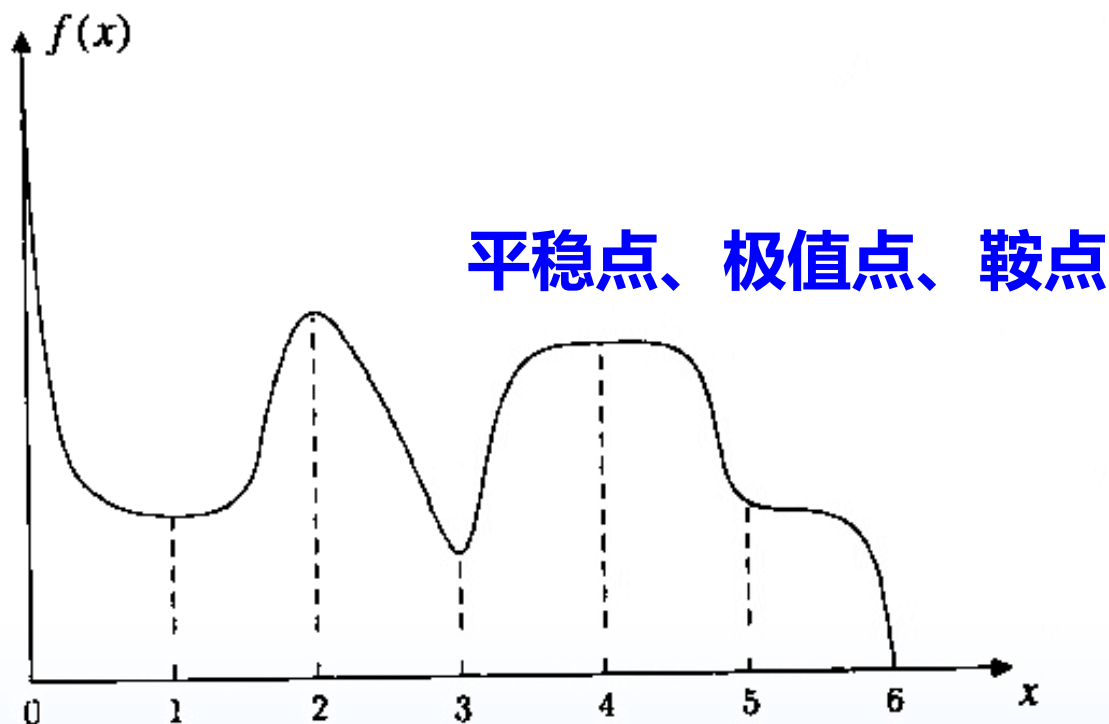


图 4.1.1 单变量函数的平稳点与极值点

如何寻找极值点?

单变量函数

单变量函数的平稳点与极值点

平稳点: $f'(c) = 0$

- 平稳点是函数图像上的一个点, 在该点处, 函数的导数为零。直观上, 这意味着函数在这一点处的切线是水平的。
- 平稳点是函数局部极值可能出现的地方, 但不是所有平稳点都是极值点。

局部极小点:

$$f'(c) = 0 \quad f''(c) = \left. \frac{d^2 f(x)}{dx^2} \right|_{x=c} \geq 0$$

局部极大点:

$$f'(c) = 0 \quad f''(c) = \left. \frac{d^2 f(x)}{dx^2} \right|_{x=c} \leq 0$$

鞍点 (saddle point) : $f'(c) = 0$

$$f''(c + \Delta x) \leq 0 \quad f''(c + \Delta x) \geq 0$$

多变量函数

多变量函数的平稳点与极值点

多变量函数无约束极小化问题

$$\min_{\mathbf{x} \in S} f(\mathbf{x}) \quad f(\mathbf{x}): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$$

邻域

$$B(\mathbf{c}; r) = \{ \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \|\mathbf{x} - \mathbf{c}\|_2 < r \}$$

闭合邻域

$$B(\mathbf{c}; r) = \{ \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \|\mathbf{x} - \mathbf{c}\|_2 \leq r \}$$

多变量函数

多变量函数的平稳点与极值点

二阶泰勒级数逼近

$$\begin{aligned} f(\mathbf{c} + \Delta \mathbf{x}) &= f(\mathbf{c}) + \left(\frac{\partial f(\mathbf{c})}{\partial \mathbf{c}} \right)^T \Delta \mathbf{x} + \frac{1}{2} (\Delta \mathbf{x})^T \cdot \frac{\partial^2 f(\mathbf{c})}{\partial \mathbf{c} \partial \mathbf{c}^T} \Delta \mathbf{x} \\ &= f(\mathbf{c}) + (\nabla f(\mathbf{c}))^T \Delta \mathbf{x} + \frac{1}{2} (\Delta \mathbf{x})^T \mathbf{H}(f(\mathbf{c})) \Delta \mathbf{x} \end{aligned}$$

梯度向量

$$\nabla f(\mathbf{c}) = \frac{\partial f(\mathbf{c})}{\partial \mathbf{c}} = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{c}}$$

Hessian矩阵

$$\mathbf{H}(f(\mathbf{c})) = \frac{\partial^2 f(\mathbf{c})}{\partial \mathbf{c} \partial \mathbf{c}^T} = \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}^T} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{c}}$$

多变量函数

多变量函数的平稳点与极值点

$$f(c) \leq f(c + \Delta x) \quad \forall 0 < \|\Delta x\|_2 \leq r$$

局部极小

$$H(f(c)) = \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x \partial x^T} \bigg|_{x=c} \succeq 0$$

局部极小

$$f(c) < f(c + \Delta x) \quad \forall 0 < \|\Delta x\|_2 \leq r$$

严格局部极小

$$f(c) \leq f(x) \quad \forall x \in S$$

全局极小

$$f(c) < f(x) \quad \forall x \in S, x \neq c$$

严格全局极小

多变量函数

多变量函数 $f(\mathbf{X})$ 的平稳点与极值点

邻域

$$B(\mathbf{C}; r) = \left\{ \mathbf{X} \mid \mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \|\text{vec}(\mathbf{X}) - \text{vec}(\mathbf{C})\|_2 < r \right\}$$

二阶泰勒级数逼近

$$\begin{aligned} f(\mathbf{C} + \Delta \mathbf{X}) &= f(\mathbf{C}) + \left(\frac{\partial f(\mathbf{C})}{\partial \text{vec}(\mathbf{C})} \right)^T \text{vec}(\Delta \mathbf{X}) + \frac{1}{2} (\text{vec}(\Delta \mathbf{X}))^T \frac{\partial^2 f(\mathbf{C})}{\partial \text{vec}(\mathbf{C}) \partial (\text{vec} \mathbf{C})^T} \text{vec}(\Delta \mathbf{X}) \\ &= f(\mathbf{C}) + (\nabla_{\text{vec} \mathbf{C}} f(\mathbf{C}))^T \text{vec}(\Delta \mathbf{X}) + \frac{1}{2} (\text{vec}(\Delta \mathbf{X}))^T \mathbf{H}(f(\mathbf{C})) \text{vec}(\Delta \mathbf{X}) \end{aligned}$$

$$\nabla_{\text{vec} \mathbf{C}} f(\mathbf{C}) = \left. \frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial \text{vec}(\mathbf{X})} \right|_{\mathbf{X}=\mathbf{C}} \in \mathbb{R}^{mn} \quad \mathbf{H}(f(\mathbf{C})) = \left. \frac{\partial^2 f(\mathbf{X})}{\partial \text{vec}(\mathbf{X}) \partial (\text{vec} \mathbf{X})^T} \right|_{\mathbf{X}=\mathbf{C}} \in \mathbb{R}^{mn \times mn}$$

总结

表 4.1.1 实变函数的平稳点和极值点的条件

实变函数	$f(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$	$f(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$	$f(\mathbf{X}) : \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}$
平稳点	$\left. \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right _{x=c} = 0$	$\left. \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \right _{\mathbf{x}=\mathbf{c}} = 0$	$\left. \frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} \right _{\mathbf{X}=\mathbf{C}} = \mathbf{O}_{m \times n}$
局部极小点	$\left. \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x \partial x} \right _{x=c} \geq 0$	$\left. \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}^T} \right _{\mathbf{x}=\mathbf{c}} \succeq 0$	$\left. \frac{\partial^2 f(\mathbf{X})}{\partial \text{vec}(\mathbf{X}) \partial (\text{vec} \mathbf{X})^T} \right _{\mathbf{X}=\mathbf{C}} \succeq 0$
严格局部极小点	$\left. \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x \partial x} \right _{x=c} > 0$	$\left. \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}^T} \right _{\mathbf{x}=\mathbf{c}} \succ 0$	$\left. \frac{\partial^2 f(\mathbf{X})}{\partial \text{vec}(\mathbf{X}) \partial (\text{vec} \mathbf{X})^T} \right _{\mathbf{X}=\mathbf{C}} \succ 0$
局部极大点	$\left. \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x \partial x} \right _{x=c} \leq 0$	$\left. \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}^T} \right _{\mathbf{x}=\mathbf{c}} \preceq 0$	$\left. \frac{\partial^2 f(\mathbf{X})}{\partial \text{vec}(\mathbf{X}) \partial (\text{vec} \mathbf{X})^T} \right _{\mathbf{X}=\mathbf{C}} \preceq 0$
严格局部极大点	$\left. \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x \partial x} \right _{x=c} < 0$	$\left. \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}^T} \right _{\mathbf{x}=\mathbf{c}} \prec 0$	$\left. \frac{\partial^2 f(\mathbf{X})}{\partial \text{vec}(\mathbf{X}) \partial (\text{vec} \mathbf{X})^T} \right _{\mathbf{X}=\mathbf{C}} \prec 0$
鞍点	$\left. \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x \partial x} \right _{x=c}$ 不定	$\left. \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}^T} \right _{\mathbf{x}=\mathbf{c}}$ 不定	$\left. \frac{\partial^2 f(\mathbf{X})}{\partial \text{vec}(\mathbf{X}) \partial (\text{vec} \mathbf{X})^T} \right _{\mathbf{X}=\mathbf{C}}$ 不定

4.1.4 一阶必要条件, 二阶必要条件, 二阶充分条件

第三章习题

见学在浙大
作业版块
Homework2

10.13 交