矩阵理论的应用

矩阵函数·主成分分析·奇异值分解·因果发现

Jingbo Xia

2026 秋——人工智能 2401/2402

目录

1. 矩阵函数 4
2. 主成分分析 81
3. 奇异值分解 106
4. 矩阵函数与因果发现算法模型 157

开宗明义

- 对矩阵的操作必要性在于数据本身的矩阵存储形式。
- 很多建模问题的第一步，是把损失或目标写成以矩阵、向量为自变量的标量函数。
- PCA 是对存储在矩阵中的数据进行操作。我们介绍它的两个应用——第一是数据的降维，第二是数据的重构。
- SVD 是一个知名的矩阵分解算法，其自然应用可衍生到推荐系统，也可以是 NLP 领域的潜在语义分析。
- 这个教学材料中包括一个图片处理的示例，它能帮助同学们较为生动地理解 PCA 算法中的“维”。
- 最后，为什么要把 SVD 和 PCA 放在一起讲授呢？难道仅仅因为它们都同时是在对矩阵类型的数据进行算法处理吗？

1. Outline

1. 矩阵函数 4
   - 矩阵函数、梯度、方向导数 5
   - 常见的矩阵函数 51
   - 凸函数 * 59
   - 凸优化 * 72
2. 主成分分析 81
   - 问题 82
   - 记号与模型 86
   - 主成分的可视化示例 98
3. 奇异值分解 106
   - 理论准备 107
   - 习题演算 126
   - 矩阵分解的应用：推荐系统和潜在语义分析 136
   - 图像压缩 143
4. 矩阵函数与因果发现算法模型 157
   - 理论准备 158
   - 问题 162
   - 记号定义 164
   - 模型建立 166
   - 模型求解 170
   - 小结 173

1 矩阵函数 4
- 矩阵函数、梯度、方向导数 5
- 常见的矩阵函数 51
- 凸函数 * 59
- 凸优化 * 72

2 主成分分析 81
- 问题 82
- 记号与模型 86
- 主成分的可视化示例 98

3 奇异值分解 106
- 理论准备 107
- 习题演算 126
- 矩阵分解的应用：推荐系统和潜在语义分析 136
- 图像压缩 143

4 矩阵函数与因果发现算法模型 157
- 理论准备 158
- 问题 162
- 记号定义 164
- 模型建立 166
- 模型求解 170
- 小结 173

算法建模中，我们常关心一系列标量指标——误差、损失、方差、能量。考虑数据 input 和参数的维度，这个标量指标函数的自变量往往不是数 (Scalar value)，而是向量 **(Vector)** 或矩阵 **(Matrix)**：

$$f = f(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{v}), \qquad \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}, \quad \boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^{n}.$$

这里 $f(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{v})$ 是一种简写：它表示 $f\colon \mathbb{R}^{m\times n} \times \mathbb{R}^{n} \to \mathbb{R}$ 这样的映射，即“以矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与向量 $\boldsymbol{v}$ 为自变量、取实数值的函数”。

算法建模中，我们常关心一系列标量指标——误差、损失、方差、能量。考虑数据 input 和参数的维度，这个标量指标函数的自变量往往不是数 (Scalar value)，而是向量 **(Vector)** 或矩阵 **(Matrix)**：

$$f = f(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{v}), \qquad \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}, \quad \boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^{n}.$$

这里 $f(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{v})$ 是一种简写：它表示 $f\colon \mathbb{R}^{m\times n} \times \mathbb{R}^{n} \to \mathbb{R}$ 这样的映射，即“以矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与向量 $\boldsymbol{v}$ 为自变量、取实数值的函数”。

三个典型例子

- 线性回归的损失：$L(\boldsymbol{w}) = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{y}\|_2^2$（数据 $\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}$ 固定，自变量是 $\boldsymbol{w}$）；
- PCA 的投影方差：$\sigma^2(\boldsymbol{v}) = \boldsymbol{v}^T\boldsymbol{C}\boldsymbol{v}$（自变量是投影方向 $\boldsymbol{v}$）；
- 低秩逼近的误差：$E(\tilde{\boldsymbol{A}}) = \left\|\boldsymbol{A} - \tilde{\boldsymbol{A}}\right\|_F^2$（自变量是矩阵 $\tilde{\boldsymbol{A}}$）。

变分自编码器（VAE）的证据下界

$$\mathcal{L}(\theta, \phi) = \mathbb{E}_{q_\phi(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x})}\big[\log p_\theta(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{z})\big] - \mathrm{KL}\big(q_\phi(\boldsymbol{z} \mid \boldsymbol{x}) \,\|\, p(\boldsymbol{z})\big),$$

编码器参数 ϕ、解码器参数 θ 都是矩阵，$\mathcal{L}$ 就是它们的标量值矩阵函数。



结构示意：Kingma & Welling (2014)

Kingma et al. Auto-Encoding Variational Bayes. ICLR, 2014.

生成对抗网络（GAN）的极小极大目标

$$\min_G \max_D \ \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}\sim p_{\text{data}}}\big[\log D(\boldsymbol{x})\big] + \mathbb{E}_{\boldsymbol{z}\sim p(\boldsymbol{z})}\big[\log\big(1 - D(G(\boldsymbol{z}))\big)\big],$$

G, D 的权重都是矩阵；训练即对这个矩阵函数做交替优化。



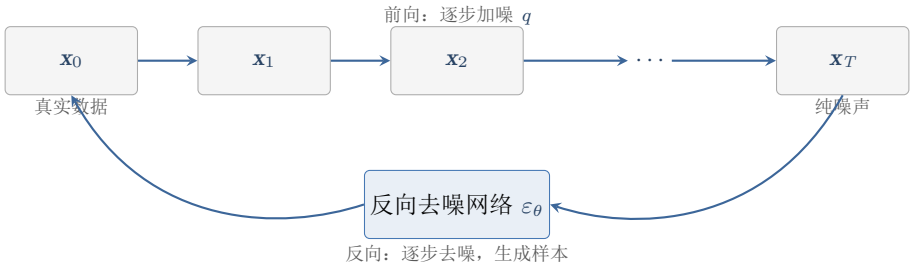
结构示意：Goodfellow 等 (2014)

Goodfellow et al. Generative Adversarial Nets. NeurIPS, 2014.

扩散模型（DDPM）的噪声预测目标

$$\mathcal{L}(\theta) = \mathbb{E}_{t,\,\mathbf{x}_0,\,\boldsymbol{\varepsilon}} \left\| \boldsymbol{\varepsilon} - \varepsilon_\theta\left(\sqrt{\bar{\alpha}_t}\,\mathbf{x}_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\,\boldsymbol{\varepsilon},\ t\right) \right\|_2^2,$$

噪声网络 ε_θ 的权重是矩阵；训练即对该矩阵函数最小化。



VAE、GAN、扩散：三种生成范式的目标函数都是标量值矩阵函数；Flow Matching 见下页。

Ho et al. Denoising Diffusion Probabilistic Models. NeurIPS, 2020.

Flow Matching：速度场建模

$$\mathcal{L}(\theta) = \mathbb{E}_{t,\,\boldsymbol{x}_0,\,\boldsymbol{x}_1} \left\| \boldsymbol{v}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t) - (\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0) \right\|_2^2, \qquad \boldsymbol{x}_t = (1-t)\,\boldsymbol{x}_0 + t\,\boldsymbol{x}_1 .$$

$\boldsymbol{x}_0$ 是噪声、$\boldsymbol{x}_1$ 是数据；网络学的是“从 $\boldsymbol{x}_t$ 往哪儿走、走多快”，与 DDPM 的噪声预测是同一目标的不同参数化。

- 采样即解常微分方程 $\mathrm{d}\boldsymbol{x}_t/\mathrm{d}t = \boldsymbol{v}_\theta$，步数可以很少；
- FLUX.2 [klein]：9B flow 模型 + Qwen3 文本嵌入（8B），蒸馏到 4 步推理、单张图 $< 0.5\,\mathrm{s}$；
- 与前面三例相同：$\mathcal{L}(\theta)$ 仍是以网络权重矩阵为自变量的标量函数。

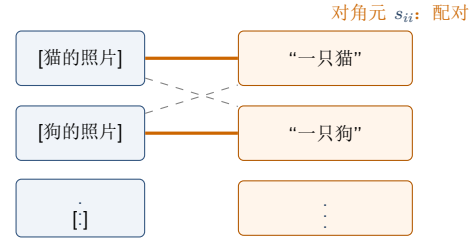
Flow Matching：Lipman et al. Flow Matching for Generative Modeling. ICLR, 2023. FLUX.2：Black Forest Labs. FLUX.2 [klein]: Towards Interactive Visual Intelligence. 技术报告, 2026.

模态对齐算法 CLIP 的学习目标：矩阵乘法下刻画的跨模态相似性

设 $\boldsymbol{Z}_I, \boldsymbol{Z}_T \in \mathbb{R}^{n\times d}$ 是同一批 n 个样本的图像、文本表示（已归一化），

$$\boldsymbol{S} = \frac{\boldsymbol{Z}_I \boldsymbol{Z}_T^T}{\tau} \in \mathbb{R}^{n\times n}, \qquad \mathcal{L} = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \log \frac{e^{s_{ii}}}{\sum_{j=1}^{n} e^{s_{ij}}}.$$

对角元 s_{ii} 是正确配对，训练把它推高、把非对角元压低（InfoNCE 对比损失）。



$$\boldsymbol{S} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1n} \\ s_{21} & s_{22} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ s_{n1} & \cdots & & s_{nn} \end{pmatrix}$$

多模态对齐 $=$ 矩阵乘法 $\boldsymbol{Z}_I \boldsymbol{Z}_T^T +$ 逐行 softmax $+$ 标量损失。

Radford et al. Learning Transferable Visual Models From Natural Language Supervision. ICML, 2021.

从“对齐”到“条件生成”

CLIP 回答“图文是否配对”；条件生成让文本与参考图直接参与生成、编辑：

$$\mathcal{L}(\theta) = \mathbb{E}\,\ell\big(\varepsilon_\theta(\boldsymbol{x}_t, t \mid \boldsymbol{c}),\ \text{目标}\big), \qquad \boldsymbol{c} = \mathrm{Enc}_{\text{Qwen3-VL}}(\text{指令},\ \text{参考图}).$$

- Qwen-Image-2.0：**Qwen3-VL** 作条件编码器，与多模态扩散 Transformer 联合建模；
- 支持约 1K token 指令、长文本排版与图像编辑，依赖大规模数据整理与多阶段训练；
- 它不是把 CLIP 当内部组件——“图文对齐”与“条件生成”是前后衔接、角色不同的两条线。

Zhao et al. Qwen-Image-2.0 Technical Report. arXiv:2605.10730, 2026.

前面几个例子的自变量形态不同，但都可以纳入同一个框架：

$$f\colon\ \mathbb{R}^{m\times n}\times\mathbb{R}^{n}\longrightarrow\mathbb{R},\qquad f=f(\boldsymbol{X},\boldsymbol{w}).$$

把矩阵当成“一列数”
矩阵 $\boldsymbol{X}=(x_{ij})$ 的全部 mn 个元素按固定顺序拉直为 $\mathrm{vec}(\boldsymbol{X})\in\mathbb{R}^{mn}$，于是

$$f(\boldsymbol{X},\boldsymbol{w})=g\big(\mathrm{vec}(\boldsymbol{X}),\boldsymbol{w}\big).$$

【定义 **1-1**】标量值矩阵函数

设 $\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{m\times n}$、$\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^{n}$。若对每一组 $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{w})$ 都有唯一实数与之对应，则称映射

$$f\colon\ \mathbb{R}^{m\times n} \times \mathbb{R}^{n} \longrightarrow \mathbb{R}, \qquad (\boldsymbol{X}, \boldsymbol{w}) \longmapsto f(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{w})$$

为标量值矩阵函数。

若 f 与 $\boldsymbol{w}$ 无关，简记为 $f(\boldsymbol{X})$；
若与 $\boldsymbol{X}$ 无关，则退化为普通的向量函数 $f(\boldsymbol{w})$。

【定义 **1-2**】矩阵梯度

设 $f: \mathbb{R}^{m\times n} \to \mathbb{R}$ 在 $\boldsymbol{X} = (x_{ij}) \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 的某邻域内有定义。若 f 对每个元素 x_{ij} 的偏导数都存在，则定义 f 在 $\boldsymbol{X}$ 处的 梯度矩阵为

$$\nabla_{\boldsymbol{X}} f = \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{X}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_{11}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{1n}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_{m1}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{mn}} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times n}.$$

即 $\nabla_{\boldsymbol{X}} f$ 与 $\boldsymbol{X}$ 同形，第 (i,j) 元就是 $\partial f/\partial x_{ij}$。

若自变量退化为向量 $\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^n$，则

$$\nabla_{\boldsymbol{w}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial w_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial w_n}\right)^T \in \mathbb{R}^n.$$

“矩阵微积分”一章已逐条推导，这里只列结果；第三列写明对哪个自变量求梯度及其结果维数。

名称	f（自变量与维数）	梯度（对谁求、结果维数）
线性型	$\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{X})$， $\boldsymbol{X},\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}$	$\nabla_{\boldsymbol{X}} f=\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}$
二次型	$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$， $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$， $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$	$\nabla_{\boldsymbol{x}} f=(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^T)\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$
范数（最小二乘）型	$\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}\|_2^2$， $\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^{l\times n}$， $\boldsymbol{w}\in\mathbb{R}^n$	$\nabla_{\boldsymbol{w}} f=2\boldsymbol{X}^T(\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y})\in\mathbb{R}^n$
行列式	$\det(\boldsymbol{A})$， $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 可逆	$\nabla_{\boldsymbol{A}} f=\det(\boldsymbol{A})\,\boldsymbol{A}^{-T}\in\mathbb{R}^{n\times n}$
对数行列式	$\log\det(\boldsymbol{A})$， $\boldsymbol{A}$ 正定	$\nabla_{\boldsymbol{A}} f=\boldsymbol{A}^{-T}\in\mathbb{R}^{n\times n}$

说明：下面频繁用到矩阵版本的“内积”，先把它约定下来。

对 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}$，定义 **Frobenius** 内积

$$\langle \boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \rangle_F = \operatorname{tr}(\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{B}) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} A_{ij} B_{ij},$$

以及由它诱导的 **Frobenius** 范数

$$\|\boldsymbol{A}\|_F = \sqrt{\langle \boldsymbol{A}, \boldsymbol{A} \rangle_F} = \sqrt{\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} A_{ij}^2}.$$

怎么理解：把矩阵逐列拉直成向量后，Frobenius 内积就是向量的普通点积、Frobenius 范数就是向量的普通长度。

$$\langle \boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \rangle_F = \operatorname{vec}(\boldsymbol{A})^T \operatorname{vec}(\boldsymbol{B}).$$

因此“逐分量相乘再求和”这一套直觉，从向量原封不动搬到矩阵。

【定义 **1-3**】方向导数

设 $f\colon \mathbb{R}^{m\times n}\to\mathbb{R}$ 在 $\boldsymbol{X}$ 处有定义，$\boldsymbol{V}\in\mathbb{R}^{m\times n}$ 为任一方向。若极限

$$D_{\boldsymbol{V}}f(\boldsymbol{X})=\lim_{t\to 0}\frac{f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})-f(\boldsymbol{X})}{t}$$

存在，则称此极限为 f 在 $\boldsymbol{X}$ 处沿方向 $\boldsymbol{V}$ 的方向导数。

等价说法：记单变量函数 $g(t)=f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})$，则 $D_{\boldsymbol{V}}f(\boldsymbol{X})=g'(0)$——即“站在 $\boldsymbol{X}$、沿 $\boldsymbol{V}$ 走一小步”的瞬时变化率。

但是，即便对一切方向 $\boldsymbol{V}$ 该极限都存在，仍不保证 f 可微。
（可微性由后面的定义单独刻画。）

例 1-1：迹函数的方向导数

设 $f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{X})$，$\boldsymbol{X}, \boldsymbol{V} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，求 $D_{\boldsymbol{V}} f(\boldsymbol{X})$。

例 1-1：迹函数的方向导数

设 $f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{X})$，$\boldsymbol{X}, \boldsymbol{V} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，求 $D_{\boldsymbol{V}} f(\boldsymbol{X})$。

解　按定义 $D_{\boldsymbol{V}} f(\boldsymbol{X}) = \lim\limits_{t\to 0} \dfrac{f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V}) - f(\boldsymbol{X})}{t}$，先化简差商。

- 第 **1** 步（代入）：$f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})$。
- 第 **2** 步（用迹的线性性拆开）：$\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}) + t\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{V})$。
- 第 **3** 步（作差商）：

$$\frac{f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V}) - f(\boldsymbol{X})}{t} = \frac{\big(\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}) + t\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{V})\big) - \mathrm{tr}(\boldsymbol{X})}{t} = \frac{t\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{V})}{t} = \mathrm{tr}(\boldsymbol{V}).$$

- 第 **4** 步（取极限）：差商与 t 无关，故 $D_{\boldsymbol{V}} f(\boldsymbol{X}) = \lim_{t\to 0} \mathrm{tr}(\boldsymbol{V}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{V})$。

一个观察：写成内积形式能读出梯度：$\mathrm{tr}(\boldsymbol{V}) = \langle \boldsymbol{I}, \boldsymbol{V}\rangle_F$，故 $\nabla f(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{I}$。

例 1-2：Frobenius 范数平方的方向导数

设 $f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}) = \|\boldsymbol{X}\|_F^2$，$\boldsymbol{X}, \boldsymbol{V} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，求 $D_{\boldsymbol{V}}f(\boldsymbol{X})$。

例 1-2：Frobenius 范数平方的方向导数

设 $f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}) = \|\boldsymbol{X}\|_F^2$，$\boldsymbol{X}, \boldsymbol{V} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，求 $D_{\boldsymbol{V}}f(\boldsymbol{X})$。

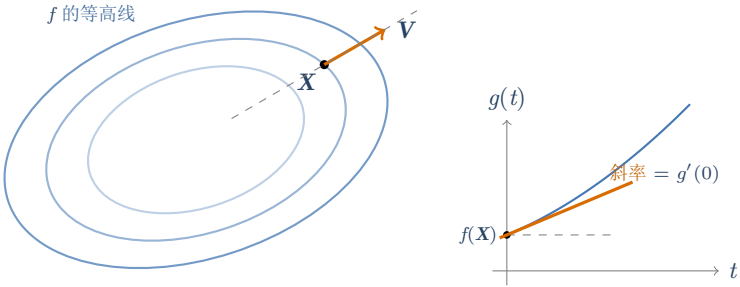
解　f 是二次的，差商里会留下 t 的一次、二次项。

- 第 **1** 步（代入并展开）：用 $\|\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\|_F^2 = \|\boldsymbol{A}\|_F^2 + 2\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{B}) + \|\boldsymbol{B}\|_F^2$，

$$f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V}) = \|\boldsymbol{X}\|_F^2 + 2t\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{V}) + t^2\,\|\boldsymbol{V}\|_F^2.$$

- 第 **2** 步（作差商）：减去 $f(\boldsymbol{X}) = \|\boldsymbol{X}\|_F^2$ 再除 t，得 $\dfrac{f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V}) - f(\boldsymbol{X})}{t} = 2\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{V}) + t\,\|\boldsymbol{V}\|_F^2$。
- 第 **3** 步（取极限）：含 t 的项趋于 0，只剩一次项系数，得 $D_{\boldsymbol{V}}f(\boldsymbol{X}) = 2\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{V})$。

写成内积形式便于读出梯度：$2\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{V}) = \langle 2\boldsymbol{X}, \boldsymbol{V}\rangle_F$，故 $\nabla f(\boldsymbol{X}) = 2\boldsymbol{X}$。



左：f 的等高线与过 $\boldsymbol{X}$ 的方向 $\boldsymbol{V}$.

右：一元剖面 $g(t) = f(\boldsymbol{X} + t\boldsymbol{V})$。$g$ 在 $t = 0$ 处的切线斜率就是方向导数 $D_{\boldsymbol{V}} f(\boldsymbol{X})$，它只反映“沿 $\boldsymbol{V}$ 这一条线走”时的变化快慢。

【定义 **1-4**】多元函数的一阶展开（全微分）

设 $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ 在 $\boldsymbol{x}$ 的某邻域内有定义。若存在向量 $\boldsymbol{g}\in\mathbb{R}^n$，使得对任意增量 $\boldsymbol{h}\to\boldsymbol{0}$ 都有

$$f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h})=f(\boldsymbol{x})+\boldsymbol{g}^T\boldsymbol{h}+o\big(\|\boldsymbol{h}\|\big),$$

则称 f 在 $\boldsymbol{x}$ 处可微，$\boldsymbol{g}$ 唯一且 $\boldsymbol{g}=\nabla f(\boldsymbol{x})$；线性部分 $\boldsymbol{g}^T\boldsymbol{h}$ 称为 f 在 $\boldsymbol{x}$ 处的全微分。

怎么读这个式子：把 $f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h})$ 拆成三部分——

- 原值 $f(\boldsymbol{x})$；
- 一阶（线性）增量 $\boldsymbol{g}^T\boldsymbol{h}=\sum_i g_ih_i$，是 $\boldsymbol{h}$ 的线性函数，给出沿 $\boldsymbol{h}$ 的主要变化；
- 余项 $o(\|\boldsymbol{h}\|)$，比 $\|\boldsymbol{h}\|$ 消失得更快的“高阶小量”。

也就是说：在 $\boldsymbol{x}$ 附近，f 可用一个线性函数来逼近。

看一个具体展开

设 $f(x_1, x_2) = x_1^2 x_2$，在 $\boldsymbol{x} = (1, 2)$ 处取增量 $\boldsymbol{h} = (h_1, h_2)$。直接展开：

$$f(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h}) = (1 + h_1)^2 (2 + h_2) = 2 + 4h_1 + h_2 + 2h_1^2 + 2h_1 h_2 + h_1^2 h_2.$$

按定义中的三部分对齐：

$$\underbrace{2}_{f(\boldsymbol{x})} + \underbrace{4h_1 + h_2}_{\boldsymbol{g}^T \boldsymbol{h}} + \underbrace{2h_1^2 + 2h_1 h_2 + h_1^2 h_2}_{o(\|\boldsymbol{h}\|)}.$$

线性部分是 $4h_1 + h_2 = (4, 1) \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix}$，故 $\boldsymbol{g} = \nabla f(1, 2) = \begin{pmatrix} 2x_1 x_2 \\ x_1^2 \end{pmatrix}_{(1,2)} = \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix}$；而平方、立方项合起来正是 $o(\|\boldsymbol{h}\|)$。

【定义 **1-5**】**Fréchet** 可微（全微分）

设 $f\colon \mathbb{R}^{m\times n}\to\mathbb{R}$ 在 $\boldsymbol{X}$ 的某邻域内有定义。若存在矩阵 $\boldsymbol{G}\in\mathbb{R}^{m\times n}$，使得对任意增量 $\Delta\boldsymbol{X}\to\boldsymbol{O}$ 都有

$$f(\boldsymbol{X}+\Delta\boldsymbol{X})=f(\boldsymbol{X})+\langle \boldsymbol{G},\ \Delta\boldsymbol{X}\rangle+o\big(\|\Delta\boldsymbol{X}\|_F\big),$$

则称 f 在 $\boldsymbol{X}$ 处 **Fréchet** 可微（简称可微），线性映射 $\Delta\boldsymbol{X}\mapsto\langle \boldsymbol{G},\Delta\boldsymbol{X}\rangle$ 称为 f 在 $\boldsymbol{X}$ 处的全微分（Fréchet 导数）。此时 $\boldsymbol{G}$ 唯一，且 $\boldsymbol{G}=\nabla_{\boldsymbol{X}}f(\boldsymbol{X})$（偏导数排成的矩阵）。

【定义 **1-6**】**Fréchet** 可微（全微分）

设 $f\colon \mathbb{R}^{m\times n}\to\mathbb{R}$ 在 $\boldsymbol{X}$ 的某邻域内有定义。若存在矩阵 $\boldsymbol{G}\in\mathbb{R}^{m\times n}$，使得对任意增量 $\Delta\boldsymbol{X}\to\boldsymbol{O}$ 都有

$$f(\boldsymbol{X}+\Delta\boldsymbol{X})=f(\boldsymbol{X})+\langle \boldsymbol{G},\ \Delta\boldsymbol{X}\rangle+o\big(\|\Delta\boldsymbol{X}\|_F\big),$$

则称 f 在 $\boldsymbol{X}$ 处 **Fréchet** 可微（简称可微），线性映射 $\Delta\boldsymbol{X}\mapsto\langle\boldsymbol{G},\Delta\boldsymbol{X}\rangle$ 称为 f 在 $\boldsymbol{X}$ 处的全微分（Fréchet 导数）。此时 $\boldsymbol{G}$ 唯一，且 $\boldsymbol{G}=\nabla_{\boldsymbol{X}}f(\boldsymbol{X})$（偏导数排成的矩阵）。

与向量情形逐项对应：把矩阵“拉直”看成向量，$\boldsymbol{x}\leftrightarrow\boldsymbol{X}$，$\boldsymbol{h}\leftrightarrow\Delta\boldsymbol{X}$，$\nabla f(\boldsymbol{x})^T\boldsymbol{h}=\sum_i\frac{\partial f}{\partial x_i}h_i\leftrightarrow\langle\boldsymbol{G},\Delta\boldsymbol{X}\rangle=\operatorname{tr}(\boldsymbol{G}^T\Delta\boldsymbol{X})$，$\|\boldsymbol{h}\|\leftrightarrow\|\Delta\boldsymbol{X}\|_F$。

强弱关系：Fréchet 可微 $\Rightarrow$ 全部偏导数 $\partial f/\partial X_{ij}$（$i=1,\dots,m,\ j=1,\dots,n$）存在，它们恰好排成梯度矩阵 $\boldsymbol{G}$；反之不然——偏导数只考察沿单个元素方向的变化，可微要求沿任意 $\Delta\boldsymbol{X}\to\boldsymbol{O}$ 的展开都成立。

命题 1-1：可微蕴含方向导数

设 $f:\mathbb{R}^{m\times n}\to\mathbb{R}$ 在 $\boldsymbol{X}$ 处可微，则对任意方向 $\boldsymbol{V}$，方向导数存在，且

$$D_{\boldsymbol{V}}f(\boldsymbol{X})=\left\langle \nabla_{\boldsymbol{X}}f(\boldsymbol{X}),\ \boldsymbol{V}\right\rangle .$$

意义：可微时，方向导数可以直接写成梯度与方向的内积，不必再对 t 求极限。

另有：

$$\left\langle \nabla_{\boldsymbol{X}}f(\boldsymbol{X}),\ \boldsymbol{V}\right\rangle =\operatorname{tr}\Big(\big(\nabla_{\boldsymbol{X}}f(\boldsymbol{X})\big)^{T}\boldsymbol{V}\Big)$$

证明　由可微定义，取 $\boldsymbol{G} = \nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X})$，令 $\Delta \boldsymbol{X} = t\boldsymbol{V}$（$t \neq 0$），则 $\|\Delta \boldsymbol{X}\|_F = |t| \, \|\boldsymbol{V}\|_F$。于是

$$f(\boldsymbol{X} + t\boldsymbol{V}) = f(\boldsymbol{X}) + \langle \boldsymbol{G},\ t\boldsymbol{V} \rangle + o\big(|t| \, \|\boldsymbol{V}\|_F\big).$$

移项、两边除以 t：

$$\frac{f(\boldsymbol{X} + t\boldsymbol{V}) - f(\boldsymbol{X})}{t} = \langle \boldsymbol{G}, \boldsymbol{V} \rangle + \frac{o\big(|t| \, \|\boldsymbol{V}\|_F\big)}{t}.$$

由于 $o(|t|)/t \to 0$（$t \to 0$），右端第二项趋于 0，故

$$D_{\boldsymbol{V}} f(\boldsymbol{X}) = \lim_{t \to 0} \frac{f(\boldsymbol{X} + t\boldsymbol{V}) - f(\boldsymbol{X})}{t} = \langle \boldsymbol{G}, \boldsymbol{V} \rangle = \operatorname{tr}\big(\boldsymbol{G}^T \boldsymbol{V}\big).$$

□

命题 1-2：一阶展开的等价刻画

设 $f:\mathbb{R}^{m\times n}\to\mathbb{R}$ 在 $\boldsymbol{X}$ 处可微，则对任意增量 $\Delta\boldsymbol{X}$ 成立一阶展开

$$f(\boldsymbol{X}+\Delta\boldsymbol{X})=f(\boldsymbol{X})+\left\langle\nabla_{\boldsymbol{X}}f(\boldsymbol{X}),\ \Delta\boldsymbol{X}\right\rangle+o\big(\|\Delta\boldsymbol{X}\|_F\big).$$

这就是可微的定义本身；它把命题 1-1 的“沿单方向”结论升级为“沿任意增量”的展开式。

两个用途： 反推梯度——展开后一次项系数即梯度，不必逐元素求偏导； 局部线性化——非线性函数在一点处被线性函数替代，用于误差估计与迭代分析。

再看

可微时满足的方向导数计算捷径

设 $f: \mathbb{R}^{m\times n} \to \mathbb{R}$ 在 $\boldsymbol{X}$ 处可微时，

$$D_{\boldsymbol{V}} f(\boldsymbol{X}) = \left\langle \nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}),\ \boldsymbol{V} \right\rangle.$$

意义：方向导数是一个数，梯度是一张矩阵：
方向导数回答“沿这个方向走，坡度是多少”，
梯度则以矩阵形式，汇总所有方向的一阶变化。

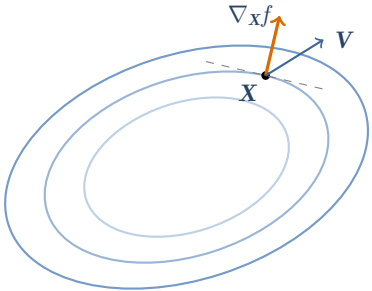
推论 1-3：最速上升方向

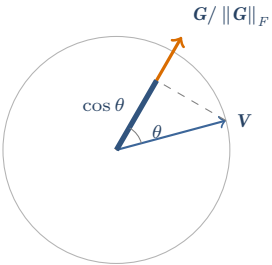
设 f 在 $\boldsymbol{X}$ 处可微，$\boldsymbol{G} = \nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}) \neq \boldsymbol{O}$。对任意满足 $\|\boldsymbol{V}\|_F = 1$ 的方向，由 Cauchy–Schwarz 不等式

$$D_{\boldsymbol{V}} f(\boldsymbol{X}) = \langle \boldsymbol{G}, \boldsymbol{V} \rangle_F \leq \|\boldsymbol{G}\|_F \, \|\boldsymbol{V}\|_F = \|\boldsymbol{G}\|_F ,$$

等号当且仅当 $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{G} / \|\boldsymbol{G}\|_F$ 时成立。因此 梯度指向函数增长最快的方向，负梯度指向下降最快的方向，两个最值分别为 $\pm \|\boldsymbol{G}\|_F$。

来源：这是命题 1-1（$D_{\boldsymbol{V}} f = \langle \boldsymbol{G}, \boldsymbol{V} \rangle$）与 Cauchy–Schwarz 不等式的直接推论——方向导数作为 $\boldsymbol{V}$ 的函数，在 $\boldsymbol{V}$ 与梯度同向时取到最大。





左：梯度垂直于等高线、指向函数增大一侧；偏离它的方向 $\boldsymbol{V}$ 方向导数更小。右：单位方向 $\boldsymbol{V}$ 与梯度夹角 θ 时 $D_{\boldsymbol{V}} f = \|\boldsymbol{G}\|_F \cos\theta$，故夹角为零时取最大值。

梯度是向量，方向导数是数——由命题 1-1，方向导数就是梯度在指定方向上的投影：$D_{\boldsymbol{u}}f = \nabla f \cdot \boldsymbol{u} = \|\nabla f\| \cos\theta$，$\theta$ 为梯度与方向的夹角。

	梯度	方向导数
类型	向量 $\nabla f \in \mathbb{R}^n$	数 $D_{\boldsymbol{u}}f \in \mathbb{R}$
记号	∇f	$D_{\boldsymbol{u}}f$
是否需指定方向	不需要	需要
表示什么	最大增长方向及其强度	沿某个给定方向的变化率

三者的层级：偏导数 $\subset$ 方向导数，例如 $\frac{\partial f}{\partial x} = D_{(1,0)}f$、$\frac{\partial f}{\partial y} = D_{(0,1)}f$——偏导只是沿坐标轴方向求。

单位化约定：本章定义对任意 $\boldsymbol{V}$ 给出 $D_{\boldsymbol{V}}f = \langle \nabla f, \boldsymbol{V} \rangle$；只有取单位方向 $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{V}/\|\boldsymbol{V}\|$ 时，$D_{\boldsymbol{u}}f = \|\nabla f\| \cos\theta$ 才称为“坡度”。

例 1-3：二元函数的梯度与方向导数

设 $f(x,y)=x^2+2y^2$，点 $P=(1,1)$。

- 求 f 在 P 处沿 x 轴正向 $\boldsymbol{u}_1=(1,0)$ 的方向导数；
- 求 f 在 P 处沿 y 轴正向 $\boldsymbol{u}_2=(0,1)$ 的方向导数；
- 求 f 在 P 处沿梯度方向 $\nabla f(P)=(2,4)$ 的方向导数。

例 1-3：二元函数的梯度与方向导数

设 $f(x,y)=x^2+2y^2$，$P=(1,1)$。求沿 $\boldsymbol{u}_1=(1,0)$、$\boldsymbol{u}_2=(0,1)$、$\nabla f(P)=(2,4)$ 三个方向的方向导数。

解　先求梯度：$\nabla f=(2x,4y)$，故 $\nabla f(P)=(2,4)$。由命题 1-1，$D_{\boldsymbol{u}}f(P)=\nabla f(P)\cdot\boldsymbol{u}=(2,4)\cdot\boldsymbol{u}$（单位化后）。

- **(1)** $\boldsymbol{u}_1=(1,0)$ 已是单位向量，$D_{\boldsymbol{u}_1}f(P)=(2,4)\cdot(1,0)=2$；
- **(2)** $\boldsymbol{u}_2=(0,1)$ 已是单位向量，$D_{\boldsymbol{u}_2}f(P)=(2,4)\cdot(0,1)=4$；
- **(3)** 梯度方向需单位化：$\boldsymbol{u}_3=\dfrac{(2,4)}{\|(2,4)\|}=\dfrac{(2,4)}{2\sqrt{5}}$，

$$D_{\boldsymbol{u}_3}f(P)=(2,4)\cdot\frac{(2,4)}{2\sqrt{5}}=\frac{4+16}{2\sqrt{5}}=\frac{20}{2\sqrt{5}}=2\sqrt{5}\approx 4.47.$$

例 1-3：二元函数的梯度与方向导数

设 $f(x,y)=x^2+2y^2$，$P=(1,1)$，$\nabla f(P)=(2,4)$。

方向 $\boldsymbol{u}$	$D_{\boldsymbol{u}}f(1,1)=(2,4)\cdot\boldsymbol{u}$	含义
x 轴正向 $(1,0)$	2	沿 x 方向上升
y 轴正向 $(0,1)$	4	沿 y 方向上升更快
$(2,4)/\sqrt{20}$	$2\sqrt{5}\approx 4.47$	最大，$=\|\nabla f\|$

沿梯度方向取到最大 $\|\nabla f\|$、反方向取到 $-\|\nabla f\|$；与梯度垂直的方向 $D_{\boldsymbol{u}}f=0$，即梯度垂直于等值线（等值线 $x^2+2y^2=3$ 在 P 处切线为 $(4,-2)$，与 $(2,4)$ 正交）。

例 1-4：矩阵与固定矩阵的距离

设 $\boldsymbol{X}, \boldsymbol{C} \in \mathbb{R}^{m\times n}$，定义

$$f(\boldsymbol{X}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{X} - \boldsymbol{C}\|_F^2.$$

求 f 在 $\boldsymbol{X}$ 处沿任意方向 $\boldsymbol{V}$ 的方向导数与梯度，并指出使 f 取最小值的矩阵。

提示：这是本章第一个自变量本身就是矩阵的例子，仍按“先算 $f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})$、再看 t 的一次项系数”的流程走。

例 1-4：矩阵与固定矩阵的距离

设 $f(\boldsymbol{X}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C}\|_F^2$，求方向导数、梯度与最小点。

解（第 **1** 步：代入方向扰动）
固定任意方向 $\boldsymbol{V}$，考虑 $\boldsymbol{X}$ 沿 $\boldsymbol{V}$ 变化后的点 $\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V}$。直接将 $\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C}$ 代入范数，并用迹表示 Frobenius 范数平方：

$$f(\boldsymbol{X}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C}\|_F^2 = \frac{1}{2}\operatorname{tr}\big((\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})^T(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})\big).$$

于是

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V}) &= \frac{1}{2}\|\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V}-\boldsymbol{C}\|_F^2 \\ &= \frac{1}{2}\operatorname{tr}\big(((\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})+t\boldsymbol{V})^T((\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})+t\boldsymbol{V})\big) \\ &= \frac{1}{2}\operatorname{tr}\big(((\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})^T+t\boldsymbol{V}^T)((\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})+t\boldsymbol{V})\big). \end{aligned}$$

例 1-4：矩阵与固定矩阵的距离

继续展开 $f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})$，暂时保留各个乘积项。

解（第 **2** 步：按分配律展开矩阵乘积）

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V}) &= \frac{1}{2}\operatorname{tr}\big(((\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})^{T}+t\boldsymbol{V}^{T})((\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})+t\boldsymbol{V})\big) \\
&= \frac{1}{2}\operatorname{tr}\Big(\underbrace{(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})^{T}(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})}_{\text{常数项}}+\underbrace{t(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})^{T}\boldsymbol{V}+t\boldsymbol{V}^{T}(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})}_{\text{两个一次交叉项}}+\underbrace{t^{2}\boldsymbol{V}^{T}\boldsymbol{V}}_{\text{二次项}}\Big).
\end{aligned}
$$

这里先把四个矩阵乘积都写出来；下一步再利用迹的性质，整理两个交叉项。

例 1-4：矩阵与固定矩阵的距离

先把迹分别作用到乘积展开式的四项上。

解（第 **3** 步：利用迹的线性性）由上一页的乘积展开式，

$$f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V}) = \frac{1}{2}\operatorname{tr}((\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})^T(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})) + \frac{t}{2}\operatorname{tr}((\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})^T\boldsymbol{V}) + \frac{t}{2}\operatorname{tr}(\boldsymbol{V}^T(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})) + \frac{t^2}{2}\operatorname{tr}(\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{V}).$$

其中第一项与 t 无关，最后一项含 t^2；中间两项都是关于 t 的一次交叉项。下一步要说明，这两个交叉项的迹相等。

例 1-4：矩阵与固定矩阵的距离

使用迹与转置的关系，把展开式整理成关于 t 的多项式。

解（第 **4** 步：利用转置性质合并交叉项）对任意方阵 $\boldsymbol{M}$，有 $\operatorname{tr}(\boldsymbol{M}) = \operatorname{tr}(\boldsymbol{M}^T)$。取 $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{V}^T(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{C})$，便得到

$$\operatorname{tr}(\boldsymbol{V}^T(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{C})) = \operatorname{tr}\big((\boldsymbol{V}^T(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{C}))^T\big) = \operatorname{tr}((\boldsymbol{X} - \boldsymbol{C})^T\boldsymbol{V}).$$

因此两个一次交叉项相等；又 $\frac{1}{2}\operatorname{tr}((\boldsymbol{X} - \boldsymbol{C})^T(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{C})) = f(\boldsymbol{X})$，$\operatorname{tr}(\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{V}) = \|\boldsymbol{V}\|_F^2$，于是

$$f(\boldsymbol{X} + t\boldsymbol{V}) = f(\boldsymbol{X}) + t\operatorname{tr}((\boldsymbol{X} - \boldsymbol{C})^T\boldsymbol{V}) + \frac{t^2}{2}\|\boldsymbol{V}\|_F^2.$$

例 1-4：矩阵与固定矩阵的距离

从 $f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})$ 的展开式求沿方向 $\boldsymbol{V}$ 的方向导数。

解（第 **5** 步：作差商并取极限）
由前面的展开式，

$$f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})-f(\boldsymbol{X})=t\,\mathrm{tr}((\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})^{T}\boldsymbol{V})+\frac{t^{2}}{2}\|\boldsymbol{V}\|_{F}^{2}.$$

当 $t\neq 0$ 时，两边除以 t：

$$\frac{f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})-f(\boldsymbol{X})}{t}=\mathrm{tr}((\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})^{T}\boldsymbol{V})+\frac{t}{2}\|\boldsymbol{V}\|_{F}^{2}.$$

令 $t\to 0$，第二项趋于 0，所以

$$D_{\boldsymbol{V}}f(\boldsymbol{X})=\mathrm{tr}((\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})^{T}\boldsymbol{V})=\langle \boldsymbol{X}-\boldsymbol{C},\boldsymbol{V}\rangle_{F}.$$

由定义，方向导数等于梯度与方向的 Frobenius 内积；下一页据此识别梯度。

例 1-4：矩阵与固定矩阵的距离

根据对任意方向 $\boldsymbol{V}$ 都成立的方向导数公式，求梯度。

解（第 **6** 步：识别梯度）
矩阵梯度满足

$$D_{\boldsymbol{V}} f(\boldsymbol{X}) = \langle \nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}), \boldsymbol{V} \rangle_F.$$

而上一页已经得到

$$D_{\boldsymbol{V}} f(\boldsymbol{X}) = \langle \boldsymbol{X} - \boldsymbol{C}, \boldsymbol{V} \rangle_F \qquad \text{对任意} \boldsymbol{V} \text{ 都成立.}$$

由 Frobenius 内积的非退化性，

$$\nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{X} - \boldsymbol{C}.$$

例 1-4：矩阵与固定矩阵的距离

确定 $f(\boldsymbol{X}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C}\|_F^2$ 的最小点。

解（第 **7** 步：直接比较函数值）

$$f(\boldsymbol{X}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C}\|_F^2 \geq 0.$$

Frobenius 范数为零当且仅当矩阵为零，因此等号成立当且仅当 $\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C}=\boldsymbol{O}$，即 $\boldsymbol{X}=\boldsymbol{C}$。于是

$$\min_{\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^{m\times n}} f(\boldsymbol{X}) = 0, \qquad \arg\min_{\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^{m\times n}} f(\boldsymbol{X}) = \{\boldsymbol{C}\}.$$

最小点唯一，也与梯度方程 $\nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{O}$ 一致。

注：把 Frobenius 范数平方写成 $\mathrm{tr}((\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C})^T(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{C}))$，能将矩阵范数计算化为迹的线性性与转置性质；这是矩阵微积分中的常用技巧。

例 1-5：用方向导数求 MSE 的梯度

设 $\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{l\times n}$、$\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^{l}$，$f(\boldsymbol{w}) = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{y}\|_2^2$。不查现成公式，直接用方向导数的定义求 $\nabla_{\boldsymbol{w}} f$。

解取任意方向 $\boldsymbol{v}$，按定义展开 $f(\boldsymbol{w} + t\boldsymbol{v})$：

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{w} + t\boldsymbol{v}) &= \|(\boldsymbol{X}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{y}) + t\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}\|_2^2 \\ &= \underbrace{\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{y}\|_2^2}_{f(\boldsymbol{w})} + 2t\left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{y}\right)^T \boldsymbol{X}\boldsymbol{v} + t^2 \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}\|_2^2 . \end{aligned}$$

对 t 求导并令 $t = 0$：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} f(\boldsymbol{w} + t\boldsymbol{v})\bigg|_{t=0} = 2\left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{y}\right)^T \boldsymbol{X}\boldsymbol{v} = \left\langle 2\boldsymbol{X}^T(\boldsymbol{X}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{y}),\ \boldsymbol{v} \right\rangle.$$

由命题 1-1（可微蕴含方向导数），上式对一切 $\boldsymbol{v}$ 成立，故 $\nabla_{\boldsymbol{w}} f = 2\boldsymbol{X}^T(\boldsymbol{X}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{y})$。

例 1-6：行列式与对数行列式的梯度

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 可逆，求 $\nabla_{\boldsymbol{A}} \det(\boldsymbol{A})$ 与 $\nabla_{\boldsymbol{A}} \log\det(\boldsymbol{A})$。

解沿方向 $\boldsymbol{V}$ 展开，先把 $\det(\boldsymbol{A})$ 提出来：

$$\det(\boldsymbol{A}+t\boldsymbol{V}) = \det(\boldsymbol{A})\cdot\det\big(\boldsymbol{I}+t\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{V}\big).$$

再用 $\det(\boldsymbol{I}+t\boldsymbol{M}) = 1 + t\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{M}) + O(t^2)$ （把 $\boldsymbol{M}$ 的全部特征值乘开即可看出），得

$$\det(\boldsymbol{A}+t\boldsymbol{V}) = \det(\boldsymbol{A})\Big(1 + t\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{V})\Big) + O(t^2),$$

故

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\det(\boldsymbol{A}+t\boldsymbol{V})\Big|_{t=0} = \det(\boldsymbol{A})\ \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{V}) = \big\langle \det(\boldsymbol{A})\,\boldsymbol{A}^{-T},\ \boldsymbol{V}\big\rangle,$$

即 $\nabla_{\boldsymbol{A}}\det(\boldsymbol{A}) = \det(\boldsymbol{A})\,\boldsymbol{A}^{-T}$。
对数版：$\log\det(\boldsymbol{A}+t\boldsymbol{V}) = \log\det(\boldsymbol{A}) + t\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{V}) + O(t^2)$，故 $\nabla_{\boldsymbol{A}}\log\det(\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{A}^{-T}$。

用方向导数 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})\big|_{t=0}$ 求下列梯度（不许逐个元素求偏导）：

- $f(\boldsymbol{X}) = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}\|_2^2$，$\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^{m\times n}$，$\boldsymbol{a}\in\mathbb{R}^n$，$\boldsymbol{b}\in\mathbb{R}^m$；
- $f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{X}\boldsymbol{B})$，$\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}$，$\boldsymbol{B}\in\mathbb{R}^{n\times n}$；
- $f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{X})$（$\boldsymbol{A}$ 对称），并写出 $\boldsymbol{X}$ 处的一阶展开式；
- $f(\boldsymbol{X}) = \log\det(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})$（$\boldsymbol{X}$ 列满秩）。

提示：四题都只需把 $f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})$ 展开到 t 的一次项，再用“对一切 $\boldsymbol{V}$ 成立”读出梯度。

(1) $f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})=\|(\boldsymbol{X}\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b})+t\,\boldsymbol{V}\boldsymbol{a}\|_2^2$，一次项为 $2t(\boldsymbol{X}\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b})^T\boldsymbol{V}\boldsymbol{a}=\big\langle 2(\boldsymbol{X}\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b})\boldsymbol{a}^T,\ \boldsymbol{V}\big\rangle$，故 $\nabla_{\boldsymbol{X}}f=2(\boldsymbol{X}\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b})\boldsymbol{a}^T$（与 $\boldsymbol{X}$ 同形）。

(2) 由迹的循环性，$\operatorname{tr}(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{V}\boldsymbol{B})=\operatorname{tr}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{V})=\big\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^T,\ \boldsymbol{V}\big\rangle$，故 $\nabla_{\boldsymbol{X}}f=\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^T$。

(3) 展开得

$$f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})=f(\boldsymbol{X})+2t\,\operatorname{tr}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V})+t^2\,\operatorname{tr}(\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}),$$

其中 $\operatorname{tr}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V})=\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{X},\boldsymbol{V}\rangle$，故 $\nabla_{\boldsymbol{X}}f=2\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}$，且

$$f(\boldsymbol{X}+\Delta\boldsymbol{X})=f(\boldsymbol{X})+2\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{X},\Delta\boldsymbol{X}\rangle+\operatorname{tr}\big(\Delta\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{A}\,\Delta\boldsymbol{X}\big).$$

(4) $\mathrm{d}\log\det(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})=\operatorname{tr}\big((\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\,\mathrm{d}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})\big)=2\operatorname{tr}\big((\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\mathrm{d}\boldsymbol{X}\big)=\big\langle 2\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1},\ \mathrm{d}\boldsymbol{X}\big\rangle$，故

$$\nabla_{\boldsymbol{X}}f=2\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}.$$

1 矩阵函数 4
- 矩阵函数、梯度、方向导数 5
- 常见的矩阵函数 51
- 凸函数 * 59
- 凸优化 * 72

2 主成分分析 81
- 问题 82
- 记号与模型 86
- 主成分的可视化示例 98

3 奇异值分解 106
- 理论准备 107
- 习题演算 126
- 矩阵分解的应用：推荐系统和潜在语义分析 136
- 图像压缩 143

4 矩阵函数与因果发现算法模型 157
- 理论准备 158
- 问题 162
- 记号定义 164
- 模型建立 166
- 模型求解 170
- 小结 173

前面 1.1 节讨论的是标量值矩阵函数（结果为误差、损失等标量）。“矩阵函数”更常见的含义其实是矩阵值函数：输入、输出都是矩阵，

$$f\colon \mathbb{R}^{n\times n} \to \mathbb{R}^{n\times n}, \qquad \boldsymbol{A} \mapsto f(\boldsymbol{A}).$$

它们通常由幂级数或谱分解定义。

一般构造（谱分解定义）：若 $\boldsymbol{A}$ 可对角化，$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\,\mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)\,\boldsymbol{P}^{-1}$，则

$$f(\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{P}\,\mathrm{diag}\big(f(\lambda_1), \ldots, f(\lambda_n)\big)\,\boldsymbol{P}^{-1}.$$

即“对特征值逐个作用 f，特征向量不变”。

本节逐一介绍六个常用的矩阵值函数；其中矩阵级数与 $\exp(\boldsymbol{A})$ 将在第 4 章“因果发现”的理论准备中用到。

例 1-7：矩阵幂

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，正整数幂定义为连乘

$$\boldsymbol{A}^k = \underbrace{\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{A}\cdots\boldsymbol{A}}_{k\ 个}, \qquad \boldsymbol{A}^0 = \boldsymbol{I}.$$

要点：

- 是最基本的矩阵值函数，一切矩阵幂级数的“零件”；
- 若 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\,\mathrm{diag}(\lambda_i)\boldsymbol{P}^{-1}$，则 $\boldsymbol{A}^k = \boldsymbol{P}\,\mathrm{diag}(\lambda_i^k)\,\boldsymbol{P}^{-1}$ ——取幂只作用在特征值上；
- 幂的性态由谱半径决定：$\rho(\boldsymbol{A}) < 1 \Rightarrow \boldsymbol{A}^k \to \boldsymbol{O}$，这决定了下面各级数的收敛性；
- 应用：k 步状态转移（马尔可夫链）、图的 k 步可达性（邻接矩阵的幂）。

例 1-8：矩阵幂级数

由标量幂级数 $\sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k$（收敛半径 R）定义矩阵幂级数

$$f(\boldsymbol{A}) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \boldsymbol{A}^k.$$

收敛判别：当谱半径 $\rho(\boldsymbol{A}) < R$（对应标量级数的收敛半径）时级数收敛；可对角化时

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_k \boldsymbol{A}^k = \boldsymbol{P}\,\mathrm{diag}\Big(\sum_{k} c_k \lambda_i^k\Big)\,\boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{P}\,\mathrm{diag}\big(f(\lambda_i)\big)\,\boldsymbol{P}^{-1},$$

与谱分解定义一致。矩阵幂级数是把标量函数“搬”到矩阵上的统一机器，下面的 Neumann 级数、指数、对数都是它的特例。

例 1-9：Neumann 级数

当 $\rho(\boldsymbol{A}) < 1$ 时，

$$(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A})^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} \boldsymbol{A}^k = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^2 + \cdots .$$

要点：

- 是标量等比级数 $\frac{1}{1-z} = \sum_k z^k$（$|z| < 1$）的矩阵版本；
- 把求逆转化为幂级数求和，避免直接求逆；
- 可用于迭代求解 $(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$：$\boldsymbol{x} = \sum_k \boldsymbol{A}^k \boldsymbol{b}$，对应不动点迭代 $\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{b}$；
- 应用：PageRank、线性递推系统的稳态、图上的传播/扩散模型。

例 1-10：矩阵指数

对任意方阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，

$$\exp(\boldsymbol{A}) = e^{\boldsymbol{A}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\boldsymbol{A}^k}{k!} = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{A} + \frac{\boldsymbol{A}^2}{2!} + \cdots .$$

要点：

- 标量指数级数收敛半径 $R = \infty$，故对任意方阵都收敛；
- $e^{t\boldsymbol{A}}$ 是线性常微分方程 $\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$、$\boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_0$ 的解 $\boldsymbol{x}(t) = e^{t\boldsymbol{A}}\boldsymbol{x}_0$；
- 若 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\,\mathrm{diag}(\lambda_i)\boldsymbol{P}^{-1}$，则 $e^{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{P}\,\mathrm{diag}(e^{\lambda_i})\,\boldsymbol{P}^{-1}$；
- 注意一般 $e^{\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}} \neq e^{\boldsymbol{A}}e^{\boldsymbol{B}}$（除非 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ 可交换）；
- 应用：连续时间动力系统、马尔可夫过程、第 4 章因果发现（NOTEARS）。

例 1-11：矩阵对数

当 $\rho(\boldsymbol{A}) < 1$ 时，

$$\log(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} \boldsymbol{A}^k = \boldsymbol{A} - \frac{\boldsymbol{A}^2}{2} + \frac{\boldsymbol{A}^3}{3} - \cdots .$$

要点：

- 是标量级数 $\log(1+z) = \sum_k \frac{(-1)^{k+1}}{k} z^k$ （$|z| < 1$）的矩阵版本，与指数互为反函数：$\exp(\log(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A})) = \boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}$；
- 一般地，$\boldsymbol{M}$ 的对数是满足 $e^{\boldsymbol{X}} = \boldsymbol{M}$ 的矩阵 $\boldsymbol{X}$ ——$\boldsymbol{M}$ 可逆时存在但不一定唯一；
- 应用：把矩阵的“乘法结构”转成“加法结构”，李群/李代数、协方差矩阵的插值与平均。

例 1-12：矩阵平方根

设 $\boldsymbol{A}$ 对称半正定，其（主）平方根 $\boldsymbol{A}^{1/2}$ 是满足

$$\left(\boldsymbol{A}^{1/2}\right)^2 = \boldsymbol{A}, \qquad \boldsymbol{A}^{1/2} \succeq \boldsymbol{O}$$

的唯一对称半正定矩阵。

构造与要点：

- 谱分解 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q}\mathrm{diag}(\lambda_i)\boldsymbol{Q}^T$（$\lambda_i \geq 0$）给出 $\boldsymbol{A}^{1/2} = \boldsymbol{Q}\,\mathrm{diag}(\sqrt{\lambda_i})\,\boldsymbol{Q}^T$；
- 半正定时主平方根存在且唯一；去掉对称半正定限制则一般不唯一；
- 应用：马氏距离/数据白化 $\boldsymbol{A}^{-1/2}$、协方差变换、最优传输中的 Wasserstein 几何。

1 矩阵函数 4
- 矩阵函数、梯度、方向导数 5
- 常见的矩阵函数 51
- 凸函数 * 59
- 凸优化 * 72

2 主成分分析 81
- 问题 82
- 记号与模型 86
- 主成分的可视化示例 98

3 奇异值分解 106
- 理论准备 107
- 习题演算 126
- 矩阵分解的应用：推荐系统和潜在语义分析 136
- 图像压缩 143

4 矩阵函数与因果发现算法模型 157
- 理论准备 158
- 问题 162
- 记号定义 164
- 模型建立 166
- 模型求解 170
- 小结 173

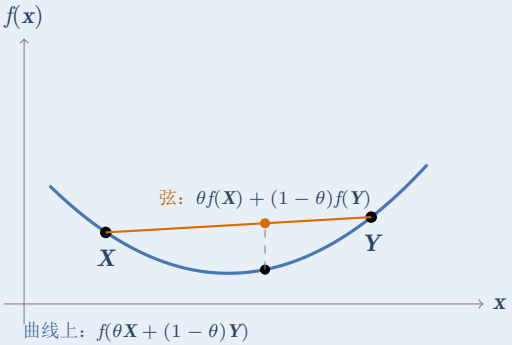
【定义 **1-7**】凸集与凸函数

集合 $C \subseteq \mathbb{R}^{m\times n}$ 称为凸集，若对任意 $\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y} \in C$ 与 $\theta \in [0,1]$，都有 $\theta\boldsymbol{X} + (1-\theta)\boldsymbol{Y} \in C$（两点间的整条线段都在集合内）。
设 C 为凸集。若对任意 $\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y} \in C$、$\theta \in [0,1]$ 成立

$$f\big(\theta\boldsymbol{X} + (1-\theta)\boldsymbol{Y}\big) \le \theta f(\boldsymbol{X}) + (1-\theta) f(\boldsymbol{Y}),$$

则称 f 为 C 上的凸函数；若 $\boldsymbol{X} \neq \boldsymbol{Y}$、$\theta \in (0,1)$ 时严格小于，则称严格凸；若 $-f$ 凸，则称 f 为凹函数。

上式右端就是连接 $(\boldsymbol{X}, f(\boldsymbol{X}))$ 与 $(\boldsymbol{Y}, f(\boldsymbol{Y}))$ 的弦：凸函数的图象处处不高于它的弦。



对任意 $\theta \in [0,1]$，弦上的点（橙色）始终不低于曲线上的对应点（蓝色）——这就是凸函数“线段在图象上方”的含义。

命题 1-4：凸函数的刻画

设 $f:\mathbb{R}^{m\times n}\to\mathbb{R}$ 可微，则以下两条都与“f 为凸函数”等价：

（一阶刻画）对任意 $\boldsymbol{X},\boldsymbol{Y}$，

$$f(\boldsymbol{Y})\geq f(\boldsymbol{X})+\left\langle \nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}),\ \boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\right\rangle,$$

即一阶展开处处低估：切平面在图象下方（逐点支撑图象）。

（二阶刻画）若 f 二阶可微，则 f 凸 $\iff$ Hesse 矩阵处处半正定，即对一切 $\boldsymbol{X}$ 与方向 $\boldsymbol{V}$，

$$D^2 f(\boldsymbol{X})[\boldsymbol{V},\boldsymbol{V}]\geq 0 \qquad （向量情形即 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})\succeq \boldsymbol{O}$）.$$

与命题 **1-1** 的衔接：一阶刻画用的正是命题 1-1 的一次项 $\langle\nabla f,\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\rangle$——凸性使得“丢掉余项”后仍有不等式。二阶刻画即方向导数 $g(t)=f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})$ 满足 $g''(0)\geq 0$。

证明（$\Rightarrow$）设 f 凸。对任意 $\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}$ 与 $\theta \in (0,1)$，由定义

$$f\big(\boldsymbol{X}+\theta(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X})\big) \le f(\boldsymbol{X}) + \theta\big(f(\boldsymbol{Y}) - f(\boldsymbol{X})\big).$$

移项、两边除以 $\theta > 0$：

$$\frac{f(\boldsymbol{X}+\theta(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X})) - f(\boldsymbol{X})}{\theta} \le f(\boldsymbol{Y}) - f(\boldsymbol{X}).$$

令 $\theta \to 0^+$，左端极限即方向导数（命题 1-1）$D_{\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}) = \langle \nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}), \boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\rangle$，得一阶刻画。

（$\Leftarrow$）设一阶刻画成立。任取 $\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}$、$\theta \in [0,1]$，记 $\boldsymbol{Z} = \theta\boldsymbol{X} + (1-\theta)\boldsymbol{Y}$。分别对 $(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{X})$、$(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{Y})$ 用一阶刻画，各乘 θ、$1-\theta$ 后相加：

$$f(\boldsymbol{X}) \ge f(\boldsymbol{Z}) + \langle \nabla f(\boldsymbol{Z}), \boldsymbol{X}-\boldsymbol{Z}\rangle, \qquad f(\boldsymbol{Y}) \ge f(\boldsymbol{Z}) + \langle \nabla f(\boldsymbol{Z}), \boldsymbol{Y}-\boldsymbol{Z}\rangle,$$

$$\theta f(\boldsymbol{X}) + (1-\theta) f(\boldsymbol{Y}) \ge f(\boldsymbol{Z}) + \langle \nabla f(\boldsymbol{Z}), \theta\boldsymbol{X} + (1-\theta)\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{Z}\rangle = f(\boldsymbol{Z}),$$

因为 $\theta\boldsymbol{X} + (1-\theta)\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{Z} = \boldsymbol{O}$。此即凸性定义。 □

例 1-13：凸函数（标量视角）

下列一元函数都是凸函数（可用二阶刻画 $f'' \geq 0$ 验证）：

- 二次型 $ax^2 + bx + c$（$a > 0$）：$f''(x) = 2a > 0$，严格凸；
- 指数函数 e^x：$f''(x) = e^x > 0$，严格凸；
- 绝对值 $|x|$：凸但在 $x = 0$ 处不可微——凸性不要求可微，一阶刻画那时要用次梯度代替梯度；
- 负对数 $-\log x$（$x > 0$）：$f''(x) = 1/x^2 > 0$。

对照：x^3、$\sin x$、$\log x$ 都不是凸函数（$\log x$ 是凹函数）。“凸/凹”是对函数整体的刻画，一处 $f'' < 0$ 就足以破坏凸性。

例 1-14：凸的矩阵函数

借助一阶刻画或二阶刻画，可以验证本章前面出现的目标函数几乎全凸：

- 线性型 $f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{X})$：既凸又凹（一阶刻画取等号）；
- 二次型 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$（$\boldsymbol{A} \succeq \boldsymbol{O}$）：$\nabla^2 f = 2\boldsymbol{A} \succeq \boldsymbol{O}$，故凸；$\boldsymbol{A} \succ \boldsymbol{O}$ 时严格凸；
- 范数型 $f(\boldsymbol{w}) = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{y}\|_2^2$：$\nabla^2 f = 2\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}$，故凸——**MSE** 是凸函数；
- 范数本身就是凸函数：$\|\theta\boldsymbol{x} + (1-\theta)\boldsymbol{y}\| \le \theta\|\boldsymbol{x}\| + (1-\theta)\|\boldsymbol{y}\|$（三角不等式），故 $\|\boldsymbol{w}\|_1$、$\|\boldsymbol{w}\|_2$、$\|\boldsymbol{X}\|_F$ 皆凸——**Ridge**、**LASSO** 的目标函数都凸；
- $f(\boldsymbol{X}) = \log\det(\boldsymbol{X}^{-1}) = -\log\det(\boldsymbol{X})$（$\boldsymbol{X}$ 正定）是凸函数，在半定规划与最大似然估计中常见，二阶验证见本节末例。

例 1-15：加权矩阵二次函数

设 $\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{m\times n}$，$\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times m}$、$\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 均对称半正定，定义

$$f(\boldsymbol{X}) = \frac{1}{2}\operatorname{tr}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}).$$

求 f 沿方向 $\boldsymbol{V}$ 的方向导数与梯度，并判断 f 是否为凸函数。

注：$\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ 半正定是凸性的前提；若其中之一不定，f 一般非凸。

例 1-15：加权矩阵二次函数

求 $f(\boldsymbol{X}) = \frac{1}{2}\operatorname{tr}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}\boldsymbol{B})$ 的方向导数、梯度，并判断凸性。

解展开 $f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})$，用 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^T$、$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}^T$ 及迹的循环性合并两个交叉项：

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V}) &= \frac{1}{2}\operatorname{tr}\big((\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})^T\boldsymbol{A}(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})\boldsymbol{B}\big) \\ &= f(\boldsymbol{X}) + t\operatorname{tr}(\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}) + \frac{t^2}{2}\operatorname{tr}(\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}\boldsymbol{B}). \end{aligned}$$

故

$$D_{\boldsymbol{V}}f(\boldsymbol{X}) = \operatorname{tr}(\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}) = \langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{X}\boldsymbol{B},\ \boldsymbol{V}\rangle_F, \qquad \nabla_{\boldsymbol{X}}f(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}.$$

二阶变化

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})\Big|_{t=0} = \operatorname{tr}(\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}\boldsymbol{B}) = \left\|\boldsymbol{A}^{1/2}\boldsymbol{V}\boldsymbol{B}^{1/2}\right\|_F^2 \geq 0,$$

故 f 凸。若 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 均正定，则 $\boldsymbol{A}^{1/2}\boldsymbol{V}\boldsymbol{B}^{1/2}=\boldsymbol{O}\Rightarrow\boldsymbol{V}=\boldsymbol{O}$，$f$ 严格凸。

例 1-16：矩阵最小二乘函数的凸性

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{r\times m}$、$\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{m\times n}$、$\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{n\times s}$、$\boldsymbol{C} \in \mathbb{R}^{r\times s}$，定义

$$f(\boldsymbol{X}) = \frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{AXB} - \boldsymbol{C}\right\|_F^2.$$

求 $\nabla_{\boldsymbol{X}} f$，并说明 f 为什么是凸函数。

注：$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B} = \boldsymbol{I}$ 时即 1.1 节中的 MSE（向量情形）；本题是它的矩阵版本。

例 1-16：矩阵最小二乘函数的凸性

求 $f(\boldsymbol{X}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{AXB} - \boldsymbol{C}\|_F^2$ 的梯度并验证凸性。

解记 $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{AXB} - \boldsymbol{C}$。对任意方向 $\boldsymbol{V}$，

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{X} + t\boldsymbol{V}) &= \frac{1}{2}\|\boldsymbol{E} + t\boldsymbol{AVB}\|_F^2 \\ &= f(\boldsymbol{X}) + t\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{E}^T\boldsymbol{AVB}) + \frac{t^2}{2}\|\boldsymbol{AVB}\|_F^2 \\ &= f(\boldsymbol{X}) + t\langle \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{EB}^T,\ \boldsymbol{V}\rangle_F + \frac{t^2}{2}\|\boldsymbol{AVB}\|_F^2. \end{aligned}$$

因此

$$\nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{A}^T(\boldsymbol{AXB} - \boldsymbol{C})\boldsymbol{B}^T, \qquad \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} f(\boldsymbol{X} + t\boldsymbol{V})\Big|_{t=0} = \|\boldsymbol{AVB}\|_F^2 \geq 0,$$

故 f 凸。若 $\boldsymbol{V} \mapsto \boldsymbol{AVB}$ 的核只有零矩阵，则 f 严格凸。

例 1-17：正定矩阵上的负对数行列式

设 $\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 为对称正定矩阵，定义

$$f(\boldsymbol{X}) = -\log\det(\boldsymbol{X}).$$

求它沿任意对称方向 $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}^T$ 的一阶、二阶方向导数，并判断其凸性。

提示：一阶部分就是例 1-6 已经算出的 $\nabla \log\det(\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{A}^{-T}$，这里再求二阶，用二阶刻画判断凸性。

例 1-17：正定矩阵上的负对数行列式

对 $f(\boldsymbol{X}) = -\log\det(\boldsymbol{X})$，计算方向导数并验证凸性。

解当 t 充分接近 0 时 $\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V}$ 仍正定。由例 1-6 的结论，

$$D_{\boldsymbol{V}} f(\boldsymbol{X}) = -\operatorname{tr}(\boldsymbol{X}^{-1}\boldsymbol{V}) = \langle -\boldsymbol{X}^{-1},\ \boldsymbol{V}\rangle_F, \qquad \nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}) = -\boldsymbol{X}^{-1}.$$

再求一次方向导数：

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} f(\boldsymbol{X}+t\boldsymbol{V})\bigg|_{t=0} = \operatorname{tr}(\boldsymbol{X}^{-1}\boldsymbol{V}\boldsymbol{X}^{-1}\boldsymbol{V}) = \left\|\boldsymbol{X}^{-1/2}\boldsymbol{V}\boldsymbol{X}^{-1/2}\right\|_F^2 \geq 0.$$

因此 $-\log\det(\boldsymbol{X})$ 在正定矩阵集合上是凸函数。
当 $\det(\boldsymbol{X}) \to 0^+$ 时 $f(\boldsymbol{X}) \to +\infty$，故它也是正定约束问题中的障碍函数。

1 矩阵函数 4
- 矩阵函数、梯度、方向导数 5
- 常见的矩阵函数 51
- 凸函数 * 59
- 凸优化 * 72

2 主成分分析 81
- 问题 82
- 记号与模型 86
- 主成分的可视化示例 98

3 奇异值分解 106
- 理论准备 107
- 习题演算 126
- 矩阵分解的应用：推荐系统和潜在语义分析 136
- 图像压缩 143

4 矩阵函数与因果发现算法模型 157
- 理论准备 158
- 问题 162
- 记号定义 164
- 模型建立 166
- 模型求解 170
- 小结 173

【定义 **1-8**】凸优化问题

优化问题

$$\min_{\boldsymbol{X}} \ f(\boldsymbol{X}) \qquad \text{s.t.} \ \ \boldsymbol{X} \in C$$

称为凸优化问题，若目标函数 f 是凸函数、可行集 C 是凸集。
特别地，$C = \mathbb{R}^{m\times n}$（无约束）时，问题凸等价于 f 凸；形如

$$\min_{\boldsymbol{X}} \ f(\boldsymbol{X}) \quad \text{s.t.} \ \ g_i(\boldsymbol{X}) \le 0 \ (i = 1, \dots, k)$$

的问题，当 f 与所有 g_i 都凸时即为凸优化（凸函数的下方水平集 $\{g_i \le 0\}$ 是凸集，凸集之交仍凸）。

记号：满足约束的点称为可行点；使 f 取到最小值的可行点称为（全局）最优点，记为 $\boldsymbol{X}^*$。

命题 1-5：凸优化的基本定理

在凸优化问题中，任一局部最优解都是全局最优解；若 f 严格凸，则最优解（若存在）唯一。

推论（可微情形的最优性条件）

设 f 可微且凸。无约束时，

$$\boldsymbol{X}^* \text{ 是最优解} \iff \nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}^*) = \boldsymbol{O}.$$

一般地，$\boldsymbol{X}^*$ 最优 $\iff \langle \nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}^*), \boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}^* \rangle \geq 0$ 对一切可行 $\boldsymbol{Y}$ 成立（沿任何可行方向都不下降，即方向导数非负）。

意义：对凸问题，令梯度为零就直接求出全局最优——这正是前面 MSE、Ridge 用正规方程一步得到闭式解的根本原因。

证明设 $\boldsymbol{X}^*$ 局部最优：存在 $\varepsilon > 0$，对满足 $\|\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}^*\|_F \le \varepsilon$ 的可行 $\boldsymbol{Y}$ 都有 $f(\boldsymbol{Y}) \ge f(\boldsymbol{X}^*)$。
任取可行点 $\boldsymbol{Z}$。由 C 凸，取 $\theta = \min\{1, \varepsilon / \|\boldsymbol{Z} - \boldsymbol{X}^*\|_F\} \in (0, 1]$，则

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{X}^* + \theta(\boldsymbol{Z} - \boldsymbol{X}^*) \in C, \qquad \|\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}^*\|_F = \theta \|\boldsymbol{Z} - \boldsymbol{X}^*\|_F \le \varepsilon,$$

故 $\boldsymbol{Y}$ 落在局部最优的邻域内，$f(\boldsymbol{Y}) \ge f(\boldsymbol{X}^*)$。又由 f 凸：

$$f(\boldsymbol{Y}) \le (1-\theta) f(\boldsymbol{X}^*) + \theta f(\boldsymbol{Z}) = f(\boldsymbol{X}^*) + \theta\big(f(\boldsymbol{Z}) - f(\boldsymbol{X}^*)\big),$$

两式合并得 $f(\boldsymbol{Z}) - f(\boldsymbol{X}^*) \ge 0$。由 $\boldsymbol{Z}$ 任意，$\boldsymbol{X}^*$ 是全局最优。
若 f 严格凸且 $\boldsymbol{X}_1^* \ne \boldsymbol{X}_2^*$ 都最优，则中点可行且

$$f\Big(\tfrac{\boldsymbol{X}_1^* + \boldsymbol{X}_2^*}{2}\Big) < \tfrac{1}{2} f(\boldsymbol{X}_1^*) + \tfrac{1}{2} f(\boldsymbol{X}_2^*) = f(\boldsymbol{X}_1^*),$$

矛盾，故最优解唯一。 □

例 1-18：凸优化问题

- 线性回归（**MSE**）：$\min_{\boldsymbol{w}} \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}\|_2^2$——无约束且目标凸，令梯度为零得闭式解 $\boldsymbol{w}^* = (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}$；
- **Ridge**：$\min_{\boldsymbol{w}} \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}\|_2^2 + \lambda\|\boldsymbol{w}\|_2^2$ （$\lambda > 0$）——目标严格凸（Hesse 阵 $2(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}+\lambda\boldsymbol{I}) \succ \boldsymbol{O}$），最优解存在且唯一；
- **LASSO**：$\min_{\boldsymbol{w}} \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}\|_2^2 + \lambda\|\boldsymbol{w}\|_1$——目标凸但不可微，不能用“梯度为零”，改用次梯度/近端算子迭代求解；
- 低秩逼近：$\min_{\boldsymbol{B}} \|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\|_F^2$ s.t. $\operatorname{rank}(\boldsymbol{B}) \le r$——目标凸，但秩约束集非凸，整体不是凸优化；第 3 章用 SVD 绕过这一困难。

上例的 Ridge/LASSO 还可以写成约束形式，用拉格朗日乘子统一处理——这正是凸优化“目标 + 凸约束”标准形态的典型样本。

例 1-19：Ridge 与 LASSO 回归的拉格朗日乘子式

在 MSE 上增加对 $\boldsymbol{w}$ 的约束，得到两个经典模型：

$$\text{Ridge:} \quad \min_{\boldsymbol{w}} \ \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}\|_2^2 \quad \text{s.t.} \quad \|\boldsymbol{w}\|_2^2 \le t,$$

$$\text{LASSO:} \quad \min_{\boldsymbol{w}} \ \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}\|_2^2 \quad \text{s.t.} \quad \|\boldsymbol{w}\|_1 \le t.$$

写出两者的拉格朗日函数，并说明乘子 λ 的作用。

例 1-19：Ridge 与 LASSO 回归的拉格朗日乘子式

Ridge：$\min \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}\|_2^2$ s.t. $\|\boldsymbol{w}\|_2^2 \le t$；LASSO：$\min \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}\|_2^2$ s.t. $\|\boldsymbol{w}\|_1 \le t$。

解引入拉格朗日乘子 $\lambda \ge 0$，把约束并入目标：

$$L_{\text{Ridge}}(\boldsymbol{w},\lambda) = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}\|_2^2 + \lambda\big(\|\boldsymbol{w}\|_2^2 - t\big),$$

$$L_{\text{LASSO}}(\boldsymbol{w},\lambda) = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}\|_2^2 + \lambda\big(\|\boldsymbol{w}\|_1 - t\big).$$

常数项 $-\lambda t$ 不影响 $\boldsymbol{w}$ 的最优解，删去即得常见的惩罚形式：

$$\hat{\boldsymbol{w}}_{\text{Ridge}} = \arg\min_{\boldsymbol{w}} \ \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}\|_2^2 + \lambda\,\|\boldsymbol{w}\|_2^2,$$

$$\hat{\boldsymbol{w}}_{\text{LASSO}} = \arg\min_{\boldsymbol{w}} \ \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}\|_2^2 + \lambda\,\|\boldsymbol{w}\|_1.$$

例 1-19：Ridge 与 LASSO 回归的拉格朗日乘子式

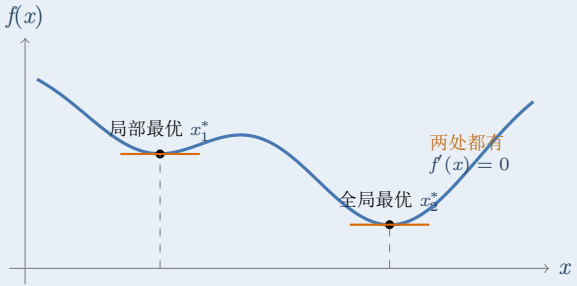
Ridge：$\min \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}\|_2^2$ s.t. $\|\boldsymbol{w}\|_2^2 \le t$；LASSO：$\min \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}\|_2^2$ s.t. $\|\boldsymbol{w}\|_1 \le t$。

解（续）

- λ 是权衡参数：λ 越大，约束越紧，$\boldsymbol{w}$ 被压得越靠近零；
- Ridge 的惩罚项 $\|\boldsymbol{w}\|_2^2 = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w}$（$L2$ 正则项）仍是二次型，目标严格凸，由凸优化的基本定理（命题 1-5）最优解唯一；梯度线性，解为 $\hat{\boldsymbol{w}} = (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X} + \lambda\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}$，闭式可求；
- LASSO 的惩罚项 $\|\boldsymbol{w}\|_1 = \sum_j |w_j|$（$L1$ 正则项）在 $w_j = 0$ 处不可微，只能借助次梯度或软阈值迭代求解；但也正是这种不可微，使解具有稀疏性（部分 w_j 恰为零）。

两种写法的对应

同一问题的约束形式与惩罚形式互为拉格朗日对偶。选哪一种写法，直接决定后面用什么工具求解。



非凸函数可以有多个“谷底”：x_1^* 满足 $f'(x)=0$、局部看最优，却不是全局最小 x_2^*。凸性保证这不会发生——这也是“把问题写成凸优化”成为建模目标的原因；VAE、GAN 的深度网络目标一般非凸，只能求到局部最优，与 MSE/Ridge 的凸情形形成鲜明对照。

本章到此收尾：把问题刻划成凸的目标函数 + 凸的约束，就能用“$\nabla f = \boldsymbol{O}$”一步求出全局最优。下一章 PCA 在约束集 $\{\|\boldsymbol{v}\|_2 = 1\}$ 上最大化二次型（非凸），我们改用特征值理论绕过凸性困难。

2. Outline

1. 矩阵函数 4
   - 矩阵函数、梯度、方向导数 5
   - 常见的矩阵函数 51
   - 凸函数 * 59
   - 凸优化 * 72
2. 主成分分析 81
   - 问题 82
   - 记号与模型 86
   - 主成分的可视化示例 98
3. 奇异值分解 106
   - 理论准备 107
   - 习题演算 126
   - 矩阵分解的应用：推荐系统和潜在语义分析 136
   - 图像压缩 143
4. 矩阵函数与因果发现算法模型 157
   - 理论准备 158
   - 问题 162
   - 记号定义 164
   - 模型建立 166
   - 模型求解 170
   - 小结 173

1 矩阵函数 4
- 矩阵函数、梯度、方向导数 5
- 常见的矩阵函数 51
- 凸函数 * 59
- 凸优化 * 72

2 主成分分析 81
- 问题 82
- 记号与模型 86
- 主成分的可视化示例 98

3 奇异值分解 106
- 理论准备 107
- 习题演算 126
- 矩阵分解的应用：推荐系统和潜在语义分析 136
- 图像压缩 143

4 矩阵函数与因果发现算法模型 157
- 理论准备 158
- 问题 162
- 记号定义 164
- 模型建立 166
- 模型求解 170
- 小结 173

把数据线性变换到新的坐标系，使得最能体现数据变化的方向能够被直接识别出来。
一组点的主成分是一串 J 个单位向量：第 j 个向量所代表的直线最贴合数据，且与前 $j-1$ 个向量正交。

要素

- 数据：$\{\boldsymbol{x}_i\}_{i=1}^n$，是（可能）相关变量的观测值，$\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^d$；
- 实坐标空间：单位向量 $\boldsymbol{v}_j \in \mathbb{R}^d$，$\boldsymbol{v}_j$ 与前 $j-1$ 个向量正交，且“最能刻画数据的变化”，$j = 1, 2, \ldots, J$。

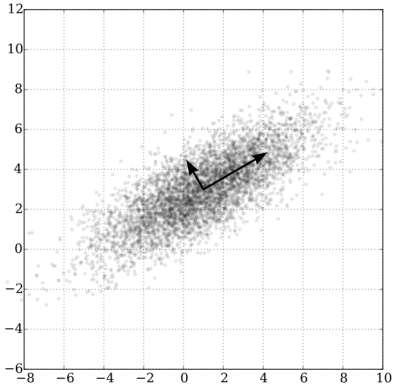


图 1: 多维高斯分布上的 PCA：中心位于 $(1, 3)$，在约 $(0.866, 0.5)$ 方向上标准差为 3，垂直方向上为 1。图中箭头是协方差矩阵的特征向量，按对应特征值的平方根缩放，并将起点平移至均值处。

如何选取投影向量？

如图所示，不同的投影方向带来不同的方差：左侧投影的方差明显大于右侧。问题于是转化为——怎样比较并选出“方差最大”的方向？投影坐标又该如何计算？

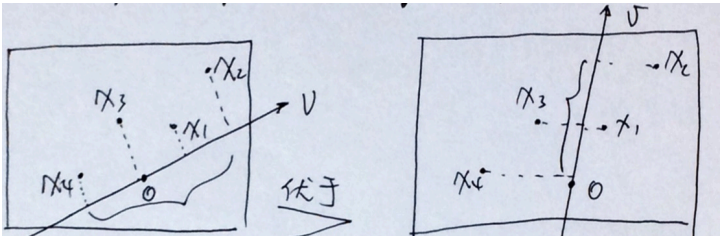


图 2: 四个样本点向不同的向量（方向）投影的示例。

1 矩阵函数 4
- 矩阵函数、梯度、方向导数 5
- 常见的矩阵函数 51
- 凸函数 * 59
- 凸优化 * 72

2 主成分分析 81
- 问题 82
- 记号与模型 86
- 主成分的可视化示例 98

3 奇异值分解 106
- 理论准备 107
- 习题演算 126
- 矩阵分解的应用：推荐系统和潜在语义分析 136
- 图像压缩 143

4 矩阵函数与因果发现算法模型 157
- 理论准备 158
- 问题 162
- 记号定义 164
- 模型建立 166
- 模型求解 170
- 小结 173

记号	含义
$\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^d$	第 i 个样本，$i = 1, 2, \ldots, l$
$\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{l \times d}$	数据矩阵，第 i 行为 $\boldsymbol{x}_i^T$
$\bar{\boldsymbol{x}}$	样本均值 $\frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} \boldsymbol{x}_i$
$\boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^d$	待求的投影方向（单位向量）
$y_i = \boldsymbol{v}^T \boldsymbol{x}_i$	第 i 个样本的投影坐标
$\boldsymbol{C} \in \mathbb{R}^{d \times d}$	协方差矩阵

约定：d 为特征维数，l 为样本个数，通常 $l \gg d$；投影方向一律取单位向量，即 $\|\boldsymbol{v}\| = 1$。

在 $\mathbb{R}^n$ 中讨论。若把 $\boldsymbol{\alpha}$ 投影到 $\boldsymbol{\beta}$ 上，则投影向量为

$$\frac{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})}\boldsymbol{\beta}=\frac{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{\|\boldsymbol{\beta}\|}\frac{\boldsymbol{\beta}}{\|\boldsymbol{\beta}\|},$$

而投影坐标（一个标量）为

$$\frac{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{\|\boldsymbol{\beta}\|}.$$

不失一般性，设 $\|\boldsymbol{\beta}\|=1$，此时投影坐标简化为内积 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=\boldsymbol{\alpha}^T\boldsymbol{\beta}$。

寻找使投影坐标方差最大的最优投影方向 $\boldsymbol{v}^*$：

$$\boldsymbol{v}^* = \arg\max_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^d} \{\sigma^2\}.$$

设共有 l 个样本 $\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^d$（$i = 1, 2, \ldots, l$），$\boldsymbol{v}$ 是它们要投影到的方向。
为记号的简洁，先设样本均值为零，即 $\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{0}$；记 σ^2 为全部投影坐标的方差，则

$$\sigma^2 = ?$$

计算投影坐标的方差：

$$\sigma^2 = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\left(\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{x}_i - 0\right)^2 = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\left(\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{x}_i\right)\left(\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{x}_i\right)^T$$

$$= \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{x}_i^T\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}^T\Big(\frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{x}_i^T\Big)\boldsymbol{v} =: \boldsymbol{v}^T\boldsymbol{C}\boldsymbol{v}.$$

注 1：在均值为零的情形，$\boldsymbol{C}$ 就是协方差矩阵。
注 2：把关于 $\boldsymbol{v}$ 的目标函数整理成二次型 $\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{C}\boldsymbol{v}$ 有何益处？——这样可以借用对称矩阵的特征值理论来求解。

若不假设样本均值为零，把 $\boldsymbol{x}_i$ 换成中心化后的 $\boldsymbol{x}_i - \overline{\mathbf{x}}$，上面的推导给出

$$\boldsymbol{C} = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}(\mathbf{x}_i - \overline{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_i - \overline{\mathbf{x}})^T = \mathbb{E}\big[(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{\mu})^T\big],$$

其中 $\boldsymbol{\mu} = \mathbb{E}[\boldsymbol{X}]$。
这正是通常所说的协方差矩阵（covariance matrix）。

带约束的优化问题为

$$\boldsymbol{v} = \underset{\boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^d,\ \|\boldsymbol{v}\|=1}{\arg\max}\ \boldsymbol{v}^T\boldsymbol{C}\boldsymbol{v}.$$

构造拉格朗日函数

$$f(\boldsymbol{v},\lambda) = \boldsymbol{v}^T\boldsymbol{C}\boldsymbol{v} - \lambda(\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{v} - 1).$$

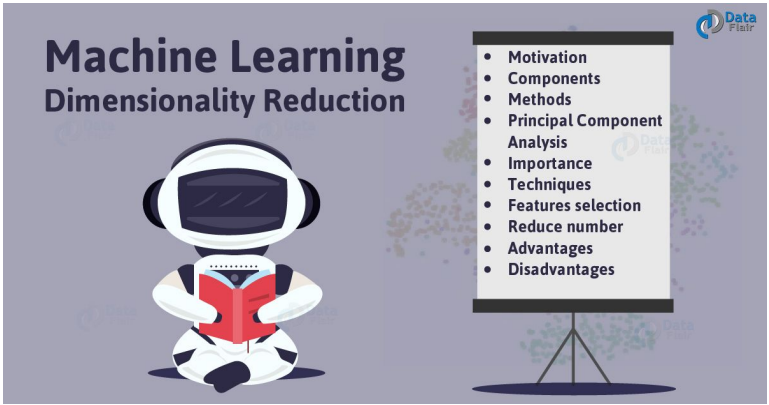
令 $\dfrac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}} = \boldsymbol{0}$，得

$$2\boldsymbol{C}\boldsymbol{v} - 2\lambda\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0} \implies \boldsymbol{C}\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}.$$

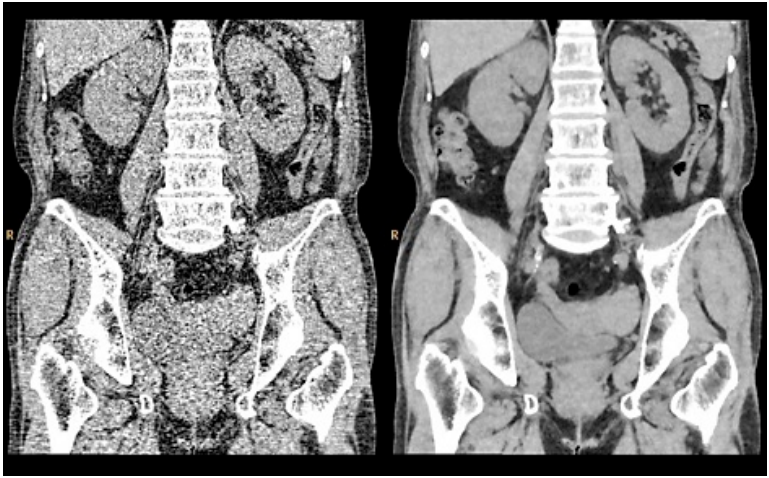
命题 2-1：最优投影方向满足特征值方程

寻优过程等价于求协方差矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的特征向量：投影方向 $\boldsymbol{v}$ 就是 $\boldsymbol{C}$ 的特征向量，对应的 λ 就是该方向上的方差。

把特征值（或奇异值）按降序排列，主要带来两类应用：特征约简（feature reduction，亦即降维 dimensionality reduction）与数据重构。



另一类应用是数据重构（data reconstruction）：



$a_1 \cdot$  $+ \quad a_2 \cdot$  $+ \quad a_3 \cdot$  $\approx$ 

$$\tilde{\boldsymbol{x}} = (a_1 \boldsymbol{v}_1) + (a_2 \boldsymbol{v}_2) + (a_3 \boldsymbol{v}_3) \approx \boldsymbol{x}, \qquad a_j = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{v}_j.$$

系数 a_j 就是投影坐标；这里只取 $J = 3$ 是便于图示，J 越大，重构越接近原图。

对特征值 λ_i 排序，依次获得不同的投影向量 $\boldsymbol{v}_i$。按降序排列后，可选取不同的 $\boldsymbol{v}_j$，把 $\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^d$ 投影过去，得到投影坐标

$$(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{v}_j) = \boldsymbol{x}_i^T \boldsymbol{v}_j.$$

特征约简（**feature reduction**）
取特征值最大的前 J 个 $\boldsymbol{v}_j$，用 J 元组替换原来的 $\boldsymbol{x}_i$：

$$\hat{\boldsymbol{x}}_i = \left(\boldsymbol{x}_i^T \boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{x}_i^T \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_i^T \boldsymbol{v}_J\right)^T.$$

这样就把 d 元向量降为 J 元向量，实现了数据降维。

数据重构（**data reconstruction**）
若用下面的近似表示样本 $\boldsymbol{x}_i$：

$$\tilde{\boldsymbol{x}}_i = (\boldsymbol{x}_i^T \boldsymbol{v}_1)\boldsymbol{v}_1 + (\boldsymbol{x}_i^T \boldsymbol{v}_2)\boldsymbol{v}_2 + \cdots + (\boldsymbol{x}_i^T \boldsymbol{v}_J)\boldsymbol{v}_J,$$

则 $\tilde{\boldsymbol{x}}_i$ 是 $\boldsymbol{x}_i$ 的一个低秩近似，即用前 J 个主成分重构原始数据。

思考

- 特征约简，是不是就是特征选择？
- 上述公式中，何谓“主成分”或“主成分向量”？数据重构还有哪些类似算法？

1 矩阵函数 4
- 矩阵函数、梯度、方向导数 5
- 常见的矩阵函数 51
- 凸函数 * 59
- 凸优化 * 72

2 主成分分析 81
- 问题 82
- 记号与模型 86
- 主成分的可视化示例 98

3 奇异值分解 106
- 理论准备 107
- 习题演算 126
- 矩阵分解的应用：推荐系统和潜在语义分析 136
- 图像压缩 143

4 矩阵函数与因果发现算法模型 157
- 理论准备 158
- 问题 162
- 记号定义 164
- 模型建立 166
- 模型求解 170
- 小结 173

一般而言，并不容易直观看出 $\boldsymbol{A}_i$ 与 $\boldsymbol{v}_j$ 长什么样。这里推荐一个很好的可视化例子。

在这个例子里，每个 $\boldsymbol{A}_i$ 是一个 4096 元组向量，代表一张人脸图片；$\boldsymbol{v}_j$ 就是所谓的“creepy faces”，代表脸部的不同特征。这些“creepy faces”的加权和可以重构出 $\boldsymbol{A}_i$。

数据来自 Olivetti 人脸数据集：40 个不同的人，每人 10 张图像；拍摄时间、光照、表情（睁眼/闭眼、微笑/不微笑）与细节（戴/不戴眼镜）各不相同，背景统一为深色，人物正面直立。

每个 $\boldsymbol{A}_i$ 是一个 4096 元组向量，对应一张人脸：



每个 $\boldsymbol{A}_i$ 可由下面这些“creepy faces”（$\boldsymbol{v}_j^T$）加权求和近似：



```
from sklearn.datasets import fetch_olivetti_faces
from sklearn.decomposition import PCA

import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline
faces = fetch_olivetti_faces()
print(faces.DESCR)
```

```
# 数据集中的前十个样本
fig = plt.figure(figsize=(10, 10))
for i in range(5):
    ax = plt.subplot2grid((1, 5), (0, i))
    ax.imshow(faces.data[i * 10].reshape(64, 64), cmap=plt.cm.gray)
    ax.axis('off')

# 计算 PCA
pca = PCA()
pca.fit(faces.data)
```



```
# “特征脸”保存在 components_ 属性中，下面是前四个
fig = plt.figure(figsize=(10, 10))
for i in range(4):
    ax = plt.subplot2grid((2, 2), (0, i))
    ax.imshow(pca.components_[i].reshape(64, 64), cmap=plt.cm.gray)
    ax.axis('off')
```



```
from skimage.io import imsave
face = faces.data[0]   # 用第一张人脸做重构演示

# 重构过程：第 k 帧其实是人脸的秩 k 近似。
# 第一步：把人脸变换到潜空间（latent space），
# 得到一个 400 维向量，第 k 个分量表示
# 第 k 个“特征脸”的权重
trans = pca.transform(face.reshape(1, -1))
```

```
# 第二步：重构。构造第 k 帧时，只用到前 k 个“特征脸”。
# 注意：这一步会保存 400 张 png 图片。
for k in range(400):
    rank_k_approx = trans[:, :k].dot(pca.components_[:k]) \
            + pca.mean_
    imsave('{:>03}'.format(str(k)) + '.jpg',
            rank_k_approx.reshape(64, 64))
```

3. Outline

1. 矩阵函数 4
   - 矩阵函数、梯度、方向导数 5
   - 常见的矩阵函数 51
   - 凸函数 * 59
   - 凸优化 * 72
2. 主成分分析 81
   - 问题 82
   - 记号与模型 86
   - 主成分的可视化示例 98
3. 奇异值分解 106
   - 理论准备 107
   - 习题演算 126
   - 矩阵分解的应用：推荐系统和潜在语义分析 136
   - 图像压缩 143
4. 矩阵函数与因果发现算法模型 157
   - 理论准备 158
   - 问题 162
   - 记号定义 164
   - 模型建立 166
   - 模型求解 170
   - 小结 173

1 矩阵函数 4
- 矩阵函数、梯度、方向导数 5
- 常见的矩阵函数 51
- 凸函数 * 59
- 凸优化 * 72

2 主成分分析 81
- 问题 82
- 记号与模型 86
- 主成分的可视化示例 98

3 奇异值分解 106
- 理论准备 107
- 习题演算 126
- 矩阵分解的应用：推荐系统和潜在语义分析 136
- 图像压缩 143

4 矩阵函数与因果发现算法模型 157
- 理论准备 158
- 问题 162
- 记号定义 164
- 模型建立 166
- 模型求解 170
- 小结 173

SVD 是一个知名的矩阵分解算法，广泛地（但并不限定）应用于以下场景：

- 图像压缩（image compression）；
- 矩阵补全（matrix completion）；
- 推荐系统（recommendation system）；
- 潜在语义索引（latent semantic indexing，亦作潜在语义分析）；
- ……

定理 3-1：奇异值分解（SVD）

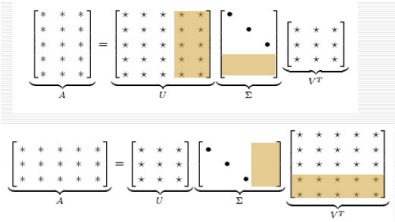
对秩为 r 的 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，存在如下分解

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\Sigma\boldsymbol{V}^T,$$

其中

- $\boldsymbol{U}$ 与 $\boldsymbol{V}$ 是正交矩阵：$\boldsymbol{U}$ 的列称为左奇异向量，是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T$ 的特征向量；$\boldsymbol{V}$ 的列称为右奇异向量，是 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 的特征向量；
- $\Sigma = \begin{pmatrix} \Delta & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix}$，称为奇异值矩阵；
- $\Delta = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r)$，而 $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值，按降序排列，衡量矩阵在对应方向上的“伸缩”程度；
- λ_i 是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T$（等价地，$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$）的特征值，$i = 1, 2, \ldots, r$，$r = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$。

以秩为 3 的 5×3 矩阵为例：



把分解式按列分块改写为

$$\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{A}_1, \boldsymbol{A}_2, \boldsymbol{A}_3) = (\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_5) \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{v}_1^T \\ \boldsymbol{v}_2^T \\ \boldsymbol{v}_3^T \end{pmatrix},$$

其中 $\boldsymbol{A}_i$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 列，$\boldsymbol{u}_k$ 是 $\boldsymbol{U}$ 的第 k 列，$\boldsymbol{v}_j$ 是 $\boldsymbol{V}$ 的第 j 列。

直接计算，上述分块乘法给出

$$\boldsymbol{A} = \sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^T + \sigma_2 \boldsymbol{u}_2 \boldsymbol{v}_2^T + \sigma_3 \boldsymbol{u}_3 \boldsymbol{v}_3^T.$$

因此，$\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^T + \sigma_2 \boldsymbol{u}_2 \boldsymbol{v}_2^T$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的一个低秩逼近（low-rank approximation）；

直接计算，上述分块乘法给出

$$\boldsymbol{A} = \sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^T + \sigma_2 \boldsymbol{u}_2 \boldsymbol{v}_2^T + \sigma_3 \boldsymbol{u}_3 \boldsymbol{v}_3^T.$$

因此，$\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^T + \sigma_2 \boldsymbol{u}_2 \boldsymbol{v}_2^T$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的一个低秩逼近（low-rank approximation）；一般地，对矩阵 $\boldsymbol{A}$，

$$\sum_{i=1}^{R} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^T$$

是 $\boldsymbol{A}$ 的一个秩不超过 R 的逼近。

两点总结

- 列向量表示：$\boldsymbol{A} = \sum_i \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^T$ 把矩阵分解为若干秩一矩阵（外积）之和。
- 数据压缩：若奇异值 σ_i 衰减很快，只需保留前 R 个较大的奇异值与对应向量，就能以很小的数据量还原矩阵的主要特征。

更进一步，Eckart–Young–Mirsky 定理保证了：这种" 取前 R 项" 的截断逼近，在所有秩不超过 R 的矩阵中是最优的——误差恰为被舍弃的奇异值平方和 $\sigma_{R+1}^2 + \cdots + \sigma_r^2$。

引理 3-2：$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T$ 的特征值非负

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$，则 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T$ 的特征值均为非负实数。

引理 3-2（回顾）：$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T$ 的特征值非负

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$，则 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T$ 的特征值均为非负实数。

证明 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T$ 均为实对称矩阵，故特征值都是实数。设 λ 是 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 的特征值，对应特征向量 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$，即 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$。两边左乘 $\boldsymbol{x}^T$：

$$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\,\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x} \implies \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|^2 = \lambda\,\|\boldsymbol{x}\|^2 .$$

左边 $\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|^2 \geq 0$，而 $\|\boldsymbol{x}\|^2 > 0$，故 $\lambda \geq 0$。对 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T$ 同理（把 $\boldsymbol{A}$ 换成 $\boldsymbol{A}^T$）。 □

引理 3-3：$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T$ 同秩

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$，则

$$r(\boldsymbol{A}) = r(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}) = r(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T).$$

引理 3-3（回顾）：$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T$ 同秩

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$，则 $r(\boldsymbol{A}) = r(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}) = r(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T)$。

证明先证 $r(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}) = r(\boldsymbol{A})$，只需证齐次方程组 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 与 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 同解。
若 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$，左乘 $\boldsymbol{A}^T$ 得 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$。反之，若 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$，左乘 $\boldsymbol{x}^T$ 得 $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|^2 = 0$，故 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$。
两方程组解空间相同，维数相等，故秩相等：$r(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}) = r(\boldsymbol{A})$。把 $\boldsymbol{A}$ 换成 $\boldsymbol{A}^T$ 即得 $r(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T) = r(\boldsymbol{A}^T) = r(\boldsymbol{A})$。 □

引理 3-4：$\boldsymbol{AA}^T$ 与 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 的非零特征值相同

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$，则 $\boldsymbol{AA}^T$ 与 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 具有相同的非零特征值。

引理 3-4（回顾）：$\boldsymbol{AA}^T$ 与 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 的非零特征值相同

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$，则 $\boldsymbol{AA}^T$ 与 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 具有相同的非零特征值。

证明设 $\lambda \neq 0$ 是 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 的特征值，$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{Ax} = \lambda \boldsymbol{x}$，其中 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$。两边左乘 $\boldsymbol{A}$：

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{Ax}) = \boldsymbol{A}(\lambda \boldsymbol{x}) \implies (\boldsymbol{AA}^T)(\boldsymbol{Ax}) = \lambda(\boldsymbol{Ax}).$$

若 $\boldsymbol{Ax} \neq \boldsymbol{0}$，则 λ 也是 $\boldsymbol{AA}^T$ 的特征值，对应特征向量为 $\boldsymbol{Ax}$。而若 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{0}$，则 $\lambda \boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{0}$，与 $\lambda \neq 0$、$\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ 矛盾。对称地，$\boldsymbol{AA}^T$ 的非零特征值也都是 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 的特征值。故两者非零特征值相同。□

引理 3-5：正交等价矩阵的奇异值相同

若 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 彼此正交等价（orthogonally equivalent），则它们具有相同的奇异值。

何谓正交等价：若存在正交矩阵 $\boldsymbol{U} \in \mathbb{R}^{m\times m}$、$\boldsymbol{V} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，使得

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{B}\boldsymbol{V},$$

则称 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 正交等价。即 $\boldsymbol{A}$ 可由 $\boldsymbol{B}$ 经左、右各乘一个正交矩阵得到。

引理 3-5（回顾）：正交等价矩阵的奇异值相同

若 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 彼此正交等价（orthogonally equivalent），则它们具有相同的奇异值。

证明设存在正交矩阵 $\boldsymbol{U} \in \mathbb{R}^{m\times m}$、$\boldsymbol{V} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，使得 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{UBV}$。则

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{UBV})^T(\boldsymbol{UBV}) = \boldsymbol{V}^T\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{UBV} = \boldsymbol{V}^T\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{BV}.$$

由于 $\boldsymbol{V}$ 正交，$\boldsymbol{V}^T = \boldsymbol{V}^{-1}$，于是

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}^{-1}(\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B})\boldsymbol{V},$$

即 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B}$ 相似，从而特征值相同，奇异值也相同。 □

再读一遍定理 3-1，下面予以证明（需用到前面的引理）。

奇异值分解（SVD）的分解结果

对秩为 r 的 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，存在如下分解

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\Sigma\boldsymbol{V}^T,$$

其中

- $\boldsymbol{U}$ 与 $\boldsymbol{V}$ 是正交矩阵：$\boldsymbol{U}$ 的列称为左奇异向量，是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T$ 的特征向量；$\boldsymbol{V}$ 的列称为右奇异向量，是 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 的特征向量；
- $\Sigma = \begin{pmatrix} \Delta & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix}$，称为奇异值矩阵；
- $\Delta = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r)$，而 $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值，按降序排列，衡量矩阵在对应方向上的“伸缩”程度；
- λ_i 是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T$（等价地，$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$）的特征值，$i = 1, 2, \ldots, r$，$r = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$。

证明由于 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 实对称，存在正交矩阵 $\boldsymbol{V}$，使得

$$\boldsymbol{V}^T(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})\boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} \Delta^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \Delta = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r), \quad \sigma_i^2 = \lambda_i \geq 0,$$

其中 λ_i 为 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 的特征值，$r = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$。

注：这里用到两个结论——实对称矩阵一定可以正交对角化（施密特正交化）；$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 的秩为 r，故恰有 r 个非零特征值。

把 $\boldsymbol{V}$ 分块：$\boldsymbol{V}=(\boldsymbol{V}_1,\boldsymbol{V}_2)$，其中 $\boldsymbol{V}_1$ 由前 r 列组成。代回上式得

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{V}_1^T\\ \boldsymbol{V}_2^T\end{pmatrix}(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})(\boldsymbol{V}_1,\boldsymbol{V}_2)=\begin{pmatrix}\boldsymbol{V}_1^T\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 & *\\ * & \boldsymbol{V}_2^T\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\Delta^2 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}.$$

比较两端，得到

$$\boldsymbol{V}_2^T\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2=(\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2)^T(\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2)=0\implies\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2=\boldsymbol{O},$$

$$\boldsymbol{V}_1^T\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1=(\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1)^T(\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1)=\Delta^2.$$

注：把 $\boldsymbol{V}$ 按前 r 列分块是一个关键技巧——右块给出 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2=\boldsymbol{O}$，左块给出 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1$ 的“长度”恰为 Δ。

为记号简洁，令

$$\boldsymbol{U}_1 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1\Delta^{-1}.$$

直接验证：

$$\boldsymbol{U}_1^T\boldsymbol{U}_1 = \Delta^{-1}\boldsymbol{V}_1^T\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1\Delta^{-1} = \Delta^{-1}\Delta^2\Delta^{-1} = \boldsymbol{I}_r,$$

即 $\boldsymbol{U}_1$ 的列是正交单位向量。
因此可用 $\boldsymbol{U}_2 \in \mathbb{R}^{m\times(m-r)}$ 扩充，使 $\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{U}_1, \boldsymbol{U}_2)$ 成为正交矩阵。

注：扩充总是可行的——先把 r 个线性无关向量扩充为 m 个向量的无关组，再施密特正交化并单位化，即得正交矩阵。

将已得的 $\boldsymbol{U}, \Sigma, \boldsymbol{V}$ 代入验证：

$$\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{U}_1^T \\ \boldsymbol{U}_2^T \end{pmatrix} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{V}_1, \boldsymbol{V}_2) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{U}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 & \boldsymbol{U}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2 \\ \boldsymbol{U}_2^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 & \boldsymbol{U}_2^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2 \end{pmatrix}.$$

由 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 = \boldsymbol{U}_1\Delta$、$\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2 = \boldsymbol{O}$、$\boldsymbol{U}_2^T\boldsymbol{U}_1 = \boldsymbol{O}$，上式化为

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{U}_1^T\boldsymbol{U}_1\Delta & \boldsymbol{U}_1^T(\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2) \\ \boldsymbol{U}_2^T\boldsymbol{U}_1\Delta & \boldsymbol{U}_2^T(\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \Sigma.$$

于是 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\Sigma\boldsymbol{V}^T$，定理得证。 □

1 矩阵函数 4
- 矩阵函数、梯度、方向导数 5
- 常见的矩阵函数 51
- 凸函数 * 59
- 凸优化 * 72

2 主成分分析 81
- 问题 82
- 记号与模型 86
- 主成分的可视化示例 98

3 奇异值分解 106
- 理论准备 107
- 习题演算 126
- 矩阵分解的应用：推荐系统和潜在语义分析 136
- 图像压缩 143

4 矩阵函数与因果发现算法模型 157
- 理论准备 158
- 问题 162
- 记号定义 164
- 模型建立 166
- 模型求解 170
- 小结 173

例 3-1：计算矩阵的 SVD 分解

求 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\Sigma\boldsymbol{V}^T$，其中

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

例 3-1：计算矩阵的 SVD 分解

求 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 1\end{pmatrix}$ 的奇异值分解。

解（i）计算 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$，求特征值与奇异值

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 2\end{pmatrix}.$$

由 $\left|\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}\right|=0$ 得 $(1-\lambda)(\lambda^2-3\lambda)=0$，故

$$\lambda_1=1,\qquad \lambda_2=3,\qquad \lambda_3=0,\qquad \Sigma=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \sqrt{3} & 0\end{pmatrix}.$$

例 3-1：计算矩阵的 SVD 分解

求 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 1\end{pmatrix}$ 的奇异值分解。

解（ii）求右奇异向量（$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 的单位特征向量）
按 $\lambda=1,3,0$ 的顺序：

$$\boldsymbol{v}_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-1\\ 1\\ 0\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{v}_2=\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}1\\ 1\\ 2\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{v}_3=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}-1\\ -1\\ 1\end{pmatrix},$$

故

$$\boldsymbol{V}=\begin{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}}\\ 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}.$$

例 3-1：计算矩阵的 SVD 分解

求 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&1\end{pmatrix}$ 的奇异值分解。

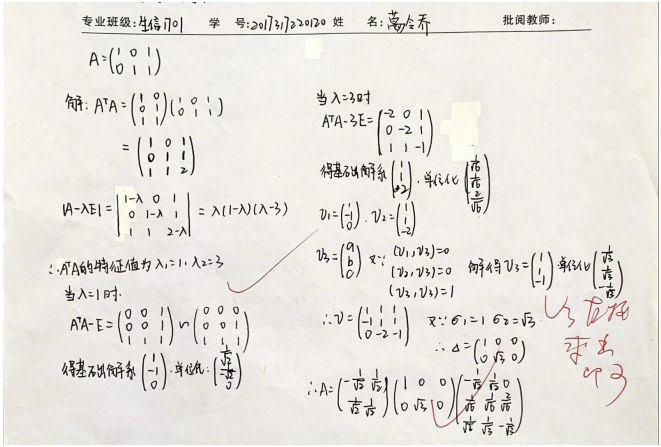
解（**iii**）由 $\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1\Delta^{-1}$ 构造 $\boldsymbol{U}$

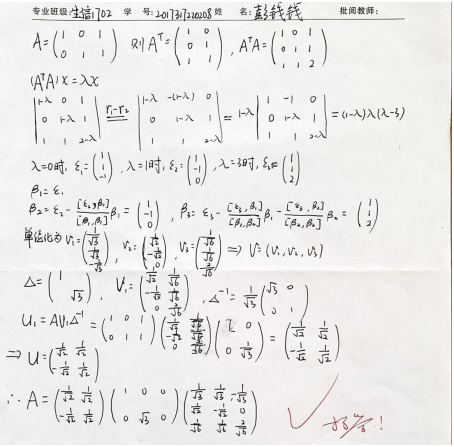
$$\boldsymbol{U}_1=\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{6}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{6}}\\0&\frac{2}{\sqrt{6}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&\frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}.$$

因 $r=2$ 且 $\boldsymbol{U}\in\mathbb{R}^{2\times2}$，$\boldsymbol{U}_1$ 已是完整的正交矩阵，无需扩充。最终

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&\sqrt{3}&0\end{pmatrix}\boldsymbol{V}^T,$$

其中 $\boldsymbol{V}^T$ 即上一页 $\boldsymbol{V}$ 的转置。


专业班级:生信2101 学 号:2011312220120 姓 名:蒋佳乔 批阅教师:
A=(1 0 1 / 0 1 1)
解: A^TA=(1 0 / 0 1 / 1 1)(1 0 1 / 0 1 1)
=(1 0 1 / 0 1 1 / 1 1 2)
|A-λE|=|1-λ 0 1 / 0 1-λ 1 / 1 1 2-λ| = λ(1-λ)(λ-3)
∴ATA的特征值为 λ1=1, λ2=3
当λ=1时.
ATA-E=(0 0 1 / 0 0 1 / 1 1 1) ~ (0 0 0 / 0 0 1 / 1 1 1)
得基础解系 (1 / -1 / 0) 单位化: (1/√2 / -1/√2 / 0)
当λ=3时
ATA-3E=(-2 0 1 / 0 -2 1 / 1 1 -1)
得基础解系 (1 / 1 / -2) 单位化 (1/√6 / 1/√6 / -2/√6)
v1=(-1 / 1 / 0) v2=(1 / 1 / -2)
v3=(a / b / c) x: (v1,v3)=0, (v2,v3)=0, (v2,v3)=1
解得 v3=(1 / 1 / -1) 单位化 (1/√3 / 1/√3 / -1/√3)
∴V=(-1 1 1 / 1 1 1 / 0 -2 -1)
x: σ1=1 σ2=√3
∴Δ=(1 0 0 / 0 √3 0)
∴A=(-1/√2 1/√2 / 1/√6 1/√6 / 1/√3 1/√3 1/√3)(1 0 0 / 0 √3 0)(1/√2 1/√6 0 / -1/√2 1/√6 0 / 0 -2/√6 1/√3)
求出了
好答!


专业班级:生信2102 学 号:2011312220083 姓 名:高钱钱 批阅教师:
A=(1 0 1 / 0 1 1) R(A^T=(1 0 / 0 1 / 1 1), A^TA=(1 0 1 / 0 1 1 / 1 1 2)
(A^TA)x=λx
|1-λ 0 1 / 0 1-λ 1 / 1 1 2-λ| r3-r1 |1-λ -(1-λ) 0 / 0 1-λ 1 / 1 1 2-λ| = (1-λ)λ(λ-3)
λ=0时, ξ1=(1 / 1 / -1), λ=1时, ξ2=(1 / -1 / 0), λ=3时, ξ3=(1 / 1 / 2)
β1=ξ1
β2=ξ2-[ξ2,β1]/[β1,β1] β1=(1/2 / 1/2 / 0), β3=ξ3-[ξ3,β1]/[β1,β1] β1-[ξ3,β2]/[β2,β2] β2=(1 / 1 / 2)
单位化为 v1=(1/√3 / 1/√3 / -1/√3), v2=(1/√2 / -1/√2 / 0), v3=(1/√6 / 1/√6 / 2/√6) ⇒ V=(v1,v2,v3)
Δ=(1 0 0 / 0 √3 0), U1=(1/√3 1/√2 1/√6 / 1/√3 -1/√2 1/√6 / -1/√3 0 2/√6), Δ^-1=1/√3 (√3 0 0 / 0 1 0)
U1=AV1Δ^-1=(1 0 1 / 0 1 1)(1/√3 1/√2 1/√6 / 1/√3 -1/√2 1/√6 / -1/√3 0 2/√6)(1/√3 0 0 / 0 1/√3 0)=(1/√2 1/√2 / -1/√2 1/√2)
⇒ U=(1/√2 1/√2 / -1/√2 1/√2)
∴A=(1/√2 1/√2 / -1/√2 1/√2)(1 0 0 / 0 √3 0)(1/√3 1/√3 -1/√3 / 1/√2 -1/√2 0 / 1/√6 1/√6 2/√6)
好答!

例 3-2：秩一矩阵的 SVD 分解

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$，求 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\Sigma\boldsymbol{V}^T$，其中

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

例 3-2：秩一矩阵的 SVD 分解

求 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$ 的奇异值分解。

解（i）计算 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$，求特征值与奇异值

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2 & 2\\ 2 & 2\end{pmatrix}.$$

由 $\left|\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}\right|=(2-\lambda)^2-4=0$ 得

$$\lambda_1=4,\qquad \lambda_2=0\quad\Longrightarrow\quad \sigma_1=2,\quad \sigma_2=0,\quad \Sigma=\begin{pmatrix}2 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}.$$

例 3-2：秩一矩阵的 SVD 分解

求 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$ 的奇异值分解。

解（ii）求右奇异向量（$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 的单位特征向量）
对应 $\lambda_1=4,\lambda_2=0$ 的单位特征向量为

$$\boldsymbol{v}_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{v}_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix},$$

故

$$\boldsymbol{V}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}.$$

例 3-2：秩一矩阵的 SVD 分解

求 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$ 的奇异值分解。

解（**iii**）由 $\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1\Delta^{-1}$ 构造 $\boldsymbol{U}$

$$\boldsymbol{U}_1=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\left(\frac{1}{2}\right)=\begin{pmatrix}\frac{2}{\sqrt{2}}\\ \frac{2}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\cdot\frac{1}{2}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}.$$

因 $r=1$，需补一列与 $\boldsymbol{U}_1$ 正交的单位向量，取 $\boldsymbol{u}_2=\left(\frac{1}{\sqrt{2}},-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^T$，于是

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}.$$

1 矩阵函数 4
- 矩阵函数、梯度、方向导数 5
- 常见的矩阵函数 51
- 凸函数 * 59
- 凸优化 * 72

2 主成分分析 81
- 问题 82
- 记号与模型 86
- 主成分的可视化示例 98

3 奇异值分解 106
- 理论准备 107
- 习题演算 126
- 矩阵分解的应用：推荐系统和潜在语义分析 136
- 图像压缩 143

4 矩阵函数与因果发现算法模型 157
- 理论准备 158
- 问题 162
- 记号定义 164
- 模型建立 166
- 模型求解 170
- 小结 173





矩阵分解应用：推荐系统。
用户—物品打分矩阵通常非常稀疏：我们只观测到少量评分，任务是把缺失项补全（matrix completion），再据此推荐。

参考：https://technotipsondatascience.wordpress.com/2018/10/22/recommendation-system/

设想一个视频网站：有成百上千万用户、成千上万部电影。每个用户只看过其中很少的一部分，并给看过的电影打分。

> 核心任务：根据已有的打分记录，预测" 用户 i 会不会喜欢电影 j"，把可能喜欢的作品主动推荐给用户。

把全部打分记录整理成一张大表——用户—物品打分矩阵 $\boldsymbol{A}$：

- 行对应用户，列对应物品（电影、商品、歌曲……）；
- 第 (i, j) 个元素 a_{ij} 是用户 i 给物品 j 的评分；
- 绝大多数 a_{ij} 是空白——用户根本没接触过这件物品。

推荐问题于是变成一个矩阵问题：把空白的 a_{ij} 补出来。

打分矩阵虽然巨大，但" 自由度" 远没有表面上那么多：

- 用户的口味由少数几个潜在因子决定——比如" 喜欢科幻还是爱情"" 偏好商业片还是文艺片"；
- 电影也可以按同样的潜在因子来描述——每部电影是这些因子的一个组合。

低秩假设：打分矩阵近似为低秩矩阵，

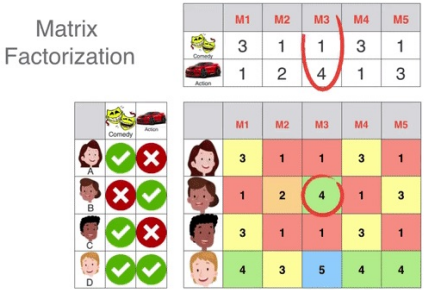
$$\boldsymbol{A} \approx \underbrace{\boldsymbol{P}}_{\text{用户}\times k} \underbrace{\boldsymbol{Q}^T}_{k\times\text{物品}}, \qquad k \ll \min\{m, n\}.$$

第 i 个用户用 k 维向量 $\boldsymbol{p}_i$（口味）刻画，第 j 个物品用 k 维向量 $\boldsymbol{q}_j$（属性）刻画，预测评分为 $\hat{a}_{ij} = \boldsymbol{p}_i^T \boldsymbol{q}_j$。

低秩假设：打分矩阵近似为低秩矩阵，

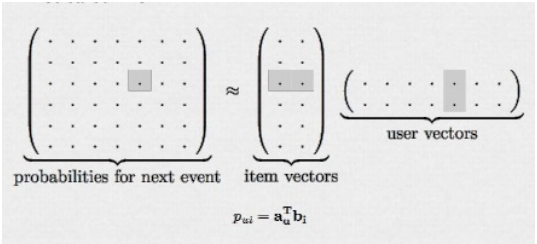
$$\boldsymbol{A} \approx \underbrace{\boldsymbol{P}}_{\text{用户}\times k} \underbrace{\boldsymbol{Q}^T}_{k\times\text{物品}}, \qquad k \ll \min\{m, n\}.$$

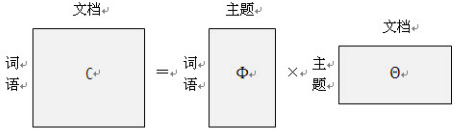
第 i 个用户用 k 维向量 $\boldsymbol{p}_i$（口味）刻画，
第 j 个物品用 k 维向量 $\boldsymbol{q}_j$（属性）刻画，
预测评分为 $\hat{a}_{ij} = \boldsymbol{p}_i^T \boldsymbol{q}_j$。



SVD（及其变体）正是从已知评分中分解出 $\boldsymbol{P}, \boldsymbol{Q}$、进而预测空白项的工具。

参考：How does Netflix recommend movies? Matrix Factorization. https://aitube.io/video/matrix-factorization/





矩阵分解应用：“潜在语义分析”算法和语义表示的构建。

潜在语义分析（**LSA/LSI**）的想法：不直接在"词"的层面对比文档，而是把词和文档都投影到一个低维的潜在语义空间，在那里比较。

构造词—文档矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$：

- 行对应词（共 m 个），列对应文档（共 n 篇）；
- 元素 a_{ij} 是词 i 在文档 j 中的（加权）词频。

对它做 SVD 并截断到前 k 个奇异值：

$$\boldsymbol{A} \approx \boldsymbol{U}_k \Sigma_k \boldsymbol{V}_k^T.$$

- $\boldsymbol{U}_k$ 的每一行：一个词在语义空间中的坐标；
- $\boldsymbol{V}_k$ 的每一行：一篇文档在语义空间中的坐标；
- 截断相当于把细碎的" 用词差异" 过滤掉，只留下主要的语义结构。

在这个空间里，" 汽车" 和" 轿车" 因为经常出现在相似文档中而彼此靠近——检索不再受词面差异的干扰。

1 矩阵函数 4
- 矩阵函数、梯度、方向导数 5
- 常见的矩阵函数 51
- 凸函数 * 59
- 凸优化 * 72

2 主成分分析 81
- 问题 82
- 记号与模型 86
- 主成分的可视化示例 98

3 奇异值分解 106
- 理论准备 107
- 习题演算 126
- 矩阵分解的应用：推荐系统和潜在语义分析 136
- 图像压缩 143

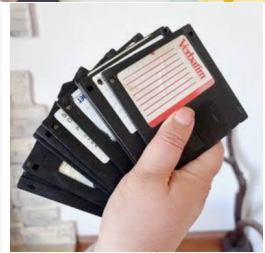
4 矩阵函数与因果发现算法模型 157
- 理论准备 158
- 问题 162
- 记号定义 164
- 模型建立 166
- 模型求解 170
- 小结 173


Imation
FLOPPY DISK
525 MF2D








Verbatim

```
library(jpeg)
img <- readJPEG(system.file("img", "xiajingbo.jpg", package="jpeg"))
if(exists("rasterImage")){
      plot(1:2, type='n')
      rasterImage(img, 1, 1, 2, 2)
}
```