Jacobian 雅克比矩阵与应用

Dezeming Family

2021 年 7 月 15 日

DezemingFamily 系列书和小册子因为是电子书，所以可以很方便地进行修改和重新发布。如果您获得了 DezemingFamily 的系列书，可以从我们的网站 [https://dezeming.top/] 找到最新版。对书的内容建议和出现的错误欢迎在网站留言。

20210823：发布第一版。

目录

一 雅可比矩阵的引入

在《函数对向量求导-通俗易懂的描述》中，我们已经介绍过了，我们将矩阵与向量相乘看做一个函数组，然后求导再根据所需要的形式进行组合。

尽管，从泛函的角度可以推导出更多更有深度的内容，但当前我还是想从矩阵和函数组的形式去认识一下雅克比矩阵。

首先回顾一下函数对向量求导构成的行向量形式矩阵：设函数组 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})=A\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{f}$ 为方程组，A 为矩阵，$\boldsymbol{x}$ 为向量。输出结果 $A\boldsymbol{x}$ 定义为 $\boldsymbol{f}=[f_1(\boldsymbol{x}),f_2(\boldsymbol{x}),...,f_m(\boldsymbol{x})]$，然后定义矩阵 $\boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x})$：

$$\boldsymbol{f}'=\begin{bmatrix}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial x_1} & \frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial x_n}\end{bmatrix} \tag{一.1}$$

$$=\begin{bmatrix}\frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & . & . & . & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}\\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & . & . & . & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}\\ . & . & . & . & . & .\\ . & . & . & . & . & .\\ . & . & . & . & . & .\\ \frac{f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & . & . & . & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}\end{bmatrix} \tag{一.2}$$

该矩阵就是对向量求导得到的雅克比矩阵，但有时候我们希望对矩阵进行求导，研究求导对矩阵的作用。

二　矩阵函数的偏导

我们知道，微分是一种线性运算（大家不要以为只有类似初中学习的 y=kx+b 才能叫线性），也就是满足交换律、结合律等一些线性性质的函数，而雅克比矩阵，就是微分的矩阵形式。

设矩阵函数 $F(A) = BA = C$，我们表示一下 B 和 A：

$$B = \begin{bmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} & \dots & b_{1,m} \\ b_{2,1} & b_{2,2} & \dots & b_{2,m} \\ . & . & \dots & . \\ . & . & \dots & . \\ . & . & \dots & . \\ b_{n,1} & b_{n,2} & \dots & b_{n,m} \end{bmatrix} \quad A = \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \dots & a_{2,n} \\ . & . & \dots & . \\ . & . & \dots & . \\ . & . & \dots & . \\ a_{m,1} & a_{m,2} & \dots & a_{m,n} \end{bmatrix} \tag{二.1}$$

我们得到的矩阵 C 表示为：

$$C_{i,j} = b_{i,1}a_{1,j} + b_{i,2}a_{2,j} + b_{i,3}a_{3,j} + \dots + b_{i,m}a_{m,j} \tag{二.2}$$

当 A 为自变量时，我们可以尝试把 $dF(A)$ 偏微分进行排列，我们知道矩阵 F 得到的结果仍然是一个矩阵，那么将 $\frac{\partial C}{\partial A_{i,j}}$ 进行排列以后（不管是按行的方式进行排列还是按列的方式进行排列），得到了一个更大的矩阵。

据此，回想《函数对向量求导——通俗易懂的描述》我们可以更好的感受到，矩阵函数微分形式是为了方便运算而构建的。

三　不同函数种类的描述

上面说的内容并没有进行统一的符号描述，为了后面更好的进行分析，这里我们统一一下符号。

我们设不加粗的函数 f 表示映射到标量的函数，设加粗小写的函数 $\boldsymbol{f}$ 为映射到向量的函数，设加粗大写的函数 $\boldsymbol{F}$ 为映射到矩阵的函数。设 $\boldsymbol{x}$ 为 m 维向量，$\boldsymbol{X}$ 为 $m \times n$ 的矩阵。于是：

函数类型	变量为向量	变量为矩阵
f	$f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$	$f : \mathbb{R}^{m\times n} \to \mathbb{R}$
$\boldsymbol{f} \in \mathbb{R}^p$	$\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^p$	$\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^{m\times n} \to \mathbb{R}^p$
$\boldsymbol{F} \in \mathbb{R}^{p\times q}$	$\boldsymbol{F} : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^{p\times q}$	$\boldsymbol{F} : \mathbb{R}^{m\times n} \to \mathbb{R}^{p\times q}$

我们设某个函数表示为 $\mathbb{F}$，可以是任意种类的函数，例如 f、$\boldsymbol{f}$ 或 $\boldsymbol{F}$。

最简单的情况就是向量函数，不管输出是什么，都比较容易进行排列。而最难的，则是矩阵函数。

3 1　向量函数

首先是向量函数，$a = \mathbb{F}(\boldsymbol{x})$，$\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, ..., x_m]^T$ 是列向量。我们不知道最后得到的 a 究竟是什么类型的数据，它可能是一个标量数，可能是一个向量，甚至是一个矩阵，我们先不用在意它的形式，但我们知道，如果 a 是标量，则 $\frac{\partial \mathbb{F}}{\partial x_i}$ 就是一个标量，如果 a 是一个向量，那么 $\frac{\partial \mathbb{F}}{\partial x_i}$ 就是同样维度的向量。

偏导算子变为行向量形式 $\boldsymbol{x}^T$ 时，偏导表示为行向量偏导：

$$D\mathbb{F} = \frac{\partial \mathbb{F}}{\partial \boldsymbol{x}^T} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbb{F}}{\partial x_1} & \frac{\partial \mathbb{F}}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial \mathbb{F}}{\partial x_m} \end{bmatrix} \tag{三.1}$$

偏导算子为行向量形式 $\boldsymbol{x}$ 时，表示为梯度向量：

$$D\mathbb{F} = \frac{\partial \mathbb{F}}{\partial \boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbb{F}}{\partial x_1} & \frac{\partial \mathbb{F}}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial \mathbb{F}}{\partial x_m} \end{bmatrix}^T \tag{三.2}$$

3 2 输出为标量的矩阵函数

对于某个输入为矩阵 $\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^{m\times n}$，输出为标量的函数 $f(\boldsymbol{X})$，可以得到如下偏导形式，这个形式就叫做矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的Jacobian 矩阵：

$$Df=\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T}=\begin{bmatrix}\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1,1}} & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{2,1}} & \dots & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{m,1}}\\ \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1,2}} & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{2,2}} & \dots & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{m,2}}\\ . & . & \dots & .\\ \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1,n}} & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{2,n}} & \dots & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{m,n}}\end{bmatrix}\in\mathbb{R}^{n\times m} \tag{三.3}$$

我们也可以将 $\boldsymbol{X}$ 矩阵展开为行向量：

$$vec(\boldsymbol{X})^T=[x_{1,1},..,x_{m,1},...,x_{1,n},...,x_{m,n}] \tag{三.4}$$

于是就能得到行向量偏导形式：

$$Df=\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial vec(\boldsymbol{X})^T} \tag{三.5}$$

$$=\begin{bmatrix}\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1,1}} & \dots & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{m,1}} & \dots & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1,n}} & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{m,n}}\end{bmatrix} \tag{三.6}$$

这些表示形式在控制论和系统分析中都会用到，并且由于它们只是表示形式的不同，它们之间可以相互转化。

偏导的梯度向量表示形式为：

$$\nabla_{vec(\boldsymbol{X})}f=\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial vec(\boldsymbol{X})} \tag{三.7}$$

$$=\begin{bmatrix}\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1,1}} & \dots & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{m,1}} & \dots & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1,n}} & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{m,n}}\end{bmatrix}^T \tag{三.8}$$

以及转化为梯度矩阵的形式：

$$\nabla_{\boldsymbol{X}}f=\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}=\begin{bmatrix}\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1,1}} & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1,2}} & \dots & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1,n}}\\ \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{2,1}} & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{2,2}} & \dots & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{2,n}}\\ . & . & \dots & .\\ \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{m,1}} & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{m,2}} & \dots & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{m,n}}\end{bmatrix}\in\mathbb{R}^{m\times n} \tag{三.9}$$

因此，梯度矩阵等于雅克比矩阵的转置。

3 3 输出为矩阵的矩阵函数

我们可以把函数 $\boldsymbol{F}$ 当做是一堆标量函数的组合，即：

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})=\begin{bmatrix}f_{1,1}(\boldsymbol{X}) & f_{1,2}(\boldsymbol{X}) & \dots & f_{1,q}(\boldsymbol{X})\\ f_{2,1}(\boldsymbol{X}) & f_{2,2}(\boldsymbol{X}) & \dots & f_{2,q}(\boldsymbol{X})\\ . & . & \dots & .\\ f_{p,1}(\boldsymbol{X}) & f_{p,2}(\boldsymbol{X}) & \dots & f_{p,q}(\boldsymbol{X})\end{bmatrix}\in\mathbb{R}^{p\times q} \tag{三.10}$$

对于行偏导矩阵，即 $\frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T}$，可能有多种表示形式，例如下面的三种方式（注意 $\frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T}\in\mathbb{R}^{pn\times qm}$）：

方式一：

$$\frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T}=\begin{bmatrix}\frac{\partial f_{1,1}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T} & \frac{\partial f_{1,2}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T} & \dots & \frac{\partial f_{1,q}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T}\\ \frac{\partial f_{2,1}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T} & \frac{\partial f_{2,2}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T} & \dots & \frac{\partial f_{2,q}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T}\\ . & . & \dots & .\\ \frac{\partial f_{p,1}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T} & \frac{\partial f_{p,2}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T} & \dots & \frac{\partial f_{p,q}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T}\end{bmatrix}\in\mathbb{R}^{pn\times qm} \tag{三.11}$$

方式二：

$$\left(\frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T}\right)_{i,j}=\begin{bmatrix}\frac{\partial f_{1,1}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{j,i}} & \frac{\partial f_{1,2}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{j,i}} & \cdots & \frac{\partial f_{1,q}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{j,i}}\\ \frac{\partial f_{2,1}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{j,i}} & \frac{\partial f_{2,2}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{j,i}} & \cdots & \frac{\partial f_{2,q}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{j,i}}\\ . & . & \cdots & .\\ \frac{\partial f_{p,1}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{j,i}} & \frac{\partial f_{p,2}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{j,i}} & \cdots & \frac{\partial f_{p,q}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{j,i}}\end{bmatrix} \quad j\in(1,m), i\in(1,n) \tag{三.12}$$

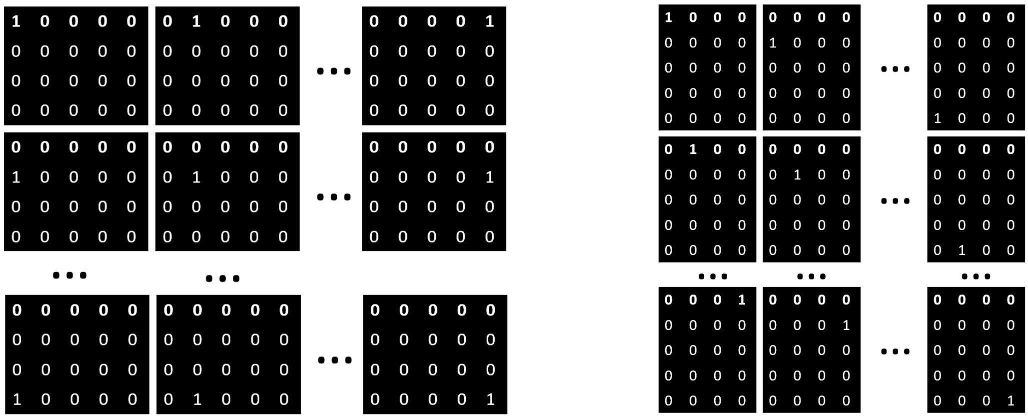
方式三：

$$\frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T}=\begin{bmatrix}\frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1,1}} & \frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{2,1}} & \cdots & \frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{m,1}}\\ \frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1,2}} & \frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{2,2}} & \cdots & \frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{m,2}}\\ . & . & \cdots & .\\ \frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1,n}} & \frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{2,n}} & \cdots & \frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})}{\partial x_{m,n}}\end{bmatrix} \tag{三.13}$$

但是这些定义方式都“不对”，不对的原因是它们在形成行向量偏导时有可能生成错误的雅克比矩阵。比如 [1] 中给的例子：$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{X}$，按照雅可比矩阵的理解，我们思考一下标量函数，$f(x)=x$，则导数为 1，可知对于 $\boldsymbol{F}$ 的导数也应该是矩阵中的“1”，也就是单位矩阵 $I^{pn\times qm}$，注意这里的 $p=m, q=n$，雅克比矩阵应该是 $I^{mn\times mn}$。

但是如果按照上面的定义方式，比如按照方式一，根据书 [1] 上的描述，设 $m=4, n=5$，会生成下图左边这个矩阵，其实就是 $vec(I^{m\times m})vec(I^{n\times n})^T$，这个矩阵的秩为 1，显然不是单位矩阵。

但我觉得书 [1] 上写错了，因为在每个矩阵块里，$\frac{\partial f_{i,j}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T}$ 为 1 的元素在坐标 (j,i) 下，所以按照方法一，行向量矩阵应该表示为下图右边这个矩阵。不过很显然这个矩阵也不是正确的雅克比矩阵。



于是，数学家定义了一种雅克比矩阵的好的定义，首先把矩阵函数列向量化，即把 $p\times q$ 的函数变为 $pq\times 1$ 的列向量：

$$vec(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X}))=\begin{bmatrix}f_{1,1}(\boldsymbol{X}) & f_{2,1}(\boldsymbol{X}) & \ldots & f_{p,1}(\boldsymbol{X}) & f_{1,2}(\boldsymbol{X}) & \ldots & f_{1,q}(\boldsymbol{X}) & \ldots & f_{p,1}(\boldsymbol{X})\end{bmatrix}^T \tag{三.14}$$

然后偏导的定义就是：

$$D\boldsymbol{F}=\frac{\partial vec(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X}))}{\partial(vec(\boldsymbol{X}))^T}\in\mathbb{R}^{pq\times mn} \tag{三.15}$$

其中:

$$\frac{\partial f_{i,j}}{\partial(vec(\boldsymbol{X}))^T}=\begin{bmatrix}\frac{\partial f_{i,j}}{\partial x_{1,1}} & \ldots & \frac{\partial f_{i,j}}{\partial x_{m,1}} & \ldots & \frac{\partial f_{i,j}}{\partial x_{1,n}} & \ldots & \frac{\partial f_{i,j}}{\partial x_{m,n}}\end{bmatrix} \tag{三.16}$$

对于上面的例子，$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{X}$，在偏导矩阵中，只有当 f 的下标和 x 的下标相同的位置才是 1，其他位置都是 0，所以我们就能得到正确的雅克比矩阵。

最后我们来看一下梯度矩阵。

如果按照以往的形式来定义梯度矩阵，比如下面，就不是一个正确的定义：

$$\nabla\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})=\frac{\partial vec\Big(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})\Big)^T}{\partial vec(\boldsymbol{X})}=\begin{bmatrix}\frac{\partial f_{1,1}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} & \frac{\partial f_{1,2}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} & \cdots & \frac{\partial f_{1,q}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}\\ \frac{\partial f_{2,1}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} & \frac{\partial f_{2,2}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} & \cdots & \frac{\partial f_{2,q}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}\\ . & . & \cdots & .\\ \frac{\partial f_{p,1}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} & \frac{\partial f_{p,2}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} & \cdots & \frac{\partial f_{p,q}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}\end{bmatrix}\in\mathbb{R}^{pn\times qm} \tag{三.17}$$

我们还是用例子：$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{X}$，这种定义给出的是错误的梯度矩阵：$\boldsymbol{I}_n(\boldsymbol{I}_m)^T$，而正确的梯度矩阵应该是 $\boldsymbol{I}_{mn}$。

我们应该用雅克比矩阵的转置来得到梯度矩阵：

$$\nabla\boldsymbol{F}=(D\boldsymbol{F})^T \tag{三.18}$$

这样的定义就是正确的了。

四　总结

由于本人不是主要从事控制系统的研究，所以对于雅克比矩阵的介绍就暂时到这里。相信对书 [1] 的内容存在疑惑的人可以从本书中找到更清晰的解释。

鉴于此，本书虽然 7 月份就开始着手写，但由于一些其他原因，导致该工作暂停，从 8 月 19 号又开始写了一部分，并最终决定于 8 月 23 号就发布第一版。

参考文献

[1] 张贤达. 矩阵分析与应用. 第 2 版 [M]. 清华大学出版社, 2013.

[2] https://www.zhihu.com/question/22586361/answer/526286105