

Матрично-векторное дифференцирование

$$f(x) = x^T A x, \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n}.$$

$$\nabla f(x) = ?$$

$$f(x) = \sum_{i,j} a_{ij} x_i x_j.$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_k} = \sum_{i \neq k} a_{ik} x_i + \sum_{j \neq k} a_{kj} x_j + a_{kk} x_k$$

$$= \sum_{i \neq k} a_{ik} x_i + \sum_{j \neq k} a_{kj} x_j = (Ax)_k + (A^T x)_k$$

$$\Rightarrow \nabla f(x) = (A + A^T) x.$$

Метод неудобный.

Нужно разбивать матричное выражение на суммы, а потом снова собирать.

Задача. Исчисления.

Таблица стандартных формул.

$$d(C^T x) = C^T dx.$$

$$d(x^T A x) = x^T (A + A^T) dx.$$

$$d \det X = \det X \operatorname{tr}(X^{-1} dx), \det X \neq 0$$

$$d \operatorname{tr}(X) = \operatorname{tr}(dx)$$

$$dX^{-1} = -X^{-1} dX \cdot X^{-1}$$

Правила формул.

$$d0 = 0$$

$$d(X + Y) = dX + dY$$

$$d(X \cdot Y) = dX \cdot Y + X \cdot dY$$

$$d\left(\frac{X}{q}\right) = \frac{dX \cdot q - X dq}{q^2}, q \in \mathbb{R}.$$

$$d(AXB) = A dX B.$$

Пример:

① Лин. регрессия:

$$\{x_i, y_i\}_{i=1}^N, \quad x_i \in \mathbb{R}^D, \quad y_i \in \mathbb{R}$$

Решающее уравнение: $g(x) = w^T \cdot x$.

$$F(w) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - w^T \cdot x_i)^2 =$$

$$= \frac{1}{N} \|y - Xw\|_2^2 \xrightarrow{w \in \mathbb{R}^D} \min_{w \in \mathbb{R}^D}$$

\downarrow
 $X \in \mathbb{R}^{N \times D}$

$$F(w) = \frac{1}{N} (y - Xw)^T (y - Xw) =$$

$$= \frac{1}{N} \left[\underbrace{y^T y}_{\uparrow \mathbb{R}} - \underbrace{y^T Xw}_{\uparrow \mathbb{R}} - \underbrace{w^T X^T y}_{\uparrow \mathbb{R}} + \underbrace{w^T X^T X w}_{\uparrow \mathbb{R}} \right] =$$

$$= \frac{1}{N} [y^T y - 2w^T X^T y + w^T X^T X w]$$

$$dF = \frac{1}{N} [0 - 2dw^T X^T y + w^T (X^T X + (X^T X)^T) dw]$$

$$dF = \frac{1}{N} [-2dw^T X^T y + 2w^T X^T X dw] \quad \textcircled{=}$$

Каноническая форма дифференциала

$\mathbb{R} \setminus V$	\mathbb{R}	\mathbb{R}^p	$\mathbb{R}^{p \times q}$
\mathbb{R}	$f'(x)dx$	ВЕКТОР $\nabla f(x)dx$	МАТРИЦА $\nabla f(x)dx$
\mathbb{R}^m	$\nabla f(x)^T dx$	ЯКОБИАН $J(x)dx$	
$\mathbb{R}^{m \times n}$	$\langle \nabla f(x), dx \rangle$		

В нашем случае, мы из вектора получаем число.

$$\Leftrightarrow d w^T \cdot \frac{1}{n} \cdot \underbrace{[-2 X^T y + 2 X^T X w]}_{\downarrow \nabla F(w)}$$

$$\nabla F(w) = \frac{2}{n} \cdot X^T (Xw - y) = 0$$

$$\Rightarrow w_{opt} = (X^T \cdot X)^{-1} \cdot X^T \cdot y.$$

Дифференциал сложной функции.

$$h(x) := f(g(x)).$$

$$h(x) \cdot [dx] = df(y) \cdot [dg] = df(g(x)) \cdot [dg(x) \cdot [dx]]$$

Пример:

$$h(x) = \frac{1}{3} \|x\|^3 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}.$$

$$\frac{1}{3} (x^T \cdot x)^{3/2}$$

$$h(x) = f(g(x)).$$

$$g(x) = x^T x \Rightarrow dg = 2x^T dx$$

$$f(y) = \frac{1}{3} y^{3/2} \Rightarrow df = \frac{1}{3} \cdot \frac{3}{2} y^{1/2} dy.$$

$$dh(x) [dx] = \frac{1}{2} (x^T x)^{1/2} \cdot 2x^T dx = \|x\| \cdot x^T dx.$$

$$\nabla h(x) = \|x\| \cdot x.$$

$$f(X) = \text{tr}(AX^{-1}B)$$

$$df = \text{tr}(A dX^{-1}B) = \text{tr}(A \cdot (-X^{-1}dX \cdot X^{-1})B)$$

$$= -\text{tr}(X^{-1}B \cdot A X^{-1}dX)$$

$$\Rightarrow \nabla f(X) = X^{-T} A^T B^T X^{-T}$$