Семинар 1
Матричное дифференцирование

Титов Владислав

vladislav.v.titov@yandex.ru

ВШЭ, 2020

ЗАДАЧА 1.1

$$\frac{\partial a^T x}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_j a_j x_j$$

ЗАДАЧА 1.1

$$\frac{\partial a^T x}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_j a_j x_j = a_i$$

ЗАДАЧА 1.1

Поэтому

$$\nabla_x \, a^T x = a$$

ЗАДАЧА 1.1

Так как скалярное произведение симметрично $a^T \mathrm{x} = x^T a$.

Следовательно,

$$\nabla_x x^T a = a$$

ЗАДАЧА 1.2

Воспользуемся теоремой Лапласа о разложении определителя по строке:

$$\frac{\partial}{\partial A_{ij}} \det A = \frac{\partial}{\partial A_{ij}} \left[\sum_k (-1)^{i+k} A_{ik} M_{ik} \right] = (-1)^{i+j} M_{ij},$$

где M_{ik} - дополнительный минор матрицы A.

ЗАДАЧА 1.2

Вспомним формулу для элементов обратной матрицы:

$$(A^{-1})_{ij} = \frac{1}{\det A}(-1)^{i+j} M_{ji}$$

ЗАДАЧА 1.2

Подставляя выражение для дополнительного минора, получаем ответ:

$$\nabla_A \det A = (\det A) A^{-T}$$

ЗАДАЧА 1.3

$$\frac{\partial}{\partial A_{ij}} \operatorname{tr}(AB) = \frac{\partial}{\partial A_{ij}} \sum_k (AB)_{kk}$$

ЗАДАЧА 1.3

$$\frac{\partial}{\partial A_{ij}}\operatorname{tr}(AB) = \frac{\partial}{\partial A_{ij}}\sum_{k}(AB)_{kk} = \frac{\partial}{\partial A_{ij}}\sum_{k,l}A_{kl}\,B_{lk}$$

ЗАДАЧА 1.3

$$\frac{\partial}{\partial A_{ij}}\mathrm{tr}(AB) = \frac{\partial}{\partial A_{ij}}\sum_{k}(AB)_{kk} = \frac{\partial}{\partial A_{ij}}\sum_{k,l}A_{kl}\,B_{lk} = B_{ji}$$

ЗАДАЧА 1.3

Таким образом, получаем ответ:

$$\nabla_A \mathrm{tr}(AB) = B^T$$

ЗАДАЧА 1.4

Так как произведение вектора на матрицу на вектор в результате дает число:

$$\nabla_A x^T A y = \nabla_A \mathrm{tr}(x^T A y)$$

ЗАДАЧА 1.4

Вспомним циклическое свойство следа матрицы (для матриц подходящего размера):

$$\mathrm{tr}(ABC) = \mathrm{tr}(BCA) = \mathrm{tr}(CAB)$$

Применим:

$$\nabla_A x^T A y = \nabla_A \mathrm{tr}(x^T A y) = \nabla_A \mathrm{tr}(A y x^T)$$

ЗАДАЧА 1.4

Воспользуемся результатом предыдущей задачи:

$$\nabla_A x^T A y = \nabla_A \mathrm{tr}(x^T A y) = \nabla_A \mathrm{tr}(A y x^T) = x y^T$$

ДИФФЕРЕНЦИАЛ ПРОИЗВЕДЕНИЯ МАТРИЦ

$$A \in \mathbb{R}^{p\times n}, B \in \mathbb{R}^{n\times q}$$

Необходимо доказать:

$$\mathrm{d}(AB) = \mathrm{d}(A)B + \mathrm{Ad}(\mathrm{B})$$

ДИФФЕРЕНЦИАЛ ПРОИЗВЕДЕНИЯ МАТРИЦ

$$\mathrm{d}(AB) = \sum_{ij} \frac{\partial (AB)}{\partial a_{ij}} \mathrm{d}a_{ij} + \sum_{ij} \frac{\partial (AB)}{\partial b_{ij}} \mathrm{d}b_{ij}$$

ДИФФЕРЕНЦИАЛ ПРОИЗВЕДЕНИЯ МАТРИЦ

Обозначим:

$$W = AB$$

Тогда:

$$w_{kl} = \sum_{r=1}^{n} a_{kr}\, b_{rl}$$

Дифференциал произведения матриц

$$\frac{\partial w_{kl}}{\partial a_{ij}} = \begin{cases} 0, & k \neq i \\ b_{jl}, & k = i \end{cases}$$

ДИФФЕРЕНЦИАЛ ПРОИЗВЕДЕНИЯ МАТРИЦ

$$\frac{\partial(AB)}{\partial a_{ij}} = \left(\frac{\partial w_{kl}}{\partial a_{ij}}\right)_{pq} = \begin{array}{cc} \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ b_{j1} & \ddots & b_{jq} \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} & \begin{matrix} 1 \\ \vdots \\ i \\ \vdots \\ p \end{matrix} \end{array}$$

Дифференциал произведения матриц

Тогда:

$$\sum_{ij} \frac{\partial(AB)}{\partial a_{ij}} \mathrm{d}a_{ij} = \sum_{ij} \begin{array}{c} \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ b_{j1}\mathrm{d}a_{ij} & \ddots & b_{jq}\mathrm{d}a_{ij} \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{c} 1 \\ \vdots \\ i \\ \vdots \\ p \end{array} =$$

$$= \sum_{j} \begin{pmatrix} b_{j1}\mathrm{d}a_{1j} & \cdots & b_{jq}\mathrm{d}a_{1j} \\ \vdots & & \vdots \\ b_{j1}\mathrm{d}a_{ij} & \ddots & b_{jq}\mathrm{d}a_{ij} \\ \vdots & & \vdots \\ b_{j1}\mathrm{d}a_{pj} & \cdots & b_{jq}\mathrm{d}a_{pj} \end{pmatrix} \begin{array}{c} 1 \\ \vdots \\ i \\ \vdots \\ p \end{array}$$

ДИФФЕРЕНЦИАЛ ПРОИЗВЕДЕНИЯ МАТРИЦ

$$\sum_{ij} \frac{\partial (AB)}{\partial a_{ij}} \mathrm{d}a_{ij} = \begin{array}{cc} \begin{pmatrix} \sum\limits_j b_{j1} \mathrm{d}a_{1j} & \cdots & \sum\limits_j b_{jq} \mathrm{d}a_{1j} \\ \vdots & & \vdots \\ \sum\limits_j b_{j1} \mathrm{d}a_{ij} & \ddots & \sum\limits_j b_{jq} \mathrm{d}a_{ij} \\ \vdots & & \vdots \\ \sum\limits_j b_{j1} \mathrm{d}a_{pj} & \cdots & \sum\limits_j b_{jq} \mathrm{d}a_{pj} \end{pmatrix} & \begin{matrix} 1 \\ \vdots \\ i \\ \vdots \\ p \end{matrix} \end{array}$$

ДИФФЕРЕНЦИАЛ ПРОИЗВЕДЕНИЯ МАТРИЦ

Посмотрим, чему должно быть равно $\mathrm{d}(A)B$:

$$\mathrm{d}(A)B = \begin{pmatrix} \mathrm{d}a_{11} & \cdots & \mathrm{d}a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{d}a_{p1} & \cdots & \mathrm{d}a_{pn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & \cdots & b_{nq} \end{pmatrix}$$

ДИФФЕРЕНЦИАЛ ПРОИЗВЕДЕНИЯ МАТРИЦ

$$\mathrm{d}(A)B = \begin{array}{cc} \begin{pmatrix} \sum\limits_j \mathrm{d}a_{1j}b_{j1} & \cdots & \sum\limits_j \mathrm{d}a_{1j}b_{jq} \\ \vdots & & \vdots \\ \sum\limits_j \mathrm{d}a_{ij}b_{j1} & \ddots & \sum\limits_j \mathrm{d}a_{ij}b_{jq} \\ \vdots & & \vdots \\ \sum\limits_j \mathrm{d}a_{pj}\,b_{j1} & \cdots & \sum\limits_j \mathrm{d}a_{pj}b_{jq} \end{pmatrix} & \begin{array}{c} 1 \\ \vdots \\ i \\ \vdots \\ p \end{array} \end{array}$$

ДИФФЕРЕНЦИАЛ ПРОИЗВЕДЕНИЯ МАТРИЦ

Получилось, что $\mathrm{d}(A)B = \sum_{ij} \frac{\partial(AB)}{\partial a_{ij}} \mathrm{d}a_{ij}$.

Аналогично можно доказать, что $A\mathrm{d}(B) = \sum_{ij} \frac{\partial(AB)}{\partial b_{ij}} \mathrm{d}b_{ij}$.