

Векторное дифференцирование. Семинар 3. 25 сентября 2019 г.

Семинарист: Данилова М.

Векторное дифференцирование

Основные понятия

Пусть $f : D \rightarrow E$, производная $\frac{\partial f}{\partial x} \in G$:

| | D | E | G | Название |
|----|---------------------------|----------------|---------------------------|--|
| | \mathbb{R} | \mathbb{R} | \mathbb{R} | Производная, $f'(x)$ |
| 1) | \mathbb{R}^n | \mathbb{R} | \mathbb{R}^n | Градиент, $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ |
| 2) | \mathbb{R}^n | \mathbb{R}^m | $\mathbb{R}^{n \times m}$ | Матрица Якоби, $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}$ |
| 3) | $\mathbb{R}^{m \times n}$ | \mathbb{R} | $\mathbb{R}^{m \times n}$ | $\frac{\partial f}{\partial x_{ij}}$ |

1. (а) $\nabla f(x)$ – градиент

$$\nabla f(x) = \frac{df}{dx} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix} - \text{вектор-столбец } (n \times 1)$$

$$\nabla f^\top(x) = \frac{df}{dx^\top} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix} - \text{вектор-строка } (1 \times n)$$

- (б) $H = [h_{ij}] = \nabla^2 f(x)$ – матрица Гессе, матрица вторых производных

$$h_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$$

$$\nabla^2 f(x) = \frac{d(\nabla f(x))}{dx^\top} = \frac{d(\nabla f^\top(x))}{dx}$$

2. Матрица Якоби

$$\frac{df}{dx^\top} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

$$\frac{df^\top}{dx} = \left(\frac{df}{dx^\top} \right)^\top \in \mathbb{R}^{n \times m}$$

Матричное представление функции:

$$f = x^T A x, \quad A = A^T$$

Скалярное представление функции:

$$f = \sum_{ij} a_{ij} x_i x_j$$

Градиент

$$\nabla f_i = \frac{\partial f(x)}{\partial x_i}$$

Скалярное представление градиента:

$$\nabla f_i = 2 \sum_j a_{ij} x_j$$

Матричное представление градиента:

$$\nabla f = 2Ax$$

Формулы дифференцирования сложной функции

1. $f \in \mathbb{R}^1, g \in \mathbb{R}^p, x \in \mathbb{R}^n$

$$\frac{\partial f(g(x))}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^p \frac{\partial f}{\partial g_i} \cdot \frac{\partial g_i}{\partial x_j} = \frac{dg^T}{dx_j} \cdot \frac{df}{dg}$$

$\frac{dg^T}{dx_j}$ - строка $(1 \times p)$

$\frac{df}{dg}$ - столбец $(p \times 1)$

→ объединим n чисел ($x \in \mathbb{R}^n$) :

$$\begin{aligned} \frac{df(g(x))}{dx} &= \frac{dg^T}{dx} \cdot \frac{df}{dg} \quad \left(\frac{df(g(x))}{dx} - (n \times 1), \frac{dg^T}{dx} - (n \times p), \frac{df}{dg} - (p \times 1) \right) \\ \frac{df(g(x))}{dx^T} &= \frac{df}{dg^T} \cdot \frac{dg}{dx^T} \quad \left(\frac{df(g(x))}{dx^T} - (1 \times n), \frac{df}{dg^T} - (1 \times p), \frac{dg}{dx^T} - (p \times n) \right) \end{aligned}$$

2. $f \in \mathbb{R}^m, g \in \mathbb{R}^p, x \in \mathbb{R}^n$

→ объединим m столбцов (матрица Якоби)

$$\begin{aligned} \frac{df^T(g(x))}{dx} &= \frac{dg^T}{dx} \cdot \frac{df^T}{dg} \quad \left(\frac{df^T(g(x))}{dx} - (n \times m), \frac{dg^T}{dx} - (n \times p), \frac{df^T}{dg} - (p \times m) \right) \\ \frac{df(g(x))}{dx^T} &= \frac{df}{dg^T} \cdot \frac{dg}{dx^T} \quad \left(\frac{df(g(x))}{dx^T} - (m \times n), \frac{df}{dg^T} - (m \times p), \frac{dg}{dx^T} - (p \times n) \right) \end{aligned}$$

Частные случаи

$$1. f \in \mathbb{R}^m, g \in \mathbb{R}^1, x \in \mathbb{R}^n$$

$$\frac{df}{dx^\top} = \frac{df}{dg} \cdot \frac{dg}{dx^\top} \quad \left(\frac{df}{dx^\top} - (m \times n), \frac{df}{dg} - (m \times 1), \frac{dg}{dx^\top} - (1 \times n) \right)$$

$$2. f \in \mathbb{R}^1, g \in \mathbb{R}^1, x \in \mathbb{R}^n$$

$$\frac{df}{dx} = \frac{dg}{dx} \cdot \frac{df}{dg} \quad \left(\frac{df}{dx} - (n \times 1), \frac{dg}{dx} - (n \times 1), \frac{df}{dg} - (1 \times 1) \right)$$

Примеры

$$1. u(x), v(x) \in \mathbb{R}^m$$

$$\frac{d(u^\top v)}{dx} = \frac{du^\top}{dx} v + \frac{dv^\top}{dx} u$$

$$2. u(x) \in \mathbb{R}^m, v(x) \in \mathbb{R}^l, A \in \mathbb{R}^{m \times l}$$

$$\frac{d}{dx} (u^\top A v) = \frac{du^\top}{dx} A v + \frac{dv^\top}{dx} A^\top u$$

$$3. u(x) \in \mathbb{R}^m, A \in \mathbb{R}^{m \times m}, A = A^\top, x \in \mathbb{R}^n$$

$$\frac{d}{dx} (u^\top A u) = \frac{du^\top}{dx} A u + \frac{du^\top}{dx} A^\top u = (A^\top = A) = 2 \frac{du^\top}{dx} A u$$

$$A = E \rightarrow \frac{d}{dx} (u^\top u) = 2 \frac{du^\top}{dx} u$$

$$4. x \in \mathbb{R}^n, A \in \mathbb{R}^{n \times n}, A^\top = A, c \in \mathbb{R}^n$$

$$\frac{dx^\top}{dx} = \frac{dx}{dx^\top} = E$$

$$\frac{d}{dx} (x^\top A) = A$$

$$\frac{d}{dx^\top} (A x) = A$$

$$\frac{d}{dx} (x^\top c) = c = \frac{d}{dx} (c^\top x)$$

$$5. x \in \mathbb{R}^n, A \in \mathbb{R}^{n \times n}, A = A^\top$$

$$\frac{d}{dx} (x^\top A x) = (A^\top + A) x = 2 A x$$

$$\frac{d}{dx} (x^\top x) = 2 x$$

$$6. f(x) = x^\top A x + b^\top x$$

$$\nabla f(x) = (A + A^\top) x + b$$

$$\nabla^2 f(x) = A + A^\top$$

$$7. f(x) = \|x\|_2 = \sqrt{x^\top x}$$

$$f(g) \in \mathbb{R}^1, g(x) \in \mathbb{R}^1, x \in \mathbb{R}^n$$

$$\nabla f(g(x)) = \frac{df(g(x))}{dx} = \frac{dg}{dx} \cdot \frac{df}{dg} \quad \left(\frac{df(g(x))}{dx} - (n \times 1), \frac{dg}{dx} - (n \times 1), \frac{df}{dg} - (1 \times 1) \right)$$

$$\frac{df}{dx} = \frac{d(x^\top x)}{dx} \cdot \frac{1}{2\sqrt{x^\top x}} = \frac{2x}{2\sqrt{x^\top x}} = \frac{x}{\sqrt{x^\top x}} = \frac{x}{\|x\|_2}$$

$$\nabla f = \frac{x}{\|x\|_2} \in \mathbb{R}^n \quad (n \times 1)$$

$$\nabla^2 f = \frac{d(\nabla f(x))}{dx^\top} = \frac{d}{dx^\top} \left(\frac{x}{\|x\|_2} \right) = \frac{1}{\|x\|_2} E - \frac{xx^\top}{\|x\|_2^3}$$

$$8. f(x) = -e^{-x^\top x}$$

$$\nabla f = \frac{df}{dx} = -e^{-x^\top x} \frac{d(-x^\top x)}{dx} = -e^{-x^\top x} \left(-\frac{dx^\top}{dx} x - \frac{dx^\top}{dx} x \right) = 2xe^{-x^\top x} \quad (n \times 1)$$

$$\nabla^2 f = \frac{d(\nabla f(x))}{dx^\top} = 2 \frac{d}{dx^\top} (xe^{-x^\top x}) = 2Ee^{-x^\top x} + 2x \frac{de^{-x^\top x}}{dx^\top} = 2Ee^{-x^\top x} - 2x \left(\frac{de^{-x^\top x}}{dx} \right)^\top =$$

$$2Ee^{-x^\top x} - 2x \left(2xe^{-x^\top x} \right)^\top = 2e^{-x^\top x} (E - 2xx^\top)$$

$$9. f(x) = \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2$$

$$x \in \mathbb{R}^n, A \in \mathbb{R}^{n \times n}, b \in \mathbb{R}^n$$

$$\frac{df}{dx} = \frac{1}{2} \frac{d(Ax - b)^\top}{dx} (Ax - b) + \frac{1}{2} \frac{d(Ax - b)}{dx} (Ax - b)^\top = A^\top (Ax - b)$$

Замечание 1.

$$\|x\| = \sqrt{x^\top x}$$

$$d\|x\| = \frac{x^\top}{\|x\|} dx = \left(\frac{x}{\|x\|}, dx \right) - \text{дифференциал}$$

$$\nabla(\|x\|) = \frac{x}{\|x\|} - \text{градиент}$$

Скалярное произведение

Определение 1 (Скалярное произведение). Пусть V - вещественное векторное пространство. Функция $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$, ставящая каждой паре векторов $x, y \in V$ в соответствие вещественное число $\langle x, y \rangle$, называется **скалярным произведением**, если оно удовлетворяет следующим условиям:

1. для любого $x \in V$ выполнено $\langle x, x \rangle \geq 0$, причем $\langle x, x \rangle = 0$ только при $x = 0$ (положительная определенность);
2. для любых $x, y \in V$ выполнено $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle$ (симметричность);
3. для любых $x, y, z \in V$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ выполнено $\langle \alpha x + \beta y, z \rangle = \alpha \langle x, z \rangle + \beta \langle y, z \rangle$ (линейность).

Определение 2 (Стандартное скалярное произведение в \mathbb{R}^n). В пространстве \mathbb{R}^n вещественных n -мерных вектор-столбцов стандартное скалярное произведение задается формулой:

$$\langle x, y \rangle = \text{Tr} (x^\top y) = \sum_{i=1}^n x_i y_i.$$

Стандартное скалярное произведение в \mathbb{R}^n не является единственно возможным.

Определение 3 (Стандартное скалярное произведение в $\mathbb{R}^{m \times n}$). В пространстве $\mathbb{R}^{m \times n}$ матриц вводят **фробениусово** скалярное произведение:

$$\langle A, B \rangle = \text{Tr} (A^\top B) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij} b_{ij}.$$

Определение 4 (Стандартное скалярное произведение в \mathbb{S}^n). Так как скалярное произведение можно наследовать на подпространство, получаем **фробениусово** скалярное произведение в \mathbb{S}^n :

$$\langle A, B \rangle = \text{Tr} (AB).$$

Норма

Определение 5 (Стандартная евклидова норма в \mathbb{R}^n).

$$\|x\|_2 = \sqrt{\langle x, x \rangle} = \sqrt{\left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)}$$

Стандартная евклидова норма также называется l_2 -норма.

Определение 6 (Стандартная фробениусова норма в $\mathbb{R}^{m \times n}$).

$$\|A\|_F = \sqrt{\langle A, A \rangle} = \sqrt{\text{Tr} (A^\top A)} = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij}^2}.$$

Стандартная фробениусова норма также называется нормой Гильберта-Шмидта.

Определение 7 (Стандартная фробениусова норма в \mathbb{S}^n). Так как норму можно наследовать на подпространство, получаем **фробениусову** норму в \mathbb{S}^n :

$$\|A\|_F = \sqrt{\langle A, A \rangle} = \sqrt{\text{Tr}(A^2)}.$$

Замечание 2. Если $A \in \mathbb{S}^n$, то

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^n \lambda_i^2(A)},$$

где $\lambda_i(A)$ - собственные значения A .

Определение 8 (Операторная норма в $\mathbb{R}^{m \times n}$). Назовем норму матрицы операторной, если она подчинена некоторой норме векторов:

$$\|A\| = \sup_{x \in \mathbb{R}^n, \|x\|=1} \|Ax\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}.$$

Также называется подчинённой или индуцированной нормой.

Матричное дифференцирование

Пусть $f(A)$ - функция матричного аргумента, где $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $A = \|a_{ij}\|$, $f : \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}^1$

$$\frac{\partial f}{\partial A} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial a_{11}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial a_{1n}} \\ \frac{\partial f}{\partial a_{m1}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial a_{mn}} \end{pmatrix}$$

матричный градиент – матрица той же размерности, что и A

Пример 1. $f(A) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} u_i u_j = u^\top A u$

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $u \in \mathbb{R}^n$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial A} &= \frac{\partial u^\top A u}{\partial A} = \begin{pmatrix} u_1 u_1 & \cdots & u_1 u_m \\ & \cdots & \\ u_m u_1 & \cdots & u_m u_m \end{pmatrix} = u u^\top \in \mathbb{R}^{m \times m} \\ \frac{\partial u^\top A u}{\partial u_{ij}} &= u_i u_j \end{aligned}$$

Базовые операции с матрицами

1. $A(B + C) = AB + AC$
2. $(A + B)^\top = A^\top + B^\top$
3. $(AB)^\top = B^\top A^\top$
4. $(AB)^{-1} = B^{-1} A^{-1}$
5. $(A^{-1})^\top = (A^\top)^{-1}$
6. $(A + B)^{-1} = A^{-1} - A^{-1} B (B + B^{-1} A B) B A^{-1}$

След и определитель

1. $\det(AB) = \det A \det B$
2. $\det(A)^{-1} = \frac{1}{\det A}$
3. $\text{Tr} A = \sum_j a_{jj} = \sum_j \lambda_j$
4. $\text{Tr}(A + B) = \text{Tr} A + \text{Tr} B$
5. $\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(BCA) = \text{Tr}(CAB)$

Пространство симметричных матриц \mathbb{S}^n

Если $X \in \mathbb{S}^n$ - симметричная матрица, тогда мы работаем в гильбертовом пространстве:

$$\langle A, B \rangle = \text{Tr}(AB) - \text{скалярное произведение}$$

$$\|A\|_F = \sqrt{\langle A, A \rangle} = \sqrt{\sum_{ij} a_{ij}^2} - \text{фробениусова норма}$$

Правила матричного дифференцирования

$f(X)$ – функция матричного аргумента

dX – матрица

$df(X) = \langle \nabla f(X), dX \rangle$ – дифференциал

$\nabla f(X)$ – градиент (матрица)

Пусть A, B - фиксированные матрицы, α - скаляр, X, Y - матричные функции.

Правила преобразования

1. $dA = 0$
2. $d(\alpha A) = \alpha (dA)$
3. $d(AXB) = A (dX) B$
4. $d(X + Y) = dX + dY$
5. $d(X^T) = (dX)^T$
6. $d(XY) = (dX)Y + X(dY)$
7. $d\langle X, Y \rangle = \langle dX, Y \rangle + \langle X, dY \rangle$

Стандартные производные

1. $d\langle A, X \rangle = \langle A, dX \rangle$
2. $d\langle Ax, x \rangle = \langle (A + A^T)x, dx \rangle$
3. $d(\det(X)) = \det(X) \langle X^{-T}, dX \rangle$
4. $d(X^{-1}) = -X^{-1} (dX) X^{-1}$

Пример 2. $f(X) = \ln \det X$, $X \in \mathbb{S}_{++}^n$

$$df(X) = d(\ln \det X) = \frac{d(\det X)}{\det X} = \frac{\det(X) \langle X^{-\top}, dX \rangle}{\det X} = \langle X^{-1}, dX \rangle$$

$$\nabla f(X) = X^{-1}$$

Пример 3. $f(X) = \|X\|_F$, $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$

$$df(X) = d(\|X\|_F) = d\sqrt{\langle X, X \rangle} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\langle X, X \rangle}} d\langle X, X \rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{\|X\|_F} 2\langle X, dX \rangle = \|X\|_F^{-1} \langle X, dX \rangle$$

$$\nabla f(X) = \|X\|_F^{-1} X$$

Формула Тейлора

Пусть $f(X)$ - функция матричного аргумента, а Δ - приращение:

$$f(X + \Delta) = f(X) + \langle \nabla f(X), \Delta \rangle + o(\Delta)$$

Примеры

1. $f(X) = \text{Tr} X$, $X \in \mathbb{S}_{++}^n$

$$f(X + \Delta) = \text{Tr}(X + \Delta) = \text{Tr} X + \text{Tr} \Delta = \text{Tr} X + \langle E, \Delta \rangle$$

$$\nabla f(X) = E$$

2. $f(X) = \ln \det X$, $X \in \mathbb{S}_{++}^n$

$$f(X + \Delta) = \ln(\det(X + \Delta)) = \ln(\det X (E + X^{-1}\Delta)) = \ln(\det X \cdot \det(E + X^{-1}\Delta)) =$$

$$\ln(\det X) + \ln(\det(E + X^{-1}\Delta)) = f(X) + \ln(1 + \text{Tr}(X^{-1}\Delta) + o(\Delta)) =$$

$$f(X) + \text{Tr}(X^{-1}\Delta) + o(\Delta) = f(X) + \langle X^{-1}, \Delta \rangle + o(\Delta)$$

$$\nabla f(X) = X^{-1}$$