

开闭
确界
闭合函数
导数
梯度gradient
链式法则chain
二阶导数
二阶导情况1
二阶导情况2
常用导数梯度
1、二次函数
2、logdet
3、例子：多维化归
4、例子2：

开闭

- 内点，内部interior
| 可以用任意范数定义一个球（范数等价性的体现）
- open开集合
| 不包含边界
- closed闭集合
- closure闭包
| 取int，再取补，保证闭包是闭的

The closure of a set C is defined as

$$\text{cl } C = \mathbf{R}^n \setminus \text{int}(\mathbf{R}^n \setminus C)$$

- boundary边界

$$\text{bd } C = \text{cl } C \setminus \text{int } C$$

确界

- supremum 上确界
- infimum 下确界
- 关系

$$\inf C = -(\sup -C)$$

闭合函数

小于等于 α 的部分，对应的定义域是闭合的

- A function $f: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ is closed if, for each $\alpha \in \mathbf{R}$, the sublevel set

$$\{x \in \text{dom } f \mid f(x) \leq \alpha\}$$

is closed. This is equivalent to

$\text{epi } f = \{(x, t) \in \mathbf{R}^{n+1} \mid x \in \text{dom } f, f(x) \leq t\}$ is closed

判定闭合函数等价方式: epi

导数

输入 n 维，输出 m 维， $m \times n$ 维矩阵 $Df(x)$

需要int，边界算不了

$$\lim_{z \in \text{dom } f, z \neq x, z \rightarrow x} \frac{\|f(z) - f(x) - Df(x)(z - x)\|_2}{\|z - x\|_2} = 0$$

- 一阶近似--仿射函数affine (关于 z 的)

线性项+常数项，比如 $f(ax+B)$

可以当作是 $f(z)$ 的一阶近似，类似一阶泰勒展开

$$f(x) + Df(x)(z - x)$$

- 计算 $Df(x)$

偏导计算导数矩阵

$$Df(x)_{ij} = \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j}, i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n$$

梯度gradient

当输出1维时，定义梯度为导数转置

用的就那么几个，有现成的，但需要自己算一遍

$$\nabla f(x) = Df(x)^\top$$

which is a column vector (in \mathbf{R}^n). Its components are the partial derivatives of f :

$$\nabla f(x)_i = \frac{\partial f(x)}{\partial x_i}, i = 1, \dots, n$$

- 一阶近似--梯度版

$$f(x) + \nabla f(x)^\top (z - x)$$

链式法则chain

- Suppose $f: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^m$ is differentiable at $x \in \text{int dom } f$ and $g: \mathbf{R}^m \rightarrow \mathbf{R}^p$ is differentiable at $f(x) \in \text{int dom } g$.

Define the composition $h: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^p$ by $h(z) = g(f(z))$. Then h is differentiable at x , with derivate

$$Dh(x) = Dg(f(x))Df(x)$$

- 仿射特例

$ax+b$ 这里是仿射函数

$$g(x) = f(Ax + b)$$

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

$f: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}, g: \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}; a, b: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$

$$1 \quad \text{gra}(g(x)) = a^\top * \text{gra}(f(ax+b))$$

二阶导数

$\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$

hessian: 二阶导组成矩阵

- Suppose $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. The second derivative or Hessian matrix of f at $x \in \text{int dom } f$, denoted $\nabla^2 f(x)$, is given by

$$\nabla^2 f(x)_{ij} = \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j}, i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, n.$$

- 二阶近似

一阶后面再加一项

$$f(x) + \nabla f(x)^T (z - x) + \frac{1}{2} (z - x)^T \nabla^2 f(x) (z - x)$$

二阶导情况1

g 标量函数

$\text{gra}(f)$ 是列向量, 需要乘上自己转置变成矩阵

- Suppose $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, and $h(x) = g(f(x))$

$$\nabla h(x) = g'(f(x)) \nabla f(x)$$

$$\nabla^2 h(x) = g'(f(x)) \nabla^2 f(x) + g''(f(x)) \nabla f(x) \nabla f(x)^T$$

二阶导情况2

仿射作为输入得到 g

两边是 A , 比较好记

Composition with affine function

$$g(x) = f(Ax + b)$$

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

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

- 如果g本身是标量函数

$$g(t) = f(x + tv), \quad x, v \in \mathbf{R}^n$$

$$g'(t) = v^\top \nabla f(x + tv)$$

$$g''(t) = v^\top \nabla^2 f(x + tv) v$$

常用导数梯度

1、二次函数

$$f(x) = \frac{1}{2} x^\top P x + q^\top x + r$$

$$\nabla f(x) = P x + q$$

$$\nabla^2 f(x) = P$$

2、logdet

输入是矩阵X，梯度也是矩阵，

需要两个下表索引，二阶导就需要4个索引,太复杂。不如直接写二阶近似

$$f(X) = \log \det X, \text{ dom } f = \mathbf{S}_{++}^n$$

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

$$f(X) + \text{tr}(X^{-1}(Z - X)) - \frac{1}{2} \text{tr}(X^{-1}(Z - X)X^{-1}(Z - X))$$

3、例子：多维化归

- 题目

$$f(x) = \log \sum_{i=1}^m \exp(a_i^\top x + b_i)$$

合并之后，求导更容易，为了用链式法则

- 一阶导

$$f = g(Ax + b)$$

$$g(y) = \log \sum_{i=1}^m \exp(y_i)$$

$$\nabla g(y) = \frac{1}{\sum_{i=1}^m \exp y_i} \begin{bmatrix} \exp y_1 \\ \vdots \\ \exp y_m \end{bmatrix}$$

再用链式法则

$$\nabla f(x) = A^\top \nabla g(Ax + b) = \frac{1}{1^\top z} A^\top z$$

$$z = \begin{bmatrix} \exp a_1^\top x + b_1 \\ \vdots \\ \exp a_m^\top x + b_m \end{bmatrix}$$

$1^\top z$: 表示对 z 内求和

- 二阶导

先情况二，再情况一，用两次链式法则

求Hessian矩阵时， ij 位置的元素即为对上述 $\nabla f(x)$ 第 i 个元素关于 x_j 求导

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

diag是对角矩阵

det行列式

$$\nabla^2 g(y) = \text{diag}(\nabla g(y)) - \nabla g(y) \nabla g(y)^\top$$

$$\begin{aligned}\nabla^2 f(x) &= A^\top \nabla g^2(Ax + b)A \\ &= A^\top \left(\frac{1}{1^\top z} \text{diag}(z) - \frac{1}{(1^\top z)^2} z z^\top \right) A\end{aligned}$$

■ $z_i = \exp(a_i^\top x + b_i), i = 1, \dots, m$

4、例子2:

- 题目

$$f(x) = \log \det(F_0 + x_1 F_1 + \dots + x_n F_n)$$

- 分解

$$f(x) = g(F_0 + x_1 F_1 + \dots + x_n F_n)$$

$$g(X) = \log \det X$$

- 求偏导

1 利用 $g'(x) = b^T * \text{gra}(f(ax+b))$, x 代表 x_i

F_i 为对内层 x_i 求导结果, 再对外面算梯度,
再两个矩阵算内积, 即 tr

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} = \text{tr}(F_i \nabla \log \det(F)) = \text{tr}(F^{-1} F_i)$$

再拼在一起

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} \text{tr}(F^{-1} F_1) \\ \vdots \\ \text{tr}(F^{-1} F_n) \end{bmatrix}$$