



人工智能与深度学习

2-1-S1 导数与链式法则

王中雷

经济学院、王亚南经济研究院、邹至庄经济研究院

厦门大学

(第一版)

内容摘要

1. 求导

2. 链式法则

求导

1. 回顾关于 $x \in \mathbb{R}$ 的求导法则:

- 设 $a \in \mathbb{R}$ 为常数。若 $f(x) = ax$, 则 $f'(x) = a$
- 对于可微一元函数 $u = u(x)$ 和 $v = v(x)$, 有 $(u \cdot v)' = u' \cdot v + v' \cdot u$

2. 对于向量自变量 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_m)^T \in \mathbb{R}^{m \times 1}$, 可微函数的导数采用以下记号与排列约定

- 对于标量值函数 $f(\mathbf{x})$, $\partial f / \partial \mathbf{x} = (\partial f / \partial x_1, \dots, \partial f / \partial x_m)^T$ 与 $\mathbf{x}$ 形状相同
- 对于向量值函数 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), \dots, f_k(\mathbf{x}))^T$, 有
$$\partial \mathbf{f}^T / \partial \mathbf{x} = (\partial f_1 / \partial \mathbf{x}, \dots, \partial f_k / \partial \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{m \times k}$$

例子

1. 例 1: 对于常向量 $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$ 以及自变量 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$, 考虑 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{a}^T \cdot \boldsymbol{x}$

2. 则有:

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^m a_j x_j$$

- $\boldsymbol{a} = (a_1, \dots, a_m)^T, \boldsymbol{x} = (x_1, \dots, x_m)^T$

3. 因此, $\partial f / \partial \boldsymbol{x} = (a_1, \dots, a_m)^T = \boldsymbol{a}$

例子

1. 例 1.1: 对于自变量 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$ 和 $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$, 考虑 $f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \boldsymbol{x}^T \cdot \boldsymbol{y}$

2. 则有:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}} &= \boldsymbol{y}, & \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{y}} &= \boldsymbol{x}, \\ \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}^T} &= \boldsymbol{y}^T, & \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{y}^T} &= \boldsymbol{x}^T \end{aligned}$$

3. 另见第 2.1 节。

例子

1. 例 2: 对于两个向量值函数 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) \in \mathbb{R}^{k \times 1}$ 和 $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}) \in \mathbb{R}^{k \times 1}$, 考虑

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})^T \cdot \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x})$$

2. 则有:

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^k u_j(\boldsymbol{x}) v_j(\boldsymbol{x})$$

- $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = (u_1(\boldsymbol{x}), \dots, u_k(\boldsymbol{x}))^T, \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}) = (v_1(\boldsymbol{x}), \dots, v_k(\boldsymbol{x}))^T$

3. 请验证:

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}} = \sum_{j=1}^k \left\{ \frac{\partial u_j(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot v_j(\boldsymbol{x}) + \frac{\partial v_j(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot u_j(\boldsymbol{x}) \right\} = \frac{\partial \boldsymbol{u}^T}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}) + \frac{\partial \boldsymbol{v}^T}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$$

例子

1. 例 3: 对于自变量 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$, 考虑恒等变换 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}$

2. 根据定义:

$$\partial \boldsymbol{f}^T / \partial \boldsymbol{x} = (\partial f_1 / \partial \boldsymbol{x}, \dots, \partial f_m / \partial \boldsymbol{x}) = (\partial x_1 / \partial \boldsymbol{x}, \dots, \partial x_m / \partial \boldsymbol{x}) = \boldsymbol{I}$$

- $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = (f_1(\boldsymbol{x}), \dots, f_m(\boldsymbol{x}))^T = (x_1, \dots, x_m)^T$
- $\boldsymbol{I}$: $m \times m$ 单位矩阵
- 请验证上述计算。

例子

1. 例 4: 对于常值矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ 以及自变量 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$, 考虑 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}$

2. 注意:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{a}_n^T \end{pmatrix} \cdot \mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^T \cdot \mathbf{x} \\ \vdots \\ \mathbf{a}_n^T \cdot \mathbf{x} \end{pmatrix}$$

- $\mathbf{a}_i^T$: 矩阵 $\mathbf{A}$ 的第 i 行

3. 因此:

$$\frac{\partial \mathbf{f}^T}{\partial \mathbf{x}} = \left(\frac{\partial(\mathbf{a}_1^T \cdot \mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}, \dots, \frac{\partial(\mathbf{a}_n^T \cdot \mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \right) = (\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n) = \mathbf{A}^T$$

- 第二个等式由例 1 得到。
- 请验证上述计算。

例子

1. 例 5: 对于常值矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 以及自变量 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$, 考虑

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}$$

2. 令 $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$ 和 $\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}$, 则 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{u}(\mathbf{x})^T \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x})$

3. 由例 2-4 得:

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{u}^T}{\partial \mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial \mathbf{v}^T}{\partial \mathbf{x}} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{x} = (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T) \cdot \mathbf{x}$$

4. 请验证上述计算。

例子

1. 例 5.1: 对于自变量 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$, 考虑 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T \cdot \boldsymbol{x}$
2. 令 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}$, 由例 5 得 $\partial f / \partial \boldsymbol{x} = 2\boldsymbol{x}$
3. 例 5.2: 对于常值对称矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ (即 $\boldsymbol{A}^T = \boldsymbol{A}$) 以及自变量 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$, 考虑 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T \cdot \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{x}$
4. 由例 5 得 $\partial f / \partial \boldsymbol{x} = 2\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{x}$

链式法则

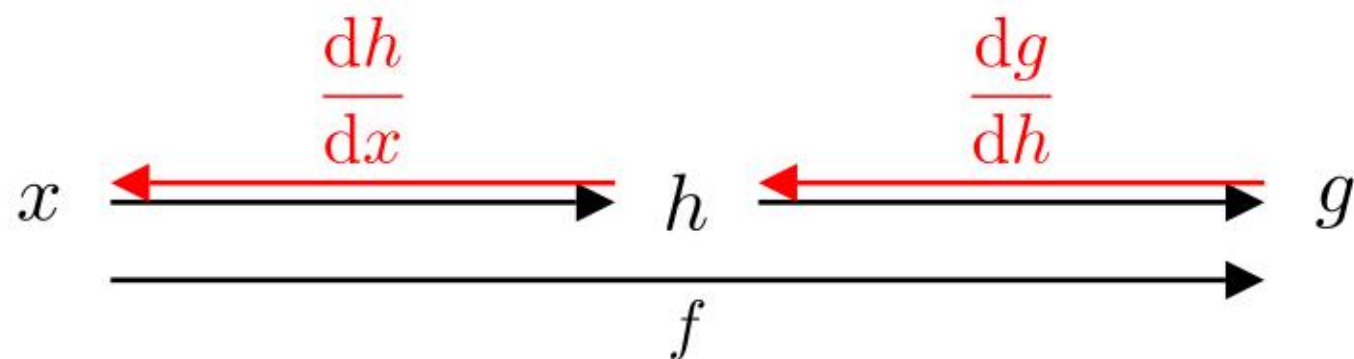
1. 首先考虑 $f(x) = g \circ h(x)$

- $x \in \mathbb{R}$
- $h(x) \in \mathbb{R}$
- $g(h) \in \mathbb{R}$
- 假设内函数与外函数在相应点处可微。

2. 相应计算图见右图。

3. 由链式法则得：

$$\frac{df}{dx} = \frac{dh}{dx} \cdot \frac{dg}{dh}$$



链式法则

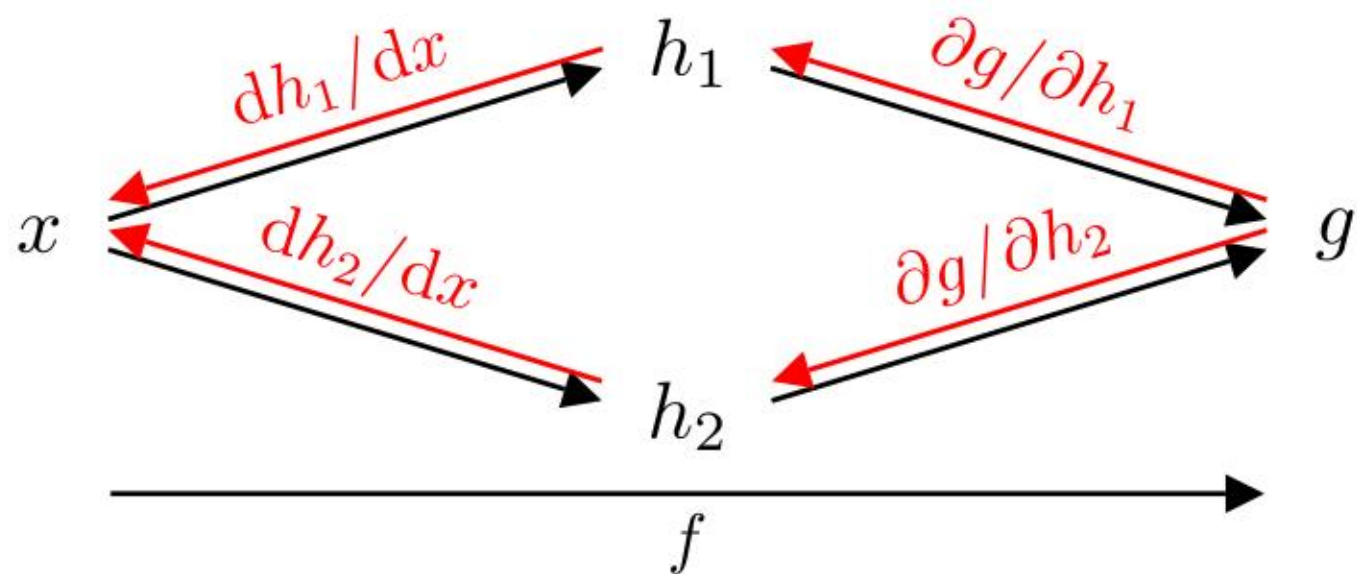
1. 接着考虑 $f(x) = g \circ \mathbf{h}(x)$

- $x \in \mathbb{R}$
- $\mathbf{h}(x) = (h_1(x), h_2(x))^T \in \mathbb{R}^2$
- $g(\mathbf{h}) \in \mathbb{R}$
- 假设内函数与外函数在相应点处可微。

2. 相应计算图见右图。

3. 由链式法则得：

$$\frac{df}{dx} = \frac{dh_1}{dx} \cdot \frac{\partial g}{\partial h_1} + \frac{dh_2}{dx} \cdot \frac{\partial g}{\partial h_2}$$



链式法则

1. 更一般地, 考虑 $f(x) = g \circ \mathbf{h}(x)$

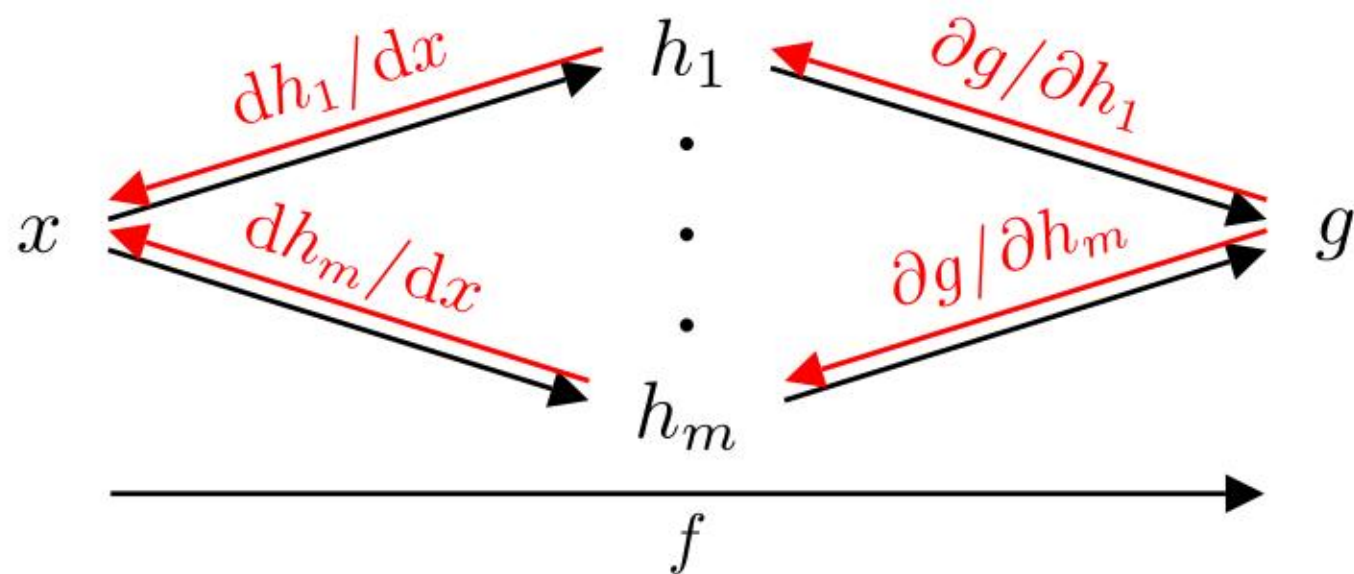
- $x \in \mathbb{R}$
- $\mathbf{h}(x) = (h_1(x), \dots, h_m(x))^T \in \mathbb{R}^m$
- $g(\mathbf{h}) \in \mathbb{R}$
- 假设内函数与外函数在相应点处可微。

2. 相应计算图见右图。

3. 由链式法则得:

$$\frac{df}{dx} = \sum_{j=1}^m \frac{dh_j}{dx} \cdot \frac{\partial g}{\partial h_j}$$

4. 一般情形见第 2.1 节。



课程总结

1. 向量求导

- 明确输入与输出的形状，保持导数排列约定一致
- 拆解为内积、线性变换等基本运算，组合已有求导结果

2. 复合函数的链式法则

- 识别输入到输出的依赖路径
- 沿各路径相乘局部导数，再将各路径的贡献相加