

17

Differential

微分

微分是线性近似



我看的比别人更远，那是因为我站在一众巨人们的臂膀之上。

If I have seen further than others, it is by standing upon the shoulders of giants.

—— 艾萨克·牛顿 (Isaac Newton) | 英国数学家、物理学家 | 1643 ~ 1727



- ▶ `numpy.meshgrid()` 获得网格数据
- ▶ `sympy.abc import x` 定义符号变量 `x`
- ▶ `sympy.abc import x` 定义符号变量 `x`
- ▶ `sympy.diff()` 求解符号导数和偏导解析式
- ▶ `sympy.evalf()` 将符号解析式中未知量替换为具体数值
- ▶ `sympy.lambdify()` 将符号表达式转化为函数
- ▶ `sympy.series()` 求解泰勒展开级数符号式
- ▶ `sympy.symbols()` 定义符号变量

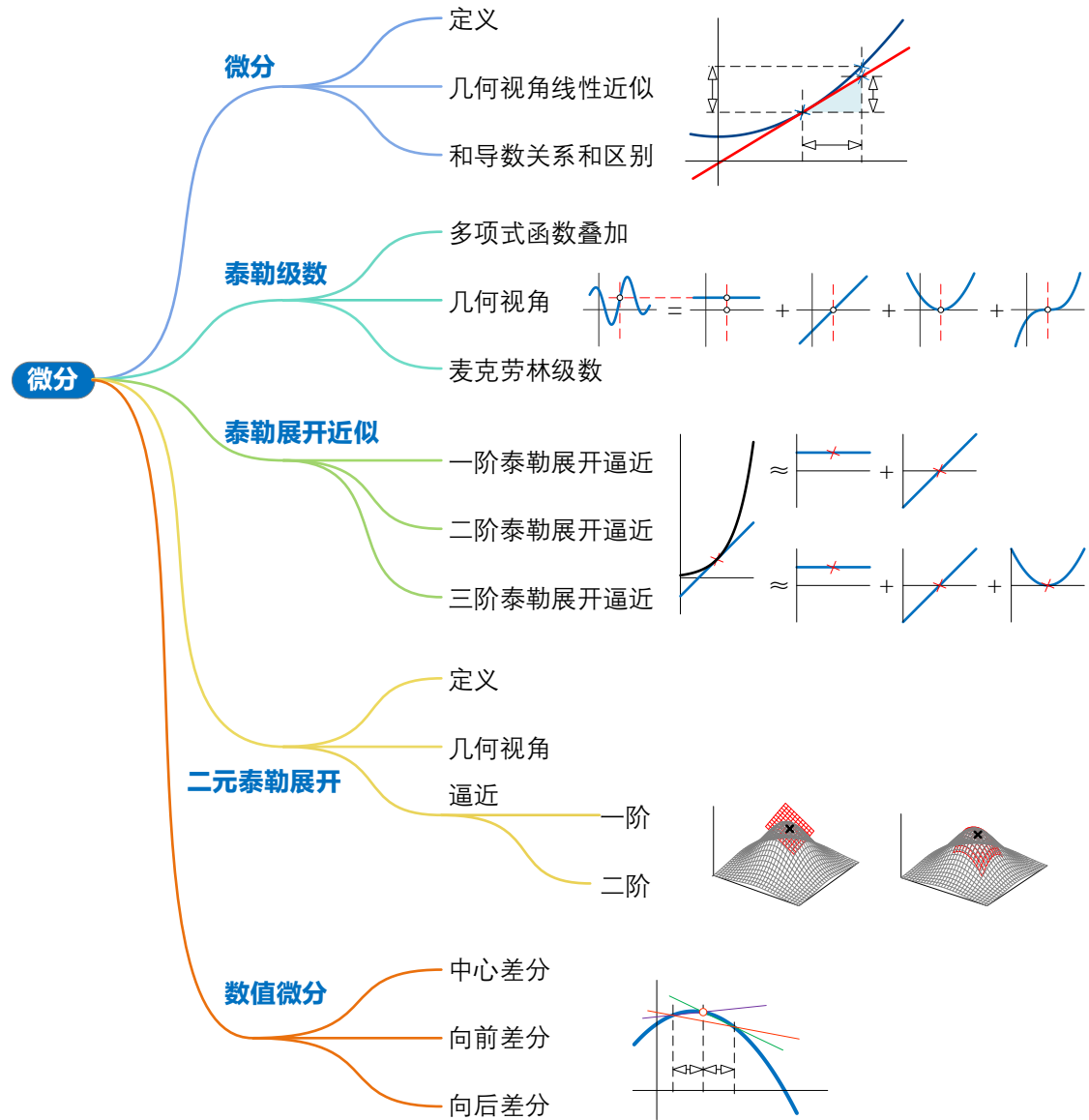
本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com



17.1 几何角度看微分：线性近似

微分 (differential) 是函数的局部变化的一种线性描述。如图 1 所示，微分可以近似地描述当函数自变量取值出现足够小 Δx 变化时，函数值变化 Δy 。

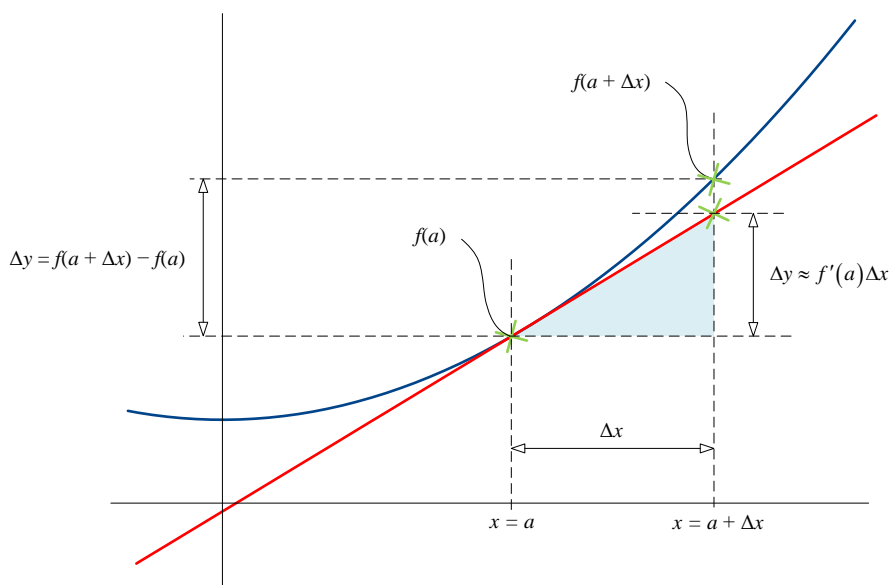


图 1. 对一元函数来说，微分是线性近似

假设函数 $f(x)$ 在某个区间内有定义。给定该区间内一点 a ，当 a 变动到 $a + \Delta x$ (也在该区间内) 时，函数实际增量为 Δy ：

$$\Delta y = f(a + \Delta x) - f(a) \quad (1)$$

而增量 Δy 可以近似为：

$$\Delta y = f(a + \Delta x) - f(a) \approx f'(a)\Delta x \quad (2)$$

其中， $f'(a)$ 为函数在 $x = a$ 处一阶导数。本书第 15 章讲过，函数 $f(x)$ 在某一点处一阶导数值是函数在该点处切线的斜率值。

整理上式， $f(a + \Delta x)$ 的近似写成：

$$f(a + \Delta x) \approx f'(a)\Delta x + f(a) \quad (3)$$

令

$$x = a + \Delta x \quad (4)$$

(3) 可以写成：

$$f(x) \approx f'(a)(x-a) + f(a) \quad (5)$$

上式就是一次函数的点斜式。一次函数通过 $(a, f(a))$ 这点，斜率为 $f'(a)$ 。

如图 1 所示，从几何角度，微分用切线这条斜线代替曲线。实践中，复杂的非线性函数可以通过局部线性化来简化运算。

图 2 和图 3 分别所示为高斯函数和其一阶导数函数在若干点处的切线。

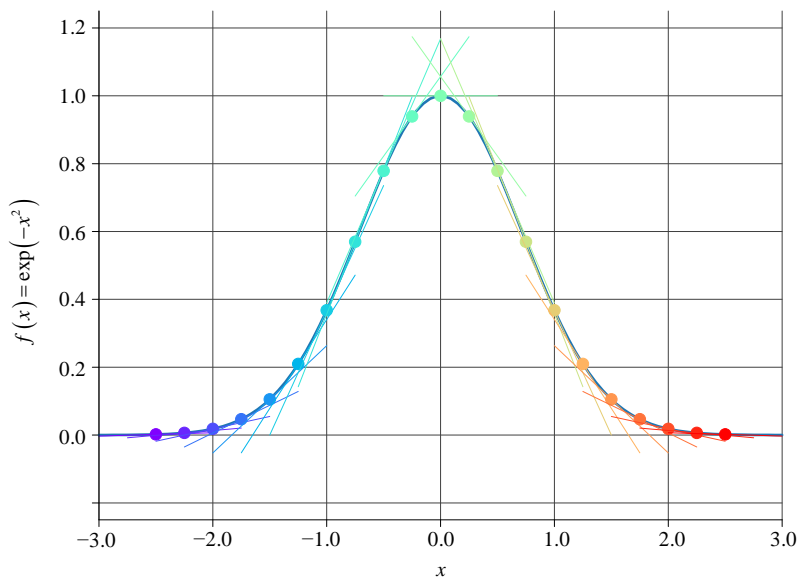


图 2. 高斯函数不同点处切线

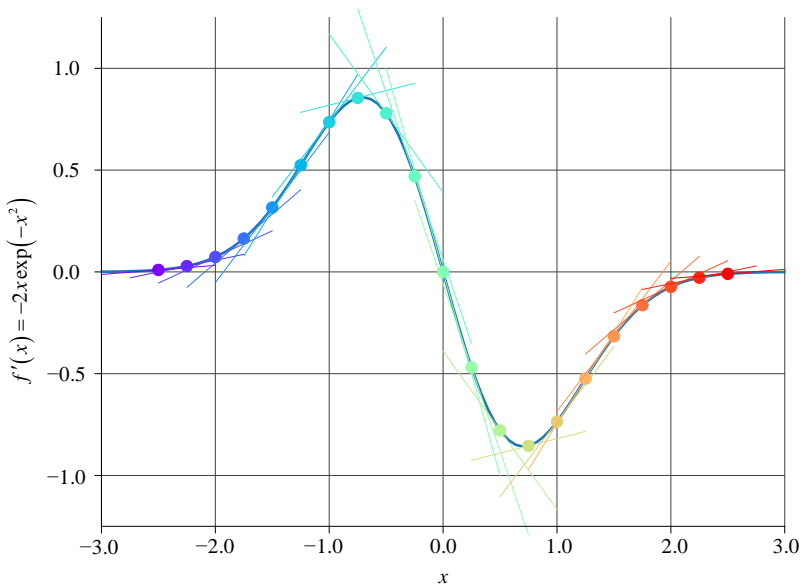


图 3. 高斯函数一阶导数不同点处切线

17.2 泰勒级数：多项式函数近似

英国数学家布鲁克·泰勒 (Sir Brook Taylor) 在 1715 年发表了**泰勒级数** (Taylor's theorem)。泰勒级数是一种强大的函数近似工具。



布鲁克·泰勒 (Brook Taylor)
英国数学家 | 1685年 ~ 1731年
以泰勒公式和泰勒级数闻名



当**展开点** (expansion point) 为 $x = a$ 时，一元函数 $f(x)$ 泰勒展开 (Taylor expansion) 形式为：

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (x-a)^n \quad (6)$$

$$= f(a) + \underbrace{\frac{f'(a)}{1!}(x-a)}_{\text{Linear}} + \underbrace{\frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2}_{\text{Quadratic}} + \underbrace{\frac{f'''(a)}{3!}(x-a)^3}_{\text{Cubic}} + \dots$$

其中， a 为**展开点** (expansion point)。式中的阶乘是多项式求导产生的。展开点为 0 的泰勒级数又叫做**麦克劳林级数** (Maclaurin series)。

如图 4 所示，泰勒展开相当于一系列多项式函数叠加，用来近似某个复杂函数。

▲ 注意，图中常数函数图像对应的高度 $f(a)$ 提供了 $x = a$ 处 $f(x)$ 的函数值。而剩余其他多项式函数在展开点 $x = a$ 处函数值均为 0。

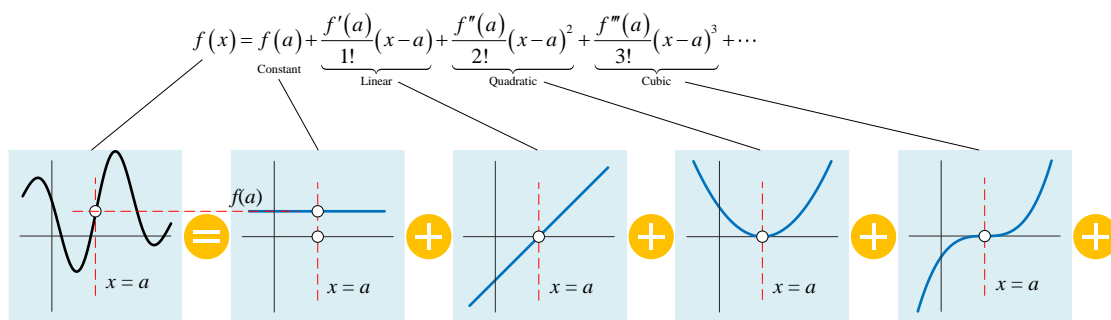


图 4. 一元函数泰勒展开原理

实际应用中，在应用泰勒公式近似计算时需要截断，也就是只取有限项。

上一节介绍微分时，(5) 实际上就是泰勒公式取前两项，即用“常数函数 + 一次函数”叠加近似原函数 $f(x)$ ：

$$f(x) \approx \underbrace{f(a)}_{\text{Constant}} + \underbrace{\frac{f'(a)}{1!}(x-a)}_{\text{Linear}} = f(a) + f'(a)(x-a) \quad (7)$$

在 (7) “常数函数 + 一次函数” 基础上，再增加“二次函数”成分，我们便得到二次近似：

$$f(x) \approx \underbrace{f(a)}_{\text{Constant}} + \underbrace{\frac{f'(a)}{1!}(x-a)}_{\text{Linear}} + \underbrace{\frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2}_{\text{Quadratic}} \quad (8)$$

图 5 和图 6 分别所示为高斯函数和其一阶导数函数的二次近似。泰勒公式把复杂函数转换为多项式叠加。相较其他函数，多项式函数更容易计算微分、积分。本章后续将会介绍利用泰勒展开近似。

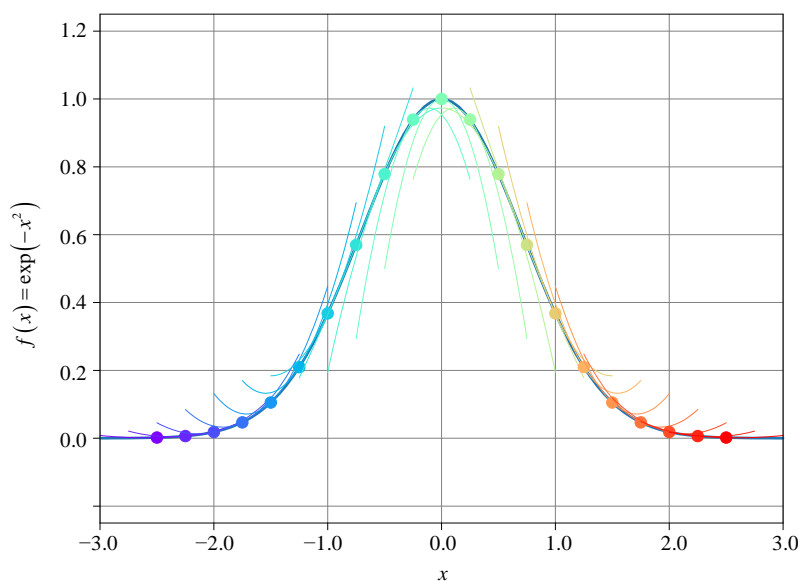


图 5. 高斯函数不同点处二次近似

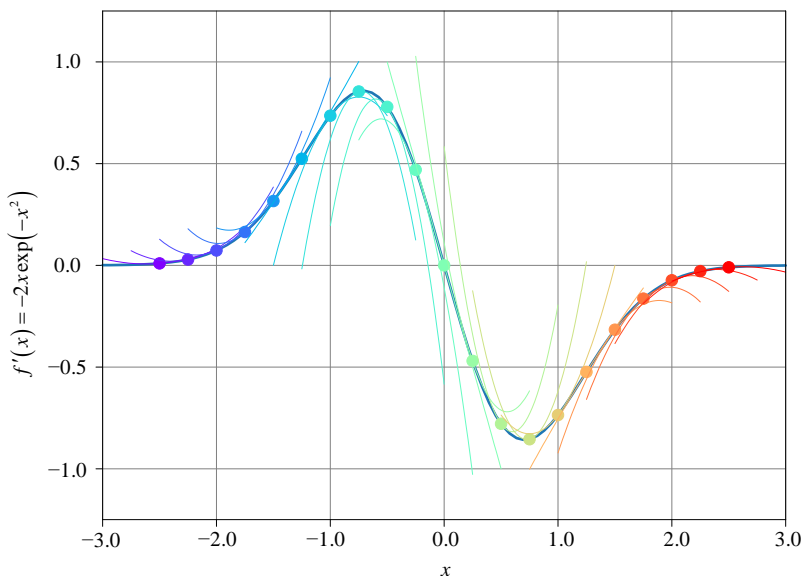


图 6. 高斯函数一阶导数不同点处二次近似



Bk3_Ch17_01.py 绘制图 5 和图 6。



在 Bk3_Ch17_01.py 基础上，我们做了一个 App 展示曲线上不同点一次和二次近似。请参考 Streamlit_Bk3_Ch17_01.py。

17.3 多项式近似和误差

再次强调，泰勒展开的核心是用一系列多项式函数叠加来逼近某个函数。实际应用中，泰勒级数常用来近似计算复杂非线性函数，并估计误差。

给定原函数 $f(x)$ 为自然指数函数：

$$f(x) = \exp(x) = e^x \quad (9)$$

在 $x = 0$ 处，该函数的泰勒级数展开为：

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = \frac{x^0}{0!} + \frac{x^1}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} + \cdots = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} + \frac{x^5}{120} + \cdots \quad (10)$$

如前文所述，在具体应用场合，泰勒公式需要截断，只取有限项进行近似运算。一个函数的有限项的泰勒级数叫做泰勒展开式。

常数函数

在 $x = 0$ 点处， $f(x)$ 函数值为：

$$f(0) = \exp(0) = 1 \quad (11)$$

图 7 所示为用常数函数来近似原函数：

$$f_0(x) = \underset{\text{Constant}}{1} \quad (12)$$

图 8 比较原函数和常数函数，并给出误差随 x 变化。常数函数为平行横轴的直线，它的估计能力显然明显不足。

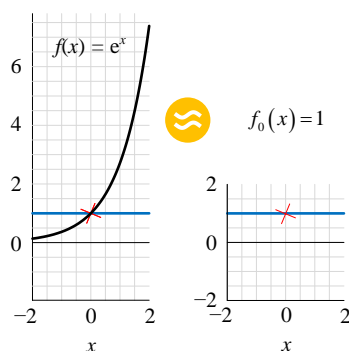


图 7. 常数函数近似

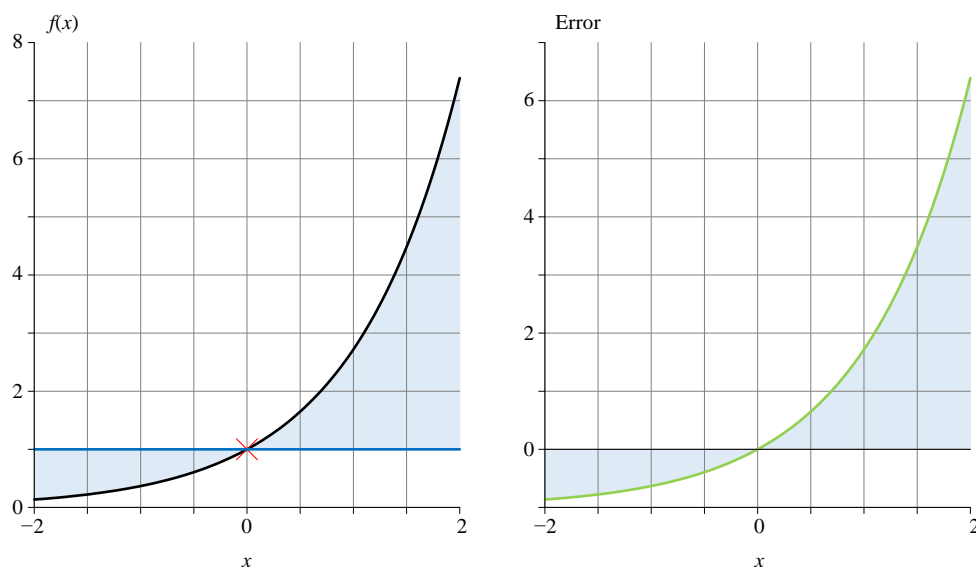


图 8. 常数函数近似及误差

一次函数

原函数 $f(x)$ 一阶导数为：

$$f'(x) = \exp(x) \quad (13)$$

$x = 0$ 处一阶导数为切线斜率：

$$f'(0) = \exp(0) = 1 \quad (14)$$

用一次函数来近似原函数：

$$f_1(x) = \underset{\text{Constant}}{1} + \underset{\text{Linear}}{x} \quad (15)$$

图 9 所示为“常数函数 + 一次函数”近似的原理。

叠加常数函数和一次函数，常被称作一阶泰勒展开 (first-order Taylor polynomial/expansion/approximation 或 first-degree Taylor polynomial)。一阶泰勒展开是最常用的逼近手段。

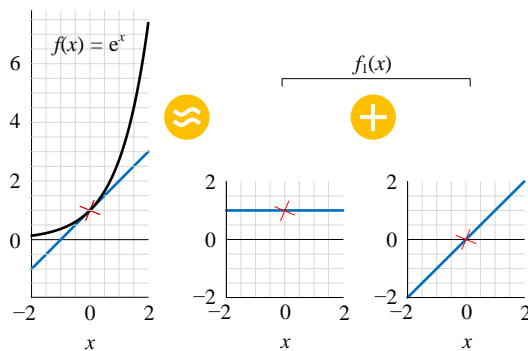


图 9. “常数函数 + 一次函数”近似

原函数和泰勒多项式的差被称作为泰勒公式的余项，即误差：

$$R(x) = f(x) - f_1(x) = f(x) - \left(\underset{\text{Constant}}{1} + \underset{\text{Linear}}{x} \right) \quad (16)$$

图 10 所示为一阶泰勒展开近似和误差；离展开点 $x = a$ 越远，误差越大。

也就是说，非线性函数在 $x = a$ 附近可以用这个一次函数近似。当 x 远离 a ，这个近似就变得越来越不准确。

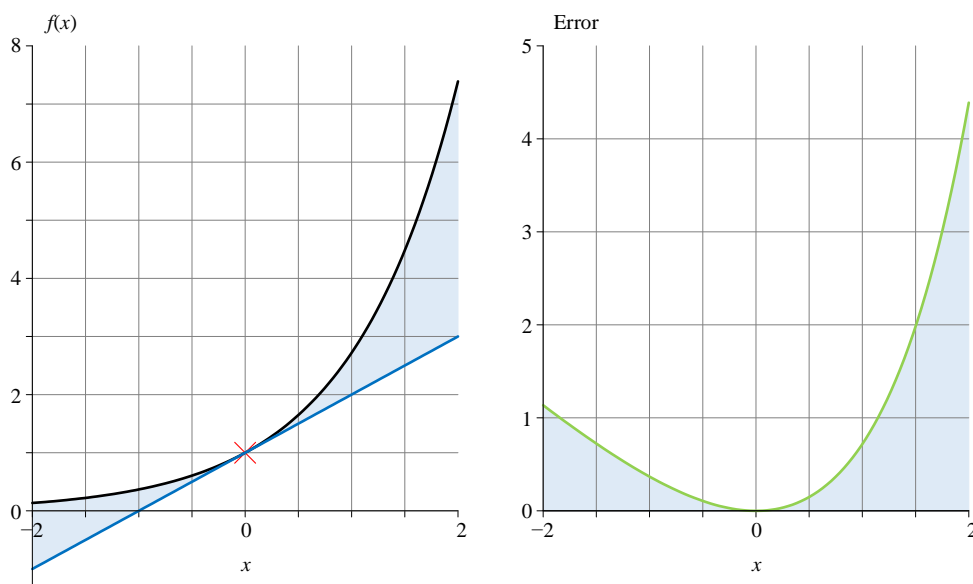


图 10. 一阶泰勒展开近似及误差

二次函数

用二次多项式函数近似原函数：

$$f_2(x) = \underbrace{1}_{\text{Constant}} + \underbrace{x}_{\text{Linear}} + \underbrace{\frac{x^2}{2}}_{\text{Quadratic}}$$

(17)

上式也叫二阶泰勒展开 (second-order Taylor polynomial/expansion/approximation)。图 11 所示，二阶泰勒展开叠加了三个成分，“常数函数 + 一次函数 + 二次函数”。

图 12 给出的是二阶泰勒展开近似及误差。相较图 10，图 12 中误差明显变小。

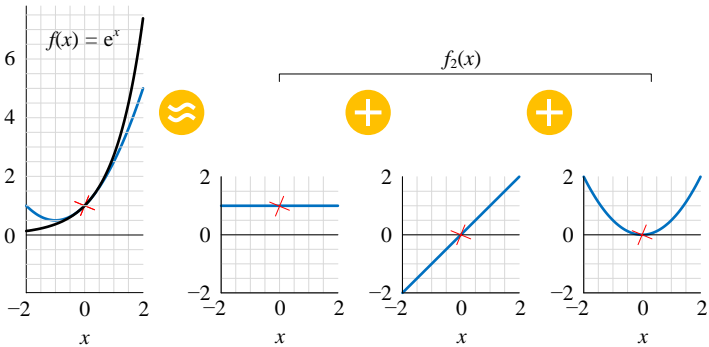


图 11. “常数函数 + 一次函数 + 二次函数”近似原函数

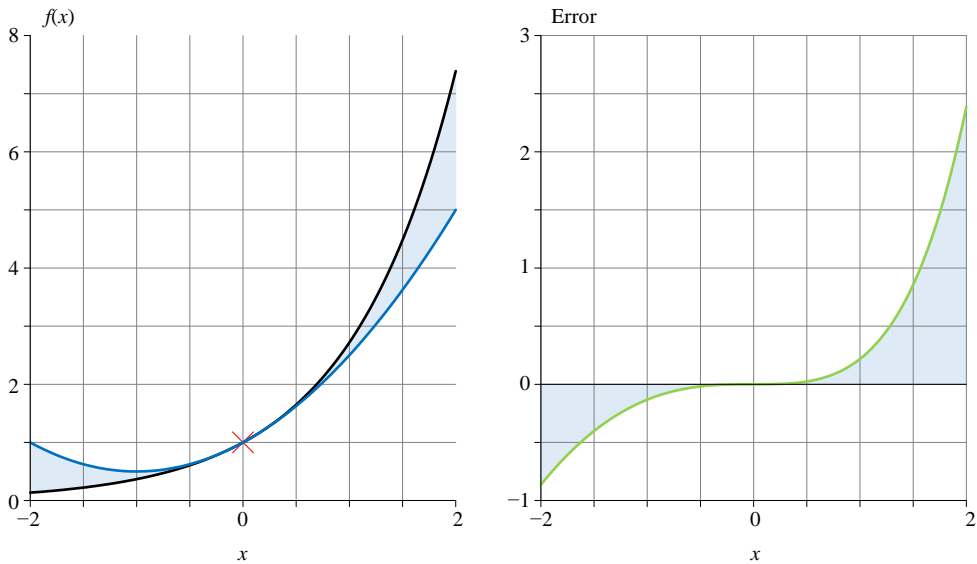


图 12. 二阶泰勒展开近似及误差

三次函数

用三次多项式函数近似原函数：

$$f_3(x) = \underbrace{1}_{\text{Constant}} + \underbrace{x}_{\text{Linear}} + \underbrace{\frac{x^2}{2}}_{\text{Quadratic}} + \underbrace{\frac{x^3}{6}}_{\text{Cubic}}$$

(18)

图 13 所示为“常数函数 + 一次函数 + 二次函数 + 三次函数”叠加近似原函数。比较图 12 和图 14，增加三次项后，逼近效果提高，误差进一步减小。

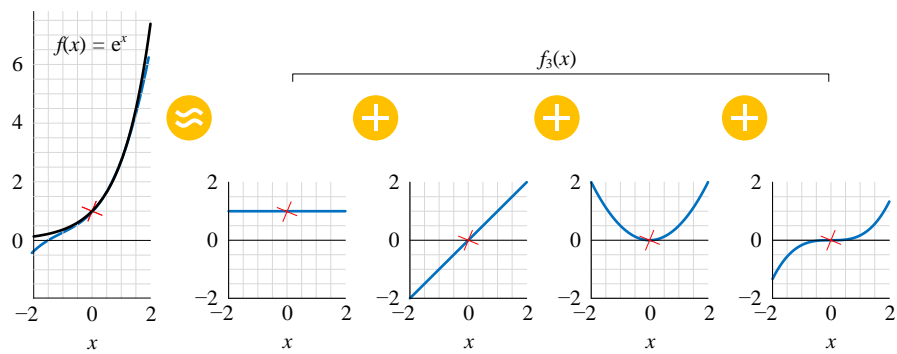


图 13. “常数函数 + 一次函数 + 二次函数 + 三次函数”近似原函数

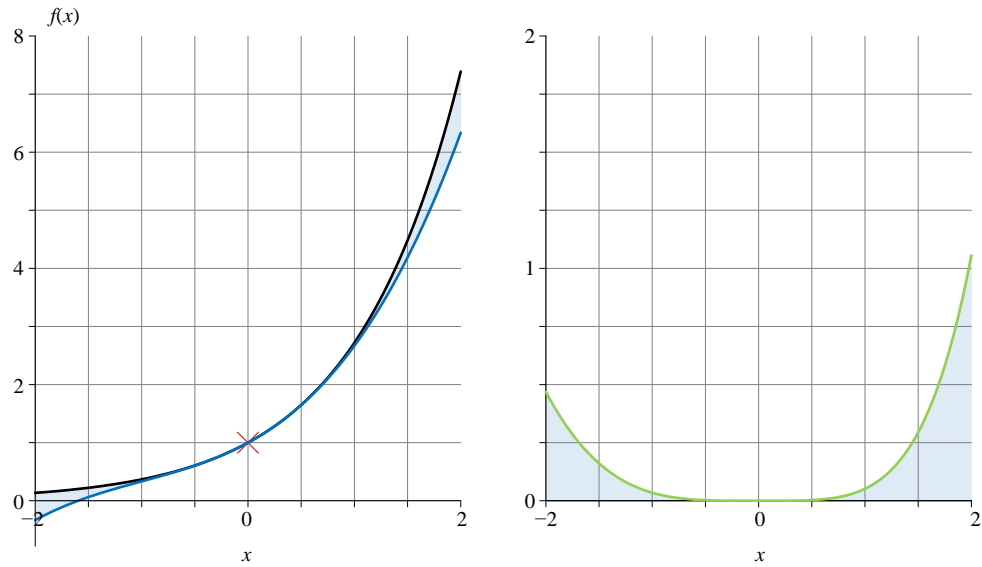


图 14. 三函数近似原函数及误差

四次函数

图 15 所示为用四次多项式函数近似原函数：

$$f(x) = \exp(x) \approx f_4(x) = \underbrace{1}_{\text{Constant}} + \underbrace{x}_{\text{Linear}} + \underbrace{\frac{x^2}{2}}_{\text{Quadratic}} + \underbrace{\frac{x^3}{6}}_{\text{Cubic}} + \underbrace{\frac{x^4}{24}}_{\text{Quartic}} \quad (19)$$

一般来说，泰勒多项式展开的项数越多，也就是说多项式幂次越高，逼近效果越好；但是，实际应用中，线性逼近和二次逼近用的最为广泛。对于误差分析本书不做探讨，对于误差分析感兴趣的同学可以自行学习。

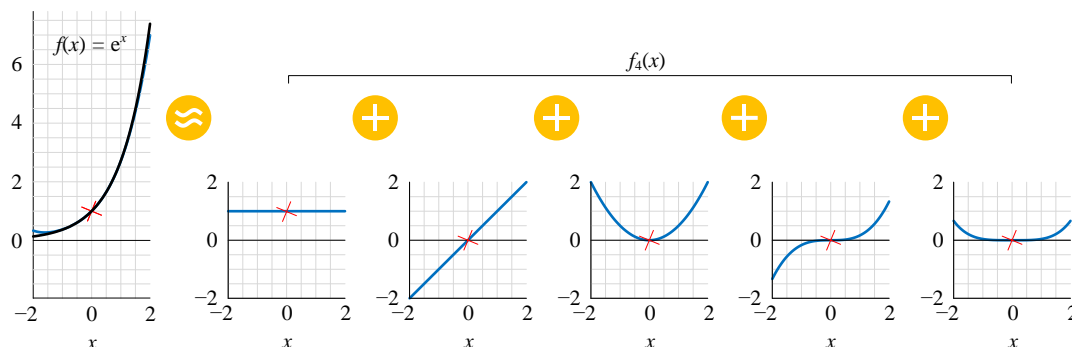


图 15.“常数函数 + 一次函数 + 二次函数 + 三次函数 + 四次函数”近似原函数



Bk3_Ch17_02.py 绘制本节图像；请大家改变展开点位置，比如 $x = 1$ 、 $x = -1$ ，并观察比较近似及误差。



在 Bk3_Ch17_02.py 基础上，我们做了一个 App 比较不同泰勒展开项数对逼近结果的影响。请参考 Streamlit_Bk3_Ch17_02.py。

17.4 二元泰勒展开：用多项式曲面近似

上一节介绍的一元泰勒展开也可以扩展到多元函数。本节以二元函数为例介绍多元函数泰勒展开。

给定二元函数 $f(x_1, x_2)$ ，它的泰勒展开可以写成：

$$f(x_1, x_2) = \underbrace{f(a, b)}_{\text{Constant}} + \underbrace{f_{x_1}(a, b)(x_1 - a) + f_{x_2}(a, b)(x_2 - b)}_{\text{Plane}} + \underbrace{\frac{1}{2!} [f_{x_1 x_1}(a, b)(x_1 - a)^2 + 2f_{x_1 x_2}(a, b)(x_1 - a)(x_2 - b) + f_{x_2 x_2}(a, b)(x_2 - b)^2]}_{\text{Quadratic}} + \dots \quad (20)$$

⚠ 注意，式中假定两个混合偏导相同，即 $f_{x_1 x_2}(a, b) = f_{x_2 x_1}(a, b)$ 。

将 (20) 写成矩阵运算形式：

$$f(x_1, x_2) = f(a, b) + \begin{bmatrix} f_{x_1}(a, b) \\ f_{x_2}(a, b) \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} x_1 - a \\ x_2 - b \end{bmatrix} + \frac{1}{2!} \begin{bmatrix} x_1 - a & x_2 - b \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} f_{x_1 x_1}(a, b) & f_{x_2 x_1}(a, b) \\ f_{x_1 x_2}(a, b) & f_{x_2 x_2}(a, b) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - a \\ x_2 - b \end{bmatrix} + \dots \quad (21)$$

如图 16 所示，从几何角度，二元函数泰勒展开相当于，水平面、斜面、二次曲面、三次曲面等多项式曲面叠加。

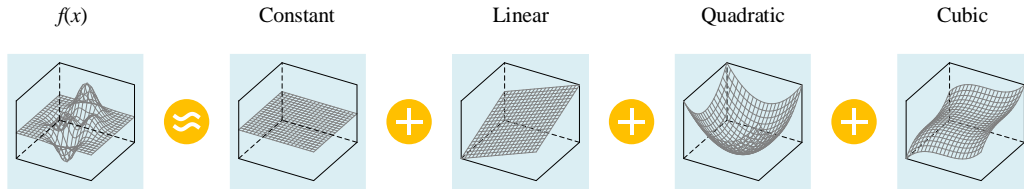


图 16. 二元函数泰勒展开原理

举个例子

给定如下二元高斯函数：

$$y = f(x_1, x_2) = \exp(-(x_1^2 + x_2^2)) \quad (22)$$

二元函数 $f(x_1, x_2)$ 一阶偏导：

$$\begin{aligned} f_{x_1}(x_1, x_2) &= \frac{\partial f}{\partial x_1}(x_1, x_2) = -2x_1 \exp(-(x_1^2 + x_2^2)) \\ f_{x_2}(x_1, x_2) &= \frac{\partial f}{\partial x_2}(x_1, x_2) = -2x_2 \exp(-(x_1^2 + x_2^2)) \end{aligned} \quad (23)$$

图 17 所示为两个一阶偏导函数的平面等高线图；图中 \times 为展开点位置，水平面位置坐标 $(-0.1, -0.2)$ 。

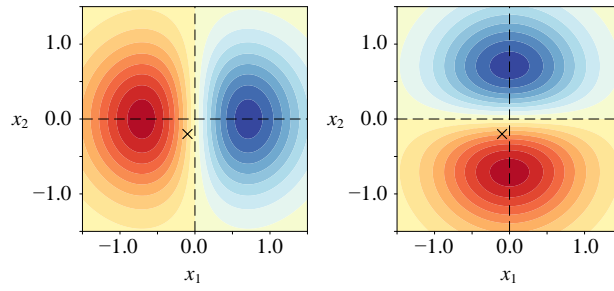


图 17. 一阶偏导数曲面等高线

(22) 中二元函数 $f(x_1, x_2)$ 二阶偏导：

$$\begin{aligned}
 f_{x_1 x_1}(x_1, x_2) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x_1, x_2) = (-2 + 4x_1^2) \exp(-(x_1^2 + x_2^2)) \\
 f_{x_2 x_2}(x_1, x_2) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(x_1, x_2) = (-2 + 4x_2^2) \exp(-(x_1^2 + x_2^2)) \\
 f_{x_1 x_2}(x_1, x_2) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(x_1, x_2) = 4x_1 x_2 \exp(-(x_1^2 + x_2^2)) \\
 f_{x_2 x_1}(x_1, x_2) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(x_1, x_2) = 4x_1 x_2 \exp(-(x_1^2 + x_2^2))
 \end{aligned} \tag{24}$$

显然，两个混合偏导相同，即，

$$f_{x_1 x_2}(x_1, x_2) = f_{x_2 x_1}(x_1, x_2) \tag{25}$$

图 18 所示为两个二阶偏导函数的平面等高线图。

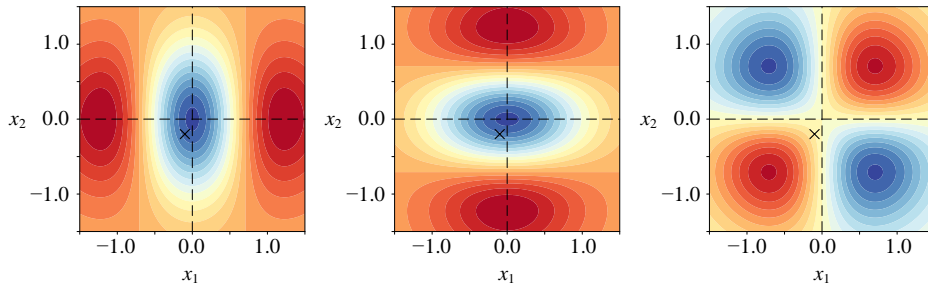


图 18. 二阶偏导数曲面等高线

展开点 $\times (-0.1, -0.2)$ 处函数值、一阶、二阶偏导数具体值为：

$$f(-0.1, -0.2) = 0.951, \quad \begin{cases} f_{x_1}(-0.1, -0.2) = 0.190 \\ f_{x_2}(-0.1, -0.2) = 0.380 \end{cases}, \quad \begin{cases} f_{x_1 x_1}(-0.1, -0.2) = -1.864 \\ f_{x_2 x_2}(-0.1, -0.2) = -1.750 \\ f_{x_1 x_2}(-0.1, -0.2) = f_{x_2 x_1}(-0.1, -0.2) = 0.076 \end{cases} \tag{26}$$

常数函数

类似前文，我们本节也采用逐步分析。首先用二元常函数来估计 $f(x_1, x_2)$ ：

$$f(x_1, x_2) \approx \underbrace{f(a, b)}_{\text{Constant}} \quad (27)$$

这相当于用一个平行于 x_1x_2 平面的水平面来近似 $f(x_1, x_2)$ 。

图 19 所示为用常数函数估计二元高斯函数，常数函数对应解析式为：

$$f(x_1, x_2) \approx f(-0.1, -0.2) = 0.951 \quad (28)$$

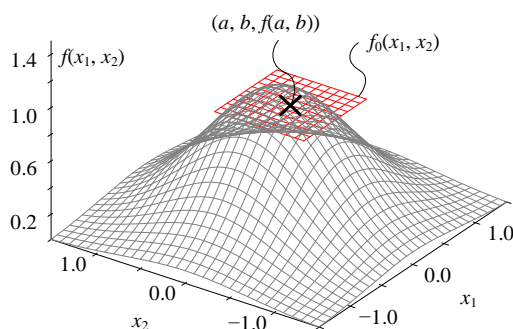


图 19. 用常数函数估计二元高斯函数

一次函数

用一次泰勒展开估计 $f(x_1, x_2)$ ：

$$f(x_1, x_2) \approx \underbrace{f(a, b)}_{\text{Constant}} + \underbrace{f_{x_1}(a, b)(x_1 - a) + f_{x_2}(a, b)(x_2 - b)}_{\text{Plane}} \quad (29)$$

相当于“水平面 + 斜面”叠加来近似 $f(x_1, x_2)$ 。

图 20 所示为一阶泰勒展开估计原函数，二元一次函数对应解析式为：

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) &\approx f(-0.1, -0.2) + f_{x_1}(-0.1, -0.2)(x_1 - (-0.1)) + f_{x_2}(-0.1, -0.2)(x_2 - (-0.2)) \\ &= 0.951 + 0.190(x_1 + 0.1) + 0.380(x_2 + 0.2) \end{aligned} \quad (30)$$

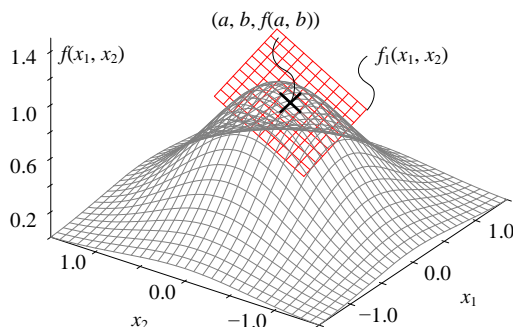


图 20. 用二元一次函数估计二元高斯函数

二次函数

用二次泰勒展开估计 $f(x_1, x_2)$:

$$f(x_1, x_2) \approx \underbrace{f(a, b)}_{\text{Constant}} + \underbrace{f_{x_1}(a, b)(x_1 - a) + f_{x_2}(a, b)(x_2 - b)}_{\text{Plane}} + \underbrace{\frac{1}{2!} [f_{x_1 x_1}(a, b)(x_1 - a)^2 + 2f_{x_1 x_2}(a, b)(x_1 - a)(x_2 - b) + f_{x_2 x_2}(a, b)(x_2 - b)^2]}_{\text{Quadratic}} \quad (31)$$

相当于“水平面 + 斜面 + 二次曲面”叠加来近似 $f(x_1, x_2)$ 。

图 21 所示为二阶泰勒展开估计原函数，二元二次函数对应解析式为：

$$f_2(x_1, x_2) = 0.951 + 0.190(x_1 + 0.1) + 0.380(x_2 + 0.2) + \frac{1}{2} [-1.864(x_1 + 0.1)^2 + 0.152(x_1 + 0.1)(x_2 + 0.2) - 1.750(x_2 + 0.2)^2] \quad (32)$$

请大家用本节代码自行展开整理上式。

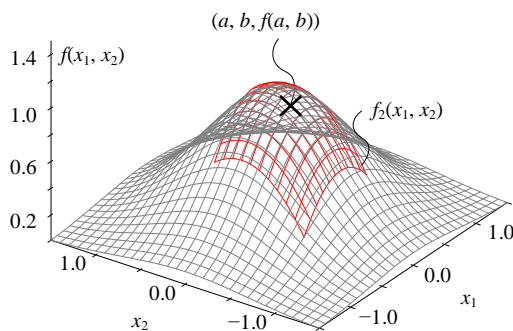


图 21. 用二次函数估计二元高斯函数



Bk3_Ch17_03.py 绘制图 19、图 20、图 21 三幅图。建议大家自己用 Streamlit 把这个代码改成一个 App。

17.5 数值微分：估算一阶导数

并不是所有函数都能得到导数的解析解，很多函数需要用数值方法近似求得导数。数值方法就是“近似”。

三种方法

本节介绍三种一次导数的数值估算方法：向前差分 (forward difference)、向后差分 (backward difference)、中心差分 (central difference)，具体如图 22 所示。

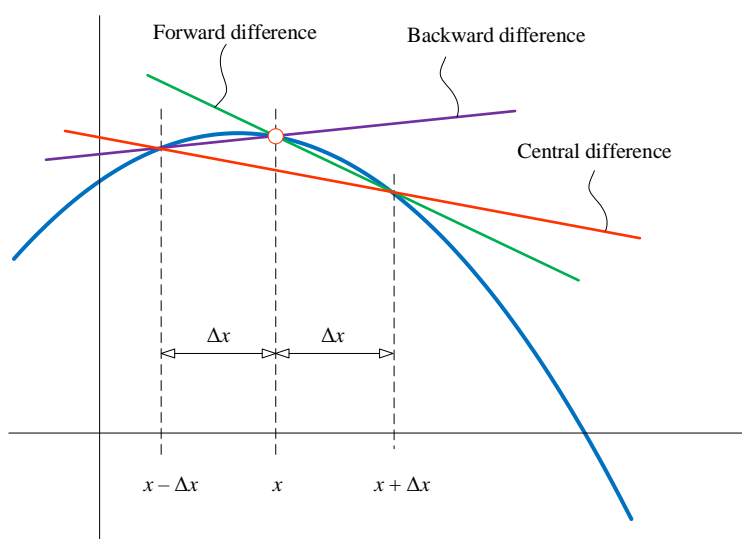


图 22. 三种一次导数的数值估计方法

一阶导数向前差分的具体公式为：

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (33)$$

一阶导数向后差分的公式如下：

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} \quad (34)$$

一阶导数的中心差分形式如下：

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (35)$$

举个例子

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

给定如下高斯函数：

$$f(x) = \exp(-x^2) \quad (36)$$

我们可以很容易计算得到它的一阶导数函数解析式为：

$$f'(x) = -2x \exp(-x^2) \quad (37)$$

图 23 所示为高斯函数和它的一阶导数图像。同时，我们用三种不同的数值方法在 x 取不同值时估算 (37)。

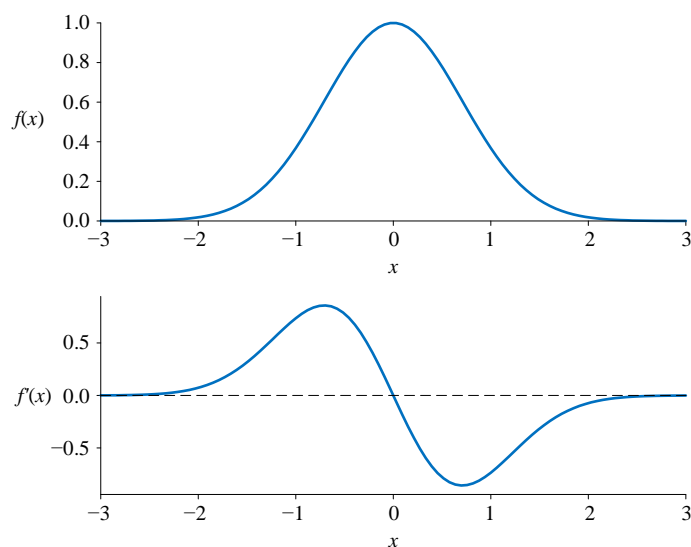


图 23. 高斯函数和它的一阶导数图像

设定 $\Delta x = 0.2$ ，图 24 对比中心差分、向前差分、向后差分结果。图 24 中，中心差分的结果相对好一些。

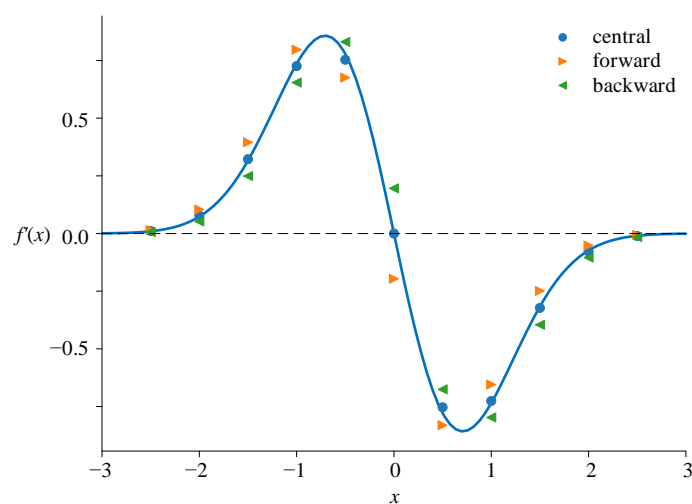
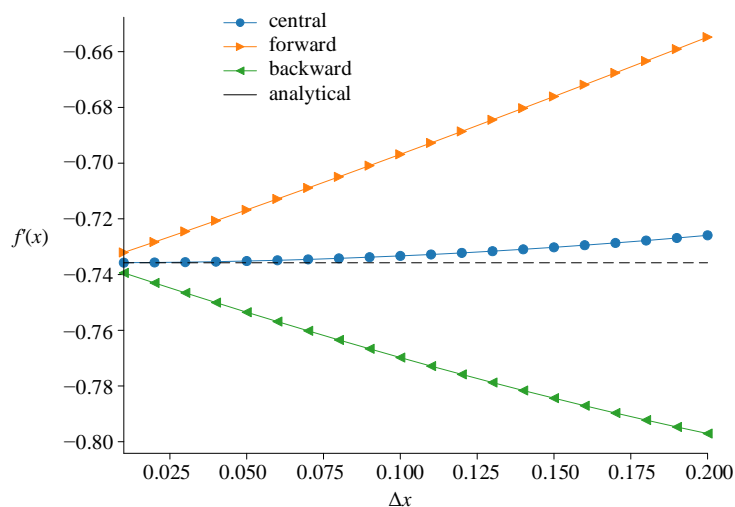
图 24. 对比中心差分、向前差分、向后差分结果, $\Delta x = 0.2$

图 25 所示为 $x = 1$, 步长 Δx 取不同值时, 中心差分、向前差分、向后差分结果对比。很明显当 Δx 减小时, 中心差分更快地收敛于解析解, 具有更高的精度。

图 25. 步长 Δx 不同时, 中心差分、向前差分、向后差分结果

Bk3_Ch17_04.py 完成三种差分运算, 并绘制图 24 和图 25。



本章有三个关键点——微分、泰勒展开、数值微分。

再次强调，导数是函数的变化率，而微分是函数线性近似。从几何视角来看，微分用切线近似非线性函数。

泰勒展开是一系列多项式函数叠加，用来近似某个复杂函数；最为常用的是一阶泰勒展开和二阶泰勒展开。

并不是所有的函数都能很容易求得导数，对于求导困难的函数，我们可以采用数值微分的方法。本章介绍了三种不同的方法。