Методы Оптимизации. Даниил Меркулов. Векторное дифференцирование.

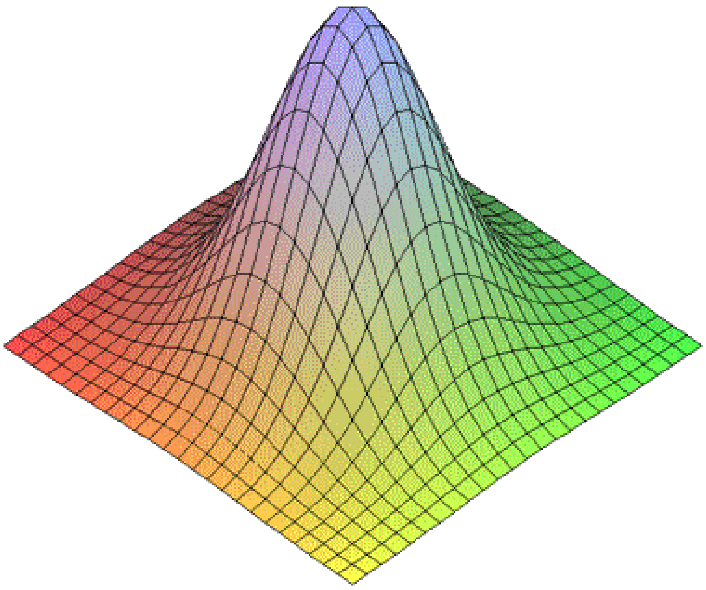
Базовые понятия

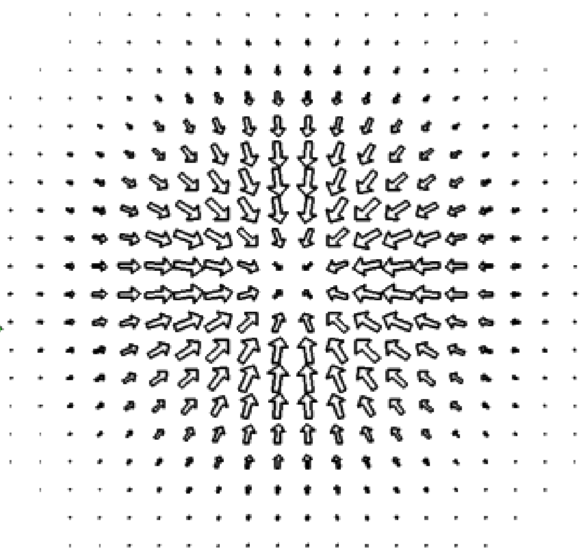
Градиент

Пусть есть функция $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, тогда вектор, составленный из частных производных следующим образом:

$$\nabla f(x) = \dfrac{df}{dx} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

называется градиентом функции $f(x)$. Этот вектор указывает направление наискорейшего возрастания в точке. Стало быть, вектор $-\nabla f(x)$ совпадает с направлением наискорейшего спуска для заданной функции в точке. Кроме того, вектор градиента в конкретной точке всегда перпендикулярен линии уровня функции, содержащей эту точку.





Соответственно,

$$\nabla f(x)^T = \dfrac{df}{dx^T} = \left(\dfrac{\partial f}{\partial x_1}, \dfrac{\partial f}{\partial x_2}, \ldots, \dfrac{\partial f}{\partial x_n} \right)$$

Гессиан

Пусть есть функция $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, тогда матрица, составленная из смешанных производных второго порядка следующим образом:

$$f''(x) = \frac{d(\nabla f)}{dx^T} = \frac{d\left(\nabla f^T\right)}{dx} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}$$

называется матрицей Гессе фугкции $f(x)$ и содержит в себе информацию о кривизне функции многих переменных в точке. Определитель этой матрицы называют гессианом функции $f(x)$ в точке. Эта матрица симметрична в том случае, когда порядок смешанного дифференциирования не важен, т.е. в случае, когда смешанные производные непрерывны.

Широко прянято называть гессианом не определитель матрицы Гессе, а саму матрицу, мы будем делать так же:) Положительная (отрицательная) определенность гессиана в точке является достаточным условием локального минимума (максимума) функции в точке.

Обобщением понятия гессиана на случай векторнозначной функции $(f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m)$ является трехмерный тензор, состоящий из гессианов по каждой компоненте вектор - функции:

$$\left(H\left(f_1(x)\right), H\left(f_2(x)\right), \ldots, H\left(f_m(x)\right)\right)$$

Якобиан

Для функции $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ вводится понятие матрицы Якоби:

$$f'(x) = \frac{df}{dx^T} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Если матрица квадратная, то её определитель называют якобианом функции $f(x)$. Часто саму матрицу так же называют якобианом. Если для некоторой функции в точке определитель матрицы Якоби отличен от нуля, то тогда и только тогда в окрестности этой точки существует обратная функция.

Матричное дифференцирование

Сводная таблица

$$f(x) : X \to Y; \qquad \frac{\partial f(x)}{\partial x} \in G$$

X	Y	G	Обозначение
$\mathbb{R}$	$\mathbb{R}$	$\mathbb{R}$	$f'(x)$ (производная)
$\mathbb{R}^n$	$\mathbb{R}$	$\mathbb{R}^{\mathrm{n}}$	$\dfrac{\partial f}{\partial x_i}$ (градиент)
$\mathbb{R}^n$	$\mathbb{R}^m$	$\mathbb{R}^{n\times m}$	$\dfrac{\partial f_i}{\partial x_j}$ (якобиан)
$\mathbb{R}^{m\times n}$	$\mathbb{R}$	$\mathbb{R}^{m\times n}$	$\dfrac{\partial f}{\partial x_{ij}}$

Общая схема

Дифференцирование сложной функции

- Пусть $x \in \mathbb{R}^n; \quad g: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^p; \quad f: \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}^1$

$$\underset{n\times 1}{\frac{\partial f(g(x))}{\partial x_j}} = \sum_{i=1}^{p} \frac{\partial f}{\partial g_i} \cdot \frac{\partial g_i}{\partial x_j} = \underset{n\times p}{\frac{\partial g^T}{\partial x_j}} \cdot \underset{p\times 1}{\frac{\partial f}{\partial g}}$$

- Для векторнозначной функции: пусть $x \in \mathbb{R}^n; \quad g: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^p; \quad f: \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}^m$

$$\underset{m\times n}{\frac{\partial f(g(x))}{\partial x^T}} = \underset{m\times p}{\frac{\partial f}{\partial g^T}} \cdot \underset{p\times n}{\frac{\partial g}{\partial x^T}}$$

- Стало быть для $p = 1$: $x \in \mathbb{R}^n; \quad g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^1; \quad f : \mathbb{R}^1 \to \mathbb{R}^m$

$$\underset{m\times n}{\frac{\partial f\left(g(x)\right)}{\partial x^T}} = \underset{m\times 1}{\frac{\partial f}{\partial g}} \cdot \underset{1\times n}{\frac{\partial g}{\partial x^T}}$$

- Еще один важный случай: $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m; \quad \alpha : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^1$

$$\underset{m\times n}{\frac{d\left(\alpha(x) f(x)\right)}{dx^T}} = \alpha(x) \underset{m\times n}{\frac{df}{dx^T}} + \underset{m\times 1}{f(x)} \underset{1\times n}{\frac{d\alpha(x)}{dx^T}}$$

Примеры

Пример 1

Найти $\nabla f(x)$, если $f(x) = c^T x$

Решение:

- $f(x) = \sum\limits_{i=1}^n c_i x_i$
- $\dfrac{\partial f(x)}{\partial x_i} = c_i \to \nabla f(x) = c$

Пример 2

Найти $\nabla f(x)$, если $f(x) = \dfrac{1}{2} x^T A x + b^T x + c$

Решение:

- $f(x) = \sum\limits_{i=1}^n \left[\dfrac{1}{2} x_i \left(\sum\limits_{j=1}^n a_{ij} x_j \right) + b_i x_i + c_i \right] = \dfrac{1}{2} \sum\limits_{i,j=1}^n \left[x_i a_{ij} x_j \right] + \sum\limits_{i=1}^n b_i x_i + c_i$
- $\dfrac{\partial f(x)}{\partial x_i} = \dfrac{1}{2} \sum\limits_{i,j=1}^n \left(a_{ij} + a_{ji} \right) x_i + b_i \to \nabla f(x) = \dfrac{1}{2} \left(A + A^T \right) x + b$

Пример 3

Найти градиент билинейной формы $f(x) = u^T(x) R v(x)$,
$R \in \mathbb{R}^{m\times p}; \quad u(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m; \quad v(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^p$

Решение:

$$\frac{d\left(u^T R v\right)}{dx} = \frac{du^T}{dx} \left(\frac{\partial \left(u^T R v\right)}{\partial u} \right) + \frac{dv^T}{dx} \left(\frac{\partial \left(u^T R v\right)}{\partial v} \right) = \frac{du^T}{dx} R v + \frac{dv^T}{dx} R^T u$$

Пример 4

Найти $\nabla f(x)$, если $f(x) = \dfrac{1}{2} \|Ax - b\|^2$

Решение:

Задачу можно решить двумя различными способами: как композицию функций $f(x) = \frac{1}{2}\|x\|^2; \quad g(x) = Ax - b$, а так же классическим способом, рассмотрев скалярное представление функции.

Ответ: $\nabla f(x) = A^T(Ax - b)$

Пример 5

Найти $\nabla f(x), f''(x)$, если $f(x) = -e^{-x^T x}$

Решение:

- Заметим, что задачу можно решить используя формулу для вычисления градиента сложной функции, однако мы, по старинке, распишем скалярный вид:

$$f(x) = -e^{-\sum\limits_i x_i^2}$$

- Аккуратно посчитаем одну из компонент градиента:

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_k} = -e^{-\sum\limits_i x_i^2} \cdot \left(\frac{\partial (-\sum\limits_i x_i^2)}{\partial x_k} \right) = e^{-\sum\limits_i x_i^2} \cdot 2x_k$$

Значит, вектор градиента запишется, как: $\nabla f(x) = 2e^{-x^T x} \cdot x$

- Абсолютно по такой же логике посчитаем элемент гессиана. Обратите внимание на индексы! Типичная ошибка (недопонимание) здесь возникает, когда записывается везде i, j, бездумно повторяя индексы

$$g_k = \frac{\partial f(x)}{\partial x_k} \to H_{k,p} = \frac{\partial g_k}{\partial x_p}$$

$$H_{k,p} = -\left(e^{-\sum\limits_i x_i^2} \cdot 2x_p \right) 2x_k + 2e^{-\sum\limits_i x_i^2} \frac{\partial x_k}{\partial x_p} = 2e^{-\sum\limits_i x_i^2} \cdot \left(\frac{\partial x_k}{\partial x_p} - 2x_p x_k \right)$$

- Итого: $f''(x) = H_{f(x)} = 2e^{-x^T x}\left(E - 2xx^T\right)$

Пример 6

Найти $f'(X)$, если $f(X) = \log\det X$; $X \in S_{++}^n$ - положительно определенная симметричная квадратная матрица

Решение:

- Применим хитрый трюк и вспомним об еще одном предназначении градиента и производной - линейная аппроксимация функции в окрестности точки.
  Заметим, что:

$$\log\det[X+\Delta X] = \log\det\left[X^{1/2}\left(I + X^{-1/2}\Delta X X^{-1/2}\right)X^{1/2}\right] =$$
$$\log\det\left[X^{1/2}\right]\det\left[I + X^{-1/2}\Delta X X^{-1/2}\right]\det\left[X^{1/2}\right] =$$

$$= \log\det[X]\det\left[I + X^{-1/2}\Delta X X^{-1/2}\right] = \log\det[X] + \log\det\left[I + X^{-1/2}\Delta X X^{-1/2}\right]$$

- Вспомним так же про то, что определитель матрицы равен произведению её собственных значений

$$\log\det[X+\Delta X] = \log\det X + \sum_{i=1}^{n}\log(1+\lambda_i)$$

```
Здесь $\lambda_i$ - собственные числа матрицы $X^{-1/2} \Delta X X^{-1/2}$. Далее используем факт "малости" матрицы $\Delta X$ (в смысле малости нормы этой матрицы), а стало быть, для приближения первого порядка справедливо: $\log (1 + \lambda_i) \approx \lambda_i$ т.к. $\lambda_i$ так же должны быть малыми.
```

$$\log\det[X+\Delta X] \approx \log\det X + \sum_{i=1}^{n}\lambda_i$$

$$\log\det[X+\Delta X] \approx \log\det X + \mathbf{tr}\left[X^{-1/2}\Delta X X^{-1/2}\right] =$$
$$\log\det X + \mathbf{tr}\left[X^{-1/2}X^{-1/2}\Delta X\right] = \log\det X + \mathbf{tr}\left[X^{-1}\Delta X\right]$$

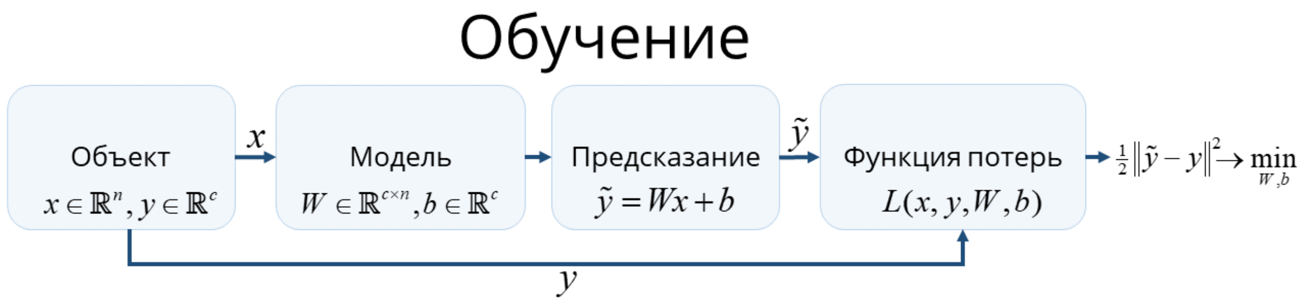
Заметим, что в пространстве матриц роль скалярного произведения играет именно след их произведения: $\mathbf{tr}(A^TB) = \mathbf{tr}(AB^T) = \mathbf{tr}(B^TA) = \mathbf{tr}(BA^T)$. Стало быть, имеем:

$$f(X+\Delta X) \approx f(X) + \langle X^{-1}, \Delta X\rangle$$

$$f(X+\Delta X) \approx f(X) + \langle f'(X), \Delta X\rangle$$

Значит, $f'(X) = X^{-1}$

Пример 7



Рассмотрим упрощенную задачу обучения с помощью линейной модели (однослойной нейронной сети). Для этого необходимо подобрать параметры полносвязного слоя $W \in \mathbb{R}^{c \times n}, b \in \mathbb{R}^c$ так, чтобы минимизировать функцию потерь (невязку). Для этого часто используют градиентные методы. Т.е. схема оптимизационных алгоритмов идейно следующая:

$$b_{k+1} = b_k - \beta \frac{\partial L(x, y, W_k, b_k)}{\partial b^T}$$

$$W_{k+1} = W_k - \omega \frac{\partial L(x, y, W_k, b_k)}{\partial W}$$

Здесь частные производные считаются именно по параметрам W, b, а не по аргументу x, а β, ω - заданные константы.

Посчитайте $\dfrac{\partial L(x, y, W, b)}{\partial b^T}$ и $\dfrac{\partial L(x, y, W, b)}{\partial W}$

Решение:

- $L(x, y, W, b) = \dfrac{1}{2} \sum\limits_{i=1}^{c} \left(\sum\limits_{j=1}^{n} (w_{ij} x_j) + b_i - y_i \right)^2$
- $\dfrac{\partial L(x, y, W, b)}{\partial b_p} = \dfrac{1}{2} 2 \sum\limits_{i=1}^{c} \left(\sum\limits_{j=1}^{n} (w_{ij} x_j) + b_i - y_i \right) \cdot \dfrac{\partial b_i}{\partial b_p} = \sum\limits_{j=1}^{n} (w_{pj} x_j) + b_p - y_p$
- Значит, $\dfrac{\partial L(x, y, W, b)}{\partial b^T} = Wx + b - y$
- Не забываем про главный секрет векторного дифференцирования: наличие, как минимум, латинского алфавита для индексов:

$$\frac{\partial L(x, y, W, b)}{\partial w_{rs}} = \frac{1}{2} 2 \sum_{i=1}^{c} \left(\sum_{j=1}^{n} (w_{ij} x_j) + b_i - y_i \right) \cdot \frac{\partial \sum\limits_{j=1}^{n} (w_{ij} x_j)}{\partial w_{rs}}$$

$$\frac{\partial L(x, y, W, b)}{\partial w_{rs}} = \left(\sum_{j=1}^{n} (w_{rj} x_j) + b_r - y_r \right) \cdot x_s$$

$$\frac{\partial L(x, y, W, b)}{\partial w_{rs}} = \sum_{j=1}^{n} (w_{rj} x_j x_s) + b_r x_s - y_r x_s$$

- Значит, $\dfrac{\partial L(x, y, W, b)}{\partial W} = Wxx^T + (b - y)x^T$

Домашнее задание 5

1. Найти $\nabla f(x)$, если $f(x) = Ax - x^T A$
2. Найти $\nabla f(x), f''(x)$, если $f(x) = \dfrac{-1}{1 + x^T x}$
3. Найти $f'(X)$, если $f(X) = \det X$
4. Найти $f''(X)$, если $f(X) = \log \det X$
5. Найти градиент и гессиан функции $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$,

   $$f(x) = \log \sum_{i=1}^{m} \exp(a_i^T x + b_i), \quad a_1, \ldots, a_m \in \mathbb{R}^n; \quad b_1, \ldots, b_m \in \mathbb{R}$$