数值优化（Numerical Optimization）学习系列-计算导数（Calculating Derivatives）

下一步 于 2015-12-27 18:50:22 发布

概述

> 最优化问题中很多算法，包括非线性最优化、非线性等式等都需要计算导数。简单函数可以直接进行人工计算或者编码实现，对于复杂的情况，需要寻找一些方法进行计算或者近似。本节主要内容包括
> 1. 常见导数求解方法
> 2. 有限差分方法
> 3. 自动微分方法
> 4. 总结

常见导数求解方法

有限差分方法（Finite Differencing）

根据导数的定义，导数表示函数在给定点x处，给定无限小的涉动后函数值的改动。因此我们可以根据定义，在给定点x处给定一个无限小的抖动，看函数值的变化率，即

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} \approx \frac{f(x+\epsilon e_i)-f(x-\epsilon e_i)}{2\epsilon}$$

自动微分方法

基本思路就是将复杂的函数分解为基本函数以及基本运算，然后通过构建有向无环图进行求解。常见函数导数求解方法

$f(x)$	$f'(x)$	$f(x)$	$f'(x)$	$f(x)$	$f'(x)$
C	0	$\cos x$	$-\sin x$	$\text{arccsc}\, x$	$-\frac{1}{x\sqrt{x^2-1}}$
x^m	mx^{m-1}	$\tan x$	$\sec^2 x$	$\text{sh}\, x$	$\text{ch}\, x$
$\frac{1}{x}$	$-\frac{1}{x^2}$	$\cot x$	$-\csc^2 x$	$\text{ch}\, x$	$\text{sh}\, x$
$\sqrt{x}$	$\frac{1}{2\sqrt{x}}$	$\sec x$	$\sec x \tan x$	$\text{th}\, x$	$\frac{1}{\text{ch}^2 x}$
a^x	$a^x \ln a$	$\csc x$	$-\csc x \cot x$	$\text{arsh}\, x$	$\frac{1}{\sqrt{1+x^2}}$
e^x	e^x	$\arcsin x$	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	$\text{arch}\, x$	$\frac{1}{\sqrt{x^2-1}}$
$\log_a x$	$\frac{1}{x\ln a}$	$\arccos x$	$-\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	$\text{arth}\, x$	$\frac{1}{1-x^2}$
$\ln x$	$\frac{1}{x}$	$\arctan x$	$\frac{1}{1+x^2}$	$\ln(\sin x)$	$\cot x$
$\lg x$	$\frac{1}{x}\lg e$	$\text{arccot}\, x$	$-\frac{1}{1+x^2}$	$\ln(\cos x)$	$-\tan x$
$\sin x$	$\cos x$	$\text{arcsec}\, x$	$\frac{1}{x\sqrt{x^2-1}}$	$\ln(\tan x)$	$2\csc 2x$

另外就是导数运算法则，例如函数加、减、乘除以及链式法则的应用。

符号微分法

有限微分近似算法

基础思想是泰勒定理和Lipschitz连续。介绍如下：

1. 泰勒公式：

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x+tp) p$$

2. Lipschitz continuous: 对任意的x和x2

$$d_Y(f(x_1, x_2)) \leq K d_X(x1, x2)$$

参考wiki

有限微分近似算法主要是基于导数定义，在给定点x处给定一个无限小的改动，看函数的变化。

前向微分

> 定义：
>
> $$\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} \approx \frac{f(x+\epsilon e_i) - f(x)}{\epsilon}$$
>
> 对于n维的向量，需要计算量为（n+1）

方法推导

根据泰勒公式：

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x+tp) p$$

假设 $||\nabla^2 f(x)|| \leq L$，L在一定范围内，则有

$$||f(x+p) - f(x) - \nabla f(x)^T p|| \leq (L/2)||p||^2$$

，此时令 $p = \epsilon e_i$，代入可以得到

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} \approx \frac{f(x+\epsilon e_i) - f(x)}{\epsilon} + \delta\,; \delta \leq (L/2)\epsilon$$

可见误差和无限小的改动相关。

在用计算机解决问题时，需要注意的是计算机浮点数本身就会有误差，例如对于double类型，该误差为u=1.1*10^(-16)。此时$\epsilon = \sqrt{u}$会得到最优的结果

中心微分方法

> 定义
>
> $$\frac{\partial f}{\partial x_i} \approx \frac{f(x+\epsilon e_i) - f(x-\epsilon e_i)}{2\epsilon}$$

> 对于N维向量，需要进行(2N+1)次运算

方法推导

该方法的基础就是函数必须能保证二级导数存在并且满足Lipschitz连续，此时根据泰勒公式

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x+tp)p$$

变换后有

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x)p + O(||p||^3)$$

代入 $p = \epsilon e_i$和$p = -\epsilon e_i$，可以得到

$$f(x+\epsilon e_i) = f(x) + \epsilon \frac{\partial f(x)}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \epsilon^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} + O(||\epsilon||^3)$$

$$f(x-\epsilon e_i) = f(x) - \epsilon \frac{\partial f(x)}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \epsilon^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} + O(||\epsilon||^3)$$

两个等式相减，同时两端同时除以 ϵ可以得到

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} \approx \frac{f(x+\epsilon e_i) - f(x-\epsilon e_i)}{2\epsilon} + O(\epsilon^2)$$

可见相比于前向微分，它的误差变成 $O(\epsilon^2)$。考虑到计算机的精度问题，参数 $\epsilon = u^{1/3}$最优。

应用

雅克比矩阵（Jacobian）

定义，对于函数向量r:$R^n \rightarrow R^m$，雅克比矩阵就是每一个函数对x求导得到的矩阵

$$J(x) = \begin{bmatrix} \nabla r_1(x)^T \\ \nabla r_2(x)^T \\ \dots \\ \nabla r_m(x)^T \end{bmatrix}$$

根据有限微分的定义可以扩展到函数向量上

$$\frac{\partial r(x)}{\partial x_i} \approx \frac{r(x + \epsilon e_i) - r(x)}{\epsilon}$$

此时计算一次可以得到矩阵的一列。
对于某些稀疏的矩阵，可以将不相交的变量进行分类，一次计算可以得到多列。

Hessian矩阵

Hessian矩阵是对称的，如果按照优先微分的方法得到的Hessian矩阵可能不是对称的，可以通过对称位置取平均的方法。
对于很多重要的算法，需要求解的是Hessian和某向量的乘积，根据泰勒公式有

$$\nabla f(x + \epsilon p) = \nabla f(x) + \epsilon \nabla^2 f(x)^T p + O(||\epsilon||^3)$$

，从而有

$$\nabla^2 f(x)^T p \approx \frac{\nabla f(x + \epsilon p) - \nabla f(x)}{\epsilon}$$

，由于一阶导数可以得到，因此可以计算得到Hessian和某向量的乘积。

如果需要计算Hessian矩阵本身，则根据

$$f(x + p) = f(x) + \nabla f(x)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x) p + O(||p||^3)$$

代入 $p = \epsilon e_i$; $p = \epsilon e_j$; $p = \epsilon(e_i + e_j)$推导可以得到

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \approx \frac{f(x + \epsilon e_i + \epsilon e_j) - f(x - \epsilon e_i) - f(x - \epsilon e_j) - f(x)}{\epsilon^2} + O(\epsilon)$$

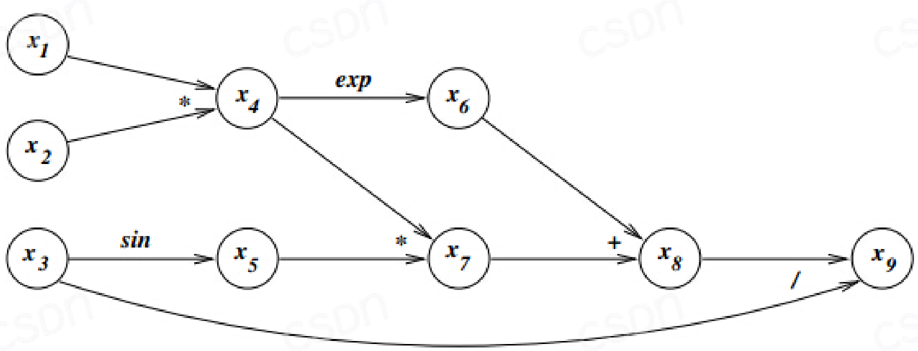
对于稀疏的Hessian矩阵，可以利用Hessian对称原理得到高效算法。

自动微分方法

根据前面的介绍，自动微分方法的主要思路是将复杂函数分解成简单函数的简单运算，然后合成最终的结果。主要有前向模式和后向模式，分别介绍如下。
在进行算法之前，一般需要将复杂函数表示成简单函数以及运算的有向无环图，例如：$f(x)=(x_1x_2\sin x_3+e^{x_1x_2})/x_3$，可以表示为

$$x_4 = x_1 * x_2,$$
$$x_5 = \sin x_3,$$
$$x_6 = e^{x_4},$$
$$x_7 = x_4 * x_5,$$
$$x_8 = x_6 + x_7,$$
$$x_9 = x_8 / x_3.$$

图示为



在实际应用中不需要人工构建该图。

前向模式

从前向后依次计算各个节点对目标节点的导数，思路是链式规则。
例如

$$\nabla x_7 = \frac{\partial x_7}{\partial x_4}\nabla x_4 + \frac{\partial x_7}{\partial x_5}\nabla x_5$$

如果计算了所有的 ∇x_i则最终的结果 ∇x_9

后向模式

和前向模式相反，根据节点的孩子节点计算得到该节点的导数，BP算法和图置信传播都是利用该思想。

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \sum_{j\ a\ child\ of i} \frac{\partial f}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial x_i}$$

对比

1. 对于结果是实数的函数，即$f: R^n \to R$，此时后向方式效率更高，对于函数向量，即$f: R^n \to R^m$，两者效率差不多
2. 对于存储空间，后向模式需要保存所有的中间导数结果，可以通过一些优化算法进行优化，例如check pointing

总结

通过该小结的学习，可以了解到
1. 常见计算导数的方法
2. 有限微分原理和可选方法
3. 自动微分原理和可选方法
4. 应用到计算梯度、雅克比矩阵或者Hessian矩阵，以及稀疏情况下如何优化。