关于自动求导机制的理解

Yzy

2019 年 8 月 30 日

目录

1 投影值，投影向量

由**向量点乘公式以及直角三角形**来推投影值 $\mathrm{Prj}_{\mathbf{a}}\,\mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \dfrac{\mathbf{a}}{|\mathbf{a}|}$。

$\vec{\boldsymbol{a}} \cdot \vec{\boldsymbol{b}} = |\vec{\boldsymbol{a}}||\vec{\boldsymbol{b}}| \cos\theta \quad \to \cos\theta = \dfrac{\vec{\boldsymbol{a}} \cdot \vec{\boldsymbol{b}}}{|\vec{\boldsymbol{a}}||\vec{\boldsymbol{b}}|}$

由直角三角形三边之间的关系可知，直角边 = 斜边乘上 $\cos\theta$。即直角边长 $=\vec{\boldsymbol{b}}\cos\theta = \dfrac{\vec{\boldsymbol{a}} \cdot \vec{\boldsymbol{b}}}{|\vec{\boldsymbol{a}}|}$，**也就是 b 在 a 上的投影值 (投影向量的模)!**

而 b 在 a 上的投影向量 $\vec{\boldsymbol{p}} = x\vec{\boldsymbol{a}}$，**其中 x 是倍数!** 倘若 $\vec{\boldsymbol{p}} = x\dfrac{\vec{\boldsymbol{a}}}{|\vec{\boldsymbol{a}}|}$ **则 x 便是上述的投影值!**

2 方向导数与梯度的关系

$\frac{\partial f}{\partial l} = \mathrm{grad}\, f \cdot \frac{\vec{l}}{|\vec{l}|}$，可以看出：方向导数是梯度在向量 $\vec{\boldsymbol{l}}$ 上的投影!

所以当沿 $\vec{\boldsymbol{l}}$ 方向的单位向量 $\vec{\boldsymbol{v}} = \dfrac{\vec{\boldsymbol{l}}}{|\vec{\boldsymbol{l}}|} = (1,1,1)$ 时，方向导数便是梯度!!!

3 auto grad 理解

以三维向量为例：$X=[x_1,x_2,x_3] \quad \rightarrow Y=X^2$

Y 对 X 的导数即为向量对向量求导,得到一个 jacobi 矩阵 $J=\begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_1}{\partial x_2} & \frac{\partial y_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} & \frac{\partial y_2}{\partial x_3} \\ \frac{\partial y_3}{\partial x_1} & \frac{\partial y_3}{\partial x_2} & \frac{\partial y_3}{\partial x_3} \end{pmatrix}$

其中 $y_1=f_1(x_1,x_2,x_3)=x_1^2$，$y_2,y_3$ 同理!

Y 对每一个分量 x_i 的导数是：各个分量函数 y_i 对 x_i 的偏导数沿某一方向 $\vec{\boldsymbol{v}}$ 的累积！一般默认方向是 $\vec{\boldsymbol{v}}=(1,1,1)$。比如 $\dfrac{d(Y)}{d(x_1)}=\frac{\partial y_1}{\partial x_1}+\frac{\partial y_2}{\partial x_1}+\frac{\partial y_3}{\partial x_1}$, $d(Y)$ 对 x_2,x_3 的导数以此类推。

所以 $\dfrac{d(Y)}{d(x_1)}$ 可以理解为**关于 x_i 的偏导向量 $(\frac{\partial y_1}{\partial x_1},\frac{\partial y_2}{\partial x_1},\frac{\partial y_3}{\partial x_1})$ 在 $\vec{\boldsymbol{v}}$ 方向上的投影!**

以链式法则 chain rule 来看，也是这样，如对 x_1 求导，因为每个分量函数 y_i 里都带有 x_1, 所以就是上述的结果!

高数中：$u=3x+2y, v=2x+3y, z=u+v \Rightarrow X=[x,y], Y=[u,v], z=g(Y)$，所以以矩阵的角度来看，$\vec{y}=f(\vec{x})$，$l=g(\vec{y})$，对每个变量 x_i 的求导方式用矩阵来计算：

$$J=\begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_m}{\partial x_n} \end{pmatrix} \quad \rightarrow J^T=\begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_m}{\partial x_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_1}{\partial x_n} & \cdots & \frac{\partial y_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

利用链式求导里的中间导数 $v=\begin{pmatrix} \frac{\partial l}{\partial y_1} & \cdots & \frac{\partial l}{\partial y_m} \end{pmatrix}^T$，有：

$$J^T\cdot v=\begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_m}{\partial x_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_1}{\partial x_n} & \cdots & \frac{\partial y_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{\partial l}{\partial y_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial l}{\partial y_m} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \frac{\partial l}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial l}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

，其中:

$$\frac{\partial l}{\partial x_1}=\frac{\partial l}{\partial y_1}\frac{\partial y_1}{\partial x_1}+\cdots+\frac{\partial l}{\partial y_m}\frac{\partial y_m}{\partial x_1}$$

$\dfrac{\partial l}{\partial x_2}=\dfrac{\partial l}{\partial y_1}\dfrac{\partial y_1}{\partial x_2}+\cdots+\dfrac{\partial l}{\partial y_m}\dfrac{\partial y_m}{\partial x_2}$,...... 以此类推。

所以，**利用 Jacobi 矩阵来一次性计算 l 对所有 x_i 的偏导累积:**

- 若 l 是标量，则 $\vec{\boldsymbol{v}}$ 可以按 $l=g(\vec{y})$ 计算出来
- 若 l 是向量，则 $\vec{\boldsymbol{v}}$ 一般默认取 $(1,1,1)$ 的方向，也可以按需求取其他任意方向!

注意： 如果只有 $\vec{y}=f(\vec{x})$(也就是上述第二种情况)，想得到 $\dfrac{d(y)}{dx}$，会在计

算图中添加一个运算 $l = g(\vec{y})$，l 是标量！(**实际上** $l = sum(\vec{y})$**, 因为** $\vec{v}$ **默认 = 全 1**) 当进行 $l.backward()$ 实际上是 $y.backward(\boldsymbol{\vec{v}})$, 这个 $\boldsymbol{v}$ 一般取与 $\vec{y}$ 维度相同的全 1 矩阵，这样得到的就是 $[\frac{d\vec{y}}{dx_1}, \frac{d\vec{y}}{dx_{2},}...]$，**因为** $\vec{v}$ **把** $\frac{dl}{dy_i}$ **全部变成了 1**。此处 $\boldsymbol{\vec{v}}$ 可以理解为对应 $\vec{y}$ 的 $\frac{dl}{\vec{y}}$。