Глубинное обучение
Лекция 2: Автоматическое дифференцирование

ФКН ВШЭ, 2019

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Основной шаг обучения нейросетей

- Даны объект x, ответ y, значения параметров θ
- Итерация обучения:
  - Выходы нейросети f(x, θ)
  - Функция потерь $\ell(f(x,\theta),y)$

проход вперёд

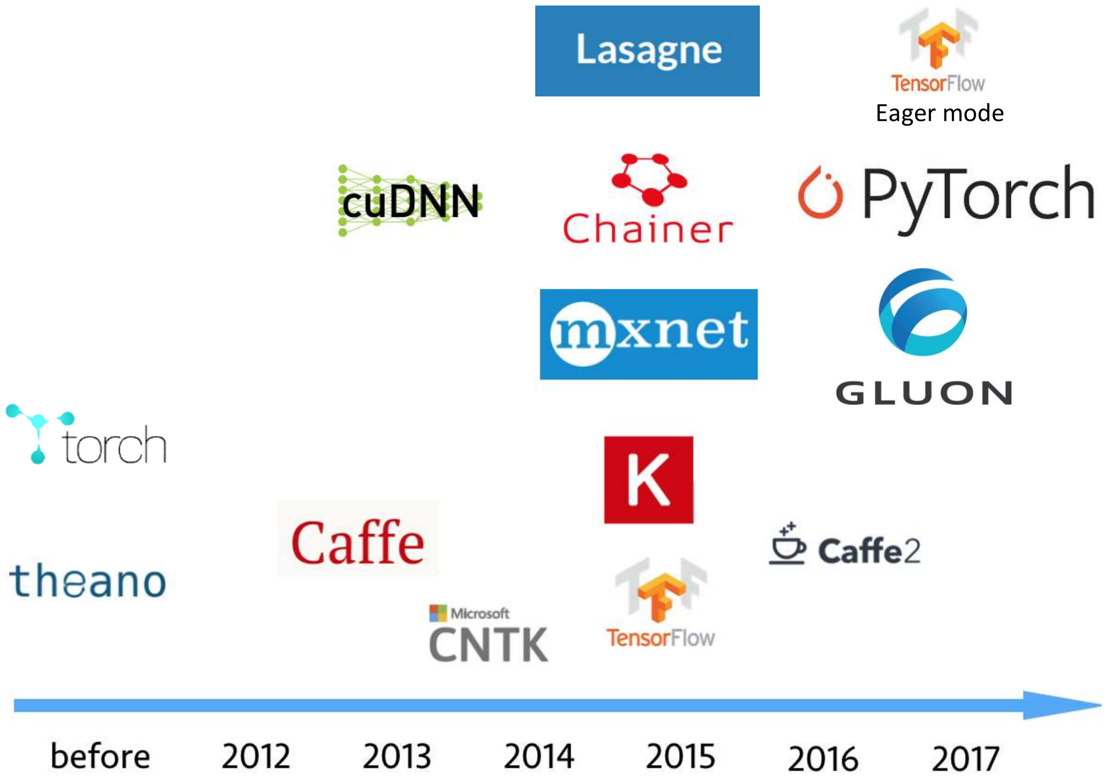
  - Градиент потерь по выходам нейросети
  - Градиент потерь по параметрам

проход назад

  - Шаг стохастической оптимизации

Deep learning frameworks

1. Есть все необходимые функции (CPU, GPU)
2. Организация единой системы
   - Собирает полные производные из производных слоев
   - Автоматическое дифференцирование



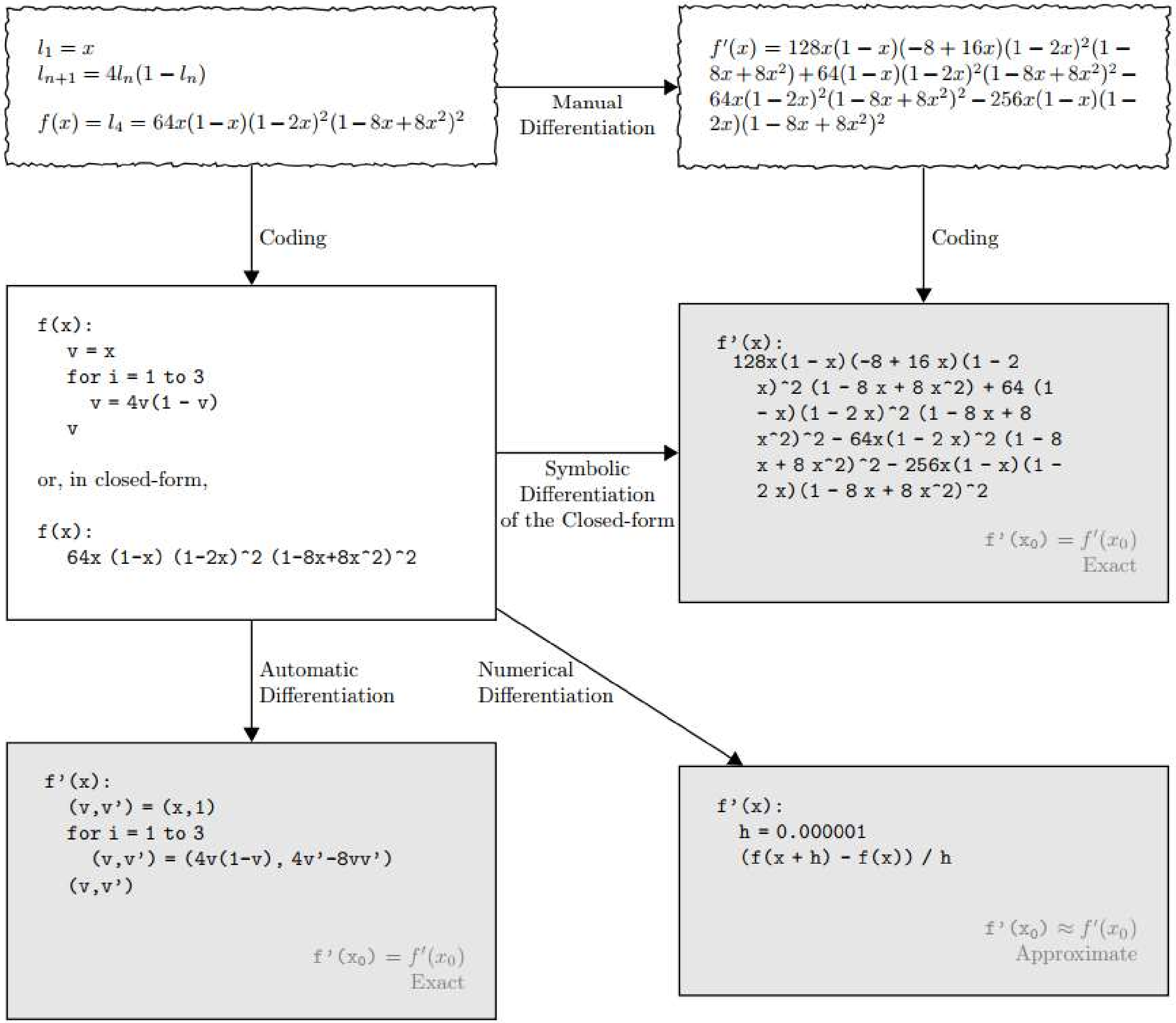
Производные на компьютере

[Baydin et al., 2017]

- Аналитическая формула
- Численный градиент
  - Конечные разности
- Символьное дифференцирование
  - Производная вычисляется алгебраически
  - Сначала формула, затем вычисления
- Алгоритмическое дифференцирование
  - Производная вычисляется как композиция элементарных производных во время выполнения программы

Производные на компьютере

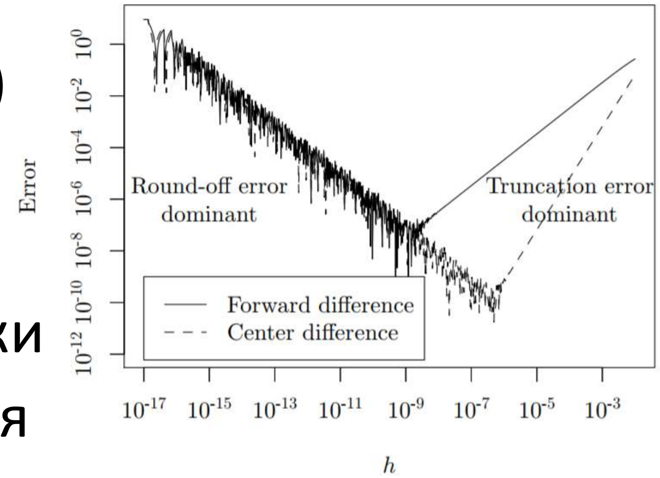
[Baydin et al., 2017]



Производные на компьютере

[Baydin et al., 2017]

- Аналитическая формула
  - Возможны очень эффективные реализации
  - Требуется выводить формулы, не всегда есть удобная запись
- Численный градиент (конечные разности)
  - Универсальный метод
  - Численные нестабильности (A + ε, A – A)
  - Медленно
- Символьное дифференцирование
  - Производная вычисляется алгебраически
  - Сначала вся формула, потом вычисления
- Алгоритмическое дифференцирование
  - Выполнение начинается сразу
  - Сохраняются промежуточные результаты



Алгоритмическое дифференцирование: прямой метод (forward mode)

- Производные вместе с выполнением
  - Функция $y = f(x), x \in \mathbb{R}^n, y \in \mathbb{R}^m$
  - Производные $v_i' = \frac{dv_i}{dx_1}$

$$v_3 := v_1 v_2 \quad \Rightarrow \quad v_3' := v_1' v_2 + v_1 v_2'$$

$$v_3 := \ln(v_2) \quad \Rightarrow \quad v_3' := \frac{1}{v_2} v_2'$$

- Якобиан вычисляется по столбцам

$$J = \begin{pmatrix} \frac{dy_1}{dx_1} & \cdots & \frac{dy_1}{dx_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{dy_m}{dx_1} & \cdots & \frac{dy_m}{dx_n} \end{pmatrix}$$

- Легко вычислять произведения Jr

Алгоритмическое дифференцирование: обратный метод (reverse mode, backprop)

- Сначала выполнение, потом производные
  - Функция $y = f(x), x \in \mathbb{R}^n, y \in \mathbb{R}^m$
  - Производные $\bar{v}_i = \frac{dy_1}{dv_i}$

$$v_3 := v_1 v_2 \Rightarrow \bar{v}_1 := \frac{dy_1}{dv_1} = \frac{dy_1}{dv_3}\frac{dv_3}{dv_1} = \bar{v}_3 v_2 \Rightarrow \bar{v}_1 := \bar{v}_3 v_2,\ \bar{v}_2 := v_1 \bar{v}_3$$

$$v_3 := \ln(v_2) \Rightarrow \bar{v}_2 := \bar{v}_3 \frac{1}{v_2}$$

- Якобиан вычисляется по строкам

$$J = \begin{pmatrix} \frac{dy_1}{dx_1} & \cdots & \frac{dy_1}{dx_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{dy_m}{dx_1} & \cdots & \frac{dy_m}{dx_n} \end{pmatrix}$$

Если m = 1, то Якобиан = градиент^T

- Легко вычислять произведения rJ

Прямой или обратный метод?

- Производная из элементарных производных
- Функция $y = f_4(f_3(f_2(f_1(x)))), x \in \mathbb{R}^n, y \in \mathbb{R}^m$
- Полная производная

$$\frac{dy}{dx} = \frac{df_1(x)}{dx}\frac{\partial f_2(f_1)}{\partial f_1}\frac{\partial f_3(f_2)}{\partial f_2}\frac{\partial f_4(f_3)}{\partial f_3}$$

- Прямой метод

$$\frac{dy}{dx} = \frac{df_1(x)}{dx}\frac{\partial f_2(f_1)}{\partial f_1}\frac{\partial f_3(f_2)}{\partial f_2}\frac{\partial f_4(f_3)}{\partial f_3}$$

- Обратный метод

$$\frac{dy}{dx} = \frac{df_1(x)}{dx}\frac{\partial f_2(f_1)}{\partial f_1}\frac{\partial f_3(f_2)}{\partial f_2}\frac{\partial f_4(f_3)}{\partial f_3}$$

Прямой или обратный метод?

- Производная из элементарных производных
- Функция $y = f_4(f_3(f_2(f_1(x)))), x \in \mathbb{R}^n, y \in \mathbb{R}^m$

- Прямой метод эффективен, когда $n \ll m$

- Обратный метод эффективен когда $n \gg m$

- В МО, x – признаки и параметры, y – функция потерь
  - Обычно используется обратный метод
  - В сложных случаях можно использовать комбинации

- Оптимальный порядок умножения матриц можно найти с помощью динамического программирования

Как вычислить Гессиан на вектор?

- Функция $y = f(x_1, x_2, \ldots, x_n), x \in \mathbb{R}^n, y \in \mathbb{R}$
- Гессиан – матрица вторых производных

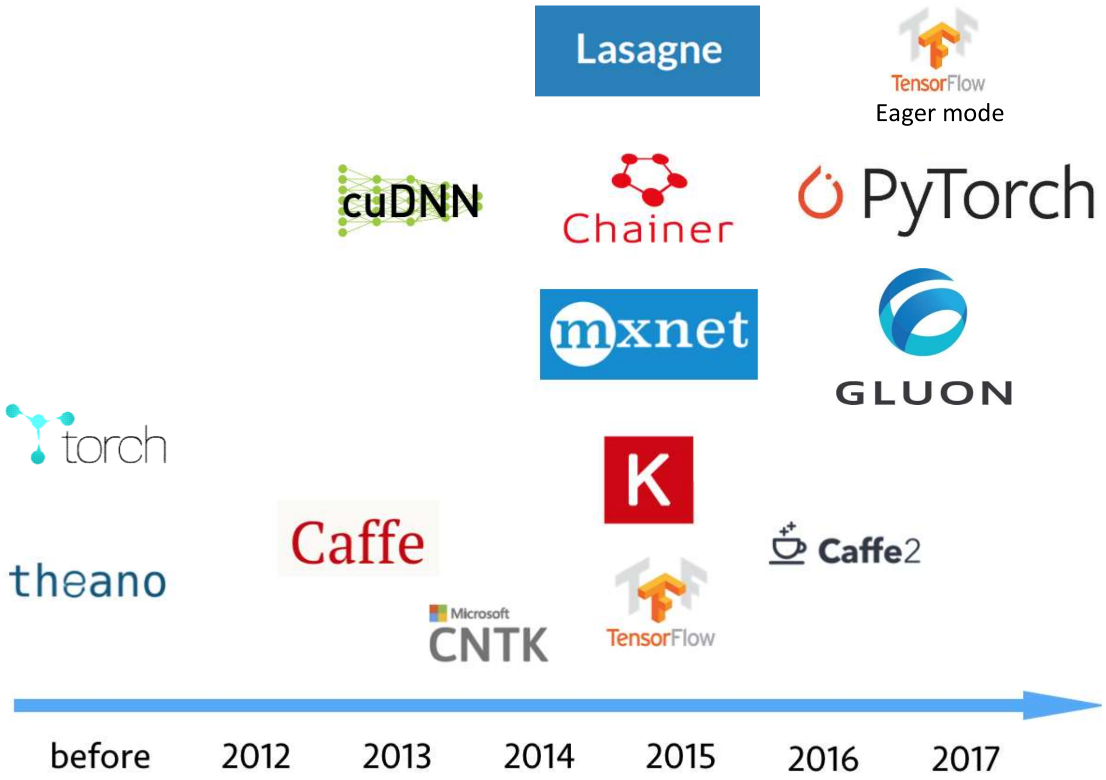
$$H = \begin{pmatrix} \frac{df}{dx_1 dx_1} & \cdots & \frac{df}{dx_1 dx_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{df}{dx_n dx_1} & \cdots & \frac{df}{dx_n dx_n} \end{pmatrix}$$

- Гессиан – очень большая матрица
- Стохастические методы второго порядке требуют вычисления Hv (пример – KFAC [Martens&Grosse, 2015])

Метод 1: 1. $g(x) = v^T \nabla f(x)$ 2. $Hv = \nabla [g(x)]$	Метод 2: 1. $g(x) = \nabla f(x)$ 2. $Hv = J_g v$

Deep learning frameworks

1. Есть все необходимые функции (CPU, GPU)
2. Организация единой системы
   – Собирает полные производные из производных слоев
   – Автоматическое дифференцирование



Библиотеки для глубинного обучения

1. Низкоуровневые операции: BLAS, LAPACK, NumPy, cuDNN, Intel MKL Library

2. Линейная алгебра с дифференцированием

   – Отдельное построение вычислительного графа

   theano, Microsoft CNTK, TensorFlow, mxnet

   – Построение графа совместно с выполнением

   torch, Caffe, Chainer, PyTorch, TensorFlow Eager mode, GLUON, Caffe2

3. Высокоуровневые библиотеки

   Lasagne, Keras

Рекомендации (январь 2019)

- Production

TensorFlow™ mxnet Caffe2

- Data science

Keras

- ML research

PyTorch

TensorFlow™

Зачем знать про backprop?

Andrej Karpathy Follow

Director of AI at Tesla. Previously Research Scientist at OpenAI and PhD student at Stanford. I like to train deep neural nets on large datasets.

Dec 19, 2016 · 7 min read

Yes you should understand backprop

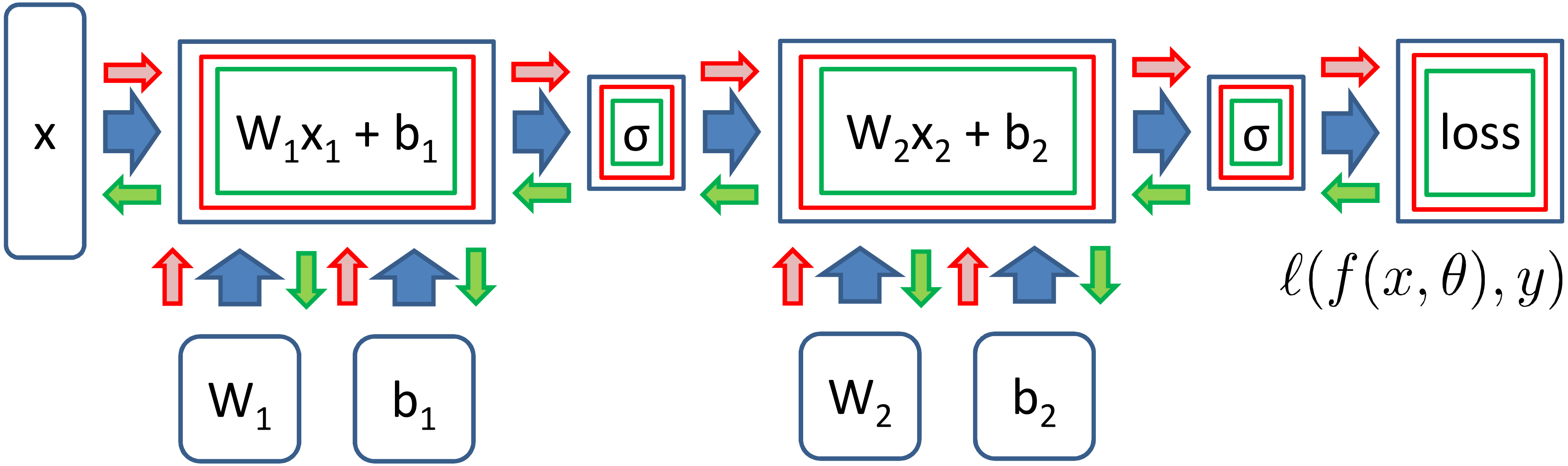
"Backprop – leaky abstraction!"

- Почему сеть не обучается?
- Почему сеть обучается медленно?

Back-propagation

[Rumelhart&McClelland, 1986]

- Вход: x_i, y_i, параметры W_1, b_1, W_2, b_2
- Найти градиент по параметрам нейросети



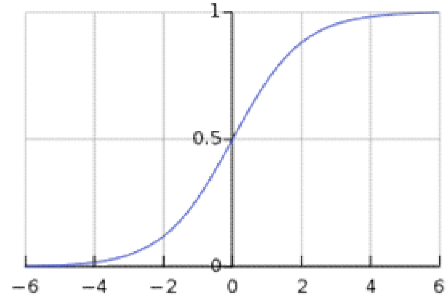
1. Проход вперёд (вычисление слоёв и функции потерь)
2. Проход назад (вычисление градиентов)

Проблемы в функциях активаций

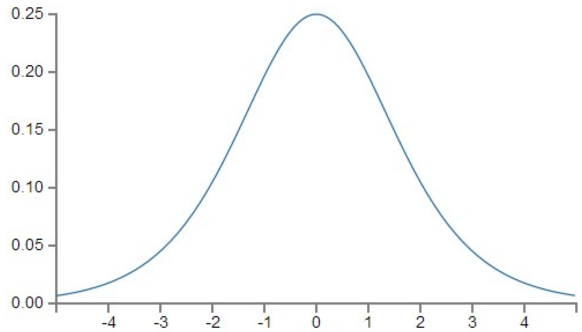
[Karpathy, 2016]

- Сигмоида (или tanh)

$$\sigma(x) = \frac{1}{1+\exp(-x)}$$



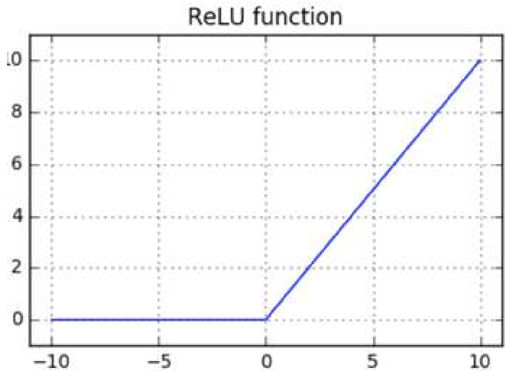
- Градиент $\frac{\partial \sigma(x)}{\partial x} = \sigma(x)(1-\sigma(x))$
  - Градиент ≈ 0 при |x| ≥ 6
  - Максимум градиента = 0.25
    - При каждом умножении макс. градиента уменьшается

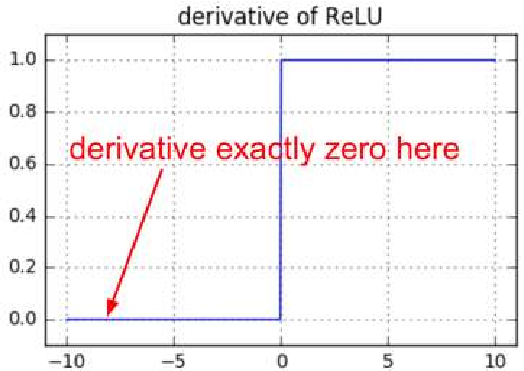


- $\mathrm{ReLu}(x) = \begin{cases} 0, x \leq 0, \\ x, x > 0 \end{cases}$

$$\frac{\partial \mathrm{ReLu}(x)}{\partial x} = \begin{cases} 0, x \leq 0, \\ 1, x > 0 \end{cases}$$

  - Мёртвые узлы!





Инициализация сетей

[Glorot&Bengio, 2010]
[He et al., 2015]

- ‘glorot’ (‘xavier’) и ‘kaiming’
- Инициализация линейного слоя:

$$y = w^T h(x)$$

- Идея: выбрать дисперсию весов так, чтобы активации были распределены стандартно-нормально
- Пусть w – i.i.d., x – i.i.d., x и w – независимы, $\mathbb{E} w_i = 0$

$$\mathrm{Var}[y] = d\mathrm{Var}[w_i h(x_i)] = d\mathrm{Var}[w_i]\mathbb{E}[h(x_i)^2]$$

- Выберем $\mathrm{Var}[w_i] := \frac{1}{d}\frac{\mathrm{Var}[x_i]}{\mathbb{E}[h(x_i)^2]}$

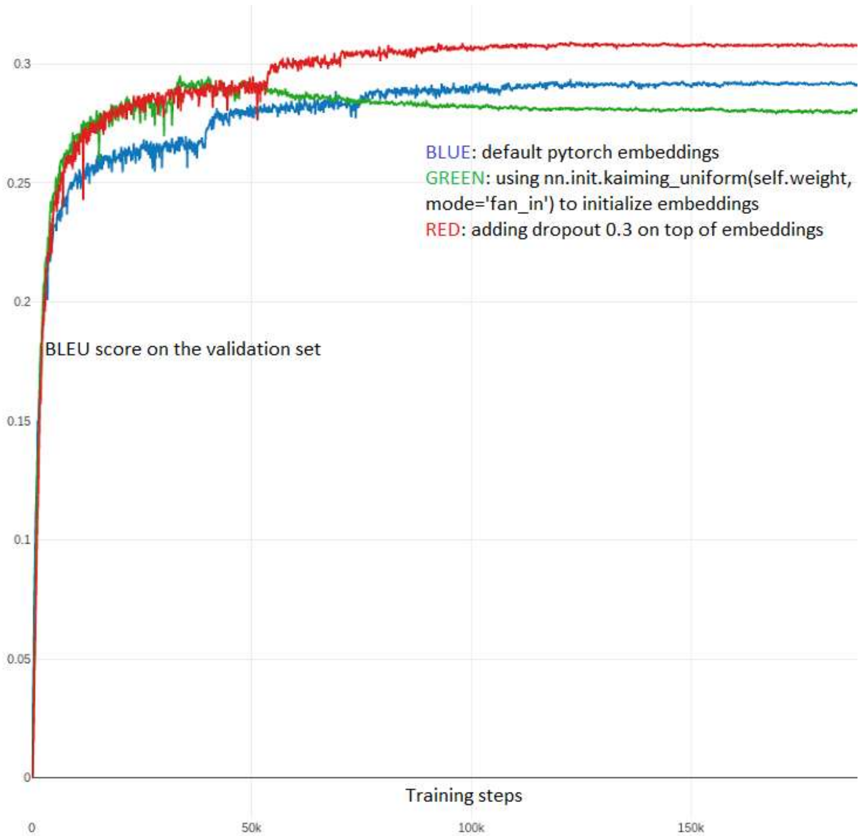
- Для ReLu $\mathrm{Var}[w_i] := \frac{2}{d}$, или $w_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 := \frac{2}{d})$

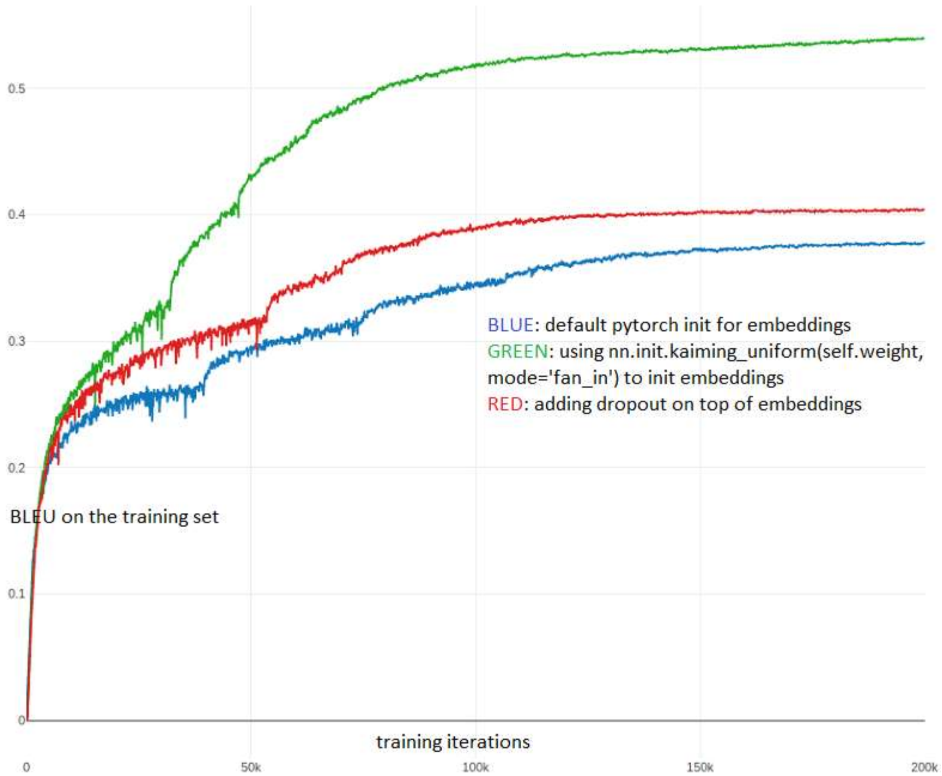
Инициализация сетей

- Пример из личной практики

seq2seq с вниманием для машинного перевода

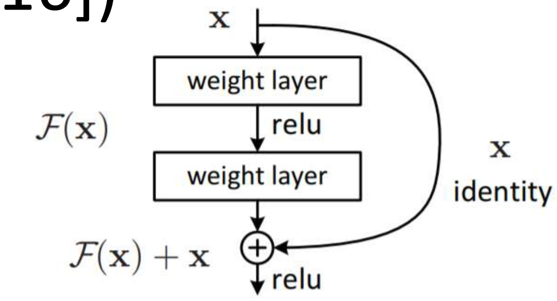
БАГ: медленное обучение и потерянные 3 BLEU



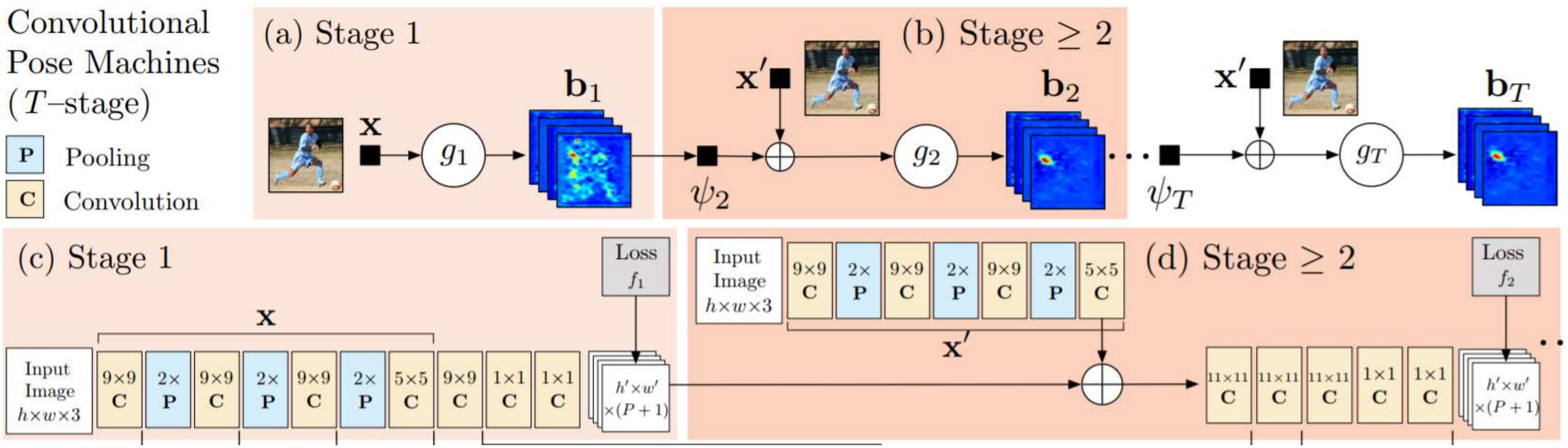


Проблемы с градиентом – повод разрабатывать новые архитектуры!

- Skip connections (ResNet, [He et al., 2016])
  - Regular: $y := f(x) \Rightarrow \frac{d\ell}{dx} := f'(x)\frac{d\ell}{dy}$
  - Skip: $y := f(x) + x \Rightarrow \frac{d\ell}{dx} := f'(x)\frac{d\ell}{dy} + \frac{d\ell}{dy}$

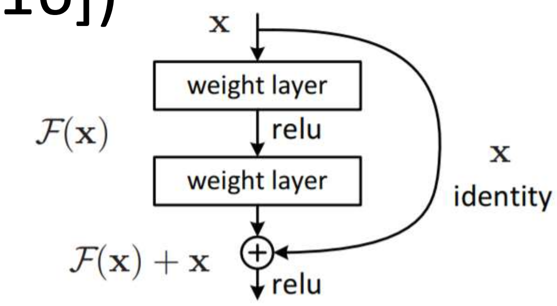


- Функции потерь на разной глубине (e.g. [Wei et al., 2016])



Проблемы с градиентом – повод разрабатывать новые архитектуры!

- Skip connections (ResNet, [He et al., 2016])
  - Regular: $y := f(x)$ ⇨ $\frac{d\ell}{dx} := f'(x)\frac{d\ell}{dy}$
  - Skip: $y := f(x) + x$ ⇨ $\frac{d\ell}{dx} := f'(x)\frac{d\ell}{dy} + \frac{d\ell}{dy}$



- Функции потерь на разной глубине (e.g. [Wei et al., 2016])
- Специальные слои (LSTM/GRU) [Hochreiter& Schmidhuber, 1997]
  - RNN – итеративное применение слоя

$$h_t := W_h \sigma(h_{t-1}) + W_x x_t + b$$

  - Матрица W_h возводится в степень t
  - Градиент либо затухает (LSTM), либо взрывается (clipping)

Заключение

- Backprop –автоматическое дифференцирование
  - По умолчанию используется обратный метод
  - В ряде случае нужны и другие методы
- При обучении моделей надо думать о градиенте
  - Затухание и взрыв градиентов
  - Инициализация
  - Специальные архитектуры