ЦЕНТРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Автоматическое дифференцирование. Вычислительный граф

МЕТОДЫ ВЫПУКЛОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

НЕДЕЛЯ 3

Даня Меркулов

Пётр Остроухов

Автоматическое дифференцирование.

Семинар

Оптимизация для всех! ЦУ

Напоминание с лекции

Автоматическое дифференцирование

Прямой режим

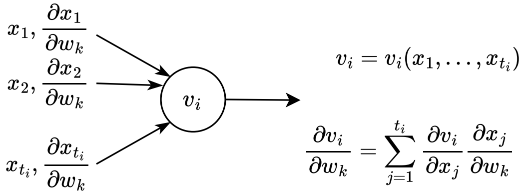
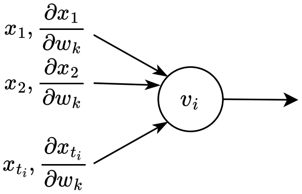


Рисунок 1. Иллюстрация прямого режима для вычисления производной функции v_i по отношению к w_k.

- Использует прямой chain rule

Прямой режим



$$v_i = v_i(x_1, \dots, x_{t_i})$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial w_k} = \sum_{j=1}^{t_i} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial w_k}$$

Рисунок 1. Иллюстрация прямого режима для вычисления производной функции v_i по отношению к w_k.

- Использует прямой chain rule
- Имеет сложность $d \times \mathcal{O}(T)$ операций

Обратный режим

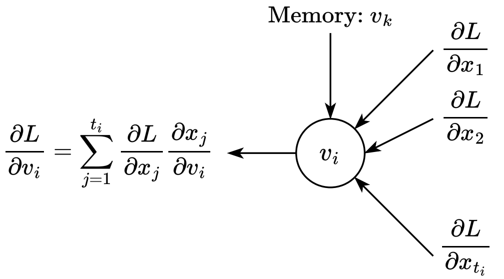


Рисунок 2. Иллюстрация обратного режима для вычисления производной функции L по отношению к узлу v_i.

- Использует обратный chain rule

Обратный режим

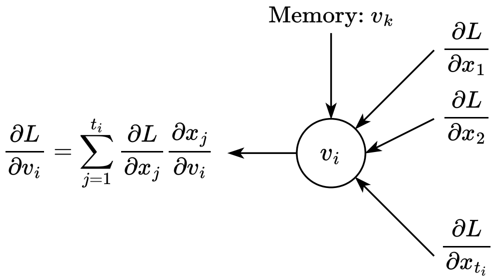


Рисунок 2. Иллюстрация обратного режима для вычисления производной функции L по отношению к узлу v_i.

- Использует обратный chain rule
- Хранит информацию из прямого прохода

Обратный режим

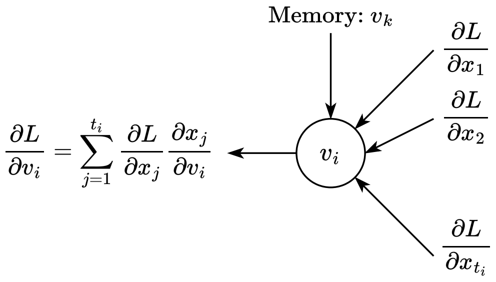


Рисунок 2. Иллюстрация обратного режима для вычисления производной функции L по отношению к узлу v_i.

- Использует обратный chain rule
- Хранит информацию из прямого прохода
- Имеет сложность $\mathcal{O}(T)$ операций

Задачи по автоматическому дифференцированию

Простой пример

Example

$$f(x_1, x_2) = x_1 * x_2 + \sin x_1$$

Давайте вычислим производные $\dfrac{\partial f}{\partial x_i}$ используя прямой и обратный режимы.

Простой пример

Example

$$f(x_1, x_2) = x_1 * x_2 + \sin x_1$$

Давайте вычислим производные $\dfrac{\partial f}{\partial x_i}$ используя прямой и обратный режимы.

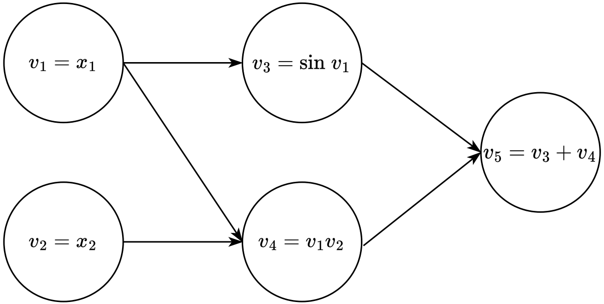


Рисунок 3. Иллюстрация вычислительного графа функции $f(x_1, x_2)$.

Автоматическое дифференцирование с JAX

Пример 1

$$f(X) = tr(AX^{-1}B)$$

$$\nabla f = -X^{-T}A^TB^TX^{-T}$$

Автоматическое дифференцирование с JAX

Пример 1

$$f(X) = tr(AX^{-1}B)$$

$$\nabla f = -X^{-T}A^TB^TX^{-T}$$

Пример 2

$$g(x) = 1/3 \cdot ||x||_2^3$$

$$\nabla^2 g = ||x||_2^{-1}xx^T + ||x||_2 I_n$$

Автоматическое дифференцирование с JAX

Пример 1

$$f(X) = tr(AX^{-1}B)$$

$$\nabla f = -X^{-T}A^TB^TX^{-T}$$

Пример 2

$$g(x) = 1/3 \cdot ||x||_2^3$$

$$\nabla^2 g = ||x||_2^{-1} x x^T + ||x||_2 I_n$$

Давайте вычислим градиенты и гессианы f и g в python

Задача 1

Question

Какой из режимов AD вы бы выбрали (прямой/обратный) для следующего вычислительного графа арифметических операций?

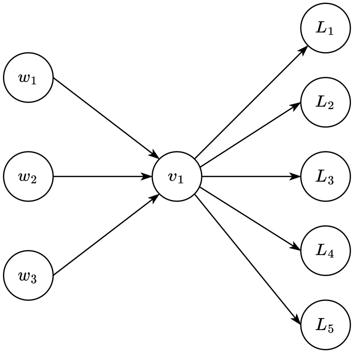


Рисунок 4. Какой режим вы бы выбрали для вычисления градиентов?

Задача 2

Предположим, у нас есть обратимая матрица A и вектор b, вектор x является решением системы линейных уравнений $Ax = b$, то есть можно записать аналитическое решение $x = A^{-1}b$.

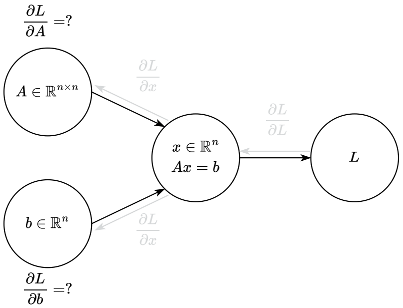


Рисунок 5. x может быть найден как решение линейной системы

> **Question**
>
> Найдите производные $\dfrac{\partial L}{\partial A}, \dfrac{\partial L}{\partial b}$.

Распространение градиента через метод наименьших квадратов

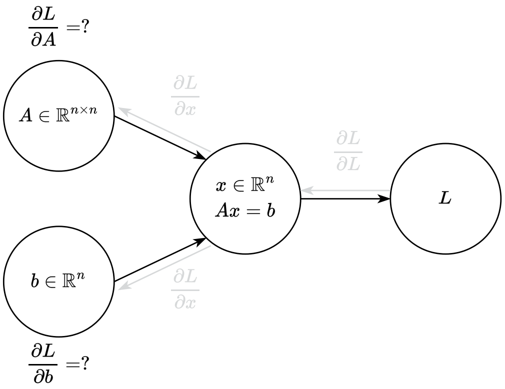


Рисунок 6. x может быть найден как решение линейной системы

Предположим, у нас есть обратимая матрица A и вектор b, вектор x является решением системы линейных уравнений $Ax = b$, то есть можно записать аналитическое решение $x = A^{-1}b$, в этом примере показано, что вычисление всех производных $\frac{\partial L}{\partial A}, \frac{\partial L}{\partial b}, \frac{\partial L}{\partial x}$, то есть обратный проход, стоит приблизительно столько же, сколько и прямой проход.

Распространение градиента через метод наименьших квадратов

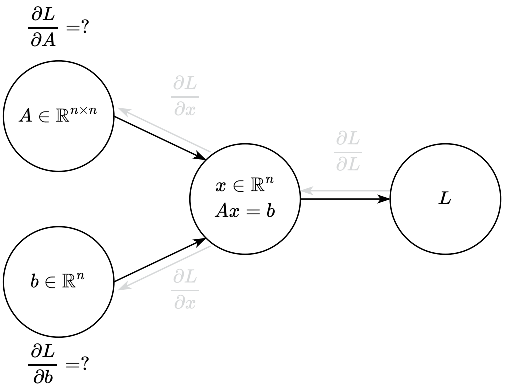


Рисунок 6. x может быть найден как решение линейной системы

Предположим, у нас есть обратимая матрица A и вектор b, вектор x является решением системы линейных уравнений $Ax = b$, то есть можно записать аналитическое решение $x = A^{-1}b$, в этом примере показано, что вычисление всех производных $\frac{\partial L}{\partial A}, \frac{\partial L}{\partial b}, \frac{\partial L}{\partial x}$, то есть обратный проход, стоит приблизительно столько же, сколько и прямой проход.
Известно, что дифференциал функции не зависит от параметризации:

$$dL = \left\langle \frac{\partial L}{\partial x}, dx \right\rangle = \left\langle \frac{\partial L}{\partial A}, dA \right\rangle + \left\langle \frac{\partial L}{\partial b}, db \right\rangle$$

Распространение градиента через метод наименьших квадратов

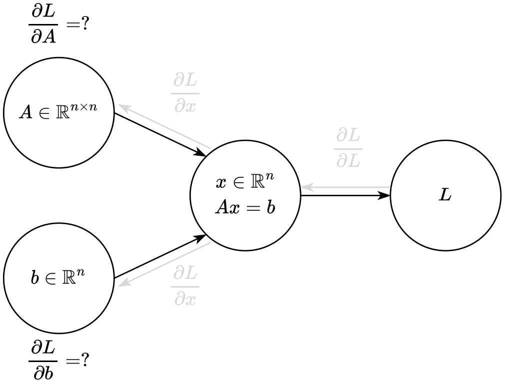


Рисунок 6. x может быть найден как решение линейной системы

Предположим, у нас есть обратимая матрица A и вектор b, вектор x является решением системы линейных уравнений $Ax = b$, то есть можно записать аналитическое решение $x = A^{-1}b$, в этом примере показано, что вычисление всех производных $\frac{\partial L}{\partial A}, \frac{\partial L}{\partial b}, \frac{\partial L}{\partial x}$, то есть обратный проход, стоит приблизительно столько же, сколько и прямой проход.
Известно, что дифференциал функции не зависит от параметризации:

$$dL = \left\langle \frac{\partial L}{\partial x}, dx \right\rangle = \left\langle \frac{\partial L}{\partial A}, dA \right\rangle + \left\langle \frac{\partial L}{\partial b}, db \right\rangle$$

Для линейной системы мы имеем:

$$Ax = b$$
$$dAx + Adx = db \to dx = A^{-1}(db - dAx)$$

Распространение градиента через метод наименьших квадратов

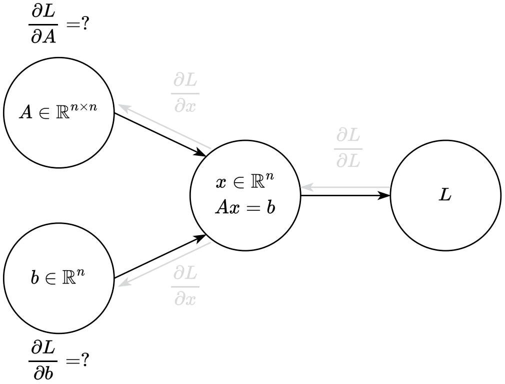


Рисунок 7. x может быть найден как решение линейной системы

Прямая подстановка дает нам:

$$\left\langle \frac{\partial L}{\partial x}, A^{-1}(db - dAx) \right\rangle = \left\langle \frac{\partial L}{\partial A}, dA \right\rangle + \left\langle \frac{\partial L}{\partial b}, db \right\rangle$$

Распространение градиента через метод наименьших квадратов

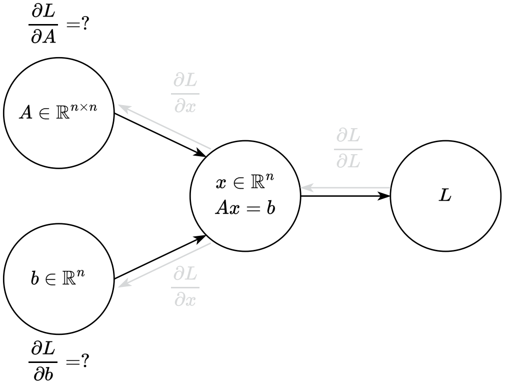


Рисунок 7. x может быть найден как решение линейной системы

Прямая подстановка дает нам:

$$\left\langle \frac{\partial L}{\partial x}, A^{-1}(db - dAx) \right\rangle = \left\langle \frac{\partial L}{\partial A}, dA \right\rangle + \left\langle \frac{\partial L}{\partial b}, db \right\rangle$$

$$\left\langle -A^{-T} \frac{\partial L}{\partial x} x^T, dA \right\rangle + \left\langle A^{-T} \frac{\partial L}{\partial x}, db \right\rangle = \left\langle \frac{\partial L}{\partial A}, dA \right\rangle + \left\langle \frac{\partial L}{\partial b}, db \right\rangle$$

Распространение градиента через метод наименьших квадратов

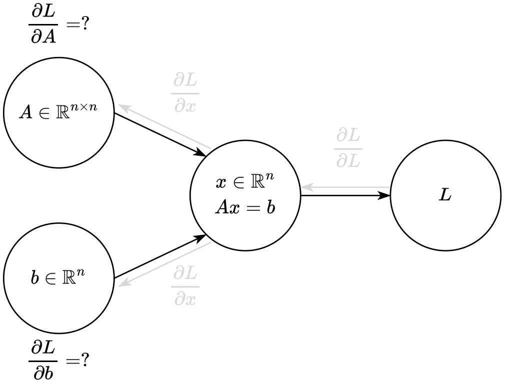


Рисунок 7. x может быть найден как решение линейной системы

Прямая подстановка дает нам:

$$\left\langle \frac{\partial L}{\partial x}, A^{-1}(db - dAx) \right\rangle = \left\langle \frac{\partial L}{\partial A}, dA \right\rangle + \left\langle \frac{\partial L}{\partial b}, db \right\rangle$$

$$\left\langle -A^{-T} \frac{\partial L}{\partial x} x^T, dA \right\rangle + \left\langle A^{-T} \frac{\partial L}{\partial x}, db \right\rangle = \left\langle \frac{\partial L}{\partial A}, dA \right\rangle + \left\langle \frac{\partial L}{\partial b}, db \right\rangle$$

Следовательно:

$$\frac{\partial L}{\partial A} = -A^{-T} \frac{\partial L}{\partial x} x^T \quad \frac{\partial L}{\partial b} = A^{-T} \frac{\partial L}{\partial x}$$

Распространение градиента через метод наименьших квадратов

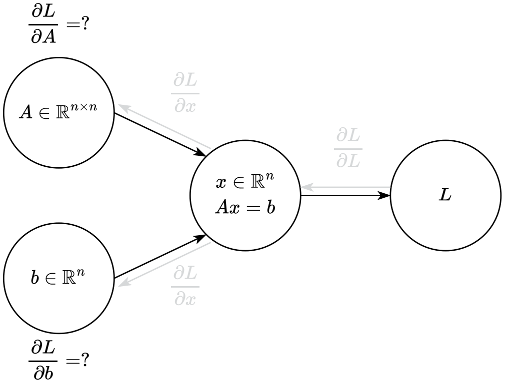


Рисунок 7. x может быть найден как решение линейной системы

Прямая подстановка дает нам:

$$\left\langle \frac{\partial L}{\partial x}, A^{-1}(db - dAx) \right\rangle = \left\langle \frac{\partial L}{\partial A}, dA \right\rangle + \left\langle \frac{\partial L}{\partial b}, db \right\rangle$$

$$\left\langle -A^{-T} \frac{\partial L}{\partial x} x^T, dA \right\rangle + \left\langle A^{-T} \frac{\partial L}{\partial x}, db \right\rangle = \left\langle \frac{\partial L}{\partial A}, dA \right\rangle + \left\langle \frac{\partial L}{\partial b}, db \right\rangle$$

Следовательно:

$$\frac{\partial L}{\partial A} = -A^{-T} \frac{\partial L}{\partial x} x^T \quad \frac{\partial L}{\partial b} = A^{-T} \frac{\partial L}{\partial x}$$

Интересно, что наиболее вычислительно интенсивная часть здесь - это обратная матрица, которая является такой же, как и для прямого прохода. Иногда возможно хранить результат сам по себе, что делает обратный проход еще дешевле.

Задача 3

Предположим, у нас есть прямоугольная матрица $W \in \mathbb{R}^{m \times n}$, которая имеет сингулярное разложение:

$$W = U\Sigma V^T, \quad U^T U = I, \quad V^T V = I,$$
$$\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_{\text{min}(m,n)})$$

Регуляризатор $R(W) = \text{tr}(\Sigma)$ в любой функции потерь стимулирует низкоранговые решения.

Question

Найдите производную $\dfrac{\partial R}{\partial W}$.

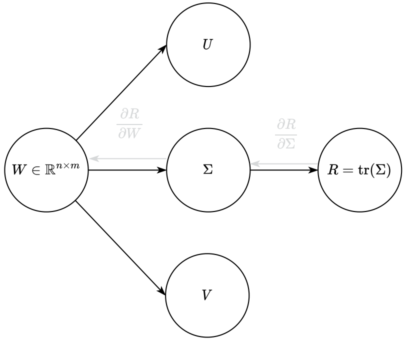
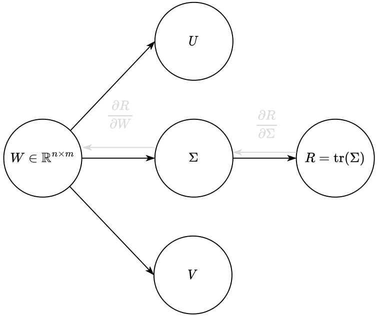


Рисунок 8. Вычислительный граф для сингулярного регуляризатора

Распространение градиента через SVD



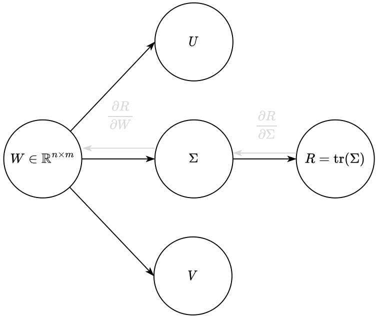
Предположим, у нас есть прямоугольная матрица $W \in \mathbb{R}^{m\times n}$, которая имеет сингулярное разложение:

$$W = U\Sigma V^T, \quad U^TU = I, \quad V^TV = I, \quad \Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_{\text{min}(m,n)})$$

1. Аналогично предыдущему примеру:

$$\begin{aligned} W &= U\Sigma V^T \\ dW &= dU\Sigma V^T + Ud\Sigma V^T + U\Sigma dV^T \\ U^TdWV &= U^TdU\Sigma V^TV + U^TUd\Sigma V^TV + U^TU\Sigma dV^TV \\ U^TdWV &= U^TdU\Sigma + d\Sigma + \Sigma dV^TV \end{aligned}$$

Распространение градиента через SVD



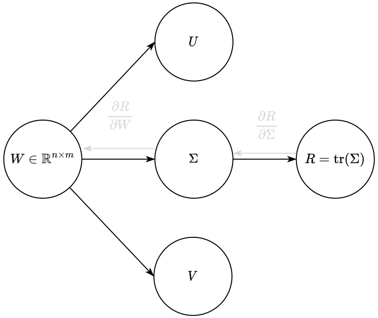
2. Обратите внимание, что $U^T U = I \to dU^T U + U^T dU = 0$. Но также $dU^T U = (U^T dU)^T$, что фактически означает, что матрица $U^T dU$ является антисимметричной:

$$(U^T dU)^T + U^T dU = 0 \quad \to \quad \text{diag}(U^T dU) = (0, \dots, 0)$$

Та же логика может быть применена к матрице V и

$$\text{diag}(dV^T V) = (0, \dots, 0)$$

Распространение градиента через SVD



2. Обратите внимание, что $U^T U = I \to dU^T U + U^T dU = 0$. Но также $dU^T U = (U^T dU)^T$, что фактически означает, что матрица $U^T dU$ является антисимметричной:

$$(U^T dU)^T + U^T dU = 0 \quad \to \quad \text{diag}(U^T dU) = (0, \dots, 0)$$

   Та же логика может быть применена к матрице V и

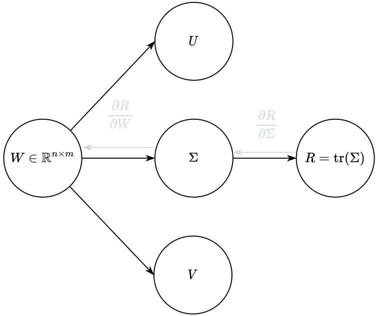
$$\text{diag}(dV^T V) = (0, \dots, 0)$$

3. В то же время, матрица $d\Sigma$ является диагональной, что означает (смотрите 1.) что

$$\text{diag}(U^T dW V) = d\Sigma$$

   Здесь на обеих сторонах мы имеем диагональные матрицы.

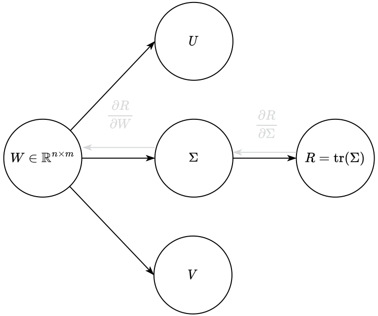
Распространение градиента через SVD



4. Теперь мы можем разложить дифференциал функции потерь как функцию Σ - такие проблемы возникают в ML задачах, где мы должны ограничить ранг матрицы:

$$
\begin{aligned}
dL &= \left\langle \frac{\partial L}{\partial \Sigma}, d\Sigma \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{\partial L}{\partial \Sigma}, \text{diag}(U^T dWV) \right\rangle \\
&= \text{tr} \left(\frac{\partial L}{\partial \Sigma}^T \text{diag}(U^T dWV) \right)
\end{aligned}
$$

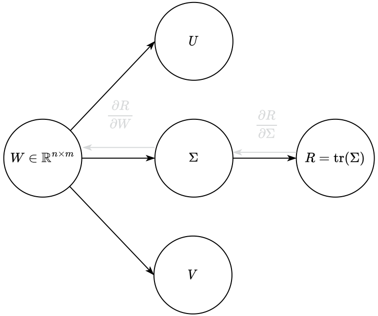
Распространение градиента через SVD



5. Как только мы имеем диагональные матрицы внутри произведения, след диагональной части матрицы будет равен следу всей матрицы:

$$
\begin{aligned}
dL &= \text{tr}\left({\frac{\partial L}{\partial \Sigma}}^T \text{diag}(U^T dW V) \right) \\
&= \text{tr}\left({\frac{\partial L}{\partial \Sigma}}^T U^T dW V \right) \\
&= \left\langle \frac{\partial L}{\partial \Sigma}, U^T dW V \right\rangle \\
&= \left\langle U \frac{\partial L}{\partial \Sigma} V^T, dW \right\rangle
\end{aligned}
$$

Распространение градиента через SVD



6. Наконец, используя другую параметризацию дифференциала

$$\left\langle U \frac{\partial L}{\partial \Sigma} V^T, dW \right\rangle = \left\langle \frac{\partial L}{\partial W}, dW \right\rangle$$

$$\frac{\partial L}{\partial W} = U \frac{\partial L}{\partial \Sigma} V^T,$$

Этот результат позволяет нам связать градиенты $\frac{\partial L}{\partial W}$ и $\frac{\partial L}{\partial \Sigma}$.

Вычислительный эксперимент с JAX

Давайте убедимся численно, что мы правильно вычислили производные в задачах 2-3

Контрольные точки градиентов

Архитектура прямого распространения

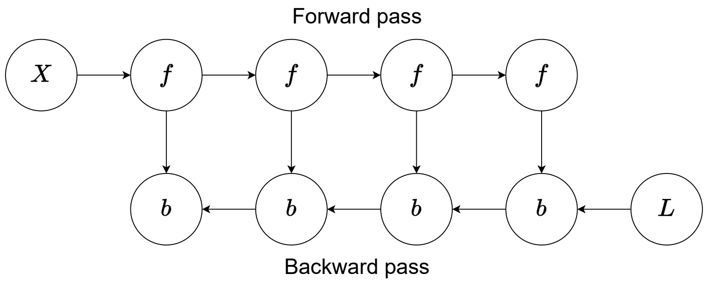


Рисунок 9. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Активации отмечены f. Градиент функции потерь по отношению к активациям и параметрам отмечен b.

Архитектура прямого распространения

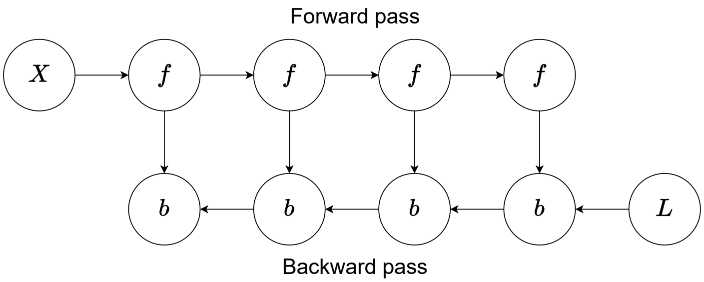


Рисунок 9. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Активации отмечены f. Градиент функции потерь по отношению к активациям и параметрам отмечен b.

> **!** Важное уведомление
>
> Результаты, полученные для узлов f, необходимы для вычисления узлов b.

Обычное обратное распространение

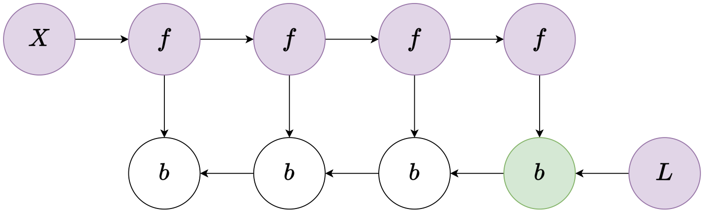


Рисунок 10. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

Обычное обратное распространение

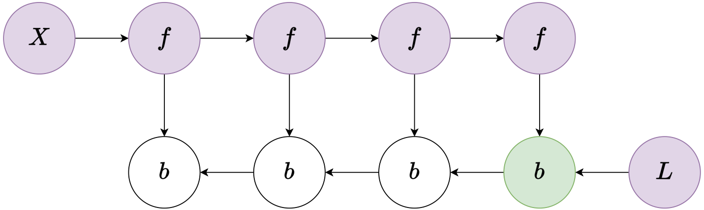


Рисунок 10. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

- Все активации f хранятся в памяти после прямого прохода.

Обычное обратное распространение

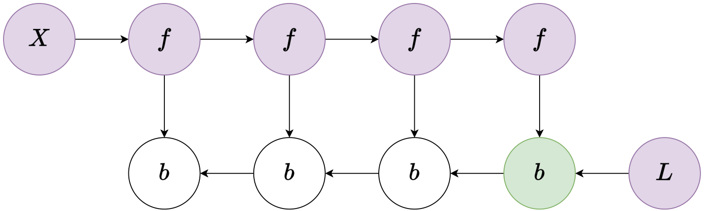


Рисунок 10. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

- Все активации f хранятся в памяти после прямого прохода.

Обычное обратное распространение

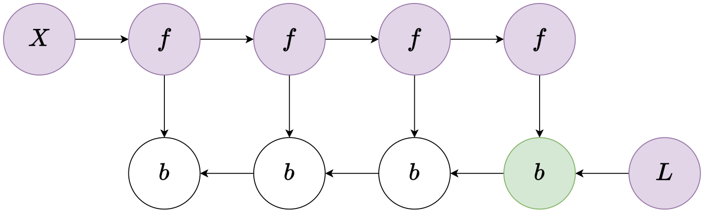


Рисунок 10. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

- Все активации f хранятся в памяти после прямого прохода.

- Оптимально с точки зрения вычислений: оно вычисляет каждый узел только один раз.

Обычное обратное распространение

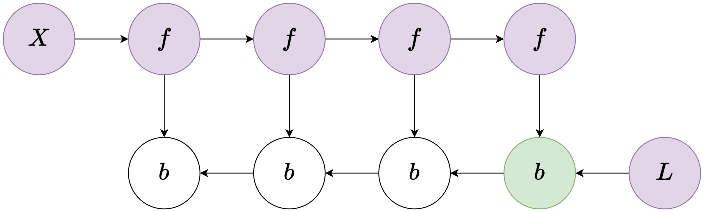


Рисунок 10. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

- Все активации f хранятся в памяти после прямого прохода.

- Оптимально с точки зрения вычислений: оно вычисляет каждый узел только один раз.

Обычное обратное распространение

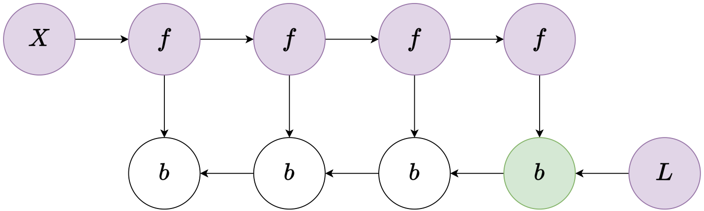


Рисунок 10. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

- Все активации f хранятся в памяти после прямого прохода.

- Оптимально с точки зрения вычислений: оно вычисляет каждый узел только один раз.

- Высокое использование памяти. Использование памяти растет линейно с количеством слоев в нейронной сети.

Ограниченное по памяти обратное распространение

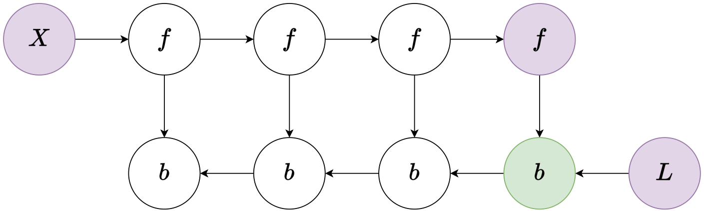


Рисунок 11. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

Ограниченное по памяти обратное распространение

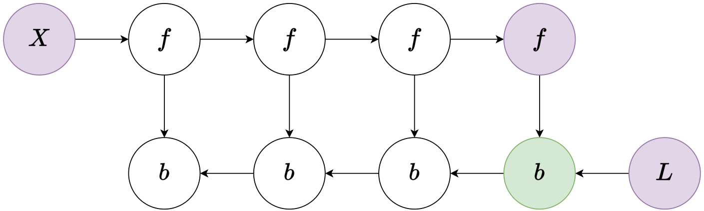


Рисунок 11. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

- Каждая активация f пересчитывается при необходимости.

Ограниченное по памяти обратное распространение

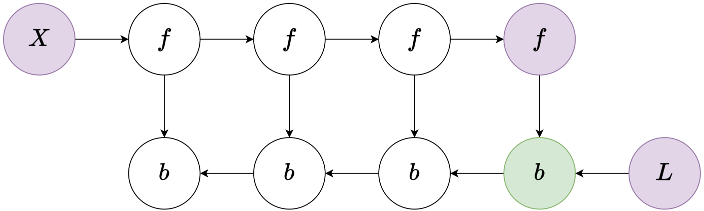


Рисунок 11. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

- Каждая активация f пересчитывается при необходимости.

Ограниченное по памяти обратное распространение

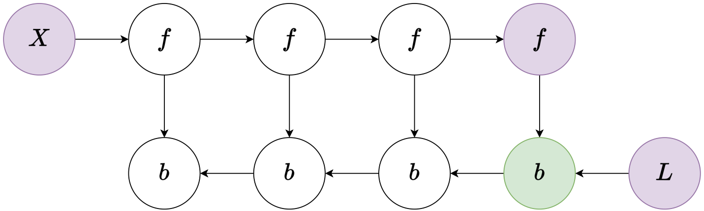


Рисунок 11. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

- Каждая активация f пересчитывается при необходимости.

- Оптимально с точки зрения памяти: нет необходимости хранить все активации в памяти.

Ограниченное по памяти обратное распространение

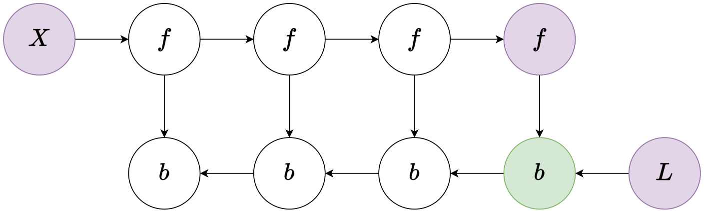


Рисунок 11. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

- Каждая активация f пересчитывается при необходимости.

- Оптимально с точки зрения памяти: нет необходимости хранить все активации в памяти.

Ограниченное по памяти обратное распространение

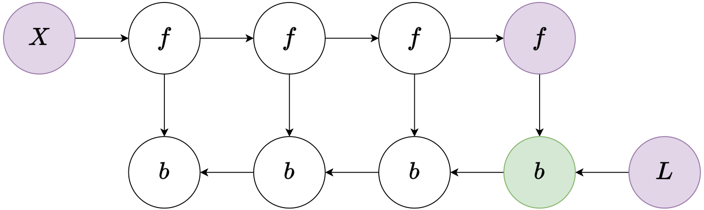


Рисунок 11. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

- Каждая активация f пересчитывается при необходимости.

- Оптимально с точки зрения памяти: нет необходимости хранить все активации в памяти.

- Вычислительно неэффективно. Количество оценок узлов масштабируется как n^2, в то время как в обычном обратном распространении оно масштабируется как n: каждый из n узлов пересчитывается порядка n раз.

Контрольные точки обратного распространения

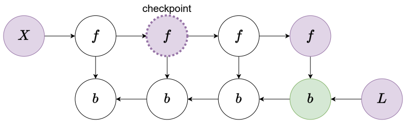


Рисунок 12. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

Контрольные точки обратного распространения

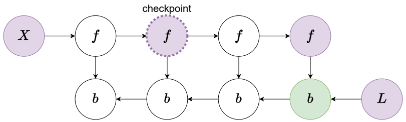


Рисунок 12. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

- Компромисс между **обычным** и **ограниченным по памяти** подходами. Стратегия состоит в том, чтобы отметить подмножество активаций нейронной сети как контрольные точки, которые будут храниться в памяти.

Контрольные точки обратного распространения

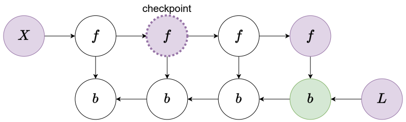


Рисунок 12. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

- Компромисс между **обычным** и **ограниченным по памяти** подходами. Стратегия состоит в том, чтобы отметить подмножество активаций нейронной сети как контрольные точки, которые будут храниться в памяти.

Контрольные точки обратного распространения

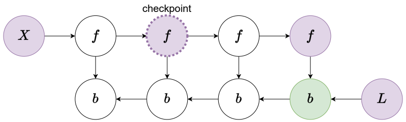


Рисунок 12. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

- Компромисс между **обычным** и **ограниченным по памяти** подходами. Стратегия состоит в том, чтобы отметить подмножество активаций нейронной сети как контрольные точки, которые будут храниться в памяти.

- Быстрее пересчитывание активаций f. Мы только пересчитываем узлы между узлом b и последней контрольной точкой, предшествующей ему, при вычислении этого узла b во время обратного распространения.

Контрольные точки обратного распространения

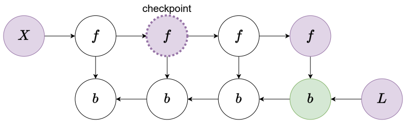


Рисунок 12. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

- Компромисс между **обычным** и **ограниченным по памяти** подходами. Стратегия состоит в том, чтобы отметить подмножество активаций нейронной сети как контрольные точки, которые будут храниться в памяти.

- Быстрее пересчитывание активаций f. Мы только пересчитываем узлы между узлом b и последней контрольной точкой, предшествующей ему, при вычислении этого узла b во время обратного распространения.

Контрольные точки обратного распространения

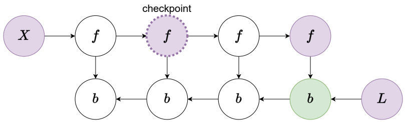


Рисунок 12. Вычислительный граф для получения градиентов для простого прямого распространения нейронной сети с n слоями. Фиолетовый цвет указывает узлы, которые хранятся в памяти.

- Компромисс между **обычным** и **ограниченным по памяти** подходами. Стратегия состоит в том, чтобы отметить подмножество активаций нейронной сети как контрольные точки, которые будут храниться в памяти.

- Быстрее пересчитывание активаций f. Мы только пересчитываем узлы между узлом b и последней контрольной точкой, предшествующей ему, при вычислении этого узла b во время обратного распространения.

- Использование памяти зависит от количества контрольных точек. Более эффективно, чем **обычный** подход.

Визуализация контрольных точек обратного распространения

Анимация вышеуказанных подходов

Пример использования контрольных точек градиентов

Оценка следа Гессиана [1]

Этот пример иллюстрирует оценку следа Гессиана нейронной сети с использованием метода Hutchinson, который является алгоритмом для получения такой оценки из матрично-векторных произведений:

Пусть $X \in \mathbb{R}^{d \times d}$ и $v \in \mathbb{R}^d$ случайный вектор такой, что $\mathbb{E}[vv^T] = I$. Тогда,

$$\text{Tr}(X) = \mathbb{E}[v^T X v] \approx \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{V} v_i^T X v_i.$$

Пример использования оценки следа Гессиана Hutchinson

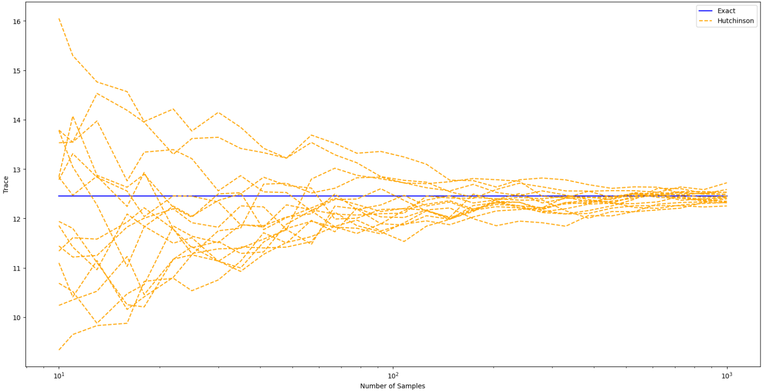


Рисунок 13. Несколько запусков оценки следа Гессиана Hutchinson, инициализированных при разных случайных начальных значениях.

[1] A stochastic estimator of the trace of the influence matrix for Laplacian smoothing splines - M.F. Hutchinson, 1990