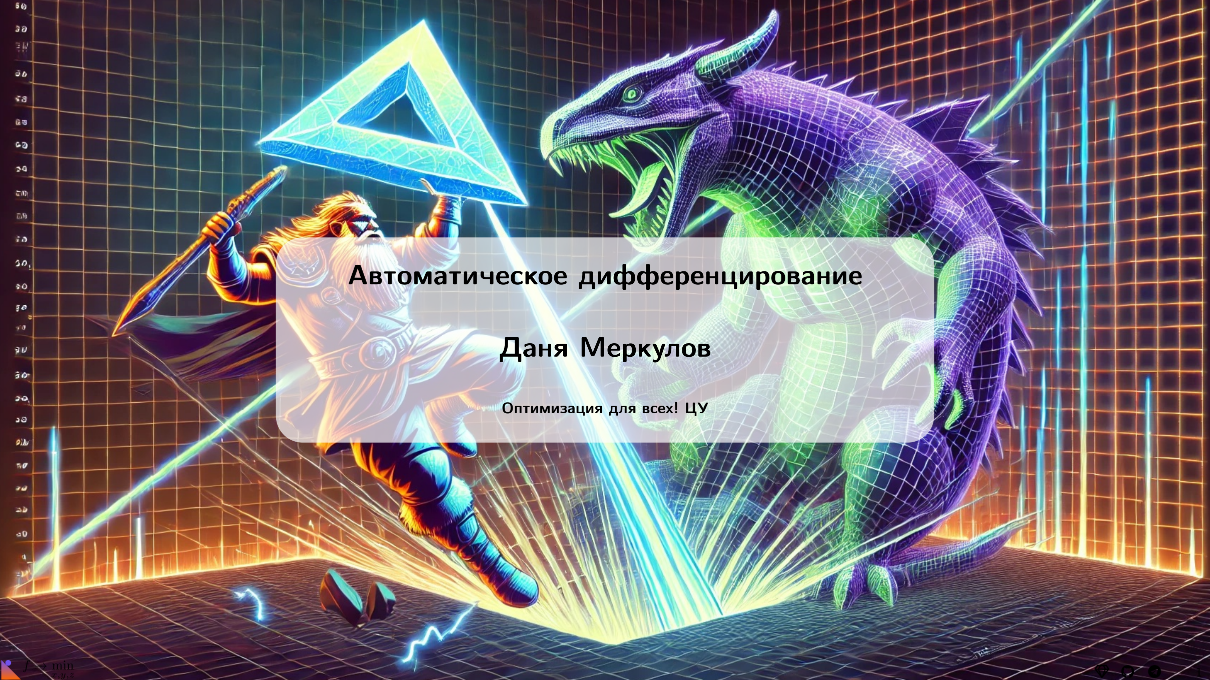
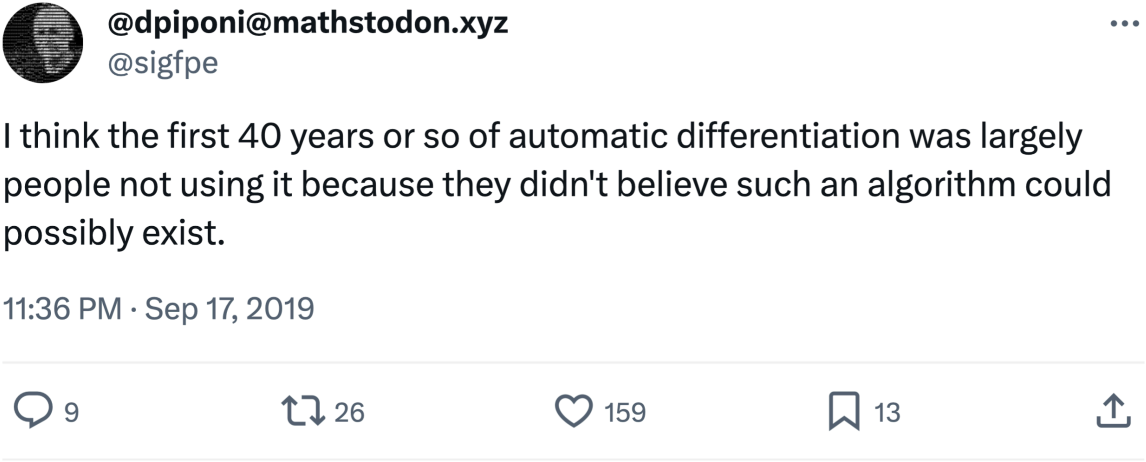


Автоматическое дифференцирование

Даня Меркулов

Оптимизация для всех! ЦУ

Автоматическое дифференцирование



@dpiponi@mathstodon.xyz
@sigfpe

I think the first 40 years or so of automatic differentiation was largely people not using it because they didn't believe such an algorithm could possibly exist.

11:36 PM · Sep 17, 2019

9 26 159 13

Рисунок 1: Когда вы поняли идею

Рисунок 2: Это не autograd

Задача

Предположим, что мы хотим решить следующую задачу:

$$
L(w) \to \min_{w \in \mathbb{R}^d}
$$

Задача

Предположим, что мы хотим решить следующую задачу:

$$
L(w) \to \min_{w \in \mathbb{R}^d}
$$

- Такие задачи обычно возникают в машинном обучении, когда вам нужно найти подходящие параметры w модели (например, обучить нейронную сеть).

Задача

Предположим, что мы хотим решить следующую задачу:

$$L(w) \to \min_{w \in \mathbb{R}^d}$$

- Такие задачи обычно возникают в машинном обучении, когда вам нужно найти подходящие параметры w модели (например, обучить нейронную сеть).
- Вы можете использовать множество алгоритмов для решения этой задачи. Однако, учитывая современный размер задачи, где d может достигать десятков миллиардов, это очень сложно решить без информации о градиентах, используя алгоритмы нулевого порядка.

Задача

Предположим, что мы хотим решить следующую задачу:

$$
L(w) \to \min_{w \in \mathbb{R}^d}
$$

- Такие задачи обычно возникают в машинном обучении, когда вам нужно найти подходящие параметры w модели (например, обучить нейронную сеть).
- Вы можете использовать множество алгоритмов для решения этой задачи. Однако, учитывая современный размер задачи, где d может достигать десятков миллиардов, это очень сложно решить без информации о градиентах, используя алгоритмы нулевого порядка.
- Поэтому было бы полезно уметь вычислять вектор градиента $\nabla_w L = \left(\frac{\partial L}{\partial w_1}, \ldots, \frac{\partial L}{\partial w_d} \right)^T$.

Задача

Предположим, что мы хотим решить следующую задачу:

$$
L(w) \to \min_{w \in \mathbb{R}^d}
$$

- Такие задачи обычно возникают в машинном обучении, когда вам нужно найти подходящие параметры w модели (например, обучить нейронную сеть).
- Вы можете использовать множество алгоритмов для решения этой задачи. Однако, учитывая современный размер задачи, где d может достигать десятков миллиардов, это очень сложно решить без информации о градиентах, используя алгоритмы нулевого порядка.
- Поэтому было бы полезно уметь вычислять вектор градиента $\nabla_w L = \left(\frac{\partial L}{\partial w_1}, \ldots, \frac{\partial L}{\partial w_d} \right)^T$.
- Обычно первые методы работают лучше в больших задачах, в то время как вторые методы требуют слишком много памяти.

Пример: многомерное масштабирование

Предположим, что у нас есть матрица расстояний для N d-мерных объектов $D \in \mathbb{R}^{N \times N}$. Учитывая эту матрицу, мы хотим восстановить исходные координаты $W_i \in \mathbb{R}^d, \ i = 1, \ldots, N$.

Пример: многомерное масштабирование

Предположим, что у нас есть матрица расстояний для N d-мерных объектов $D \in \mathbb{R}^{N \times N}$. Учитывая эту матрицу, мы хотим восстановить исходные координаты $W_i \in \mathbb{R}^d$, $i = 1, \ldots, N$.

$$L(W) = \sum_{i,j=1}^{N} \left(\|W_i - W_j\|_2^2 - D_{i,j}\right)^2 \to \min_{W \in \mathbb{R}^{N \times d}}$$

Пример: многомерное масштабирование

Предположим, что у нас есть матрица расстояний для N d-мерных объектов $D \in \mathbb{R}^{N \times N}$. Учитывая эту матрицу, мы хотим восстановить исходные координаты $W_i \in \mathbb{R}^d$, $i = 1, \ldots, N$.

$$L(W) = \sum_{i,j=1}^{N} \left(\|W_i - W_j\|_2^2 - D_{i,j}\right)^2 \to \min_{W \in \mathbb{R}^{N \times d}}$$

Ссылка на наглядную визуализацию ♣, где можно увидеть, что методы без градиента обрабатывают эту задачу намного медленнее, особенно в пространствах большой размерности.

Question

Связано ли это с PCA?

Пример: многомерное масштабирование

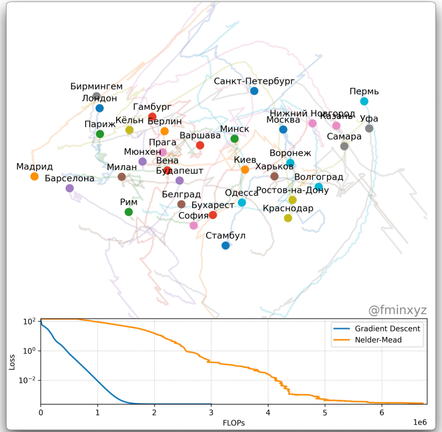


Рисунок 3: Ссылка на анимацию

Пример: градиентный спуск без градиента

Предположим, что мы хотим решить следующую задачу:

$$
L(w) \to \min_{w \in \mathbb{R}^d}
$$

Пример: градиентный спуск без градиента

Предположим, что мы хотим решить следующую задачу:

$$
L(w) \to \min_{w \in \mathbb{R}^d}
$$

с помощью алгоритма градиентного спуска (GD):

$$
w_{k+1} = w_k - \alpha_k \nabla_w L(w_k)
$$

Пример: градиентный спуск без градиента

Предположим, что мы хотим решить следующую задачу:

$$
L(w) \to \min_{w \in \mathbb{R}^d}
$$

с помощью алгоритма градиентного спуска (GD):

$$
w_{k+1} = w_k - \alpha_k \nabla_w L(w_k)
$$

Можно ли заменить $\nabla_w L(w_k)$ используя только информацию нулевого порядка?

Пример: градиентный спуск без градиента

Предположим, что мы хотим решить следующую задачу:

$$
L(w) \to \min_{w \in \mathbb{R}^d}
$$

с помощью алгоритма градиентного спуска (GD):

$$
w_{k+1} = w_k - \alpha_k \nabla_w L(w_k)
$$

Можно ли заменить $\nabla_w L(w_k)$ используя только информацию нулевого порядка?
Да, но за определенную цену.

[1] предлагаю хорошую презентацию о методах без градиента

Пример: градиентный спуск без градиента

Предположим, что мы хотим решить следующую задачу:

$$
L(w) \to \min_{w \in \mathbb{R}^d}
$$

с помощью алгоритма градиентного спуска (GD):

$$
w_{k+1} = w_k - \alpha_k \nabla_w L(w_k)
$$

Можно ли заменить $\nabla_w L(w_k)$ используя только информацию нулевого порядка?
Да, но за определенную цену.
Можно рассмотреть оценку 2-точечного градиента[1] G:

$$
G = d \frac{L(w + \varepsilon v) - L(w - \varepsilon v)}{2\varepsilon} v,
$$

где v сферически симметричен.

[1] предлагаю хорошую презентацию о методах без градиента

Пример: градиентный спуск без градиента

Предположим, что мы хотим решить следующую задачу:

$$
L(w) \to \min_{w \in \mathbb{R}^d}
$$

с помощью алгоритма градиентного спуска (GD):

$$
w_{k+1} = w_k - \alpha_k \nabla_w L(w_k)
$$

Можно ли заменить $\nabla_w L(w_k)$ используя только информацию нулевого порядка?
Да, но за определенную цену.
Можно рассмотреть оценку 2-точечного градиента[1] G:

$$
G = d\frac{L(w+\varepsilon v) - L(w-\varepsilon v)}{2\varepsilon}v,
$$

где v сферически симметричен.

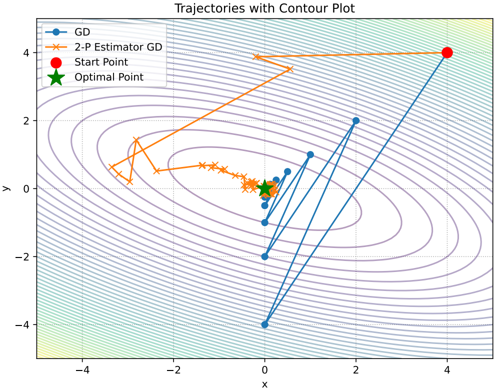


Рисунок 4: "Иллюстрация двухточечной оценки градиентного спуска"

[1] предлагаю хорошую презентацию о методах без градиента

Пример: конечные разности

$$
w_{k+1} = w_k - \alpha_k G
$$

Пример: конечные разности

$$w_{k+1} = w_k - \alpha_k G$$

Можем также рассмотреть идею конечных разностей:

$$G = \sum_{i=1}^{d} \frac{L(w + \varepsilon e_i) - L(w - \varepsilon e_i)}{2\varepsilon} e_i$$

Открыть в Colab ♣

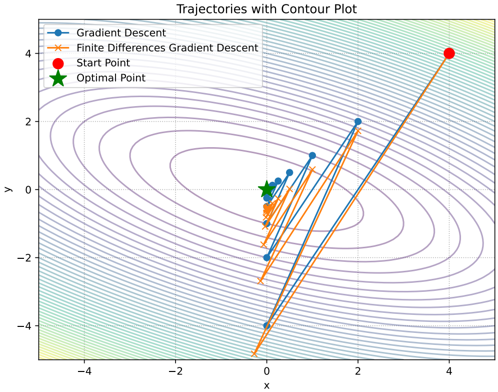


Рисунок 5: "Иллюстрация оценки конечных разностей градиентного спуска"

Проклятие размерности для методов нулевого порядка [2]

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$

Проклятие размерности для методов нулевого порядка [2]

$$
\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)
$$

GD: $x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$ Zero order GD: $x_{k+1} = x_k - \alpha_k G$,

где G - оценка градиента 2-точечная или многоточечная.

[2] Оптимальные скорости для нулевого порядка выпуклой оптимизации: сила двух оценок функции

Проклятие размерности для методов нулевого порядка [2]

$$
\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)
$$

$$
\text{GD: } x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \qquad \text{Zero order GD: } x_{k+1} = x_k - \alpha_k G,
$$

где G - оценка градиента 2-точечная или многоточечная.

	$f(x)$ - гладкая	$f(x)$ - гладкая и выпуклая	$f(x)$ - гладкая и сильно выпуклая
GD	$\|\nabla f(x_k)\|^2 \approx \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$	$f(x_k) - f^* \approx \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$	$\|x_k - x^*\|^2 \approx \mathcal{O}\left(\left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k\right)$
Zero order GD	$\|\nabla f(x_k)\|^2 \approx \mathcal{O}\left(\frac{n}{k}\right)$	$f(x_k) - f^* \approx \mathcal{O}\left(\frac{n}{k}\right)$	$\|x_k - x^*\|^2 \approx \mathcal{O}\left(\left(1 - \frac{\mu}{nL}\right)^k\right)$

Для 2-точечных оценок, вы не можете сделать зависимость лучше, чем на $\sqrt{n}$!

[2] Оптимальные скорости для нулевого порядка выпуклой оптимизации: сила двух оценок функции

Конечные разности

Наивный подход к получению приблизительных значений градиентов - это подход **конечных разностей**. Для каждой координаты, можно вычислить приближенное значение частной производной:

$$\frac{\partial L}{\partial w_k}(w) \approx \frac{L(w+\varepsilon e_k) - L(w)}{\varepsilon}, \quad e_k = (0, \ldots, \underset{k}{1}, \ldots, 0)$$

[3] Linnainmaa S. The representation of the cumulative rounding error of an algorithm as a Taylor expansion of the local rounding errors. Master's Thesis (in Finnish), Univ. Helsinki, 1970.

Конечные разности

Наивный подход к получению приблизительных значений градиентов - это подход **конечных разностей**. Для каждой координаты, можно вычислить приближенное значение частной производной:

$$\frac{\partial L}{\partial w_k}(w) \approx \frac{L(w + \varepsilon e_k) - L(w)}{\varepsilon}, \quad e_k = (0, \ldots, \underset{k}{1}, \ldots, 0)$$

Question

Если время, необходимое для одного вычисления $L(w)$ равно T, то какое время необходимо для вычисления $\nabla_w L$ с этим подходом?

Конечные разности

Наивный подход к получению приблизительных значений градиентов - это подход **конечных разностей**. Для каждой координаты, можно вычислить приближенное значение частной производной:

$$\frac{\partial L}{\partial w_k}(w) \approx \frac{L(w+\varepsilon e_k) - L(w)}{\varepsilon}, \quad e_k = (0, \dots, \underset{k}{1}, \dots, 0)$$

Question

Если время, необходимое для одного вычисления $L(w)$ равно T, то какое время необходимо для вычисления $\nabla_w L$ с этим подходом?
Ответ $2dT$, что очень долго для больших задач. Кроме того, этот точный метод нестабилен, что означает, что вам придется выбирать между точностью и стабильностью.

Конечные разности

Наивный подход к получению приблизительных значений градиентов - это подход **конечных разностей**. Для каждой координаты, можно вычислить приближенное значение частной производной:

$$
\frac{\partial L}{\partial w_k}(w) \approx \frac{L(w + \varepsilon e_k) - L(w)}{\varepsilon}, \quad e_k = (0, \ldots, \underset{k}{1}, \ldots, 0)
$$

Question

Если время, необходимое для одного вычисления $L(w)$ равно T, то какое время необходимо для вычисления $\nabla_w L$ с этим подходом?

Ответ $2dT$, что очень долго для больших задач. Кроме того, этот точный метод нестабилен, что означает, что вам придется выбирать между точностью и стабильностью.

Теорема

Существует алгоритм для вычисления $\nabla_w L$ в $\mathcal{O}(T)$ операциях. [3]

[3] Linnainmaa S. The representation of the cumulative rounding error of an algorithm as a Taylor expansion of the local rounding errors. Master's Thesis (in Finnish), Univ. Helsinki, 1970.

Прямой режим автоматического дифференцирования

Чтобы глубже понять идею автоматического дифференцирования, рассмотрим простую функцию для вычисления производных:

$$L(w_1, w_2) = w_2 \log w_1 + \sqrt{w_2 \log w_1}$$

Прямой режим автоматического дифференцирования

Чтобы глубже понять идею автоматического дифференцирования, рассмотрим простую функцию для вычисления производных:

$$
L(w_1, w_2) = w_2 \log w_1 + \sqrt{w_2 \log w_1}
$$

Давайте нарисуем вычислительный граф этой функции:

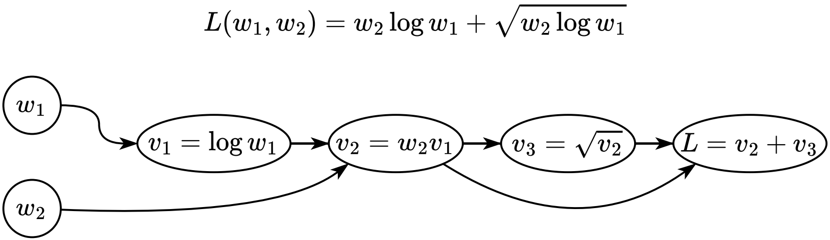


Рисунок 6: Иллюстрация вычислительного графа для функции $L(w_1, w_2)$

Прямой режим автоматического дифференцирования

Чтобы глубже понять идею автоматического дифференцирования, рассмотрим простую функцию для вычисления производных:

$$
L(w_1, w_2) = w_2 \log w_1 + \sqrt{w_2 \log w_1}
$$

Давайте нарисуем вычислительный граф этой функции:

$$
L(w_1, w_2) = w_2 \log w_1 + \sqrt{w_2 \log w_1}
$$

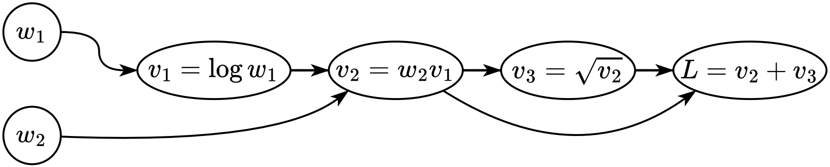


Рисунок 6: Иллюстрация вычислительного графа для функции $L(w_1, w_2)$

Давайте пойдем от начала графа к концу и вычислим производную $\dfrac{\partial L}{\partial w_1}$.

Прямой режим автоматического дифференцирования

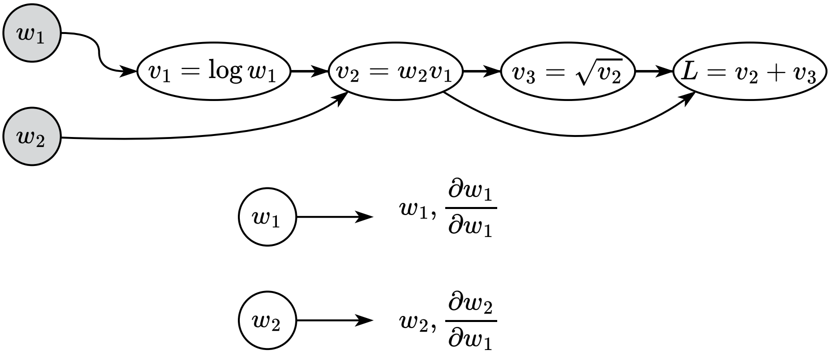


Рисунок 7: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$w_1 = w_1, w_2 = w_2$

Прямой режим автоматического дифференцирования

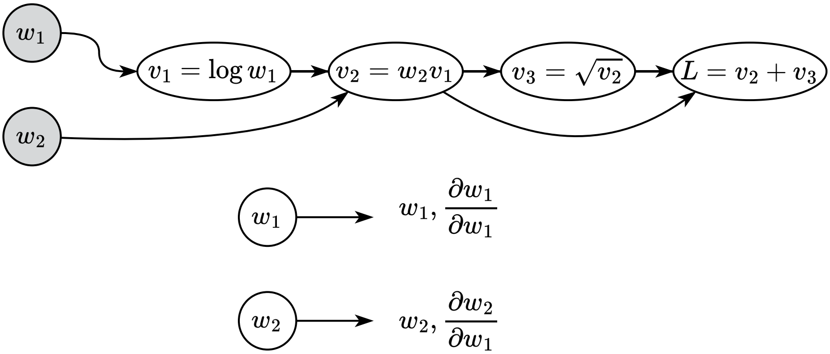


Рисунок 7: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$w_1 = w_1, w_2 = w_2$

Производная

$$\frac{\partial w_1}{\partial w_1} = 1, \frac{\partial w_2}{\partial w_1} = 0$$

Прямой режим автоматического дифференцирования

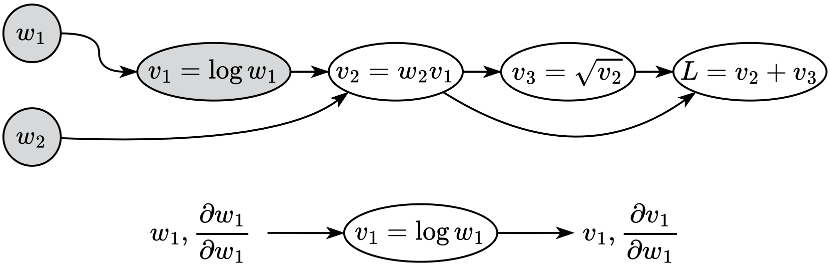


Рисунок 8: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Прямой режим автоматического дифференцирования

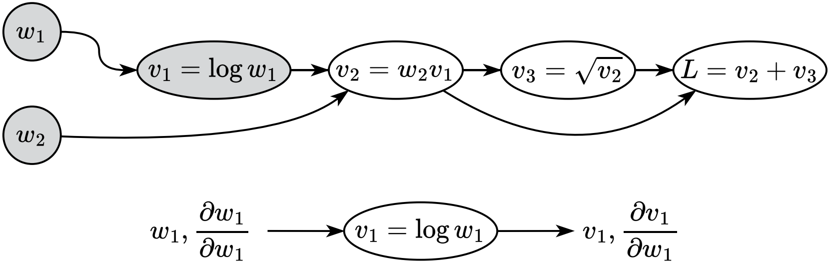


Рисунок 8: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$v_1 = \log w_1$

Прямой режим автоматического дифференцирования

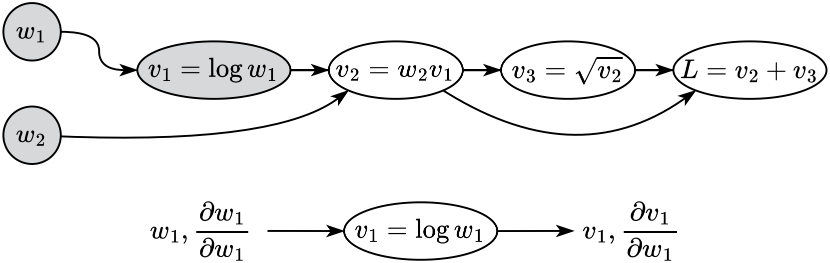


Рисунок 8: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$v_1 = \log w_1$

Производная

$\frac{\partial v_1}{\partial w_1} = \frac{\partial v_1}{\partial w_1} \frac{\partial w_1}{\partial w_1} = \frac{1}{w_1} 1$

Прямой режим автоматического дифференцирования

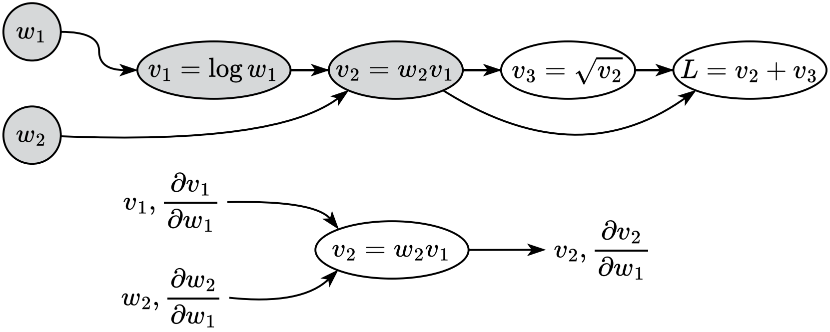


Рисунок 9: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Прямой режим автоматического дифференцирования

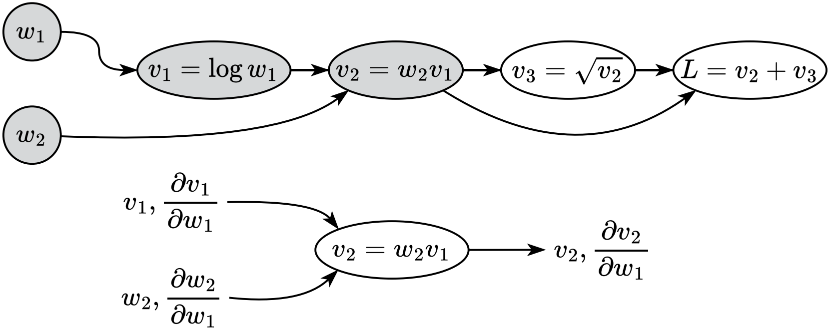


Рисунок 9: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$v_2 = w_2 v_1$

Прямой режим автоматического дифференцирования

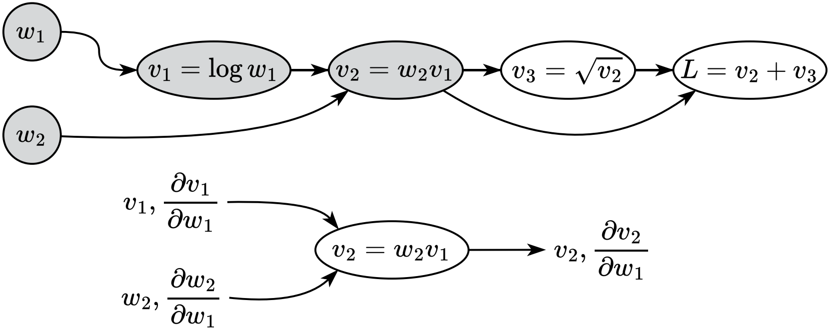


Рисунок 9: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$$v_2 = w_2 v_1$$

Производная

$$\frac{\partial v_2}{\partial w_1} = \frac{\partial v_2}{\partial v_1}\frac{\partial v_1}{\partial w_1} + \frac{\partial v_2}{\partial w_2}\frac{\partial w_2}{\partial w_1} = w_2\frac{\partial v_1}{\partial w_1} + v_1\frac{\partial w_2}{\partial w_1}$$

Прямой режим автоматического дифференцирования

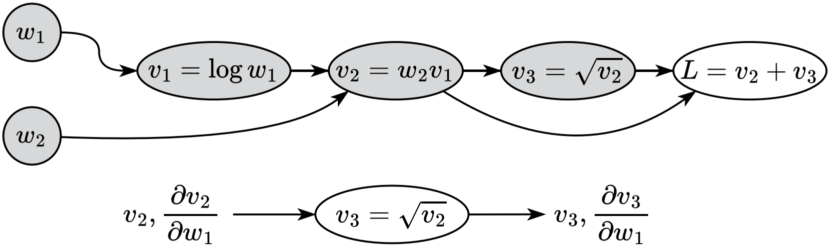


Рисунок 10: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Прямой режим автоматического дифференцирования

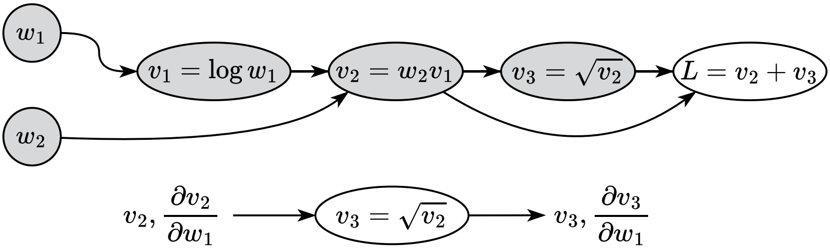


Рисунок 10: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$v_3 = \sqrt{v_2}$

Прямой режим автоматического дифференцирования

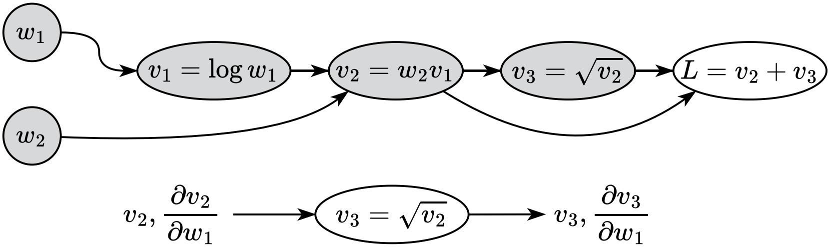


Рисунок 10: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$v_3 = \sqrt{v_2}$

Производная

$$\frac{\partial v_3}{\partial w_1} = \frac{\partial v_3}{\partial v_2}\frac{\partial v_2}{\partial w_1} = \frac{1}{2\sqrt{v_2}}\frac{\partial v_2}{\partial w_1}$$

Прямой режим автоматического дифференцирования

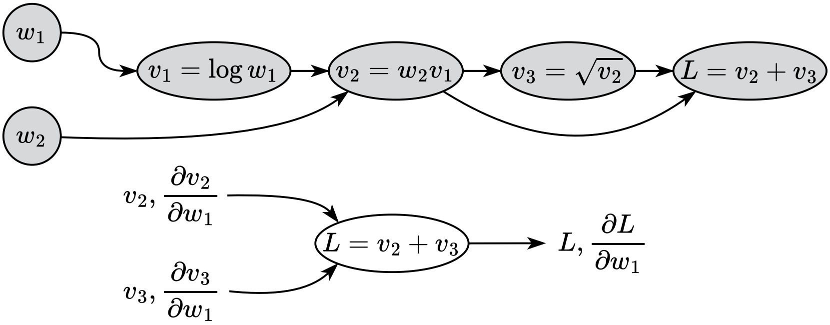


Рисунок 11: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Прямой режим автоматического дифференцирования

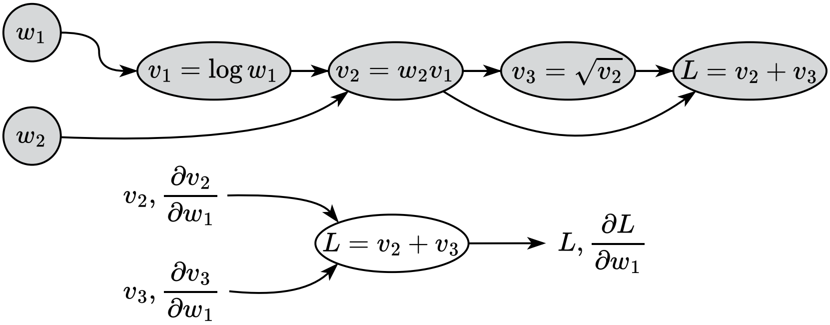


Рисунок 11: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$L = v_2 + v_3$

Прямой режим автоматического дифференцирования

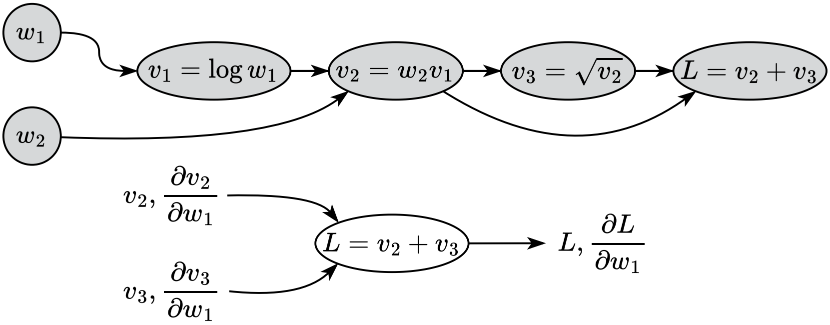


Рисунок 11: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$$L = v_2 + v_3$$

Производная

$$\frac{\partial L}{\partial w_1} = \frac{\partial L}{\partial v_2}\frac{\partial v_2}{\partial w_1} + \frac{\partial L}{\partial v_3}\frac{\partial v_3}{\partial w_1} = 1\frac{\partial v_2}{\partial w_1} + 1\frac{\partial v_3}{\partial w_1}$$

Сделайте аналогичные вычисления для $\dfrac{\partial L}{\partial w_2}$

$$
L(w_1, w_2) = w_2 \log w_1 + \sqrt{w_2 \log w_1}
$$

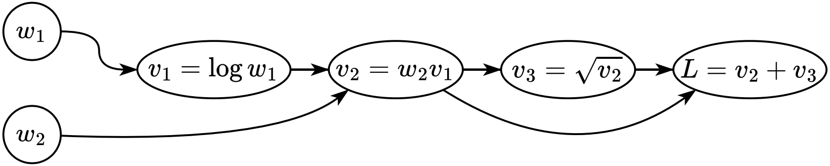


Рисунок 12: Иллюстрация вычислительного графа для функции $L(w_1, w_2)$

Пример прямого режима автоматического дифференцирования

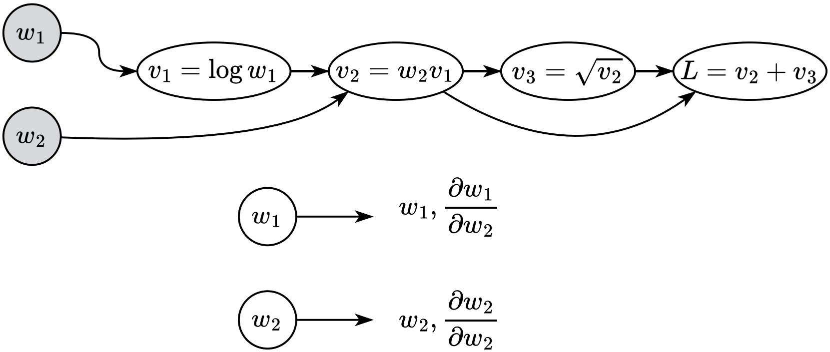


Рисунок 13: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$$w_1 = w_1, w_2 = w_2$$

Производная

$$\frac{\partial w_1}{\partial w_2} = 0, \frac{\partial w_2}{\partial w_2} = 1$$

Пример прямого режима автоматического дифференцирования

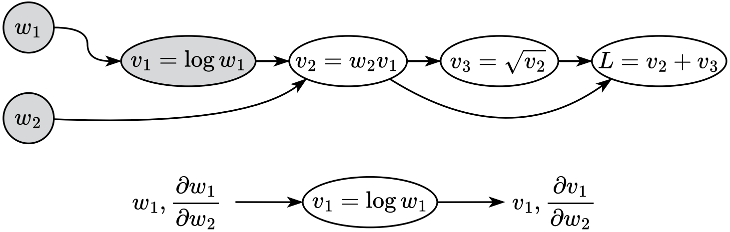


Рисунок 14: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$$v_1 = \log w_1$$

Derivative

$$\frac{\partial v_1}{\partial w_2} = \frac{\partial v_1}{\partial w_1}\frac{\partial w_1}{\partial w_2} = \frac{1}{w_1} \cdot 0$$

Пример прямого режима автоматического дифференцирования

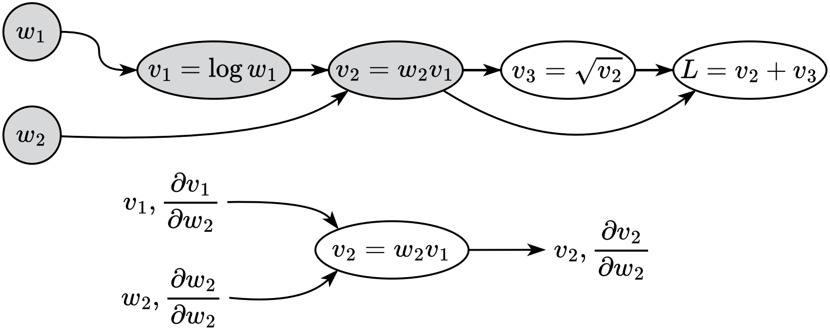


Рисунок 15: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$$v_2 = w_2 v_1$$

Производная

$$\frac{\partial v_2}{\partial w_2} = \frac{\partial v_2}{\partial v_1}\frac{\partial v_1}{\partial w_2} + \frac{\partial v_2}{\partial w_2}\frac{\partial w_2}{\partial w_2} = w_2 \frac{\partial v_1}{\partial w_2} + v_1 \frac{\partial w_2}{\partial w_2}$$

Пример прямого режима автоматического дифференцирования

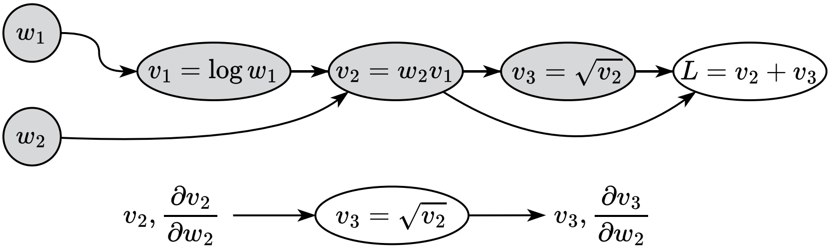


Рисунок 16: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$$v_3 = \sqrt{v_2}$$

Производная

$$\frac{\partial v_3}{\partial w_2} = \frac{\partial v_3}{\partial v_2}\frac{\partial v_2}{\partial w_2} = \frac{1}{2\sqrt{v_2}}\frac{\partial v_2}{\partial w_2}$$

Пример прямого режима автоматического дифференцирования

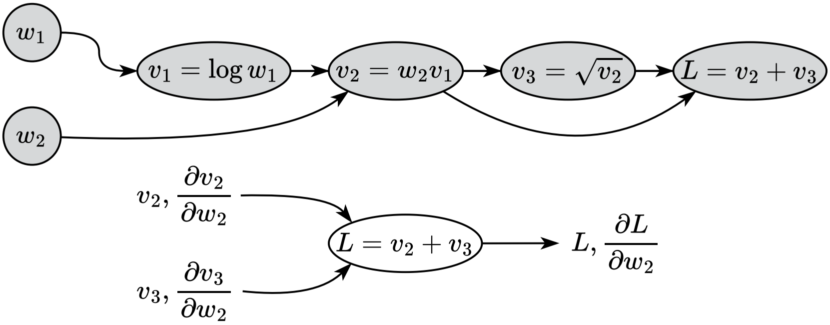


Рисунок 17: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$$L = v_2 + v_3$$

Производная

$$\frac{\partial L}{\partial w_2} = \frac{\partial L}{\partial v_2}\frac{\partial v_2}{\partial w_2} + \frac{\partial L}{\partial v_3}\frac{\partial v_3}{\partial w_2} = 1\frac{\partial v_2}{\partial w_2} + 1\frac{\partial v_3}{\partial w_2}$$

Алгоритм прямого режима автоматического дифференцирования

Предположим, что у нас есть вычислительный граф $v_i, i \in [1; N]$. Наша цель - вычислить производную выхода этого графа по некоторой входной переменной w_k, т.е. $\dfrac{\partial v_N}{\partial w_k}$. Эта идея предполагает распространение градиента по входной переменной от начала к концу, поэтому мы можем ввести обозначение:

Алгоритм прямого режима автоматического дифференцирования

Предположим, что у нас есть вычислительный граф $v_i, i \in [1; N]$. Наша цель - вычислить производную выхода этого графа по некоторой входной переменной w_k, т.е. $\dfrac{\partial v_N}{\partial w_k}$. Эта идея предполагает распространение градиента по входной переменной от начала к концу, поэтому мы можем ввести обозначение:

$$\overline{v_i} = \frac{\partial v_i}{\partial w_k}$$

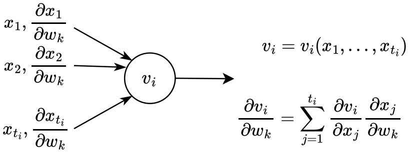


Рисунок 18: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Алгоритм прямого режима автоматического дифференцирования

Предположим, что у нас есть вычислительный граф $v_i, i \in [1; N]$. Наша цель - вычислить производную выхода этого графа по некоторой входной переменной w_k, т.е. $\dfrac{\partial v_N}{\partial w_k}$. Эта идея предполагает распространение градиента по входной переменной от начала к концу, поэтому мы можем ввести обозначение:

$$
\overline{v_i} = \frac{\partial v_i}{\partial w_k}
$$

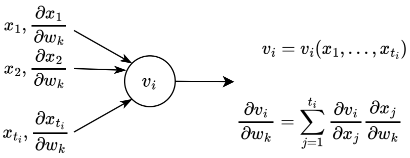


Рисунок 18: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

- Для $i = 1, \ldots, N$:

Алгоритм прямого режима автоматического дифференцирования

Предположим, что у нас есть вычислительный граф $v_i, i \in [1; N]$. Наша цель - вычислить производную выхода этого графа по некоторой входной переменной w_k, т.е. $\dfrac{\partial v_N}{\partial w_k}$. Эта идея предполагает распространение градиента по входной переменной от начала к концу, поэтому мы можем ввести обозначение:

$$
\overline{v_i} = \frac{\partial v_i}{\partial w_k}
$$

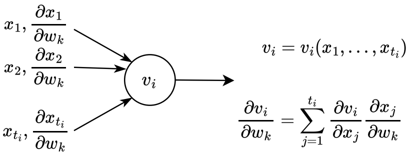


Рисунок 18: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

- Для $i = 1, \ldots, N$:
  - Вычислить v_i как функцию его родителей (входов) $x_1, \ldots, x_{t_i}$:

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

Алгоритм прямого режима автоматического дифференцирования

Предположим, что у нас есть вычислительный граф $v_i, i \in [1; N]$. Наша цель - вычислить производную выхода этого графа по некоторой входной переменной w_k, т.е. $\dfrac{\partial v_N}{\partial w_k}$. Эта идея предполагает распространение градиента по входной переменной от начала к концу, поэтому мы можем ввести обозначение:

$$
\overline{v_i} = \frac{\partial v_i}{\partial w_k}
$$

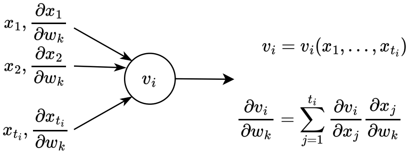


Рисунок 18: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

- Для $i = 1, \dots, N$:
  - Вычислить v_i как функцию его родителей (входов) $x_1, \dots, x_{t_i}$:
  $$
  v_i = v_i(x_1, \dots, x_{t_i})
  $$
  - Вычислить производную $\overline{v_i}$ используя прямой режим автоматического дифференцирования:
  $$
  \overline{v_i} = \sum_{j=1}^{t_i} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial w_k}
  $$

Алгоритм прямого режима автоматического дифференцирования

Предположим, что у нас есть вычислительный граф $v_i, i \in [1; N]$. Наша цель - вычислить производную выхода этого графа по некоторой входной переменной w_k, т.е. $\dfrac{\partial v_N}{\partial w_k}$. Эта идея предполагает распространение градиента по входной переменной от начала к концу, поэтому мы можем ввести обозначение:

$$
\overline{v_i} = \frac{\partial v_i}{\partial w_k}
$$

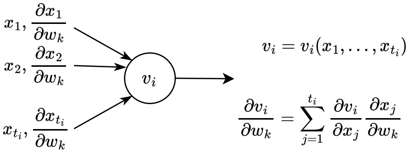


Рисунок 18: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

- Для $i = 1, \ldots, N$:
  - Вычислить v_i как функцию его родителей (входов) $x_1, \ldots, x_{t_i}$:
    $$
    v_i = v_i(x_1, \ldots, x_{t_i})
    $$
  - Вычислить производную $\overline{v_i}$ используя прямой режим автоматического дифференцирования:
    $$
    \overline{v_i} = \sum_{j=1}^{t_i} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial w_k}
    $$

Алгоритм прямого режима автоматического дифференцирования

Предположим, что у нас есть вычислительный граф $v_i, i \in [1; N]$. Наша цель - вычислить производную выхода этого графа по некоторой входной переменной w_k, т.е. $\dfrac{\partial v_N}{\partial w_k}$. Эта идея предполагает распространение градиента по входной переменной от начала к концу, поэтому мы можем ввести обозначение:

$$\overline{v_i} = \frac{\partial v_i}{\partial w_k}$$

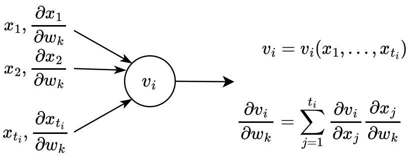


Рисунок 18: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

- Для $i = 1, \ldots, N$:
  - Вычислить v_i как функцию его родителей (входов) $x_1, \ldots, x_{t_i}$:
  $$v_i = v_i(x_1, \ldots, x_{t_i})$$
  - Вычислить производную $\overline{v_i}$ используя прямой режим автоматического дифференцирования:
  $$\overline{v_i} = \sum_{j=1}^{t_i} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial w_k}$$

Обратите внимание, что этот подход не требует хранения всех промежуточных вычислений, но можно видеть, что для вычисления производной $\dfrac{\partial L}{\partial w_k}$ нам нужно $\mathcal{O}(T)$ операций. Это означает, что для всего градиента, нам нужно $d\mathcal{O}(T)$ операций, что то же самое, что и для конечных разностей, но теперь мы не имеем проблем со стабильностью, или неточностями(формулы выше точны).


There is another

Обратный режим автоматического дифференцирования

Мы рассмотрим ту же функцию с вычислительным графом:

$$L(w_1, w_2) = w_2 \log w_1 + \sqrt{w_2 \log w_1}$$

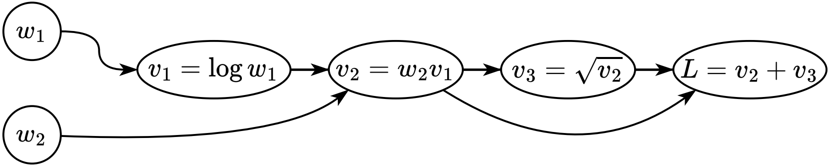


Рисунок 19: Иллюстрация вычислительного графа для функции $L(w_1, w_2)$

Обратный режим автоматического дифференцирования

Мы рассмотрим ту же функцию с вычислительным графом:

$$L(w_1, w_2) = w_2 \log w_1 + \sqrt{w_2 \log w_1}$$

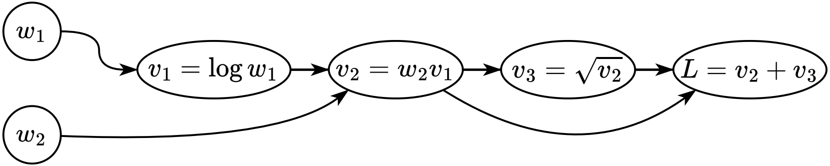


Рисунок 19: Иллюстрация вычислительного графа для функции $L(w_1, w_2)$

Предположим, что у нас есть некоторые значения параметров w_1, w_2 и мы уже выполнили прямой проход (т.е. однократное распространение через вычислительный граф слева направо). Предположим также, что мы как-то сохранили все промежуточные значения v_i. Давайте пойдем от конца графа к началу и вычислим производные $\dfrac{\partial L}{\partial w_1}, \dfrac{\partial L}{\partial w_2}$:

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

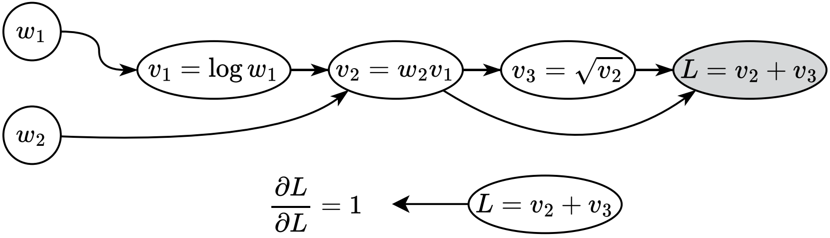


Рисунок 20: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

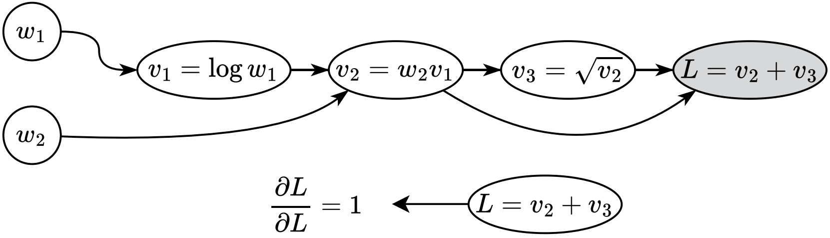


Рисунок 20: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

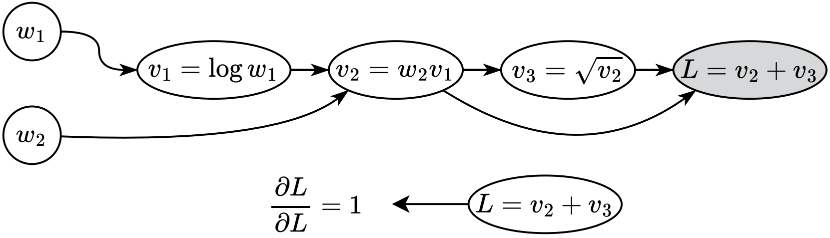


Рисунок 20: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

$$
\frac{\partial L}{\partial L} = 1
$$

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

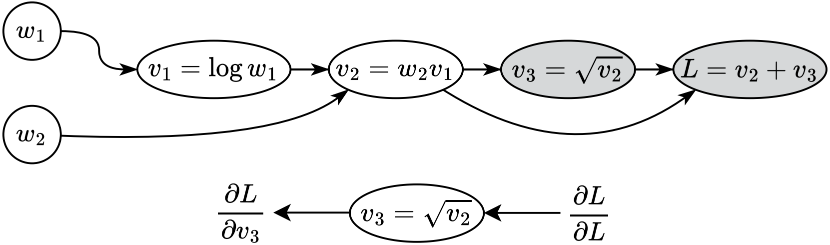


Рисунок 21: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

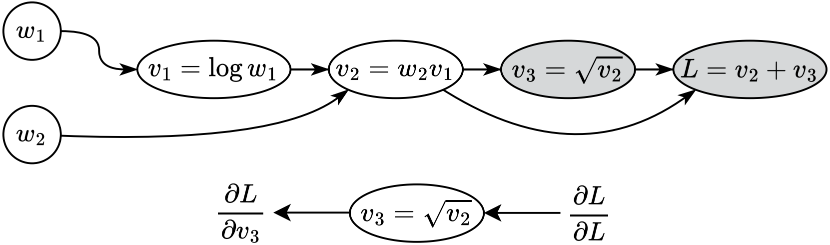


Рисунок 21: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

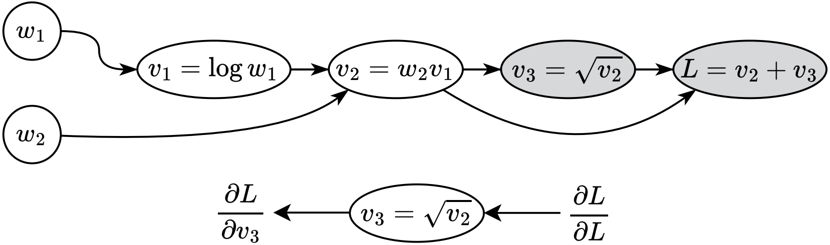


Рисунок 21: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial v_3} &= \frac{\partial L}{\partial L}\frac{\partial L}{\partial v_3} \\
&= \frac{\partial L}{\partial L} 1
\end{aligned}
$$

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

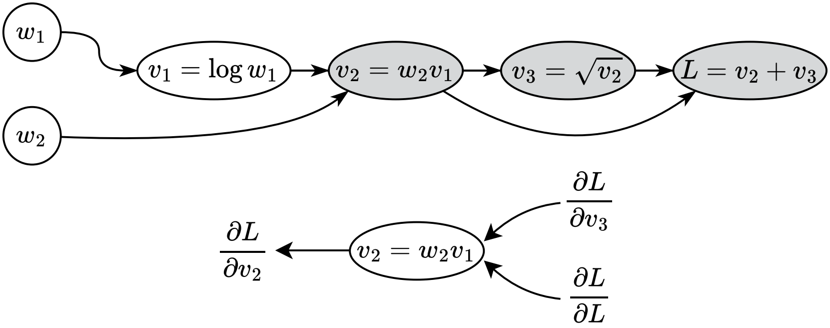


Рисунок 22: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

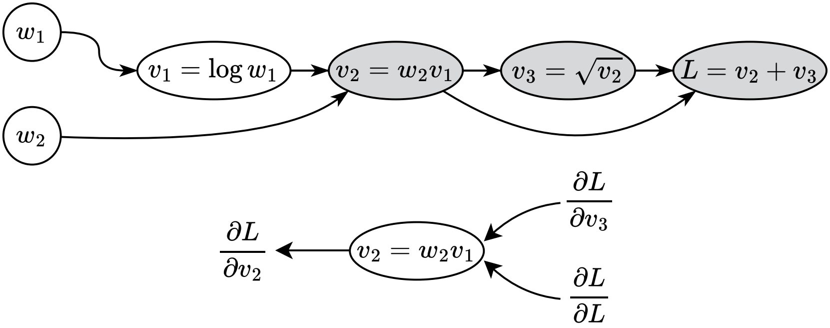


Рисунок 22: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

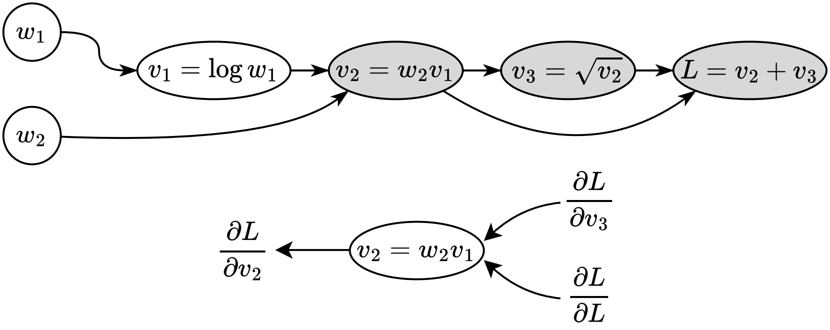


Рисунок 22: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial v_2} &= \frac{\partial L}{\partial v_3}\frac{\partial v_3}{\partial v_2} + \frac{\partial L}{\partial L}\frac{\partial L}{\partial v_2} \\
&= \frac{\partial L}{\partial v_3}\frac{1}{2\sqrt{v_2}} + \frac{\partial L}{\partial L}1
\end{aligned}
$$

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

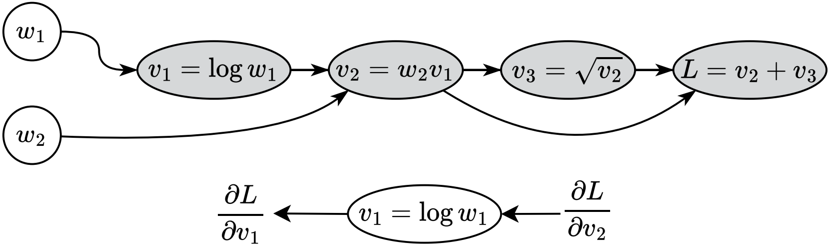


Рисунок 23: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

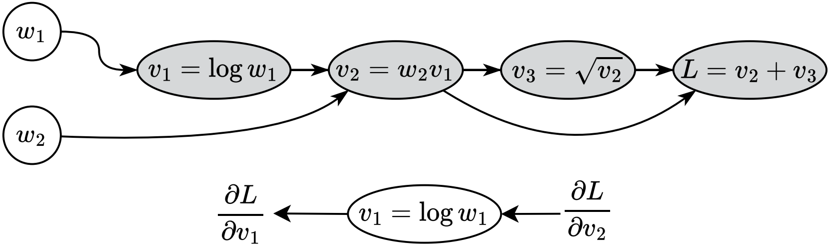


Рисунок 23: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

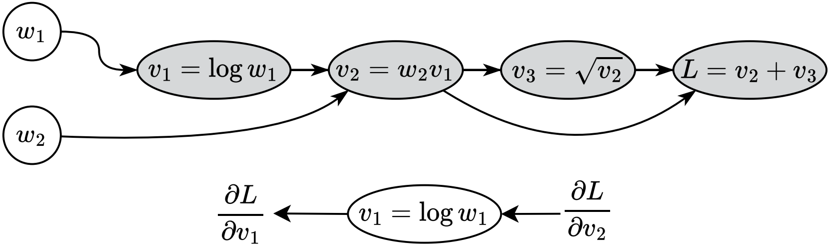


Рисунок 23: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial v_1} &= \frac{\partial L}{\partial v_2}\frac{\partial v_2}{\partial v_1} \\
&= \frac{\partial L}{\partial v_2} w_2
\end{aligned}
$$

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

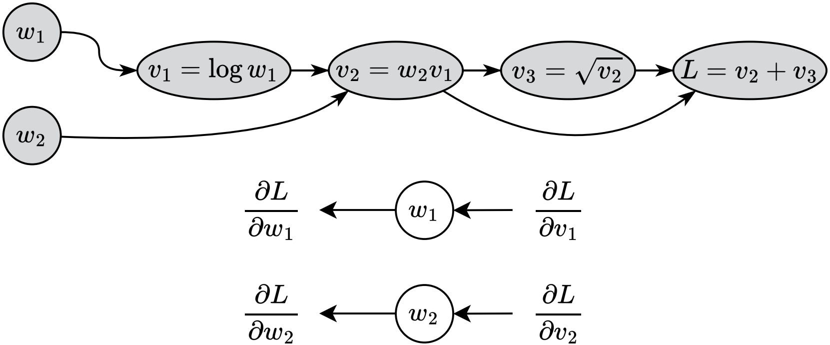


Рисунок 24: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

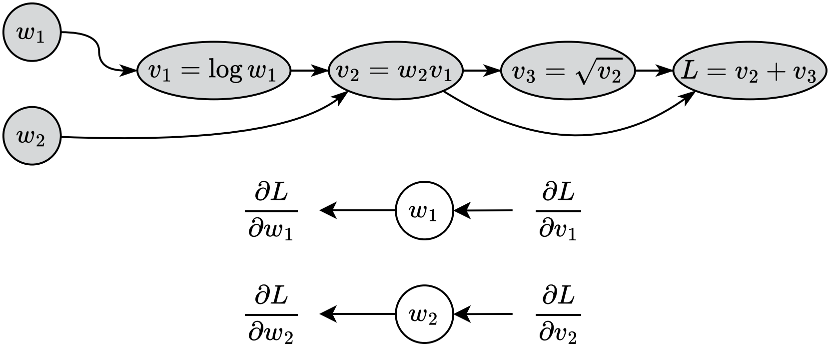


Рисунок 24: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

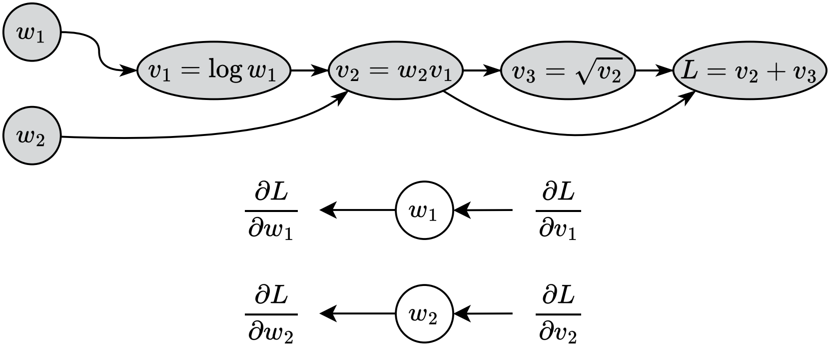


Рисунок 24: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

$$\frac{\partial L}{\partial w_1} = \frac{\partial L}{\partial v_1}\frac{\partial v_1}{\partial w_1} = \frac{\partial L}{\partial v_1}\frac{1}{w_1} \qquad \frac{\partial L}{\partial w_2} = \frac{\partial L}{\partial v_2}\frac{\partial v_2}{\partial w_2} = \frac{\partial L}{\partial v_1}v_1$$

Обратный (reverse) режим автоматического дифференцирования

Question

Обратите внимание, что для того же количества вычислений, что и в прямом режиме, мы имеем полный вектор градиента $\nabla_w L$. Это бесплатный обед? Какова стоимость ускорения?

Обратный (reverse) режим автоматического дифференцирования

Question

Обратите внимание, что для того же количества вычислений, что и в прямом режиме, мы имеем полный вектор градиента $\nabla_w L$. Это бесплатный обед? Какова стоимость ускорения?
Ответ Обратите внимание, что для использования обратного режима AD вам нужно хранить все промежуточные вычисления из прямого прохода. Эта проблема может быть частично смягчена подходом контрольных точек градиента, который включает необходимые повторные вычисления некоторых промежуточных значений. Это может значительно уменьшить объем памяти большой модели машинного обучения.

Алгоритм обратного режима автоматического дифференцирования

Предположим, что у нас есть вычислительный граф $v_i, i \in [1; N]$. Наша цель - вычислить производную выхода этого графа по всем входным переменным w, т.е. $\nabla_w v_N = \left(\frac{\partial v_N}{\partial w_1}, \ldots, \frac{\partial v_N}{\partial w_d} \right)^T$. Эта идея предполагает распространение градиента функции по промежуточным переменным от конца к началу, поэтому мы можем ввести обозначение:

$$\overline{v_i} = \frac{\partial L}{\partial v_i} = \frac{\partial v_N}{\partial v_i}$$

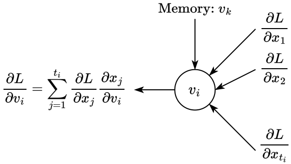


Рисунок 25: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

- **ПРЯМОЙ ПРОХОД**

  Для $i = 1, \ldots, N$:

Алгоритм обратного режима автоматического дифференцирования

Предположим, что у нас есть вычислительный граф $v_i, i \in [1; N]$. Наша цель - вычислить производную выхода этого графа по всем входным переменным w, т.е. $\nabla_w v_N = \left(\frac{\partial v_N}{\partial w_1}, \ldots, \frac{\partial v_N}{\partial w_d} \right)^T$. Эта идея предполагает распространение градиента функции по промежуточным переменным от конца к началу, поэтому мы можем ввести обозначение:

$$
\overline{v_i} = \frac{\partial L}{\partial v_i} = \frac{\partial v_N}{\partial v_i}
$$

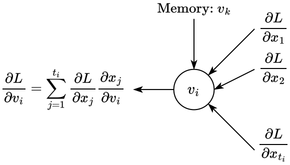


Рисунок 25: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

- **ПРЯМОЙ ПРОХОД**

  Для $i = 1, \ldots, N$:
  - Вычислить и сохранить значения v_i как функцию его родителей (входов)

Алгоритм обратного режима автоматического дифференцирования

Предположим, что у нас есть вычислительный граф $v_i, i \in [1; N]$. Наша цель - вычислить производную выхода этого графа по всем входным переменным w, т.е. $\nabla_w v_N = \left(\frac{\partial v_N}{\partial w_1}, \ldots, \frac{\partial v_N}{\partial w_d} \right)^T$. Эта идея предполагает распространение градиента функции по промежуточным переменным от конца к началу, поэтому мы можем ввести обозначение:

$$
\overline{v_i} = \frac{\partial L}{\partial v_i} = \frac{\partial v_N}{\partial v_i}
$$

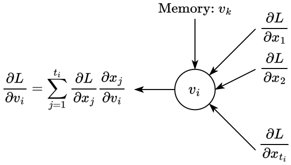


Рисунок 25: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

- **ПРЯМОЙ ПРОХОД**

  Для $i = 1, \ldots, N$:
  - Вычислить и сохранить значения v_i как функцию его родителей (входов)
- **ОБРАТНЫЙ ПРОХОД**

  Для $i = N, \ldots, 1$:

Алгоритм обратного режима автоматического дифференцирования

Предположим, что у нас есть вычислительный граф $v_i, i \in [1; N]$. Наша цель - вычислить производную выхода этого графа по всем входным переменным w, т.е. $\nabla_w v_N = \left(\frac{\partial v_N}{\partial w_1}, \dots, \frac{\partial v_N}{\partial w_d}\right)^T$. Эта идея предполагает распространение градиента функции по промежуточным переменным от конца к началу, поэтому мы можем ввести обозначение:

$$\overline{v_i} = \frac{\partial L}{\partial v_i} = \frac{\partial v_N}{\partial v_i}$$

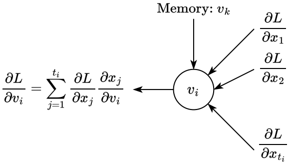


Рисунок 25: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

- **ПРЯМОЙ ПРОХОД**

  Для $i = 1, \dots, N$:
  - Вычислить и сохранить значения v_i как функцию его родителей (входов)
- **ОБРАТНЫЙ ПРОХОД**

  Для $i = N, \dots, 1$:
  - Вычислить производную $\overline{v_i}$ используя обратный режим автоматического дифференцирования и информацию от всех его детей (выходов) $(x_1, \dots, x_{t_i})$:

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

Выберите своего бойца

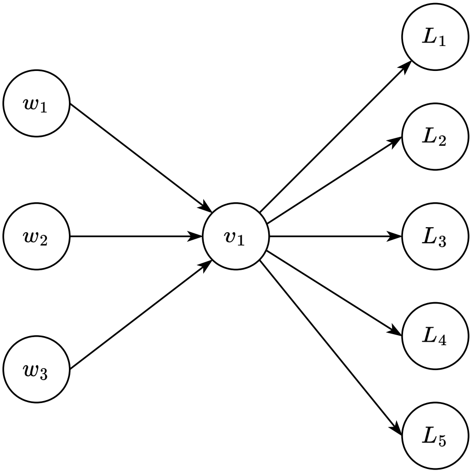


Рисунок 26: Какой режим вы бы выбрали для вычисления градиентов?

Question

Какой из режимов AD вы бы выбрали (прямой/обратный) для следующего вычислительного графа арифметических операций? Предположим, что вам нужно вычислить якобиан $J = \left\{ \dfrac{\partial L_i}{\partial w_j} \right\}_{i,j}$

Выберите своего бойца

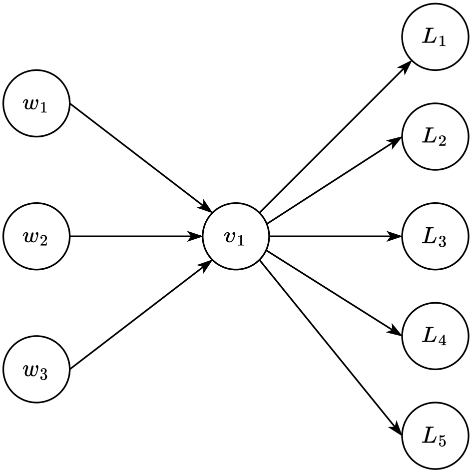


Рисунок 26: Какой режим вы бы выбрали для вычисления градиентов?

Question

Какой из режимов AD вы бы выбрали (прямой/обратный) для следующего вычислительного графа арифметических операций? Предположим, что вам нужно вычислить якобиан $J = \left\{ \dfrac{\partial L_i}{\partial w_j} \right\}_{i,j}$

Ответ Обратите внимание, что время вычислений в обратном режиме пропорционально количеству выходов, в то время как прямой режим работает пропорционально количеству входов. Поэтому было бы хорошей идеей рассмотреть прямой режим AD.

Выберите своего бойца

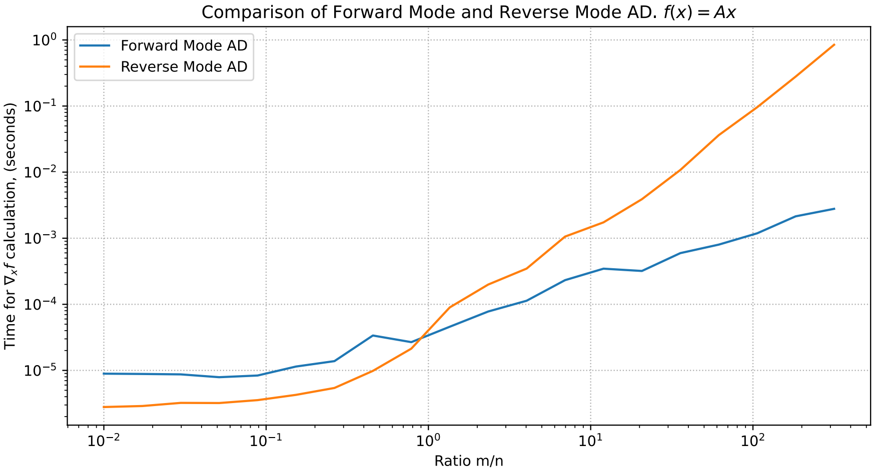


Рисунок 27: ♣ Этот граф хорошо иллюстрирует идею выбора между режимами. Размерность $n = 100$ фиксирована, и граф представляет время, необходимое для вычисления якобиана w.r.t. x для $f(x) = Ax$

Выберите своего бойца

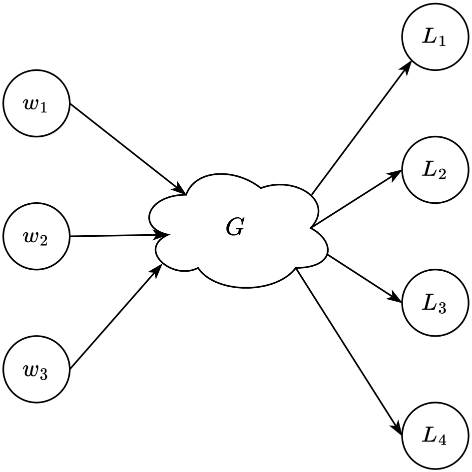


Рисунок 28: Какой режим вы бы выбрали для вычисления градиентов?

Question

Какой из режимов AD вы бы выбрали (прямой/обратный) для следующего вычислительного графа арифметических операций? Предположим, что вам нужно вычислить якобиан $J = \left\{ \dfrac{\partial L_i}{\partial w_j} \right\}_{i,j}$. Обратите внимание, что G - это произвольный вычислительный граф

Выберите своего бойца

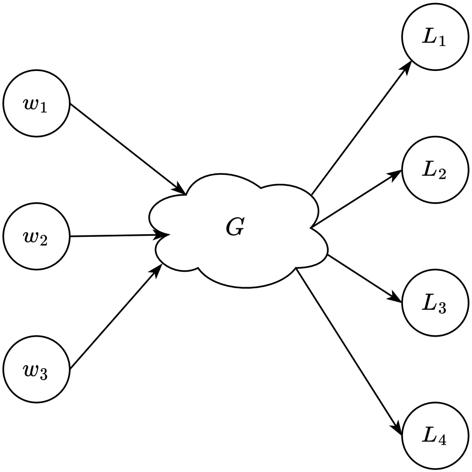


Рисунок 28: Какой режим вы бы выбрали для вычисления градиентов?

Question

Какой из режимов AD вы бы выбрали (прямой/обратный) для следующего вычислительного графа арифметических операций? Предположим, что вам нужно вычислить якобиан $J = \left\{\frac{\partial L_i}{\partial w_j}\right\}_{i,j}$. Обратите внимание, что G - это произвольный вычислительный граф

Ответ В общем случае невозможно сказать это без некоторого знания о конкретной структуре графа G. Обратите внимание, что также есть множество продвинутых подходов для смешивания прямого и обратного режимов AD, основанных на конкретной структуре G.

Архитектура прямого распространения

ПРЯМОЙ ПРОХОД

- $v_0 = x$ обычно у нас есть batch данных x здесь в качестве входа.

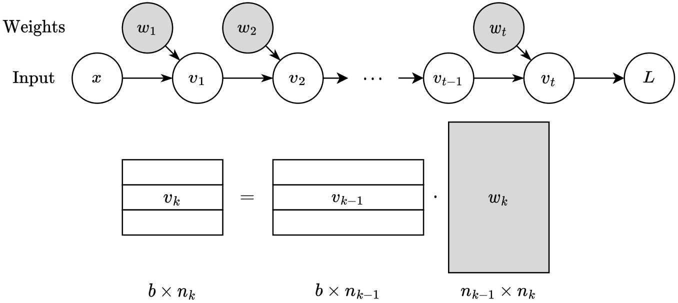


Рисунок 29: Архитектура прямого распространения нейронной сети

ОБРАТНЫЙ ПРОХОД

Архитектура прямого распространения

ПРЯМОЙ ПРОХОД

- $v_0 = x$ обычно у нас есть batch данных x здесь в качестве входа.
- Для $k = 1, \ldots, t-1, t$:

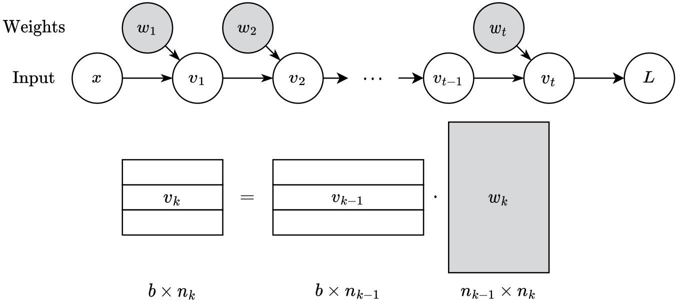


Рисунок 29: Архитектура прямого распространения нейронной сети

ОБРАТНЫЙ ПРОХОД

Архитектура прямого распространения

ПРЯМОЙ ПРОХОД

- $v_0 = x$ обычно у нас есть batch данных x здесь в качестве входа.
- Для $k = 1, \dots, t-1, t$:
  - $v_k = \sigma(v_{k-1} w_k)$. Обратите внимание, что практически говоря, данные имеют размерность $x \in \mathbb{R}^{b \times d}$, где b - размер батча (для одного данного $b = 1$). В то время как матрица весов w_k k слоя имеет размер $n_{k-1} \times n_k$, где n_k - размер внутреннего представления данных.

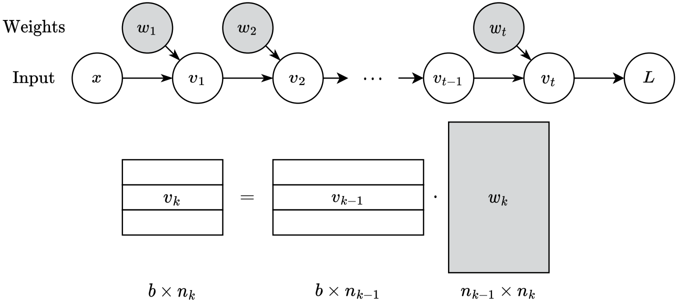


Рисунок 29: Архитектура прямого распространения нейронной сети

ОБРАТНЫЙ ПРОХОД

Архитектура прямого распространения

ПРЯМОЙ ПРОХОД

- $v_0 = x$ обычно у нас есть batch данных x здесь в качестве входа.
- Для $k = 1, \ldots, t-1, t$:
  - $v_k = \sigma(v_{k-1} w_k)$. Обратите внимание, что практически говоря, данные имеют размерность $x \in \mathbb{R}^{b \times d}$, где b - размер батча (для одного данного $b = 1$). В то время как матрица весов w_k k слоя имеет размер $n_{k-1} \times n_k$, где n_k - размер внутреннего представления данных.
- $L = L(v_t)$ - вычислить функцию потерь.

ОБРАТНЫЙ ПРОХОД

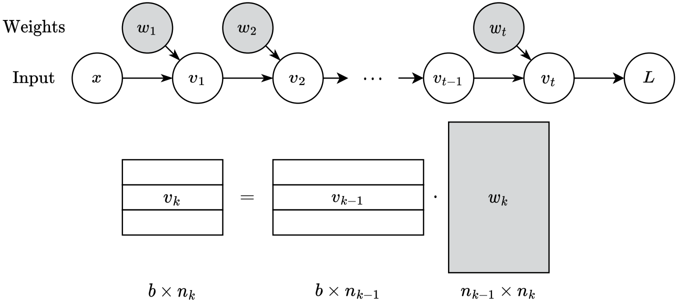


Рисунок 29: Архитектура прямого распространения нейронной сети

Архитектура прямого распространения

ПРЯМОЙ ПРОХОД

- $v_0 = x$ обычно у нас есть batch данных x здесь в качестве входа.
- Для $k = 1, \ldots, t-1, t$:
  - $v_k = \sigma(v_{k-1} w_k)$. Обратите внимание, что практически говоря, данные имеют размерность $x \in \mathbb{R}^{b \times d}$, где b - размер батча (для одного данного $b = 1$). В то время как матрица весов w_k k слоя имеет размер $n_{k-1} \times n_k$, где n_k - размер внутреннего представления данных.
- $L = L(v_t)$ - вычислить функцию потерь.

ОБРАТНЫЙ ПРОХОД

- $v_{t+1} = L, \dfrac{\partial L}{\partial L} = 1$

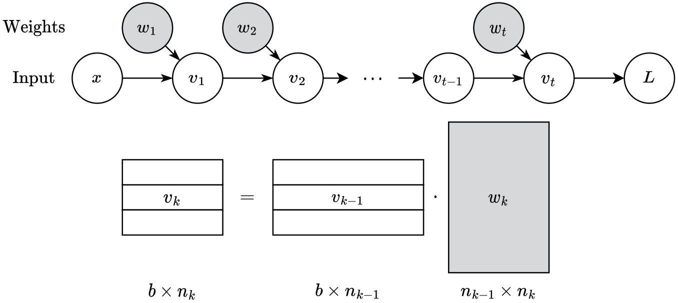


Рисунок 29: Архитектура прямого распространения нейронной сети

Архитектура прямого распространения

ПРЯМОЙ ПРОХОД

- $v_0 = x$ обычно у нас есть batch данных x здесь в качестве входа.
- Для $k = 1, \dots, t-1, t$:
  - $v_k = \sigma(v_{k-1} w_k)$. Обратите внимание, что практически говоря, данные имеют размерность $x \in \mathbb{R}^{b \times d}$, где b - размер батча (для одного данного $b = 1$). В то время как матрица весов w_k k слоя имеет размер $n_{k-1} \times n_k$, где n_k - размер внутреннего представления данных.
- $L = L(v_t)$ - вычислить функцию потерь.

ОБРАТНЫЙ ПРОХОД

- $v_{t+1} = L, \dfrac{\partial L}{\partial L} = 1$
- Для $k = t, t-1, \dots, 1$:

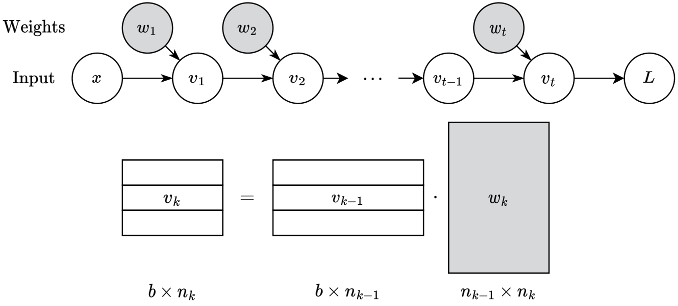


Рисунок 29: Архитектура прямого распространения нейронной сети

Архитектура прямого распространения

ПРЯМОЙ ПРОХОД

- $v_0 = x$ обычно у нас есть batch данных x здесь в качестве входа.
- Для $k = 1, \dots, t-1, t$:
    - $v_k = \sigma(v_{k-1} w_k)$. Обратите внимание, что практически говоря, данные имеют размерность $x \in \mathbb{R}^{b \times d}$, где b - размер батча (для одного данного $b = 1$). В то время как матрица весов w_k k слоя имеет размер $n_{k-1} \times n_k$, где n_k - размер внутреннего представления данных.
- $L = L(v_t)$ - вычислить функцию потерь.

ОБРАТНЫЙ ПРОХОД

- $v_{t+1} = L, \dfrac{\partial L}{\partial L} = 1$
- Для $k = t, t-1, \dots, 1$:
    - $\underset{b \times n_k}{\dfrac{\partial L}{\partial v_k}} = \underset{b \times n_{k+1}}{\dfrac{\partial L}{\partial v_{k+1}}} \underset{n_{k+1} \times n_k}{\dfrac{\partial v_{k+1}}{\partial v_k}}$

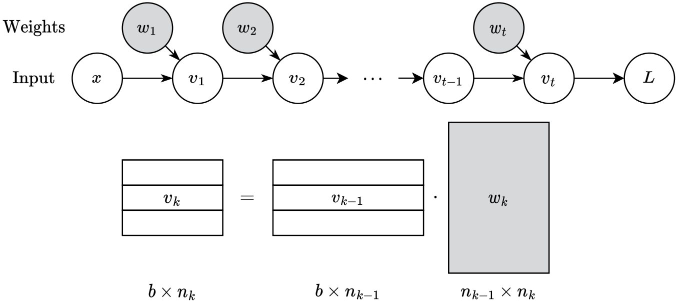


Рисунок 29: Архитектура прямого распространения нейронной сети

Архитектура прямого распространения

ПРЯМОЙ ПРОХОД

- $v_0 = x$ обычно у нас есть batch данных x здесь в качестве входа.
- Для $k = 1, \dots, t-1, t$:
  - $v_k = \sigma(v_{k-1} w_k)$. Обратите внимание, что практически говоря, данные имеют размерность $x \in \mathbb{R}^{b \times d}$, где b - размер батча (для одного данного $b = 1$). В то время как матрица весов w_k k слоя имеет размер $n_{k-1} \times n_k$, где n_k - размер внутреннего представления данных.
- $L = L(v_t)$ - вычислить функцию потерь.

ОБРАТНЫЙ ПРОХОД

- $v_{t+1} = L, \dfrac{\partial L}{\partial L} = 1$
- Для $k = t, t-1, \dots, 1$:
  - $\underset{b \times n_k}{\dfrac{\partial L}{\partial v_k}} = \underset{b \times n_{k+1}}{\dfrac{\partial L}{\partial v_{k+1}}} \underset{n_{k+1} \times n_k}{\dfrac{\partial v_{k+1}}{\partial v_k}}$
  - $\underset{b \times n_{k-1} \cdot n_k}{\dfrac{\partial L}{\partial w_k}} = \underset{b \times n_{k+1}}{\dfrac{\partial L}{\partial v_{k+1}}} \cdot \underset{n_{k+1} \times n_{k-1} \cdot n_k}{\dfrac{\partial v_{k+1}}{\partial w_k}}$

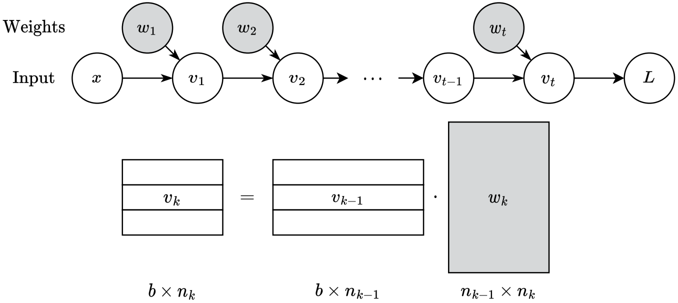


Рисунок 29: Архитектура прямого распространения нейронной сети

Произведение Гессиана на вектор без вычисления самого Гессиана

Когда вам нужна некоторая информация о кривизне функции, обычно вам нужно работать с гессианом. Однако, когда размерность задачи велика, это является вызовом. Для скалярной функции $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, гессиан в точке $x \in \mathbb{R}^n$ записывается как $\nabla^2 f(x)$. Тогда произведение вектора на гессиан можно оценить

Произведение Гессиана на вектор без вычисления самого Гессиана

Когда вам нужна некоторая информация о кривизне функции, обычно вам нужно работать с гессианом. Однако, когда размерность задачи велика, это является вызовом. Для скалярной функции $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, гессиан в точке $x \in \mathbb{R}^n$ записывается как $\nabla^2 f(x)$. Тогда произведение вектора на гессиан можно оценить

$$
v \mapsto \nabla^2 f(x) \cdot v
$$

Произведение Гессиана на вектор без вычисления самого Гессиана

Когда вам нужна некоторая информация о кривизне функции, обычно вам нужно работать с гессианом. Однако, когда размерность задачи велика, это является вызовом. Для скалярной функции $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, гессиан в точке $x \in \mathbb{R}^n$ записывается как $\nabla^2 f(x)$. Тогда произведение вектора на гессиан можно оценить

$$
v \mapsto \nabla^2 f(x) \cdot v
$$

для любого вектора $v \in \mathbb{R}^n$. Мы должны использовать тождество

$$
\nabla^2 f(x) v = \nabla [x \mapsto \nabla f(x) \cdot v] = \nabla g(x),
$$

где $g(x) = \nabla f(x)^T \cdot v$ - новая векторная функция, которая умножает градиент f в x на вектор v.

Произведение Гессиана на вектор без вычисления самого Гессиана

Когда вам нужна некоторая информация о кривизне функции, обычно вам нужно работать с гессианом. Однако, когда размерность задачи велика, это является вызовом. Для скалярной функции $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, гессиан в точке $x \in \mathbb{R}^n$ записывается как $\nabla^2 f(x)$. Тогда произведение вектора на гессиан можно оценить

$$
v \mapsto \nabla^2 f(x) \cdot v
$$

для любого вектора $v \in \mathbb{R}^n$. Мы должны использовать тождество

$$
\nabla^2 f(x) v = \nabla [x \mapsto \nabla f(x) \cdot v] = \nabla g(x),
$$

где $g(x) = \nabla f(x)^T \cdot v$ - новая векторная функция, которая умножает градиент f в x на вектор v.

```python
import jax.numpy as jnp

def hvp(f, x, v):
    return grad(lambda x: jnp.vdot(grad(f)(x), v))(x)
```

Динамика обучения нейронной сети через спектр Гессиана и hvp [4]

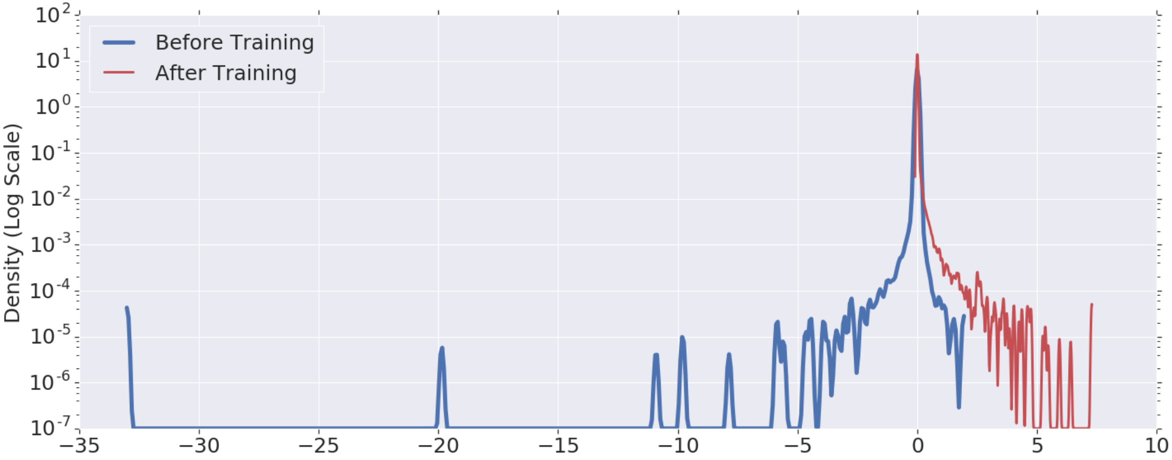


Рисунок 30: Большие отрицательные собственные значения исчезли после обучения для ResNet-32

[4] Некоторые исследования в оптимизации нейронных сетей через спектр собственных значений Гессиана

Идея Хадчинсона для оценки следа матрицы [5]

Этот пример иллюстрирует оценку следа Гессиана нейронной сети с помощью метода Hutchinson, который является алгоритмом для получения такой оценки из произведений матрицы на вектор:

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

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

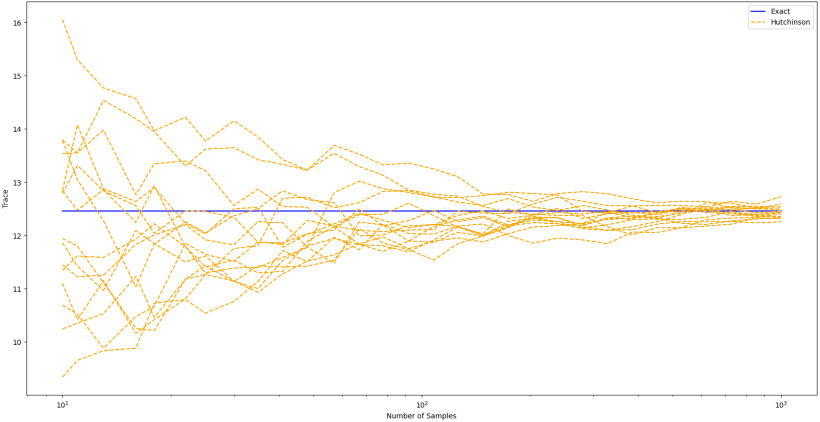


Рисунок 31: Источник

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

Контрольные точки активаций

Анимация вышеуказанных подходов

Пример использования контрольных точек градиента

[6] ZeRO: Memory Optimizations Toward Training Trillion Parameter Models

Контрольные точки активаций

Анимация вышеуказанных подходов

Пример использования контрольных точек градиента

Реальный пример из **GPT-2**[6]:

- Активации в простом режиме могут занимать гораздо больше памяти: для последовательности длиной 1K и размера батча 32, 60 GB нужно для хранения всех промежуточных активаций.

[6] ZeRO: Memory Optimizations Toward Training Trillion Parameter Models

Контрольные точки активаций

Анимация вышеуказанных подходов

Пример использования контрольных точек градиента

Реальный пример из **GPT-2**[6]:

- Активации в простом режиме могут занимать гораздо больше памяти: для последовательности длиной 1K и размера батча 32, 60 GB нужно для хранения всех промежуточных активаций.
- Контрольные точки активаций могут снизить потребление до 8 GB, перезапустив их (33% дополнительных вычислений)

[6] ZeRO: Memory Optimizations Toward Training Trillion Parameter Models

Чем автоматическое дифференцирование (AD) не является:

- AD не является конечными разностями

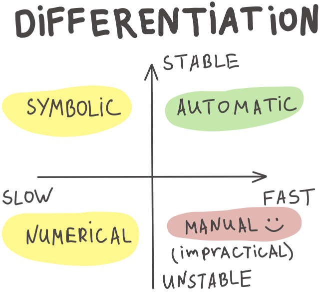


Рисунок 32: Различные подходы для взятия производных

Чем автоматическое дифференцирование (AD) не является:

- AD не является конечными разностями
- AD не является символической производной

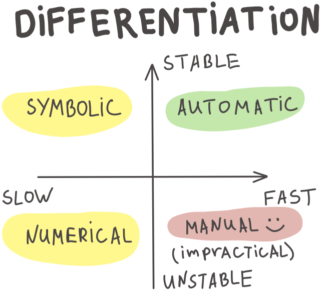


Рисунок 32: Различные подходы для взятия производных

Чем автоматическое дифференцирование (AD) не является:

- AD не является конечными разностями
- AD не является символической производной
- AD не является только цепным правилом

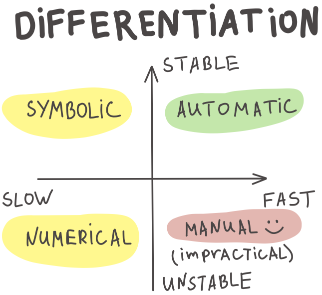


Рисунок 32: Различные подходы для взятия производных

Чем автоматическое дифференцирование (AD) не является:

- AD не является конечными разностями
- AD не является символической производной
- AD не является только цепным правилом
- AD не является только обратным распространением

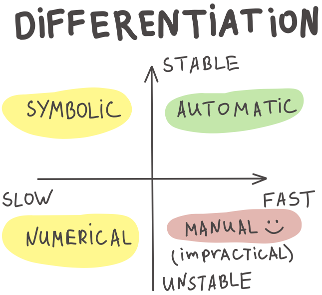


Рисунок 32: Различные подходы для взятия производных

Чем автоматическое дифференцирование (AD) не является:

- AD не является конечными разностями
- AD не является символической производной
- AD не является только цепным правилом
- AD не является только обратным распространением
- AD (обратный режим) является времяэффективным и численно стабильным

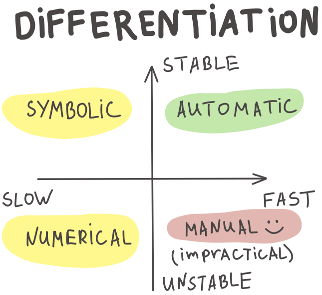


Рисунок 32: Различные подходы для взятия производных

Чем автоматическое дифференцирование (AD) не является:

- AD не является конечными разностями
- AD не является символической производной
- AD не является только цепным правилом
- AD не является только обратным распространением
- AD (обратный режим) является времяэффективным и численно стабильным
- AD (обратный режим) является неэффективным в памяти (вам нужно хранить все промежуточные вычисления из прямого прохода).

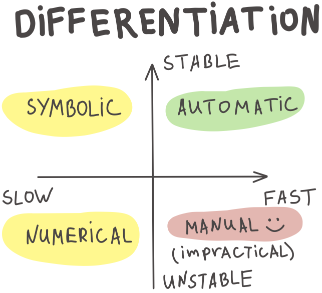


Рисунок 32: Различные подходы для взятия производных

Дополнительные материалы

- Я рекомендую прочитать официальную книгу по Jax Autodiff. Open In Colab ♣

Дополнительные материалы

- Я рекомендую прочитать официальную книгу по Jax Autodiff. Open In Colab ♣
- Распространение градиента через линейные наименьшие квадраты [семинар]

Дополнительные материалы

- Я рекомендую прочитать официальную книгу по Jax Autodiff. Open In Colab ♣
- Распространение градиента через линейные наименьшие квадраты [семинар]
- Распространение градиента через SVD [семинар]

Дополнительные материалы

- Я рекомендую прочитать официальную книгу по Jax Autodiff. Open In Colab ♣
- Распространение градиента через линейные наименьшие квадраты [семинар]
- Распространение градиента через SVD [семинар]
- Контрольные точки активаций [семинар]

Итоги

Итоги

Определения

1. Формула для приближенного вычисления производной функции $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ по k-ой координате с помощью метода конечных разностей.
2. Пусть $f = f(x_1(t), \ldots, x_n(t))$. Формула для вычисления $\frac{\partial f}{\partial t}$ через $\frac{\partial x_i}{\partial t}$ (Forward chain rule).
3. Пусть L - функция, возвращающая скаляр, а v_k - функция, возвращающая вектор $x \in \mathbb{R}^t$. Формула для вычисления $\frac{\partial L}{\partial v_k}$ через $\frac{\partial L}{\partial x_i}$ (Backward chain rule).
4. Идея Хатчинсона для оценки следа матрицы с помощью matvec операций.

Теоремы

1. Автоматическое дифференцирование. Вычислительный граф. Forward/ Backward mode (в этом вопросе нет доказательств, но необходимо подробно описать алгоритмы).