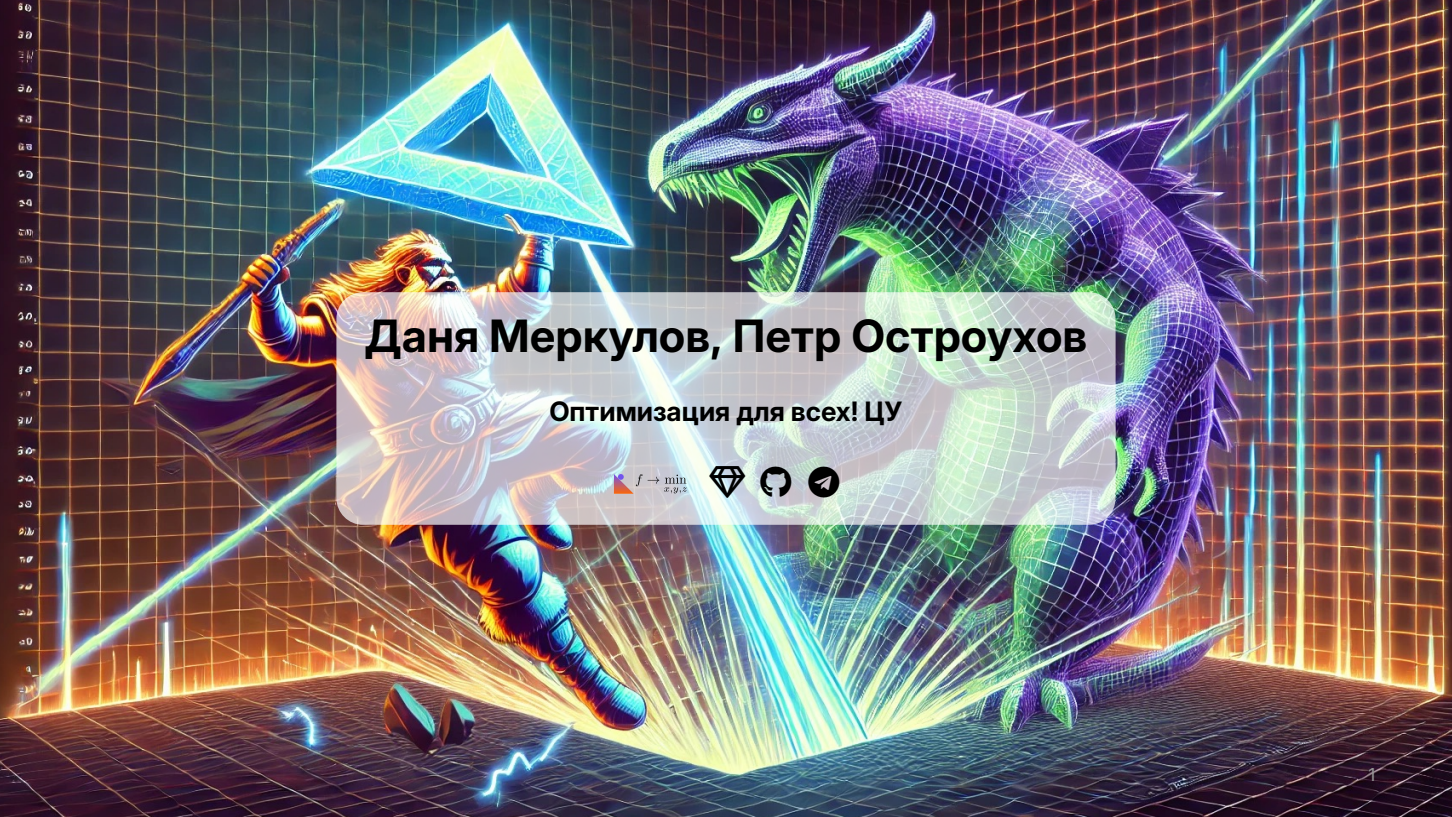
ЦЕНТРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Автоматическое дифференцирование. Вычислительный граф

МЕТОДЫ ВЫПУКЛОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

НЕДЕЛЯ 3

Даня Меркулов


Даня Меркулов, Петр Остроухов
Оптимизация для всех! ЦУ
$f \to \min_{x,y,z}$

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 нам 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 нам нужно найти подходящие параметры w модели (например, обучить нейронную сеть).
- Существуют разные методы решения этой задачи. Однако, размерность задач сегодня может достигать сотен миллиардов или даже триллионов переменных. Такие задачи очень тяжело решать без знания градиентов, то есть методами 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 нам нужно найти подходящие параметры w модели (например, обучить нейронную сеть).
- Существуют разные методы решения этой задачи. Однако, размерность задач сегодня может достигать сотен миллиардов или даже триллионов переменных. Такие задачи очень тяжело решать без знания градиентов, то есть методами нулевого порядка.
- Поэтому было бы полезно уметь вычислять вектор градиента $\nabla_w L = \left(\frac{\partial L}{\partial w_1}, \dots, \frac{\partial L}{\partial w_d} \right)^T$.

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 нам нужно найти подходящие параметры w модели (например, обучить нейронную сеть).
- Существуют разные методы решения этой задачи. Однако, размерность задач сегодня может достигать сотен миллиардов или даже триллионов переменных. Такие задачи очень тяжело решать без знания градиентов, то есть методами нулевого порядка.
- Поэтому было бы полезно уметь вычислять вектор градиента $\nabla_w L = \left(\frac{\partial L}{\partial w_1}, \dots, \frac{\partial L}{\partial w_d}\right)^T$.
- Обычно методы первого порядка работают лучше в больших задачах, в то время как методы второго порядка требуют слишком много памяти.

Пример: задача многомерного шкалирования

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

Пример: задача многомерного шкалирования

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

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

Пример: задача многомерного шкалирования

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

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

Ссылка на визуализацию ♣, где можно увидеть, что безградиентные методы оптимизации решают эту задачу намного медленнее, особенно в пространствах большой размерности.

> **Question**
>
> Связано ли это с PCA?

Пример: многомерное масштабирование

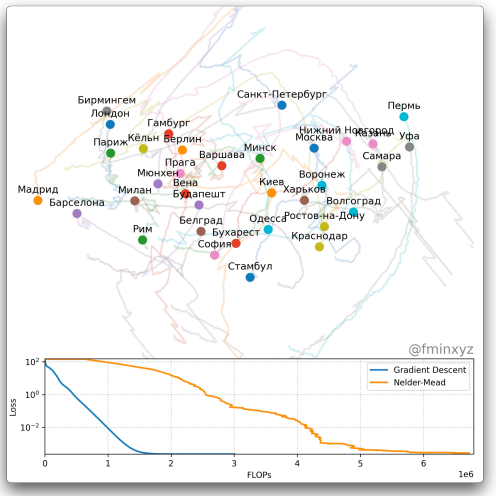


Рисунок 3. Ссылка на анимацию

Градиентный спуск без градиента: 2-точечный метод аппроксимации

Предположим, что мы хотим решить следующую задачу:

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

Градиентный спуск без градиента: 2-точечный метод аппроксимации

Предположим, что мы хотим решить следующую задачу:

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

с помощью алгоритма градиентного спуска (GD):

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

Градиентный спуск без градиента: 2-точечный метод аппроксимации

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?

Градиентный спуск без градиента: 2-точечный метод аппроксимации

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]рекомендуется хорошая презентация о безградиентных методах

Градиентный спуск без градиента: 2-точечный метод аппроксимации

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.
Рассмотрим двухточечную оценку градиента[1] G:

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

где v - случайный вектор из сферически симметричного распределения.

[1] рекомендуется хорошая презентация о безградиентных методах

Градиентный спуск без градиента: 2-точечный метод аппроксимации

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.
Рассмотрим двухточечную оценку градиента[1] G:

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

где v - случайный вектор из сферически симметричного распределения.

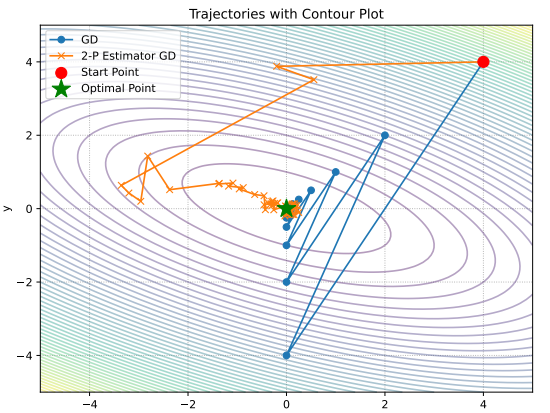


Рисунок 4. "Иллюстрация двухточечной оценки градиентного спуска"

[1] рекомендуется хорошая презентация о безградиентных методах

Градиентный спуск без градиента: многоточечный метод аппроксимации

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

Градиентный спуск без градиента: многоточечный метод аппроксимации

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

Также рассмотрим 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 ♣

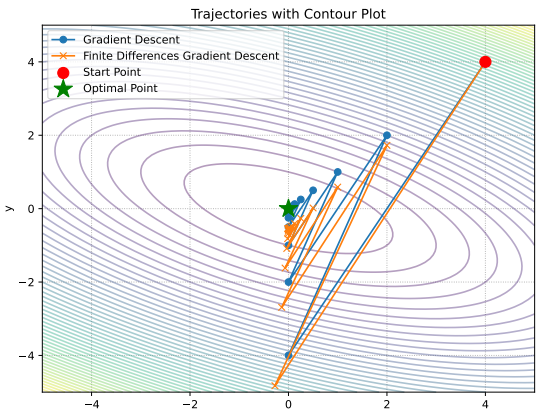


Рисунок 5. “Иллюстрация работы метода оценки градиента с помощью метода конечных разностей”

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]

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

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.

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

Для 2-точечных оценок, мы не можем сделать зависимость лучше, чем от $\sqrt{n}$!

[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:

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

[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:

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

Question

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

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 метод нестабилен, что означает, что нам 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:

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

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 метод нестабилен, что означает, что нам придется выбирать между точностью и стабильностью.

Теорема

Существует алгоритм для **точного** вычисления $\nabla_w L$ за $\mathcal{O}(T)$. [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:

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

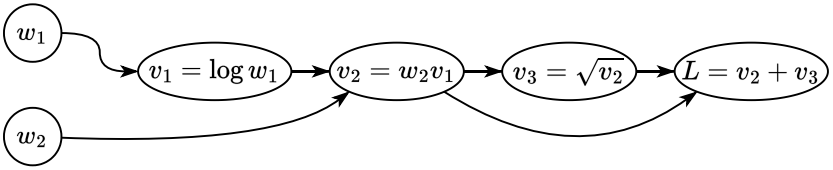


Рисунок 6. Иллюстрация вычислительного графа для функции $L(w_1, w_2)$

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:

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

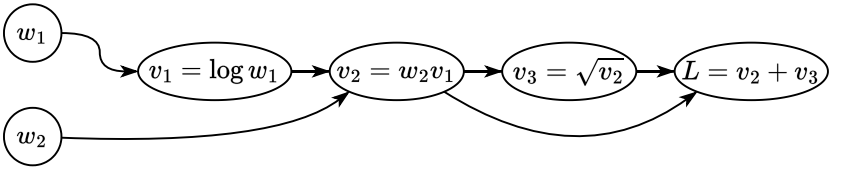


Рисунок 6. Иллюстрация вычислительного графа для функции $L(w_1, w_2)$

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

Прямой режим автоматического дифференцирования

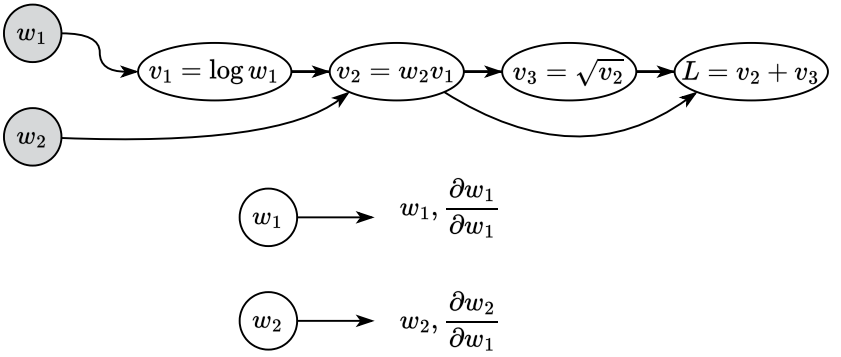


Рисунок 7. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$w_1 = w_1, w_2 = w_2$

Прямой режим автоматического дифференцирования

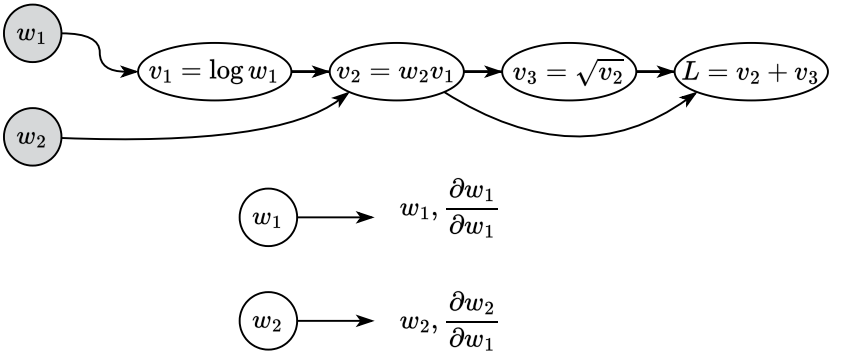


Рисунок 7. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

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

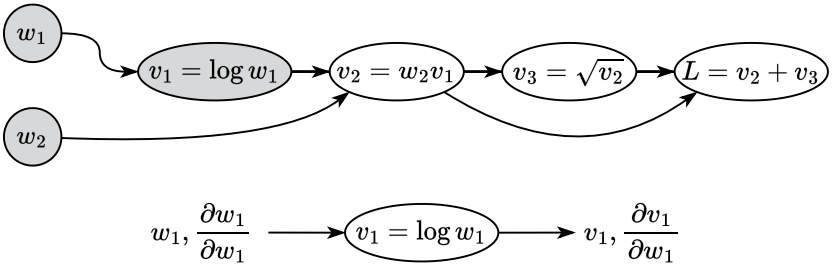


Рисунок 8. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Прямой режим автоматического дифференцирования

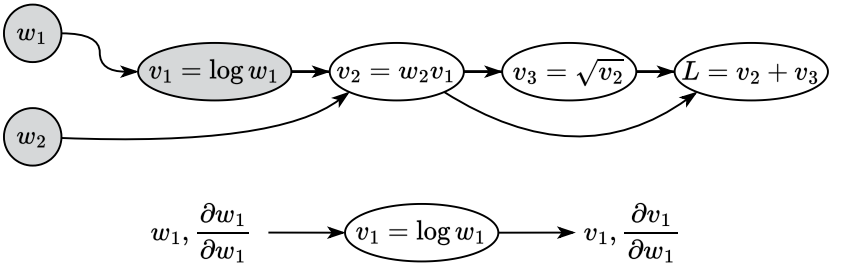


Рисунок 8. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$v_1 = \log w_1$

Прямой режим автоматического дифференцирования

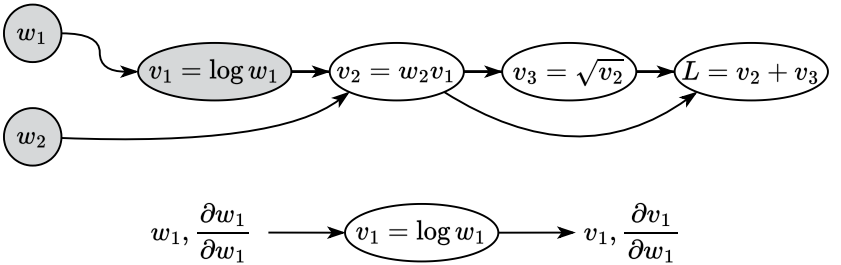


Рисунок 8. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

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

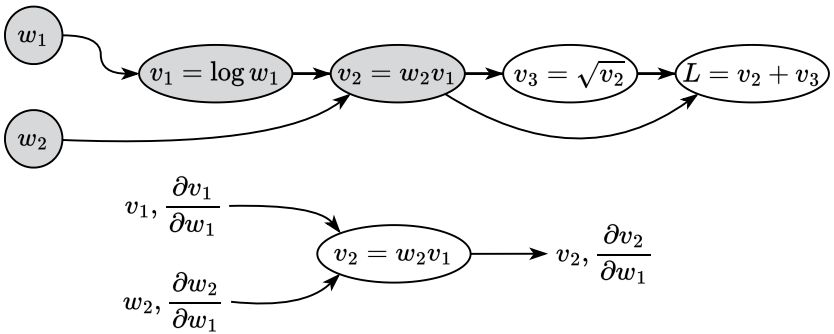


Рисунок 9. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Прямой режим автоматического дифференцирования

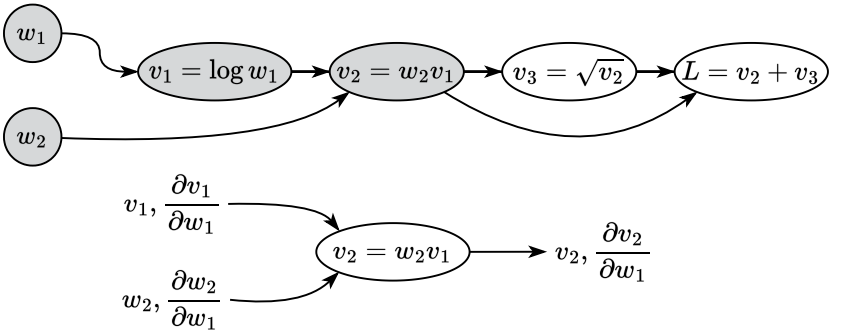


Рисунок 9. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$v_2 = w_2 v_1$

Прямой режим автоматического дифференцирования

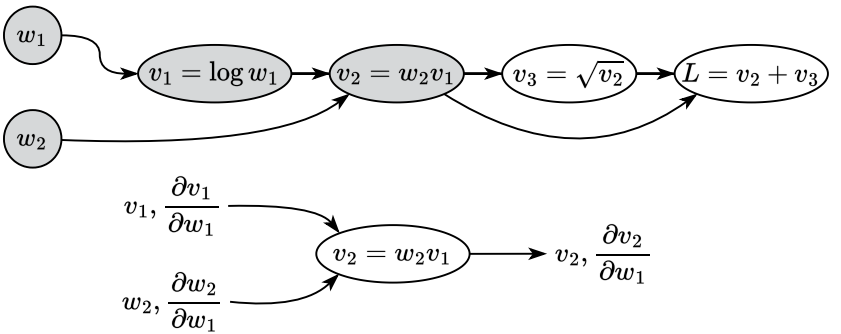


Рисунок 9. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

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

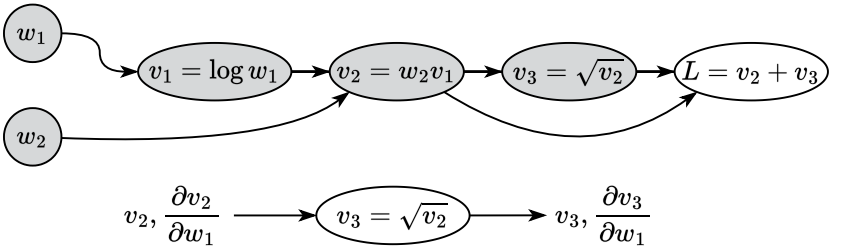


Рисунок 10. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Прямой режим автоматического дифференцирования

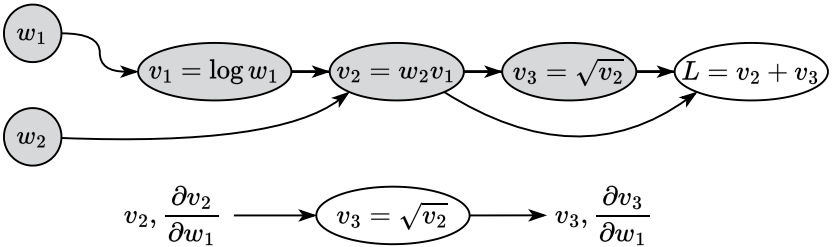


Рисунок 10. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$v_3 = \sqrt{v_2}$

Прямой режим автоматического дифференцирования

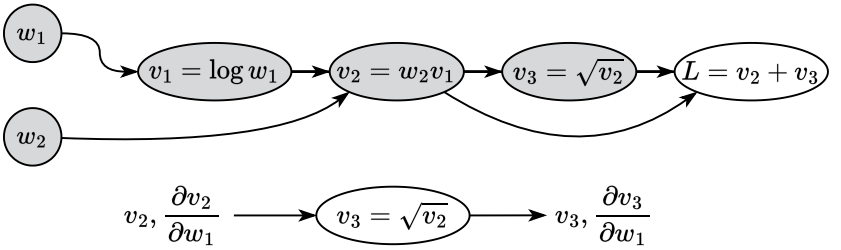


Рисунок 10. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

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

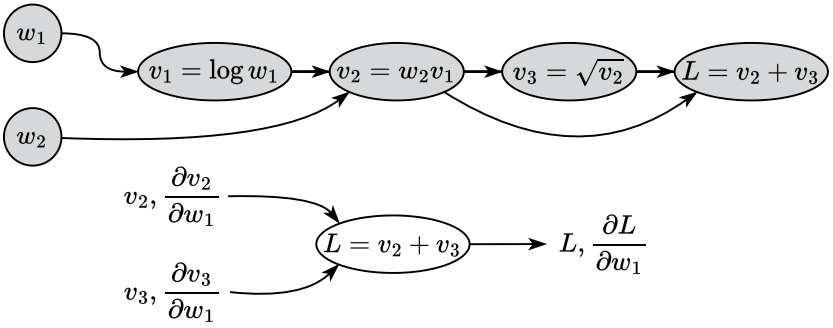


Рисунок 11. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Прямой режим автоматического дифференцирования

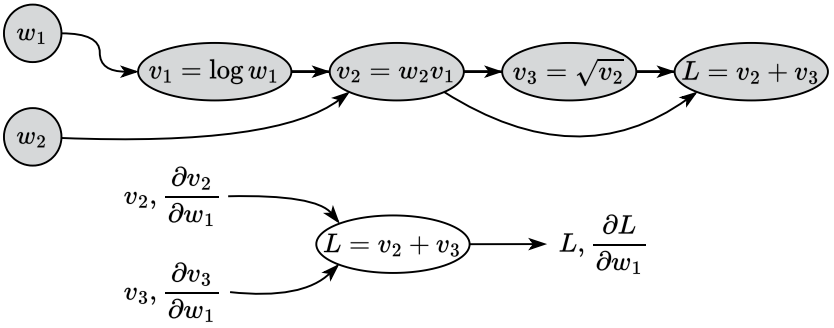


Рисунок 11. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$L = v_2 + v_3$

Прямой режим автоматического дифференцирования

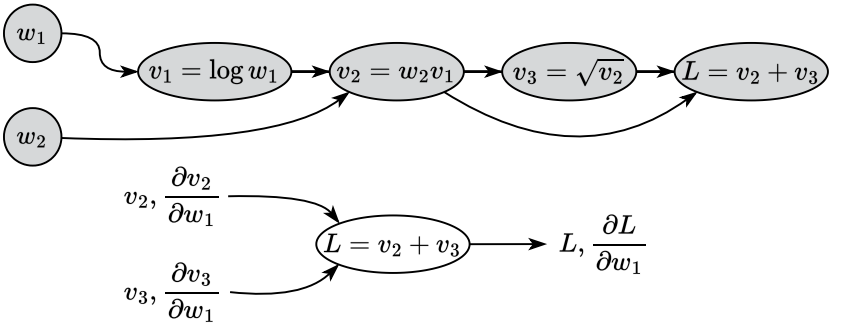


Рисунок 11. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

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 $\frac{\partial L}{\partial w_2}$

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

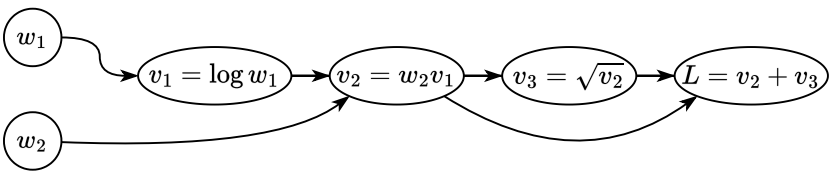


Рисунок 12. Иллюстрация вычислительного графа для функции $L(w_1, w_2)$

Пример прямого режима автоматического дифференцирования

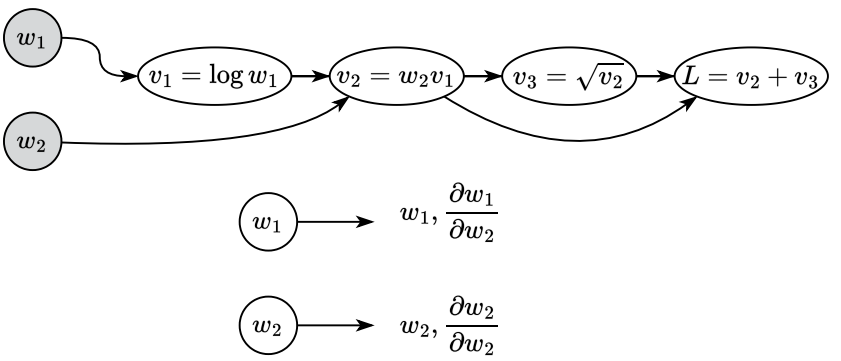


Рисунок 13. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

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

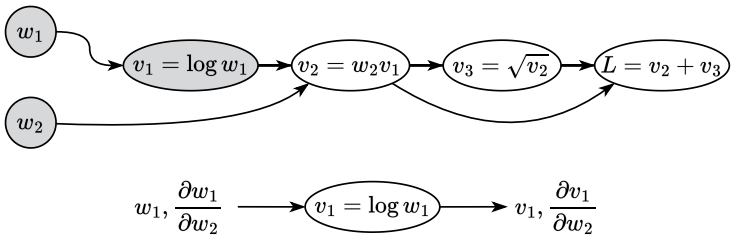


Рисунок 14. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$v_1 = \log w_1$

Производная

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

Пример прямого режима автоматического дифференцирования

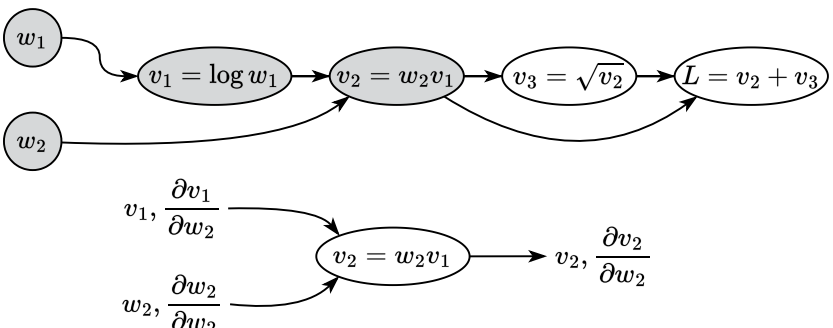


Рисунок 15. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

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

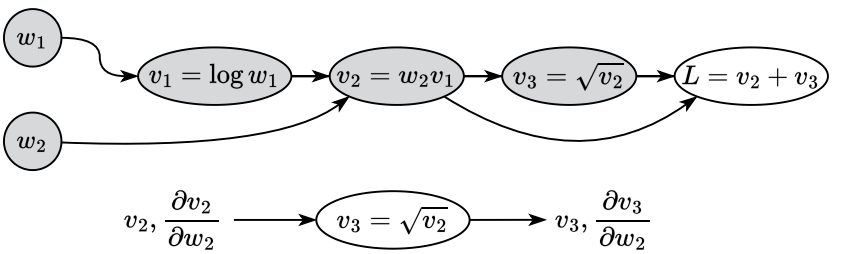


Рисунок 16. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

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

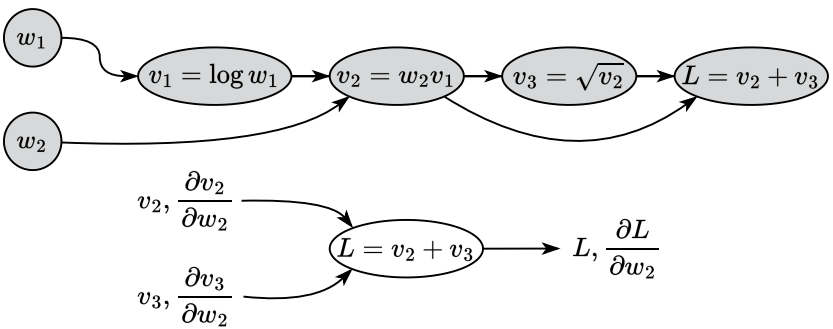


Рисунок 17. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$L = v_2 + v_3$

Производная

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

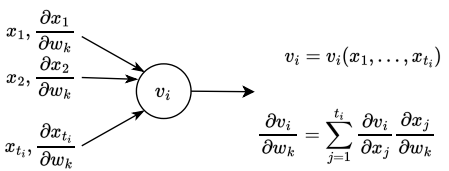
Алгоритм прямого режима автоматического дифференцирования

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. $\frac{\partial v_N}{\partial w_k}$. 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. $\frac{\partial v_N}{\partial w_k}$. Эта идея предполагает распространение градиента по входной переменной от начала к концу, поэтому мы можем ввести обозначение:

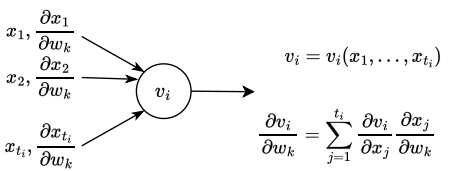
$$\overline{v_i} = \frac{\partial v_i}{\partial w_k}$$



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:

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

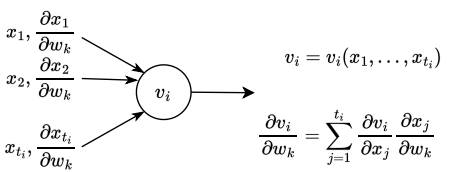


- Для $i = 1, \ldots, N$:

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. $\frac{\partial v_N}{\partial w_k}$. Эта идея предполагает распространение градиента по входной переменной от начала к концу, поэтому мы можем ввести обозначение:

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



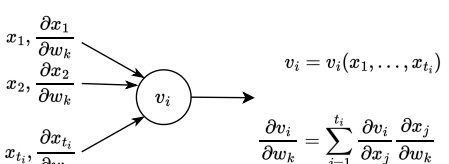
- Для $i = 1, \ldots, N$:
  - Вычислить v_i как функцию его предков $x_1, \ldots, x_{t_i}$:

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

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:

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



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

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

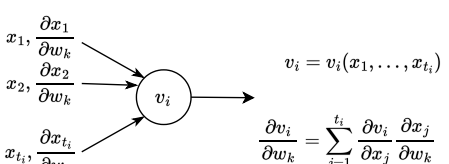
  - Вычислить производную $\overline{v_i}$ используя формулу производной сложной функции:

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

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:

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



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

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

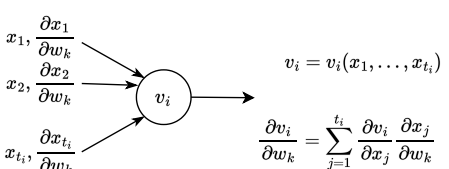
  - Вычислить производную $\overline{v_i}$ используя формулу производной сложной функции:

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

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:

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



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

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

  - Вычислить производную $\overline{v_i}$ используя формулу производной сложной функции:

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

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 у нас нет проблем со стабильностью или неточностями(формулы выше точны).


There is another

Обратный режим автоматического дифференцирования

Мы рассмотрим ту же функцию с вычислительным графом:

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

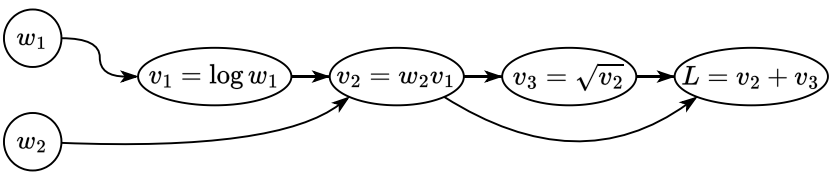


Рисунок 18. Иллюстрация вычислительного графа для функции $L(w_1, w_2)$

Обратный режим автоматического дифференцирования

Мы рассмотрим ту же функцию с вычислительным графом:

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

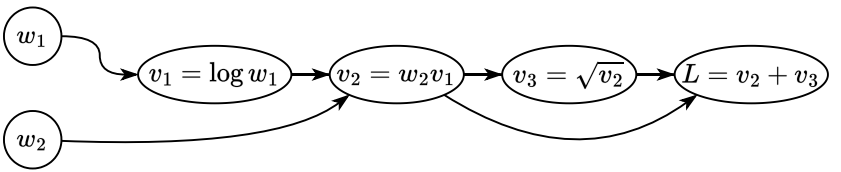


Рисунок 18. Иллюстрация вычислительного графа для функции $L(w_1, w_2)$

Предположим, что у нас есть некоторые значения параметров w_1, w_2 и мы уже выполнили прямой проход (т.е. вычисление значений всех промежуточных узлов вычислительного графа). 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

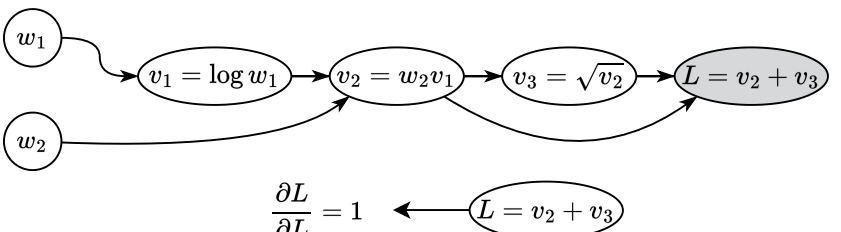


Рисунок 19. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

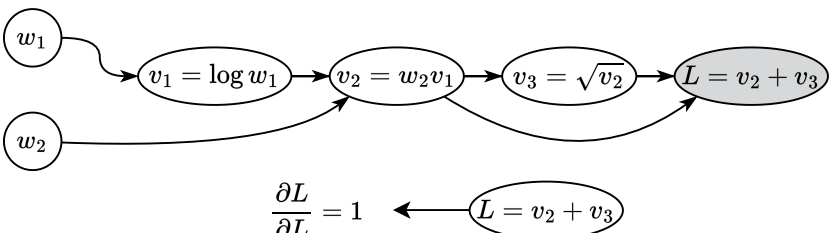


Рисунок 19. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

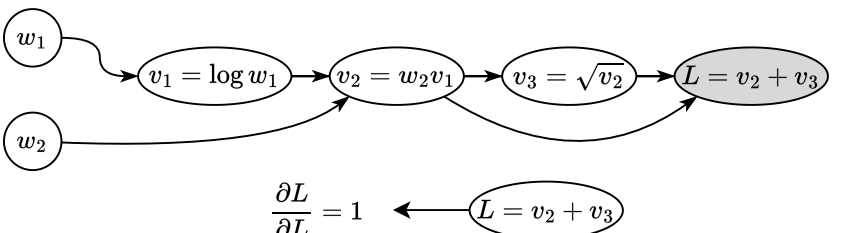


Рисунок 19. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

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

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

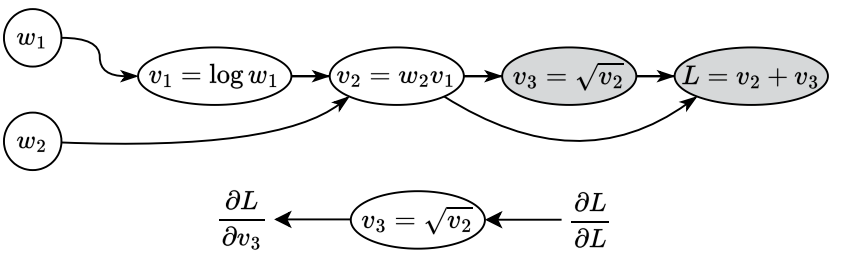


Рисунок 20. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

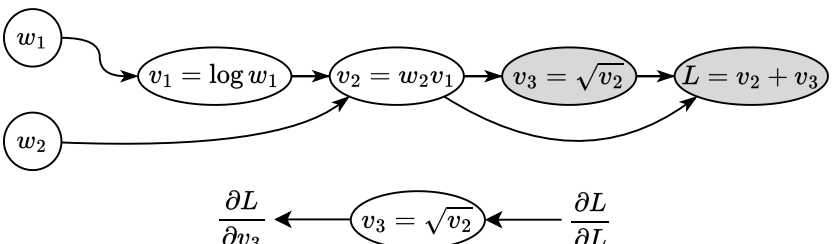


Рисунок 20. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

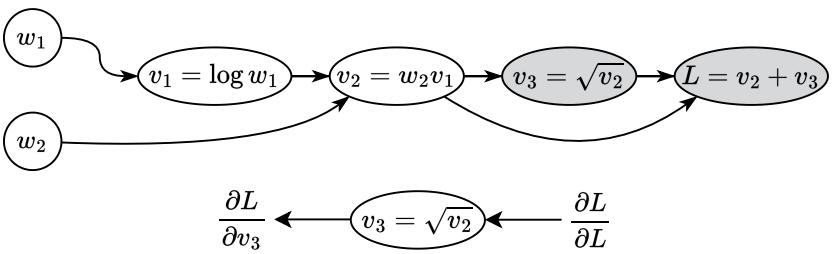


Рисунок 20. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

$$\frac{\partial L}{\partial v_3} = \frac{\partial L}{\partial L}\frac{\partial L}{\partial v_3} \quad = \frac{\partial L}{\partial L}1$$

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

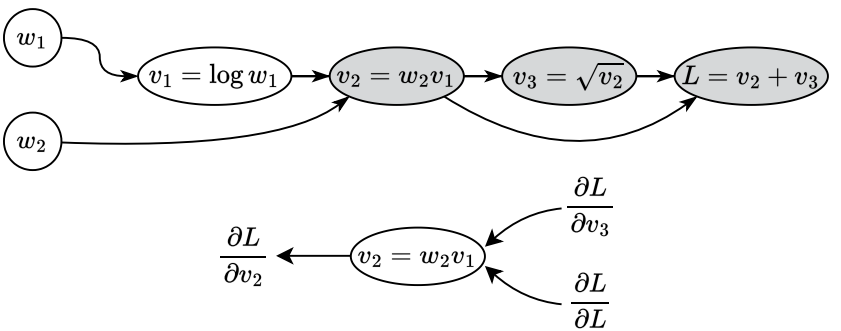


Рисунок 21. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

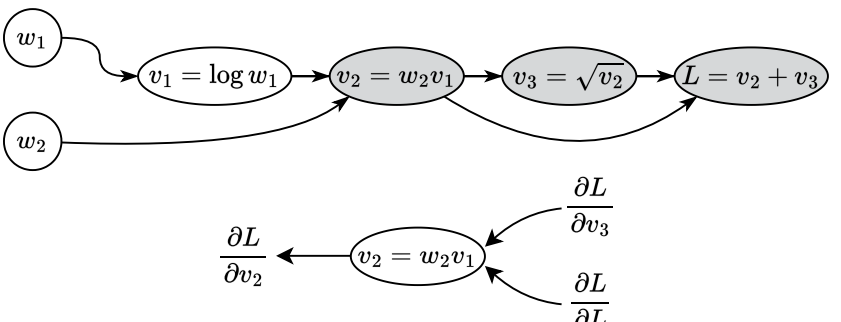


Рисунок 21. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

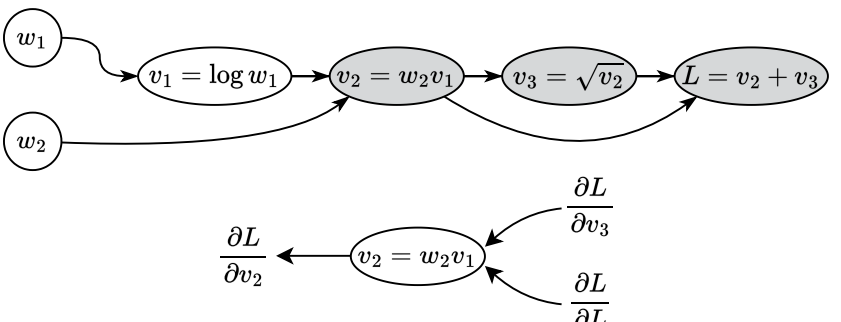


Рисунок 21. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

$$\frac{\partial L}{\partial v_2} = \frac{\partial L}{\partial v_3}\frac{\partial v_3}{\partial v_2} + \frac{\partial L}{\partial L}\frac{\partial L}{\partial v_2} \quad = \frac{\partial L}{\partial v_3}\frac{1}{2\sqrt{v_2}} + \frac{\partial L}{\partial L}1$$

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

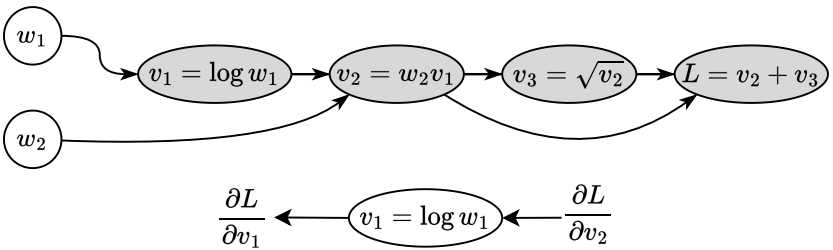


Рисунок 22. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

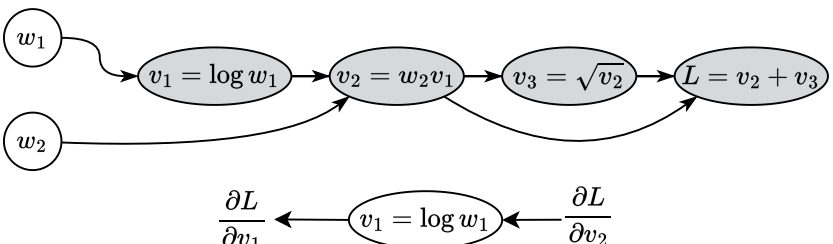


Рисунок 22. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

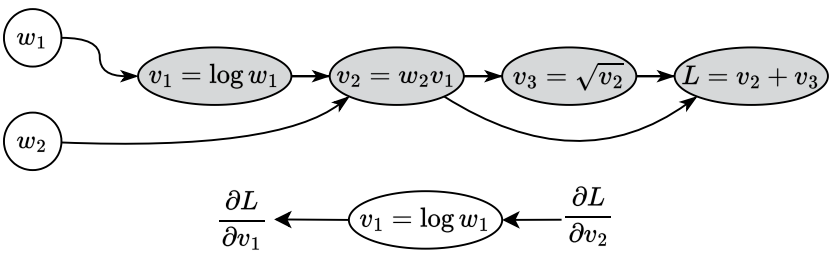


Рисунок 22. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

$$\frac{\partial L}{\partial v_1} = \frac{\partial L}{\partial v_2}\frac{\partial v_2}{\partial v_1} \quad = \frac{\partial L}{\partial v_2} w_2$$

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

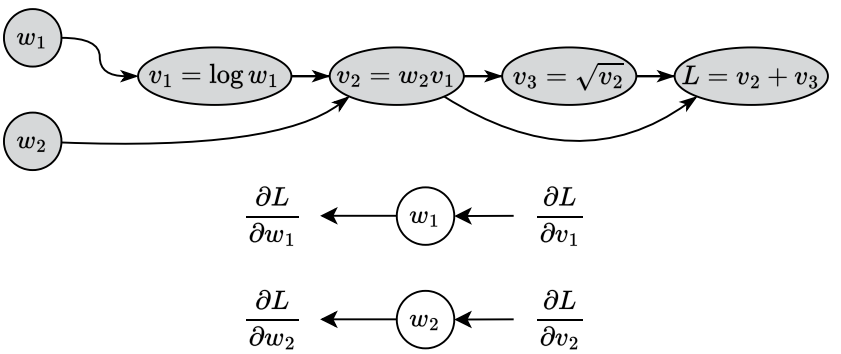


Рисунок 23. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

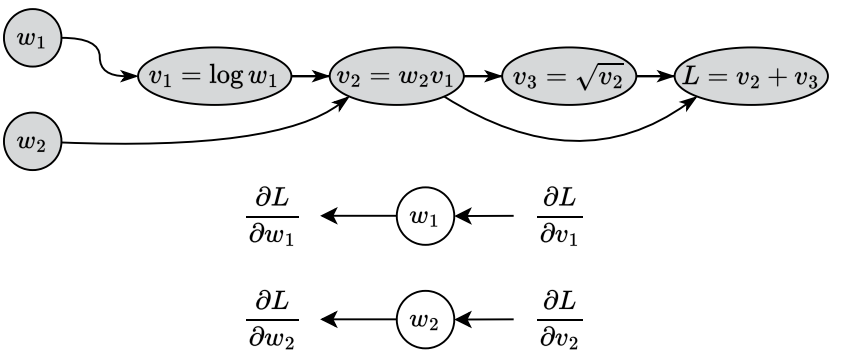


Рисунок 23. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

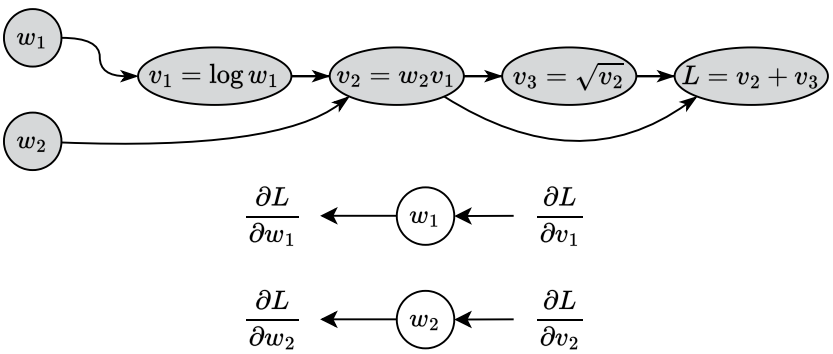


Рисунок 23. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

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

Обратный режим автоматического дифференцирования

ЦУ

Question

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

Обратный режим автоматического дифференцирования

Question

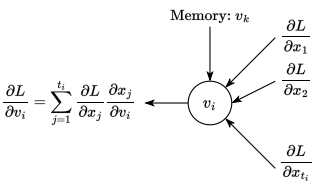
Обратите внимание, что для того же количества вычислений, что и в прямом режиме, мы получаем полный вектор градиента $\nabla_w L$. Какова стоимость ускорения?

Ответ Обратите внимание, что для использования обратного режима AD вам нужно хранить все промежуточные вычисления из прямого прохода. Эта проблема может быть частично решена с помощью чекпоинтинга, при котором мы сохраняем только часть промежуточных значений, а остальные пересчитываем заново по мере необходимости. Это позволяет значительно уменьшить объём требуемой памяти при обучении больших моделей 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. $\nabla_w v_N = \left(\frac{\partial v_N}{\partial w_1}, \dots, \frac{\partial v_N}{\partial w_d}\right)^T$. Эта идея предполагает распространение градиента функции по промежуточным переменным от конца к началу, поэтому мы можем ввести обозначение:

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

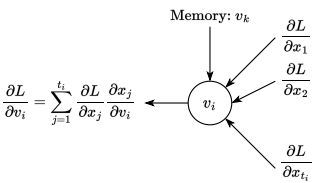


- **ПРЯМОЙ ПРОХОД**
  Для $i = 1, \dots, N$:

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. $\nabla_w v_N = \left(\frac{\partial v_N}{\partial w_1}, \dots, \frac{\partial v_N}{\partial w_d}\right)^T$. Эта идея предполагает распространение градиента функции по промежуточным переменным от конца к началу, поэтому мы можем ввести обозначение:

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



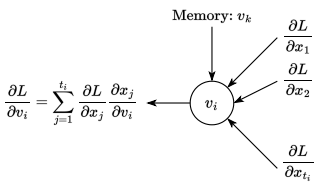
- **ПРЯМОЙ ПРОХОД**

  Для $i = 1, \dots, N$:
  - Вычислить и сохранить значения v_i как функцию его предков

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:

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

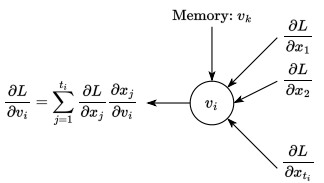


- **ПРЯМОЙ ПРОХОД**
  Для $i = 1, \dots, N$:
  - Вычислить и сохранить значения v_i как функцию его предков
- **ОБРАТНЫЙ ПРОХОД**
  Для $i = N, \dots, 1$:

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:

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



- **ПРЯМОЙ ПРОХОД**

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

  Для $i = N, \dots, 1$:
  - Вычислить производную $\overline{v_i}$ используя формулу производной сложной функции и информацию от всех потомков (выходов):

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

Choose your fighter

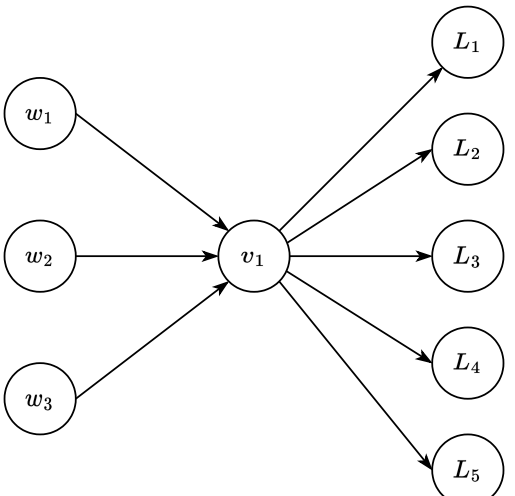


Рисунок 24. Какой режим вы бы выбрали для вычисления градиентов?

Question

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

Choose your fighter

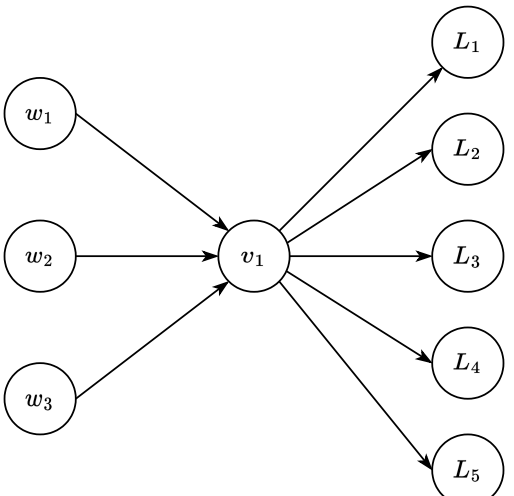


Рисунок 24. Какой режим вы бы выбрали для вычисления градиентов?

Question

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

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

Choose your fighter

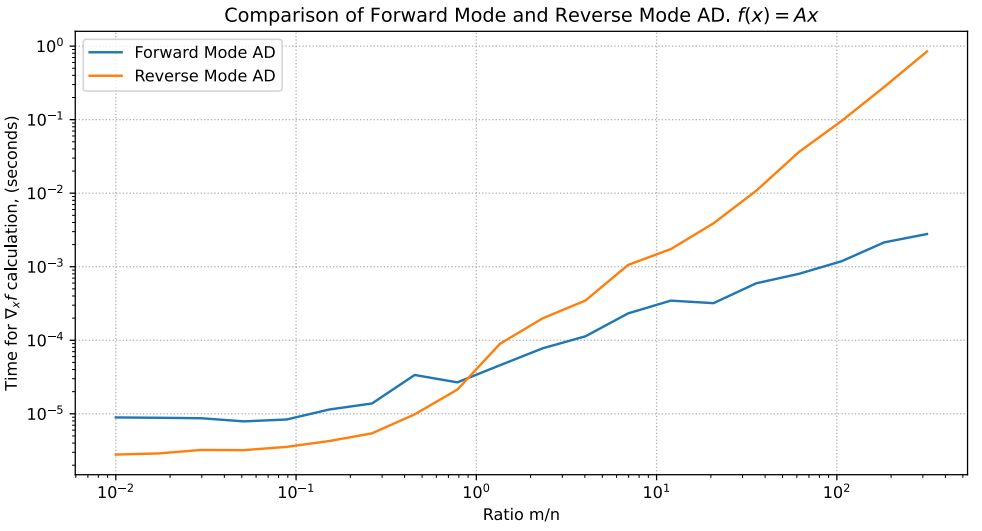


Рисунок 25. ♣ График иллюстрирует идею выбора между режимами автоматического дифференцирования. Размерность входа $n = 100$ фиксирована, измерено время вычисления якобиана в зависимости от соотношения размерностей выхода и входа для разных размерностей выхода m.

Choose your fighter

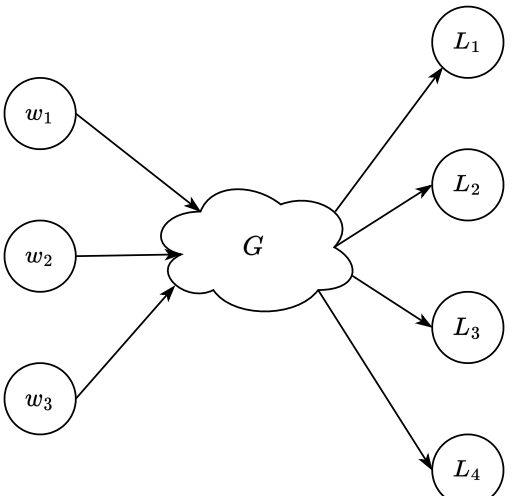


Рисунок 26. Какой режим вы бы выбрали для вычисления градиентов?

Question

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

Choose your fighter

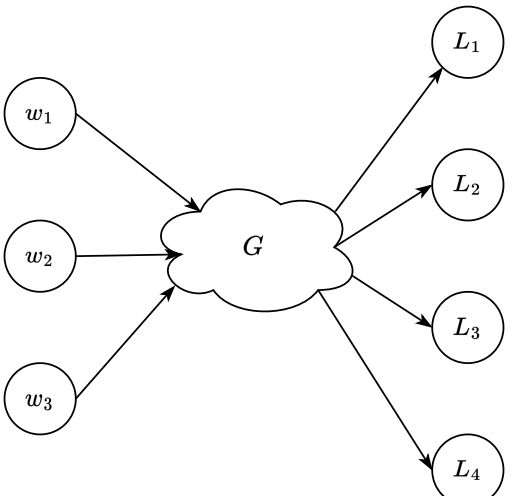


Рисунок 26. Какой режим вы бы выбрали для вычисления градиентов?

Question

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

Ответ В общем случае невозможно ответить без некоторого знания о конкретной структуре графа G. Следует отметить, что существуют продвинутые подходы, смешивающие прямой и обратный режим AD в зависимости от конкретной структуры графа G.

Пример: алгоритм обратного автоматического дифференцирования для feed-forward архитектуры

ПРЯМОЙ ПРОХОД

- $v_0 = x$ на вход обычно подаётся батч данных x

ОБРАТНЫЙ ПРОХОД

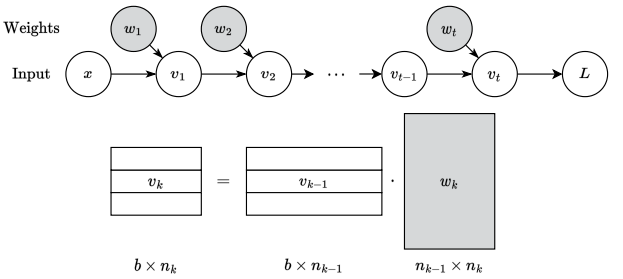


Рисунок 27. Архитектура прямого распространения нейронной сети

Пример: алгоритм обратного автоматического дифференцирования для feed-forward архитектуры

ПРЯМОЙ ПРОХОД

- $v_0 = x$ на вход обычно подаётся батч данных x
- Для $k = 1, \dots, t-1, t$:

ОБРАТНЫЙ ПРОХОД

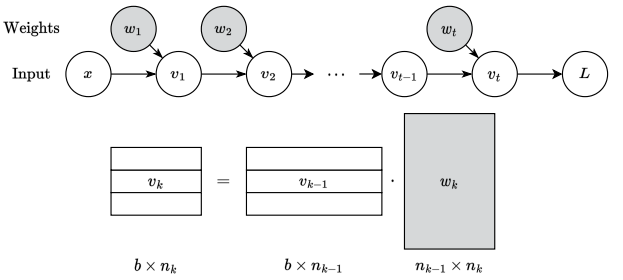


Рисунок 27. Архитектура прямого распространения нейронной сети

Пример: алгоритм обратного автоматического дифференцирования для feed-forward архитектуры

ПРЯМОЙ ПРОХОД

- $v_0 = x$ на вход обычно подаётся батч данных x
- Для $k = 1, \dots, t-1, t$:
  - $v_k = \sigma(v_{k-1} w_k)$. Обратите внимание, что на практике, данные имеют размерность $x \in \mathbb{R}^{b \times d}$, где b - размер батча (для одного объекта из выборки $b = 1$). 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.

ОБРАТНЫЙ ПРОХОД

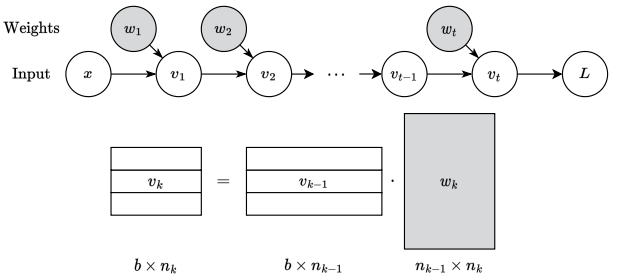


Рисунок 27. Архитектура прямого распространения нейронной сети

Пример: алгоритм обратного автоматического дифференцирования для feed-forward архитектуры

ПРЯМОЙ ПРОХОД

- $v_0 = x$ на вход обычно подаётся батч данных x
- Для $k = 1, \dots, t-1, t$:
  - $v_k = \sigma(v_{k-1} w_k)$. Обратите внимание, что на практике, данные имеют размерность $x \in \mathbb{R}^{b \times d}$, где b - размер батча (для одного объекта из выборки $b = 1$). 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

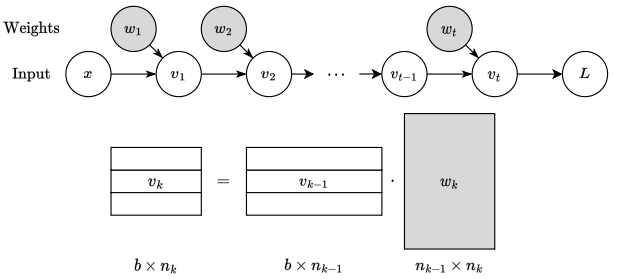


Рисунок 27. Архитектура прямого распространения нейронной сети

Пример: алгоритм обратного автоматического дифференцирования для feed-forward архитектуры

ПРЯМОЙ ПРОХОД

- $v_0 = x$ на вход обычно подаётся батч данных x
- Для $k = 1, \dots, t-1, t$:
  - $v_k = \sigma(v_{k-1} w_k)$. Обратите внимание, что на практике, данные имеют размерность $x \in \mathbb{R}^{b \times d}$, где b - размер батча (для одного объекта из выборки $b = 1$). 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

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

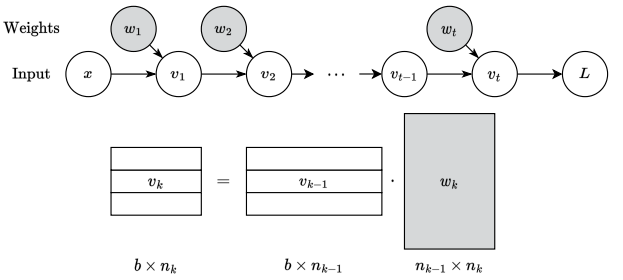


Рисунок 27. Архитектура прямого распространения нейронной сети

Пример: алгоритм обратного автоматического дифференцирования для feed-forward архитектуры

ПРЯМОЙ ПРОХОД

- $v_0 = x$ на вход обычно подаётся батч данных x
- Для $k = 1, \dots, t-1, t$:
  - $v_k = \sigma(v_{k-1} w_k)$. Обратите внимание, что на практике, данные имеют размерность $x \in \mathbb{R}^{b \times d}$, где b - размер батча (для одного объекта из выборки $b = 1$). 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 $k = t, t-1, \dots, 1$:

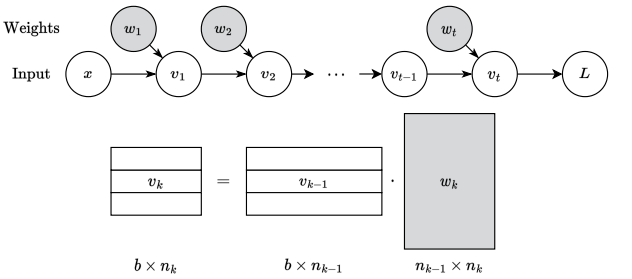


Рисунок 27. Архитектура прямого распространения нейронной сети

Пример: алгоритм обратного автоматического дифференцирования для feed-forward архитектуры

ПРЯМОЙ ПРОХОД

- $v_0 = x$ на вход обычно подаётся батч данных x
- Для $k = 1, \dots, t-1, t$:
  - $v_k = \sigma(v_{k-1} w_k)$. Обратите внимание, что на практике, данные имеют размерность $x \in \mathbb{R}^{b \times d}$, где b - размер батча (для одного объекта из выборки $b = 1$). 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 $k = t, t-1, \dots, 1$:
  - $\underset{b \times n_k}{\dfrac{\partial L}{\partial v_k}} = \underset{b \times n_{k+1}}{\dfrac{\partial L}{\partial v_{k+1}}} \underset{n_{k+1} \times n_k}{\dfrac{\partial v_{k+1}}{\partial v_k}}$

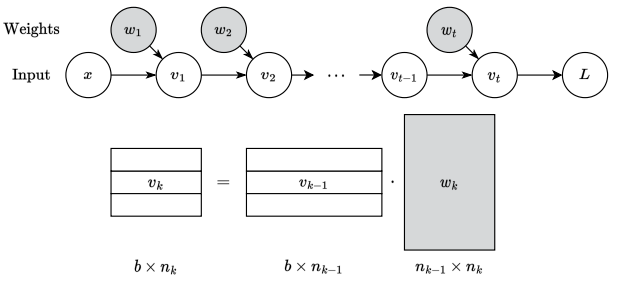


Рисунок 27. Архитектура прямого распространения нейронной сети

Пример: алгоритм обратного автоматического дифференцирования для feed-forward архитектуры

ПРЯМОЙ ПРОХОД

- $v_0 = x$ на вход обычно подаётся батч данных x
- Для $k = 1, \dots, t-1, t$:
  - $v_k = \sigma(v_{k-1} w_k)$. Обратите внимание, что на практике, данные имеют размерность $x \in \mathbb{R}^{b \times d}$, где b - размер батча (для одного объекта из выборки $b = 1$). 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 $k = t, t-1, \dots, 1$:
  - $\underset{b \times n_k}{\dfrac{\partial L}{\partial v_k}} = \underset{b \times n_{k+1}}{\dfrac{\partial L}{\partial v_{k+1}}} \underset{n_{k+1} \times n_k}{\dfrac{\partial v_{k+1}}{\partial v_k}}$
  - $\underset{b \times n_{k-1} \cdot n_k}{\dfrac{\partial L}{\partial w_k}} = \underset{b \times n_{k+1}}{\dfrac{\partial L}{\partial v_{k+1}}} \cdot \underset{n_{k+1} \times n_{k-1} \cdot n_k}{\dfrac{\partial v_{k+1}}{\partial w_k}}$

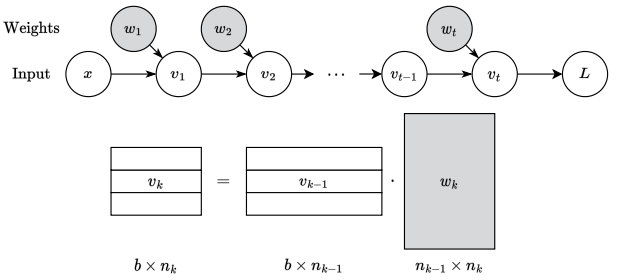


Рисунок 27. Архитектура прямого распространения нейронной сети

Произведение Гессиана на вектор без вычисления самого Гессиана

Когда вам нужна некоторая информация о кривизне функции, обычно вам нужно работать с гессианом. Однако, это трудно делать, когда размерность задачи велика. 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 записать как

Произведение Гессиана на вектор без вычисления самого Гессиана

Когда вам нужна некоторая информация о кривизне функции, обычно вам нужно работать с гессианом. Однако, это трудно делать, когда размерность задачи велика. 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 записать как

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

Произведение Гессиана на вектор без вычисления самого Гессиана

Когда вам нужна некоторая информация о кривизне функции, обычно вам нужно работать с гессианом. Однако, это трудно делать, когда размерность задачи велика. 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 записать как

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

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

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

где $g(x) = \nabla f(x)^T \cdot v$ - новая функция, которая скалярно 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, это трудно делать, когда размерность задачи велика. 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 записать как

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

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

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

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

```
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]

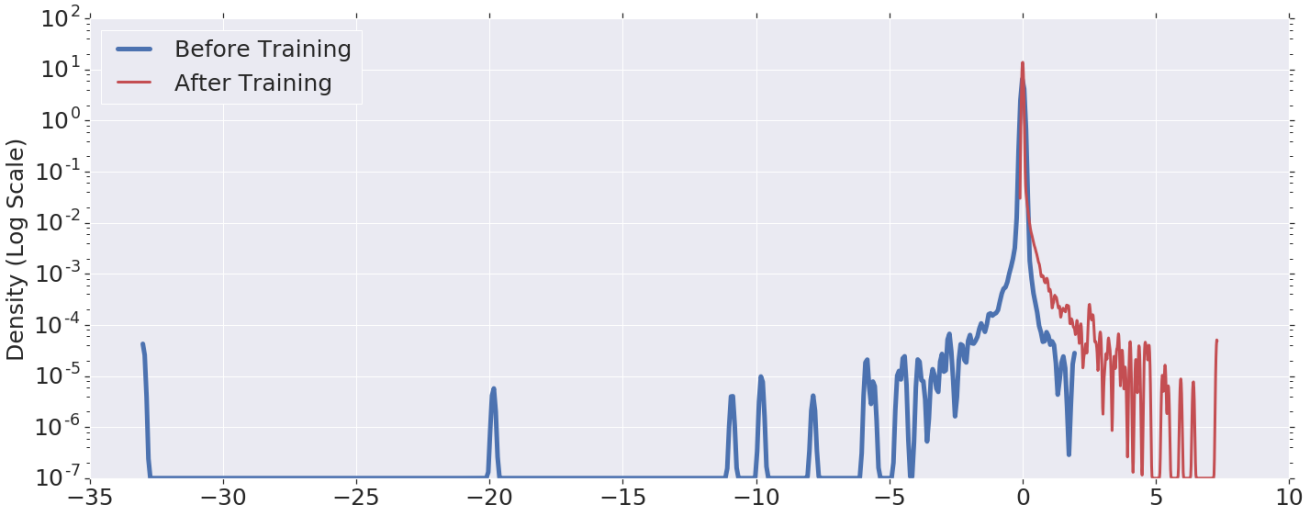


Рисунок 28. Большие по модулю отрицательные собственные значения гессиана исчезли после обучения ResNet-32

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

Идея Хатчинсона для оценки следа матрицы [5]

Метод Хатчинсона позволяет оценить след гессиана с помощью операций вычисления умножения гессиана на произвольный 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,

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

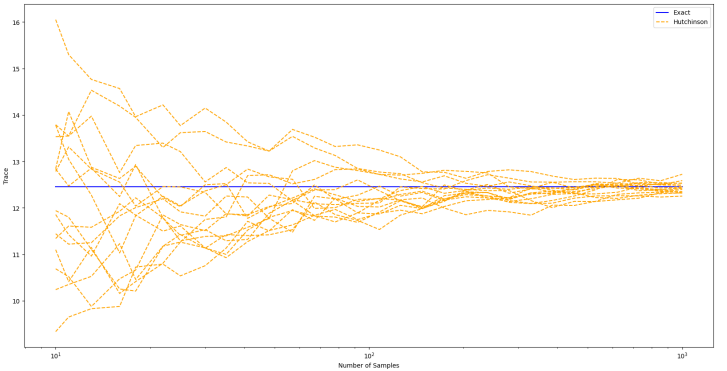


Рисунок 29. Источник

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

Чекпоинтинг

Анимация вышеуказанных подходов

Пример использования контрольных точек градиента

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

Чекпоинтинг

Анимация вышеуказанных подходов

Пример использования контрольных точек градиента

В качестве примера рассмотрим обучение **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

Чекпоинтинг

Анимация вышеуказанных подходов

Пример использования контрольных точек градиента

В качестве примера рассмотрим обучение **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.
- Чекпоинтинг может снизить потребление до 8 GB, пересчитывая их (33% дополнительных вычислений)

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

Чем автоматическое дифференцирование (AD) не является:

- AD не является методом конечных разностей

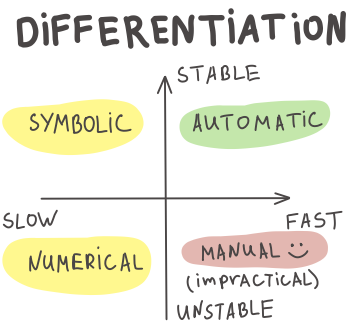


Рисунок 30. Различные подходы для взятия производных

Чем автоматическое дифференцирование (AD) не является:

- AD не является методом конечных разностей
- AD не является символьным вычислением производных

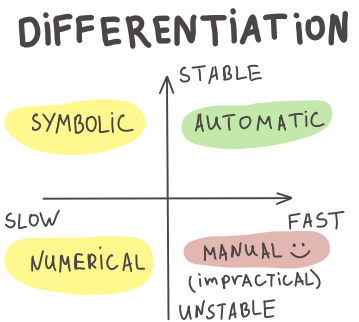


Рисунок 30. Различные подходы для взятия производных

Чем автоматическое дифференцирование (AD) не является:

- AD не является методом конечных разностей
- AD не является символьным вычислением производных
- AD не является только правилом вычисления производной сложной функции

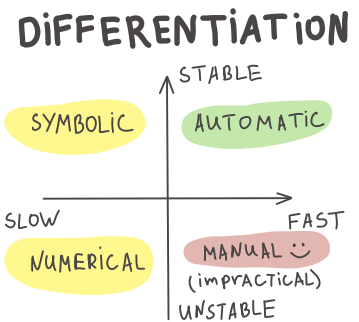


Рисунок 30. Различные подходы для взятия производных

Чем автоматическое дифференцирование (AD) не является:

- AD не является методом конечных разностей
- AD не является символьным вычислением производных
- AD не является только правилом вычисления производной сложной функции
- AD (обратный режим) является времяэффективным и численно стабильным

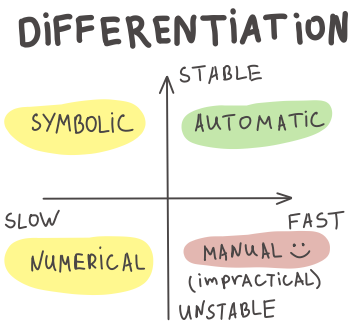


Рисунок 30. Различные подходы для взятия производных

Чем автоматическое дифференцирование (AD) не является:

- AD не является методом конечных разностей
- AD не является символьным вычислением производных
- AD не является только правилом вычисления производной сложной функции
- AD (обратный режим) является времяэффективным и численно стабильным
- AD (обратный режим) не является эффективным по памяти (нужно хранить все промежуточные вычисления из прямого прохода)

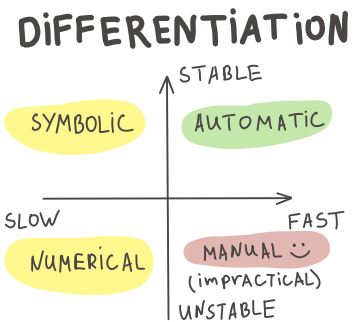


Рисунок 30. Различные подходы для взятия производных

Дополнительные материалы

- Рекомендую прочитать официальный мануал по Jax Autodiff. Open In Colab ♣

Дополнительные материалы

- Рекомендую прочитать официальный мануал по Jax Autodiff. Open In Colab ♣
- Распространение градиента через линейные наименьшие квадраты [семинар]

Дополнительные материалы

- Рекомендую прочитать официальный мануал по Jax Autodiff. Open In Colab ♣
- Распространение градиента через линейные наименьшие квадраты [семинар]
- Распространение градиента через SVD [семинар]

Дополнительные материалы

- Рекомендую прочитать официальный мануал 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 $f = f(x_1(t), \dots, x_n(t))$. 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).