Автоматическое дифференцирование

Семинар

ФКН ВШЭ

Прямой режим

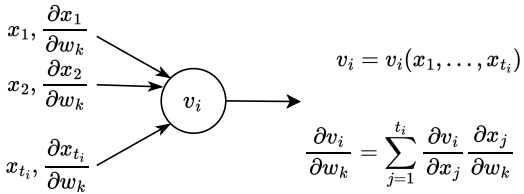


Figure 1: Иллюстрация прямого правила дифференцирования сложной функции для вычисления производной v_i по w_k.

- Использует прямое правило дифференцирования сложной функции

Прямой режим

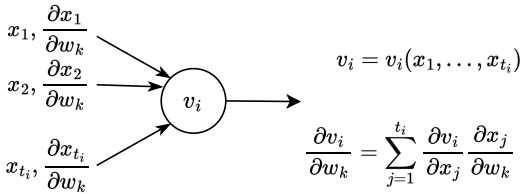


Figure 1: Иллюстрация прямого правила дифференцирования сложной функции для вычисления производной v_i по w_k.

- Использует прямое правило дифференцирования сложной функции
- Имеет сложность $d \times \mathcal{O}(T)$ операций

Обратный режим

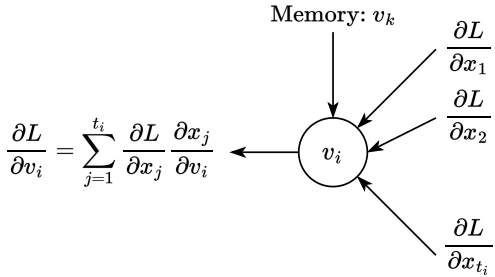


Figure 2: Иллюстрация обратного правила дифференцирования сложной функции для вычисления производной L по узлу v_i.

- Использует обратное правило дифференцирования сложной функции

Обратный режим

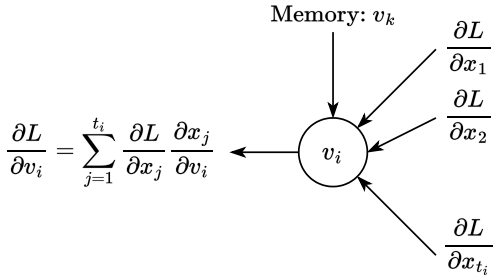


Figure 2: Иллюстрация обратного правила дифференцирования сложной функции для вычисления производной L по узлу v_i.

- Использует обратное правило дифференцирования сложной функции
- Сохраняет информацию из прямого прохода

Обратный режим

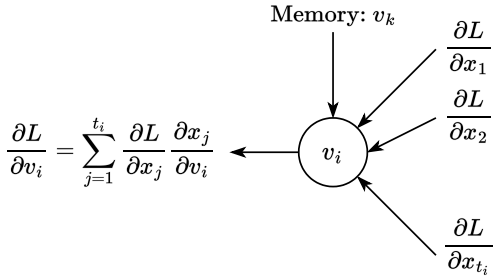


Figure 2: Иллюстрация обратного правила дифференцирования сложной функции для вычисления производной L по узлу v_i.

- Использует обратное правило дифференцирования сложной функции
- Сохраняет информацию из прямого прохода
- Имеет сложность $\mathcal{O}(T)$ операций

Простой пример

Example

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

Вычислим производные $\dfrac{\partial f}{\partial x_i}$ с помощью прямого и обратного режимов.

Простой пример

Example

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

Вычислим производные $\dfrac{\partial f}{\partial x_i}$ с помощью прямого и обратного режимов.

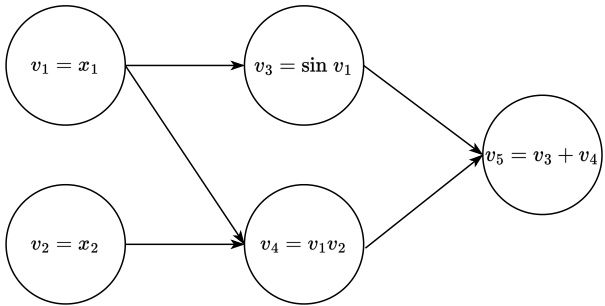


Figure 3: Иллюстрация вычислительного графа $f(x_1, x_2)$.

Автоматическое дифференцирование с JAX

Пример №1

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

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

Автоматическое дифференцирование с JAX

Пример №1

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

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

Пример №2

$$g(x) = \frac{1}{3}\|x\|_2^3$$

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

Автоматическое дифференцирование с JAX

Пример №1

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

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

Пример №2

$$g(x) = \frac{1}{3}\|x\|_2^3$$

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

Вычислим градиенты и гессианы функций f и g

Задача 1

Question

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

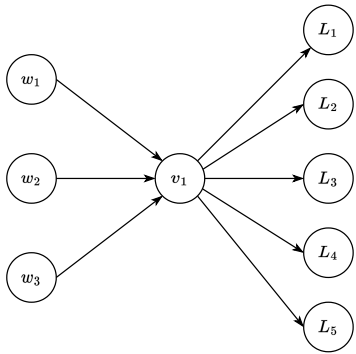


Figure 4: Какой режим вы бы выбрали для вычисления градиентов?

Задача 2

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

Question

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

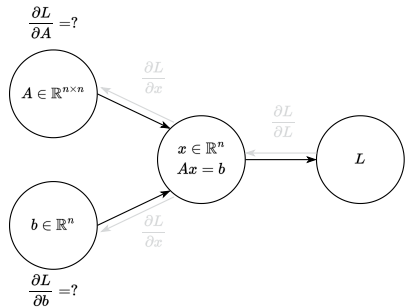


Figure 5: x может быть найден как решение линейной системы

Распространение градиента через линейные наименьшие квадраты

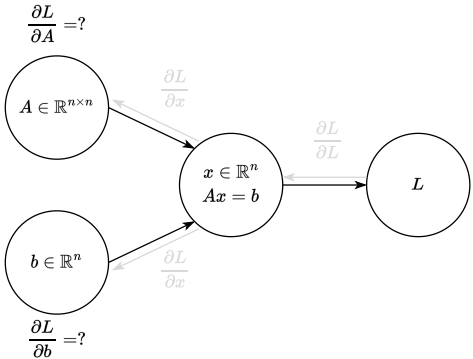


Figure 6: x может быть найден как решение линейной системы

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

Распространение градиента через линейные наименьшие квадраты

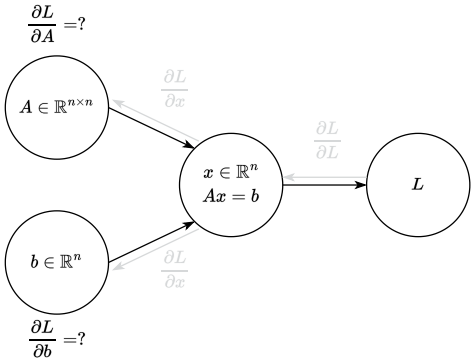


Figure 6: x может быть найден как решение линейной системы

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

Известно, что дифференциал функции не зависит от параметризации:

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

Распространение градиента через линейные наименьшие квадраты

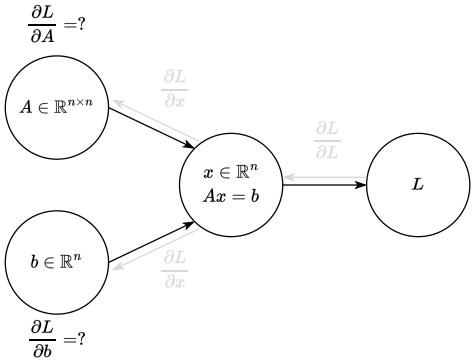


Figure 6: x может быть найден как решение линейной системы

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

Известно, что дифференциал функции не зависит от параметризации:

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

Учитывая линейную систему, имеем:

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

Распространение градиента через линейные наименьшие квадраты

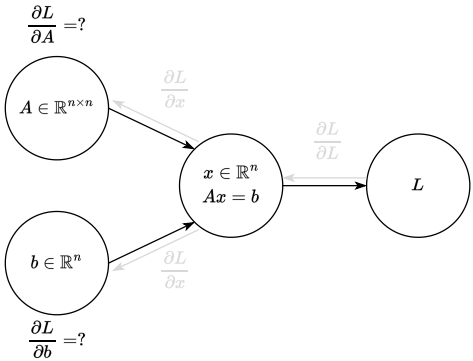


Figure 7: x может быть найден как решение линейной системы

Прямая подстановка даёт нам:

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

Распространение градиента через линейные наименьшие квадраты

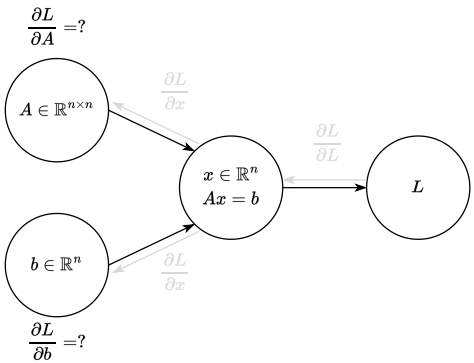


Figure 7: x может быть найден как решение линейной системы

Прямая подстановка даёт нам:

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

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

Распространение градиента через линейные наименьшие квадраты

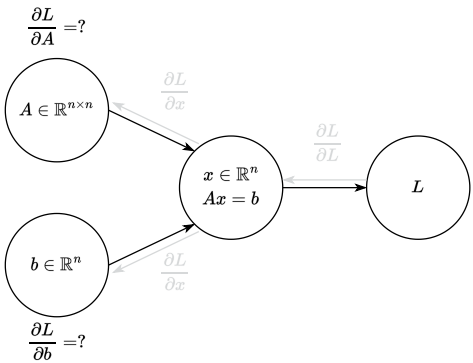


Figure 7: x может быть найден как решение линейной системы

Прямая подстановка даёт нам:

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

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

Следовательно:

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

Распространение градиента через линейные наименьшие квадраты

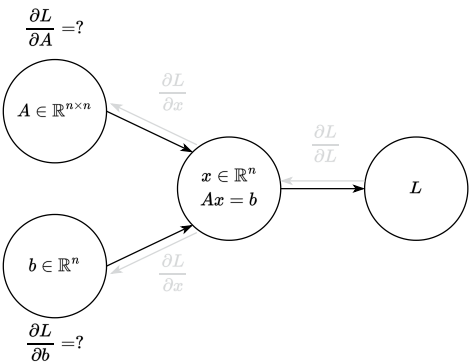


Figure 7: x может быть найден как решение линейной системы

Прямая подстановка даёт нам:

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

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

Следовательно:

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

Интересно, что наиболее вычислительно затратная часть здесь — это обращение матрицы, что совпадает со сложностью прямого прохода. Иногда даже можно сохранить сам результат, что делает обратный проход ещё дешевле.

Задача 3

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

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

Регуляризатор $R(W) = \text{tr}(\Sigma)$ в любой функции потерь поощряет решения с низким рангом.

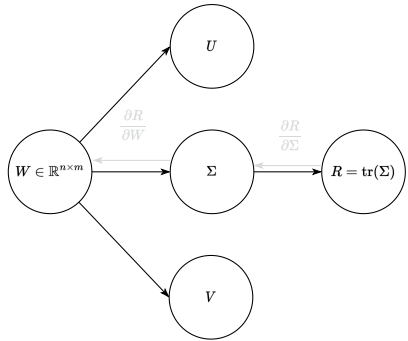
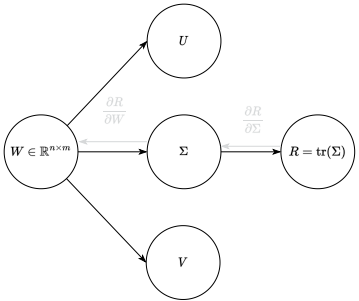


Figure 8: Вычислительный граф для сингулярного регуляризатора

Question

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

Распространение градиента через SVD



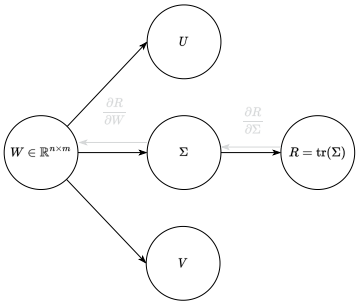
Предположим, что у нас есть прямоугольная матрица $W \in \mathbb{R}^{m \times n}$, которая имеет сингулярное разложение:

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

1. Аналогично предыдущему примеру:

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

Распространение градиента через SVD



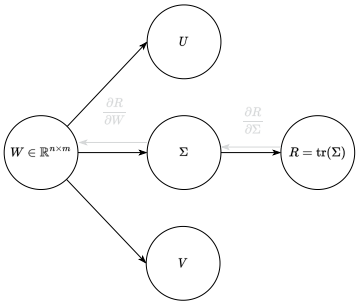
2. Заметим, что $U^T U = I \to dU^T U + U^T dU = 0$. Но также $dU^T U = (U^T dU)^T$, что означает, что матрица $U^T dU$ антисимметрична:

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

Та же логика применима к матрице V:

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

Распространение градиента через SVD



2. Заметим, что $U^T U = I \to dU^T U + U^T dU = 0$. Но также $dU^T U = (U^T dU)^T$, что означает, что матрица $U^T dU$ антисимметрична:

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

Та же логика применима к матрице V:

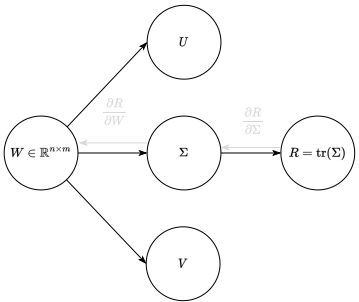
$$\mathrm{diag}(dV^T V) = (0, \dots, 0)$$

3. При этом матрица $d\Sigma$ диагональна, что означает (смотри пункт 1), что

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

Здесь с обеих сторон у нас диагональные матрицы.

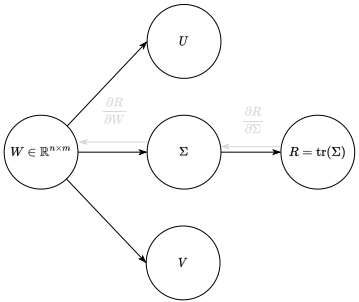
Распространение градиента через SVD



4. Теперь мы можем разложить дифференциал функции потерь как функцию от Σ — такие задачи возникают в машинном обучении, когда нужно ограничить ранг матрицы:

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

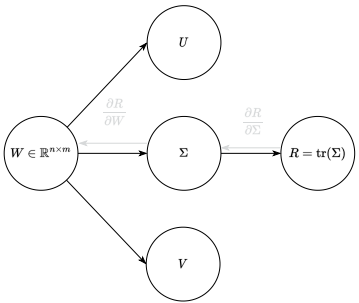
Распространение градиента через SVD



5. Поскольку у нас диагональные матрицы внутри произведения, след диагональной части матрицы будет равен следу всей матрицы:

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

Распространение градиента через SVD



6. Наконец, используя другую параметризацию дифференциала

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

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

Этот красивый результат позволяет связать градиенты $\dfrac{\partial L}{\partial W}$ и $\dfrac{\partial L}{\partial \Sigma}$.

Вычислительный эксперимент с JAX

Убедимся численно, что мы правильно вычислили производные в задачах 2 и 3

Архитектура прямого распространения

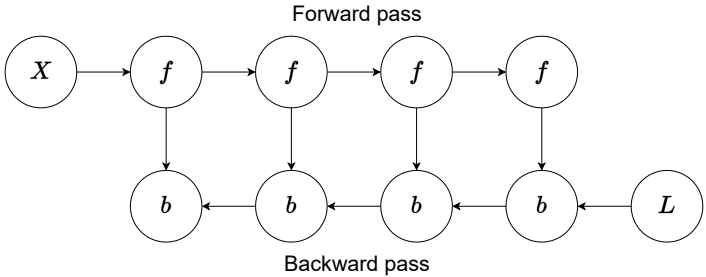


Figure 9: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Активации обозначены через f. Градиент функции потерь по активациям и параметрам обозначен через b.

Архитектура прямого распространения

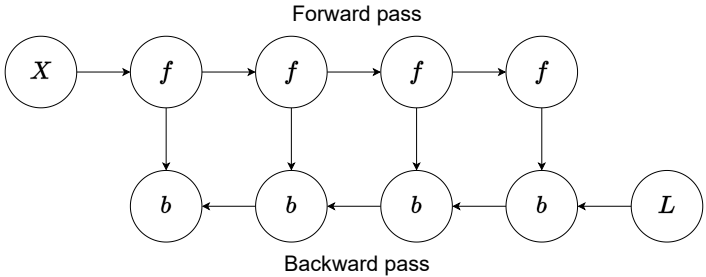


Figure 9: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Активации обозначены через f. Градиент функции потерь по активациям и параметрам обозначен через b.

! Important

Результаты, полученные для узлов f, необходимы для вычисления узлов b.

Стандартное обратное распространение

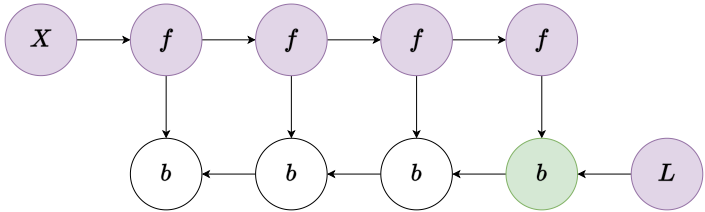


Figure 10: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

Стандартное обратное распространение

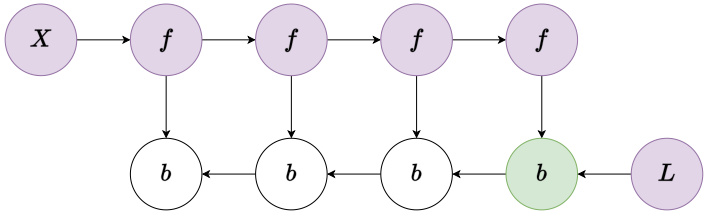


Figure 10: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

- Все активации f сохраняются в памяти после прямого прохода.

Стандартное обратное распространение

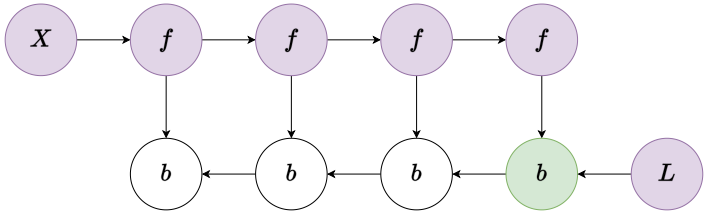


Figure 10: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

- Все активации f сохраняются в памяти после прямого прохода.

Стандартное обратное распространение

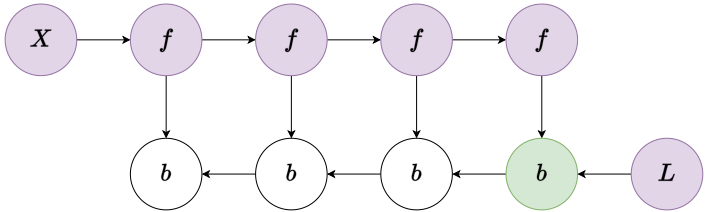


Figure 10: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

- Все активации f сохраняются в памяти после прямого прохода.

- Оптимален по вычислениям: каждый узел вычисляется только один раз.

Стандартное обратное распространение

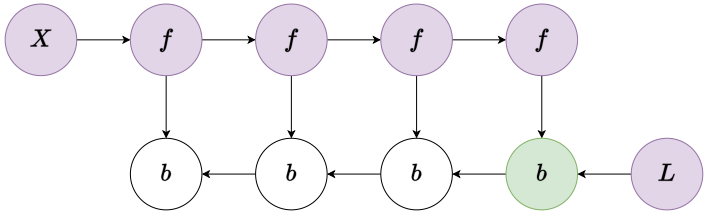


Figure 10: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

- Все активации f сохраняются в памяти после прямого прохода.

- Оптимален по вычислениям: каждый узел вычисляется только один раз.

Стандартное обратное распространение

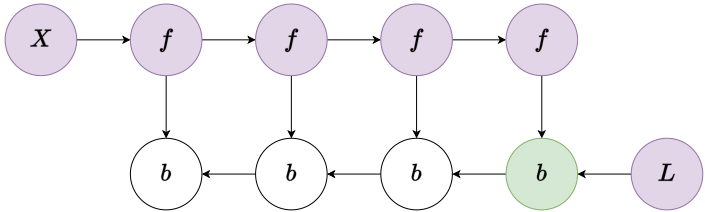


Figure 10: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

- Все активации f сохраняются в памяти после прямого прохода.

- Оптимален по вычислениям: каждый узел вычисляется только один раз.

- Высокое потребление памяти. Использование памяти растёт линейно с количеством слоёв в нейронной сети.

Экономное по памяти обратное распространение

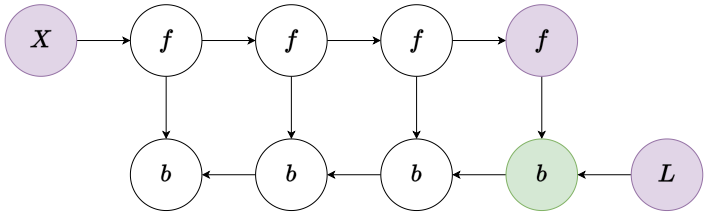


Figure 11: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

Экономное по памяти обратное распространение

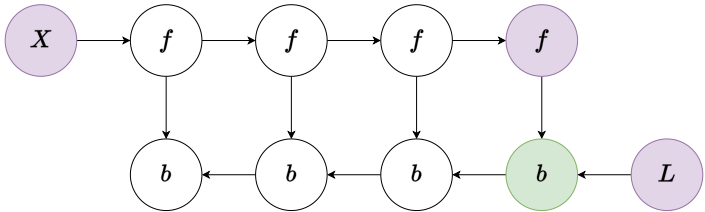


Figure 11: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

- Каждая активация f пересчитывается по мере необходимости.

Экономное по памяти обратное распространение

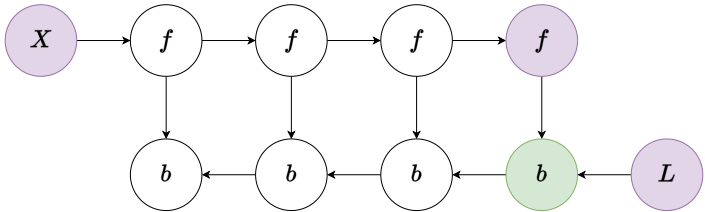


Figure 11: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

- Каждая активация f пересчитывается по мере необходимости.

Экономное по памяти обратное распространение

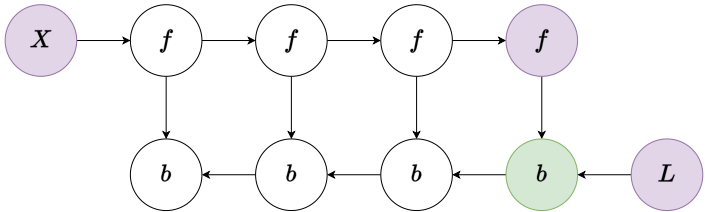


Figure 11: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

- Каждая активация f пересчитывается по мере необходимости.

- Оптимален по памяти: нет необходимости хранить все активации в памяти.

Экономное по памяти обратное распространение

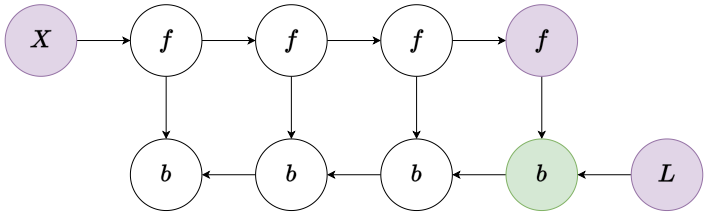


Figure 11: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

- Каждая активация f пересчитывается по мере необходимости.

- Оптимален по памяти: нет необходимости хранить все активации в памяти.

Экономное по памяти обратное распространение

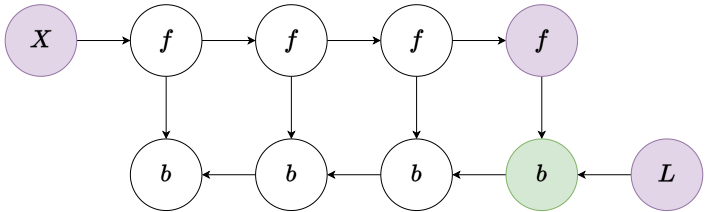


Figure 11: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

- Каждая активация f пересчитывается по мере необходимости.

- Оптимален по памяти: нет необходимости хранить все активации в памяти.

- Вычислительно неэффективен. Количество вычислений узлов растёт как n^2, тогда как в стандартном подходе — как n: каждый из n узлов пересчитывается порядка n раз.

Обратное распространение с чекпоинтами

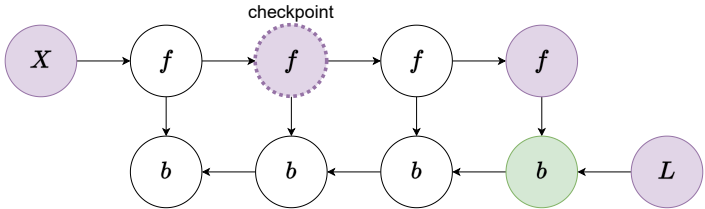


Figure 12: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

Обратное распространение с чекпоинтами

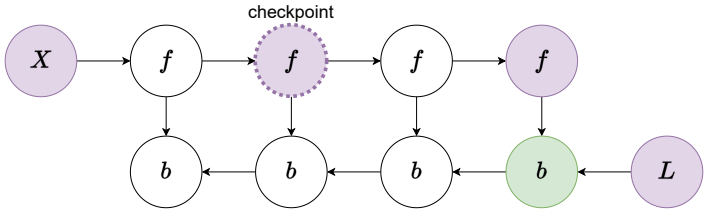


Figure 12: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

- Компромисс между **стандартным** и **экономным по памяти** подходами. Стратегия состоит в том, чтобы пометить подмножество активаций нейронной сети как чекпоинты, которые будут храниться в памяти.

Обратное распространение с чекпоинтами

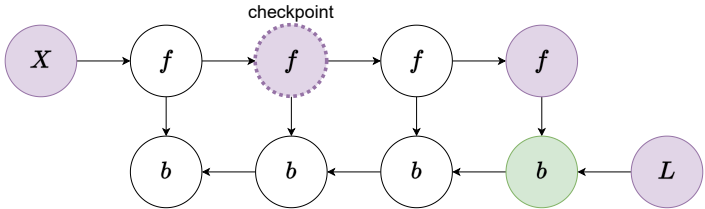


Figure 12: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

- Компромисс между **стандартным** и **экономным по памяти** подходами. Стратегия состоит в том, чтобы пометить подмножество активаций нейронной сети как чекпоинты, которые будут храниться в памяти.

Обратное распространение с чекпоинтами

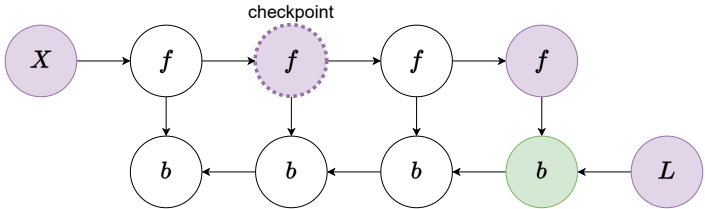


Figure 12: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

- Компромисс между **стандартным** и **экономным по памяти** подходами. Стратегия состоит в том, чтобы пометить подмножество активаций нейронной сети как чекпоинты, которые будут храниться в памяти.

  - Более быстрый пересчёт активаций f. При вычислении узла b во время обратного прохода нужно пересчитать только узлы между этим b и последним предшествующим ему чекпоинтом.

Обратное распространение с чекпоинтами

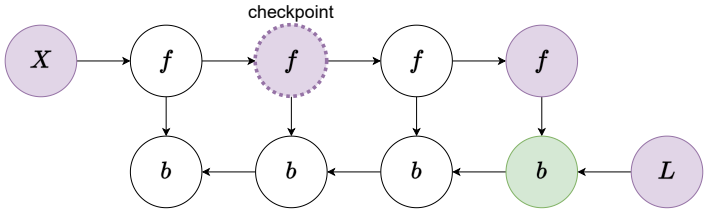


Figure 12: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

- Компромисс между **стандартным** и **экономным по памяти** подходами. Стратегия состоит в том, чтобы пометить подмножество активаций нейронной сети как чекпоинты, которые будут храниться в памяти.

  - Более быстрый пересчёт активаций f. При вычислении узла b во время обратного прохода нужно пересчитать только узлы между этим b и последним предшествующим ему чекпоинтом.

Обратное распространение с чекпоинтами

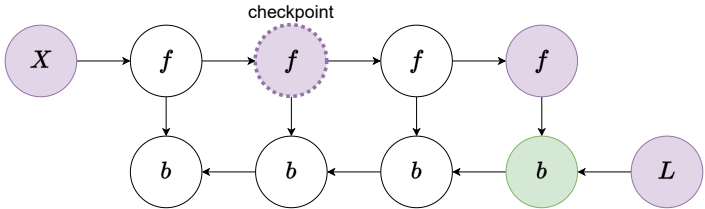


Figure 12: Вычислительный граф для получения градиентов простой нейронной сети прямого распространения с n слоями. Фиолетовым цветом обозначены узлы, хранящиеся в памяти.

- Компромисс между **стандартным** и **экономным по памяти** подходами. Стратегия состоит в том, чтобы пометить подмножество активаций нейронной сети как чекпоинты, которые будут храниться в памяти.

- Более быстрый пересчёт активаций f. При вычислении узла b во время обратного прохода нужно пересчитать только узлы между этим b и последним предшествующим ему чекпоинтом.

- Потребление памяти зависит от количества чекпоинтов. Эффективнее, чем **стандартный** подход.

Визуализация чекпоинтинга градиента

Анимированная визуализация вышеописанных подходов

Пример использования чекпоинтинга градиента

Оценка следа методом Хатчинсона [1]

Этот пример иллюстрирует оценку следа гессиана нейронной сети с использованием метода Хатчинсона — алгоритма, который позволяет получить такую оценку 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,

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

Пример использования оценки следа методом Хатчинсона

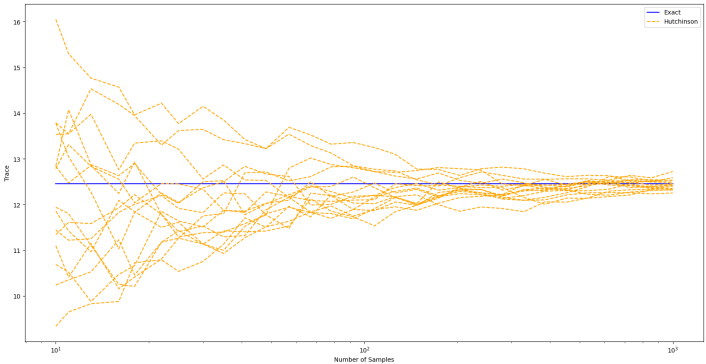


Figure 13: Несколько запусков оценки следа методом Хатчинсона с разными начальными значениями генератора случайных чисел.

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