



# Автоматическое дифференцирование

Даниил Меркулов

Методы оптимизации. МФТИ



## Повторим матричное дифференцирование

## Пример 1

### Example

Найти гессиан  $\nabla^2 f(x)$ , если  $f(x) = \langle x, Ax \rangle - b^T x + c$ .

## Пример 1

### Example

Найти гессиан  $\nabla^2 f(x)$ , если  $f(x) = \langle x, Ax \rangle - b^T x + c$ .

1. Распишем дифференциал  $df$

$$\begin{aligned} df &= d(\langle Ax, x \rangle - \langle b, x \rangle + c) \\ &= \langle Ax, dx \rangle + \langle x, Adx \rangle - \langle b, dx \rangle \\ &= \langle Ax, dx \rangle + \langle A^T x, dx \rangle - \langle b, dx \rangle \\ &= \langle (A + A^T)x - b, dx \rangle \end{aligned}$$

Что означает, что градиент  $\nabla f = (A + A^T)x - b$ .

## Пример 1

### Example

Найти гессиан  $\nabla^2 f(x)$ , если  $f(x) = \langle x, Ax \rangle - b^T x + c$ .

1. Распишем дифференциал  $df$

$$\begin{aligned} df &= d(\langle Ax, x \rangle - \langle b, x \rangle + c) \\ &= \langle Ax, dx \rangle + \langle x, Adx \rangle - \langle b, dx \rangle \\ &= \langle Ax, dx \rangle + \langle A^T x, dx \rangle - \langle b, dx \rangle \\ &= \langle (A + A^T)x - b, dx \rangle \end{aligned}$$

Что означает, что градиент  $\nabla f = (A + A^T)x - b$ .

## Пример 1

### Example

Найти гессиан  $\nabla^2 f(x)$ , если  $f(x) = \langle x, Ax \rangle - b^T x + c$ .

1. Распишем дифференциал  $df$

$$\begin{aligned} df &= d(\langle Ax, x \rangle - \langle b, x \rangle + c) \\ &= \langle Ax, dx \rangle + \langle x, Adx \rangle - \langle b, dx \rangle \\ &= \langle Ax, dx \rangle + \langle A^T x, dx \rangle - \langle b, dx \rangle \\ &= \langle (A + A^T)x - b, dx \rangle \end{aligned}$$

Что означает, что градиент  $\nabla f = (A + A^T)x - b$ .

2. Найдем второй дифференциал  $d^2 f = d(df)$ , полагая, что  $dx = dx_1 = \text{const}$ :

$$\begin{aligned} d^2 f &= d(\langle (A + A^T)x - b, dx_1 \rangle) \\ &= \langle (A + A^T)dx, dx_1 \rangle \\ &= \langle dx, (A + A^T)^T dx_1 \rangle \\ &= \langle (A + A^T)dx_1, dx \rangle \end{aligned}$$

Таким образом, гессиан:  $\nabla^2 f = (A + A^T)$ .

## Пример 2

### Example

Найти гессиан  $\nabla^2 f(x)$ , если  $f(x) = \ln \langle x, Ax \rangle$ .

## Пример 3

### Example

Найти градиент  $\nabla f(x)$  и гессиан  $\nabla^2 f(x)$ , если  $f(x) = \ln(1 + \exp\langle a, x \rangle)$



## Пример 3

### i Example

Найти градиент  $\nabla f(x)$  и гессиан  $\nabla^2 f(x)$ , если  $f(x) = \ln(1 + \exp\langle a, x \rangle)$

1. Начнем с записи дифференциала  $df$ . Имеем:

$$f(x) = \ln(1 + \exp\langle a, x \rangle)$$

Используя правило дифференцирования сложной функции:

$$df = d(\ln(1 + \exp\langle a, x \rangle)) = \frac{d(1 + \exp\langle a, x \rangle)}{1 + \exp\langle a, x \rangle}$$

теперь посчитаем дифференциал экспоненты:

$$d(\exp\langle a, x \rangle) = \exp\langle a, x \rangle \langle a, dx \rangle$$

Подставляя в выражение выше, имеем:

$$df = \frac{\exp\langle a, x \rangle \langle a, dx \rangle}{1 + \exp\langle a, x \rangle}$$

## Пример 3

### i Example

Найти градиент  $\nabla f(x)$  и гессиан  $\nabla^2 f(x)$ , если  $f(x) = \ln(1 + \exp\langle a, x \rangle)$

1. Начнем с записи дифференциала  $df$ . Имеем:

$$f(x) = \ln(1 + \exp\langle a, x \rangle)$$

Используя правило дифференцирования сложной функции:

$$df = d(\ln(1 + \exp\langle a, x \rangle)) = \frac{d(1 + \exp\langle a, x \rangle)}{1 + \exp\langle a, x \rangle}$$

теперь посчитаем дифференциал экспоненты:

$$d(\exp\langle a, x \rangle) = \exp\langle a, x \rangle \langle a, dx \rangle$$

Подставляя в выражение выше, имеем:

$$df = \frac{\exp\langle a, x \rangle \langle a, dx \rangle}{1 + \exp\langle a, x \rangle}$$

## Пример 3

### i Example

Найти градиент  $\nabla f(x)$  и гессиан  $\nabla^2 f(x)$ , если  $f(x) = \ln(1 + \exp\langle a, x \rangle)$

1. Начнем с записи дифференциала  $df$ . Имеем:

$$f(x) = \ln(1 + \exp\langle a, x \rangle)$$

Используя правило дифференцирования сложной функции:

$$df = d(\ln(1 + \exp\langle a, x \rangle)) = \frac{d(1 + \exp\langle a, x \rangle)}{1 + \exp\langle a, x \rangle}$$

теперь посчитаем дифференциал экспоненты:

$$d(\exp\langle a, x \rangle) = \exp\langle a, x \rangle \langle a, dx \rangle$$

Подставляя в выражение выше, имеем:

$$df = \frac{\exp\langle a, x \rangle \langle a, dx \rangle}{1 + \exp\langle a, x \rangle}$$

2. Для выражения  $df$  в нужной форме, запишем:

$$df = \left\langle \frac{\exp\langle a, x \rangle}{1 + \exp\langle a, x \rangle} a, dx \right\rangle$$

Напомним, что функция сигмоиды определяется как:

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

Таким образом, мы можем переписать дифференциал:

$$df = \langle \sigma(\langle a, x \rangle) a, dx \rangle$$

Следовательно, градиент:

$$\nabla f(x) = \sigma(\langle a, x \rangle) a$$

## Пример 3

### Example

Найти градиент  $\nabla f(x)$  и гессиан  $\nabla^2 f(x)$ , если  $f(x) = \ln(1 + \exp\langle a, x \rangle)$

3. Теперь найдем гессиан с помощью второго дифференциала:

$$d(\nabla f(x)) = d(\sigma(\langle a, x \rangle)a)$$

Так как вектор  $a$  константа, нам необходимо продифференцировать лишь сигмоиду:

$$d(\sigma(\langle a, x \rangle)) = \sigma(\langle a, x \rangle)(1 - \sigma(\langle a, x \rangle))\langle a, dx \rangle$$

То есть:

$$d(\nabla f(x)) = \sigma(\langle a, x \rangle)(1 - \sigma(\langle a, x \rangle))\langle a, dx \rangle a$$

Запишем гессиан:

$$\nabla^2 f(x) = \sigma(\langle a, x \rangle)(1 - \sigma(\langle a, x \rangle))aa^T$$

# 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



Рис. 1: Когда понял идею



Рис. 2: Это не автоград

# Задача

Пусть есть задача оптимизации:

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



# Задача

Пусть есть задача оптимизации:

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

- Such problems typically arise in machine learning, when you need to find optimal hyperparameters  $w$  of an ML model (i.e. train a neural network).

# Задача

Пусть есть задача оптимизации:

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

- Such problems typically arise in machine learning, when you need to find optimal hyperparameters  $w$  of an ML model (i.e. train a neural network).
- You may use a lot of algorithms to approach this problem, but given the modern size of the problem, where  $d$  could be dozens of billions it is very challenging to solve this problem without information about the gradients using zero-order optimization algorithms.

# Задача

Пусть есть задача оптимизации:

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

- Such problems typically arise in machine learning, when you need to find optimal hyperparameters  $w$  of an ML model (i.e. train a neural network).
- You may use a lot of algorithms to approach this problem, but given the modern size of the problem, where  $d$  could be dozens of billions it is very challenging to solve this problem without information about the gradients using zero-order optimization algorithms.
- That is why it would be beneficial to be able to calculate the gradient vector  $\nabla_w L = \left( \frac{\partial L}{\partial w_1}, \dots, \frac{\partial L}{\partial w_d} \right)^T$ .

# Задача

Пусть есть задача оптимизации:

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

- Such problems typically arise in machine learning, when you need to find optimal hyperparameters  $w$  of an ML model (i.e. train a neural network).
- You may use a lot of algorithms to approach this problem, but given the modern size of the problem, where  $d$  could be dozens of billions it is very challenging to solve this problem without information about the gradients using zero-order optimization algorithms.
- That is why it would be beneficial to be able to calculate the gradient vector  $\nabla_w L = \left( \frac{\partial L}{\partial w_1}, \dots, \frac{\partial L}{\partial w_d} \right)^T$ .
- Typically, first-order methods perform much better in huge-scale optimization, while second-order methods require too much memory.

## Пример: задача многомерного шкалирования

Suppose, we have a pairwise distance matrix for  $N$   $d$ -dimensional objects  $D \in \mathbb{R}^{N \times N}$ . Given this matrix, our goal is to recover the initial coordinates  $W_i \in \mathbb{R}^d$ ,  $i = 1, \dots, N$ .

## Пример: задача многомерного шкалирования

Suppose, we have a pairwise distance matrix for  $N$   $d$ -dimensional objects  $D \in \mathbb{R}^{N \times N}$ . Given this matrix, our goal is to recover the initial coordinates  $W_i \in \mathbb{R}^d$ ,  $i = 1, \dots, N$ .

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

## Пример: задача многомерного шкалирования

Suppose, we have a pairwise distance matrix for  $N$   $d$ -dimensional objects  $D \in \mathbb{R}^{N \times N}$ . Given this matrix, our goal is to recover the initial coordinates  $W_i \in \mathbb{R}^d$ ,  $i = 1, \dots, N$ .

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

Link to a nice visualization ♣, where one can see, that gradient-free methods handle this problem much slower, especially in higher dimensions.

### Question

Is it somehow connected with PCA?

## Пример: задача многомерного шкалирования



Рис. 3: Ссылка на анимацию



## Пример: безградиентный градиентный спуск

Рассмотрим следующую задачу оптимизации

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

## Пример: безградиентный градиентный спуск

Рассмотрим следующую задачу оптимизации

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

вместе с методом градиентного спуска (GD)

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

## Пример: безградиентный градиентный спуск

Рассмотрим следующую задачу оптимизации

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

вместе с методом градиентного спуска (GD)

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

Можно ли заменить  $\nabla_w L(w_k)$ , используя, лишь информацию нулевого порядка о функции?

## Пример: безградиентный градиентный спуск

Рассмотрим следующую задачу оптимизации

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

вместе с методом градиентного спуска (GD)

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

Можно ли заменить  $\nabla_w L(w_k)$ , используя, лишь информацию нулевого порядка о функции?

Да, но есть нюанс.

## Пример: безградиентный градиентный спуск

Рассмотрим следующую задачу оптимизации

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

вместе с методом градиентного спуска (GD)

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

Можно ли заменить  $\nabla_w L(w_k)$ , используя, лишь информацию нулевого порядка о функции?

Да, но есть нюанс.

One can consider 2-point gradient estimator<sup>a</sup>  $G$ :

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

where  $v$  is spherically symmetric.

---

<sup>a</sup>I suggest a nice presentation about gradient-free methods

## Пример: безградиентный градиентный спуск

Рассмотрим следующую задачу оптимизации

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

вместе с методом градиентного спуска (GD)

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

Можно ли заменить  $\nabla_w L(w_k)$ , используя, лишь информацию нулевого порядка о функции?

Да, но есть нюанс.

One can consider 2-point gradient estimator<sup>a</sup>  $G$ :

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

where  $v$  is spherically symmetric.

<sup>a</sup>I suggest a nice presentation about gradient-free methods



Рис. 4: ``Illustration of two-point estimator of Gradient Descent''

## Пример: конечно-разностный градиентный спуск

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

## Пример: конечно-разностный градиентный спуск

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

One can also consider the idea of finite differences:

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

Open In Colab ♣



Рис. 5: ``Illustration of finite differences estimator of Gradient Descent''



# Проклятие размерности методов нулевого порядка

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

# Проклятие размерности методов нулевого порядка

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

$$\text{GD: } x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$$

$$\text{Zero order GD: } x_{k+1} = x_k - \alpha_k G,$$

where  $G$  is a 2-point or multi-point estimator of the gradient.

## Проклятие размерности методов нулевого порядка

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

$$\text{GD: } x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$$

$$\text{Zero order GD: } x_{k+1} = x_k - \alpha_k G,$$

where  $G$  is a 2-point or multi-point estimator of the gradient.

	$f(x)$ - smooth	$f(x)$ - smooth and convex	$f(x)$ - smooth and strongly convex
GD	$\ \nabla f(x_k)\ ^2 \approx \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$	$f(x_k) - f^* \approx \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$	$\ x_k - x^*\ ^2 \approx \mathcal{O}\left(\left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k\right)$
Zero order GD	$\ \nabla f(x_k)\ ^2 \approx \mathcal{O}\left(\frac{n}{k}\right)$	$f(x_k) - f^* \approx \mathcal{O}\left(\frac{n}{k}\right)$	$\ x_k - x^*\ ^2 \approx \mathcal{O}\left(\left(1 - \frac{\mu}{nL}\right)^k\right)$

## Метод конечных разностей

The naive approach to get approximate values of gradients is **Finite differences** approach. For each coordinate, one can calculate the partial derivative approximation:

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

---

<sup>1</sup>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.

## Метод конечных разностей

The naive approach to get approximate values of gradients is **Finite differences** approach. For each coordinate, one can calculate the partial derivative approximation:

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

### Question

If the time needed for one calculation of  $L(w)$  is  $T$ , what is the time needed for calculating  $\nabla_w L$  with this approach?

## Метод конечных разностей

The naive approach to get approximate values of gradients is **Finite differences** approach. For each coordinate, one can calculate the partial derivative approximation:

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

### Question

If the time needed for one calculation of  $L(w)$  is  $T$ , what is the time needed for calculating  $\nabla_w L$  with this approach?

**Answer**  $2dT$ , which is extremely long for the huge scale optimization. Moreover, this exact scheme is unstable, which means that you will have to choose between accuracy and stability.

## Метод конечных разностей

The naive approach to get approximate values of gradients is **Finite differences** approach. For each coordinate, one can calculate the partial derivative approximation:

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

### i Question

If the time needed for one calculation of  $L(w)$  is  $T$ , what is the time needed for calculating  $\nabla_w L$  with this approach?

**Answer**  $2dT$ , which is extremely long for the huge scale optimization. Moreover, this exact scheme is unstable, which means that you will have to choose between accuracy and stability.

### Theorem

There is an algorithm to compute  $\nabla_w L$  in  $\mathcal{O}(T)$  operations.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>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.