

Выполнил(а) Абдулов И.А., № группы 3121, дата 22.12.2022, оценка

| | | |
|--|------------------------------------|--------------------------------|
| Название статьи/главы книги: Автоматическое дифференцирование в Python | | |
| ФИО автора статьи: А.В. Туркин | Дата публикации: 2016 г. | Размер статьи 8 стр. |
| Прямая полная ссылка на источник и сокращенная ссылка: https://cyberleninka.ru/article/n/avtomaticheskoe-differentsirovanie-v-python https://bit.ly/3WvNI2Z | | |
| Тэги, ключевые слова или словосочетания Программирование, Python, библиотеки Python, автоматическое дифференцирование, структура кластера | | |
| Перечень фактов, упомянутых в статье: Численное решение многих задач оптимизации требует получения значений производных, что в настоящее время может быть сделано с использованием библиотек автоматического дифференцирования. Такие библиотеки созданы, например, для такого языка как Python, который получил широкое распространение в научной среде. Принципы, которые лежат в основе методики автоматического дифференцирования, не относятся ни к численному, ни к символьному дифференцированию. Они включают набор приемов, приводящих к вычислению производной с predetermined точностью. Есть два способа построения программ автоматического дифференцирования: с использованием перегрузки операторов и с применением методики преобразования исходного кода. В настоящее время, многие исследователи используют Python для проведения научных расчетов, используя при этом множество свободно распространяемых библиотек. Некоторые из них могут быть использованы для осуществления автоматического дифференцирования программ, написанных с использованием конструкций этого языка. К таковым можно отнести следующие библиотеки: PyADOL-C, PyCppAD, CasADi, Computation Graph Toolkit (CGT), Theano и AD. Перед описанием возможностей того или иного инструмента автоматического дифференцирования необходимо поставить задачу нахождения производной функции. Была выбрана задача поиска геометрической структуры кластера атомов с минимальной энергией их взаимодействия. Были рассмотрены все приведенные инструменты с целью оценки их производительности с точки зрения времени вычисления градиента рассматриваемой целевой функции. Результаты показали, следующие закономерности: CasADi показывает наилучшее время вычисления производной для большинства рассмотренных кластеров. Вторым и третьим по скорости вычисления являются такие инструменты как PyADOL-C и PyCppAD соответственно. Стоит отметить, что несмотря на удобный функционал библиотеки AD, она показала наихудший результат из всех рассмотренных инструментов. | | |
| Позитивные следствия и/или достоинства описанной в статье технологии -Язык Python получил широкое распространение в научной среде -Python имеет множество свободно распространяющихся библиотек - CasADi обладает наибольшей производительностью среди рассмотренных инструментов. | | |
| Негативные следствия и/или недостатки описанной в статье технологии -Библиотека AD показала наихудший результат из всех рассмотренных -Библиотека ADOL-C, с помощью которой можно осуществлять автоматическое дифференцирование программ, переписана на Python -Для автоматического дифференцирования необходимо определить активные переменные SX или MX объектами | | |
| Ваши замечания, пожелания преподавателю или анекдот о программистах¹ | | |