Reverse-Mode 自動微分を理解する

Hiromi ISHII

2023-03-15

Tsukuba Computer Mathematics Seminar 2023

Forward-Mode と Reverse-Mode 自動微分

自動微分とは？

- 自動微分：与えられた関数の値とその微分係数を，合成関数の微分公式（連鎖律）を使って効率的・厳密に計算する方法
- 関連するが異なる計算方法：
  - 記号微分：数式を記号的な構文木で表現し，微分法則に従い記号的に処理．
    - 厳密だが項数が組合せ爆発して非効率になりがち．
  - 数値微分：極限 $\lim_{\Delta x \to 0} \dfrac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$ の Δx を微小数で置き換えて近似．
    - あくまで近似．Δt をどう近似するかで振る舞いが変わってくる．

連鎖律

- 皆さんお馴染の基本公式

$$\mathbb{R}^n \xrightarrow{f} \mathbb{R}^k \xrightarrow{g} \mathbb{R}^m$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}(g \circ f) = \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}f}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}$$

- 統一性のため $\boldsymbol{u}_0 = \boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_1 = f(\boldsymbol{u}_0), \boldsymbol{u}_2 = g(\boldsymbol{u}_1) = g(f(\boldsymbol{u}_0))$ として並び換えれば,

$$\mathbb{R}^0 \xrightarrow{\boldsymbol{u}_0} \mathbb{R}^n \xrightarrow{\boldsymbol{u}_1} \mathbb{R}^k \xrightarrow{\boldsymbol{u}_2} \mathbb{R}^m$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_2}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_1}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_2}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_1}$$

連鎖律

- 皆さんお馴染の基本公式

$$\mathbb{R}^n \xrightarrow{f} \mathbb{R}^k \xrightarrow{g} \mathbb{R}^m$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}(g \circ f) = \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}f}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}$$

- 統一性のため $\boldsymbol{u}_0 = \boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_1 = f(\boldsymbol{u}_0), \boldsymbol{u}_2 = g(\boldsymbol{u}_1) = g(f(\boldsymbol{u}_0))$ として並び換えれば,

$$\mathbb{R}^0 \xrightarrow{\boldsymbol{u}_0} \mathbb{R}^n \xrightarrow{\boldsymbol{u}_1} \mathbb{R}^k \xrightarrow{\boldsymbol{u}_2} \mathbb{R}^m$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_2}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_1}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_2}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_1}$$

連鎖律 （多変数）

多変数も同様

$$\mathbb{R}^0 \xrightarrow{\boldsymbol{u}_0} \mathbb{R}^{n_0} \xrightarrow{\boldsymbol{u}_1} \cdots \xrightarrow{\boldsymbol{u}_{N-1}} \mathbb{R}^{n_{N-1}} \xrightarrow{\boldsymbol{u}_N} \mathbb{R}^{n_N}$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_N}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_1}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_2}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_1}\cdots\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_{N-1}}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_{N-2}}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_N}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_{N-1}}$$

連鎖律　（多変数）

多変数も同様

$$\mathbb{R}^0 \xrightarrow{\boldsymbol{u}_0} \mathbb{R}^{n_0} \xrightarrow{\boldsymbol{u}_1} \dots \xrightarrow{\boldsymbol{u}_{N-1}} \mathbb{R}^{n_{N-1}} \xrightarrow{\boldsymbol{u}_N} \mathbb{R}^{n_N}$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_N}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_1}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_2}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_1}\cdots\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_{N-1}}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_{N-2}}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_N}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_{N-1}}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_N}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_N}$$

連鎖律　（多変数）

多変数も同様

$$\mathbb{R}^0 \xrightarrow{\boldsymbol{u}_0} \mathbb{R}^{n_0} \xrightarrow{\boldsymbol{u}_1} \cdots \xrightarrow{\boldsymbol{u}_{N-1}} \mathbb{R}^{n_{N-1}} \xrightarrow{\boldsymbol{u}_N} \mathbb{R}^{n_N}$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_N}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_1}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_2}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_1}\cdots\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_{N-1}}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_{N-2}}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_N}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_{N-1}}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_N}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_N}$$

$$\xrightarrow{\hspace{10em}} \text{Forward}$$

これを前から計算するのが Forward-Mode 自動微分

連鎖律　（多変数）

多変数も同様

$$\mathbb{R}^0 \xrightarrow{\boldsymbol{u}_0} \mathbb{R}^{n_0} \xrightarrow{\boldsymbol{u}_1} \cdots \xrightarrow{\boldsymbol{u}_{N-1}} \mathbb{R}^{n_{N-1}} \xrightarrow{\boldsymbol{u}_N} \mathbb{R}^{n_N}$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_N}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_1}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_0}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_2}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_1}\cdots\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_{N-1}}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_{N-2}}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_N}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_{N-1}}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_N}{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_N}$$

Forward

Reverse

これを前から計算するのが Forward-Mode 自動微分

これを後から計算するのが Reverse-Mode 自動微分

Reverse-Mode 自動微分いろいろ