

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

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 $\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$ 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

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

$$\frac{d}{d\mathbf{x}}(g \circ f) = \frac{dg}{df} \frac{df}{d\mathbf{x}}$$

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

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

$$\frac{d\mathbf{u}_2}{d\mathbf{u}_0} = \frac{d\mathbf{u}_1}{d\mathbf{u}_0} \frac{d\mathbf{u}_2}{d\mathbf{u}_1}$$

連鎖律

◆ 皆さんお馴染の基本公式

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

$$\frac{d}{d\mathbf{x}}(g \circ f) = \frac{dg}{df} \frac{df}{d\mathbf{x}}$$

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

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

$$\frac{d\mathbf{u}_2}{d\mathbf{u}_0} = \frac{d\mathbf{u}_1}{d\mathbf{u}_0} \frac{d\mathbf{u}_2}{d\mathbf{u}_1}$$

連鎖律 (多変数)

$$\mathbb{R}^0 \xrightarrow{u_0} \mathbb{R}^{n_0} \xrightarrow{u_1} \dots \xrightarrow{u_{N-1}} \mathbb{R}^{n_{N-1}} \xrightarrow{u_N} \mathbb{R}^{n_N}$$

$$\frac{d\mathbf{u}_N}{d\mathbf{u}_0} = \frac{d\mathbf{u}_1}{d\mathbf{u}_0} \frac{d\mathbf{u}_2}{d\mathbf{u}_1} \dots \frac{d\mathbf{u}_{N-1}}{d\mathbf{u}_{N-2}} \frac{d\mathbf{u}_N}{d\mathbf{u}_{N-1}}$$

連鎖律 (多変数)

$$\mathbb{R}^0 \xrightarrow{u_0} \mathbb{R}^{n_0} \xrightarrow{u_1} \dots \xrightarrow{u_{N-1}} \mathbb{R}^{n_{N-1}} \xrightarrow{u_N} \mathbb{R}^{n_N}$$

$$\frac{d\mathbf{u}_N}{d\mathbf{u}_0} = \frac{d\mathbf{u}_0}{d\mathbf{u}_0} \frac{d\mathbf{u}_1}{d\mathbf{u}_0} \frac{d\mathbf{u}_2}{d\mathbf{u}_1} \dots \frac{d\mathbf{u}_{N-1}}{d\mathbf{u}_{N-2}} \frac{d\mathbf{u}_N}{d\mathbf{u}_{N-1}} \frac{d\mathbf{u}_N}{d\mathbf{u}_N}$$

Reverse-Mode 自動微分いろいろ

Reverse-Mode 自動微分いろいろ