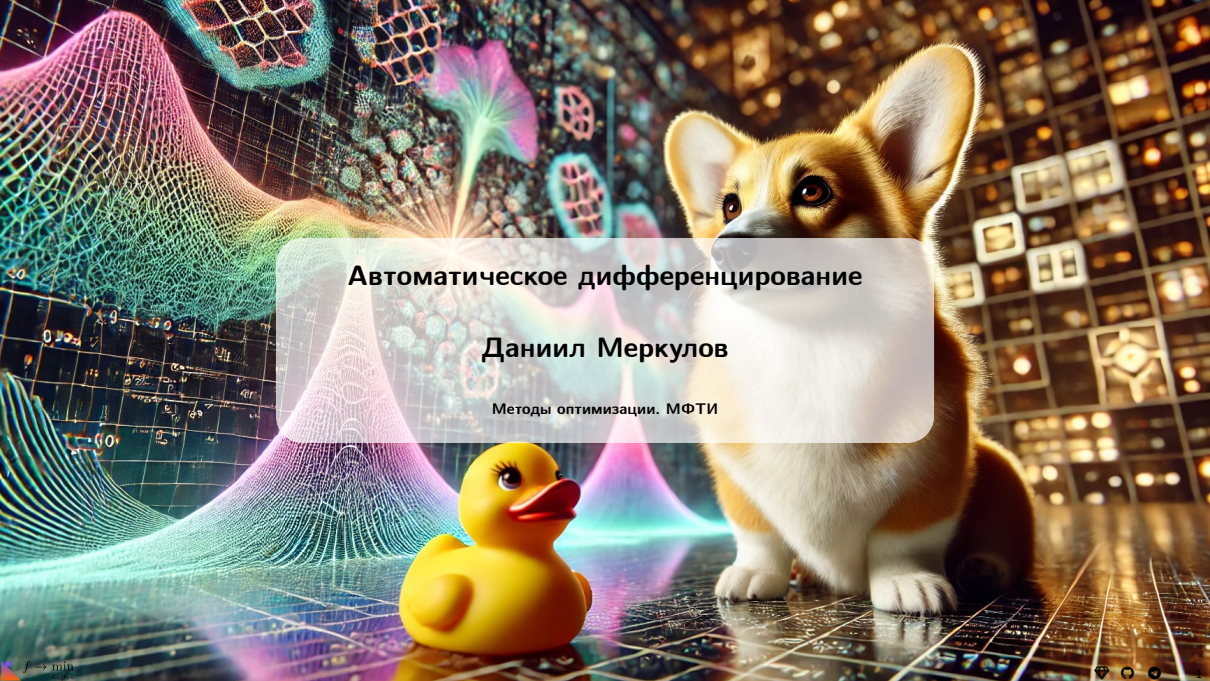


Автоматическое дифференцирование

Даниил Меркулов

Методы оптимизации. МФТИ

Повторим матричное дифференцирование

Пример 1

$x + dx - x = dx$

$df = \langle \nabla f(x), dx \rangle$

$df(x) \approx f(x+dx) - f(x)$

$\nabla f^T dx$

$\nabla f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$

$d^2 f = \langle \nabla^2 f \, dx_1, dx \rangle$

$\langle \dots dx, dx_1 \rangle$

Example

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

Решение: 1) $df = \langle (A + A^T)x - b, dx \rangle$

2) $d^2 f = d(df) =$ (при условии $dx = dx_1 = \text{const}$)

$= d\left(\langle (A + A^T)x - b, dx_1 \rangle \right) = \langle d\left((A + A^T)x - b\right), dx_1 \rangle =$

$= \langle (A + A^T) dx, dx_1 \rangle = \langle (A + A^T) dx_1, dx \rangle$

$\Rightarrow \boxed{\nabla^2 f = A + A^T}$

Пример 1

Example

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

1. Распишем дифференциал df

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Пример 2

$$0)\ df = \frac{\langle (A+A^T)x, dx\rangle}{\langle x, Ax\rangle} = \left\langle \frac{(A+A^T)x}{\langle x, Ax\rangle}, dx \right\rangle$$

Решение:

1) $d^2f = d(df) =$ считая $dx = dx_1 = \text{const}$ $\quad d^2f = \langle \dots dx_1, dx\rangle$

$\frac{dfg - fdg}{g^2}$

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

$$= \left\langle d\left(\frac{(A+A^T)x}{\langle x, Ax\rangle}\right), dx_1 \right\rangle = \left\langle \frac{-2Ax \cdot d(\langle x, Ax\rangle) + 2Adx \cdot \langle x, Ax\rangle}{\langle x, Ax\rangle^2}, dx_1 \right\rangle$$

$$= \left\langle \frac{2\langle x, Ax\rangle \cdot Adx - 2Ax \cdot \langle 2Ax, dx\rangle}{\langle x, Ax\rangle^2}, dx_1 \right\rangle \quad \langle x, Ax\rangle = t$$

$d(\langle x, Ax\rangle) = \langle 2Ax, dx\rangle$

Пример 2

$$d^2f = \left\langle \frac{2t\,Adx - 4\,Ax\langle Ax, dx\rangle}{t^2}, dx_1 \right\rangle =$$

$$= \frac{1}{t^2}\left\langle 2tAdx - 4Ax(Ax)^T dx, dx_1 \right\rangle =$$

$$(PP^T)^T = PP^T$$

Example

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

$$= \frac{1}{t^2}\left\langle \left[2tA - 4\left(Ax(Ax)^T\right)\right]dx, dx_1 \right\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\nabla^2 f = \frac{2\langle x, Ax\rangle A - 4(Ax)(Ax)^T}{\langle x, Ax\rangle^2}}$$

Пример 3

Example

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

$df =$

Пример 3

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

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

$d\sigma(x) = \sigma(x)[1-\sigma(x)] \cdot dx$

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

Example

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

∇f

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

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

Example

$\sigma := \sigma(\langle a,x\rangle)$

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

$d^2f = \langle d(\sigma a), dx_1\rangle =$

3. Теперь найдем гессиан с помозью второго дифференциала:

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

$= \langle d\sigma\cdot a, dx_1\rangle =$

$= \langle \sigma(1-\sigma)\langle a,dx\rangle a, dx_1\rangle$

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

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

$= \langle \sigma(1-\sigma)\, a\cdot\langle a,dx\rangle, dx_1\rangle =$

То есть:

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

$= \langle \sigma(1-\sigma)\, a a^T dx, dx_1\rangle =$

Запишем гессиан:

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

$\Rightarrow \boxed{\nabla^2 f = \sigma(1-\sigma)\, a a^T}$

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:

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

Задача

Пусть есть задача оптимизации:

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

- 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:

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

- 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:

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

- 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:

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

- 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.

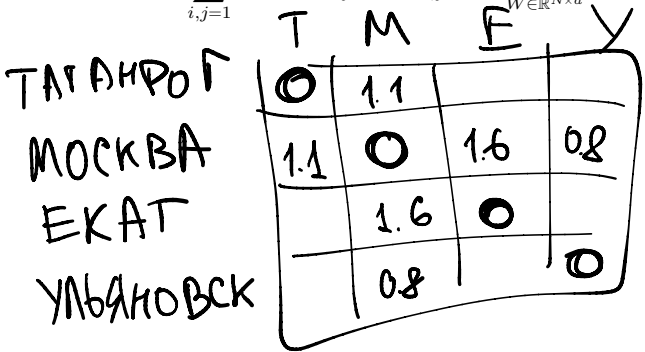
Пример: задача многомерного шкалирования

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 $W_i \in \mathbb{R}^d,\ i = 1, \dots, N$.

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



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 $W_i \in \mathbb{R}^d,\ i = 1, \dots, N$.

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

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

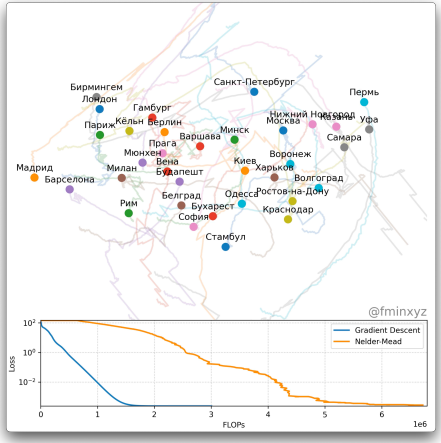


Рис. 3: Ссылка на анимацию

Пример: безградиентный градиентный спуск

Рассмотрим следующую задачу оптимизации

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

Пример: безградиентный градиентный спуск

Рассмотрим следующую задачу оптимизации

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

вместе с методом градиентного спуска (GD)

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

Пример: безградиентный градиентный спуск

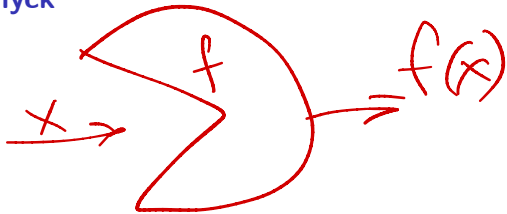
Рассмотрим следующую задачу оптимизации

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

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

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

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

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

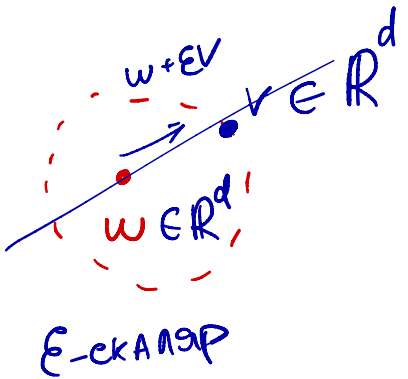
вместе с методом градиентного спуска (GD)

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

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[a] G:

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

where v is spherically symmetric.



[a] I suggest a nice presentation about gradient-free methods

Пример: безградиентный градиентный спуск

Рассмотрим следующую задачу оптимизации

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

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[a] G:

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

2.

where v is spherically symmetric.

[a] I suggest a nice presentation about gradient-free methods

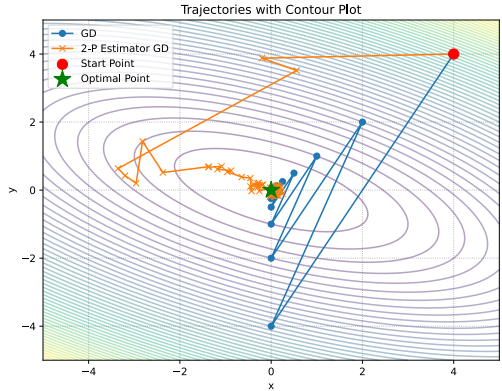


Рис. 4: ``Illustration of two-point estimator of Gradient Descent''

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:

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

2d

$e_i = (0, 0, \ldots, 1, 0, 0)$ — i-ая поз

Open In Colab ♣

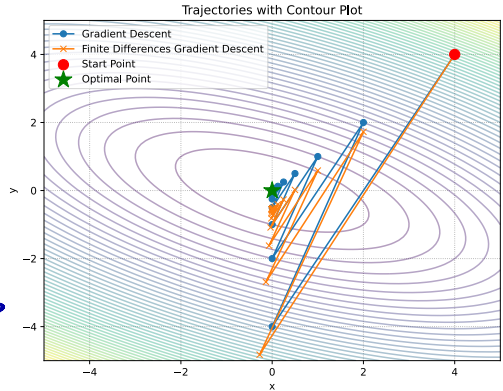


Рис. 5: ``Illustration of finite differences estimator of Gradient Descent''

Проклятие размерности методов нулевого порядка

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

Проклятие размерности методов нулевого порядка

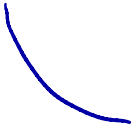
$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$

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

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



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

GD: $x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$ 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	$\|\nabla f(x_k)\|^2 \approx \mathcal{O}\left(\frac{d}{k}\right)$	$f(x_k) - f^* \approx \mathcal{O}\left(\frac{d}{k}\right)$	$\|x_k - x^*\|^2 \approx \mathcal{O}\left(\left(1 - \frac{\mu}{dL}\right)^k\right)$