Tomáš Oberhuber

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering
Czech Technical University in Prague

Výpočet derivací

- derivace mnoha ztrátových funkcí nebo funkcionálů lze snadno napočítat ručně
- v řadě případů může být ztrátová funkce příliš složitá na ruční derivování
- pak lze použít některou z následujících metod
  - konečné diference – *finite differencing*
  - automatické derivování – *automatic differentiation*
  - symbolické derivování – *symbolic differentiation*
    - například programy Mathematica, Maple, Macsyma nebo Ginac
    - v této přednášce se symbolickým derivováním zabývat nebudeme

Konečné diference

- derivace lze nahrazovat pomocí konečných diferencí
- příkladem je dopředná diference pro aproximaci první derivace

$$\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_i} \approx \frac{f(\vec{x} + \epsilon \vec{e}_i) - f(\vec{x})}{\epsilon},$$

  pro $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, kde $\vec{e}_i$ je i-tý bazický vektor
- funkci f je tedy potřeba vyčíslit dvakrát
- otázkou je zde hlavně volba parametru ϵ
  - čím menší ϵ zvolíme, tím přesnější aproximaci dostaneme
  - když ϵ zvolíme příliš malé, můžeme narazit na přesnost počítačové aritmetiky

Připomeneme si definici množiny čísel s pohyblivou desetinnou čárkou s konečnou přesností:

Definition 1

Definujeme **množinu čísel s pohyblivou desetinou čárkou** jako

$$\mathbb{F}\left(\beta, t, L, U\right) \equiv \{0\} \cup \left\{ x \in \mathbb{R} \mid x = (-1)^s \beta^e \sum_{i=1}^{t} a_i \beta^{-i} \right\},$$

kde $\beta \in \mathbb{N}, \beta > 1$ určuje základ rozvoje $t \in \mathbb{N}, t > 0$ určuje počet významných cifer, a pro exponent $e \in \mathbb{N}$ platí $L \leq e \leq U$.

Definition 2

Číslo $u = \beta^{-t-1}$ se označuje jako **zaokrouhlovací jednotky** (*unit roundoff*). Někdy se také označuje jako **strojové epsilon** (*machine epsilon*).

Lemma 3

Pro libovolné reálné číslo $x \in [\beta^L, \beta^U]$ *platí*

$$fl(x) = x(1+\delta) \text{ kde } |\delta| \leq u,$$

kde $fl(\cdot)$ *značí projekci čísla* x *na nejbližší číslo z množiny* $\mathbb{F}$.

Remark 4

Číslo u nám tedy vyjadřuje relativní chybu, které se dopouštíme při zaokrouhlování, tj. při projekci reálných čísel do množiny $\mathbb{F}$. Tato relativní chyba se vztahuje k velikosti čísla x.

- Pro jednoduchou přesnost je $u = 1.19 \cdot 10^{-7}$.
- Pro dvojitou přesnost je $u = 2.22 \cdot 10^{-16}$.

Konečné diference

Nechť $|f(\vec{x})| \leq L_f$ na okolí bodu x. Pak platí

$$
\begin{aligned}
|fl(f(\vec{x})) - f(\vec{x})| &\leq uL_f, & (1)\\
|fl(f(\vec{x} + \epsilon\vec{e}_i)) - f(\vec{x} + \epsilon\vec{e}_i)| &\leq uL_f. & (2)
\end{aligned}
$$

- Z Taylorova rozvoje dále dostáváme

$$f(\vec{x}+\vec{p}) = f(\vec{x}) + \nabla f(\vec{x})\vec{p} + \frac{1}{2}\vec{p}^T\nabla^2 f(\vec{x}+\xi\vec{p})\vec{p},$$

  kde $\xi \in (0,1)$.
- Pokud je $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$, pak existuje C takové, že

$$\left\|\nabla^2 f(\vec{x})\right\| < C$$

  pro všechna $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$.
- A potom platí

$$\left\|f(\vec{x}+\vec{p}) - f(\vec{x}) - \nabla f(\vec{x})\vec{p}\right\| \leq \frac{C}{2}\left\|p\right\|^2. \qquad (3)$$

Konečné diference

- Volbou $\vec{p} = \epsilon \vec{e}_i$ dostáváme

$$\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_i} \approx \frac{f(\vec{x} + \epsilon \vec{e}_i) - f(\vec{x})}{\epsilon} + \delta_\epsilon,$$

  kde

$$|\delta_\epsilon| \leq \frac{C}{2} \left\| \epsilon \vec{e}_i \right\| = \frac{C\epsilon}{2},$$

- pro správnou volbu ϵ potřebujeme nyní vzít v úvahu zaokrouhlovací chyby.

Konečné diference

- Nyní tedy budeme sledovat zaokrouhlovací chyby vzniklé při výpočtu konečné diference
$$\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_i} = \frac{f(\vec{x} + \epsilon \vec{e}_i) - f(\vec{x})}{\epsilon} + \delta_\epsilon.$$
- Platí
$$fl(f(\vec{x})) = f(\vec{x})(1 + \delta) \Leftrightarrow fl(f(\vec{x})) - f(\vec{x}) = f(\vec{x})\delta,$$
kde $|\delta| \leq u$.
- A tedy
$$|fl(f(\vec{x})) - f(\vec{x})| \leq L_f|\delta| \leq L_f u$$
- podobně lze ukázat i
$$|fl(f(\vec{x} + \epsilon\vec{e}_i)) - f(\vec{x} + \epsilon\vec{e}_i)| \leq L_f|\delta| \leq L_f u.$$

- Celkem je tedy

$$\left| fl\left(\frac{f(\vec{x}+\epsilon\vec{e}_i)-f(\vec{x})}{\epsilon}\right) - \frac{f(\vec{x}+\epsilon\vec{e}_i)-f(\vec{x})}{\epsilon}\right| \leq 2\frac{uL_f}{\epsilon}$$

- a pro chybu aproximace platí

$$\left|\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_i} - fl\left(\frac{f(\vec{x}+\epsilon\vec{e}_i)-f(\vec{x})}{\epsilon}\right)\right| \leq$$
$$\left|\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_i} - \frac{f(\vec{x}+\epsilon\vec{e}_i)-f(\vec{x})}{\epsilon}\right| + \left|\frac{f(\vec{x}+\epsilon\vec{e}_i)-f(\vec{x})}{\epsilon} - fl\left(\frac{f(\vec{x}+\epsilon\vec{e}_i)-f(\vec{x})}{\epsilon}\right)\right| \leq$$
$$\delta_\epsilon + 2\frac{uL_f}{\epsilon} \leq 2\frac{uL_f}{\epsilon} + \frac{C\epsilon}{2}.$$

- Dále lze ukázat, že

$$\arg\min_\epsilon \left(\frac{uL_f}{\epsilon} + \frac{C\epsilon}{2}\right) = \sqrt{\frac{4L_f u}{C}}.$$

Konečné diference

- Volíme tedy
$$\epsilon \approx u^{\frac{1}{2}}.$$
- Podobně lze dokázat, že pro centrální diferenci tvaru
$$\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_i} \approx \frac{f(\vec{x} + \epsilon \vec{e}_i) - f(\vec{x} - \epsilon \vec{e}_i)}{\epsilon} + O(\epsilon^2)$$
je vhodné volit
$$\epsilon \approx u^{\frac{1}{3}}.$$

Výpočet Jakobiánů

- Buď $\vec{f} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, chceme napočítat Jakobián

$$\mathbb{J}_{\vec{f}}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \nabla f_1(\vec{x}) \\ \vdots \\ \nabla f_m(\vec{x}) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m,n}.$$

- Pomocí konečné diference

$$\frac{\vec{f}(\vec{x} + \epsilon \vec{e}_i) - \vec{f}(\vec{x})}{\epsilon} \approx \frac{\partial \vec{f}(\vec{x})}{\partial x_i} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\vec{x})}{\partial x_i} \\ \vdots \\ \frac{\partial f_m(\vec{x})}{\partial x_i} \end{pmatrix}$$

získáme jeden sloupec celého Jakobiánu.

Výpočet Jakobiánů

- Jednou perturbací ve směru $\vec{e}_i$ lze tedy napočítat jeden sloupec.
- Celkem tedy musíme vyčíslit hodnoty

$$\vec{f}(\vec{x}), \vec{f}(\vec{x} + \epsilon\vec{e}_1), \ldots, \vec{f}(\vec{x} + \epsilon\vec{e}_n),$$

  tj. celkem $(n + 1)\times$ vyčíslit funkci $\vec{f}$.
- Všechna vyčíslení jsou na sobě nezávislá a lze je případně provést paralelně.

Výpočet Jakobiánů

- V případě některých metod, jako *inexact Newton method*, se nepočítá inverze Jakobiánu, ale Jakobián se vždy aplikuje na určitý vektor $\vec{p}$.
- Pak lze použít přímo vztah

$$\mathbb{J}_{\vec{f}}(\vec{x})\vec{p} \approx \frac{\vec{f}(\vec{x} + \epsilon\vec{p}) - \vec{f}(\vec{x})}{\epsilon}.$$

- Funkci $\vec{f}$ pak vyčíslujeme pouze dvakrát a šetříme paměť, protože Jakobián nemusíme ukládat v paměti explicitně.

Výpočet řídkého Jakobiánů

- V některých úlohách může být Jakobián řídký.
- Například u takto definované funkce

$$\vec{f}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} 2(x_2^3 - x_1^2) \\ 3(x_2^3 - x_1^2) + 2(x_3^3 - x_2^2) \\ \vdots \\ 3(x_i^3 - x_{i-1}^2) + 2(x_{i+1}^3 - x_i^2) \\ \vdots \\ 3(x_{n-1}^3 - x_{n-2}^2) + 2(x_n^3 - x_{n-1}^2) \\ 3(x_n^3 - x_{n-1}^2) \end{pmatrix}.$$

Výpočet řídkého Jakobiánů

- Jakobián pak má následující tridiagonální vzor nenulových prvků

$$\begin{pmatrix} * & * & & & & \\ * & * & * & & & \\ & * & * & * & & \\ & & * & * & * & \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{pmatrix}.$$

Výpočet řídkého Jakobiánů

- Zvolme například $n = 6$, pak je

$$\vec{f}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} -2x_1^2 & 2x_2^3 & & & & \\ -3x_1^2 & 3x_2^3 - 2x_2^2 & 2x_3^3 & & & \\ & -3x_2^2 & 3x_3^3 - 2x_3^2 & 2x_4^3 & & \\ & & -3x_3^2 & 3x_4^3 - 2x_4^2 & 2x_5^3 & \\ & & & -3x_4^2 & 3x_5^3 - 2x_5^2 & 2x_6^3 \\ & & & & -3x_5^2 & 3x_6^3 - 2x_6^2 \end{pmatrix}.$$

- Pro výpočet $\frac{\partial \vec{f}}{\partial x_1}$ musíme napočítat perturbaci $\vec{f}(\vec{x} + \epsilon \vec{e}_1)$.

Výpočet řídkého Jakobiánů

- Perturbace vektorem $\epsilon\vec{e}_1$ ovlivní pouze první dvě složky f_1 a f_2

$$\frac{\partial\vec{f}(\vec{x})}{\partial x_1} \approx \begin{pmatrix} \frac{f_1(\vec{x}+\epsilon\vec{e}_1)-f_1(\vec{x})}{\epsilon} \\ \frac{f_2(\vec{x}+\epsilon\vec{e}_1)-f_2(\vec{x})}{\epsilon} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

- Perturbace vektorem $\epsilon\vec{e}_4$ zase ovlivní pouze složky f_3, f_4 s f_5

$$\frac{\partial\vec{f}(\vec{x})}{\partial x_4} \approx \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{f_3(\vec{x}+\epsilon\vec{e}_4)-f_3(\vec{x})}{\epsilon} \\ \frac{f_4(\vec{x}+\epsilon\vec{e}_4)-f_4(\vec{x})}{\epsilon} \\ \frac{f_5(\vec{x}+\epsilon\vec{e}_4)-f_5(\vec{x})}{\epsilon} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Výpočet řídkého Jakobiánu

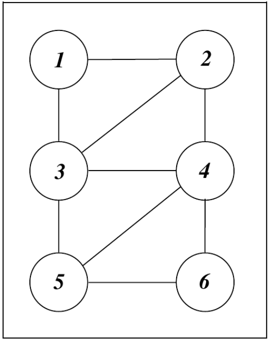
- Pokud tedy napočítáme perturbaci vektorem $\epsilon\vec{p} = \epsilon(\vec{e}_1 + \vec{e}_4)$, dostaneme vektor

$$\nabla\vec{f}\vec{p} = \begin{pmatrix} \frac{f_1(\vec{x}+\epsilon(\vec{e}_1+\vec{e}_4))-f_1(\vec{x})}{\epsilon} \\ \frac{f_2(\vec{x}+\epsilon(\vec{e}_1+\vec{e}_4))-f_2(\vec{x})}{\epsilon} \\ \frac{f_3(\vec{x}+\epsilon(\vec{e}_1+\vec{e}_4))-f_3(\vec{x})}{\epsilon} \\ \frac{f_4(\vec{x}+\epsilon(\vec{e}_1+\vec{e}_4))-f_4(\vec{x})}{\epsilon} \\ \frac{f_5(\vec{x}+\epsilon(\vec{e}_1+\vec{e}_4))-f_5(\vec{x})}{\epsilon} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{f_1(\vec{x}+\epsilon(\vec{e}_1))-f_1(\vec{x})}{\epsilon} \\ \frac{f_2(\vec{x}+\epsilon(\vec{e}_1))-f_2(\vec{x})}{\epsilon} \\ \frac{f_3(\vec{x}+\epsilon(\vec{e}_4))-f_3(\vec{x})}{\epsilon} \\ \frac{f_4(\vec{x}+\epsilon(\vec{e}_4))-f_4(\vec{x})}{\epsilon} \\ \frac{f_5(\vec{x}+\epsilon(\vec{e}_4))-f_5(\vec{x})}{\epsilon} \\ 0 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\vec{x})}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f_2(\vec{x})}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f_3(\vec{x})}{\partial x_4} \\ \frac{\partial f_4(\vec{x})}{\partial x_4} \\ \frac{\partial f_5(\vec{x})}{\partial x_4} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

- První dvě složky tedy odpovídají prvnímu sloupci Jakobiánu a složky 3, 4 a 5 odpovídají čtvrtému sloupci Jakobiánu.

Výpočet řídkého Jakobiánů

- Abychom zjistili, které perturbace lze vzájemně kombinovat, sestrojíme si incidenční graf.
- Pro funkci $\vec{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ má tento graf n uzlů.
- Mezi uzly i a k vede hrana právě když existuje f_j, které závisí na x_i a x_k.
- V grafu pak napočítáme vrcholové obarvení.
- Každé barvě pak lze přiřadit jeden perturbační vektor.



J. Nocedal, S. J. Wright, Numerical Optimization, Springer, 2006.

Výpočet Hessiánu

- Mějme funkci $f \in C^2(\mathbb{R}^n;\mathbb{R})$ a chceme napočítat Hessián $\nabla^2 f(\vec{x}) \in \mathbb{R}^{n,n}$.
- Lze postupovat stejně jako při výpočtu Jakobiánu funkce $\nabla f(\vec{x})$.
- Hessián je však symetrický a díky numerickým chybám může být symetrie porušena.
- Někdy se proto vyplatí provést průměrování příslušných transponovaných prvků.
- Pokud potřebujeme výsledný Hessián pouze aplikovat na určitý vektor $\vec{p}$, pak si lze opět pomoci konečnou diferencí, tj.

$$\nabla^2 f(\vec{x})\vec{p} \approx \frac{\nabla f(\vec{x} + \epsilon\vec{p}) - \nabla f(\vec{x})}{\epsilon}.$$

Výpočet Hessiánu

- Hessián lze také počítat podle vztahu

$$\frac{\partial^2 f(\vec{x})}{\partial x_i \partial x_j} \approx \frac{f(\vec{x} + \epsilon\vec{e}_i + \epsilon\vec{e}_j) - f(\vec{x} + \epsilon\vec{e}_i) - f(\vec{x} + \epsilon\vec{e}_j) + f(\vec{x})}{\epsilon^2} + O(\epsilon).$$

- Tento postup vyžaduje celkem

$$\frac{n(n-1)}{2} + 2n + 1 = O(n^2)$$

vyčíslení funkce f.

Výpočet řídkého Hessiánu

- V řadě úloh může být Hessián řídký. Pak lze použít podobný postup jako pro výpočet řídkého Jakobiánu aplikovaný na $\nabla f(\vec{x})$.
- Obecně je potřeba sestrojit adjacenční graf o n uzlech.
- Uzly i a j, $i \neq j$ jsou spojené hranou pokud platí

$$\frac{\partial^2 f(\vec{x})}{\partial x_i \partial x_j} \neq 0.$$

- Následně hledáme obarvení, kde každé dva uzly spojené hranou mají různou barvu a každá cesta v grafu délky tři obsahuje alespoň tři barvy.

T. F. Coleman, J. J. Moré, *Estimation of sparse hessian matrices and graph coloring problems*, Mathematical Programming vol. 28, pp. 243–270, 1984.

Automatické derivování

- Pod tímto názvem se rozumí postupy pro derivování funkcí vyjádřených ve formě výpočetního kódu.
- Výpočet každé funkce lze rozdělit jako posloupnost několika základních operacích.
- Stačí pak odvodit derivace těchto základních operací.
- Dále se využívá pravidlo pro derivaci složené funkce – *chain rule*

$$\nabla_{\vec{x}} h(y(\vec{x})) = \sum_{i=i}^{m} \frac{\partial h}{\partial y_i} \nabla y_i(\vec{x}),$$

pro $y : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m, h : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$.

Automatické derivování

Existují dva základní přístupy:

- **dopředný** – *forward*,
- **zpětný** – *reverse*.

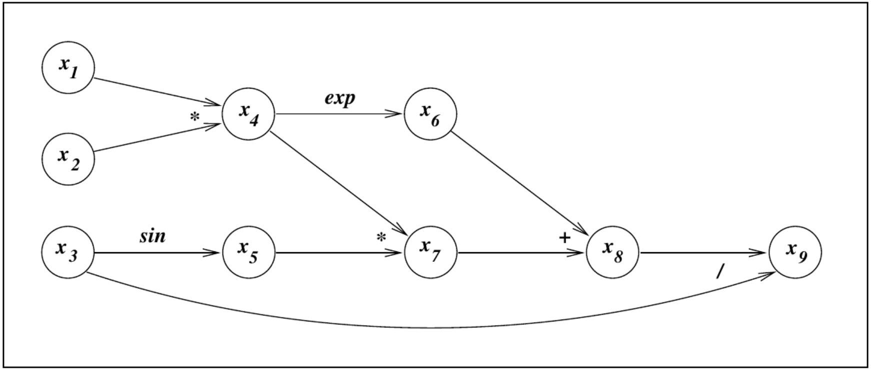
Předvedeme si je na následujícím příkladu:

$$f(\vec{x}) = \frac{x_1 x_2 \sin(x_3) + \exp(x_1 x_2)}{x_3}.$$

To lze vyhodnotit takto:

$$\begin{aligned}
x_4 &= x_1 x_2, \\
x_5 &= \sin(x_3), \\
x_6 &= \exp(x_4), \\
x_7 &= x_4 x_5, \\
x_8 &= x_6 + x_7, \\
x_9 &= x_8 / x_3.
\end{aligned}$$

Vyčíslení lze také vyjádřit pomocí následujícího grafu:



J. Nocedal, S. J. Wright, Numerical Optimization, Springer, 2006.

Dopředný mód

- Cílem je vypočítat směrovou derivaci funkce f ve směru $\vec{p} \in \mathbb{R}^n$
  - $n = 3$ v našem příkladu.
- Toho lze dosáhnout tak, že budeme postupně napočítávat

$$D_{\vec{p}} x_i = \nabla x_i \cdot \vec{p} = \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial x_i}{\partial x_j} p_j \text{ pro } i = 1, 2, \ldots 9,$$

  kde

$$\nabla x_i = \left(\frac{\partial x_i}{\partial x_1}, \frac{\partial x_i}{\partial x_2}, \frac{\partial x_i}{\partial x_3} \right).$$

- Platí totiž

$$D_{\vec{p}} f = D_{\vec{p}} x_9$$

Dopředný mód

- Snadno vidíme, že platí

$$\begin{pmatrix} \nabla x_1 \\ \nabla x_2 \\ \nabla x_3 \end{pmatrix} \vec{p} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \vec{p} = \vec{p},$$

tj.

$$\begin{pmatrix} D_{\vec{p}} x_1 \\ D_{\vec{p}} x_2 \\ D_{\vec{p}} x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} = \vec{p}.$$

Dopředný mód

Dále dostáváme ($x_4 = x_1 x_2$)

$$\begin{aligned} \nabla x_4 &= \frac{\partial x_4}{\partial x_1}\nabla x_1 + \frac{\partial x_4}{\partial x_2}\nabla x_2 \\ &= x_2 \nabla x_1 + x_1 \nabla x_2 \end{aligned}$$

a tedy

$$\begin{aligned} D_{\vec{p}} x_4 &= \frac{\partial x_4}{\partial x_1} D_{\vec{p}} x_1 + \frac{\partial x_4}{\partial x_2} D_{\vec{p}} x_2 \\ &= x_2 D_{\vec{p}} x_1 + x_1 D_{\vec{p}} x_2 . \end{aligned}$$

Podobně

$$\begin{aligned} x_5 = \sin(x_3) \quad &\Rightarrow \quad D_{\vec{p}} x_5 = \frac{\partial x_5}{\partial x_3} D_{\vec{p}} x_3 = \cos(x_3) D_{\vec{p}} x_3 \\ x_6 = \exp(x_4) \quad &\Rightarrow \quad D_{\vec{p}} x_6 = \frac{\partial x_6}{\partial x_4} D_{\vec{p}} x_4 = \exp(x_4) D_{\vec{p}} x_4 \\ x_7 = x_4 x_5 \quad &\Rightarrow \quad D_{\vec{p}} x_7 = \frac{\partial x_7}{\partial x_4} D_{\vec{p}} x_4 + \frac{\partial x_7}{\partial x_5} D_{\vec{p}} x_5 \\ &\qquad = x_5 D_{\vec{p}} x_4 + x_4 D_{\vec{p}} x_5 \\ x_8 = x_6 + x_7 \quad &\Rightarrow \quad D_{\vec{p}} x_8 = \frac{\partial x_8}{\partial x_6} D_{\vec{p}} x_6 + \frac{\partial x_8}{\partial x_7} D_{\vec{p}} x_7 \\ &\qquad = D_{\vec{p}} x_6 + D_{\vec{p}} x_7 \\ x_9 = x_8 / x_3 \quad &\Rightarrow \quad D_{\vec{p}} x_9 = \frac{\partial x_9}{\partial x_8} D_{\vec{p}} x_8 + \frac{\partial x_9}{\partial x_3} D_{\vec{p}} x_3 \\ &\qquad = \frac{1}{x_3} D_{\vec{p}} x_8 - \frac{x_8}{x_3^2} D_{\vec{p}} x_3 \end{aligned}$$

Dopředný mód

- Výpočetně se vše provádí tak, že pro každou proměnnou u si program pro AD napočítává i příslušnou derivaci $D_{\vec{p}}u$.
- To pak použije, pokud je to potřeba pro výpočet směrových derivací odvozených proměnných.
- Na příkladu
$$z := \frac{w}{y} \quad \rightarrow \quad D_{\vec{p}}z := \frac{1}{y}D_{\vec{p}}w - \frac{w}{y^2}D_{\vec{p}}y.$$
- vidíme, že výpočet derivace může vyžadovat násobně více operací.
- Pokud chceme napočítat gradient ∇f, musíme vše provádět souběžně pro n vektorů
$$\vec{p} = \vec{e}_1, \ldots, \vec{e}_n.$$
- Celkově může tak počet potřebných operací a místo v paměti výrazně narůst

Dopředný mód

- Dopředný mód může být implementovaný jako:
  - součást překladače,
  - formou precompileru,
  - pomocí přetížení operátorů v C++ – autodiff.

Zpětný mód

- V tomto režimu nevyčíslujeme gradient souběžně s funkcí samotnou.
- Místo toho nejprve vyčíslíme kompletně funkci f a následně dopočítáváme gradient.
- Ve zpětném módu využíváme pomocné proměnné $\tilde{x}_i$ asociované z každým uzlem výpočetního grafu.
- Tyto proměnné se někdy označují jako adjungované – *adjoint*.
- Vycházíme opět ze vztahu pro derivování složené funkce

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \sum_{j \in potomek(j)} \frac{\partial f}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial x_i}.$$

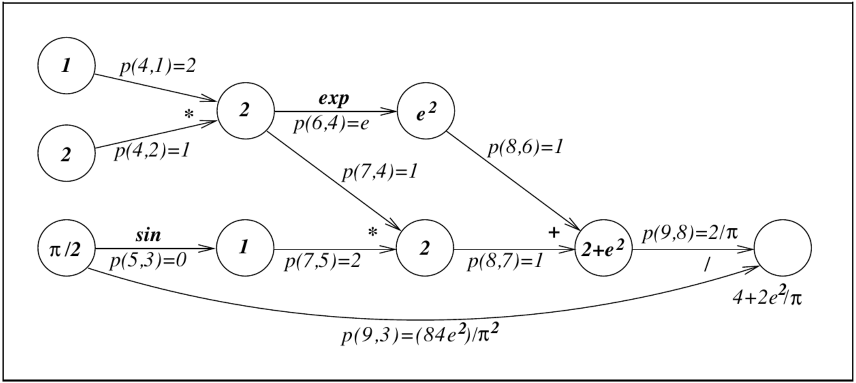
- Pro každou proměnnou $\tilde{x}_i$ provádíme update

$$\tilde{x}_i + = \frac{\partial f}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial x_i}$$

jakmile jsou jednotliví členové celé sumy známé.

Zpětný mód

Zpětný mód si předvedeme na předchozím příkladu v bodě $\vec{x} = (1, 2, \pi/2)$



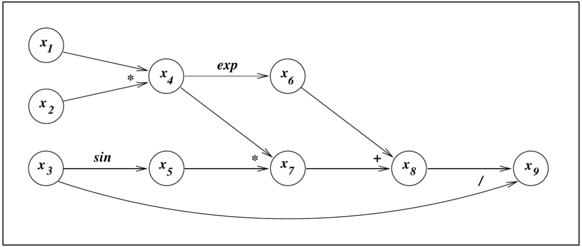
J. Nocedal, S. J. Wright, Numerical Optimization, Springer, 2006.

Zpětný mód

- Nejprve inicializujeme všechny adjungované proměnné $\tilde{x}_i = 0$.
- Pouze u poslední platí $\tilde{x}_9 = 1 = \frac{\partial f}{\partial x_9}$, kde $x_9 = f$.

- Uzel 9 závisí na uzlech 8 a 3
- Vidíme, že

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial x_8} &= \frac{\partial f}{\partial x_9}\frac{\partial x_9}{\partial x_8},\\
\frac{\partial f}{\partial x_3} &= \frac{\partial f}{\partial x_9}\frac{\partial x_9}{\partial x_3} + \underbrace{\frac{\partial f}{\partial x_5}}_{\text{neznáme}}\frac{\partial x_5}{\partial x_3}.
\end{aligned}
$$



- Dostáváme

$$\tilde{x}_8 = \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_8} + = \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_9}\frac{\partial x_9(\vec{x})}{\partial x_8} = \tilde{x}_9 \frac{1}{x_3} = 1 \cdot \frac{1}{\pi/2} = \frac{2}{\pi},$$

$$\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_3} + = \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_9}\frac{\partial x_9(\vec{x})}{\partial x_3} = 1 \frac{-x_8}{x_3^2} = -\frac{2+e^2}{(\pi/2)^2} = \frac{-8-4e^2}{\pi^2}.$$

- Uzel 3 má za potomka uzel 5, takže ještě není plně vyřešen.
- Uzel 8 již jiného potomka nemá, můžeme ho tedy označit za vyřešený.
- Díky znalosti uzlu 8 můžeme pokročit k uzlům 6 a 7.

- Dostáváme ($x_8 = x_6 + x_7$)

$$\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_6} = \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_8}\frac{\partial x_8(\vec{x})}{\partial x_6},$$
$$\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_7} = \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_8}\frac{\partial x_8(\vec{x})}{\partial x_7}$$

a tedy

$$\tilde{x}_6 = \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_6} + = \tilde{x}_8 \cdot 1 = \frac{2}{\pi},$$
$$\tilde{x}_7 = \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_7} + = \tilde{x}_8 \cdot 1 = \frac{2}{\pi}$$

- Oba uzly 6 a 7 jsou nyní již kompletní.

- Dále napočítáme uzly 4 ($x_6 = \exp(x_4), x_7 = x_4 x_5$) a 5 ($x_7 = x_4 x_5$)

$$\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_4} = \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_6}\frac{\partial x_6(\vec{x})}{\partial x_4} + \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_7}\frac{\partial x_7(\vec{x})}{\partial x_4},$$
$$\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_5} = \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_7}\frac{\partial x_7(\vec{x})}{\partial x_5}$$

a tedy

$$\tilde{x}_4 = \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_4} + = \tilde{x}_6 \exp x_4 + \tilde{x}_7 x_5 = \frac{2}{\pi}e^2 + \frac{2}{\pi} \cdot 1$$
$$\tilde{x}_5 = \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_5} + = \tilde{x}_7 x_4 = \frac{2}{\pi} \cdot 2.$$

- Nakonec můžeme už dopočítat $\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_1} &= \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_4}\frac{\partial x_4}{\partial x_1} \text{ ze vztahu } (x_4 = x_1 x_2),\\
\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_2} &= \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_4}\frac{\partial x_4}{\partial x_2} \text{ ze vztahu } (x_4 = x_1 x_2),\\
\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_3} &= \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_5}\frac{\partial x_5}{\partial x_3} \text{ ze vztahu } (x_5 = \sin(x_3)),
\end{aligned}$$

a tedy

$$\begin{aligned}
\tilde{x}_1 &= \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_1} = \tilde{x}_4 x_2 = \frac{2}{\pi}\left(e^2 + 1\right) \cdot 2,\\
\tilde{x}_2 &= \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_2} = \tilde{x}_4 x_1 = \frac{2}{\pi}\left(e^2 + 1\right) \cdot 1,\\
\tilde{x}_3 &= \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_3} + = \tilde{x}_5 \cos(x_3) = \frac{4}{\pi}\cos(\frac{\pi}{2}) = 0.
\end{aligned}$$

Zpětný mód

- Nesmíme ale zapomenout na původní hodnotu $\tilde{x}_3 = \frac{-8-4e^2}{\pi^2}$.
- Celkem tedy platí

$$\nabla f(\vec{x}) = \left(4\frac{e^2+1}{\pi}, 2\frac{e^2+1}{\pi}, -4\frac{2+e^2}{\pi^2}\right).$$

Zpětný mód

- Můžeme si všimnout, že výpočet se hodně podobá algoritmu zpětné propagace (*backpropagation*)
- Výsledkem zpětného módu je gradient funkce f.
- Směrové derivace pak lze snadno počítat ze znalosti gradientu.
- Dále si všimneme, že u dopředného módu jsme potřebovali pomocnou proměnnou pro každou složku gradientu.
- Počet operací a paměťová náročnost je tedy úměrná dimenzi gradientu (pokud nebudeme počítat jednu složku po druhé).
- U zpětného chodu na velikosti gradientu nijak nezáleží.
- Proto je zpětný chod výhodnější.
- Nevýhoda zpětného chodu je nutnost udržovat v paměti výpočetní graf, který může zabírat také hodně paměti.
- Implementace v C/C++ např. ADOL-C.

Omezení automatického derivováni

- Ukazuje se, že AD může být náchylné na zaokrouhlovací chyby vznikající pro numerických výpočtech jako je např. řešení parciálních diferenciálních rovnic pomocí FDM, FVM nebo FEM.
- Další překážkou mohou být podmínky v kódu.
- Např. tento kód pro (bizární) výpočet funkce $f(x) = x - 1$

```
if( x == 1.0 )
        f = 0.0
else
        f = x - 1.0;
```

- Výsledek AD bude, že $f'(1) = 0$.

Zdroje

Další zdroje:

1. www.autodiff.org
2. juliadiff.org
3. A. G. Baydin, B. A. Pearlmutter, A. A. Radul, J. M. Siskind, *Automatic differentiation in machine learning: a survey*, Journal of Marchine Learning Research, vol. 18, pp. 1–43, 2018.