

Posudek disertační práce

Jan Hartman
„Automatické derivování“

1. Aktuálnost řešené problematiky

Při řešení nejrůznějších úloh vyskytujících se v mnoha oblastech matematiky, fyziky či průmyslu, se velmi často setkáváme s úlohou spočítat derivaci, gradient, Jacobiho či Hessovu matici zadané funkce nebo zobrazení. Vzhledem k tomu, že se jedná o poměrně složitý problém, není jednoduché vyvinout rychlé a spolehlivé algoritmy. Předložená disertační práce se zabývá automatickým derivováním, což je jeden z možných způsobů efektivního výpočtu derivací. Podíváme-li se na seznam použité literatury, napočítáme celkem 19 položek (včetně dvou knih), které jsou rovnoměrně rozloženy od 80. let minulého století do současnosti. Více než polovina z nich pojednává o automatickém derivování, z čehož vyplývá, že zkoumaná problematika je aktuální. Zbývajících sedm položek jsou autorovy výzkumné zprávy nebo příspěvky do sborníků publikované buď samostatně nebo ve spoluautorství. Najdeme zde rovněž jeden článek zasláný do Kybernetiky. Disertant se proto ve své práci zabýval důležitými problémy zasluhujícími v současné době velkou pozornost.

2. Obsah práce

V úvodu práce jsou nejprve zmíněny tři možnosti výpočtu derivace funkce f v zadaném bodě. Užití poměrných diferencí nebo symbolická derivace skýtají řadu nevýhod, zatímco automatické derivování má spoustu výhodných vlastností, mezi které patří přesnost spočtené derivace a rychlost výpočtu. V první kapitole jsou popsány vlastnosti a způsoby výpočtu první derivace pomocí přímého a zpětného módu. Přímým módem získáme, kromě funkční hodnoty, jednotlivé parciální derivace v zadaném bodě, zatímco pomocí zpětného módu spočítáme celý gradient. Dále je uvedeno zobecnění pro výpočet druhých a vyšších derivací a způsoby implementace automatického derivování v jazycích C++ a Fortran 77. V dalších kapitolách je automatické derivování implementováno do interaktivního systému UFO, což je jedním z hlavních cílů této práce. Proto je nejprve ve druhé kapitole systém UFO stručně popsán a ve třetí kapitole je ukázáno, jak je provedena vlastní implementace automatického derivování do tohoto systému. Konečně v závěrečné kapitole je princip automatického derivování zobecněn také pro některé nehladké funkce.

3. Přínos disertace

Hlavním přínosem disertační práce je implementace technik automatického derivování do systému UFO, což považují za velice záslužnou činnost. Kromě hladkých funkcí autor implementoval také nehladké funkce maximum a absolutní hodnota, které se v systému UFO často vyskytují. Dále oceňuji ucelené a téměř vyčerpávající zpracování technik automatického derivování. Se zájmem jsem si pročetl konkrétní způsob implementace automatického derivování (kapitola 1.6) a také vyzdvihuji uvedení jednoduchých příkladů během výkladu, čímž autor přispěl k jeho lepšímu pochopení.

4. Zpracování disertace

Autor zpracoval danou problematiku automatického derivování velmi podrobně a s rutinou, čímž značně přispěl k rozvoji tohoto oboru. Text je srozumitelný, doplňovaný ilustrativním příkladem a lze ho využít i jako studijní materiál. V práci jsem nenašel podstatné chyby, avšak na mnoha místech jsou překlepy a různé nedostatky. Na většinu z nich poukazuji dále. Je škoda, že práce není napsána pečlivěji s odstraněním těchto chyb, neboť potom by byla pro čtenáře ještě srozumitelnější a přehlednější. Uvítal bych, kdyby bylo uvedeno více literatury a vyzdvižení vlastního přínosu autora v teoretické oblasti.

5. Připomínky a otázky k diskusi

Při pročítání textu jsem si postupně dělal poznámky, které mají rozmanitý charakter. Jsou to především různé nejasnosti, nepřesnosti a náměty k diskusi, jejichž výčet uvádím. Nejprve však musím upozornit, že autor ve své práci často a nevhodně používá slůvko „tedy“.


1. Co je výhodnější pro výpočet gradientu: zpětný mód nebo přímý mód s postupným dosazováním $\dot{x} = e_i$, $i = 1, \dots, n$? Při použití zpětného módu, kdy je lepší použít postup odvození z pravidla řetězení a kdy postup odvození z přímého módu?
2. Vektor (v_{1-n}, \dots, v_l) je třeba uložit. Pokud máme složitější vyjádření funkce f , jak velká může být jeho dimenze?
3. Kolik operátorů (*, /, ...) a elementárních funkcí (sin, cos, exp, log, ...) celkem se uvažuje?
4. Str. 26 dole – autor zde příliš často a zbytečně používá slovo „transformace“.
5. Str. 32 dole, 33 nahoře – co znamená „dlouhé pole“ a jaká „úsporná opatření“ má autor na mysli pro velké úlohy?
6. Autor má tendenci používat nestejně značení indexů. Např. na str. 33 a 55 nahoře autor uvádí proměnnou/pole VBAR, ve které jsou uloženy hodnoty \bar{v}_i , viz vztah (1.4). Když to porovnáme se vztahem (1.4), zjistíme, že jsou prohozené indexy i a j . Takových příkladů jsem našel v práci více. Působí to nepřehledně a zmatečně.
7. Na str. 43 chybí INTEGER LNGARR, na str. 44-45 u jednotlivých funkcí a subroutine RVRSWP chybí předání hodnoty LNGARR a deklarace proměnných LNGARR, IARG1, IARG2, VALUE, INDARR a parametrů CONV, BMULTV, SINV, ...
8. Str. 46, poslední odstavec – autor se zmiňuje o efektivnějších technikách výpočtu derivací pro řídké matice. Určitě by bylo vhodné uvést nějakou citaci.
9. Kapitola 2 – nestačilo by číslování podkapitol 2.1, 2.2, atd. namísto 2.1.1, 2.1.2, atd.?
10. Jaký je důvod omezení na obsah proměnných FMODEL, FMODEL, FMODEL uvedené v kapitole 3.2? Autor uvádí „Aby implementace automatického derivování nebyla příliš komplikovaná.“ Tento důvod se mi zdá poněkud obecný a nicneříkající.
11. Str. 55, 56, 70 – autor uvádí výčet polí „V, VDOT, OPCODE, ARG1, ARG2“, správně má být „V, VBAR, OPCODE, ARG1, ARG2“. Kromě toho, na str. 55 chybí vysvětlení polí VDOT, VBARDT, které je prvně uvedeno až o 3 strany dále.
12. Str. 58 na konci kapitoly 3.4.1 – autor uvádí „... pomocí procedur MKCNST(X(1)) a MKCNST(X(2))“. Správně má být „... pomocí procedur MKINDP(X(1)) a MKINDP(X(2))“.
13. V kapitole 3.4.2 se počítají druhé derivace (horní trojúhelník symetrické Hessiany matice), takže dimenze HF je $n(n+1)/2$. Jak je ošetřen případ, kdy pracujeme s řídkými maticemi, takže pole HF obsahuje pouze nenulové (a diagonální) prvky Hessiany matice?
14. Str. 63, ř. 5 – správně má být „UZADD2.I“
15. Str. 63 - kroky 3.4 – za „UZADF1.I, resp. UZADF2.I“ by mělo být doplněno „(UZADA1.I, UZADA2.I, UZADC1.I, UZADC2.I).“
16. Příklad (3.1) si autor vymyslel nebo je odněkud převzatý?
17. Str. 65, popis k obrázku 3.3 – správně má být „FGMODELA“.
18. Str. 74 uprostřed – není jasné, co je „svazek hodnot“ y_j a jak získáme y_{k+1} z bodu x_{k+1} ?
19. Literatura, položka [20] – uvedený odkaz učebního textu *Základy nehladké analýzy* již neplatí, text existuje jako Technická zpráva V-808, ICS AS CR, Praha 2000.
20. Literatura, položka [22] – správně má být Technická zpráva V-930.
21. Zajímalo by mě vymezení osobního přínosu disertanta a společné práce týmu.

Závěrem bych uvedl jednu kritickou poznámku. Dva krátké příklady uvedené na konci třetí a čtvrté kapitoly, které porovnávají pouze čas, je poněkud málo. U příkladu 4.4.3 autor uvádí dosažené časy s přesností na desetitisícinu sekundy, což při výsledných časech řádově 0,06 sekundy však nevypovídá o efektivitě použití automatického derivování. Je škoda, že autor neuvedl více srovnávacích experimentů na celé sady příkladů (např. z [19]), kde bychom viděli porovnání spočtené funkční hodnoty, dosaženého gradientu, počtu iterací a výsledného času. Lépe by vynikly výhody (či nevýhody pro konkrétní příklady) automatického derivování.

6. Závěr

Předložená disertační práce představuje ucelené zpracování tematiky vymezené názvem doplněné o implementaci nových technik do systému UFO. Přes některé nedostatky si zaslouhuje vysoké ocenění, splňuje požadavky na kvalitní práci a prokazuje předpoklady autora k samostatné vědecké práci.

V Praze dne 19.11.2008



RNDr. Ctírad Matonoša, Ph.D.
Ústav Informatiky AV ČR, v.v.i.
Pod Vodárenskou věží 2
182 07 Praha 8

