Машинное обучение. Выпуклые задачи. Регуляризация и стабильность

Алексей Колесов

Белорусский государственный университет

11 октября 2017 г.

План

- рассмотреть класс выпуклых задач
- показать, какие выпуклые задачи допускают (эффективное) решение
- рассмотреть понятия «регуляризация» и «стабильность»

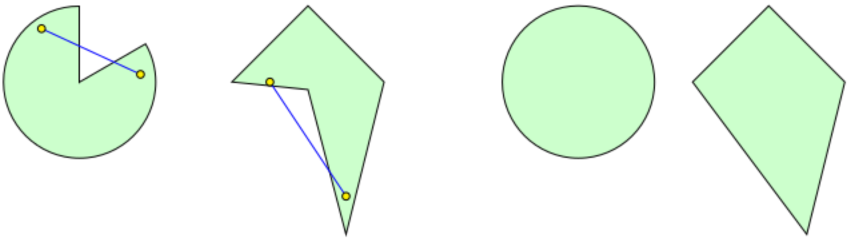
Содержание

Выпуклое множество

Выпуклое множество

Подмножество C векторного пространства называется **выпуклым** (convex), если для любых u, v из C отрезок, соединяющий эти два вектора тоже лежит в C. Т.е. $\forall\alpha \in [0, 1]$ вектор $\alpha u + (1 - \alpha)v \in C$

Примеры



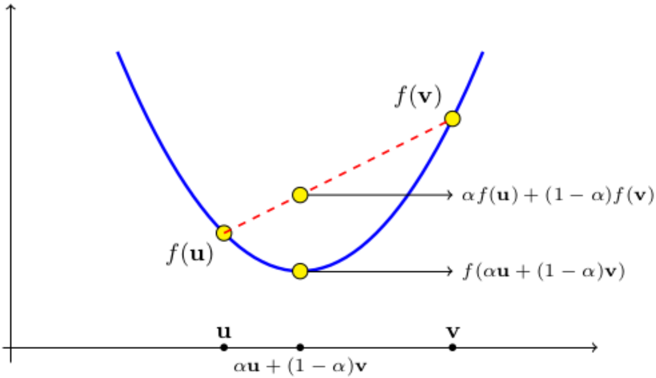
Выпуклая функция

Выпуклая функция

Пусть C — выпуклое множество. Тогда функция f называется **выпуклой** (convex), если для любых двух векторов u, v из C график f лежит под отрезком, соединяющим $f(u)$ и $f(v)$. Т.е, для $\forall u, v \in C$ и $\forall \alpha \in [0, 1]$:

$$f(\alpha u + (1 - \alpha)v) \leqslant \alpha f(u) + (1 - \alpha)f(v)$$

Пример


$f(\mathbf{v})$
$\alpha f(\mathbf{u}) + (1-\alpha) f(\mathbf{v})$
$f(\mathbf{u})$
$f(\alpha\mathbf{u} + (1-\alpha)\mathbf{v})$
$\mathbf{u}$
$\mathbf{v}$
$\alpha\mathbf{u} + (1-\alpha)\mathbf{v}$

Надграфик

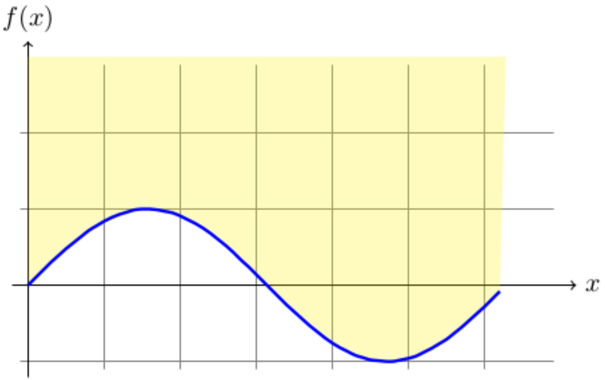
Выпуклая функция

Надграфиком (epigraph) функции называется множество точек, лежащих на или над графиком функции

Лемма о надграфике

Функция f выпукла $\iff$ надграфик f — выпуклое множество

Надграфик



Лемма о минимуме выпуклой функции

Шаром радиуса r и центром в u называют множество точек $B(u,r) = \{v : ||v - u|| \leqslant r\}$

Точка u называется **локальным минимумом** f, если $\exists r > 0$, что для любого $v \in B(u,r)$ выполняется, что $f(v) \geqslant f(u)$

Лемма о минимуме выпуклой функции

Любой локальный минимум выпуклой функции является её глобальным минимумом

Доказательство леммы у минимуме выпуклой функции

Имеем: u — локальный минимум выпуклой f **Хотим**: $\forall v$ $f(v) \geqslant f(u)$

Доказательство: Зафиксируем v

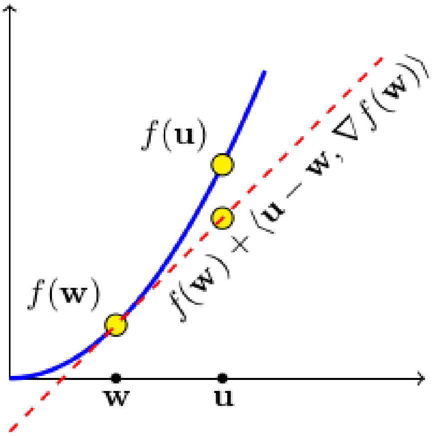
- $\exists \alpha > 0$, такое что $u + \alpha(v - u) \in B(u, r)$
- $f(u) \leqslant f(u + \alpha(v - u))$
- $f(u + \alpha(v - u)) = f(\alpha v + (1 - \alpha)u) \leqslant (1 - \alpha)f(u) + \alpha f(v)$
- $\alpha f(u) \leqslant \alpha f(v)$

Опорные плоскости

- для выпуклой функции f можно **в любой** точке w можно построить касательную плоскость
- (опорная) плоскость будет лежать не выше графика f
- если f дифференцируема, то $l(u) = f(w) + \langle \nabla f(w), u - w \rangle$ — опорная
- $\nabla f(w) = \left(\frac{\partial f(w)}{\partial w_1}, \ldots, \frac{\partial f(w)}{\partial w_d} \right)$

$$\forall u,\ f(u) \geqslant f(w) + \langle \nabla f(w), u - w \rangle$$

Пример


$f(\mathbf{u})$
$f(\mathbf{w})$
$f(\mathbf{w}) + \langle \mathbf{u} - \mathbf{w}, \nabla f(\mathbf{w}) \rangle$
$\mathbf{w}$
$\mathbf{u}$

Критерий выпуклости

Критерий выпуклости

Пусть $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ дважды дифференцируема. Тогда следующие утверждения эквивалентны:

- f выпукла
- f' монотонно не убывает
- $f'' \geqslant 0$

- $f(x) = x^2$ выпукла $\Leftarrow f''(x) = 2 > 0$
- $f(x) = \log(1 + \exp(x))$ выпукла $\Leftarrow$
  $f'(x) = \dfrac{\exp(x)}{1 + \exp(x)} = \dfrac{1}{\exp(-x) + 1}$ возрастает

Лемма о композиции выпуклой и линейной функции

Лемма о композиции выпуклой и линейной функции

Пусть $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ может быть представлена как $f(w) = g(\langle w, x\rangle > +y)$, где $x \in \mathbb{R}^d$, $y \in \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$. Тогда g — выпукла $\Rightarrow f$ — выпукла

$$
\begin{aligned}
f(\alpha w_1 + (1-\alpha)w_2) &= g(\langle \alpha w_1 + (1-\alpha)w_2, x\rangle + y) && (1)\\
&= g(\alpha\langle w_1, x\rangle + (1-\alpha)\langle w_2, x\rangle + y) && (2)\\
&= g(\alpha(\langle w_1, x\rangle + y) + (1-\alpha)(\langle w_2, x\rangle + y)) && (3)\\
&\leqslant \alpha g(\langle w_1, x\rangle + y)) + (1-\alpha) g(\langle w_2, x\rangle + y)) && (4)
\end{aligned}
$$

Примеры

- пусть $x \in \mathbb{R}^d$, $y \in \mathbb{R}$ и $f(w) = (\langle w, x \rangle - y)^2$. Тогда $f(w)$ — выпукла
- пусть $x \in \mathbb{R}^d$, $y \in \{-1; 1\}$, тогда $f(w) = \log(1 + \exp(-y\langle w, x \rangle))$ — выпукла

Лемма о максимуме и сумме выпуклых функций

Лемма о максимуме и сумме выпуклых функций

Пусть для $i = 1, \ldots, r$ $f_i : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ — выпуклые функции. Тогда следующие функции тоже являются выпуклыми:

- $g(x) = \max_{i \in [r]} f_i(x)$
- $\sum_{i=1}^{r} w_i f_i(x)$, где $w_i \geqslant 0$

Например, $f(x) = |x|$ выпукла.

Липшицевость

Липшицевость

Пусть $C \subset \mathbb{R}^d$. Функция $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^k$ называется ρ-липшицева, если для любых w_1, w_2 из C выполняется, $||f(w_1) - f(w_2)|| \leqslant \rho||w_1 - w_2||$

По теореме о среднем значении $f(w_1) - f(w_2) = f'(u)(w_1 - w_2)$, поэтому если $|f'| < \rho$, то функция ρ-липшицева

Примеры

- $f(x) = |x|$ 1-липшицева $\Leftarrow$
  $|x_1| - |x_2| = |x_1 - x_2 + x_2| - |x_2| \leqslant |x_1 - x_2| + |x_2| - |x_2| = |x_1 - x_2|$
- $f(x) = \log(1 + \exp(x))$ 1-липшицева, так как
$$|f'(x)| = |\frac{1}{1 + \exp(-x)}| \leqslant 1$$
- $f(x) = x^2$ на $\mathbb{R}$ не липшицева для любого ρ
- $f(x) = x^2$ на $[-a; a]$ липшицева с $\rho = 2a$
- $f(w) = \langle w, v\rangle + b$ $||v||$-липшицева по неравенству Коши

Лемма о композиции липшицевых функций

Лемма о композиции липшицевых функций

Композиция ρ_1 и ρ_2 липшицевых функций является $(\rho_1 \rho_2)$-липшицевой

Гладкость

Гладкая функция

Дифференцируемая функция $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ называется β-**гладкой** (smooth), если её градиент β-липшицевый, т.е.

$$\forall v, w \text{ выполняется, что } ||\nabla f(w) - \nabla f(v)|| \leqslant \beta||w - v||$$

- для гладкой функции выполняется, $f(v) \leqslant \nabla f(w) + \langle f(w), v - w\rangle + \frac{\beta}{2}||v - w||^2$
- если функция гладкая и неотрицательная, то $||\nabla f(w)||^2 \leqslant 2\beta f(w)$ (самоограниченная)

Примеры

- $f(x) = x^2$ является 2-гладкой ($f'(x) = 2x$)
- $f(x) = \log(1 + \exp(x))$ является $(1/4)$-гладкой (см. $f''(x)$)

Лемма о композиции гладкой и линейной функции

Лемма о композиции гладкой и линейной функции

Пусть $f(w) = g(\langle w, x, \rangle + b)$, причём g является β-гладкой. Тогда f является $(\beta||x||^2)$-гладкой.

- $f(w) = (\langle w, x \rangle + b)^2$ является $(2||x||^2)$-гладкой
- $f(w) = \log(1 + \exp(-y\langle w, x \rangle))$ является $(||x||^2/4)$-гладкой

Определения

Задача выпуклой оптимизации

Задача минимизации выпуклой функции на выпуклом множестве называется **задачей выпуклой оптимизации** (convex optimization problem)

Выпуклая задача машинного обучения

Задача машинного обучения (H, Z, l) называется **выпуклой** (convex learning problem), если множество гипотез H является выпуклым, и l является выпуклой для любого $z \in Z$.

Пример

Рассмотрим линейную регрессию с квадратичной функцией потерь.
Раньше задавали так: $H = \{x \mapsto \langle w, x \rangle, w \in \mathbb{R}^d\}$,
$l(h, (x, y)) = (h(x) - y)^2$
Теперь:

- $H = \mathbb{R}^d$
- $Z = X \times Y = \mathbb{R}^{d+1}$
- $l(w, (x, y)) = (\langle w, x \rangle - y)^2$
- задача — выпукла

Лемма о выпуклых задачах машинного обучения

Лемма о выпуклых задачах машинного обучения

Минимизация эмпирического риска для выпуклой задачи машинного обучения является задачей выпуклой оптимизации

$$\mathrm{ERM}_H(S) = \operatorname*{argmin}_{w \in H} L_S(w) = \operatorname*{argmin}_{w \in H} \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} l(w, z_i)$$

Все ли выпуклые задачи изучаемы

- задача полупространств изучаема в $\mathbb{R}^d$ (VC-теория)
- с помощью «discretization trick» любая задача с d параметрами изучаема
- все задачи $\mathbb{R}^d$ изучаемы?

Не все выпуклые задачи изучаемы

Пусть $H = \mathbb{R}$, $l(w,(x,y)) = (wx - y)^2$.
Возьмём $\epsilon = 1/4$, $\delta = 0.01$, $m \geqslant m(\epsilon,\delta)$, $\mu = \frac{\log(100/99)}{2m}$,
$z_1 = (1,0)$, $z_2 = (\mu,-1)$
Распределения:

$$D_1(x) = \begin{cases} \mu & \text{если } x = z_1 \\ 1-\mu & \text{если } x = z_2 \end{cases}.$$

$$D_2(x) = 1_{x=z_2}$$

- вероятность, что S содержит только z_2 больше 0.99 $((1-\mu) \geqslant e^{-2\mu m} = 0.99)$
- если $A(S) = \overline{w} < -1/(2\mu)$, то $L_{D_1}(\overline{w}) - L_{D_1}(0) = \frac{1}{4\mu} - (1-\mu) > 1/4$
- $\overline{w} \geqslant -1/(2\mu)$, то $L_{D_2}((\overline{}w)) \geqslant 1/4$

Изучаемые классы

Выпукло-липшицево-ограниченная задача

Задача называется **выпукло-липшицево-ограниченной** (convex-lipschitz-bounded) с параметрами ρ, B, если:

- H является выпуклым множеством и $\forall w \in H$, $||w|| \leqslant B$
- $\forall z \in Z$ функция $l(w, z)$ является выпуклой и ρ-липшицевой

Например, пусть $X = \{x \in \mathbb{R}^d : ||x|| < \rho\}$, $Y = \mathbb{R}$, $H = \{w \in \mathbb{R}^d, ||w|| < B\}$ и $l(w,(x,y)) = |\langle w, x\rangle - y|$. Данная задача выпукло-липшицево-ограниченная

Изучаемые классы

Выпукло-гладко-ограниченная задача

Задача называется **выпукло-гладко-ограниченной** (convex-smooth-bounded) с параметрами β, B, если:

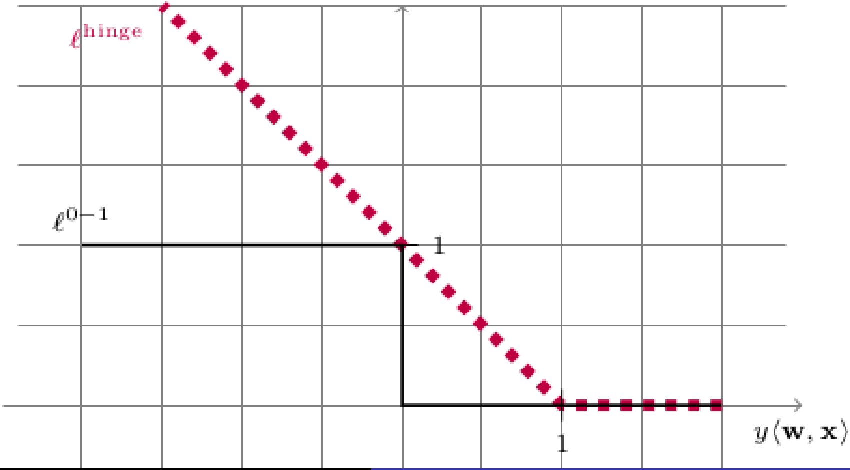
- H является выпуклым множеством и $\forall w \in H$, $||w|| \leqslant B$
- $\forall z \in Z$ функция $l(w, z)$ является выпуклой, **неотрицательной** и β-гладкой

Например, пусть $X = \{x \in \mathbb{R}^d : ||x|| < \beta/2\}$, $Y = \mathbb{R}$, $H = \{w \in \mathbb{R}^d, ||w|| < B\}$ и $l(w,(x,y)) = (\langle w, x\rangle - y)^2$. Данная задача выпукло-липшицево-ограниченная

Суррогатные функции потерь

- интересные функции потерь часто сложно оптимизировать (0-1 loss)
- можно задать функцию
  - выпукла
  - оценка сверху на оригинальную функцию потерь
- оптимизировать верхнюю границу

Hinge-loss



Декомпозиция

Ошибка такой задачи складывается из:

- approximation error — насколько хорош класс
- esitmation error — насколько хорошо решили задачу в неполных данных
- optimization error — насколько велика разница между суррогатной и оригинальной функцией потерь

Содержание

RLM

Будем искать решение вот так:

$$\mathrm{argmin}_w (L_S(w) + R(w))$$

- $R(w)$ может отражать «сложность» гипотезы
- $H = \bigcup_i \{w : R(w) \leqslant i\}$ (см. SRM)
- $R(w) = \lambda ||w||^2$ — регуляризация Тихонова
- гребневая регрессия использует регуляризацию
- выбор регуляризации — наложение prior distribution на w

Стабильность

- интуитивно, если «немного» изменить S, то $A(S)$ должен меняться немного (стабильность)
- если $L_D(A(S)) >> L_S(A(S))$, то есть «переобучение»
- если алгоритм стабилен, то $\mathbb{E}_S[L_D(A(S)) - L_S(A(S))]$ невелико

Определение стабильности

- пусть $S = (z_1, \ldots, z_m) \sim D^m$, $z' \sim D$
- $S^{(i)} = (z_1, \ldots, z_{i-1}, z', z_{i+1}, z_m)$
- замена S на $S^{(i)}$ — «небольшое изменение входа»
- для «хороших» A $l(A(S^{(i)}), z_i) - l(A(S), z_i) \geqslant 0$
- если $l(A(S^{(i)}), z_i) - l(A(S), z_i)$ велико, то «переобучение»

Лемма о «небольшом изменении входа»

Лемма о «небольшом изменении входа»

Пусть $U(m)$ — равномерное распределение над $[m]$. Тогда:

$$\mathop{\mathbb{E}}_{S\sim D^m}[L_D(A(S)) - L_S(A(S))] =$$
$$\mathop{\mathbb{E}}_{(S,z')\sim D^{m+1}, i\sim U(m)}[l(A(S^{(i)}, z_i) - l(A(S), z_i)]$$

- $\mathop{\mathbb{E}}_{S}[L_D(A(S))] = \mathop{\mathbb{E}}_{S,z_i}[l(A(S), z')] = \mathop{\mathbb{E}}_{S,z'}[l(A(S^{(i)}, z_i)]$
- $\mathop{\mathbb{E}}_{S}[L_S(A(S))] = \mathop{\mathbb{E}}_{S,i}[l(A(S), z_i)]$

В среднем стабильный при замене одного объекта алгоритм

В среднем стабильный при замене одного объекта алгоритм

Алгоритм называется **в среднем стабильным при замене одного объекта** (on-average-replace-on-stable), если существует монотонно убывающая $\epsilon : \mathbb{N} \to \mathbb{R}$, такая что

$$\mathop{\mathbb{E}}_{(S,z')\sim D^{m+1}, i\sim U(m)}[l(A(S^{(i)}, z_i) - l(A(S), z_i)] \leqslant \epsilon(m)$$

Стабильность не означает «хорошесть» алгоритма!

План

- стабильные алгоритмы не переобучаются
- докажем, что RLM с регуляризацией Тихонова стабилен
- будем считать, что функция потерь выпукла

Сильная выпуклость

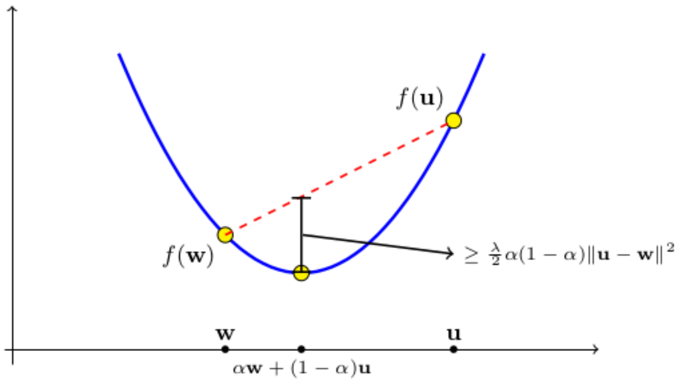
Сильная выпуклость

Функция f называется λ-сильно выпуклой , если для всех u, w и $\alpha \in [0, 1]$ выполняется

$$f(\alpha w + (1-\alpha)u) \leqslant \alpha f(w) + (1-\alpha)f(u) - \frac{\lambda}{2}\alpha(1-\alpha)||w-u||^2$$

Выпуклая функция является 0-сильно выпуклой.

Рисунок


$f(\mathbf{u})$
$f(\mathbf{w})$
$\geq \frac{\lambda}{2}\alpha(1-\alpha)\|\mathbf{u}-\mathbf{w}\|^2$
$\mathbf{w}$
$\mathbf{u}$
$\alpha\mathbf{w} + (1-\alpha)\mathbf{u}$

Лемма о сильно выпуклых функциях

Лемма о сильно выпуклых функциях

1. $f(w) = \lambda||w||^2$ является 2λ-строго выпуклой
2. если f λ-строго выпуклая, а g — выпуклая, то $f+g$ является λ-строго выпуклой
3. если f является λ-строго выпуклая, и u минимизирует $f(u)$, то для любого w выполняется:
$$f(w) - f(u) \geqslant \lambda||w-u||^2$$

$$\frac{f(u+\alpha(w-u)) - f(u)}{\alpha} \leqslant f(w) - f(u) - \frac{\lambda}{2}(1-\alpha)||w-u||^2$$

Рассмотрим предел при $\alpha \to 0$

Регуляризация Тихонова стабилизирует задачу

Рассматриваем:

$$A(S) = \underset{w}{\operatorname{argmin}}(L_S(w) + \lambda||w||^2)$$

$f_S(w) = L_S(w) + \lambda||w||^2$ является 2λ-строго выпуклой и для любого v

$$f_S(v) - f_S(A(S)) \geqslant \lambda||v - A(S)||^2$$

$$\begin{aligned}
f_S(v) - f_S(u) &= L_S(v) + \lambda||v||^2 - (L_S(u) + \lambda||u||^2) && (5)\\
&= L_{S^{(i)}}(v) + \lambda||v||^2 - (L_{S^{(i)}}(u) + \lambda||u||^2) && (6)\\
&+ \frac{l(v, z_i) - l(u, z_i)}{m} + \frac{l(v, z') - l(u, z')}{m} && (7)
\end{aligned}$$

Регуляризация Тихонова стабилизирует задачу

Имеем:

$$f_S(v) - f_S(A(S)) \geqslant \lambda ||v - A(S)||^2$$

$$f_S(v) - f_S(u) = L_{S^{(i)}}(v) + \lambda ||v||^2 - (L_{S^{(i)}}(u) + \lambda ||u|| \tag{8}$$

$$\frac{l(v, z_i) - l(u, z_i)}{m} + \frac{l(v, z') - l(u, z')}{m} \tag{9}$$

Возьмем $v = A(S^{(i)})$, $u = A(S)$ и:

$$f_S(A(S^{(i)}) - f_S(A(S)) \leqslant \frac{l(A(S^{(i)}), z_i) - l(A(S), z_i)}{m} + \frac{l(A(S^{(i)}), z') - l(A(S), z')}{m}$$

$$\lambda ||A(S^{(i)}) - A(S)||^2 \leqslant \frac{l(A(S^{(i)}), z_i) - l(A(S), z_i)}{m} + \frac{l(A(S^{(i)}), z') - l(A(S), z')}{m}$$

Случай липшицевой функции потерь

Если l ρ-липшицева, то

$$l(A(S^{(i)}), z_i) - l(A(S), z_i) \leqslant \rho||A(S^{(i)} - A(S)||$$
$$l(A(S^{(i)}), z') - l(A(S), z') \leqslant \rho||A(S^{(i)} - A(S)||$$

Получаем

$$\lambda||A(S^{(i)}) - A(S)||^2 \leqslant \frac{2\rho||A(S^{(i)} - A(S)||}{m}$$
$$||A(S^{(i)}) - A(S)|| \leqslant \frac{2\rho}{\lambda m}$$
$$l(A(S^{(i)}), z_i) - l(A(S), z_i) \leqslant \frac{2\rho^2}{\lambda m}$$

Регуляризация Тихонова стабилизирует RLM

Лемма о RLM в случае выпукло-липшицево-ограченной задачи

RLM в случае выпукло-липшицево-ограченной задачи является стабильным с $\epsilon(m) = \frac{2\rho^2}{\lambda m}$. Т.е.

$$\mathop{\mathbb{E}}_{S \sim D^m}[L_D(A(S)) - L_S(A(S))] \leqslant \frac{2\rho^2}{\lambda m}$$

Чуть более слабую оценку можно доказать для выпукло-гладко-ограниченных задач

Fitting-stability tradeoff

- чем больше λ, тем стабильней алгоритм, но хуже приближение
- $\mathop{\mathbb{E}}_{S}[L_D(A(S))] = \mathop{\mathbb{E}}_{S}[L_S(A(S))] + \mathop{\mathbb{E}}_{S}[L_D(A(S)) - L_S(A(S))]$
- второе слагаемое соответствует стабильности
- хотим, чтоб сумма была маленькой
- можно находить баланс валидацией

Оценки на эмпирический риск

Оценка на эмпирический риск для липшицевой функции потерь

Если мы используем RLM-алгоритм для липшицевой функции потерь с регуляризацией Тихонова, то:

$$\forall w^*, \mathop{\mathbb{E}}_{S}[L_D(A(S))] \leqslant L_D(w^*) + \lambda||w^*||^2 + \frac{2\rho^2}{\lambda m}$$

Пусть $\lambda = \sqrt{\frac{2\rho^2}{B^2 m}}$, то:

$$\mathop{\mathbb{E}}_{S}[L_D(A(S))] \leqslant \min_{w \in H} L_D(w) + \rho B \sqrt{\frac{8}{m}}$$

Содержание

Итоги

- рассмотрели выпуклость, гладкость, липшицевость фукнций
- показали, что выпуклости недостаточно для изучаемости
- выделили классы выпуклых задач, которые можно решить
- ввели понятие регуляризации и стабильности
- доказали, что стабильные алгоритмы не переобучаются

Литература

- Shai Shalev-Shwartz and Shai Ben-David — Understanding Machine Learning: From theory to algorithms (главы 12,13)