Машинное обучение.
Stochastic gradient descent

Алексей Колесов

Белорусский государственный университет

18 октября 2017 г.

План

- вместо $L_S(h)$ будем пытаться оптимизировать $L_D(h)$
- итеративно: каждый шаг в направлении уменьшения функции
- эффективно для выпуклых задач

Содержание

Общий план алгоритма

- для дифференцируемой $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ **градиентом** называется $\nabla f(w) = \left(\frac{\partial f(w)}{\partial w_1}, \dots, \frac{\partial f(w)}{\partial w_d} \right)$
- итеративный алгоритм:
  - $w^{(1)} = 0$
  - для $\eta > 0$, $w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta \nabla f(w^{(t)})$ (update rule)
  - результат: $\overline{w} = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} w^{(t)}$
- для некоторых классов выпуклых функций доказуемо хорошо работает

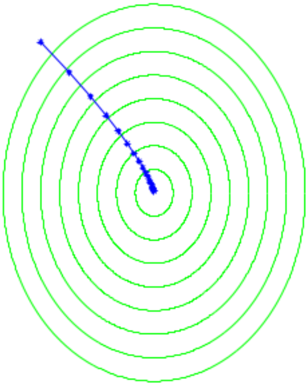
Мотивация update rule

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta \nabla f(w^{(t)})$$

- $-\nabla f(w)$ — направление наибольшего убывания функции в точке w
- $f(u) \approx f(w) + \langle u - w, \nabla f(w) \rangle$, для выпуклых $f(u) \geqslant f(w) + \langle u - w, \nabla f(w) \rangle$
- хотим минимизировать $f(u)$, но не уходить далеко:

$$w^{(t+1)} = \operatorname*{argmin}_w \frac{1}{2}||w - w^{(t)}||^2 + \eta \left(f(w^{(t)}) + \langle w - w^{(t)}, \nabla f(w^{(t)}) \rangle \right)$$

Пример GD



Предположения

- пусть функция f выпуклая и липшицева
- зафиксируем w^*, такой что $||w^*|| \leqslant B$
- оценим $f(\overline{w}) - f(w^*)$

Оценка оптимальности

$$f(\overline{w}) - f(w^*) = f\left(\frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} w^{(t)}\right) - f(w^*) \tag{1}$$

$$\leqslant \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} f(w^{(t)}) - f(w^*) \tag{2}$$

$$= \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T}\left(f(w^{(t)}) - f(w^*)\right) \tag{3}$$

$$\leqslant \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T}\langle w^{(t)} - w^*, \nabla f(w^{(t)})\rangle \tag{4}$$

Лемма о итеративном процессе

Лемма о итеративном процессе

Пусть $v_1, \ldots, v_T$ произвольные векторы. Пусть $w^{(1)} = 0$ и

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta v_t$$

Тогда:

$$\sum_{t=1}^{T} \langle w^{(t)} - w^*, v_t \rangle \leqslant \frac{||w^*||^2}{2\eta} + \frac{\eta}{2} \sum_{t=1}^{T} ||v_t||^2$$

Если $||v_t|| \leqslant \rho$, $||w^*|| \leqslant B$, $\eta = \sqrt{\frac{B^2}{\rho^2 T}}$, то

$$\frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} \langle w^{(t)} - w^*, v_t \rangle \leqslant \frac{B\rho}{\sqrt{T}}$$

Доказательство леммы

Хотим **доказать**:

$$\sum_{t=1}^{T} \langle w^{(t)} - w^*, v_t \rangle \leqslant \frac{||w^*||^2}{2\eta} + \frac{\eta}{2} \sum_{t=1}^{T} ||v_t||^2$$

Рассмотрим одно слагаемое:

$$\langle w^{(t)} - w^*, v_t \rangle = \frac{1}{\eta} \langle w^{(t)} - w^*, \eta v_t \rangle \tag{5}$$

$$= \frac{1}{2\eta} \left(-||w^{(t)} - w^* - \eta v_t||^2 + ||w^{(t)} - w^*||^2 + \eta^2 ||v_t||^2 \right) \tag{6}$$

$$= \frac{1}{2\eta} \left(-||w^{(t+1)} - w^*||^2 + ||w^{(t)} - w^*||^2 \right) + \frac{\eta}{2} ||v_t||^2 \tag{7}$$

Доказательство леммы

Хотим **доказать**:

$$\sum_{t=1}^{T} \langle w^{(t)} - w^*, v_t \rangle \leqslant \frac{||w^*||^2}{2\eta} + \frac{\eta}{2} \sum_{t=1}^{T} ||v_t||^2$$

Распишем:

$$\sum_{t=1}^{T} \left(-||w^{(t+1)} - w^*||^2 + ||w^{(t)} - w^*||^2 \right) \tag{8}$$

$$= ||w^{(1)} - w^*||^2 - ||w^{(T+1)} - w^*||^2 \tag{9}$$

$$\leqslant ||w^{(1)} - w^*||^2 \tag{10}$$

$$= ||w^*||^2 \tag{11}$$

Следствие для выпукло-ограниченно-липшицевых функций

Следствие для выпукло-ограниченно-липшицевых функций

Пусть f выпуклая, ρ-липшицева функция и $w^* \in \mathrm{argmin}_{\{w:||w||\leqslant B\}} f(w)$. Тогда если запустить T итераций GD с $\eta = \sqrt{\frac{B^2}{\rho^2 T}}$, то

$$f(\overline{w}) - f(w^*) \leqslant \frac{B\rho}{\sqrt{T}}$$

Чтобы получить, что $f(\overline{w}) - f(w^*) \leqslant \epsilon$, для $\epsilon > 0$ нужно провести T итераций, где

$$T \geqslant \frac{B^2\rho^2}{\epsilon^2}$$

Содержание

Мотивация

- GD применим только для дифференцируемых функций
- попробуем ослабить требование
- необходимо наличие «опорных плоскостей»

Лемма о выпуклости

Лемма о выпуклости

Пусть S — открытое выпуклое множество. Тогда функция $f : S \to \mathbb{R}$ выпукла тогда и только тогда, когда $\forall w \in S \; \exists v$, такой что

$$\forall u \in S, \; f(u) \geqslant f(w) + \langle u - w, v \rangle$$

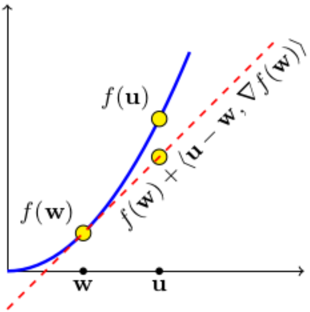
Определение

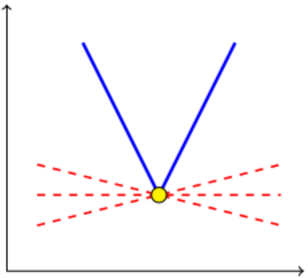
Вектор v, который удовлетворяет

$$\forall u \in S,\ f(u) \geqslant f(w) + \langle u - w, v \rangle$$

называется **субградиентом** (subgradient) функции f в точке w. Множество всех субградиентов f в w называется **субдифференциалом** и обозначается $\partial f(w)$

Пример


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



Вычисление субградиентов

Лемма о субградиенте дифференцируемой функции

Если f дифференцируема в w, то $\partial f(w) = \{\nabla f(w)\}$

Лемма о субградиенте максимума выпуклых функций

Пусть $g(w) = \max_{i \in [r]} g_i(w)$, где g_i — выпуклая дифференцируемая функция. Зафиксируем w и найдём $j \in \operatorname{argmax}_i g_i(w)$. Тогда $\nabla g_j(w) \in \partial g(w)$

Пример

Пусть $f(w) = \max 0, 1 - y\langle w, x\rangle$ — hinge loss. Тогда для любого w можно найти $v \in \partial f$:

$$v = \begin{cases} 0 & \text{если } 1 - y\langle w, x\rangle \leqslant 0 \\ -yx & \text{если } 1 - y\langle w, x\rangle > 0 \end{cases}$$

Субградиент липшицевых функций

Лемма о субградиенте липшицевых функций

Пусть A выпуклое открытое множество и $f : A \to \mathbb{R}$ выпуклая функция. Тогда, f является ρ-липшицевой тогда и только тогда, когда $\forall w \in A$, $\forall v \in \partial f(w)$ выполняется $||v|| \leqslant \rho$

Итоги

- субградиент обобщает градиент
- можно использовать в GD (заменив $\nabla f(w)$ на субградиент)

Содержание

План

- в GD необходимо знать градиент в каждой точке
- будем выбирать случайный вектор, который в среднем будет равен градиенту
- выведем простой способ для задачи МО

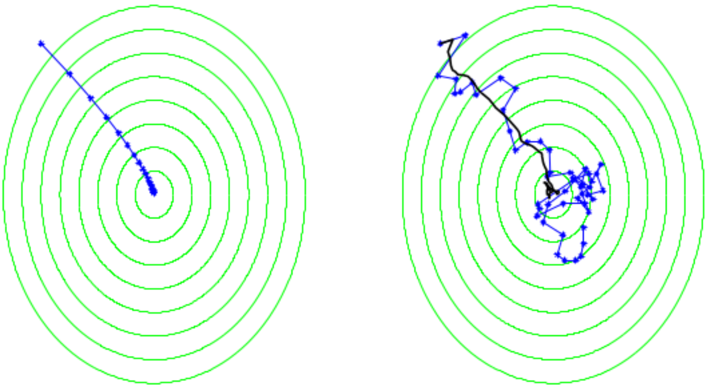
Алгоритм

Алгоритм 1 Stochastic gradient descent для минимизации $f(w)$

Вход: $\eta > 0,\ T > 0$

1: $w^{(1)} = 0$
2: **for** $t = 1, \dots T$ **do**
3: $\quad v_t$ — случайный вектор, т.ч. $\mathbb{E}[v_t | w^{(t)}] \in \partial f(w^{(t)})$
4: $\quad w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta v_t$
5: **end for**
6: **return** $\overline{w} = \sum_{t=1}^{T} w^{(t)}$

Пример



SGD для выпукло-липшицево-ограниченных функций

SGD для выпукло-липшицево-ограниченных функций

Пусть $B > 0$, $\rho > 0$. Пусть f выпуклая функция и $w^* \in \text{argmin}_{\{w:||w||\leqslant B\}} f(w)$. Пусть SGD был запущен на T итерациях с $\eta = \sqrt{\frac{B^2}{\rho^2 T}}$. Кроме того, пусть $\mathbb{P}[||v_t|| \leqslant \rho] = 1$. Тогда:

$$\mathbb{E}[f(\overline{w})] - f(w^*) \leqslant \frac{B\rho}{\sqrt{T}}$$

Проекционный шаг

- в анализе GD и SGD мы требовали, чтоб $||w|| \leqslant B$
- после update rule нет гарантий на $||w||$
- можно добавить проекцию $w^{(t)}$ на допустимое множество

Алгоритм

1. $w^{(t+\frac{1}{2})} = w^{(t)} - \eta v_t$
2. $w^{(t+1)} = \text{argmin}_{w \in H} ||w - w^{(t+\frac{1}{2})}||$

Лемма о проекции

Пусть H замкнутое выпуклое множество и v проекция w на H, т.е. $v = \text{argmin}_{x \in H} ||x - w||^2$. Тогда, для любого $u \in H$:

$$||w - u||^2 \geqslant ||v - u||^2$$

Доказательство леммы

Хотим:

$$||w-u||^2 \geqslant ||v-u||^2$$

Так как H выпукло, то $\forall\alpha \in (0,1)$ $v+\alpha(u-v) \in H$.
Имеем:

$$\begin{aligned} ||v-w||^2 &\leqslant ||v+\alpha(u-v)-w||^2 && (12)\\ &= ||v-w||^2 + 2\alpha\langle v-w, u-v\rangle + \alpha^2||u-v||^2 && (13) \end{aligned}$$

Значит:

$$2\langle v-w, u-v\rangle \geqslant -\alpha||u-v||^2$$
$$\langle v-w, u-v\rangle \geqslant 0$$

Доказательство

Хотим:

$$||w - u||^2 \geqslant ||v - u||^2$$

Имеем:

$$\langle v - w, u - v \rangle \geqslant 0$$

Распишем:

$$\begin{aligned} ||w - u||^2 &= ||w - v + v - u||^2 && (14) \\ &= ||w - v||^2 + ||v - u||^2 + 2\langle v - w, u - v \rangle && (15) \\ &\geqslant ||v - u||^2 && (16) \end{aligned}$$

Справедливость анализа для проецкионной версии

$$||w^{(t+1)} - w^*||^2 - ||w^{(t)} - w^*||^2 \tag{17}$$

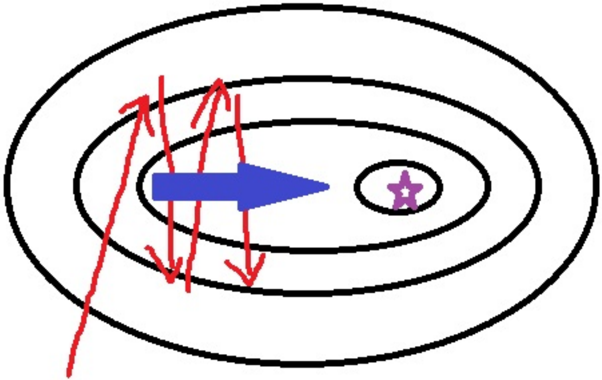
$$= ||w^{(t+1)} - w^*||^2 - ||w^{(t+\frac{1}{2})} - w^*||^2 + ||w^{(t+\frac{1}{2})} - w^*||^2 - ||w^{(t)} - w^*| \tag{18}$$

$$\leqslant ||w^{(t+\frac{1}{2})} - w^*||^2 - ||w^{(t)} - w^*||^2 \tag{19}$$

Переменный размер шага

- чем ближе к оптимуму, тем меньше «должен» быть шаг η
- шаг η можно выбирать отдельно для каждой координаты
- множество других вариаций

SGD with momentum



Выбор ответа

- последний $w^{(T)}$
- $\sum\limits_{t=\lceil \alpha T \rceil}^{T} w^{(t)}$
- лучший по эмпирическому риску

SGD для сильно-выпуклых функций

Сильная выпуклость

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

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

Для λ-сильно выпуклых функций выполняется, что $\forall w, u$ и $\forall v \in \partial f(w)$ выполняется:

$$\langle w-u, v\rangle \geqslant f(w) - f(v) + \lambda||w-u||^2$$

SGD для сильно-выпуклых функций

Алгоритм 2 Stochastic gradient descent для минимизации λ-сильно выпуклой $f(w)$

Вход: $T > 0$

1: $w^{(1)} = 0$
2: **for** $t = 1, \dots T$ **do**
3: v_t — случайный вектор, т.ч. $\mathbb{E}[v_t | w^{(t)}] \in \partial f(w^{(t)})$
4: $\eta_t = 1/(\lambda t)$
5: $w^{(t+\frac{1}{2})} = w^{(t)} - \eta_t v_t$
6: $w^{(t+1)} = \text{argmin}_{w \in H} ||w - w^{(t+\frac{1}{2})}||$
7: **end for**
8: **return** $\overline{w} = \sum_{t=1}^{T} w^{(t)}$

Лемма о SGD для сильно выпуклых функций

Лемма о SGD для сильно выпуклых функций

Пусть f λ-строго выпуклая и $\mathbb{E}[||v_t||^2] < \rho^2$. Тогда для $w^* \in H$ выполняется:

$$\mathbb{E}[f(\overline{w})] - f(w^*) \leqslant \frac{\rho^2}{2\lambda T}(1 + \log(T))$$

Общие замечания

$$L_D(w) = \mathop{\mathbb{E}}_{z \sim D}[l(w, z)]$$

- раньше минимизировали $L_S(w)$
- SGD позволяет минимизировать $L_D(w)$
- не знаем $\nabla L_D(w)$, зато легко построим оценку

Случай дифференцируемой l

- если l дифференцируема, то L_D — тоже
- выберем $z \sim D$
- $v_t = \nabla l(w, z)$ по w в точке $w^{(t)}$

$$\mathbb{E}[v_t | w^{(t)}] = \mathop{\mathbb{E}}_{z \sim D}[\nabla l(w^{(t)}, z)] = \nabla \mathop{\mathbb{E}}_{z \sim D}[l(w^{(t)}, z)] = \nabla L_D(w^{(t)})$$

Случай недифференцируемой l

Вместо градиента возьмём субградиент. Тогда

$$l(u,z) - l(w^{(t)},z) \geqslant \langle u - w^{(t)}, v_t \rangle$$

Тогда:

$$\begin{aligned} L_D(u) - L_D(w^{(t)}) &= \mathbb{E}[l(u,z) - l(w^{(t)})|w^{(t)}] && (20) \\ &\geqslant \mathbb{E}[\langle u - w^{(t)}, v_t \rangle | w^{(t)}] && (21) \\ &= \langle u - w^{(t)}, \mathbb{E}[v_t|w^{(t)}] \rangle && (22) \end{aligned}$$

Поэтому $\mathbb{E}[v_t|w^{(t)}]$ — субградиент $L_D(w)$ и $w^{(t)}$

SGD для минимизации true risk

Алгоритм 3 Stochastic gradient descent для минимизации $L_D(w)$

Вход: $\eta > 0,\ T > 0$

1: $w^{(1)} = 0$
2: **for** $t = 1, \dots T$ **do**
3: выбор $z \sim D$
4: выбор $v_t \in \partial l(w^{(t)}, z)$
5: $w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta v_t$
6: **end for**
7: **return** $\overline{w} = \sum_{t=1}^{T} w^{(t)}$

SGD для выпукло-липшицево-ограниченных задач

SGD для выпукло-липшицево-ограниченных задач

Рассмотрим выпукло-липшицево-ограниченную задачу с параметрами ρ, B. Тогда для любого $\epsilon > 0$, то при запуске SGD на T примерах:

$$T \geqslant \frac{B^2 \rho^2}{\epsilon^2}$$

с $\eta = \sqrt{\frac{B^2}{\rho^2 T}}$, то результат SGD удовлетворяет:

$$\mathbb{E}[L_D(\overline{w})] \leqslant \min_{w \in H} L_D(w) + \epsilon$$

SGD для RLM

$$\min_w \left(\frac{\lambda}{2}||w||^2 + L_S(w)\right)$$

- SGD имеет выборочную сложность не хуже RLM
- RLM может выигрывать у SGD на некоторых D
- $f(w) = \frac{\lambda}{2}||w||^2 + L_S(w)$ — λ-строго выпуклая функция
- $v_t \in \partial l(w^{(t)}, z) \Rightarrow \lambda w^{(t)} + v_t$ — субградиент для f

Содержание

Итоги

- рассмотрели GD, SGD и понятие субградиента
- вывели вариант SGD для регуляризованного риска
- получили способ решать выпукло-липшицево-ограниченные задачи

Литература

- Shai Shalev-Shwartz and Shai Ben-David — Understanding Machine Learning: From theory to algorithms (глава 14)