Análisis Matemático para Inteligencia Artificial

Verónica Pastor (vpastor@fi.uba.ar),
Martín Errázquin (merrazquin@fi.uba.ar)

Especialización en Inteligencia Artificial

14/4/2023

Temario

Optimización en ML

Optimización en ML

Convención: Todos los casos van a asumirse de minimización, sin pérdida de generalidad ya que maximizar f equivale a minimizar $f' = -f$.

Optimización en general: buscamos minimizar $J(\theta)$, tenemos toda la información necesaria disponible.

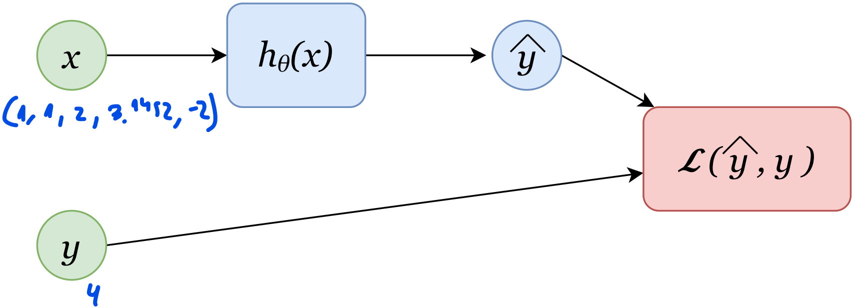
Optimización en ML: buscamos minimizar $J(\theta)$, sólo disponemos de un $\hat{J}(\theta)$ basado en el dataset disponible.

Conclusión: **no** son el mismo problema.

mejor

	θ_1	θ_2
$\downarrow$ J_{TRAIN}	5	1000
$\downarrow$ J_{TEST}	10	1

Aprendizaje supervisado: esquema



Dada una observación (x, y) fija, entonces la predicción $\hat{y} = h_\theta(x)$ depende puramente de los parámetros θ del modelo, y por lo tanto también la pérdida/error.

Para un dataset $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$ fijo, definimos entonces una función de costo $J(\theta)$ que sólo depende de los parámetros del modelo, y queremos minimizarla.

Proxy target/surrogate loss

Denominamos *proxy* o *surrogate* a una función f' que queremos minimizar como *medio* para minimizar otra función f que es la que verdaderamente nos interesa.

El esquema entonces resulta:

- *aprendemos* vía train set $\rightarrow$ *necesitamos* minimizar $J_{train}(\theta)$
- *predecimos* vía test set $\rightarrow$ *queremos* minimizar $J_{test}(\theta)$

Importante: Definida una función de pérdida por observación $\mathcal{L}(\hat{y}, y)$, la función de costo típicamente se define como

$$J(\theta) = \mathbb{E}[\mathcal{L}(\hat{y}, y)]$$

de donde

$$\hat{J}(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathcal{L}(\hat{y}_i, y_i)$$

Ejemplo

Supongamos un caso de clasificación binaria donde definimos la función de pérdida como el *accuracy* o *precisión*, definido como

$$\mathcal{L}(\hat{y}, y) = 1\{\hat{y} \neq y\} \qquad \begin{cases} 1 & \text{si me equivoco} \\ 0 & \text{si acierto} \end{cases} \qquad ✗$$

Como podemos ver, esta función de pérdida es *muy mala* para minimizar.

Planteamos entonces entrenar sobre la *cross-entropy loss*

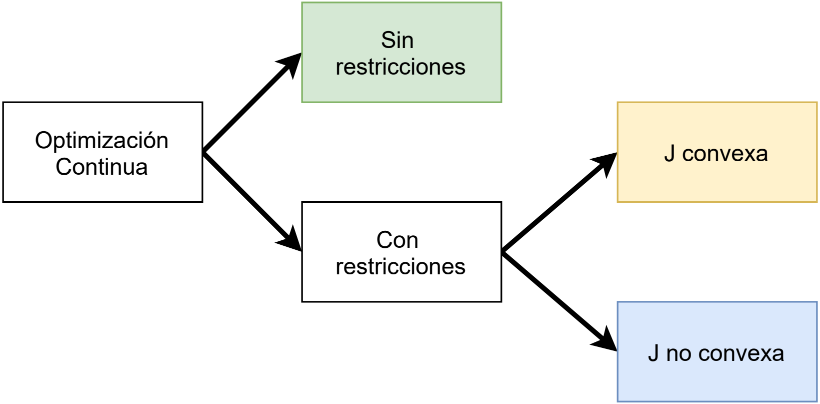
$$\mathcal{L}_{train}(\hat{y}, y) = -y \cdot log(\hat{y}) - (1 - y) \cdot log(1 - \hat{y}) \qquad ✓$$

que nos permite ya no sólo trabajar con $\hat{y} \in \{0, 1\}$ sino todo el rango continuo $[0, 1]$ de probabilidades, además de, especialmente, ser **derivable respecto de** $\hat{y}$.

$$\frac{d\mathcal{L}}{d\hat{y}}$$

Taxonomía

Ahora que nuestro problema es minimizar $J_{train}(\theta)$, podemos separarlo en varios casos:



Opt. sin restricciones

Caso trivial

Analicemos el caso más simple: se conoce la solución analítica.
Ejemplo: modelo lineal con $\hat{y} =< \theta, x >$, matriz de diseño X, vector de targets Y, $\mathcal{L}(\hat{y}, y) = (\hat{y} - y)^2$, entonces el θ óptimo resulta:

$$\theta^* = \arg\min_{\theta} J(\theta) = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

Importante: si ese cálculo nosotros lo realizamos mediante cierto método iterativo en vez de calcularlo directamente es *decisión de implementación* nuestra, la expresión de θ^* ya la tenemos.

Gradient Descent

Δ chico

$J'(\theta_1) > 0 \Rightarrow J(\theta_1+\Delta) > J(\theta_1)$

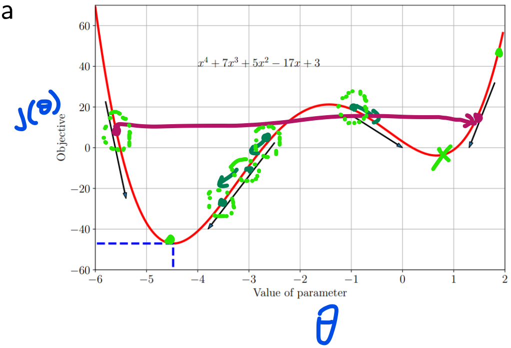
$J'(\theta_2) < 0 \Rightarrow J(\theta_2+\Delta) < J(\theta_2)$

$\Rightarrow$ $J'\uparrow$ $\theta\downarrow$; $J'\downarrow$ $\theta\uparrow$

$\Delta\theta \propto -J'$

¿Qué ocurre si no existe solución analítica? En términos generales, la única estrategia posible es *prueba y error* en forma *iterativa*.

Planteemos el caso de $J(\theta)$, $\theta \in \mathbb{R}$.
En cada punto ¿Cómo saber hacia donde moverme?
- Si J es derivable, J' informa la inclinación de J para cada θ.
- Como mínimo, informa la *dirección de crecimiento* y (en sentido contrario) la *dirección de decrecimiento*



Definición

Sea $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ diferenciable, entonces:

- $\nabla_f(x)^T$ apunta en la dirección de *máximo crecimiento*.
- $-\nabla_f(x)^T$ apunta en la dirección de *máximo decrecimiento*.

Se define entonces el algoritmo de minimización de *descenso por gradiente* (GD) como:

$$x_{t+1} = x_t - \gamma \cdot \nabla_f(x)^T \quad = x_t + \gamma \cdot \left(-\nabla_f(x)^T\right)$$

donde $\gamma > 0$ es el *learning rate*, un valor pequeño que controla *cuánto* moverse por paso.

- Para una sucesión γ_t apropiada está demostrado que GD converge a un mínimo *local*.
- Son dos problemas a resolver:
  - Cómo seleccionar el punto inicial x_0
  - Cómo seleccionar γ (o γ_t)

No GD-based

¿Pausa! ¿Por qué Gradient Descent?

- GD pide muy poco, que f sea diferenciable (y recordemos que nosotros la construimos...)
- GD es una aproximación *lineal*

¿Podemos hacer algo mejor que lineal?

Recordemos el polinomio de Taylor de grado 2 de una función $f(x)$ alrededor de un punto x_t evaluada en un punto $\tilde{x} = x_t + \Delta$ con Δ pequeño:

$$f(\tilde{x}) \approx f(x_t) + f'(x_t)(\tilde{x} - x_t) + \frac{1}{2} f''(x_t)(\tilde{x} - x_t)^2$$

$$f(x_t + \Delta) \approx f(x_t) + f'(x_t)\Delta + \frac{1}{2} f''(x_t)\Delta^2$$

Método de Newton

Para el caso anterior (desarrollo de Taylor de orden 2) el máximo ocurre en $f'(x_t + \Delta^*) = 0$ para $\Delta^* = -\frac{f'(x_t)}{f''(x_t)}$. Luego, el método de Newton plantea:

$$x_{t+1} = x_t - \frac{f'(x_t)}{f''(x_t)}$$

O en su versión multivariada:

$$x_{t+1} = x_t - H^{-1} \nabla_f (x_t)^T$$

Pros:

- Incorpora curvatura para corrección $\rightarrow$ mayor velocidad de convergencia

Cons:

- Newton en particular no converge a mínimo, sino a punto crítico: surgen los *saddle points* como peligro.

- La estimación de Hessiano requiere **muchas** observaciones. Goodfellow compara 10^2 obs. para $\nabla_f(x)$ vs 10^4 para $H^{-1}\nabla_f(x)^T$.

Extensiones

Recapitulación

Queremos seguir utilizando gradient descent (GD/VGD), la idea es proponer adaptaciones del mismo que ataquen los problemas del original, a saber:

- elección de θ_0
- elección de γ_t
- convergencia lenta

Recordemos la expresión de *(Vanilla) Gradient Descent*:

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \gamma \cdot g$$

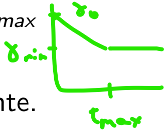
con $g = \nabla_f(\theta_t)$.

LR decay

Idea: al principio está bien aprender de forma agresiva, luego hay que ir *refinando* $\rightarrow \gamma$ decrece con t.

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \gamma_t \cdot g$$

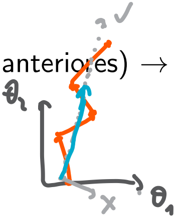
con diferentes opciones de γ_t decreciente, entre ellas:

- polinomial: $\gamma_t = \gamma_0 (\frac{1}{t})^k = \gamma_0 \cdot t^{-k}$ 
- exponencial: $\gamma_t = \gamma_0 (\frac{1}{k})^t = \gamma_0 \cdot k^{-t}$ 
- restringida: $\gamma_t = \begin{cases} (1 - \frac{t}{t_{max}})\gamma_0 + \frac{t}{t_{max}} \gamma_{min} & \text{si } 0 \leq t < t_{max} \\ \gamma_{min} & \text{si } t \geq t_{max} \end{cases}$ 

con hiperparámetros $k, \gamma_0, \gamma_{min}$ menos sensibles que γ constante.

Momentum

Idea: adaptar el γ según consistencia (tener en cuenta steps anteriores) $\rightarrow$ agregar memoria.

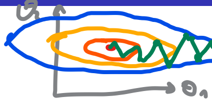


$$\begin{cases} v_t = \alpha v_{t-1} - \gamma \cdot g \\ \theta_{t+1} = \theta_t + v_t \end{cases}$$

- $\alpha \in (0, 1)$ es la *viscosidad* (en términos físicos) o retención de memoria de valores anteriores.

Observar que

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \gamma(g_t + \alpha g_{t-1} + \alpha^2 g_{t-2} + \dots) = \theta_t - \gamma \overbrace{\sum_{i=0}^{t} \alpha^i g_{t-i}}^{g_t}$$



Idea: "reescalar" el gradiente para tener más estabilidad. El reescalamiento se hace a nivel de *feature* para que variaciones grandes sobre un feature no anulen a otros que aún no variaron.

$$\begin{cases} s_t = \lambda s_{t-1} + (1-\lambda) g^2 \\ \theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\gamma}{\sqrt{s_t + \epsilon}} \odot g \end{cases}$$

$\sim \theta_{t+1} = \theta_t - \gamma \cdot \frac{g_t}{\sqrt{s_t}}$

con ^{2} y $\sqrt{}$ aplicados *element-wise*, e.g. $g^2 = g \odot g = (g_1^2, g_2^2, \ldots, g_n^2)$.

- $\lambda \in (0,1)$ es la retención de memoria de valores anteriores.
- $0 < \epsilon \ll 1$ es una constante para estabilidad numérica. Valores típicos rondan 10^{-6}.

Adam

Idea: Momentum y RMSProp hacen cosas distintas y ambas están buenas ¡Mezclemos!

$$
\begin{cases}
v_t = \beta_1 v_{t-1} + (1-\beta_1) g & \leftarrow \text{momentum} \\
s_t = \beta_2 s_{t-1} + (1-\beta_2) g^2 & \leftarrow \text{RMSprop} \\
\left.\begin{array}{l} v'_t = \frac{v_t}{1-\beta_1^t} \\ s'_t = \frac{s_t}{1-\beta_2^t} \end{array}\right\} & \text{reescalado} \\
\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\gamma}{\underbrace{\sqrt{s'_t+\epsilon}}_{\text{RMSprop}}} \odot \underbrace{v'_t}_{\text{mom}} &
\end{cases}
$$

- $\beta_1, \beta_2 \in (0,1)$ son la retención de memoria de valores anteriores de media y variabilidad del gradiente. Valores default son $\beta_1 = 0.99, \beta_2 = 0.999$.
- $0 < \epsilon \ll 1$ es una constante para estabilidad numérica. Valor default es 10^{-8}.

Batch size

Estimación de ∇_f

En todos estos casos estamos partiendo de la base que conocemos *perfectamente* $\nabla_f(\theta)$, pero la realidad es que no. En el mejor de los casos, podemos calcular el promedio sobre las n observaciones del dataset.

El problema: ¿cuántas m observaciones utilizamos para estimar $\nabla_f(\theta)$?

Si recordamos que $\sigma_{\bar{x}} \propto \frac{1}{\sqrt{m}}$, reducir *10x* el error estándar de la estimación requiere *100x* más observaciones. $\rightarrow$ no rinde. Al mismo tiempo, hardware tipo GPU/TPU nos permite procesar múltiples entradas en paralelo.

Se definen 3 enfoques generales:

- stochastic (*): $m = 1$
- **minibatch**: $1 < m \ll n$ según hardware
- batch: $m = n$

(*) Hay un conflicto en la literatura, donde a cualquier $m < n$ se le llama *stochastic*, especialmente dada la preponderancia del esquema de minibatch por sobre los demás.