Машинное обучение и анализ данных

Оптимизация

Дьяконов А.Г.

Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова (Москва, Россия)

Методы оптимизации
(пока безусловная оптимизация)

Методы нулевого порядка / метаэвристики

– используют лишь значения функции

- **Покоординартный спуск**
- **Стохастическая оптимизация**

Методы первого порядка

– используют первые производные

- **Градинтный спуск (+стохастический, наискорейший и т.п.)**
- **Квазиньютоновские методы (BFGS, …)**
- **Stochastic Average Gradient, momentum, Nesterov, …**

Методы второго порядка

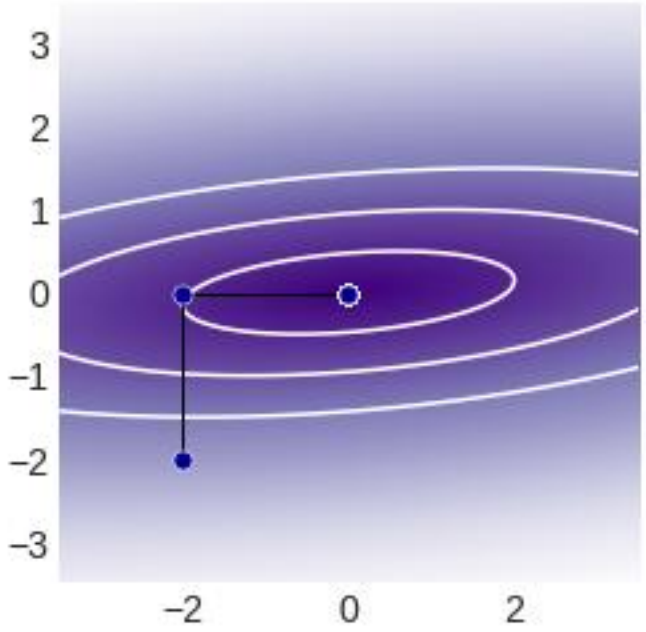
– используют вторые производные

- **Метод Ньютона**

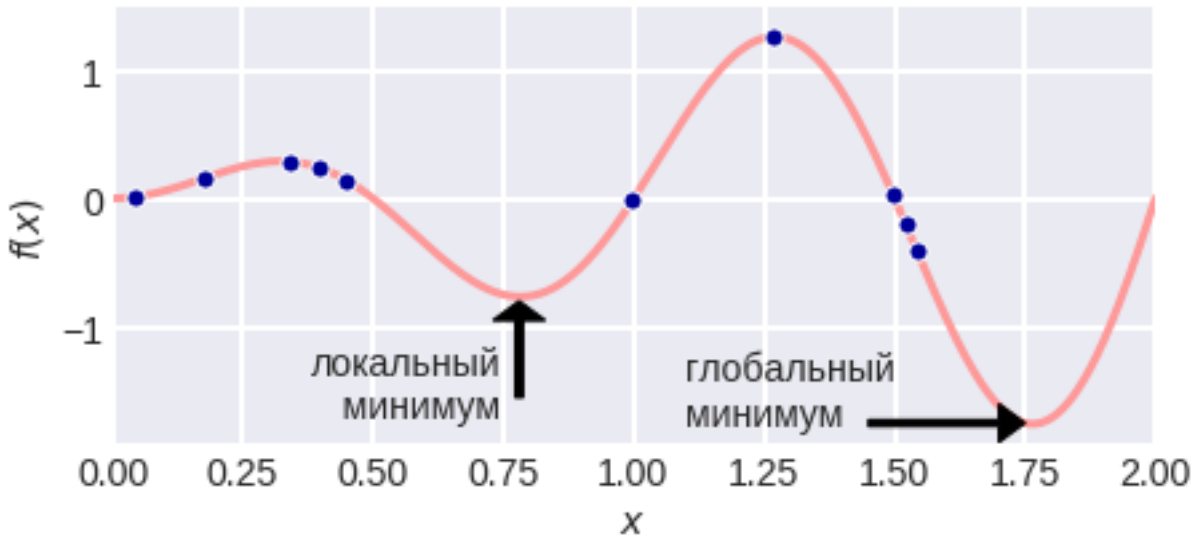
Покоординатный спуск

Перебираем координаты вектора параметров
Оптимизируем по каждой координате (любым способом)

Итерации быстрые, но сходимость медленная
Можно, как и любой метод нулевого порядка, использовать, когда производная не вычисляется



Стохастическая оптимизация



Полный перебор

Направленный перебор

Стохастические алгоритмы

генетические алгоритмы

имитация отжига

когда будем говорить про селекцию

Градиент

$\nabla f(w_0)$ – **направление наискорейшего возрастания функции**

$$f(w) = f(w_0) + (w - w_0)^{\mathrm{T}} \nabla f(w_0) + o(\| w - w_0 \|)$$

$$f(w) - f(w_0) \approx (w - w_0)^{\mathrm{T}} \nabla f(w_0)$$

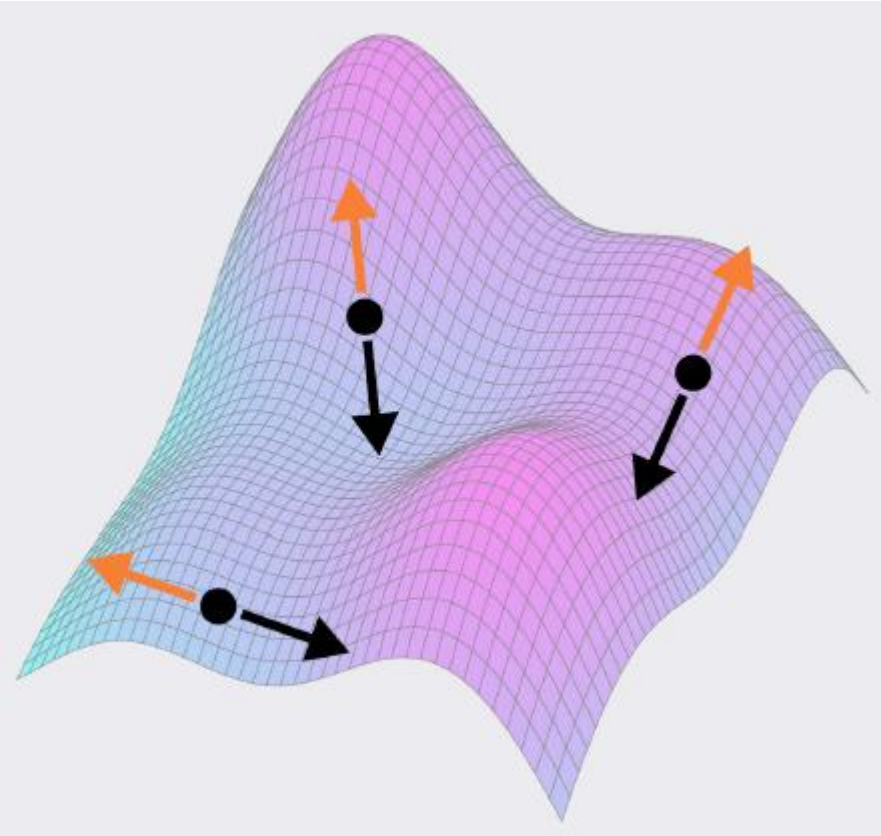
если выбирать из всех векторов $w - w_0$ **единичной нормы,**

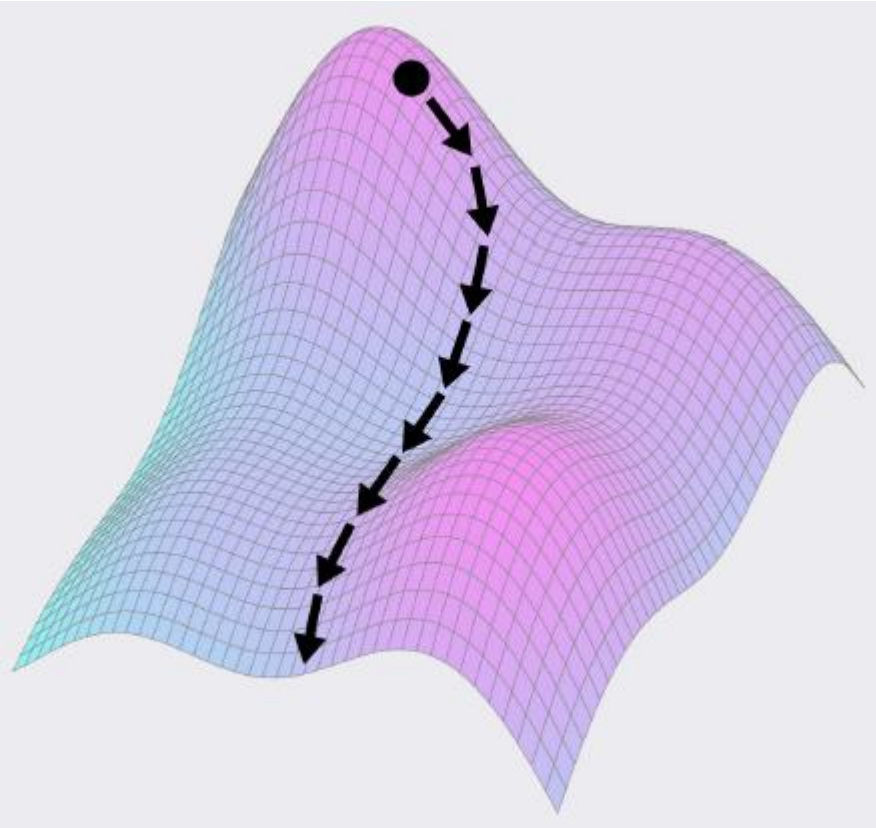
то по неравенству К-Б-Ш

$$|(w - w_0)^{\mathrm{T}} \nabla f(w_0)| \le 1 \| \nabla f(w_0) \| = \frac{\nabla f(w_0)^{\mathrm{T}}}{\| \nabla f(w_0) \|} \nabla f(w_0)$$

Антиградиент $(-\nabla f(w_0))$ **– направление наискорейшего убывания функции**

Градиент и антиградиент





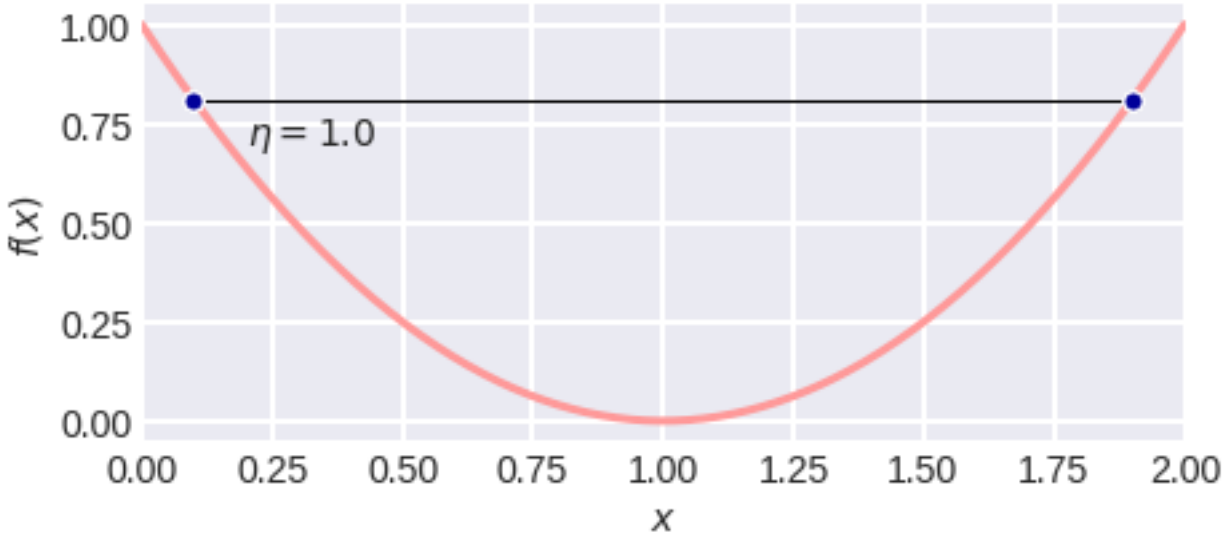
[Glassner]

Градиентный спуск

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

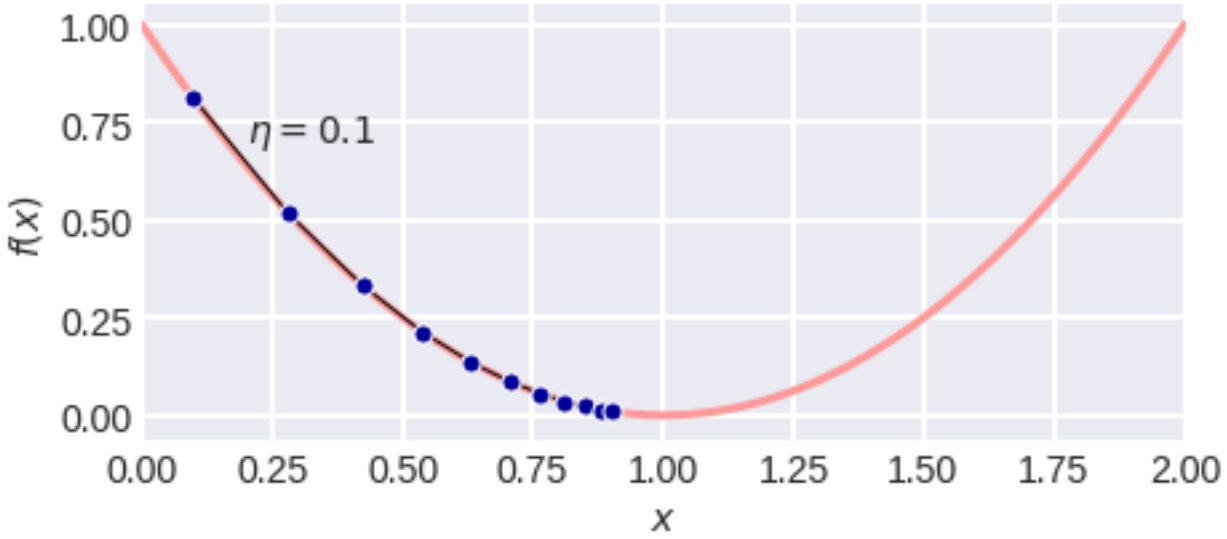
$\eta > 0$ – **шаг / темп обучения (step size / learning rate)**

Хотим $\lim\limits_{t\to\infty} w^{(t)} = \arg\min\limits_{w} L(w)$

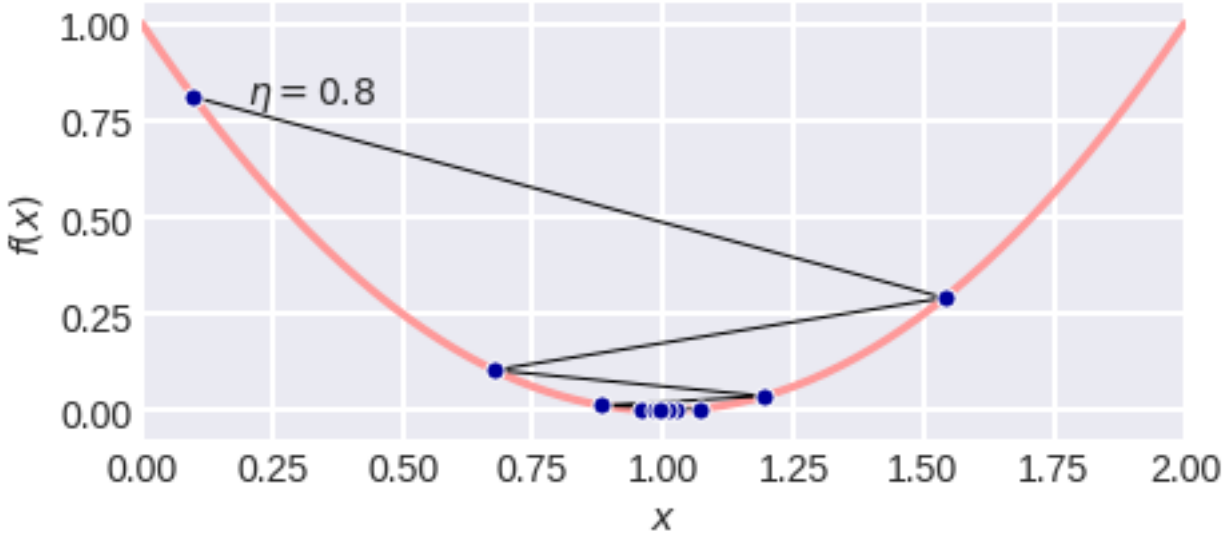


неудачно выбран темп

Градиентный спуск

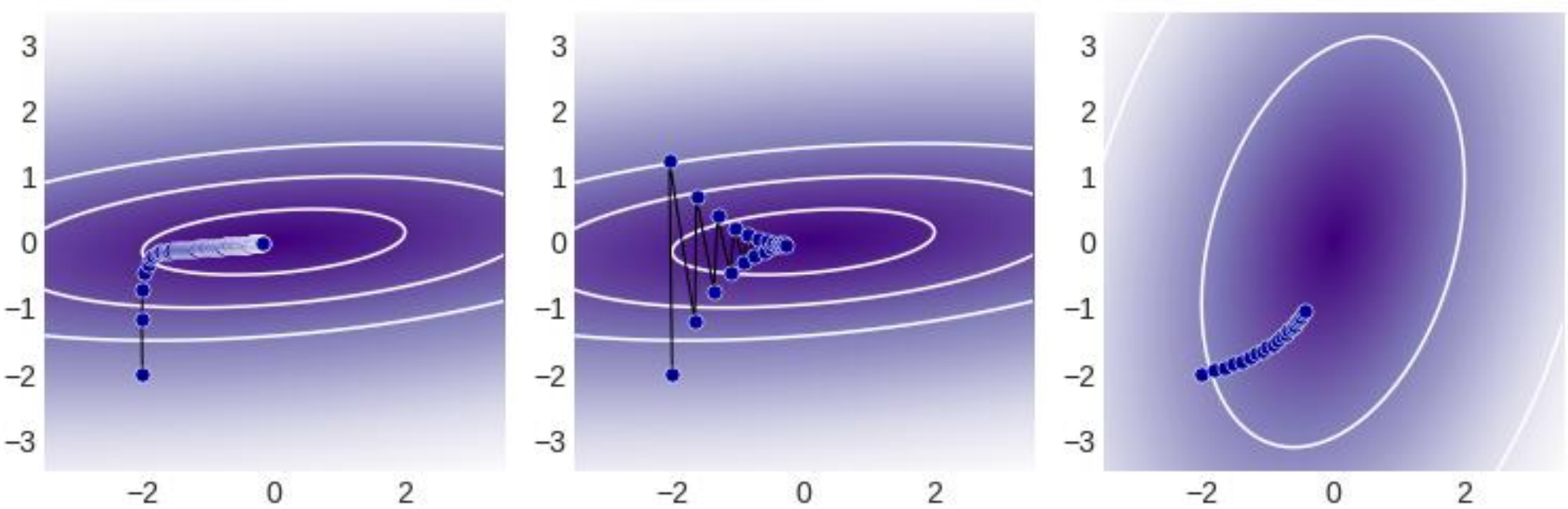


темп, возможно, маленький



темп, возможно, большой

Градиентный спуск



Проблема масштаба признаков

Проблема постоянного шага

Выбор шага – важно!

Большой – можем не сойтись

Маленький – долгая сходимость

Теорема (Для SGD нет теоремы)

Пусть $L: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ **выпукла и дифференцируема,** ∇L **липшецева (Lipschitz continuous) с константой** $\lambda > 0$**:**

$$\| \nabla L(z_1) - \nabla L(z_2) \| \le \lambda \| z_1 - z_2 \|$$

для любых $z_1, z_2 \in \mathbb{R}^d$**. Тогда метод градиентного спуска с фиксированной скоростью** $\eta \le 1/\lambda$ **сходится, в частности,**

$$L(z^{(t)}) - L(z^*) \le \frac{\| z^{(0)} - z^* \|^2}{2\eta t}$$

Переменный шаг

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

Достаточные условия сходимости:

(иногда условия Роббинса-Монро)

$$\sum_{t=1}^{+\infty} \eta^{(t)} = +\infty$$

$$\sum_{t=1}^{+\infty} (\eta^{(t)})^2 < +\infty$$

Пример

$$\eta^{(t)} = \frac{1}{t}$$

Leon Bottou's «Tricks» http://research.microsoft.com/pubs/192769/tricks-2012.pdf

Скорость сходимости

Для выпуклых функций

$$L(w^{(t)}) - \min L(w) \le O\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$$

Для строго выпуклых функций

$$L(w^{(t)}) - \min L(w) \le O\left(\frac{1}{k}\right)$$

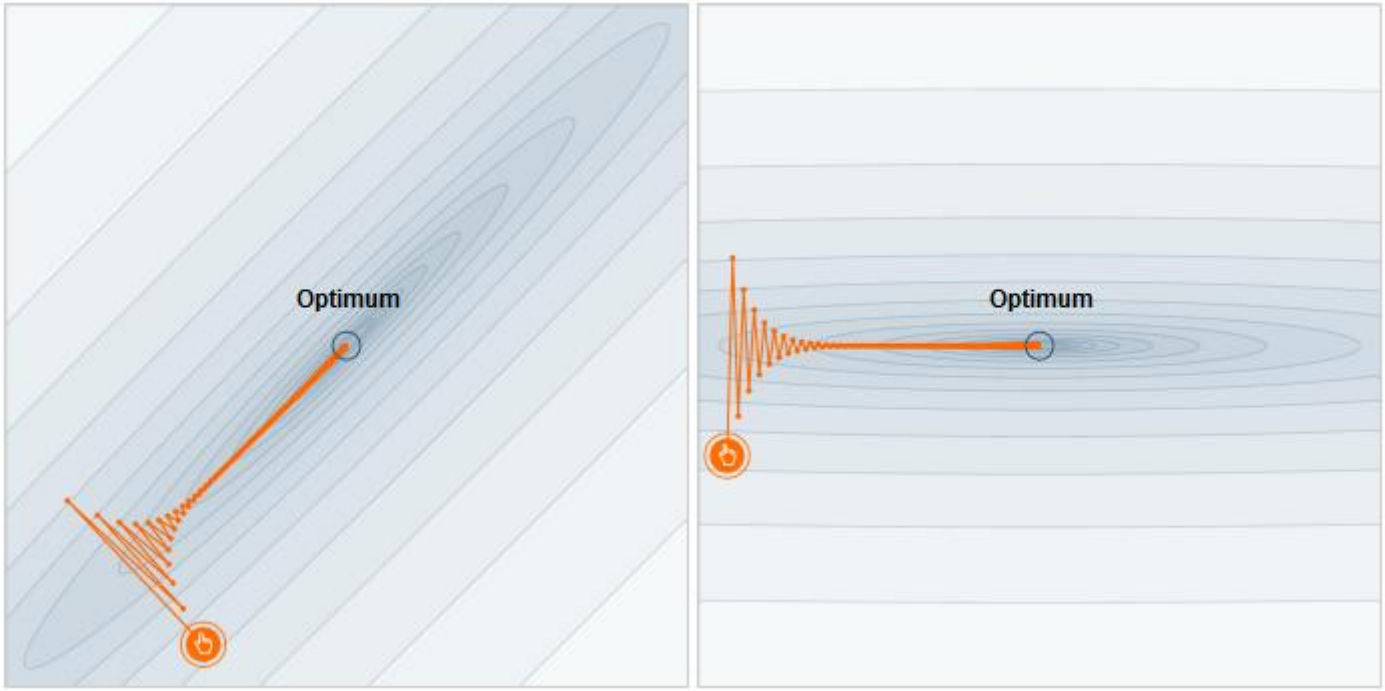
Без дополнительных предположений нельзя улучшить границы

Оптимальный шаг

Наискорейший градиентный спуск

$$w^{(t+1)} = \arg\min_{\eta} L(w^{(t)} - \eta \nabla L(w^{(t)}))$$

Свойства градиентного спуска



+ если функция выпуклая градиентный спуск сойдётся в минимум
(при правильном выборе шагов)
– если нет – в один из локальных минимумов
+ простой метод
+ может использоваться в онлайн-режиме (см. дальше)

https://distill.pub/2017/momentum/

Стохастический градиентный спуск

Если есть большая сумма

(если без регуляризации)

$$L(w) = \sum_{t=1}^{m} L_t(w)$$

Слишком долго вычислять полный градиент!

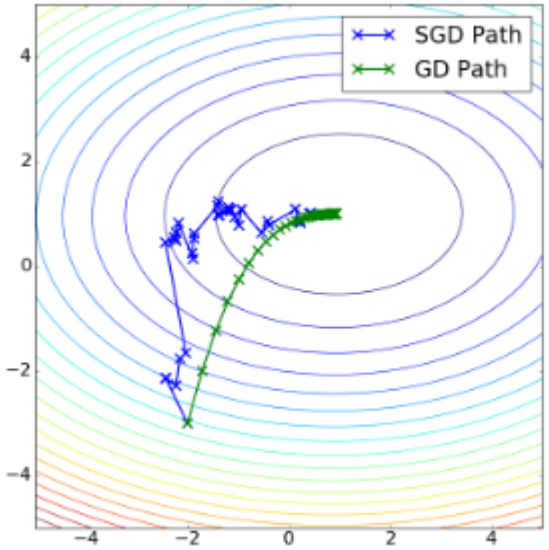
Не вычисляем полный градиент:

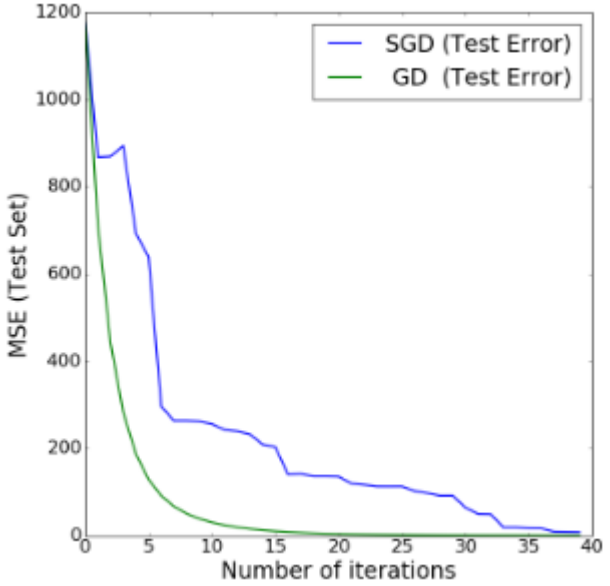
$$\nabla L(w) = \sum_{t=1}^{m} \nabla L_t(w)$$

А выцепляем случайное (!) слагаемое и делаем шаг с помощью такого частичного антиградиента:

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

Стохастический градиентный спуск





- **Можно учиться в online-режиме**

(когда функция становится известна по частям – некоторые слагаемые), но порядок здесь не совсем случайный

- **Метод быстрый**

(не надо вычислять градиенты всех слагаемых на каждом шаге)

- **темп сходимости определяется на CV**

Критерии останова

- **слабо меняется значение функции**

$$|L(w^{(t+1)}) - L(w^{(t)})| < \varepsilon$$

- **слабо меняется аргумент**

$$\| w^{(t+1)} - w^{(t)} \| < \varepsilon$$

- **слишком много итераций**

$$t \geq t_{\max}$$

нормализация…

многое зависит от начальной точки…

Пакетное (Batch / Offline)-обучение

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta \sum_{i=1}^{m} \nabla L_i(w)$$

Онлайн (Online)-обучение

stochastic gradient descent – если слагаемые случайные

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

Minibatch Online обучение

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta \sum_{i \in I} \nabla L_i(w)$$

See Yoshua Bengio's «Practical recommendations for gradient-based training of deep architectures»
http://arxiv.org/abs/1206.5533

Другие приёмы

- **Momentum**
- **адаптивные шаги**

см. http://github.com/Dyakonov/DL/

(оптимизация в DL)

Метод градиентного спуска в машинном обучении

Оптимизация в ML:
Минимизация эмпирического риска (empirical training loss) + регуляризатора (regularizer term)
пока пусть нет регуляризатора

$$\sum_{i=1}^{m}(a(x_t \mid w^{(t)}) - y_t)^2 \to \min$$

Gradient Descent

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta\sum_{i=1}^{m}(a(x_t \mid w^{(t)}) - y_t)\frac{\partial a(x_t \mid w^{(t)})}{\partial w}$$

Метод градиентного спуска в машинном обучении

Gradient Descent в линейной модели

$$a(x \mid w) = w^{\mathrm{T}} x$$

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta \sum_{i=1}^{m} (a(x_t \mid w^{(t)}) - y_t) x_t$$

Есть аналитическое решение,
но данные м.б. большими
функция ошибки чуть сложнее

в матричной форме $w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta X^{\mathrm{T}} (a - y)$

Stochastic Gradient Descent (SGD)

из обучения выбирается случайный объект x_t

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta_t (a(x_t \mid w^{(t)}) - y_t) x_t$$

Метод градиентного спуска в машинном обучении

если заменить в формуле значение $a(x_t \mid w^{(t)})$, т.е. оценку принадлежности к классу 1 на округлённое значение, т.е. предсказываемую метку… то получим алгоритм персептрона

– один из первых алгоритмов линейной классификации (Розенблат, 1958)

Гарантированно находит разделяющую классы прямую, если она существует

SGD может применяться в онлайн-режиме (Online Learning), когда объекты поступают по одному и на больших данных

Пример градиентного спуска – квадратичный функционал (*)

Рассмотрим функцию

$$f(w) = w^{\mathrm{T}} A w - b^{\mathrm{T}} w$$

пусть матрица симметричная и невырожденная

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \alpha(Aw^{(t)} - b)$$

трюк… симметричная матрица допускает разложение

$$A = Q \Lambda Q^{\mathrm{T}}$$

$$\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$$

переход к новым координатам:

$$v = Q^{\mathrm{T}}(w - w^*),$$

где $w^* = A^{-1}b = Q\Lambda^{-1}Q^{\mathrm{T}}b$ **– оптимальное решение, тогда**

$$Q^{\mathrm{T}} w^{(t+1)} = Q^{\mathrm{T}} w^{(t)} - \alpha Q^{\mathrm{T}}(Q\Lambda Q^{\mathrm{T}} w^{(t)} - b)$$

Пример градиентного спуска – квадратичный функционал (*)

$$Q^{\mathrm{T}} w^{(t+1)} = Q^{\mathrm{T}} w^{(t)} - \alpha Q^{\mathrm{T}} (Q \Lambda Q^{\mathrm{T}} w^{(t)} - b)$$

$$Q^{\mathrm{T}} (w^{(t+1)} - w^*) = Q^{\mathrm{T}} (w^{(t)} - w^*) - \alpha (\Lambda Q^{\mathrm{T}} w^{(t)} - Q^{\mathrm{T}} b)$$

$$v^{(t+1)} = v^{(t)} - \alpha (\Lambda Q^{\mathrm{T}} w^{(t)} - \Lambda Q^{\mathrm{T}} w^*)$$

$$v^{(t+1)} = v^{(t)} - \alpha \Lambda v^{(t)} = (I - \alpha \Lambda) v^{(t)}$$

в новом пространстве всё покоординатно…

$$v_{[i]}^{(t+1)} = (1 - \alpha \lambda_i) v_{[i]}^{(t)}$$

Норма вектора в новом пространстве – расстояние до оптимума

$$v_{[i]}^{(t)} = (1 - \alpha \lambda_i)^t v_{[i]}^{(0)}$$

Для сходимости

$$|1 - \alpha \lambda_i| < 1$$

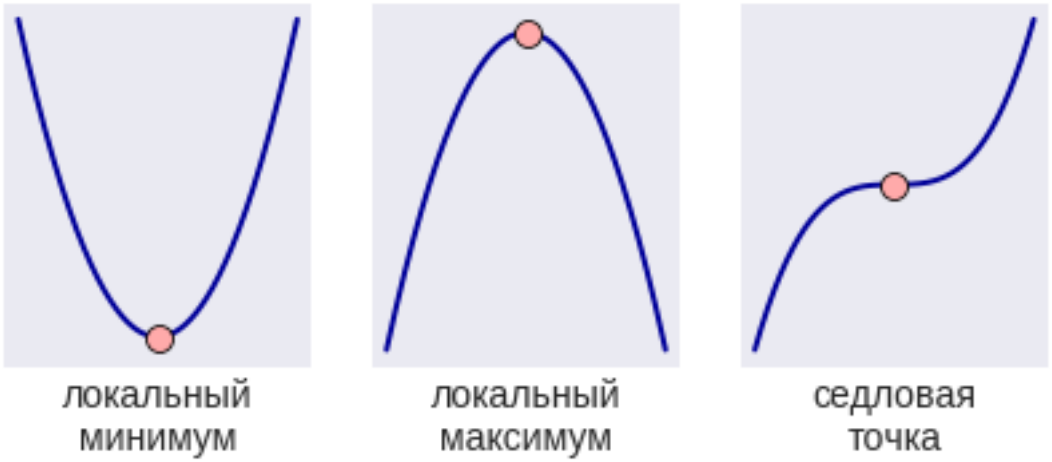
Пример градиентного спуска – квадратичный функционал (*)

Для сходимости

$$|1-\alpha\lambda_i|<1$$

Вопрос – какой темп сходимости оптимален?

Стационарные точки



Особенность многомерных пространств

В пространствах большой размерности стационарные точки как правило седловые (а не локальные минимумы и максимумы)

$$f(w) = f(w_0) + (w - w_0)^{\mathrm{T}} \nabla f(w_0) + (w - w_0)^{\mathrm{T}} H (w - w_0) + o(\| w - w_0 \|^2)$$

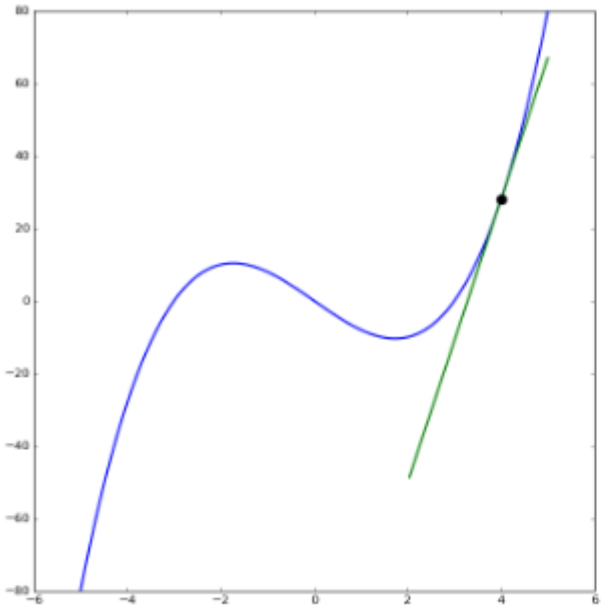
зависит от с.з. матрицы Гессе

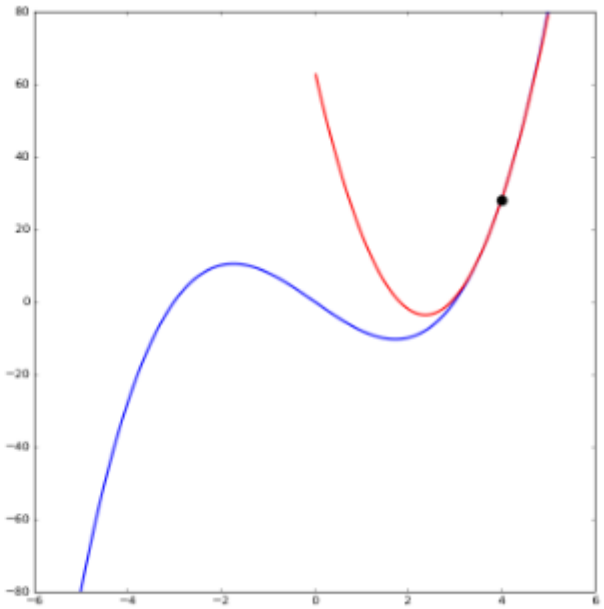
Если есть и положительные и отрицательные – седло

Если представить, что знак определяется подбрасыванием монетки…

В любом случае, полезно смотреть за нормой градиента – попали ли в стационарную точку

Метод Ньютона





Градиентный спуск использует только первые производные

~ Локальная линейная аппроксимация

Метод Ньютона использует вторые производные

~ аппроксимация рядом Тейлора до 2го порядка

Шаг по методу Ньютона

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - H_{(t)}^{-1} g^{(t)}$$

Смысл

$$f_{\deg\le 2}(w) = f(w^{(t)}) + (w - w^{(t)})^{\mathrm{T}} g^{(t)} + \frac{1}{2}(w - w^{(t)})^{\mathrm{T}} H_{(t)} (w - w^{(t)})$$

$$\nabla f_{\deg\le 2} = g^{(t)} + H_{(t)}(w - w^{(t)})$$

Приравнивая градиент к нулю получаем формулу для шага
Нет гиперпараметров и темпа обучения!

Применим, если матрица Гессе положительно определённая

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - (H_{(t)} + \alpha I)^{-1} g^{(t)}$$

обращение матрицы трудоёмко (но не всегда необходимо –
– там умножается на вектор

Матрица Гессе – матрица вторых производных

$$H = \frac{\partial}{\partial w}\left[\frac{\partial L(w)}{\partial w}\right]^{\mathrm{T}}$$

Квази-ньютоновские методы

- **BFGS =** Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шанно

вместо обращение Гессиана $H_{(t)}^{-1}$ – (O(n^3) операций)

– низкоранговая аппроксимация обратного гессиана $M_{(t)} \approx H_{(t)}^{-1}$,

которая итеративно уточняется (O(n^2) для хранения)

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \varepsilon M_{(t)} g^{(t)}$$

ε специально подбирается линейным поиском

- **Limited memory BFGS – с ограниченной памятью**

Хорошо на всех данных (не мини батчах)

Le et al, «On optimization methods for deep learning, ICML 2011»

Ba et al, «Distributed second-order optimization using Kronecker-factored approximations», ICLR 2017

Дальше, что понадобится в SVM
(немного про условную оптимизацию)

Оптимизация с ограничениями

$$f(w) \to \min$$
$$g_i(w) \le 0, i \in I,$$
$$h_j(w) = 0, \ j \in J.$$

Выпишем Лагранжиан

$$L(w, \alpha, \beta) = f(w) + \sum_{i \in I} \alpha_i g_i(w) + \sum_{j \in J} \beta_j h_j(w)$$

$$\alpha = (\alpha_i)_{i \in I} \ge 0, \ \beta = (\beta_j)_{j \in J}.$$

Заметим, что

$$\max_{\alpha, \beta} L(w, \alpha, \beta)$$

обращается в бесконечность, если нарушено хотя бы одно ограничение (по g_i или h_j),

в противном случае, совпадает с $f(w)$

Оптимизация с ограничениями

Поэтому можно решать такую задачу:

$$\min_{w} \max_{\alpha,\beta} L(w,\alpha,\beta)$$

из-за выпуклости всех функций min и max можно переставлять

Условия Кунна-Таккера (Karush-Kuhn-Tucker (KKT) Conditions):
в оптимальной точке

$$\alpha_i g_i(w) = 0$$

Ссылки

Более продвинутые современные подходы к оптимизации в DL см. в

http://github.com/Dyakonov/DL/