Lekce 2 [35]

> Describe maximum likelihood estimation, as minimizing NLL, cross-entropy and KL divergence. [10]

Self information

- $I(x) = -\log P(x)$
- Jak moc jsme překvapeni, když dostaneme $x \sim P$
- Pro nezávislé jevy se sčítá, pro jevy s pností 1 je rovna 0

Entropie

- $H(P) = \mathbb{E}_{x \sim P}[I(x)] = -\mathbb{E}_{x \sim P}[\log P(x)]$
- Množství překvapení v distribuci P

Cross-entropy

- $H(P, Q) = -\mathbb{E}_{x \sim P}[\log Q] = \mathbb{E}_{x \sim P}[I_Q(x)]$
- V podmíněném případě pak $H(Y|X) = H(X, Y) - H(X)$, tedy jak moc jsem překvapen když se dozvím obojí oproti tomu, když se dozvím jen X
- Měří, jak moc budu překvapený, když budu tahat x z distribuce P, ale své překvapení budu měřit na základě distribuce Q

Kullback-Leibler Divergence

- $D_{KL}(P||Q) = H(P, Q) - H(P) = -\mathbb{E}_{x \sim P}[\log P - \log Q]$
- Není symetrická
- V zásadě říká, jak "špatná" je moje distribuce Q. Konkrétně zjišťuje o jak moc více budu překvapen, když tahám x z P, ale překvapení měřím skrze Q
  - Čím jsou si Q a P podobnější, tím menší tohle "překvapení navíc" bude

MLE

- Samo o sobě je to takové hledání parametrů modelu, aby

$$\theta_{\mathrm{ML}} = \arg\max_{\theta} p_{\text{model}}(\mathbb{X}; \theta) \quad (1)$$

Což se dá dále upravovat, až se dostaneme NLL, binární crossentropii, a KL divergenci

$$\theta_{ML} \; p(y|x;\theta) = \arg\max_{\theta} \prod \underbrace{p(y_i | x_i; \theta)}_{p}$$

$$= \arg\min - \sum \log p \quad \leftarrow NLL$$

$$= am. \; \mathbb{E}_{x,y \sim \hat{p}_{data}}[-\log p]$$

$$= am. \; H(\hat{p}_{data}, p(y; x; \theta))$$

$$= am.. \; D_{KL}(\hat{p}_{da} \,||\, p(y; x; \theta)) + \ldots$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\theta}_{\mathrm{ML}} &= \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} p_{\text{model}}(\mathbb{Y}|\mathbb{X};\boldsymbol{\theta}) \\
&= \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \sum\nolimits_{i=1}^{m} -\log p_{\text{model}}(y^{(i)}|\boldsymbol{x}^{(i)};\boldsymbol{\theta}) \quad \leftarrow \text{NLL} \\
&= \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \mathbb{E}_{\mathbf{x},\mathrm{y}\sim\hat{p}_{\text{data}}}[-\log p_{\text{model}}(y|\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})] \\
&= \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} H(\hat{p}_{\text{data}}, p_{\text{model}}(y|\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})) \quad \leftarrow \text{binary crossentropy loss} \\
&= \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} D_{\mathrm{KL}}(\hat{p}_{\text{data}}\|p_{\text{model}}(y|\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})) + H(\hat{p}_{\text{data}}) \quad \leftarrow \text{KL-divergence}
\end{aligned}
$$

> Define mean squared error and show how it can be derived using MLE. [5]

$$MSE = \mathbb{E}[(\hat{y}-y)^2] = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}((f(x_i;\theta)-y_i)^2) \quad (2)$$

Pokud se nám při regresi nechce odhadovat celá distribuce, můžeme si usnadnit práci, predikovat pouze její střední hodnotu a říct, že ta distribuce je normální s nějakým rozptylem (a s tou naší střední hodnotou).

Dává to smysl, protože normální rozdělení má mezi rozděleními se stejnou střední hodnotou a rozptylem maximální entropii, tedy nejméně navíc vnesené informace.

MLE potom vyjde

$$
\begin{aligned}
\arg\max_{\boldsymbol{\theta}} p(y \mid \boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta}) &= \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \sum_{i=1}^{m} -\log p\left(y^{(i)} \mid \boldsymbol{x}^{(i)};\boldsymbol{\theta}\right) \\
&= \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} -\sum_{i=1}^{m} \log \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{\left(y^{(i)}-\hat{y}\left(\boldsymbol{x}^{(i)};\boldsymbol{\theta}\right)\right)^2}{2\sigma^2}\right) \\
&= \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} -m\log\left(2\pi\sigma^2\right)^{-1/2} - \sum_{i=1}^{m} -\frac{\left(y^{(i)}-\hat{y}\left(\boldsymbol{x}^{(i)};\boldsymbol{\theta}\right)\right)^2}{2\sigma^2} \\
&= \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \sum_{i=1}^{m} \frac{\left(y^{(i)}-\hat{y}\left(\boldsymbol{x}^{(i)};\boldsymbol{\theta}\right)\right)^2}{2\sigma^2} = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(y^{(i)}-\hat{y}\left(\boldsymbol{x}^{(i)};\boldsymbol{\theta}\right)\right)^2
\end{aligned}
$$

To $1/m$ jsme si nakonec přimysleli, protože můžeme. MSE tedy dává smysl jako loss funkce, ale **pouze pokud má náš estimátor pevný rozptyl (tj. vlastně chybu)** σ^2.

> Describe gradient descent and compare it to stochastic (i.e., online) gradient descent and minibatch stochastic gradient descent. [5]

Pokud máme nějaký loss L a nějaká trénovací data, chceme při tréninku minimalizovat

$$J(\boldsymbol{\theta}) = \mathbb{E}_{(\boldsymbol{x},y)\sim\hat{p}_{\text{data}}} L(f(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta}),y) \quad (3)$$

Což můžeme udělat v krocích pomocí tzv. **gradient descent** s learning rate α

$$\boldsymbol{\theta} \leftarrow \boldsymbol{\theta} - \alpha\nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta}) \quad (4)$$

Druhy

- V běžném GD počítáme J a jeho gradient ze všech trénovacích dat

- V **online (stochastic) gradient descent** nasamplujeme pouze jedno dato
- V **minibatch SGD** vybereme m samplů, ze kterých poté odhadujeme střední hodnotu J

> Formulate conditions on the sequence of learning rates used in SGD to converge to optimum almost surely. [5]

SGD skoro jistě konverguje k optimu, pokud je naše loss spojitá a konvexní a zároveň pro learning raty platí

$$\forall i : \alpha_i > 0, \quad \sum_i \alpha_i = \infty, \quad \sum_i \alpha_i^2 < \infty \quad (5)$$

Tedy můžeme složením krůčků dojít kamkoli, ale zároveň musí platit $\alpha \to 0$. Konkrétně to *na druhou* se tam vyskytuje za MSE, říká v podstatě že "nabraná chyba bude konečná".

> Write down the backpropagation algorithm. [5]

Chceme spočítat derivaci posledního vrcholu (u_n) vzhledem ke všem předešlým vrcholům. Tím získáme derivaci loss vůči parametrům, což je to, co potřebujeme do SGD.

1. Spustíme forward propagation, kterým spočteme hodnoty všech vrcholů
2. Nastavíme $g_n = 1$
3. Od konce počítáme g_i jako $\sum_{j:i \in P(u^{(j)})} g^{(j)} \frac{\partial u^{(j)}}{\partial u^{(i)}}$, využití chain rule

> Write down the mini-batch SGD algorithm with momentum. Then, formulate SGD with Nesterov momentum and show the difference between them. [5]

$$\begin{aligned} \boldsymbol{g} &\leftarrow \tfrac{1}{m} \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \textstyle\sum_i L\left(f\left(\boldsymbol{x}^{(i)}; \boldsymbol{\theta}\right), \boldsymbol{y}^{(i)}\right) \\ \boldsymbol{v} &\leftarrow \beta \boldsymbol{v} - \alpha \boldsymbol{g} \\ \boldsymbol{\theta} &\leftarrow \boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{v} \end{aligned} \quad (6)$$

Navíc oproti SGD tam je to v, které zajišťuje roli "kudy jsme šli minule". V Nestor momentum je to pak jen trochu pozměněno, *momentum krok* se dělá *před* výpočtem gradientu, tak, aby ten samotný gradient byl přesnější.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\theta} &\leftarrow \boldsymbol{\theta} + \beta \boldsymbol{v} \\ \boldsymbol{g} &\leftarrow \tfrac{1}{m} \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \textstyle\sum_i L\left(f\left(\boldsymbol{x}^{(i)}; \boldsymbol{\theta}\right), y^{(i)}\right) \\ \boldsymbol{v} &\leftarrow \beta \boldsymbol{v} - \alpha \boldsymbol{g} \\ \boldsymbol{\theta} &\leftarrow \boldsymbol{\theta} - \alpha \boldsymbol{g} \end{aligned} \quad (7)$$

> Write down the AdaGrad algorithm and show that it tends to internally decay learning rate by a factor of $1/t$ in step t. Then write down the RMSProp algorithm and explain how it solves the problem with the involuntary learning rate decay. [10]

$$\begin{aligned} \boldsymbol{g} &\leftarrow \tfrac{1}{m} \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \textstyle\sum_i L\left(f\left(\boldsymbol{x}^{(i)}; \boldsymbol{\theta}\right), y^{(i)}\right) \\ \boldsymbol{r} &\leftarrow \boldsymbol{r} + \boldsymbol{g}^2 \\ \boldsymbol{\theta} &\leftarrow \boldsymbol{\theta} - \tfrac{\alpha}{\sqrt{\boldsymbol{r}+\varepsilon}} \boldsymbol{g} \end{aligned} \quad (8)$$

Velikosti gradientu normalizujeme, aby se paramentry s různými rozptyly měnily zhruba stejně. To, co máme uloženo v r, si můžeme představit zhruba jako σ^2 jednotlivých složek, takže vydělení learning ratu $\sqrt{r+\varepsilon}$ provede normalizaci.

Pokud zůstávají gradienty dlouho stejné, tj $g \approx g_0$, tak po t krocích algoritmu je $r \approx t \cdot g_0^2$, a proto

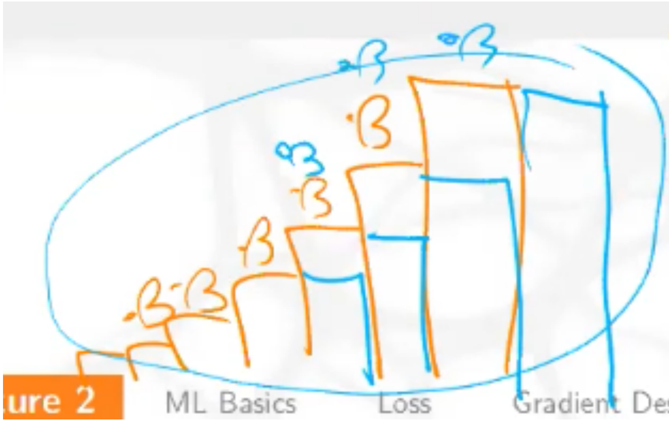
$$\frac{\alpha}{\sqrt{\boldsymbol{r}+\varepsilon}} \approx \frac{\alpha/\sqrt{t}}{\sqrt{\boldsymbol{g}_0^2 + \varepsilon/t}}, \quad (9)$$

jinými slovy, jako kdybychom learning rate škálovali $1/\sqrt{t}$, což zpravidla nechceme, protože to může být moc rychlé.

RMSPRop funguje podobně, ale r počítáme tak, aby zhruba odpovídalo střední hodnotě poslechních g^2 — počítáme exponenciální průměr posledních několika hodnot.

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{g} \leftarrow \tfrac{1}{m} \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \textstyle\sum_i L\left(f\left(\boldsymbol{x}^{(i)}; \boldsymbol{\theta}\right), y^{(i)}\right) \\ &\boldsymbol{r} \leftarrow \beta \boldsymbol{r} + (1-\beta) \boldsymbol{g}^2 \\ &\boldsymbol{\theta} \leftarrow \boldsymbol{\theta} - \tfrac{\alpha}{\sqrt{\boldsymbol{r}+\varepsilon}} \boldsymbol{g} \end{aligned} \quad (10)$$

Jak tento exponenciální průměr funguje je ukázáno na následujícím obrázku.



> Write down the Adam algorithm. Then show why the bias-correction terms $(1-\beta^t)$ make the estimation of the first and second moment unbiased. [10]

Adam je spojením momentum a RMSProp.

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{g} \leftarrow \tfrac{1}{m} \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \textstyle\sum_i L\left(f\left(\boldsymbol{x}^{(i)}; \boldsymbol{\theta}\right), y^{(i)}\right) \\ &t \leftarrow t+1 \\ &\boldsymbol{s} \leftarrow \beta_1 \boldsymbol{s} + (1-\beta_1)\, \boldsymbol{g} \text{ (biased first moment estimate)} \\ &\boldsymbol{r} \leftarrow \beta_2 \boldsymbol{r} + (1-\beta_2)\, \boldsymbol{g}^2 \text{ (biased second moment estimate)} \\ &\hat{\boldsymbol{s}} \leftarrow \boldsymbol{s} / \left(1-\beta_1^t\right), \hat{\boldsymbol{r}} \leftarrow \boldsymbol{r} / \left(1-\beta_2^t\right) \\ &\boldsymbol{\theta} \leftarrow \boldsymbol{\theta} - \tfrac{\alpha}{\sqrt{\hat{\boldsymbol{r}}+\varepsilon}} \hat{\boldsymbol{s}} \end{aligned} \quad (11)$$

První moment odpovídá momentum, druhý používáme kvůli normalizaci LR, stříškové verze složí jako korekce biasů. Po t krocích totiž r vypadá jako

$$\boldsymbol{r}_t = (1-\beta_2) \sum_{i=1}^{t} \beta_2^{t-i} \boldsymbol{g}_i^2 \quad (12)$$

Tedy jako bych dělal vážený průměr nějakých prvků s celkovouv vahou

$$(1-\beta_2) \sum_{i=1}^{t} \beta_2^{t-i} = (1-\beta_2) \frac{1-\beta_2^t}{1-\beta_2} = 1-\beta_2^t. \quad (13)$$

Jinými slovy,

$$\mathbb{E}\left[\boldsymbol{r}_t\right] \approx \mathbb{E}\left[\boldsymbol{g}^2\right] \cdot \left(1-\beta_2^t\right) \quad (14)$$

A biasu se tedy zbavím vydělením.