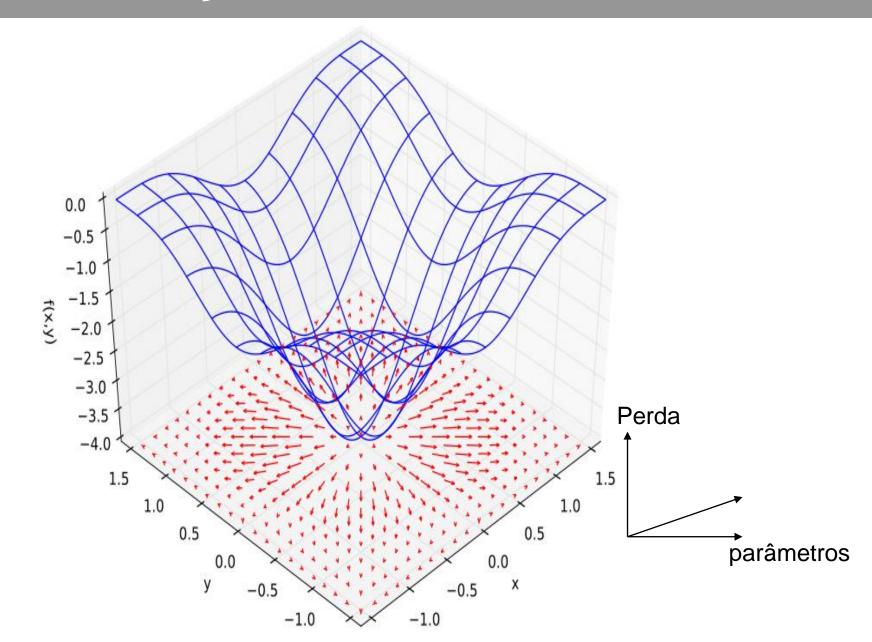
### Redes Neurais e Deep Learning

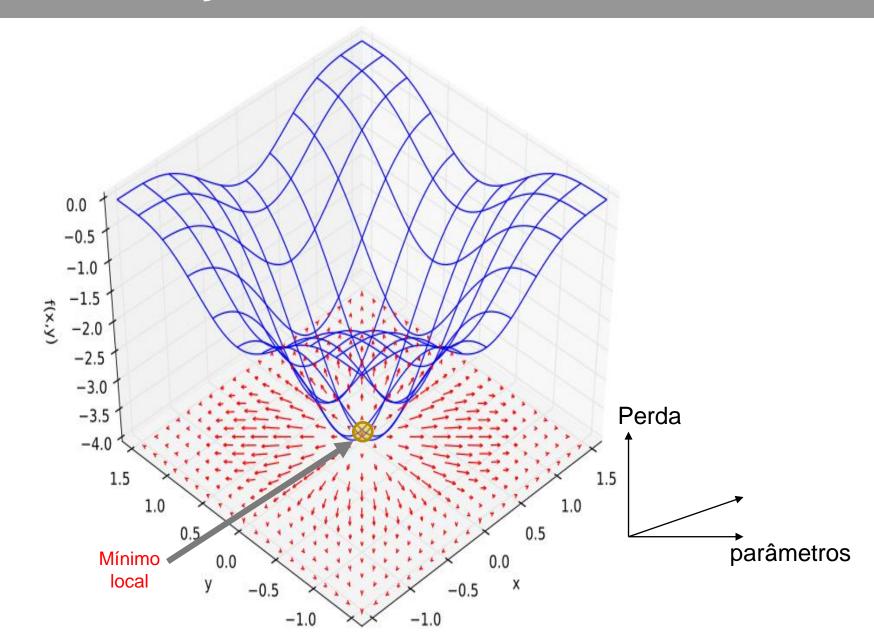
## SGD STOCHASTIC GRADIENT DESCENT

Zenilton K. G. Patrocínio Jr zenilton@pucminas.br

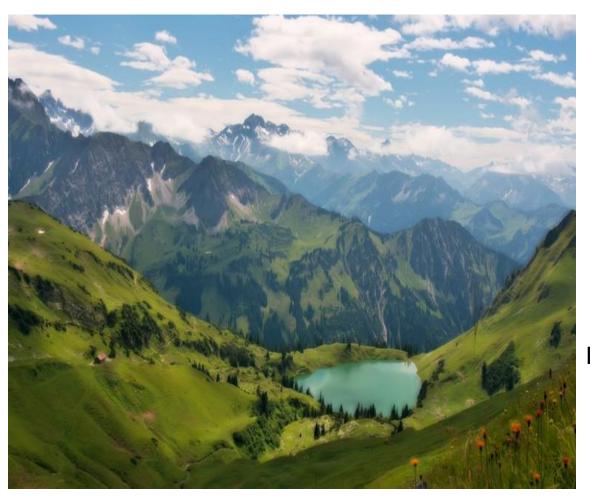
## Otimização da Função de Perda

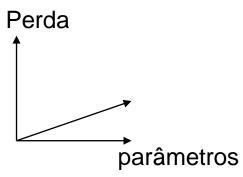


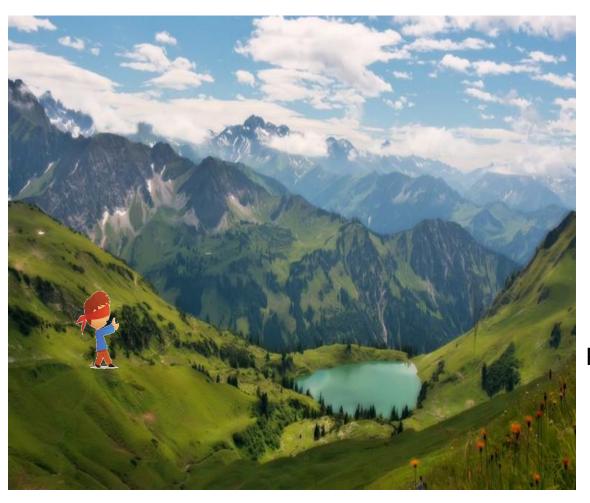
## Otimização da Função de Perda

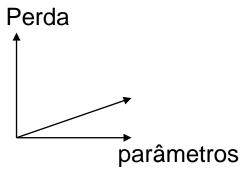


## Otimização da Função de Perda









### Talvez seja uma ideia muito ruim... mas é simples!

```
# assume X train is the data where each column is an example (e.g. 3073 x 50,000)
# assume Y train are the labels (e.g. 1D array of 50,000)
# assume the function L evaluates the loss function
bestloss = float("inf") # Python assigns the highest possible float value
for num in xrange(1000):
  W = np.random.randn(10, 3073) * 0.0001 # generate random parameters
  loss = L(X train, Y train, W) # get the loss over the entire training set
  if loss < bestloss: # keep track of the best solution
    bestloss = loss
    bestW = W
  print 'in attempt %d the loss was %f, best %f' % (num, loss, bestloss)
# prints:
# in attempt 0 the loss was 9.401632, best 9.401632
# in attempt 1 the loss was 8.959668, best 8.959668
# in attempt 2 the loss was 9.044034, best 8.959668
# in attempt 3 the loss was 9.278948, best 8.959668
# in attempt 4 the loss was 8.857370, best 8.857370
# in attempt 5 the loss was 8.943151, best 8.857370
# in attempt 6 the loss was 8.605604, best 8.605604
# ... (trunctated: continues for 1000 lines)
```

Quão bem se comporta essa abordagem sobre o conjunto de teste...

```
# Assume X_test is [3073 x 10000], Y_test [10000 x 1]
scores = Wbest.dot(Xte_cols) # 10 x 10000, the class scores for all test examples
# find the index with max score in each column (the predicted class)
Yte_predict = np.argmax(scores, axis = 0)
# and calculate accuracy (fraction of predictions that are correct)
np.mean(Yte_predict == Yte)
# returns 0.1555
```

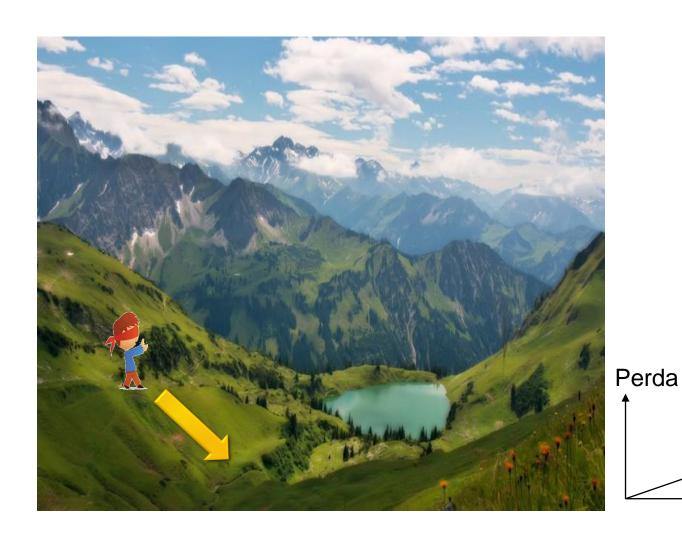
15,5% acurácia! Não é tão ruim!

Porém, estado da arte é ~95%

Toma-se vários passos aleatórios e mede-se a perda. Em seguira, direciona-se para o valor mais baixo encontrado

- Não é totalmente "sem sentido". Esse é um tipo de otimização "sem gradiente". Faz sentido se você não puder calcular gradientes por algum motivo
- Uma versão um pouco mais inteligente calcula a média dos pontos aleatórios ponderados pela perda (pontos de menor perda ganham maior peso). Isso se aproxima do gradiente

Mas é menos eficiente que o método do gradiente quando os gradientes estão disponíveis



parâmetros

Em uma dimensão, a derivada de uma função é dada por

$$rac{df(x)}{dx} = \lim_{h o 0} rac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

Em uma dimensão, a derivada de uma função é dada por

$$rac{df(x)}{dx} = \lim_{h o 0} rac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

Em uma dimensão, a derivada de uma função é dada por

$$rac{df(x)}{dx} = \lim_{h o 0} rac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

Em uma dimensão, a derivada de uma função é dada por

$$rac{df(x)}{dx} = \lim_{h o 0} rac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

#### W corrente:

```
[0,34;
-1,11;
0,78;
0,12;
0,55;
2,81;
-3,1;
-1,5;
0,33;...]
perda 1,25347
```

```
[?;
?;
?;
?;
?;
?;...]
```

### W corrente: [0,34;-1,11; 0,78; 0,12; 0,55; 2,81; -3,1; -1,5; 0,33;...]

perda 1,25347

```
W + h (1^a dim):
[0,34 + 0,0001;
-1,11;
0,78;
0,12;
0,55;
2,81;
-3,1;
-1,5;
0,33;...]
perda 1,25322
```

```
[?;
?;
?;
?;
?;
?;...]
```

#### W corrente:

```
[0,34;
-1,11;
0,78;
0,12;
0,55;
2,81;
-3,1;
-1,5;
0,33;...]
perda 1,25347
```

```
W + h (1<sup>a</sup> dim):
```

```
[0,34 + 0,0001;
-1,11;
0,78;
0,12;
0,55;
2,81;
-3,1;
-1,5;
0,33;...
perda 1,25322
```

```
[-2,5;
?;
?;
(1,25322 - 1,25347)/0,0001= -2,5\frac{df(x)}{dx} = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}?;
?;...]
```

### W corrente:

```
[0,34;
-1,11;
0,78;
0,12;
0,55;
2,81;
-3,1;
-1,5;
0,33;...]
perda 1,25347
```

### $W + h (2^a dim)$ :

```
[0,34;
-1,11 + 0,0001;
0,78;
0,12;
0,55;
2,81;
-3,1;
-1,5;
0,33;...
perda 1,25353
```

```
[-2,5;
?;
?;
?;
?;
?;
?;...]
```

#### W corrente:

```
[0,34;
-1,11;
0,78;
0,12;
0,55;
2,81;
-3,1;
-1,5;
0,33;...]
perda 1,25347
```

### $W + h (2^a dim)$ :

```
[0,34;
-1,11 + 0,0001;
0,78;
0,12;
0,55;
2,81;
-3,1;
-1,5;
0,33;...
perda 1,25353
```

[-2,5;  
0,6;  
?;  
?;  

$$(1,25353 - 1,25347)/0,0001$$
  
 $= 0,6$   

$$\frac{df(x)}{dx} = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$
?;...]

### W corrente:

```
[0,34;
-1,11;
0,78;
0,12;
0,55;
2,81;
-3,1;
-1,5;
0,33;...]
perda 1,25347
```

### W + h (3a dim):

```
[0,34;
-1,11;
0.78 + 0.0001;
0,12;
0,55;
2,81;
-3,1;
-1,5;
0,33;...]
perda 1,25347
```

```
[-2,5;
0,6;
?;
?;
?;
?;
?;
```

#### W corrente:

```
[0,34;
-1,11;
0,78;
0,12;
0,55;
2,81;
-3,1;
-1,5;
0,33;...]
perda 1,25347
```

### $W + h (3^a dim)$ :

```
[0,34;
-1,11;
0.78 + 0.0001;
0,12;
0,55;
2,81;
-3,1;
-1,5;
0,33;...
perda 1,25347
```

```
[-2,5;

0,6;

0;

?;

\frac{1,25347 - 1,25347}{0,0001}
= 0
\frac{df(x)}{dx} = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}
?;...]
```

# Avaliação numérica do gradiente

$$rac{df(x)}{dx} = \lim_{h o 0} rac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

```
def eval numerical gradient(f, x):
 a naive implementation of numerical gradient of f at x
  - f should be a function that takes a single argument
  - x is the point (numpy array) to evaluate the gradient at
  fx = f(x) # evaluate function value at original point
 grad = np.zeros(x.shape)
  h = 0.00001
  # iterate over all indexes in x
  it = np.nditer(x, flags=['multi index'], op flags=['readwrite'])
  while not it.finished:
    # evaluate function at x+h
   ix = it.multi index
   old value = x[ix]
   x[ix] = old value + h # increment by h
   fxh = f(x) # evalute f(x + h)
   x[ix] = old value # restore to previous value (very important!)
   # compute the partial derivative
   grad[ix] = (fxh - fx) / h # the slope
   it.iternext() # step to next dimension
  return grad
```

# Avaliação numérica do gradiente

$$rac{df(x)}{dx} = \lim_{h o 0} rac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

- Aproximada
- Muito lenta

```
def eval numerical gradient(f, x):
 a naive implementation of numerical gradient of f at x
  - f should be a function that takes a single argument
  - x is the point (numpy array) to evaluate the gradient at
  fx = f(x) # evaluate function value at original point
 grad = np.zeros(x.shape)
  h = 0.00001
  # iterate over all indexes in x
  it = np.nditer(x, flags=['multi index'], op flags=['readwrite'])
  while not it.finished:
    # evaluate function at x+h
   ix = it.multi index
   old value = x[ix]
   x[ix] = old value + h # increment by h
   fxh = f(x) # evalute f(x + h)
   x[ix] = old value # restore to previous value (very important!)
   # compute the partial derivative
   grad[ix] = (fxh - fx) / h # the slope
   it.iternext() # step to next dimension
  return grad
```

Uma abordagem mais promissora!

A perda é apenas uma função de W, por exemplo:

$$egin{aligned} L &= rac{1}{N} \sum_{i=1}^N L_i + \sum_k W_k^2 \ L_i &= \sum_{j 
eq y_i} \max(0, s_j - s_{y_i} + 1) \ s &= f(x; W) = Wx \end{aligned}$$

Deseja-se

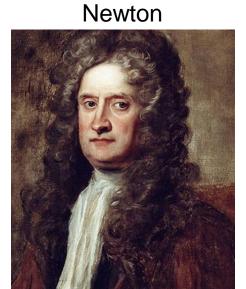
$$\nabla_W L = \dots$$

### Uma abordagem mais promissora

A perda é apenas uma função de W, por exemplo:

$$egin{aligned} L &= rac{1}{N} \sum_{i=1}^N L_i + \sum_k W_k^2 \ L_i &= \sum_{j 
eq y_i} \max(0, s_j - s_{y_i} + 1) \ s &= f(x; W) = Wx \end{aligned}$$

Deseja-se  $\nabla_W L = \dots$ 





#### W corrente:

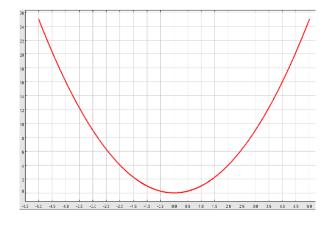
```
[0,34;
-1,11;
0,78;
0,12;
0,55;
2,81;
-3,1;
-1,5;
0,33;...]
perda 1,25347
```

```
dW = ...
                                [-2,5;
(alguma função dos
                               0,6;
dados e de W)
                                0;
                               0,2;
                               0,7;
                                -0,5;
                                1,1;
                                1,3;
                               -2,1;...]
```

## Funções de Perda

#### Perda Quadrática

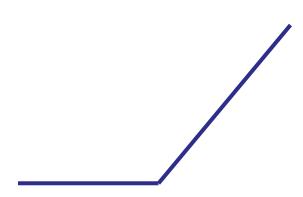
$$L = \left(y_i - f(x_i)\right)^2$$



Perda de Articulação

$$y_i \in \{-1,1\}$$

$$L = \max(0,1 - y_i f(x_i))$$



Perda de Entropia Cruzada

$$y_i \in \{-1,1\}$$

$$L = \log(1 + \exp(-y_i f(x_i)))$$

Todas essas três funções de perda possuem derivadas "bem comportadas"

Como  $f(x) = w^T x$  é uma função linear dos pesos W, pode-se derivar a perda em relação aos pesos

- Gradiente Numérico: aproximado, lento, fácil de codificar
- Gradiente Analítico: exato, rápido, a prova de erros

Na prática: Sempre se usa gradiente analítico, mas ocasionalmente verificase a implementação por meio de gradiente numérico.

⇒ Isto é chamado de **verificação de gradiente** 

O gradiente  $\nabla_W L(W)$  representa o vetor de derivadas parciais

$$\nabla_W L(W) = \left[ \frac{\partial L}{\partial W_{11}}, \frac{\partial L}{\partial W_{12}}, \cdots, \frac{\partial L}{\partial W_{21}}, \frac{\partial L}{\partial W_{22}}, \cdots \right]^T$$

O gradiente  $\nabla_W L(W)$  representa o vetor de derivadas parciais

$$\nabla_W L(W) = \left[ \frac{\partial L}{\partial W_{11}}, \frac{\partial L}{\partial W_{12}}, \cdots, \frac{\partial L}{\partial W_{21}}, \frac{\partial L}{\partial W_{22}}, \cdots \right]^T$$

em que, por exemplo,  $\frac{\partial L}{\partial W_{11}}$  mede o quão rápido varia a perda L em relação a uma variação do coeficiente  $W_{11}$  da matriz W

O gradiente  $\nabla_W L(W)$  representa o vetor de derivadas parciais

$$\nabla_W L(W) = \left[ \frac{\partial L}{\partial W_{11}}, \frac{\partial L}{\partial W_{12}}, \cdots, \frac{\partial L}{\partial W_{21}}, \frac{\partial L}{\partial W_{22}}, \cdots \right]^T$$

em que, por exemplo,  $\frac{\partial L}{\partial W_{11}}$  mede o quão rápido varia a perda L em relação a uma variação do coeficiente  $W_{11}$  da matriz W

Neste caso, para se minimizar o valor do risco empírico é necessário se igualar a zero o gradiente de L em relação à matriz W, isto é

$$\nabla_W L(W) = 0$$

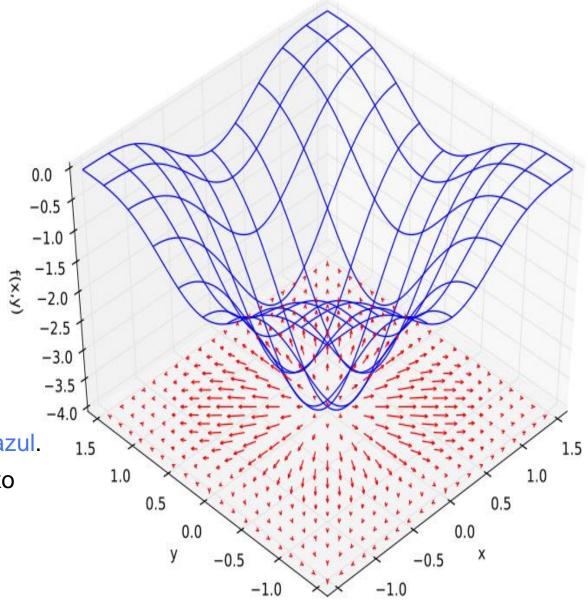
considerando, assim, que L é uma função da matriz W

Quando  $\nabla_W L(W) = 0$ , então todas as derivadas parciais são nulas, ou ainda, a perda não se modifica em nenhuma direção

Quando  $\nabla_W L(W) = 0$ , então todas as derivadas parciais são nulas, ou ainda, a perda não se modifica em nenhuma direção

A superfície da perda aparece em azul.

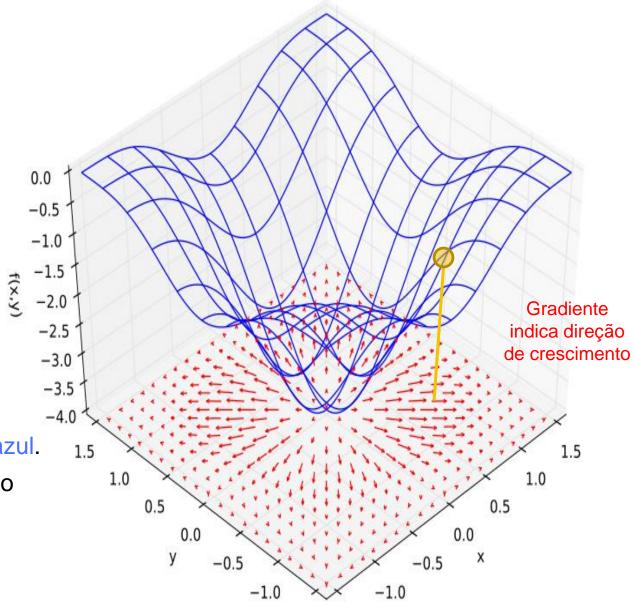
Os gradientes são mostrados abaixo como setas vermelhas.



Quando  $\nabla_W L(W) = 0$ , então todas as derivadas parciais são nulas, ou ainda, a perda não se modifica em nenhuma direção

A superfície da perda aparece em azul.

Os gradientes são mostrados abaixo como setas vermelhas.

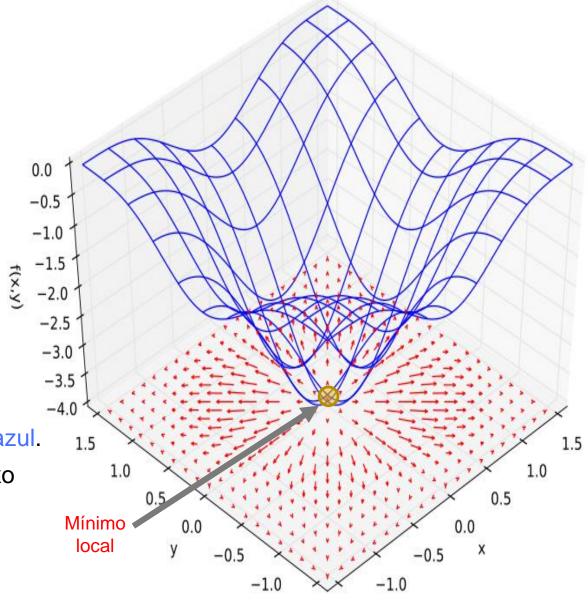


Quando  $\nabla_W L(W) = 0$ , então todas as derivadas parciais são nulas, ou ainda, a perda não se modifica em nenhuma direção

Portanto, obteve-se um ótimo local

A superfície da perda aparece em azul.

Os gradientes são mostrados abaixo como setas vermelhas.

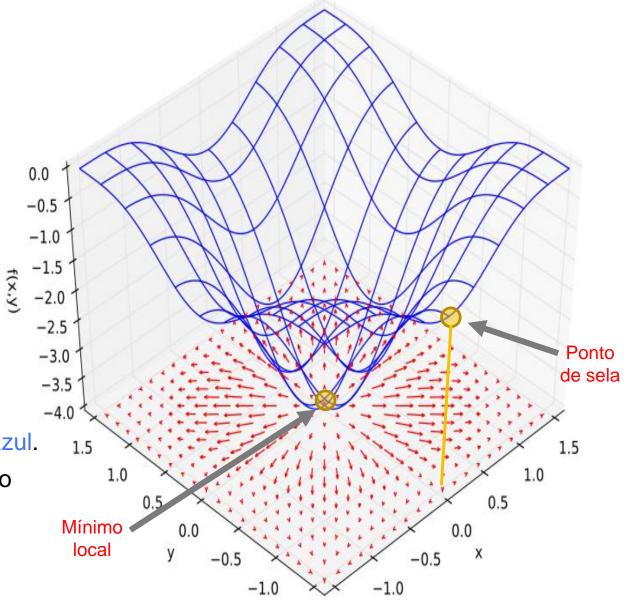


Quando  $\nabla_W L(W) = 0$ , então todas as derivadas parciais são nulas, ou ainda, a perda não se modifica em nenhuma direção

Portanto, obteve-se um ótimo local (ou, pelo menos, um ponto de sela)

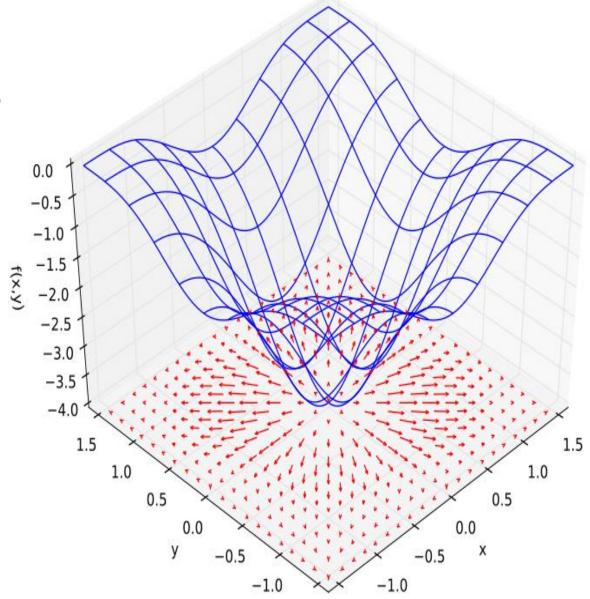
A superfície da perda aparece em azul.

Os gradientes são mostrados abaixo como setas vermelhas.



## Método do Gradiente (ou Descida Mais Íngreme)

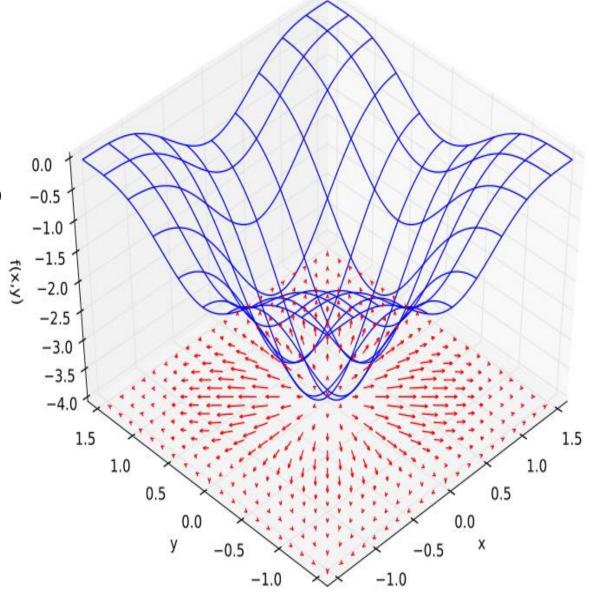
Para se alcançar um ponto de mínimo deve-se seguir a direção contrária ao gradiente,



Para se alcançar um ponto de mínimo deve-se seguir a direção contrária ao gradiente,

isto é, deve-se dar passos na direção

 $-\nabla_{W}L(W)$ 



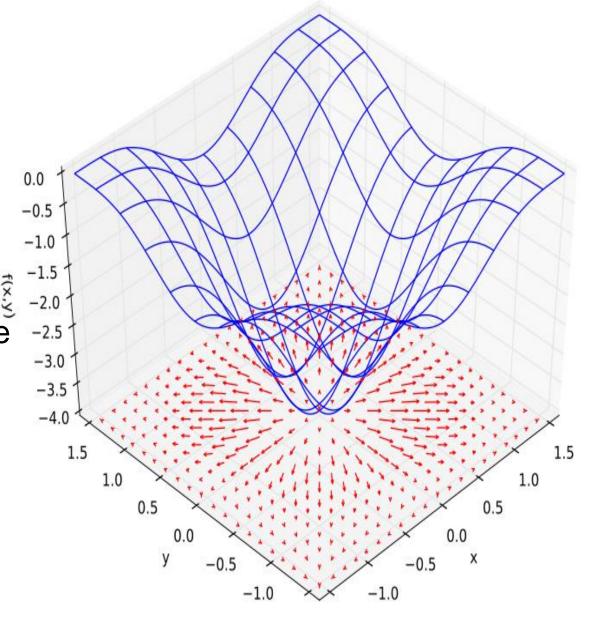
Para se alcançar um ponto de mínimo deve-se seguir a direção contrária ao gradiente,

isto é, deve-se dar passos na direção

$$-\nabla_W L(W)$$

Mais precisamente, seja  $W^t$  a matriz de pesos no passo t então

$$W^{t+1} = W^t - \alpha \nabla_W L(W)$$



Para se alcançar um ponto de mínimo deve-se seguir a direção contrária ao gradiente,

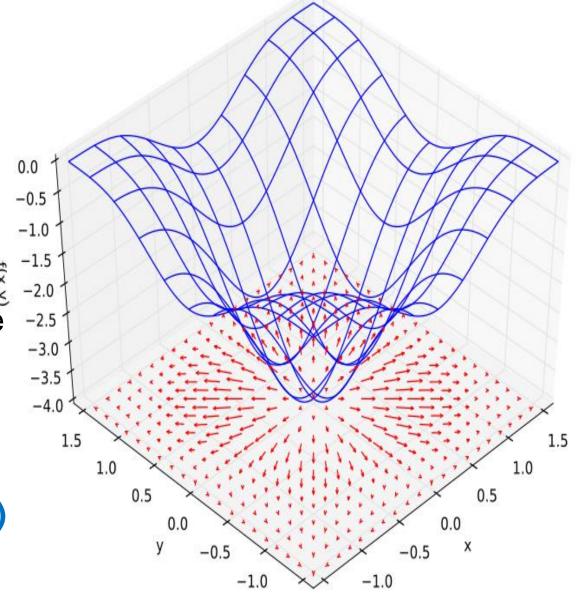
isto é, deve-se dar passos na direção

$$-\nabla_{W}L(W)$$

Mais precisamente, seja  $W^t$  a matriz de pesos no passo t então

$$W^{t+1} = W^t - \alpha \nabla_W L(W)$$

em que  $\alpha$  é chamado de *taxa de* aprendizado (ou tamanho do passo)



Para se alcançar um ponto de mínimo deve-se seguir a direção contrária ao gradiente,

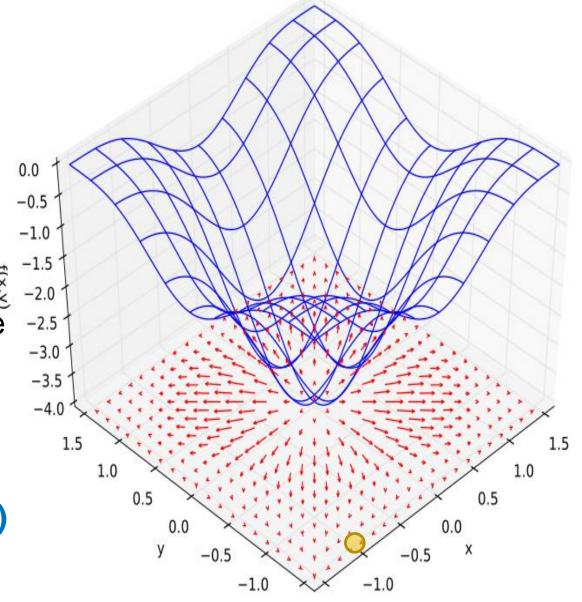
isto é, deve-se dar passos na direção

$$-\nabla_{W}L(W)$$

Mais precisamente, seja  $W^t$  a matriz de pesos no passo t então

$$W^{t+1} = W^t - \alpha \nabla_W L(W)$$

em que  $\alpha$  é chamado de *taxa de* aprendizado (ou tamanho do passo)

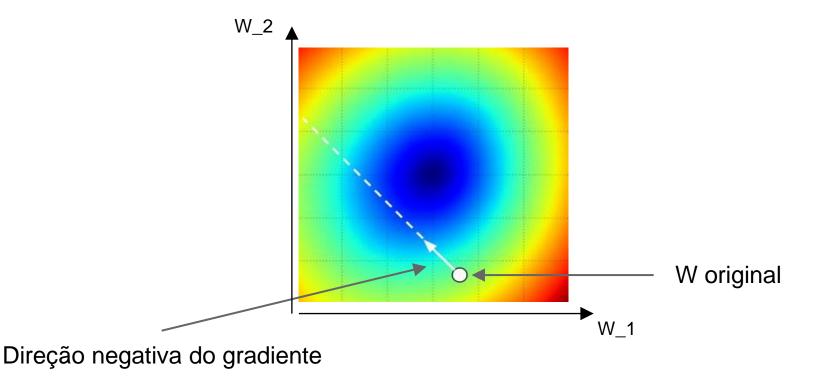


```
# Vanilla Gradient Descent

while True:
    weights_grad = evaluate_gradient(loss_fun, data, weights)
    weights += - step_size * weights_grad # perform parameter update
```

```
# Vanilla Gradient Descent

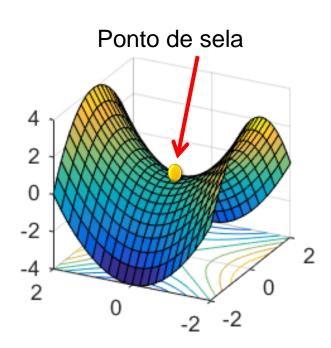
while True:
    weights_grad = evaluate_gradient(loss_fun, data, weights)
    weights += - step_size * weights_grad # perform parameter update
```



Seguir a direção contrária ao gradiente deve levar a uma perda mínima

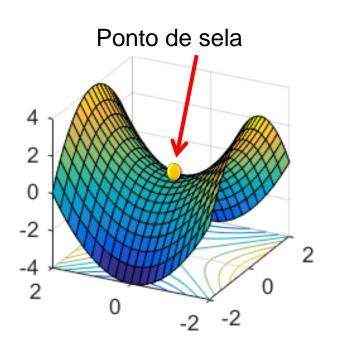
Seguir a direção contrária ao gradiente deve levar a uma perda mínima

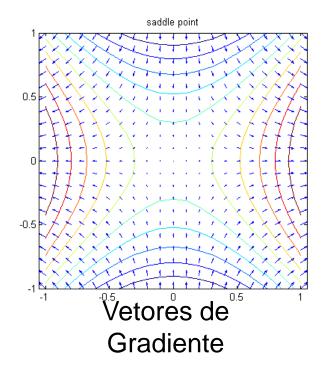
Mas pode demorar muito tempo. Uma razão é a presença de pontos de sela, em que o gradiente também desaparece



Seguir a direção contrária ao gradiente deve levar a uma perda mínima

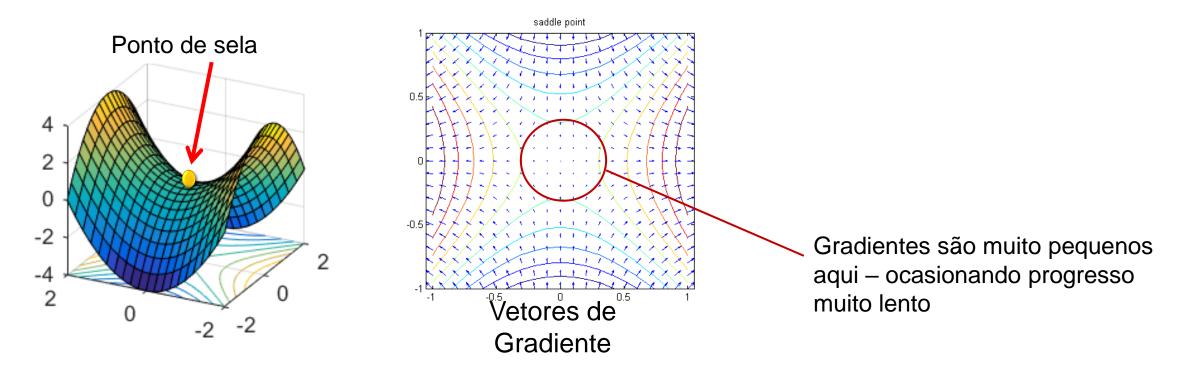
Mas pode demorar muito tempo. Uma razão é a presença de pontos de sela, em que o gradiente também desaparece





Seguir a direção contrária ao gradiente deve levar a uma perda mínima

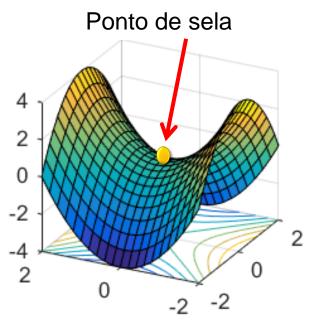
Mas pode demorar muito tempo. Uma razão é a presença de pontos de sela, em que o gradiente também desaparece



Existem várias evidências de que a maioria dos extremos da função de perda (ou zeros do gradiente da função de perda  $\nabla_W L$ ) para redes neurais profundas são de fato pontos de sela

Veja por exemplo

Dauphin et al. "Identifying and attacking the saddle point problem in high-dimensional non-convex optimization" arXiv 1406.2572, 2014.



A perda total L é dada pela soma das perdas para todos os itens de dados

$$L = \sum_{i=1}^{N} L(x_i, y_i, W)$$

A perda total L é dada pela soma das perdas para todos os itens de dados

$$L = \sum_{i=1}^{N} L(x_i, y_i, W)$$

assim o gradiente da perda total é dado por

$$\frac{dL}{dW} = \sum_{i=1}^{N} \frac{dL}{dW} (x_i, y_i, W)$$

A perda total *L* é dada pela soma das perdas para todos os itens de dados

$$L = \sum_{i=1}^{N} L(x_i, y_i, W)$$

assim o gradiente da perda total é dado por

$$\frac{dL}{dW} = \sum_{i=1}^{N} \frac{dL}{dW} (x_i, y_i, W)$$

Portanto, calcular o gradiente em relação a W exige uma passagem completa pelo conjunto de dados

A perda total *L* é dada pela soma das perdas para todos os itens de dados

$$L = \sum_{i=1}^{N} L(x_i, y_i, W)$$

assim o gradiente da perda total é dado por

$$\frac{dL}{dW} = \sum_{i=1}^{N} \frac{dL}{dW} (x_i, y_i, W)$$

Portanto, calcular o gradiente em relação a W exige uma passagem completa pelo conjunto de dados

A obtenção do valor mínimo da função de perda pode exigir milhões de passos de gradiente e, portanto, se torna muito caro

#### Processamento em Lotes (Minibatches)

Em vez de se calcular um gradiente sobre todo o conjunto de dados, pode-se calculá-lo usando um subconjunto de tamanho fixo de amostras de dados chamado *minibatch* (seu tamanho é tipicamente 32, 64, 128, 256,...)

#### Processamento em Lotes (Minibatches)

Em vez de se calcular um gradiente sobre todo o conjunto de dados, pode-se calculá-lo usando um subconjunto de tamanho fixo de amostras de dados chamado *minibatch* (seu tamanho é tipicamente 32, 64, 128, 256,...)

O minibatch é idealmente uma amostra aleatória de tamanho m do conjunto de dados (na prática, podem ser apenas m amostras consecutivas)

#### Processamento em Lotes (Minibatches)

Em vez de se calcular um gradiente sobre todo o conjunto de dados, pode-se calculá-lo usando um subconjunto de tamanho fixo de amostras de dados chamado *minibatch* (seu tamanho é tipicamente 32, 64, 128, 256,...)

O minibatch é idealmente uma amostra aleatória de tamanho m do conjunto de dados (na prática, podem ser apenas m amostras consecutivas)

Então se calcula o gradiente da seguinte forma: (N o tamanho do conjunto de dados, m o tamanho do minibatch)

$$g^{(t)} = \frac{1}{m} \sum_{j=i_1,...,i_m \in \{1,...,N\}} \nabla_W L(x_j, y_j, W)$$

Considerando  $W^{(t)}$  como a matriz de pesos na iteração t, temos que:

$$W^{(t+1)} = W^{(t)} - \alpha \, g^{(t)}$$

Considerando  $W^{(t)}$  como a matriz de pesos na iteração t, temos que:

$$W^{(t+1)} = W^{(t)} - \alpha \, g^{(t)}$$

Esse método é chamado de *gradiente descendente estocástico* (SGD). O SGD e suas variantes são usadas quase universalmente em treinamento de redes profundas

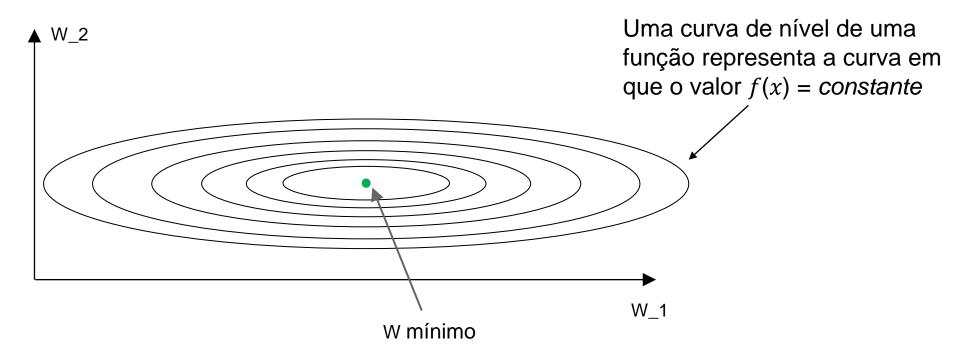
Considerando  $W^{(t)}$  como a matriz de pesos na iteração t, temos que:

$$W^{(t+1)} = W^{(t)} - \alpha g^{(t)}$$

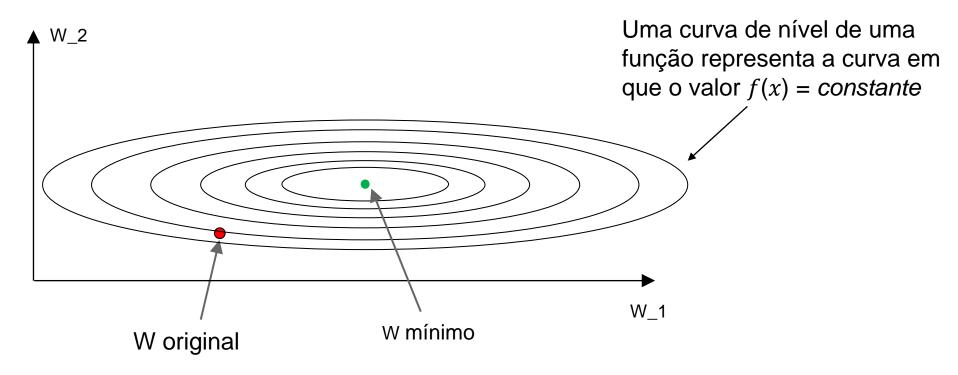
Esse método é chamado de *gradiente descendente estocástico* (SGD). O SGD e suas variantes são usadas quase universalmente em treinamento de redes profundas

O SGD usa  $g^{(t)}$ , isto é o gradiente de um *minibatch*, no lugar do gradiente sobre o conjunto de dados completo e é dito "estocástico" pois o gradiente de um *minibatch* é calculado sobre uma amostra do conjunto de dados

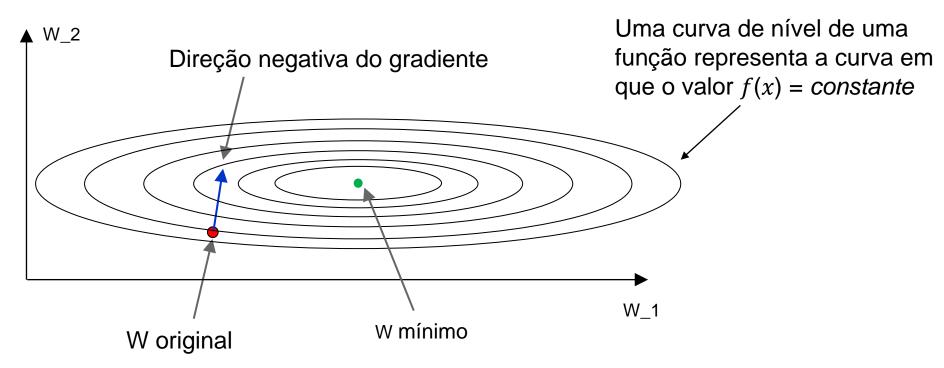
O gradiente da função em um ponto é sempre perpendicular a curva de nível naquele ponto

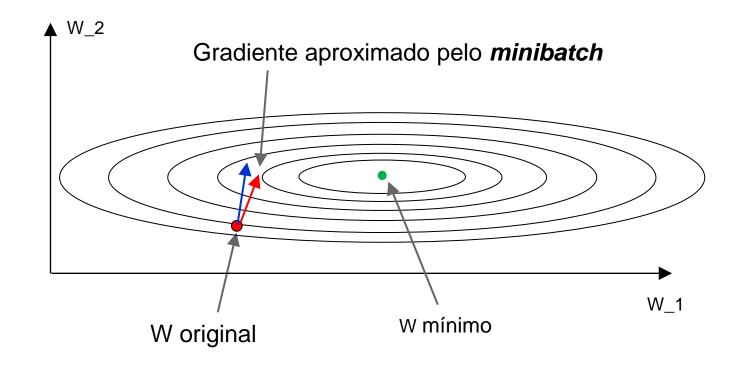


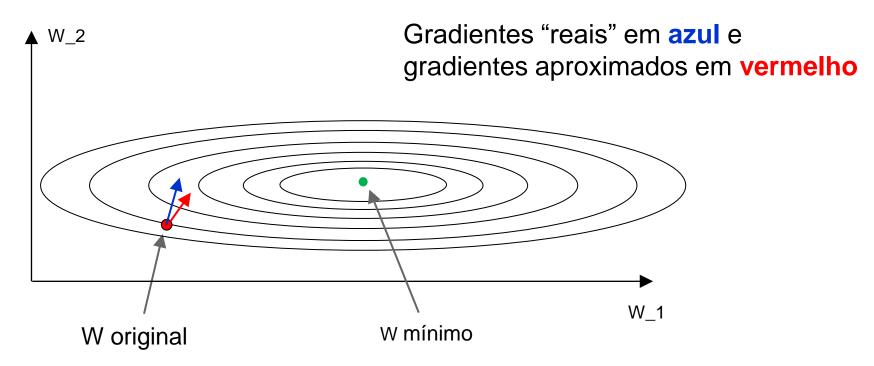
O gradiente da função em um ponto é sempre perpendicular a curva de nível naquele ponto

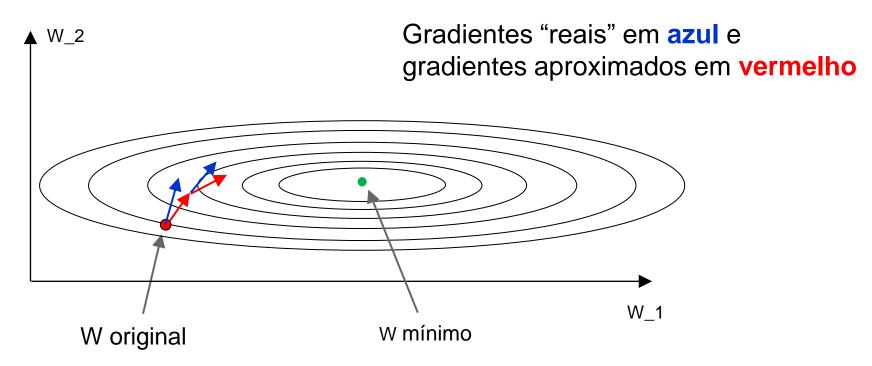


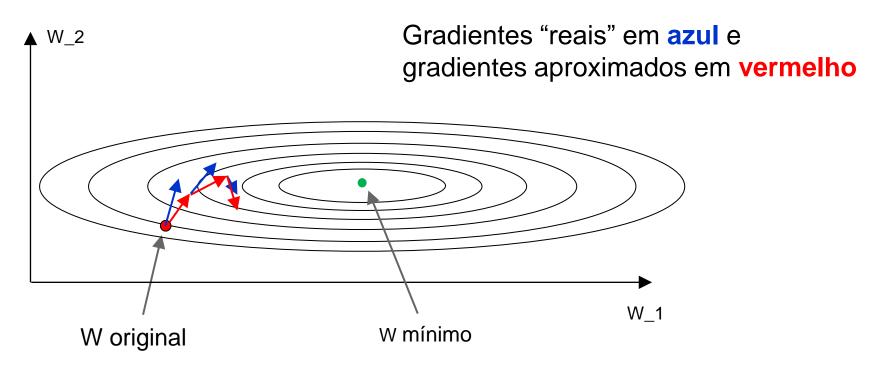
O gradiente da função em um ponto é sempre perpendicular a curva de nível naquele ponto

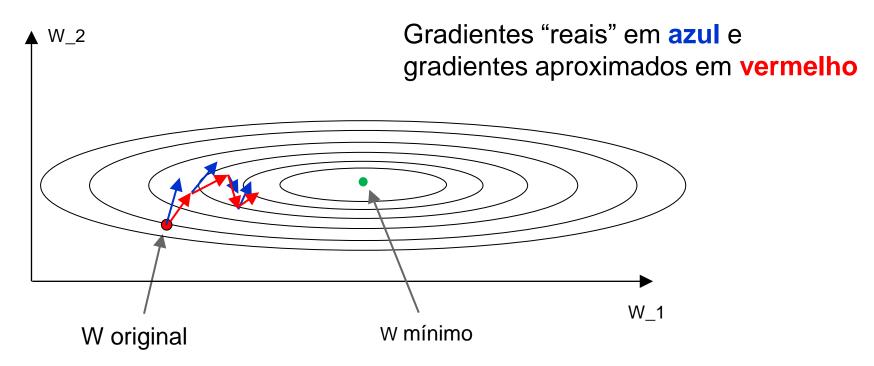


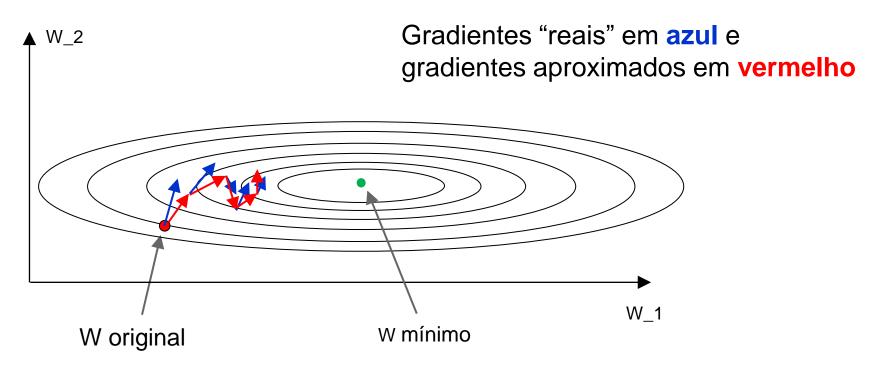












Ideia principal: usar apenas uma pequena amostra do conjunto de treinamento para calcular o gradiente em cada passo

Ideia principal: usar apenas uma pequena amostra do conjunto de treinamento para calcular o gradiente em cada passo

```
# Vanilla Minibatch Gradient Descent

while True:
   data_batch = sample_training_data(data, 256) # sample 256 examples
   weights_grad = evaluate_gradient(loss_fun, data_batch, weights)
   weights += - step_size * weights_grad # perform parameter update
```

Ideia principal: usar apenas uma pequena amostra do conjunto de treinamento para calcular o gradiente em cada passo

```
# Vanilla Minibatch Gradient Descent

while True:
   data_batch = sample_training_data(data, 256) # sample 256 examples
   weights_grad = evaluate_gradient(loss_fun, data_batch, weights)
   weights += - step_size * weights_grad # perform parameter update
```

Tamanhos comuns de *minibatches* são amostras de 32, 64, 128, 256, ... Por exemplo, na AlexNet utilizou-se lotes com 256 amostras