# Търсене и извличане на информация. Приложение на дълбоко машинно обучение

Стоян Михов





Лекция 9: Намиране на градиент чрез пропагиране назад. Стохастично спускане по градиента.

#### План на лекцията

#### 1. Формалности за курса (5 мин)

- 2. Намиране на градиент чрез пропагиране назад Backpropagation (20 мин)
- 3. Пропагиране назад при логистична регресия (20 мин)
- 4. Сходимост на спускането по градиента (20 мин)
- 5. Стохастичен градиент (20 мин)

#### Формалности

- Засега ще провеждаме занятията онлайн всяка сряда от 8:15 до 12:00 часа.
- Засега ще използваме платформата Google meet: meet.google.com/hue-frfx-axb
- Днес ще използваме едновременно слайдове и бяла дъска. Моля следете съответния екран.
- Благодаря за предадените домашни. Ще се постараем да ги оценим до следващото занятие.
- Второто домашно задание ще бъде публикувано в Moodle около средата на декември.
- Деветата лекция се базира на глави 4 и 5 от втория учебник.

## Защо да изучаваме автоматично диференциране, спускане по градиент, стохастичен градиент и т.н.

- Нали в модерните системи за дълбоко обучение тези функции вече са имплементирани за нас?
- Също, защо трябва да изучаваме компилатори, след като те вече са имплементирани за нас?
  - 1. Да знаете какво става под повърхността винаги е полезно.
  - 2. Автоматичното диференциране не винаги работи перфектно разбирането на принципите е критично при дебъгване и подобряване на моделите.
  - 3. При по-специални модели може да се наложи добавянето на нови модули. За разширяването на системите е съществено познаването на теорията.
  - 4. Може да ви се наложи да участвате в разработването на нови системи за дълбоко обучение.

#### План на лекцията

- 1. Формалности за курса (5 мин)
- 2. Намиране на градиент чрез пропагиране назад Backpropagation (20 мин)
- 3. Пропагиране назад при логистична регресия (20 мин)
- 4. Сходимост на спускането по градиента (20 мин)
- 5. Стохастичен градиент (20 мин)

#### Числено намиране на градиент

- . Нека  $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ . Тогава:  $\frac{\partial f(x_1,\ldots,x_n)}{\partial x_i} = \lim_{h \to 0} \frac{f(x_1,\ldots,x_i+h,\ldots,x_n)-f(x_1,\ldots,x_i,\ldots,x_n)}{h}$  т.е.  $\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} = \lim_{h \to 0} \frac{f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i)-f(\mathbf{x})}{h}$ , където  $\mathbf{e}_i$  е i-тия базисен вектор.
- Полагайки достатъчно малко h, примерно  $h=10^{-4}$ , ние можем да намерим приближение на производната:  $\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} pprox \frac{f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i)-f(\mathbf{x})}{h}$ .
- . По добра апроксимация на производната:  $\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} \approx \frac{f(\mathbf{x} + h\mathbf{e}_i) f(\mathbf{x} h\mathbf{e}_i)}{2h}.$
- Градиента намираме, като апроксимираме производната в дадената точка по всяка от n-те координати.
- Задача: Докажете, че втората формула ни дава по-добро приближение на производната, като оцените порядъка на грешката.
- Сложност: Ако сложността на израза за f е от порядък O(k) то сложността за численото намиране на градиента на f в точката  $\mathbf x$  е от порядък O(nk).

#### Аналитично намиране на градиент

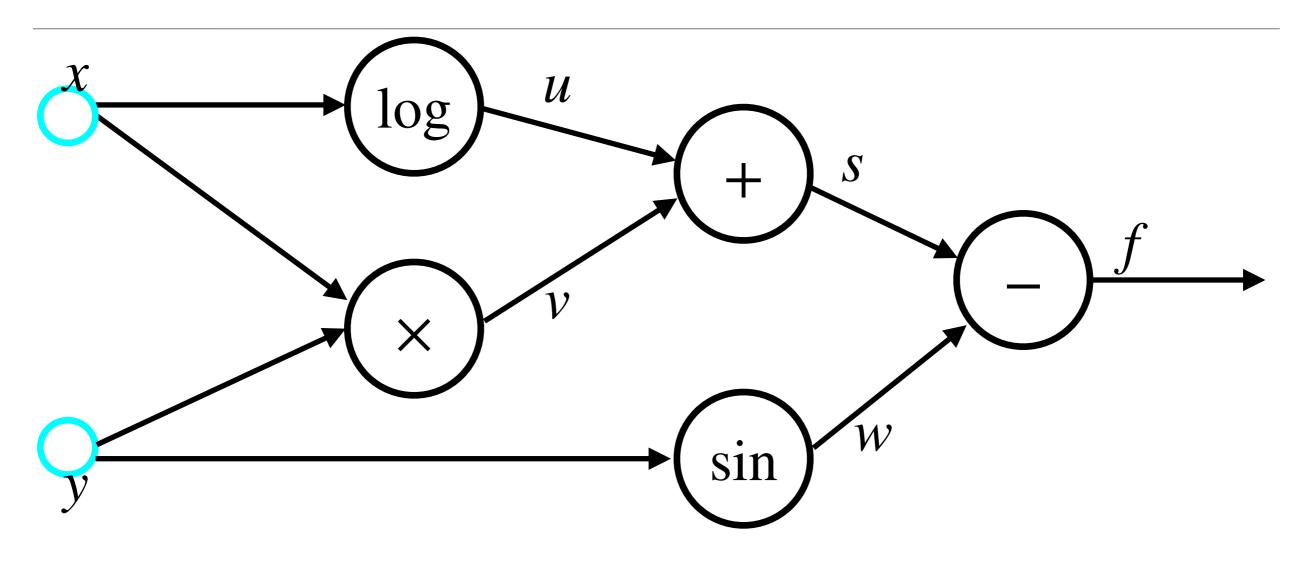
- . Нека  $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ . Нека сме намерили аналитични изрази за производните  $\dfrac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i}$  за  $i=1,2,\ldots,n$ .
- Производната по дадено направление намираме, като заместим в съответния израз за производната с дадената точка.
- Градиента намираме, като заместим в израза за производната по всяка от n-те координати с дадената точка.
- . Сложност: Ако сложността на изразите за  $\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i}$  е от порядък O(k'), то сложността за аналитичното намиране на градиента на f в точката  $\mathbf{x}$  е от порядък O(nk').
- Задача: Докажете, че съществуват изрази със сложност O(k), за които сложността на израза за производната е от порядък  $O(2^k)$ .

#### Намиране на градиент чрез пропагиране назад

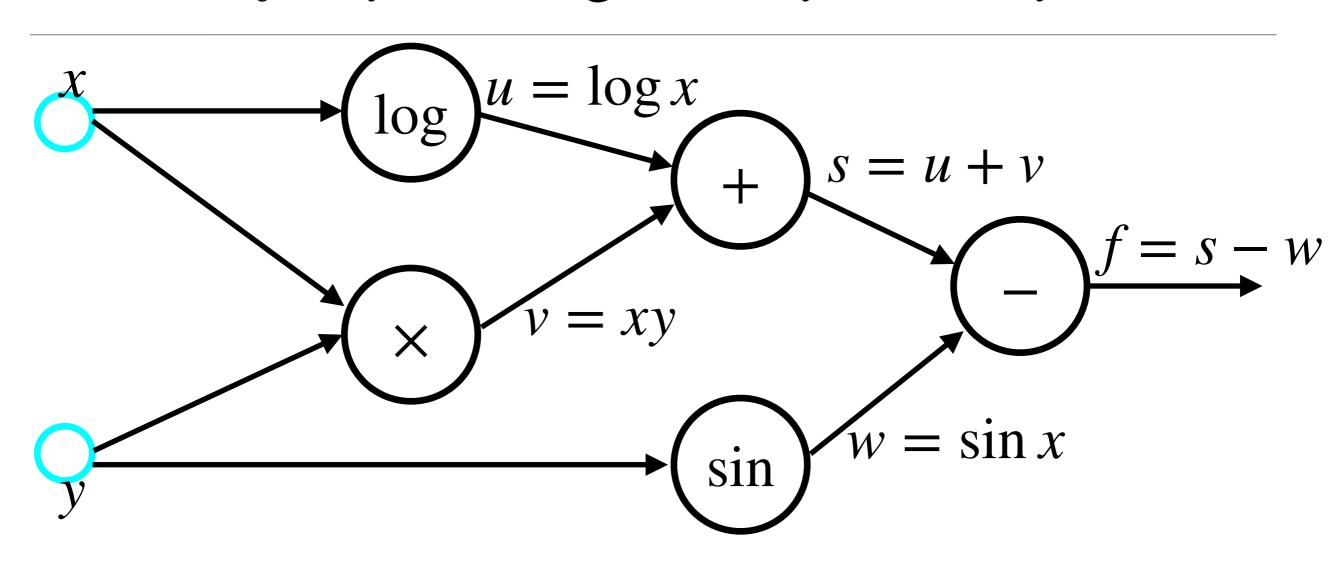
#### Backpropagation

- Намира точните производни и градиент в дадена точка не е числено приближение.
- Използва се аналитичен израз за производните само за локалните функции — избягва се намирането на изразите за производните на целевата функция.
- Преизползват се междинните резултати от изчисленията, с което се постига оптимална изчислителна сложност.
- Сложността за намиране на градиента е O(k), за израз със сложност k.

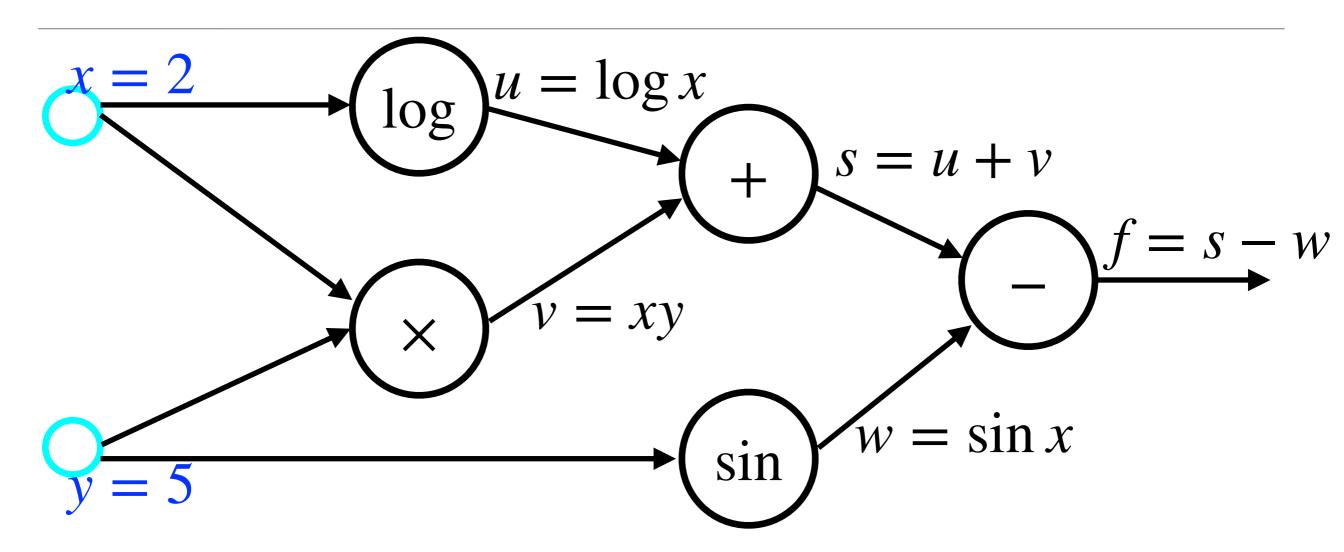
Пример:  $f(x, y) = (\log(x) + xy) - \sin(y)$ 



Пример: 
$$f(x, y) = (\log(x) + xy) - \sin(y)$$

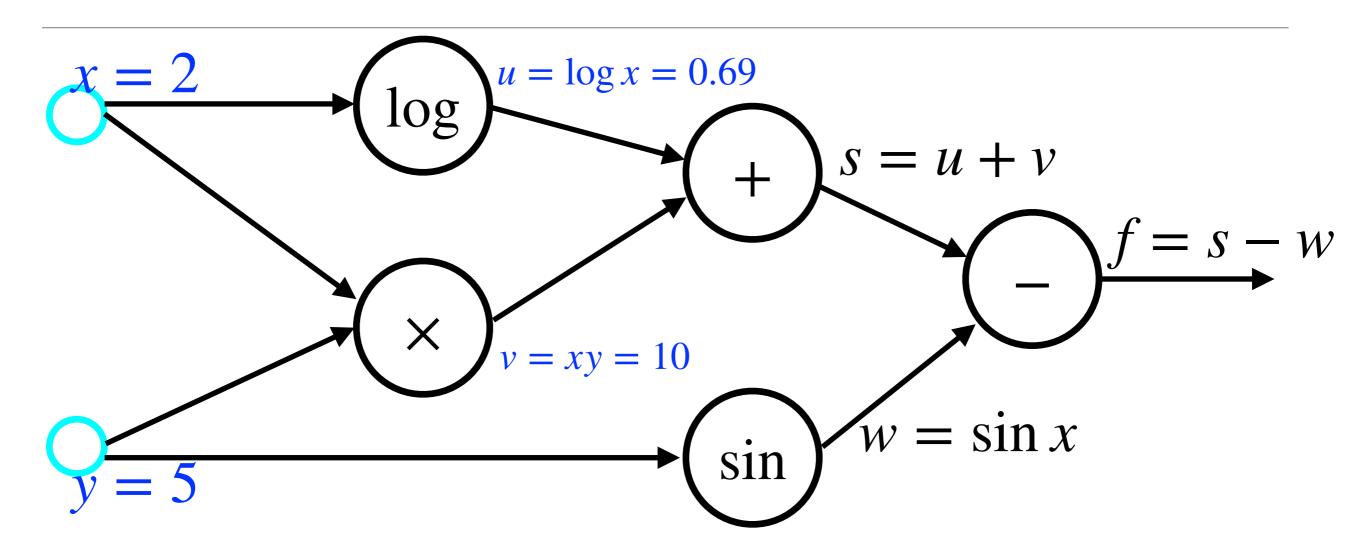


Пример:  $f(x, y) = (\log(x) + xy) - \sin(y)$ 



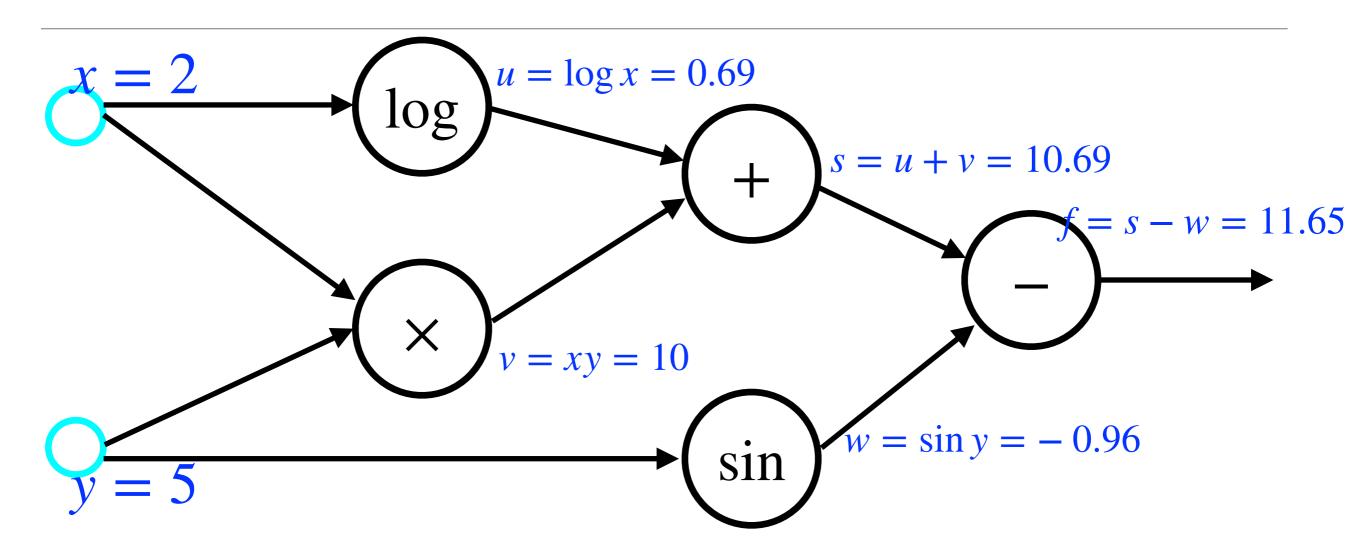
Пропагиране напред — Forward propagation

Пример: 
$$f(x, y) = (\log(x) + xy) - \sin(y)$$



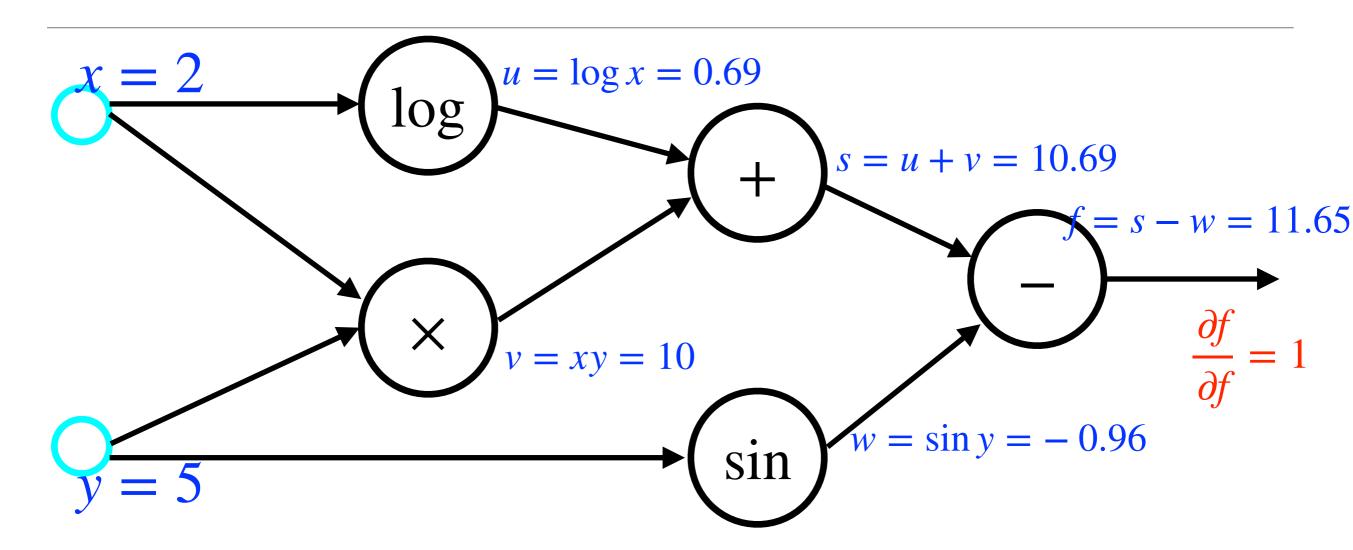
Пропагиране напред — Forward propagation

Пример: 
$$f(x, y) = (\log(x) + xy) - \sin(y)$$

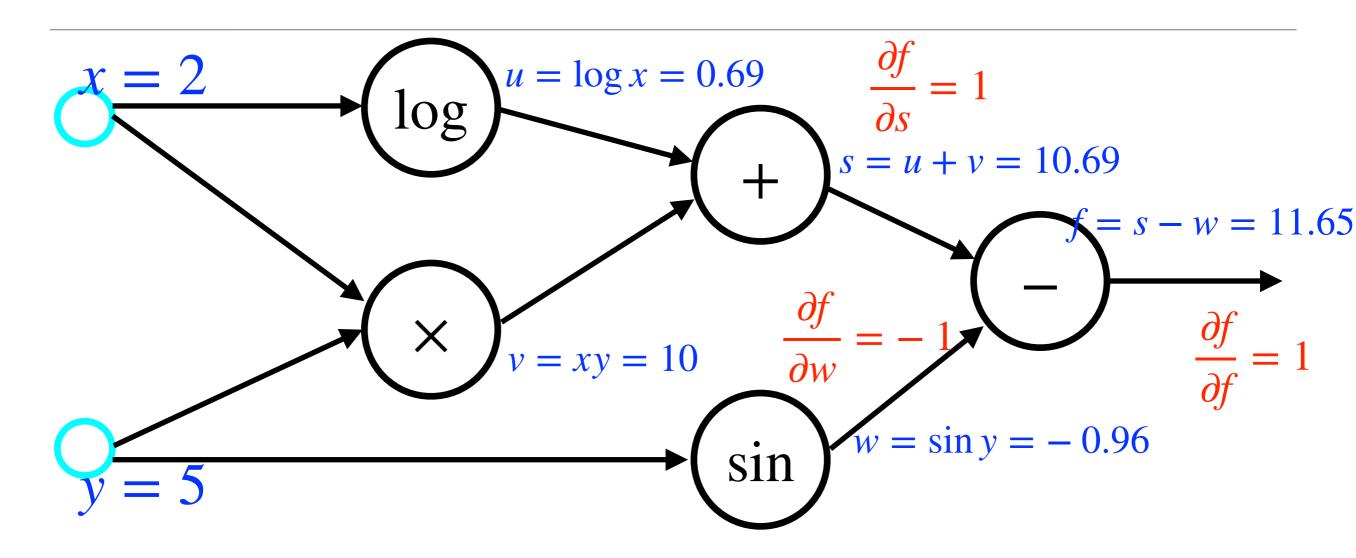


Пропагиране напред — Forward propagation

Пример: 
$$f(x, y) = (\log(x) + xy) - \sin(y)$$

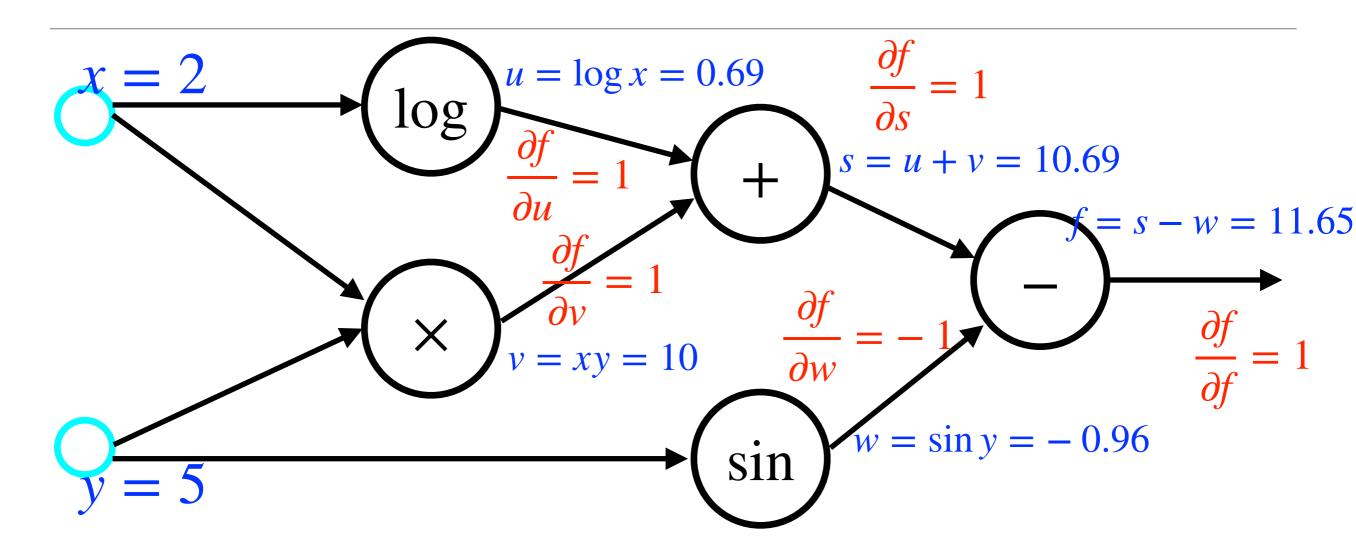


Пример:  $f(x, y) = (\log(x) + xy) - \sin(y)$ 



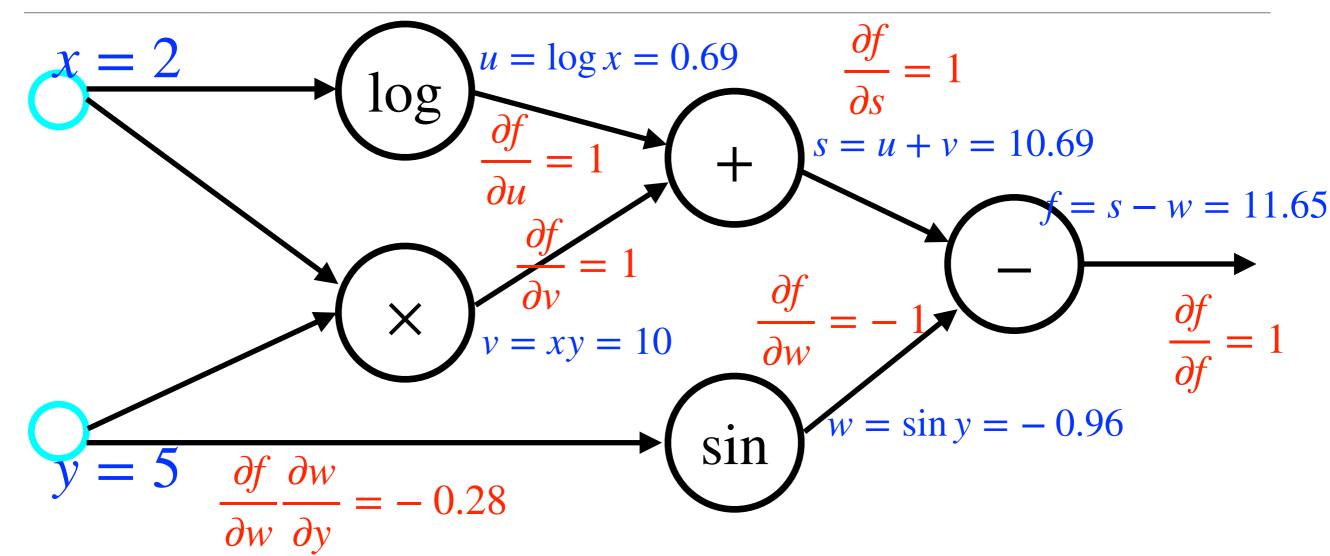
$$\frac{\partial f}{\partial w} = \frac{\partial f}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial w} = \frac{\partial f}{\partial f} (-1) = -1, \quad \frac{\partial f}{\partial s} = \frac{\partial f}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial s} = \frac{\partial f}{\partial f} 1 = 1$$

Пример: 
$$f(x, y) = (\log(x) + xy) - \sin(y)$$



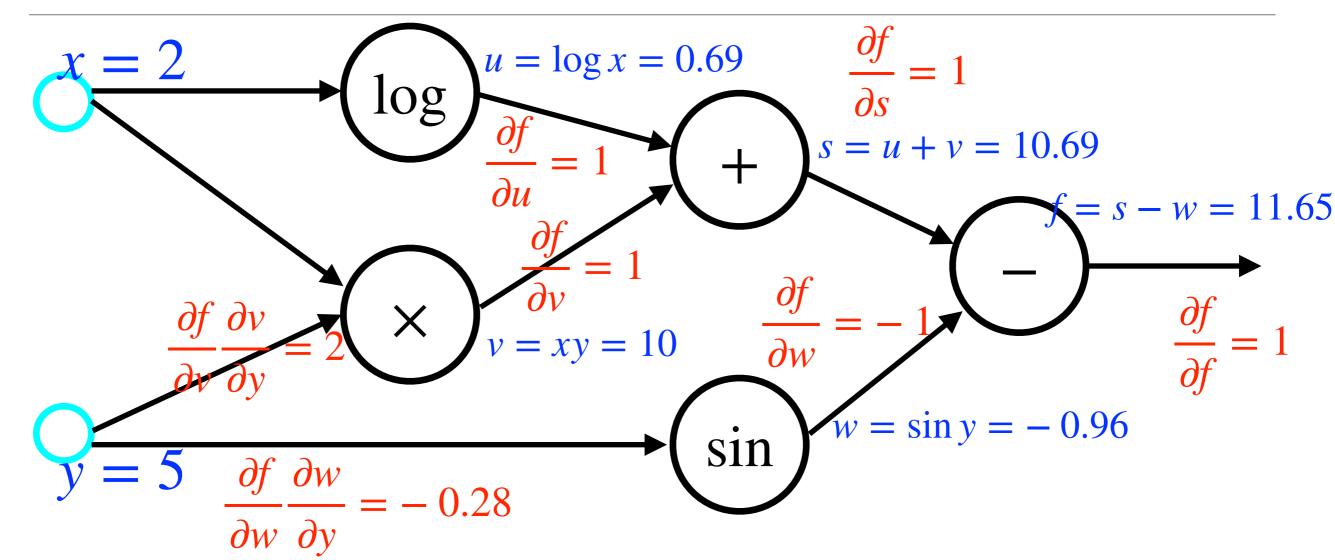
$$\frac{\partial f}{\partial u} = \frac{\partial f}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial u} = \frac{\partial f}{\partial s} 1 = 1, \frac{\partial f}{\partial v} = \frac{\partial f}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial v} = \frac{\partial f}{\partial s} 1 = 1$$

Пример: 
$$f(x, y) = (\log(x) + xy) - \sin(y)$$



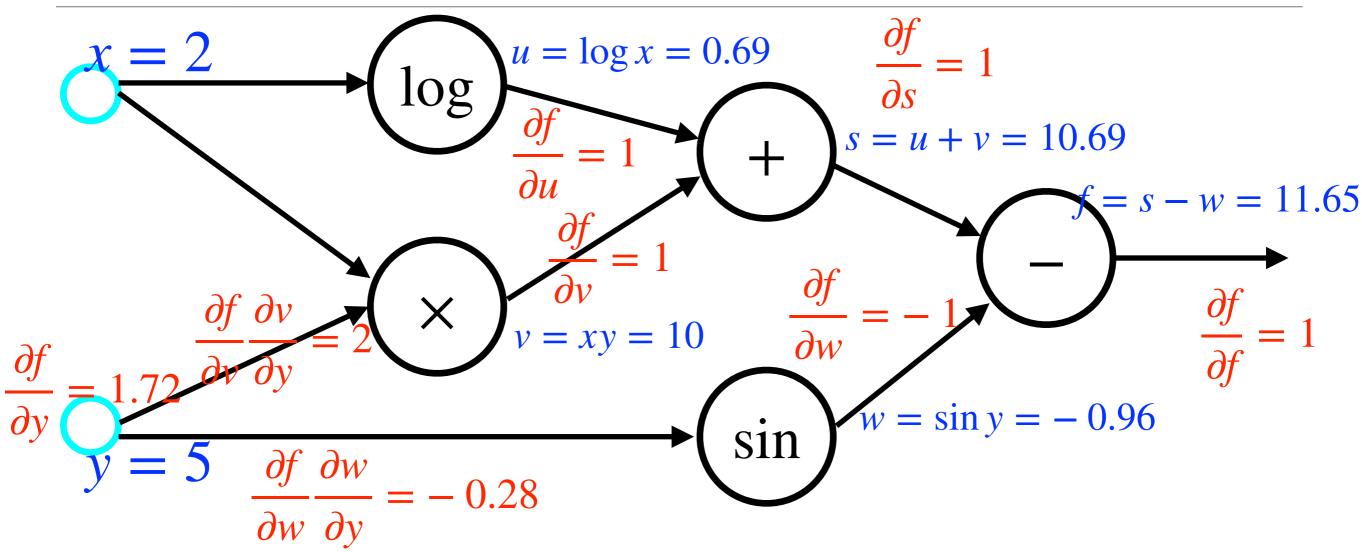
$$\frac{\partial f}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial w} \cos(y) = (-1)\cos(5) = -0.28$$

Пример: 
$$f(x, y) = (\log(x) + xy) - \sin(y)$$

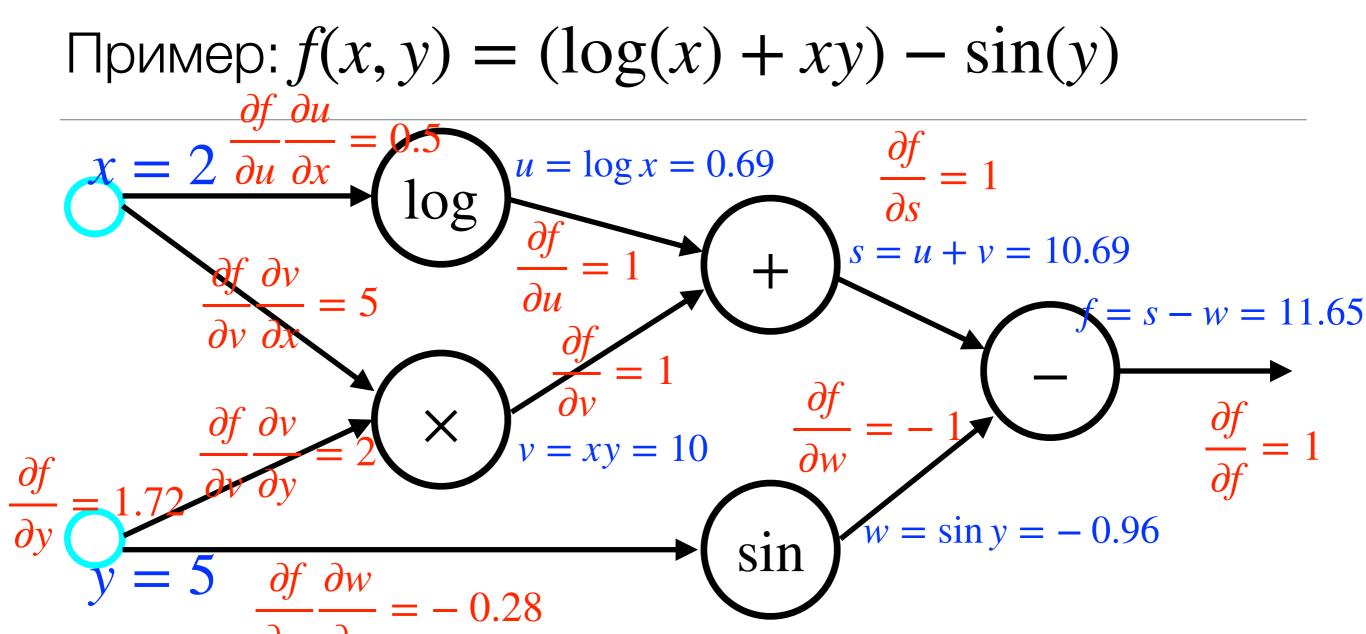


$$\frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial v}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial v} x = 2$$

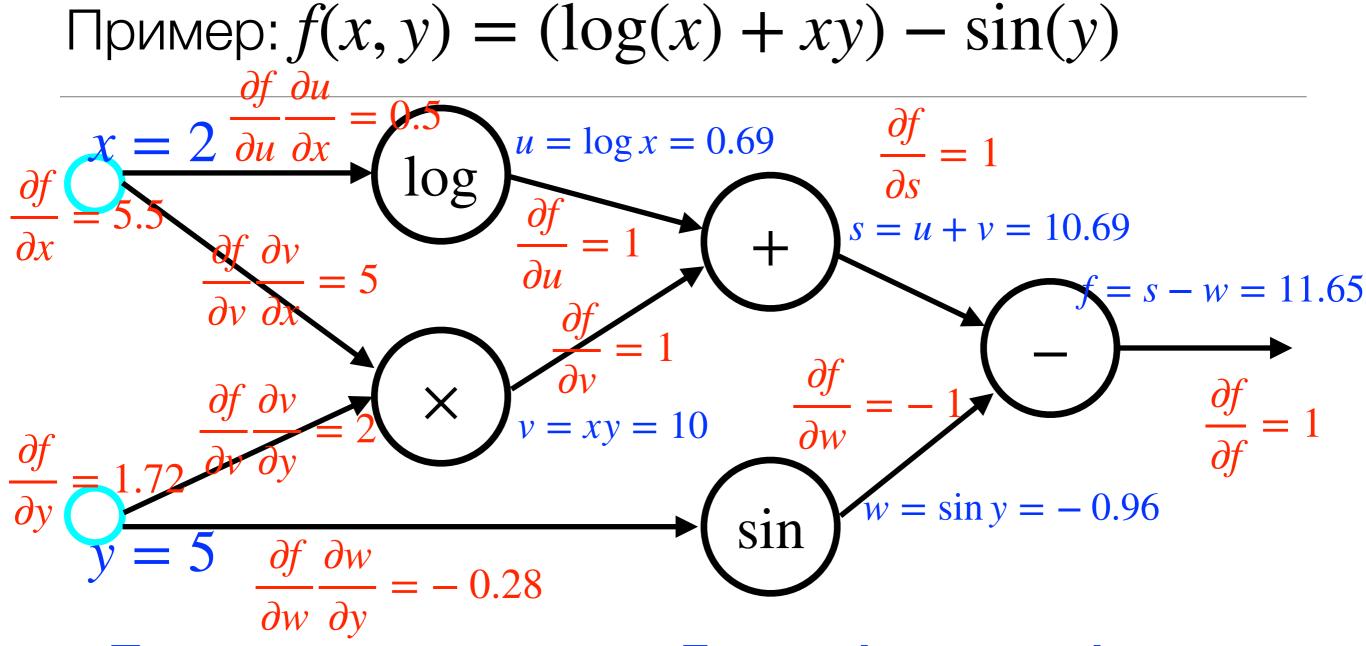
Пример: 
$$f(x, y) = (\log(x) + xy) - \sin(y)$$



$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial f}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial y} = 2 - 0.28 = 1.72$$

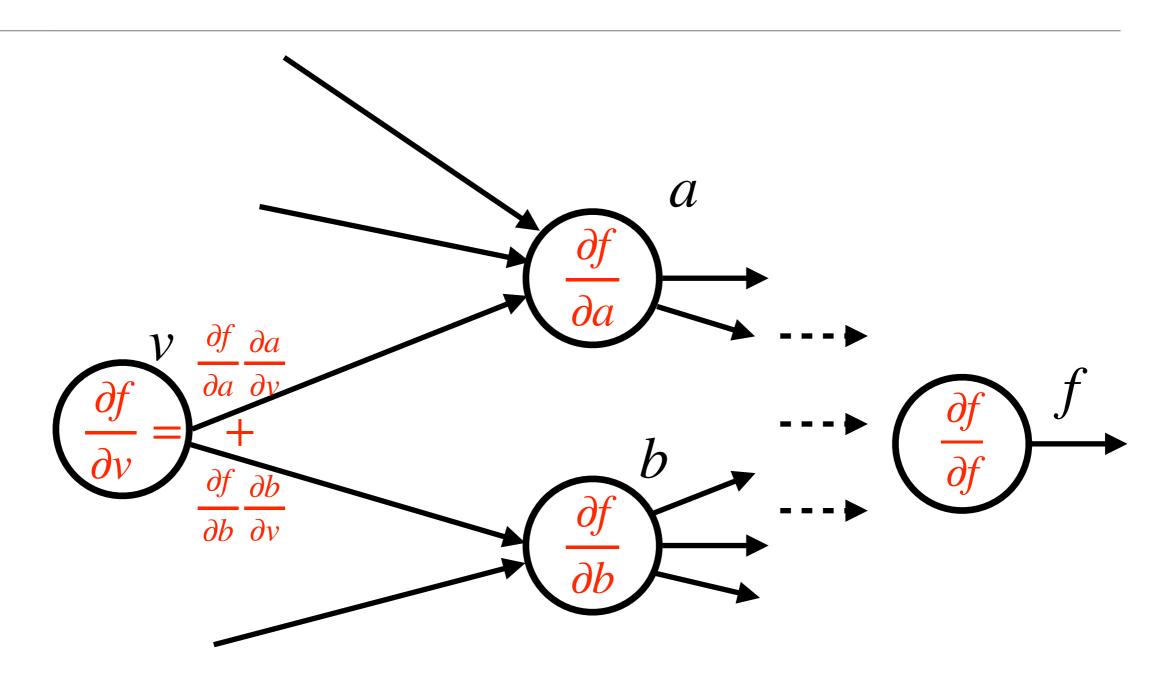


$$\frac{\partial f}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial u}\frac{1}{x} = 0.5, \frac{\partial f}{\partial v}\frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial v}y = 5$$



$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial v}{\partial x} = 5 + 0.5 = 5.5$$

### Основен инвариант



## Формализация на Backpropagation — изчислителен граф

- Даден е ацикличен граф  $G = (V, E), E \subset V \times V$ .
- За всеки връх  $v \in V$  (непосредствените) предшественици означаваме с  $P_G(v) = [p \in V \mid (p,v) \in E]$ . Ще предполагаме, че  $P_G(v)$  е списък.
- Листата на графа ще означаваме с  $L(G) = [v \mid P_G(v) = \varnothing].$
- Крайни върхове на графа ще означаваме с  $T(G) = [v \mid \neg \exists u \in V : (v,u) \in E].$  Ще предполагаме, че в графа съществува единствен краен връх: |T(G)| = 1

# Формализация на Backpropagation — изчислителен граф

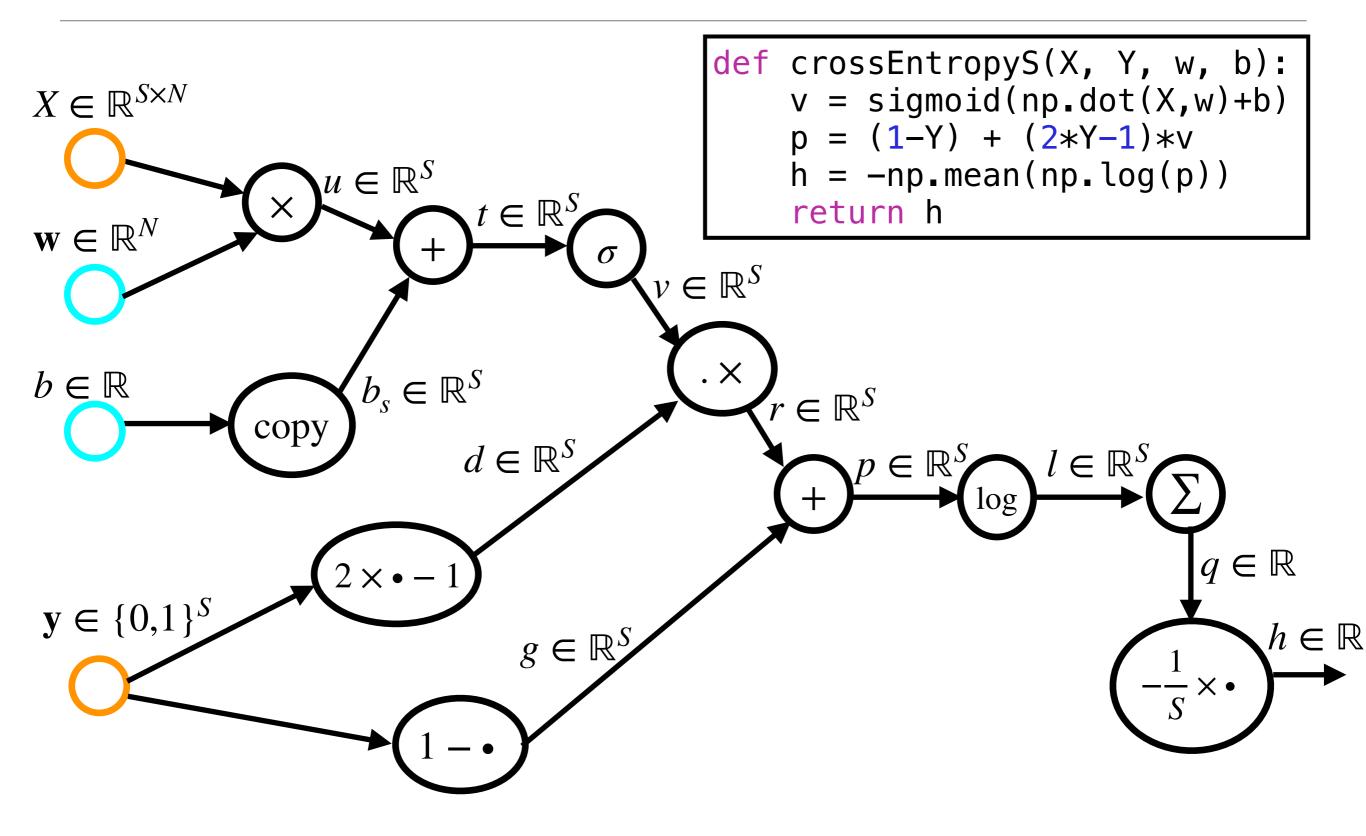
- За всеки връх  $v \in V \setminus L(G)$  ще предполагаме, че е дефинирана функция за изчисляване на стойността:  $\operatorname{calc}(G,v): \mathbb{R}^{|P_G(v)|} \to \mathbb{R}.$
- За всеки връх  $v \in V \setminus L(G)$  и всеки негов предшественик  $u \in P_G(v)$  ще предполагаме, че е дефинирана функция за изчисляване на частната производна на функцията  $\operatorname{calc}(G,v)$  спрямо аргумента u, която бележим с  $\operatorname{deriv}(G,v,u): \mathbb{R}^{|P_G(v)|} \to \mathbb{R}.$

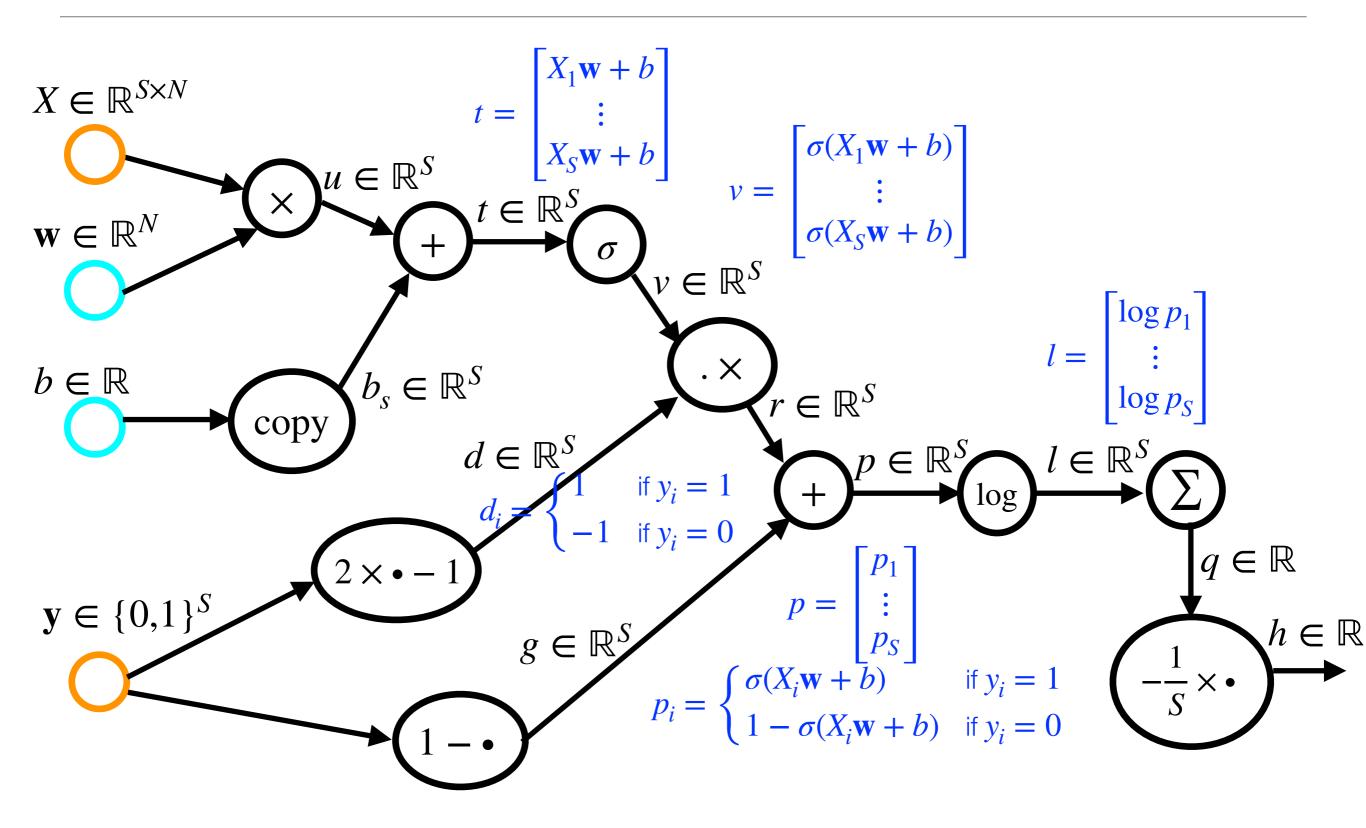
#### Backpropagation алгоритъм

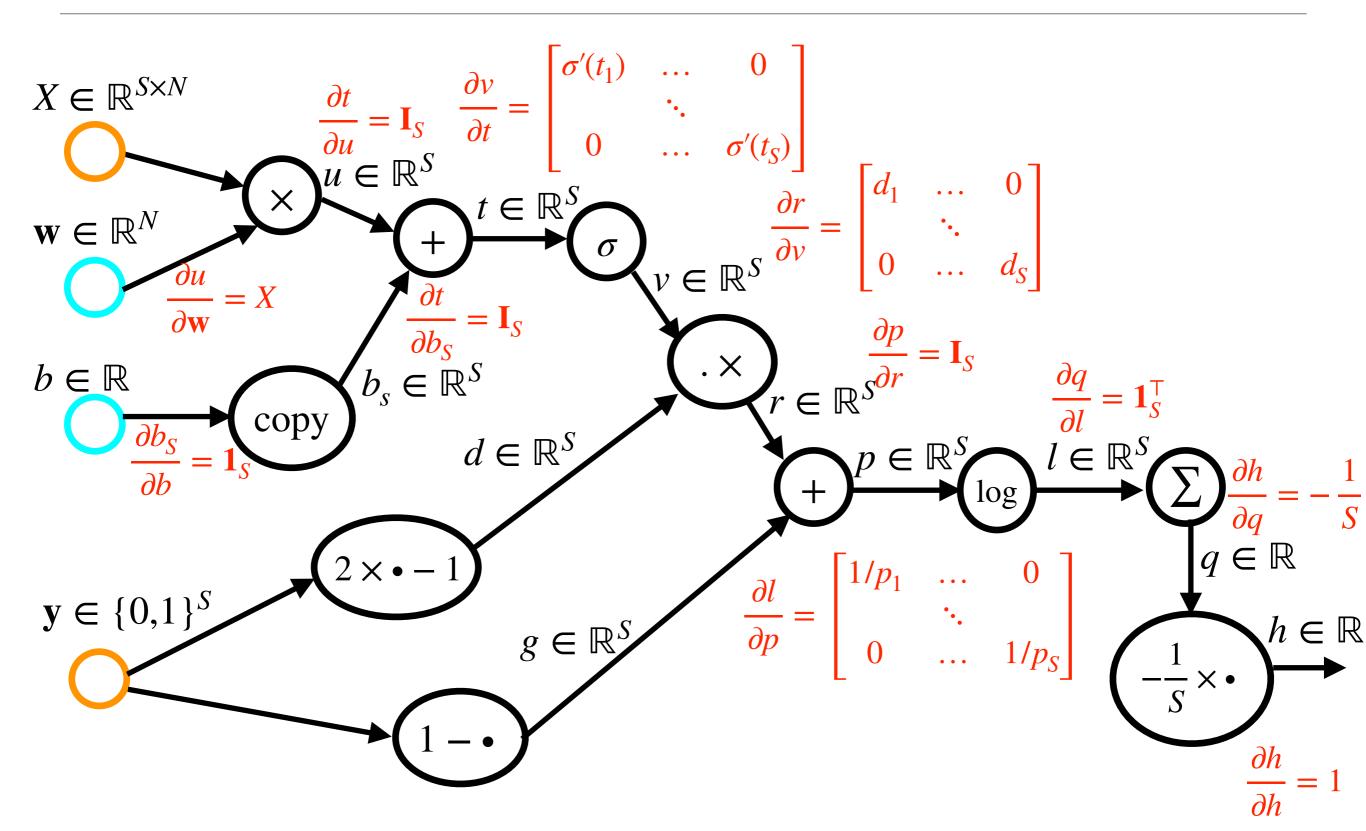
```
Forward(G):
   for v in topologicalSort(G) do
2
      if v in Leafs(G) then read(F(v))
3
      else
         [p1,p2,...,pk] <- Predecessors(G)(v)</pre>
5
         F(v) \leftarrow calc(G,v)(F(p1),...,F(pk))
6
  return F
Backward(G,F):
   for v in topologicalSort(G) do B(v) <- 0
   for v in reverseTopologicalSort(G) do
3
      if v in Top(G) then B(v) < -1
      [p1,p2,...,pk] \leftarrow Predecessors(G)(v)
4
5
      for p in Predecessors(G)(v) do
6
         B(p) += B(v) * deriv(G, v, p)(F(p1), ..., F(pk))
  return B
```

#### План на лекцията

- 1. Формалности за курса (5 мин)
- 2. Намиране на градиент чрез пропагиране назад Backpropagation (20 мин)
- 3. Пропагиране назад при логистична регресия (20 мин)
- 4. Сходимост на спускането по градиента (20 мин)
- 5. Стохастичен градиент (20 мин)







$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial h}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial l} \frac{\partial l}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial v} \frac{\partial v}{\partial t}$$

$$= -\frac{1}{S} \mathbf{1}_{S}^{T} \begin{bmatrix} 1/p_{1}... & 0 \\ & \ddots & \\ & 0... & 1/p_{S} \end{bmatrix} \mathbf{I}_{S} \begin{bmatrix} d_{1}... & 0 \\ & \ddots & \\ & 0... & d_{S} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma'(t_{1})... & 0 \\ & \ddots & \\ & 0... & \sigma'(t_{S}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{y_{1} - \sigma(X_{1}\mathbf{w} + b)}{S} ... - \frac{y_{S} - \sigma(X_{S}\mathbf{w} + b)}{S} \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial h}{\partial b} = \frac{\partial h}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial b_S} \frac{\partial b_S}{\partial b} = \left[ -\frac{y_1 - \sigma(X_1 \mathbf{w} + b)}{S} \dots -\frac{y_S - \sigma(X_S \mathbf{w} + b)}{S} \right] \mathbf{I}_S \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} = -\frac{1}{S} \sum_{i=1}^S y_i - \sigma(X_i \mathbf{w} + b)$$

$$\frac{\partial h}{\partial w} = \frac{\partial h}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial w} = \left[ -\frac{y_1 - \sigma(X_1 \mathbf{w} + b)}{S} \dots - \frac{y_S - \sigma(X_S \mathbf{w} + b)}{S} \right] \mathbf{I}_S X =$$

$$= -\frac{1}{S} \sum_{i=1}^{S} (y_i - \sigma(X_i \mathbf{w} + b)) X_i$$

#### План на лекцията

- 1. Формалности за курса (5 мин)
- 2. Намиране на градиент чрез пропагиране назад Backpropagation (20 мин)
- 3. Пропагиране назад при логистична регресия (20 мин)
- 4. Сходимост на спускането по градиента (20 мин)
- 5. Стохастичен градиент (20 мин)

#### Градиент, Хесиан, развиване в ред на Тейлър

**Теорема (Тейлър)**: Нека  $g: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$  е два пъти диференцируема с непрекъснати производни в околност на точката  $t_0 \in \mathbb{R}$ . Нека  $t \in \mathbb{R}$  е произволна точка в тази околност. Тогава съществува  $\bar{t} \in (t_0, t)$ , така че:

$$g(t) = g(t_0) + g'(t_0)(t - t_0) + \frac{1}{2}g''(\bar{t})(t - t_0)^2$$

Ще изведем теоремата на Тейлър за многомерния случай.

Нека $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ . Градиент и Хесиан наf наричаме съответно:

$$\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} f(\mathbf{x}) \\ \frac{\partial}{\partial x_2} f(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_n} f(\mathbf{x}) \end{bmatrix}, \nabla_{\mathbf{x}}^2 f(\mathbf{x}) = \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_1} f(\mathbf{x}) & \dots & \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_n} f(\mathbf{x}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2}{\partial x_n \partial x_1} f(\mathbf{x}) & \dots & \frac{\partial^2}{\partial x_n \partial x_n} f(\mathbf{x}) \end{bmatrix}$$

Нека  $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ . Т.е. за  $\mathbf{v}\in\mathbb{R}^n$  имаме, че  $f(\mathbf{v})\in\mathbb{R}$ . Разглеждаме функциите  $\mathbf{v}:\mathbb{R}\to\mathbb{R}^n$ ,  $\mathbf{v}(t)=\mathbf{x}_0+t(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)$  и  $g:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ ,  $g(t)=f(\mathbf{v}(t))=f(\mathbf{x}_0+t(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0))$  и прилагаме теоремата на Тейлър за g при  $t_0=0,\ t=1$ . В такъв случай имаме, че

$$g'(t) = (f(\mathbf{v}(t)))' = \left(\frac{\partial f(\mathbf{v})}{\partial \mathbf{v}}\right)^{\top} \frac{\partial \mathbf{v}(t)}{\partial t} = (\nabla_{\mathbf{v}} f(\mathbf{v}))^{\top} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{0}),$$

$$g''(t) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\left(\frac{\partial f(\mathbf{v})}{\partial \mathbf{v}}\right)^{\top} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{0})\right) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{0})^{\top} \frac{\partial^{2} f(\mathbf{v})}{\partial \mathbf{v}^{2}} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{0}) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{0})^{\top} \nabla_{\mathbf{v}}^{2} f(\mathbf{v}) (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{0})$$

**Теорема (Тейлър)**: Нека  $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$  е два пъти диференцируема с непрекъснати производни в околност на точката  $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ . Нека  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  е произволна точка в тази околност. Тогава съществува  $\bar{t} \in (0,1)$ , така че ако  $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_0 + \bar{t}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ , то:

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + (\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}_0))^{\mathsf{T}} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^{\mathsf{T}} \nabla_{\mathbf{x}}^2 f(\bar{\mathbf{x}}) (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$$

#### Сходимост на спускането по градиента

• Стремим се да минимизираме кросентропията

$$H_X[\Pr\|\Pr_{\theta}] = -\frac{1}{|X|} \sum_{i=1}^{|X|} \log \Pr_{\theta}[\mathbf{x}^{(i)}]$$
. Нека положим  $f(\theta) = H_X[\Pr\|\Pr_{\theta}]$ .

- Спускаме се по градиента:  $\theta_{k+1} = \theta_k \alpha \, \nabla_\theta f(\theta_k)$
- От развиването в ред на Тейлър получаваме:

$$f(\theta_{k+1}) = f(\theta_k) - \alpha \nabla f(\theta_k)^{\top} \nabla f(\theta_k) + \frac{1}{2} (\alpha \nabla f(\theta_k))^{\top} \nabla^2 f(\bar{\theta}) (\alpha \nabla f(\theta_k))$$

- Да допуснем, че вторите производни са ограничени:  $\|\nabla^2 f(\theta)\| \leq L. \text{ Тогава: } \|\mathbf{u}^\mathsf{T} \nabla^2 f(\theta) \ \mathbf{u}\| \leq L \|\mathbf{u}\|^2$
- Заместваме и получаваме:

$$f(\theta_{k+1}) \le f(\theta_k) - \alpha \|\nabla f(\theta_k)\|^2 + \frac{\alpha^2 L}{2} \|\nabla f(\theta_k)\|^2$$

• Нека подберем  $\alpha$ , така че  $\alpha L < 1$ . Тогава:

$$f(\theta_k) - f(\theta_{k+1}) \ge \frac{\alpha}{2} \|\nabla f(\theta_k)\|^2$$

• Следователно, на всяка стъпка **стойността на** f **намалява** и разликата на последователните членове на редицата е  $\geq \frac{\alpha}{2} \|\nabla f(\theta_k)\|^2$ .

• Нека сумираме нашето неравенство за k = 0, 1, ..., T - 1:

$$\frac{\alpha}{2} \sum_{k=0}^{T-1} \|\nabla f(\theta_k)\|^2 \le \sum_{k=0}^{T-1} f(\theta_k) - f(\theta_{k+1}) = f(\theta_0) - f(\theta_T)$$

• Нека $f^*$  е глобален минимум на функциятаf. Тогава

$$f(\theta_T) \ge f^*$$
 и следователно:  $\sum_{k=0}^{T-1} \|\nabla f(\theta_k)\|^2 \le \frac{2}{\alpha} (f(\theta_0) - f^*).$ 

- Дясната страна е константа, следователно редът при  $T \to \infty$  с неотрицателни членове е ограничен, следователно е сходящ и  $\|\nabla f(\theta_k)\|^2 \longrightarrow 0$ .
- $\|\theta_{k+1}-\theta_k\|=\alpha\|\nabla f(\theta_k)\|\to 0$ . Следователно редицата  $\theta_k$  (както и  $f(\theta_k)$ ) е сходяща.

#### План на лекцията

- 1. Формалности за курса (5 мин)
- 2. Намиране на градиент чрез пропагиране назад Backpropagation (20 мин)
- 3. Пропагиране назад при логистична регресия (20 мин)
- 4. Сходимост на спускането по градиента (20 мин)
- 5. Стохастичен градиент (20 мин)

### Стандартен стохастичен градиент Standard Stochastic Gradient

. 
$$f(\theta) = H_X[\Pr\|\Pr_{\theta}] = -\frac{1}{|X|} \sum_{i=1}^{|X|} \log \Pr_{\theta}[\mathbf{x}^{(i)}]$$
. Нека с  $H_{X_i}[\Pr\|\Pr_{\theta}] = -\log \Pr_{\theta}[\mathbf{x}^{(i)}]$  означим поточковата кросентропия в точката  $X_i$  и  $f_{X_i}(\theta) = H_{X_i}[\Pr\|\Pr_{\theta}]$ .

. Нека  $X_{i_k}$  е случайно наблюдение (семпъл) от X. Тогава:  $\theta_{k+1} = \theta_k - \alpha \, \nabla_\theta f_{X_{i_k}}(\theta_k)$ 

• От теоремата на Тейлър получаваме:

$$f(\theta_{k+1}) = f(\theta_k) - \alpha \nabla f(\theta_k)^{\top} \nabla f_{X_{i_k}}(\theta_k) + \frac{1}{2} (\alpha \nabla f_{X_{i_k}}(\theta_k))^{\top} \nabla^2 f(\bar{\theta}) (\alpha \nabla f_{X_{i_k}}(\theta_k))$$

$$f(\theta_{k+1}) \leq f(\theta_k) - \alpha \nabla f(\theta_k)^{\top} \nabla f_{X_{i_k}}(\theta_k) + \frac{\alpha^2 L}{2} \|\nabla f_{X_{i_k}}(\theta_k)\|^2$$

#### Свойства на стандартния стохастичен градиент

• Изчисляването на градиента става |X| пъти по-бързо.

. 
$$f(\theta_k) - f(\theta_{k+1}) \ge \alpha \nabla f(\theta_k)^{\top} \nabla f_{X_{i_k}}(\theta_k) - \frac{\alpha^2 L}{2} \|\nabla f_{X_{i_k}}(\theta_k)\|^2$$

- .  $\alpha \nabla f(\theta_k)^{\mathsf{T}} \nabla f_{X_{i_k}}(\theta_k)$  може да бъде и отрицателно, следователно нямаме никаква гаранция, че стойността на f намалява.
- Може да подходим вероятностно.

#### Партиден стохастичен градиент Batched Stochastic Gradient

Разглеждаме **партида** (batch, minibatch) — извадка от B на брой наблюдения на случайни величини от X:  $\mathbf{X}_B = X_1, X_2, \dots, X_B$ . Тогава ако означим с  $f_{\mathbf{X}_B}(\theta) = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B f_{X_i}(\theta_k)$  кросентропията на партидата

 $\mathbf{X}_{B}$ , то дефинираме презаписването на параметрите като:

- $\cdot \theta_{k+1} = \theta_k \alpha \nabla_{\theta} f_{X_B}(\theta_k).$
- Можем да повторим същите разсъждения като при стандартния стохастичен градиент в случая на партида. Разликите са, че времето за намиране на градиента нараства с фактор B, но за сметка на това може да очакваме, че отклонението на партидния градиента от ще намалее пълния градиент ще намалее.

#### Заключение

- Чрез Backpropagation градиентите на сложни функции се изчисляват автоматично, ефективно и точно, като в същото време се имплементират лесно.
- Спускането по пълния градиент е гарантирано сходящо, но се изчислява бавно.
- При стандартния стохастичен градиент не е гарантирано, че се намалява грешката, но е много по бързо.
- Партидният стохастичен градиент е компромис, при който има много повисока вероятност за схождане, като е значително по-ефективен от пълния градиент.
- Партидният стохастичен градиент (и неговите вариации) е дефакто стандартният подход в съвременните системи за дълбоко машинно обучение.

