ОСНОВИ СИСТЕМ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ, НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ та ГЛИБОКОГО НАВЧАННЯ

Модуль 5. Глибоке навчання

Лекція 5.3. Градієнтний спуск

Градієнтний спуск/ Gradient Descent

Градієнтний спуск (gradient descent) — ітераційний алгоритм оптимізації, в якому для знаходження локального мінімуму функції здійснюються кроки, пропорційні протилежному значенню градієнту (або наближеного градієнту) функції в поточній точці.

Градієнтний спуск відомий також як найшвидший спуск (steepest descent), або метод найшвидшого спуску (method of steepest descent).

Типова задача оптимізації

Стандартна постановка:

Задано:

- Допустиме безліч незалежних
- змінних $\mathbb{X} = \{\vec{x} | g_i(\vec{x}) \leq 0, i = 0,1, \dots, m\} \in \mathbb{R}^n$
- Цільова функція – відображення $f: \mathbb{X} \to \mathbb{R}$
- Обмеження …
- Критерій пошуку (***min*** або ***max*** цільової функції)

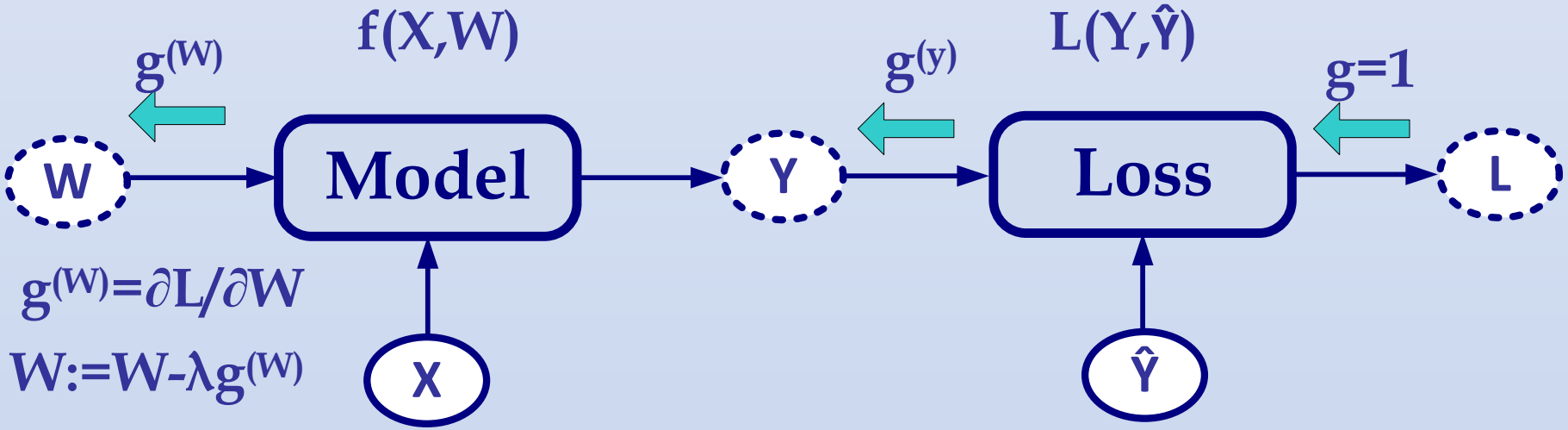
Необхідно: знайти таке $\vec{x}^* \in \mathbb{X}$, що

$$f(\vec{x}^*) = \min_{\vec{x} \in \mathbb{X}} f(\vec{x})$$

Взагалі вирішенням таких задач займається ***теорія математичного програмування.***

←Backward

Процес навчання → пошук параметрів $\overline{W}$, які мінімізують втрати (Loss)



Загальний підхід → використання методів градієнтного методу (gradient descent)

Градієнтний спуск

Маєм тренувальний набір (датасет)

$X = \{x_i | i = 1, 2, \dots, N\}$ **- вектори ознак (**x_i**-вектор !)**

$Y = \{y_i | i = 1, 2, \dots, N\}$ **- вектори міток (*labels*)**

Деяким чином визначені початкові значення ваг моделі W

Визначена функція похибки (втрат, Loss)

$$L(W) = F(W, x_i, \hat{y}_i \ )$$

Важливо: $L(W)$**залежить тільки від** W

Градієнтний спуск

Визначена функція $L(W)$

Необхідно знайти таке $\overline{W}$, що

$$L\left(\overline{W}\right) = min\,(L(W))$$

$\overline{W}$ - ваги, для якої функція похибки досягає свого мінімального значення.

Узагальнено ітераційний процес пошуку $\overline{W}$:

$$W^{(t+1)} = W^{(t)} - \Delta W^{(t)}; \Delta W^{(t)} = \lambda \nabla L\left(W^{(t)}\right);$$

$$\nabla L\left(W^{(t)}\right) = \frac{\partial L(W)}{\partial W}$$

t – ітерація (епоха), t=1,2, …

$\Delta W^{(t)}$- крок оптимізації ваг W

$\nabla L\left(W^{(t)}\right)$– градієнт функції похибки в точці $W^{(t)}$

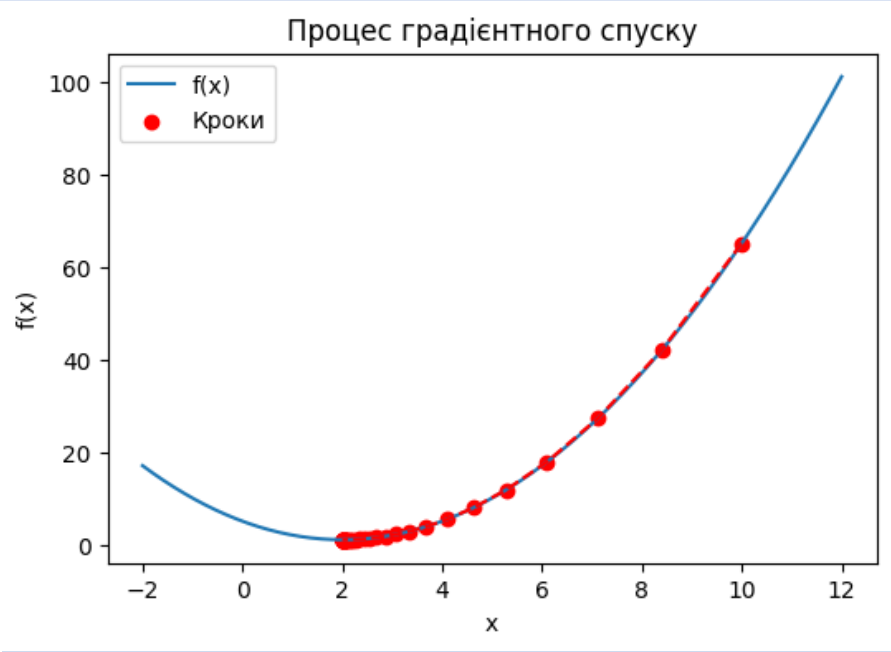
λ– швидкість навчання (розмір кроку навчання - learning rate)

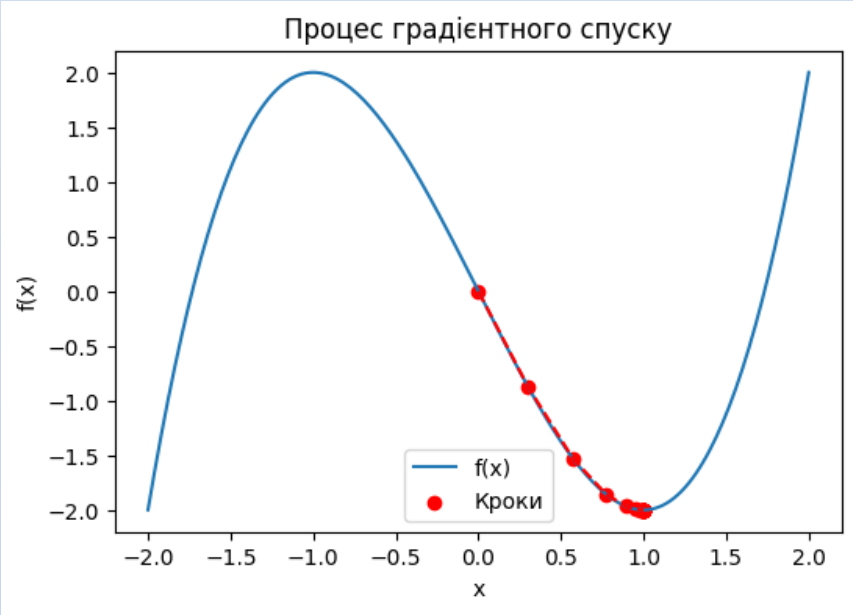
Градієнтний спуск

Приклад 1. Мінімізація одновимірної функції

$$f(x, y) = x^2 - 4x + 5$$

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} = 2x - 4$$





$$f(x, y) = x^3 - 3x$$

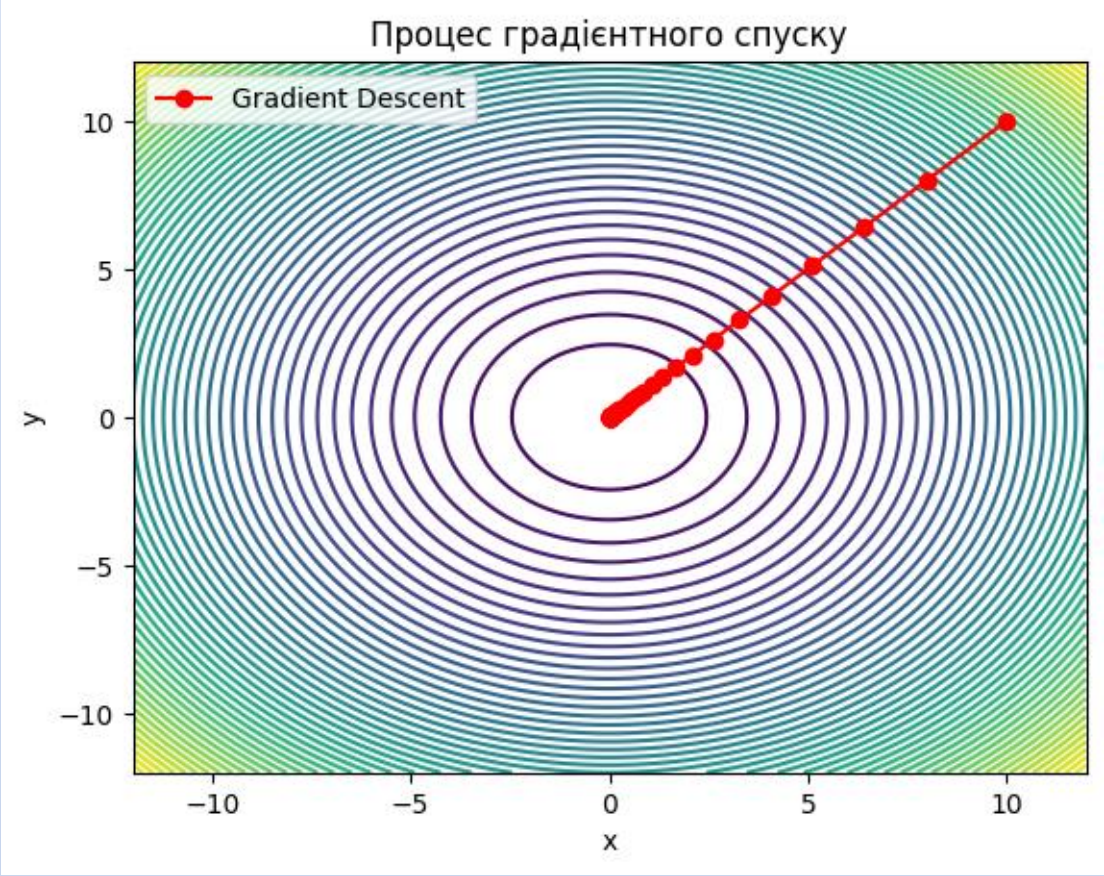
$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} = 3x^2 - 3$$

Градієнтний спуск

Приклад 2. Мінімізація двовимірної функції

$$f(x, y) = x^2 + y^2$$

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x} = 2x; \frac{\partial f(x,y)}{\partial y} = 2y$$

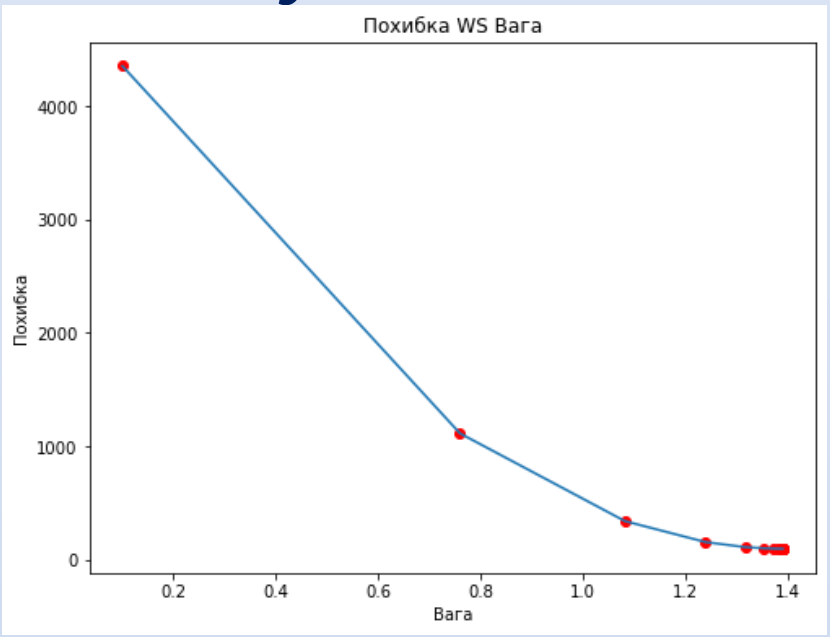


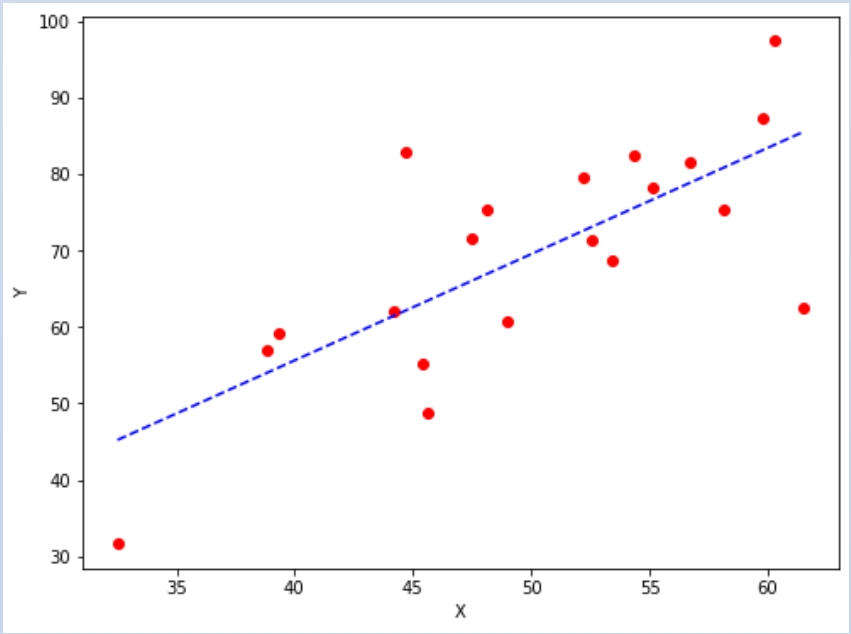
Градієнтний спуск

Приклад 3.

Ітерація	Похибка	Вага	Зміщення
1	4352.1	0.759	0.023
3	341.4	1.239	0.032
5	112.5	1.354	0.034
7	99.5	1.381	0.035
9	98.68	1.388	0.035
11	98.64	1.389	0.035
13	98.63847	1.390	0.035
15	98.63835	1.390	0.035
17	98.63832	1.390	0.035

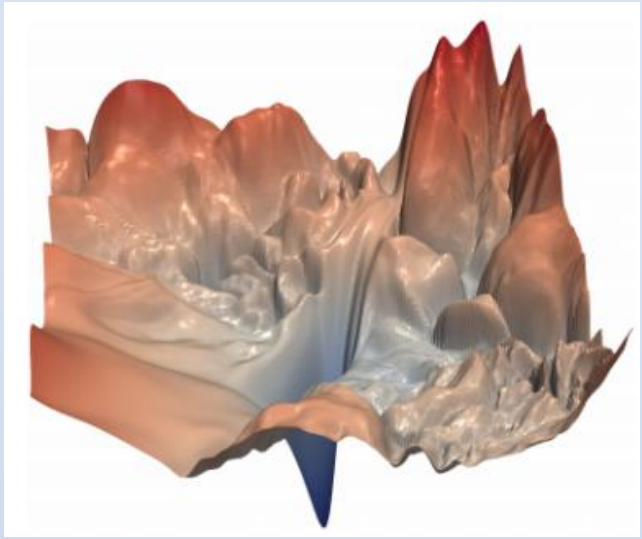
Вага: 1.389738; Зміщення Bias: 0.03509





Проблеми градієнтного спуску

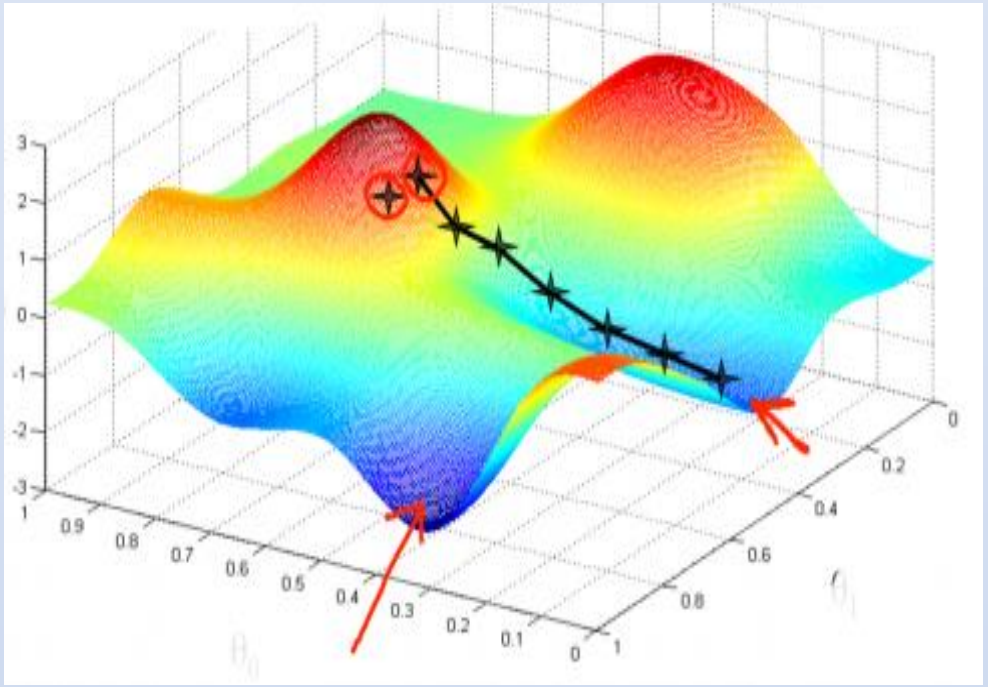
Багатовимірна (!!! Багато) функція $L(W)$

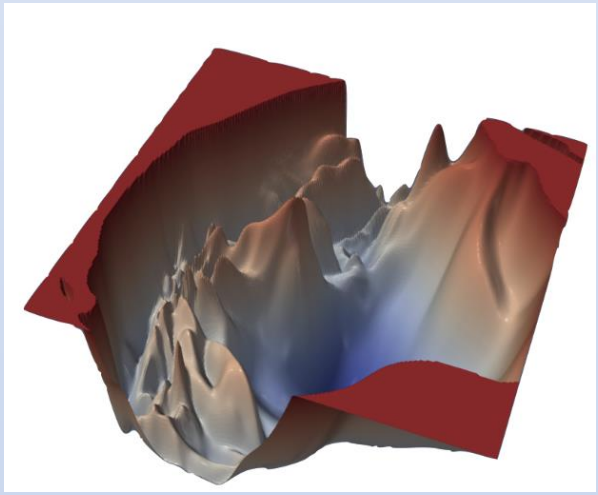


Проблеми:

- **Локальні мінімуми. Алгоритм просто застряє у локальному мінімумі, так і не потрапивши на глобальний мінімум.**
- **Сідлові точки. Дуже малі значення компонент градієнту.**
- **Яри, перетин ярів. Яр – це протяжна вузька долина, що має крутий ухил в одному напрямку (тобто по сторонах долини) і плавний ухил в іншому (тобто вздовж долини). Приклад – функція Розенброка.**

Проблеми градієнтного спуску

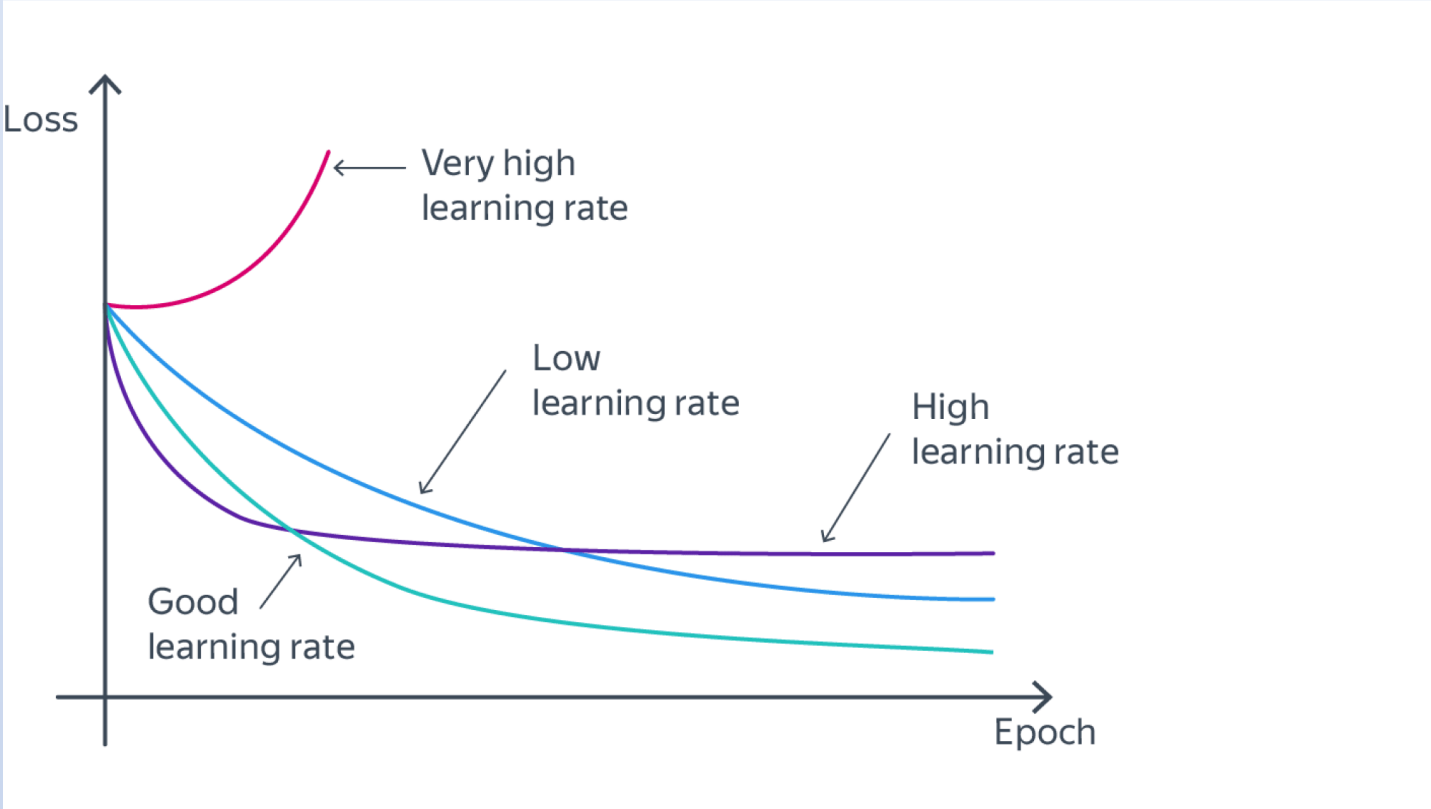




- Для невдало обумовлених опуклих задач градієнтний спуск «зигзагує» все більше, коли градієнт вказує майже ортогонально до найкоротшого напряму до точки мінімуму.

Проблеми градієнтного спуску

Як обирати швидкість навчання λ (learning rate)



Learning rate : потрібно вибирати вкрай акуратно - алгоритм може передчасно вийти на плато, або зовсім розійтися.

Методи оптимізації

Momentum (метод моментів). Проблема з SGD – якщо функція потрапляє у "яр", тобто по одному з напрямків маємо швидкий спуск, а по-іншому повільний, то SGD призводить до осциляції і вкрай повільної збіжності до мінімуму.

Зміна параметрів розраховується як зважена сума зсуву на попередньому кроці та нового на основі градієнта.

$$\Delta_{t+1} = \gamma \Delta_t + \lambda * \nabla L \left(w_t \right)$$

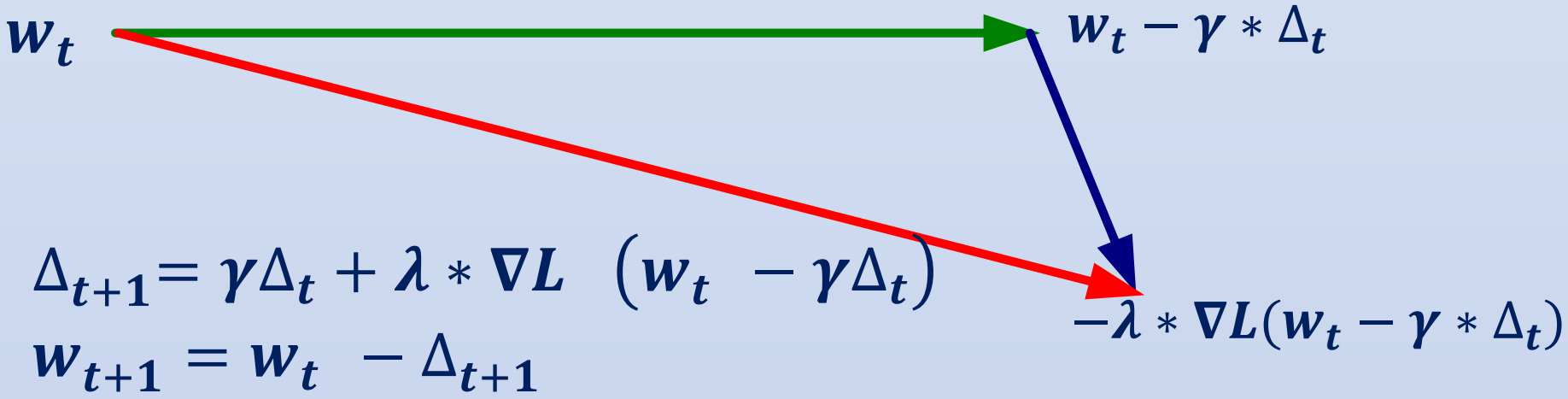
$$w_{t+1} = w_t - \Delta_{t+1}$$

Швидкість руху в напрямку мінімуму збільшується (бо цей напрямок присутній у всіх градієнтах), а осциляція гаситься. Ваговий параметр γ зазвичай вибирається рівним 0.9 чи близько до того.

Методи оптимізації

Прискорені градієнти Нестерова (Nesterov accelerated gradient)

Замість того, щоб обчислювати градієнт у поточній точці, використовується градієнт у точці "передбаченої" на підставі зсуву, розрахованого на попередньому кроці.



$$\Delta_{t+1} = \gamma\Delta_t + \lambda * \nabla L \quad (w_t - \gamma\Delta_t)$$

$$w_{t+1} = w_t - \Delta_{t+1}$$

Основний внесок в вектор зсуву дає перша складова, а складова із градієнтом лише «уточнює». Тому градієнт обчислюється в окресті нової точки, а не в поточної .

Методи оптимізації

AdaGrad (адаптивний градієнт). Загальна ідея – змінювати швидкість навчання λ для кожного параметра окремо, в залежності від того, як сильно змінюється параметр. Замість скаляру λ на кожній t ітерації використовується вектор

$$\lambda_t = (\lambda_t^{(1)}, \lambda_t^{(2)}, \dots, \lambda_t^{(d)})$$

Для $t = 1$ (перша епоха)

$\lambda_1^i = \lambda, i = 0, 1, \dots, d$, d – кількість параметрів (ваг).

Для t-ї епохи маємо:

$w_t = \left(w_t^{(1)}, w_t^{(2)}, \dots, w_t^{(d)}\right)$ - ваги.

$\lambda_t = (\lambda_t^{(1)}, \lambda_t^{(2)}, \dots, \lambda_t^{(d)})$ - швидкості навчання.

$\nabla L(w_t) = \left(g_t^{(1)}, g_t^{(2)}, \dots, g_t^{(d)}\right)$ - вектор градієнтів.

Методи оптимізації

AdaGrad.

Визначається додатковий вектор

$$G_t = \left(G_t^{(1)}, G_t^{(2)}, \dots, G_t^{(d)}\right),$$

де кожен компонент є сума квадратів часткових похідних функції помилки за відповідним параметром, тобто

$$G_t^{(i)} = \sum_{j=1}^{t} (g_j^{(i)})^2; i = 1, 2, \dots, d \ .$$

Кожен елемент вектору швидкості визначається як

$$\lambda_t^{(i)} = \lambda \Big/ \sqrt{G_t^{(i)} + \epsilon}.$$

Тут $\epsilon \approx 10^{-8}$ мала, запобіжник від ділення на нуль.

Методи оптимізації

AdaGrad.

На останнє

$$w_{t+1} = w_t - \lambda_t \odot \nabla L(w_t),$$

Операція $\odot$ - покомпонентне множення вектору на вектор, або

$$w_{t+1}^{(i)} = w_t^{(i)} - \lambda_t^{(i)} g_t^{(i)}, i = 1, 2, \dots, d$$

Оптимізатори градієнтного спуску

Оптимізатор	Рік	Швидкість навчання	Градієнт
Momentum	1964		Yes
AdaGrad	2011	Yes	
AdaDelta	2012	Yes	
Nesterov	2013		Yes
Adam	2014	Yes	Yes
AdaMax	2015	Yes	Yes
Nadam	2015	Yes	Yes
AMSGrad	2018	Yes	Yes

Рекомендована ЛІТЕРАТУРА

Литвин В. В., Пелещак Р. М., Висоцька В. А. Глибинне навчання : навч. посіб. – Львів : Вид-во Львівської Політехніки, 2011. – 264 с.

Тимощук П.В., Лобур М. В. Principles of Artificial Neural Networks and Their Applications :: Принципи штучних нейронних мереж та їх застосування : навч. посіб. – Львів : Вид-во Львівської Політехніки, 2011. – 292 с.

Тимощук, П.В. Штучні нейронні мережі : навч. посіб. – Львів : Вид-во Львівської Політехніки, 2011. – 444 с.

Рекомендована ЛІТЕРАТУРА

Beyeler M. Machine Learning for OpenCV . — Packt Publishing Ltd., 2017 . — 350 p.

Sarkar D., Bali R., Sharma T. Practical Machine Learning with Python . — APress, 2018. — 530p.

Raschka S., Mirjalili V. Python Macine Learning. Machine Learning and Deep Learning with Python, scikit-learn, and TensorFlow 2 .- 3rd Edition, Packt Publishing, 2019 .- 859 p.

The END
Модуль 5. Лекція 03.