Машинное обучение

Лекция 3
Градиентные методы обучения

Evgenii Egorov

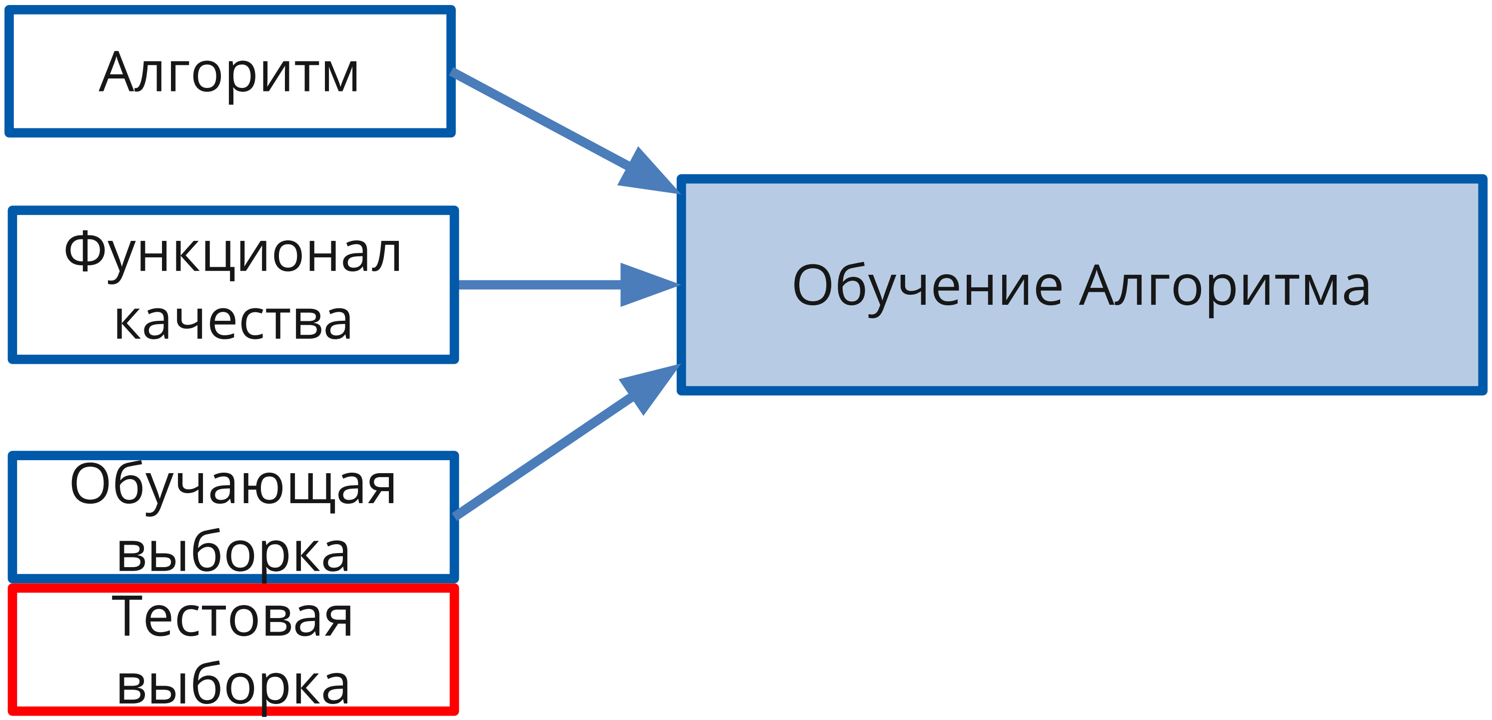
План

- Резюме прошлой лекции
    - Линейная регрессия
    - Решение в явном виде и его проблемы
    - Регуляризация

- Градиентный спуск для решения задач оптимизации

- Модификации градиентного спуска

Обучение алгоритма



Линейная Регрессия

Алгоритм

Функционал качества

Обучающая выборка

Тестовая выборка

Линейная Регрессия

Алгоритм

$$a(x) = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_d x_d$$

Функционал качества

$$Q(w) = \frac{1}{l} \|Xw - y\|^2$$

Обучающая выборка

Тестовая выборка

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} \dots x_{1d} \\ \vdots \qquad \vdots \\ x_{l1} \dots x_{ld} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{l \times d} \qquad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_l \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^l$$

Обучение Линейной Регрессии

$$Q(w) = \frac{1}{l}\|Xw - y\|^2 \to \min_w$$

1. Аналитическое решение
2. Итерационные методы оптимизации

Обучение Линейной Регрессии

$$Q(w) = \frac{1}{l}\|Xw - y\|^2 \to \min_w$$

1. **Аналитическое решение**

Обучение Линейной Регрессии

$$Q(w) = \frac{1}{l}\|Xw - y\|^2 \to \min_w$$

1. **Аналитическое решение**

- Градиент

$$\nabla Q(w) = \frac{2}{l}(X^T X w - X^T y)$$

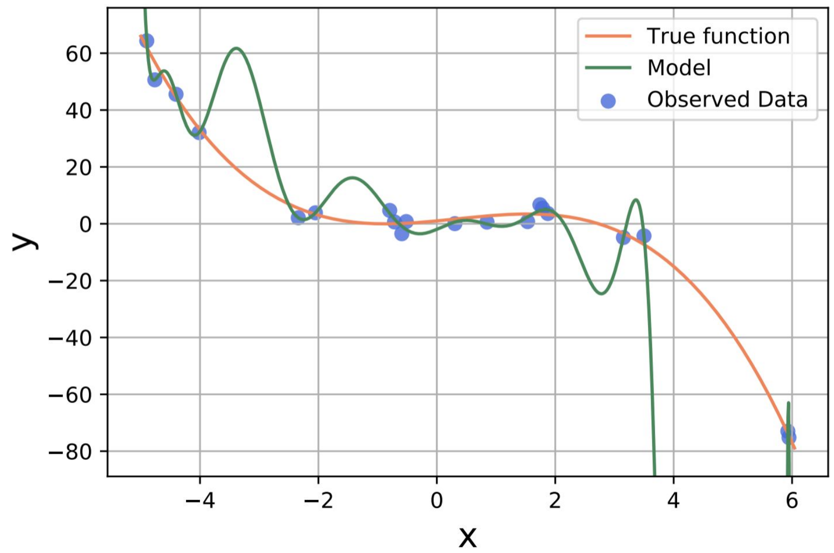
- Решение

$$\nabla Q(w) = 0$$

$$w^* = (X^T X)^{-1} X^T y$$

Проблемы

Переобучение



Аналитическое решение на практике

$$w^* = (X^T X)^{-1} X^T y$$

Регуляризация

Задача обучения линейной регрессии

$$Q(w) = \frac{1}{l}\|Xw - y\|^2 \to \min_w$$

Добавим "штраф":

$$Q(w) + \lambda R(w) \to \min_w$$

Регуляризация

$$Q(w) + \lambda R(w) \to \min_w$$

Норма вектора в качестве регуляризатора

$$R(w) = \|w\|_2^2 = \sum_{j=1}^{d} w_j^2$$

$$R(w) = \|w\|_1 = \sum_{j=1}^{d} |w_j|$$

Регуляризация

$$Q(w) + \lambda R(w) \to \min_w$$

Норма вектора в качестве регуляризатора

$$R(w) = \|w\|_2^2 = \sum_{j=1}^{d} w_j^2$$

-> Ridge regression

$$R(w) = \|w\|_1 = \sum_{j=1}^{d} |w_j|$$

-> Lasso regression

Гребневая регрессия (Ridge)

$$\frac{1}{l}\|Xw - y\|^2 + \lambda\|w\|_2^2 \to \min_w$$

1. Аналитическое решение (более стабильное)

$$w^* = (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T y$$

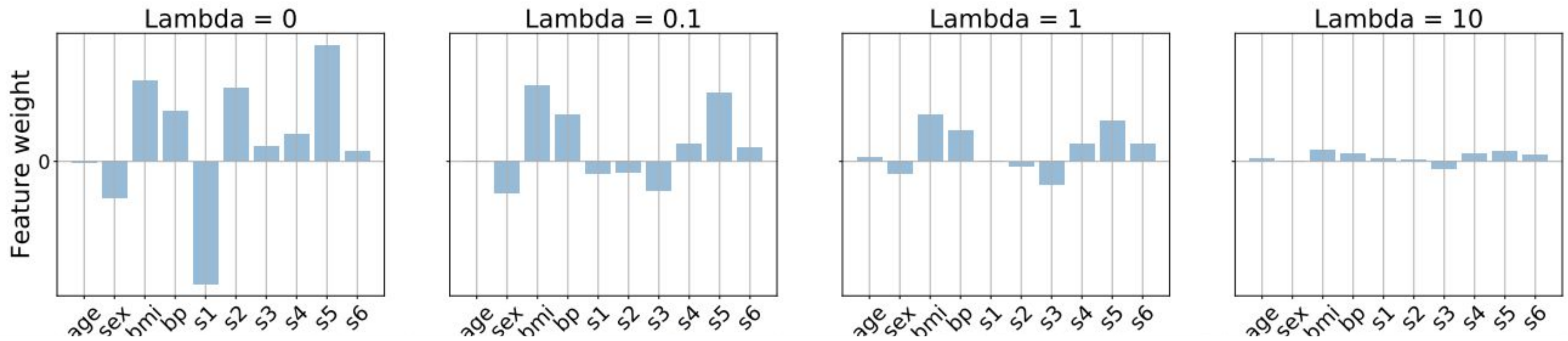
Гребневая регрессия (Ridge)

$$\frac{1}{l}\|Xw - y\|^2 + \lambda\|w\|_2^2 \to \min_w$$

1. Аналитическое решение (более стабильное)

$$w^* = (X^TX + \lambda I)^{-1}X^Ty$$

2. Эффект сокращения весов (shrinkage)



Лассо регрессия (LASSO)

$$\frac{1}{l}\|Xw - y\|^2 + \lambda\|w\|_1 \to \min_w$$

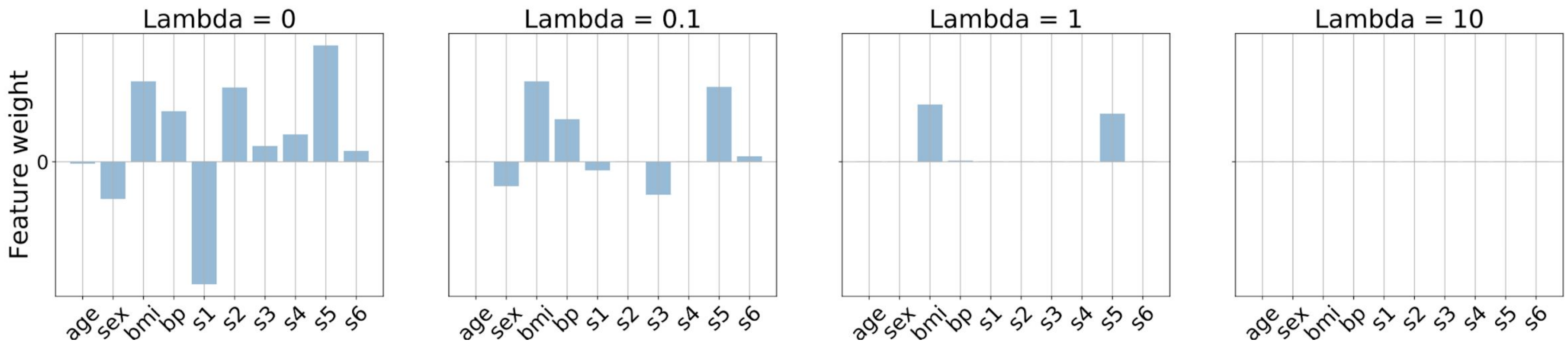
1. Least Absolute Shrinkage and Selection Operator

Лассо регрессия (LASSO)

$$\frac{1}{l}\|Xw - y\|^2 + \lambda\|w\|_1 \to \min_w$$

1. Least Absolute Shrinkage and Selection Operator

2. Эффект сокращения весов (shrinkage) и отбора признаков (selection)



Что если не аналитическое решение?

$$Q(w) + \lambda R(w) \to \min_w$$

Что если не аналитическое решение?

$$Q(w) + \lambda R(w) \to \min_{w}$$

Итерационные методы оптимизации

Градиент

Вектор частных производных

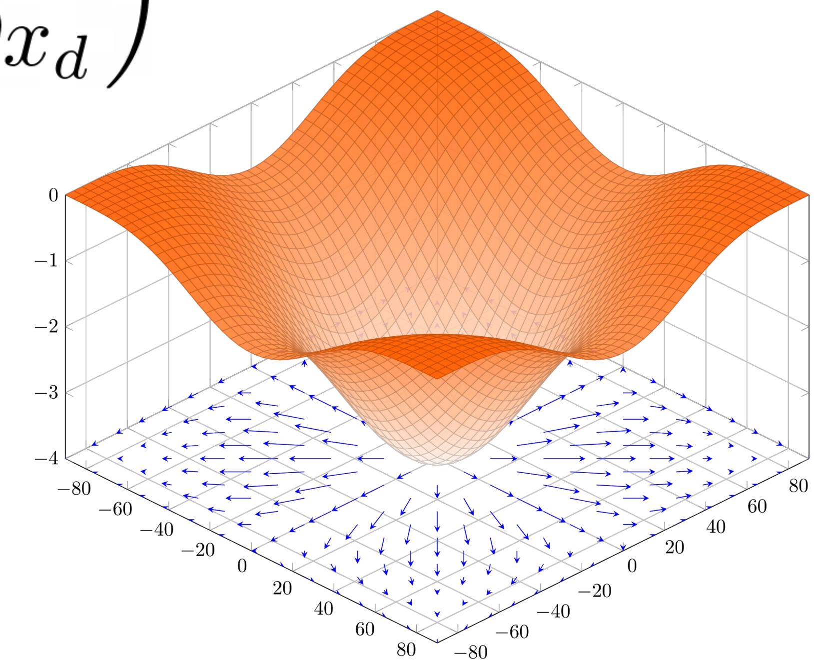
$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_d} \right)$$

Градиент

Вектор частных производных

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_d} \right)$$

Градиент показывает направление наискорейшего возрастания функции



Градиент: условие экстремума

Если точка x_0 — экстремум и в ней существует производная, то

$$\nabla f(x_0) = 0$$

Градиентный спуск

Задача: найти минимум функции

$$\min_x f(x)$$

Градиентный спуск

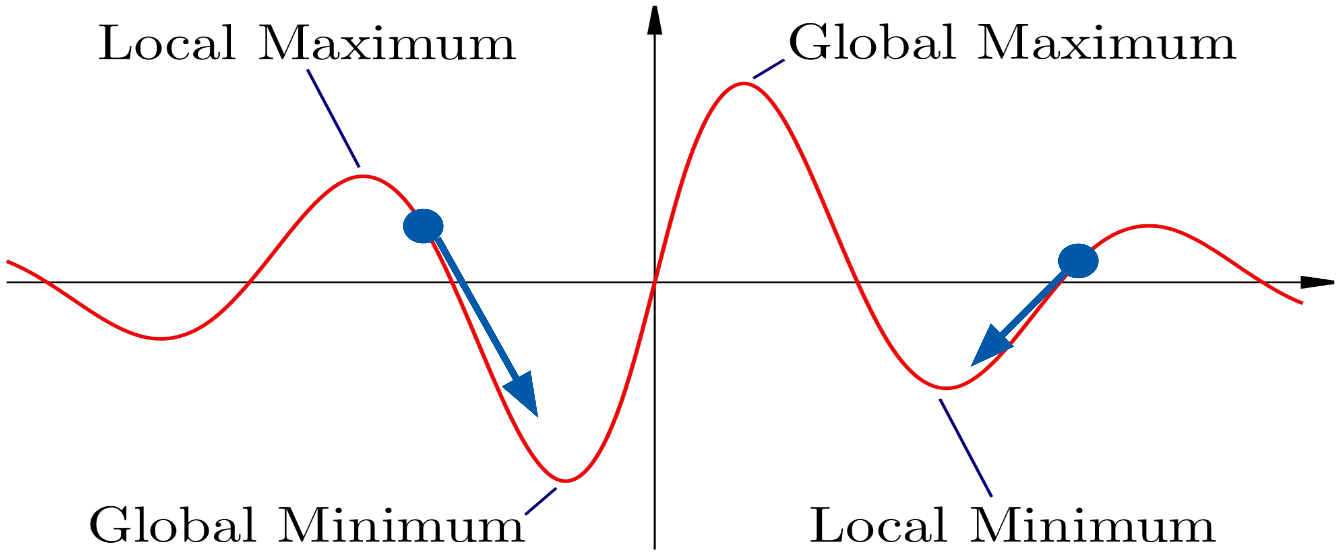
https://www.codingame.com/playgrounds/9487/deep-learning-from-scratch---theory-and-implementation/gradient-descent-and-backpropagation

Градиентный спуск

- Стартуем из случайной точки
- Сдвигаемся по антиградиенту
- Повторяем, пока не окажемся в точке минимума

Градиентный спуск: начальное приближение

- Стартуем из случайной точки
  - Как выбрать x_0 ?



Градиентный спуск: итерации

- Стартуем из случайной точки
- Сдвигаемся по антиградиенту

$$x^t = x^{t-1} - \eta \nabla f(x^{t-1})$$

Длина шага (Learning rate)

Новая точка

Градиент в предыдущей точке

Градиентный спуск: сходимость

- Стартуем из случайной точки
- Сдвигаемся по антиградиенту
- Повторяем, пока не окажемся в точке минимума
  - $\|x^t - x^{t-1}\| < \varepsilon$
  - $\|f(x^t) - f(x^{t-1})\| < \varepsilon$
  - $\|\nabla f(x^t)\| < \varepsilon$

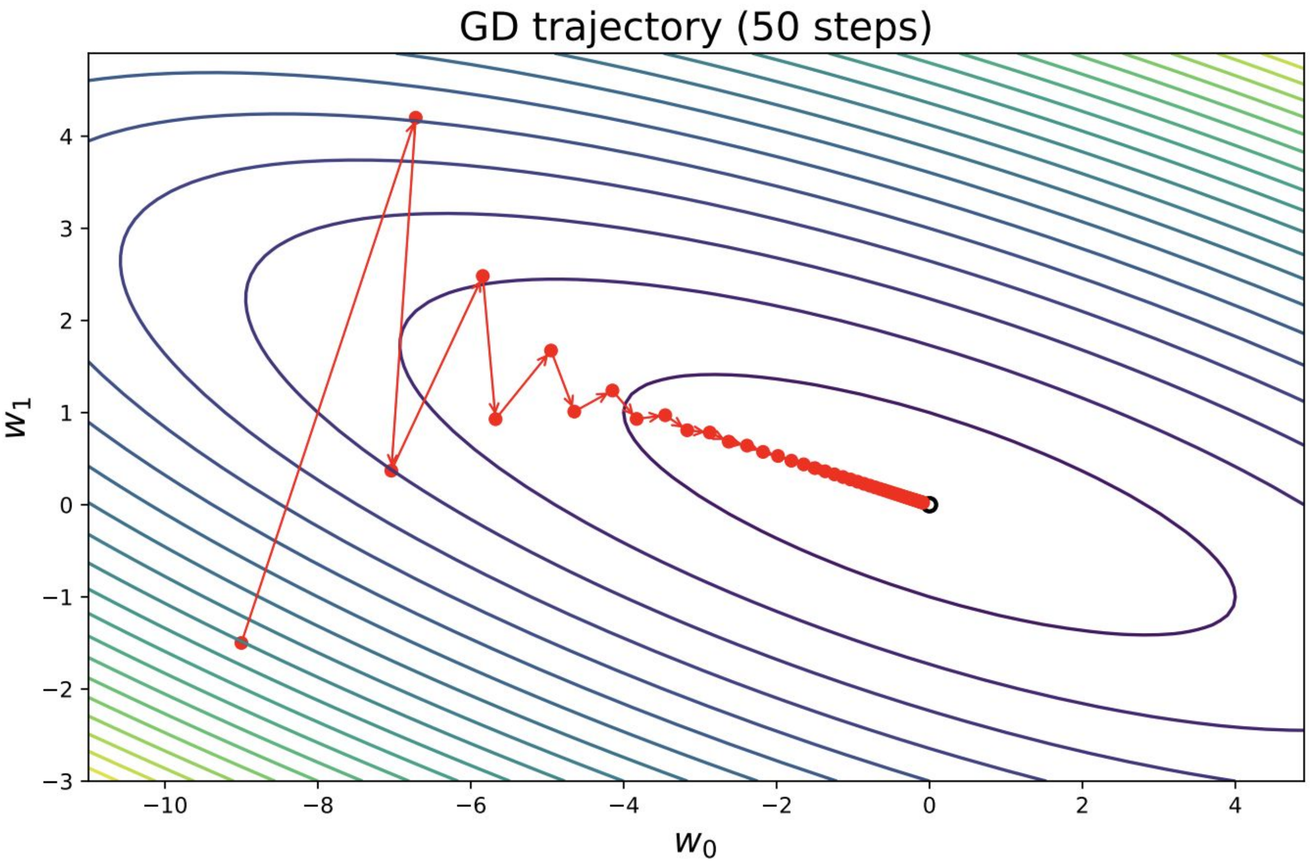
Градиентный спуск: длина шага

$$x^t = x^{t-1} - \eta \nabla f(x^{t-1})$$

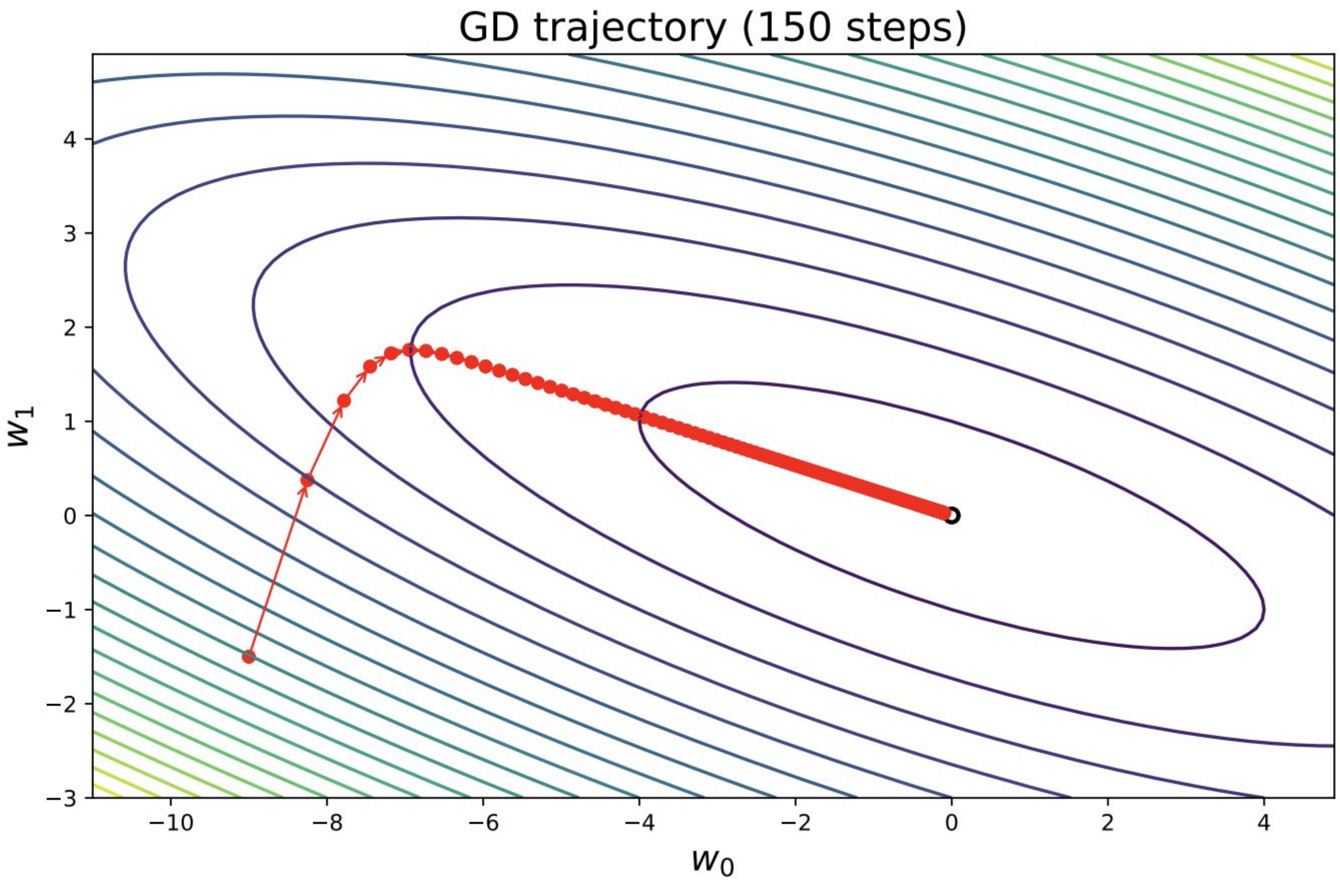
Длина шага
(Learning rate)

- Позволяет контролировать скорость обучения
- Если сделать длину шага недостаточно маленькой, градиентный спуск может разойтись
- Длина шага — гиперпараметр, который нужно подбирать

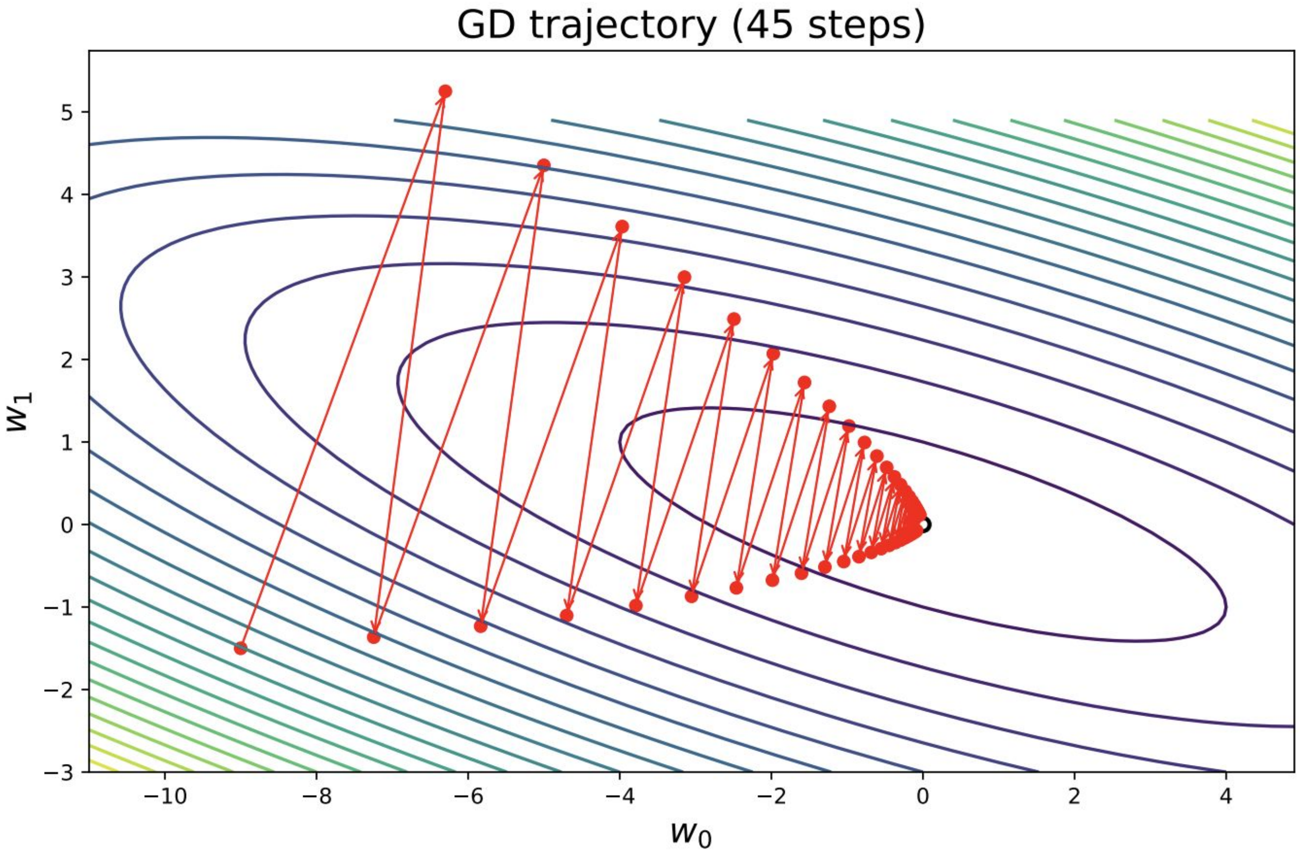
Градиентный спуск: длина шага



Градиентный спуск: длина шага



Градиентный спуск: длина шага



Градиентный спуск: переменная длина шага

$$x^t = x^{t-1} - \eta_t \nabla f(x^{t-1})$$

Длину шага можно менять в зависимости от итерации

Градиентный спуск: переменная длина шага

$$x^t = x^{t-1} - \eta_t \nabla f(x^{t-1})$$

Длину шага можно менять в зависимости от итерации

- Например: $\eta_t = \dfrac{1}{t}$
- Шаг наискорейшего спуска:

$$\eta_t = \arg\min_{\eta} f(x^t) = \arg\min_{\eta} f(x^{t-1} - \eta \nabla f(x^{t-1}))$$

Градиентный спуск в МО

Хотим минимизировать ошибки модели на обучающей выборке

$$Q(w) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} L(y_i, a(x_i))$$

1. Выбираем начальное приближение w^0
2. На каждой итерации делаем шаги в сторону антиградиента
$$w^t = w^{t-1} - \eta \nabla Q(w^{t-1})$$
$$\nabla Q(w) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} \nabla L(y_i, a(x_i))$$
3. Останавливаемся, если
$$\|Q(w^t) - Q(w^{t-1})\| < \varepsilon$$

Градиентный спуск: сложности

- Для вычисления градиента, как правило, надо просуммировать что-то по всем объектам

$$\nabla Q(w) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{l} \nabla L(y_i, a(x_i))$$

- И это для одного маленького шага!

Градиентный спуск: сложности

- Для вычисления градиента, как правило, надо просуммировать что-то по всем объектам

$$\nabla Q(w) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{l} \nabla L(y_i, a(x_i))$$

- И это для одного маленького шага!
- Может оценить одним слагаемым?

$$\nabla Q(w) \approx \nabla L(y_i, a(x_i))$$

Стохастический градиентный спуск

Хотим минимизировать ошибки модели на обучающей выборке

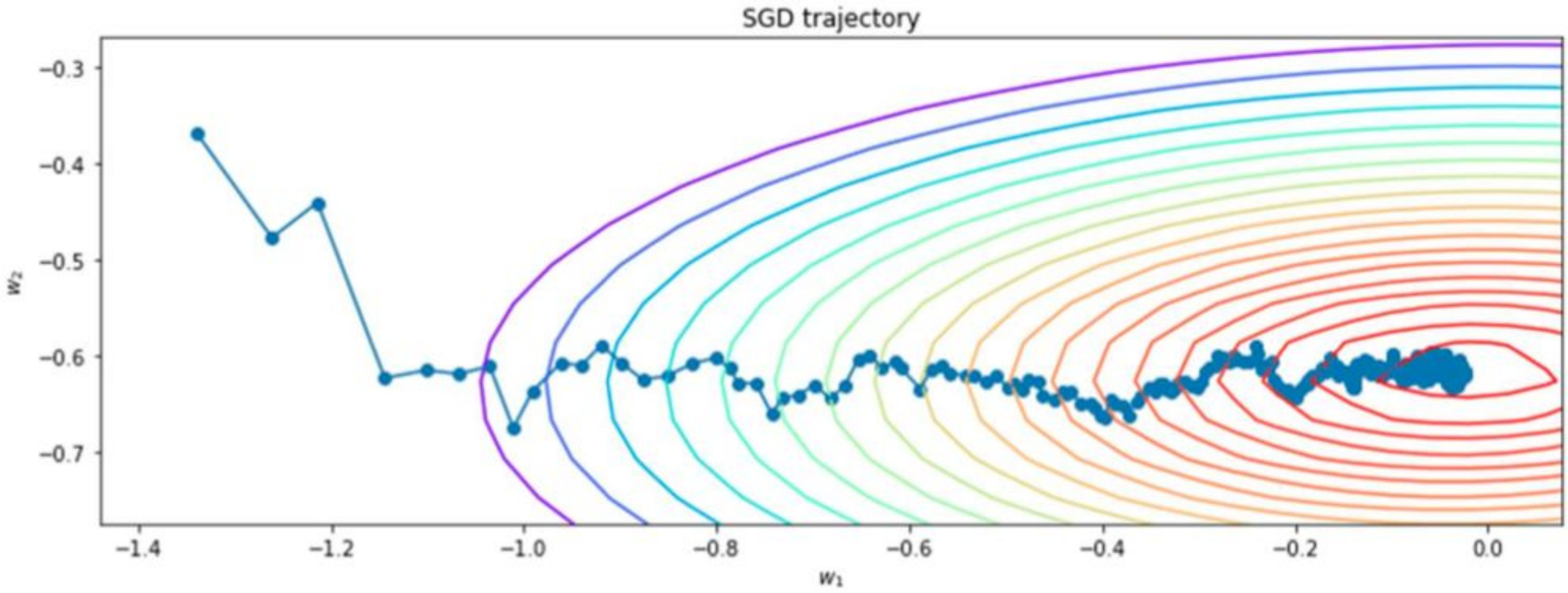
$$Q(w) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} L(y_i, a(x_i))$$

$$w^0$$

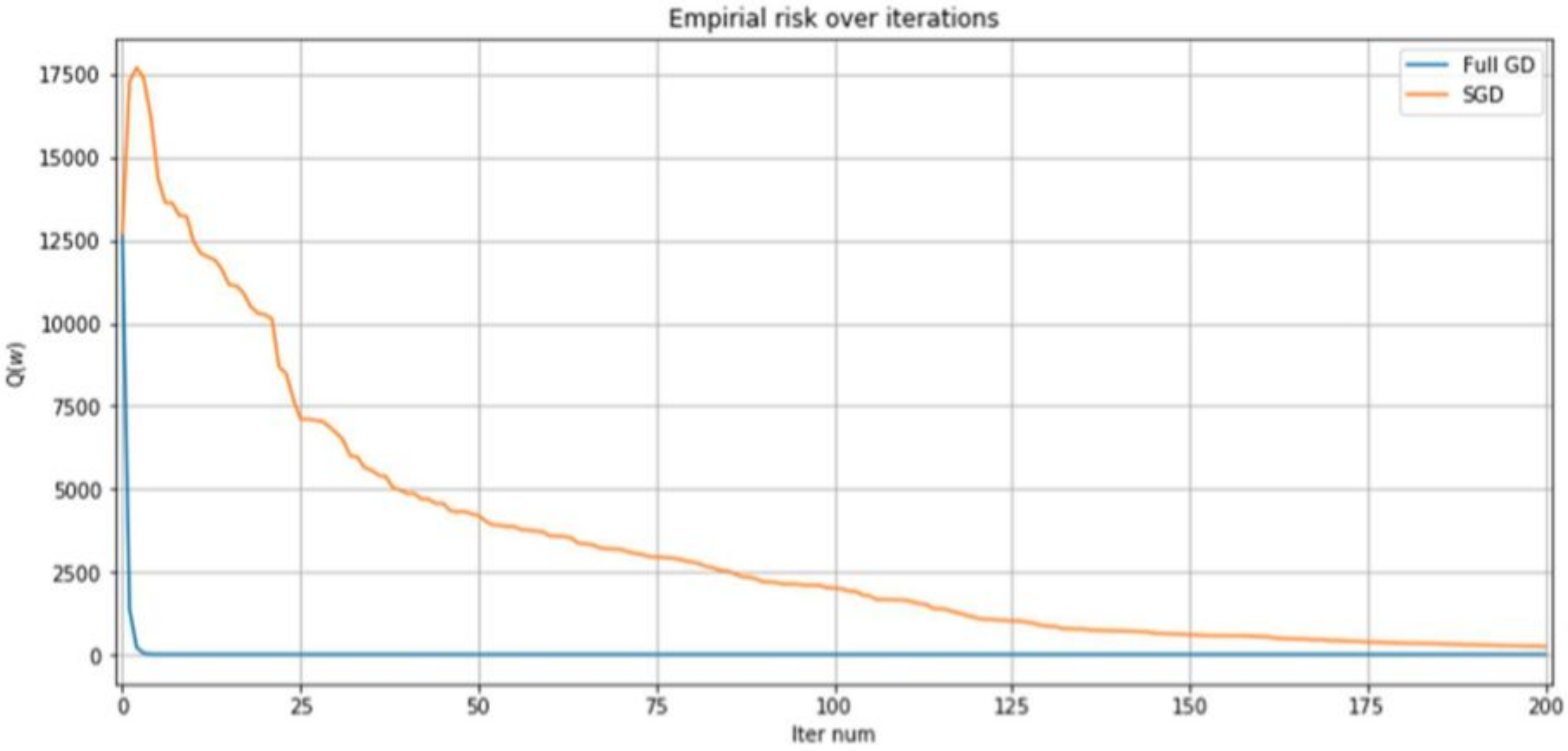
1. Выбираем начальное приближение
2. На каждой итерации выбираем случайный объект i и делаем шаг $w^t = w^{t-1} - \eta \nabla L(y_i, a(x_i))$
3. Останавливаемся, если

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

Стохастический градиентный спуск



Стохастический градиентный спуск



Mini-batch

Хотим минимизировать ошибки модели на обучающей выборке

$$Q(w) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} L(y_i, a(x_i))$$

$$w^0$$

1. Выбираем начальное приближение
2. На каждой итерации выбираем m случайных объектов и делаем шаг $w^t = w^{t-1} - \eta \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} \nabla L(y_j, a(x_j))$
3. Останавливаемся, если

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

Градиентный спуск

1. Mini-batch GD стабильнее стохастического

2. Важно масштабировать признаки

3. Длина шага - гиперпараметр, который сильно влияет на сходимость