MML minor #1

Методы оптимизации

Задача машинного обучения

$D = \{x, y\}_{i=1}^{N}$ — обучающая выборка.

$y^* = A(x; \mu)$ — метод предсказания

μ — параметры

$L(D, \mu) = E(D, \mu) + R(\mu)$ — функция потерь

$E(D, \mu)$ — функция ошибки

$R(\mu)$ — функция регуляризации

$L(D, \mu) \to \min\limits_{\mu}$ — процедура обучения

Ключевая задача в машинном обучении: **оптимизация**.

Напоминание: ряд Тейлора

$f(x)$ — одномерная бесконечно дифференцируемая функция

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \ldots =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n.$$

(не всегда сходится)

Напоминание: градиент

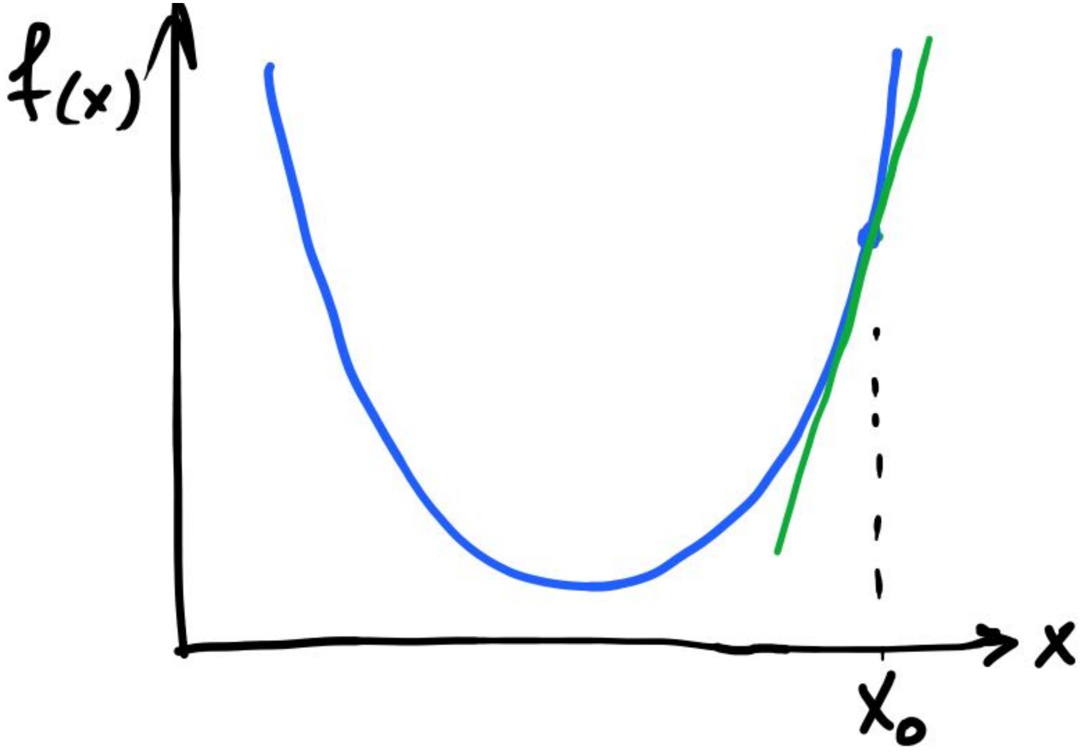
- Пусть $f = f(x, y)$
- Частная производная: $\frac{\partial f}{\partial x}$
- Градиент: $\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}\right)$

Методы 1 порядка

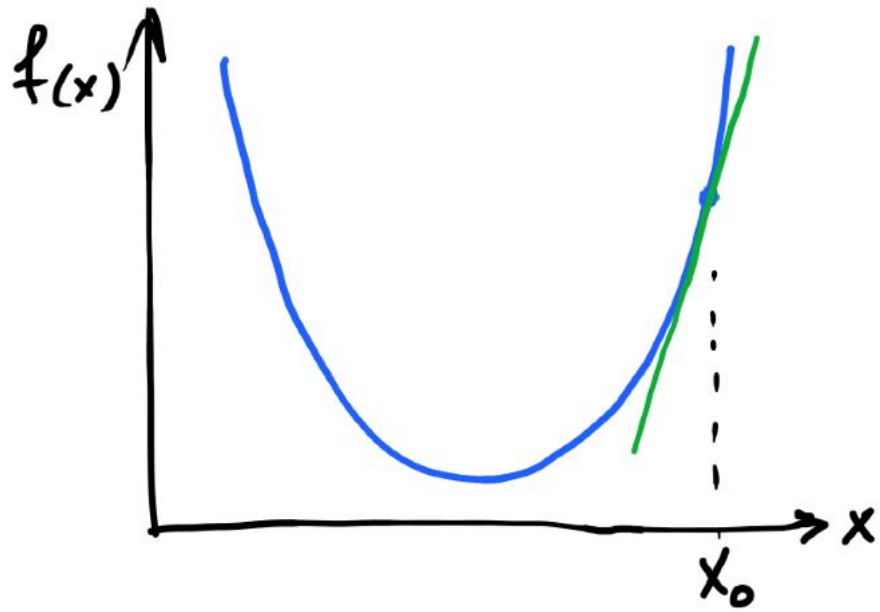
$$f(x) \to \min_x$$

Разложим в ряд Тейлора до первой производной

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$



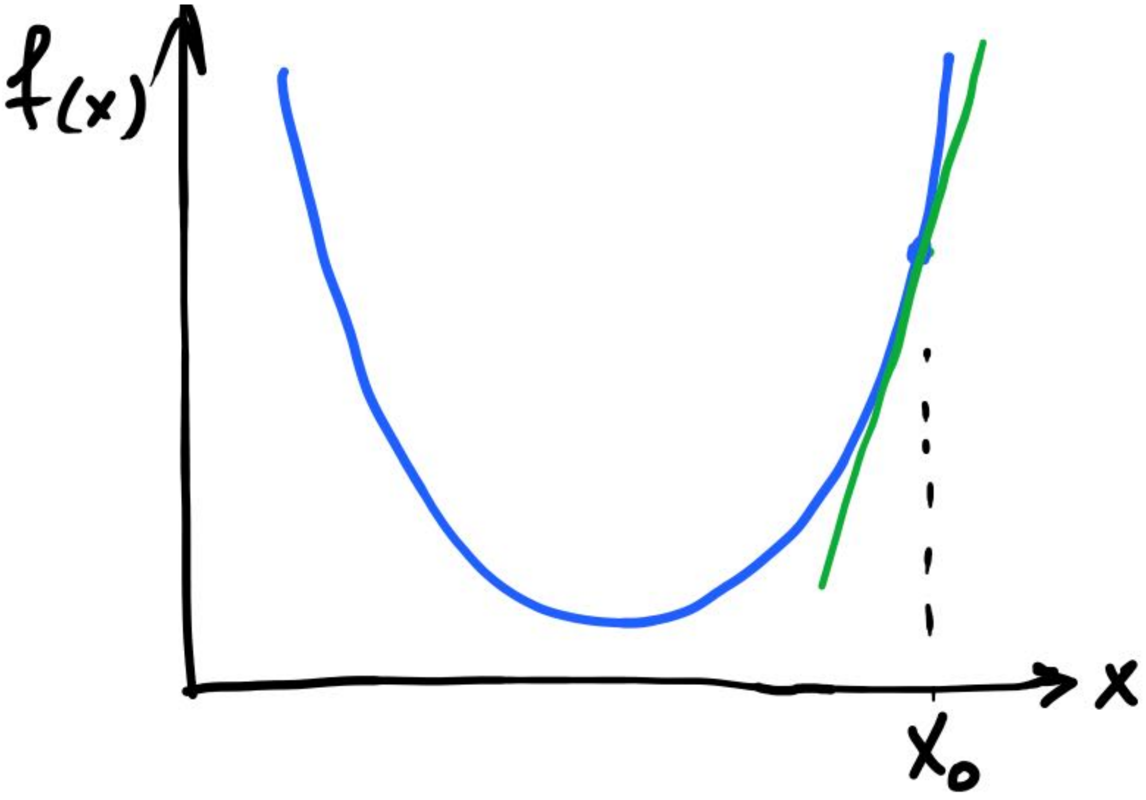
Градиент как направление шага

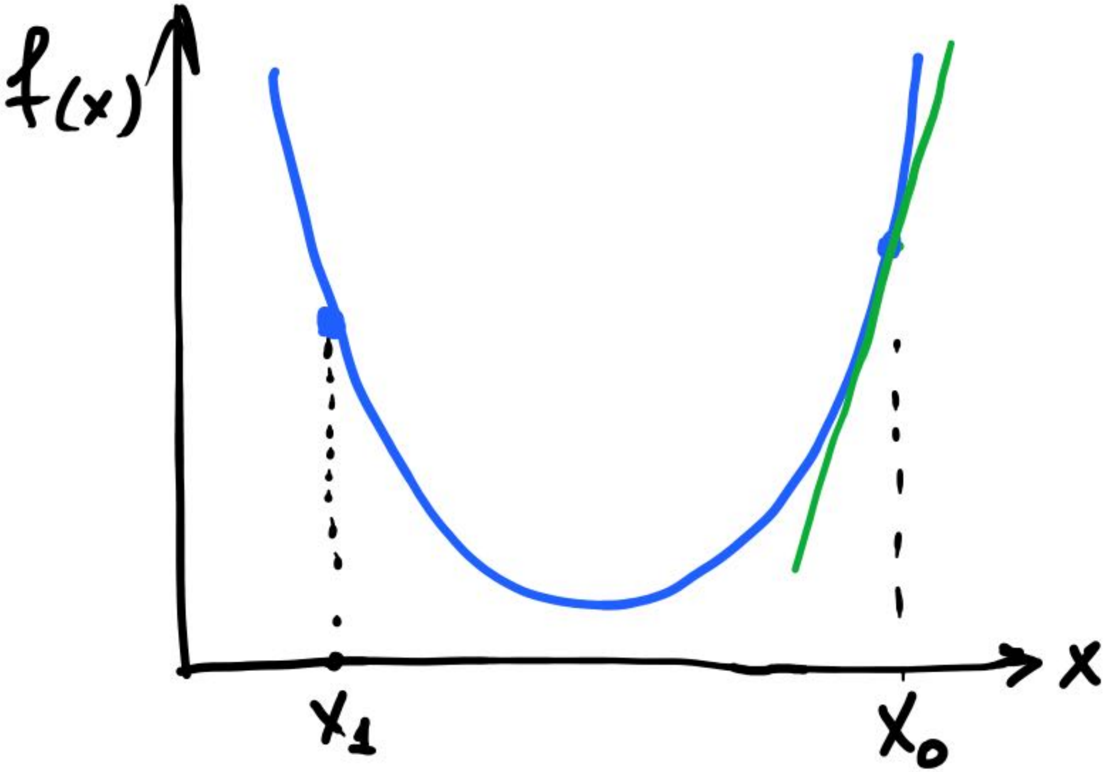


$$f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) \to \min_x$$

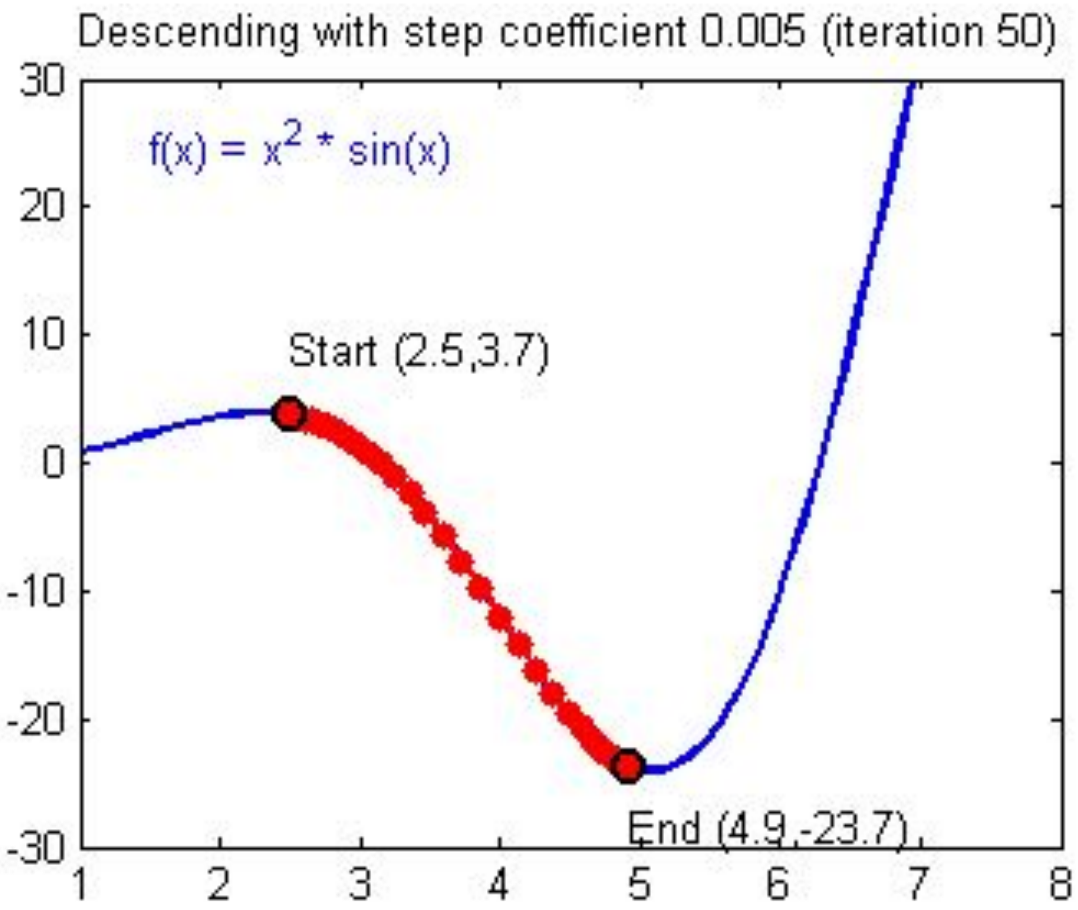
$f'(x_0) > 0$ — минимум в направлении $x \to -\infty$
$f'(x_0) < 0$ — минимум в направлении $x \to +\infty$
Оптимальный шаг: в направлении $-f'(x_0)$

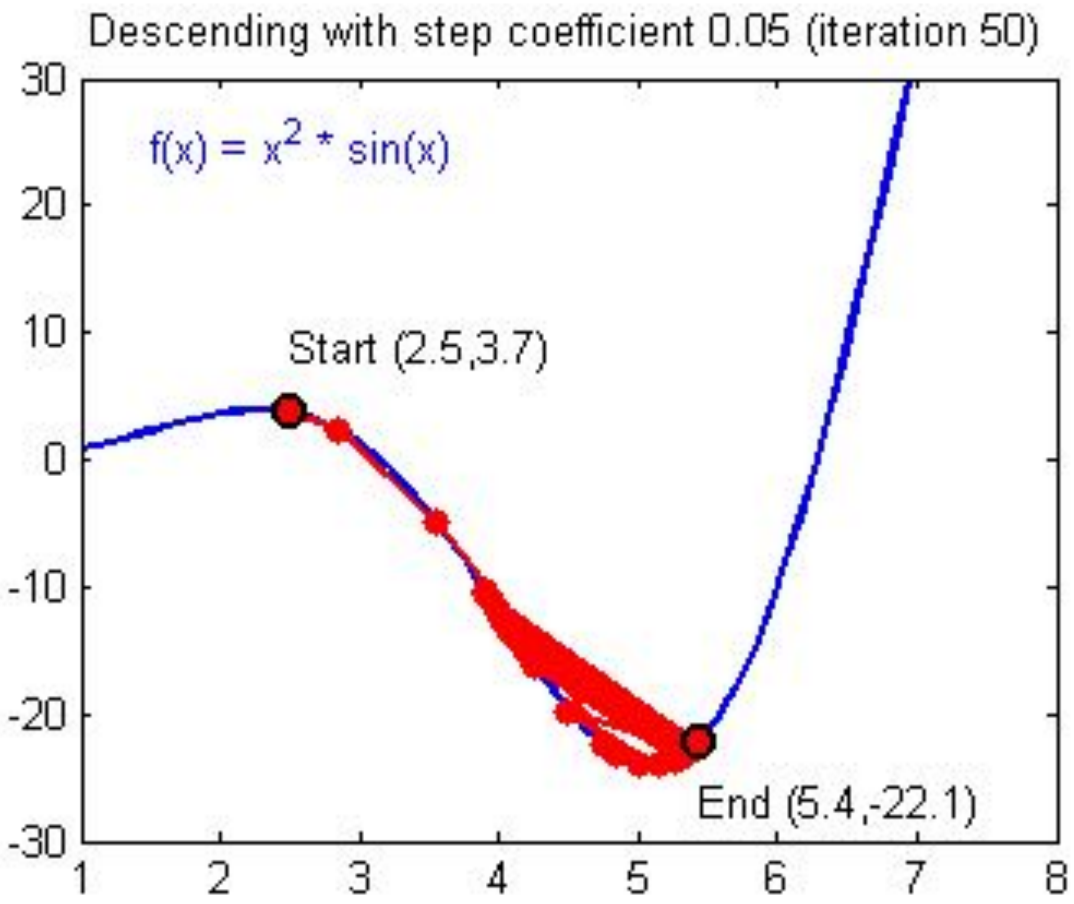
Величина шага?





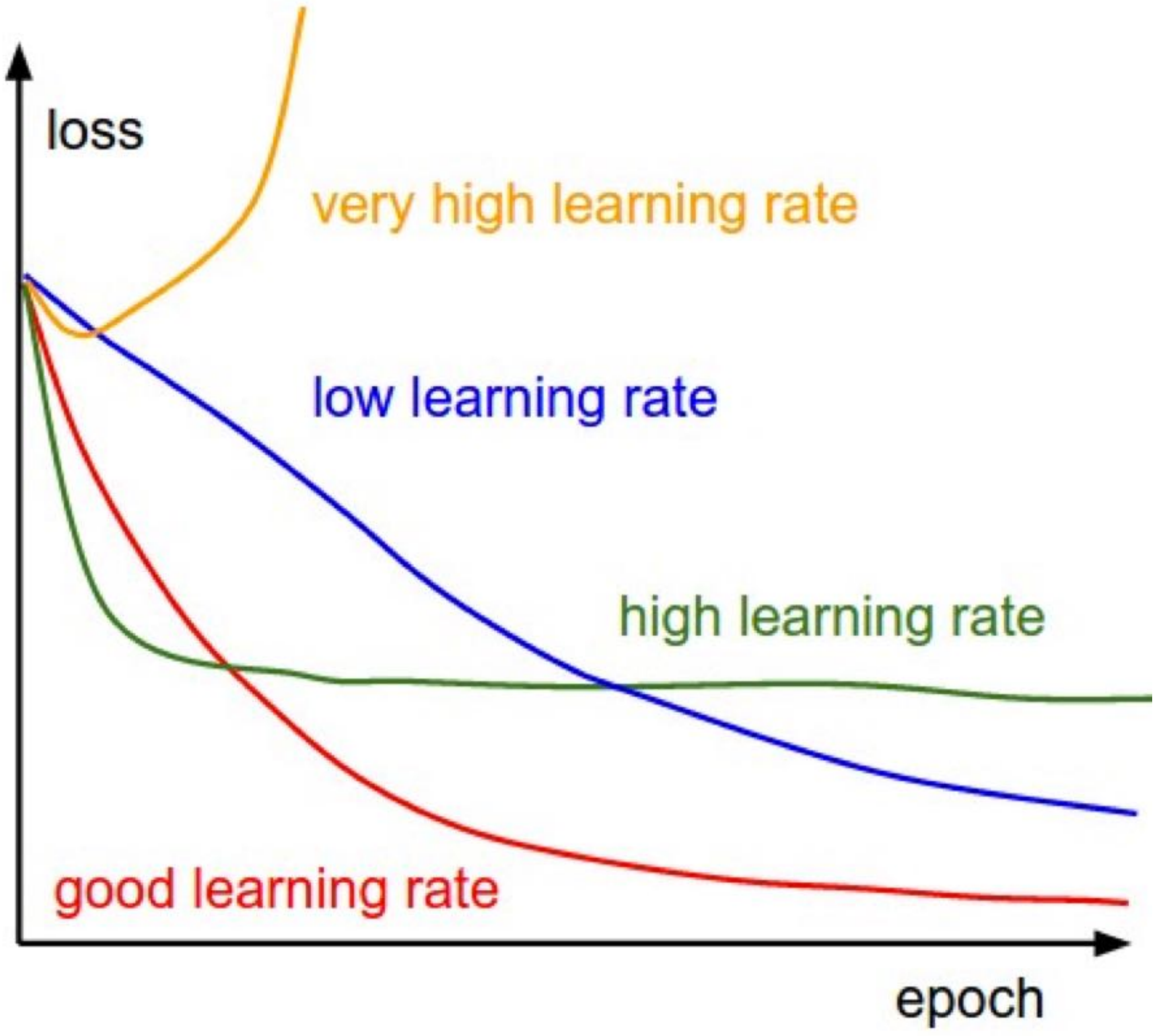
Величина шага?





https://hackernoon.com/life-is-gradient-descent-880c60ac1be8

Как понять что величина шага плохая



Многомерный случай

Задача:

$$f(x) \to \min_x$$

Разложим в ряд Тейлора до первой производной

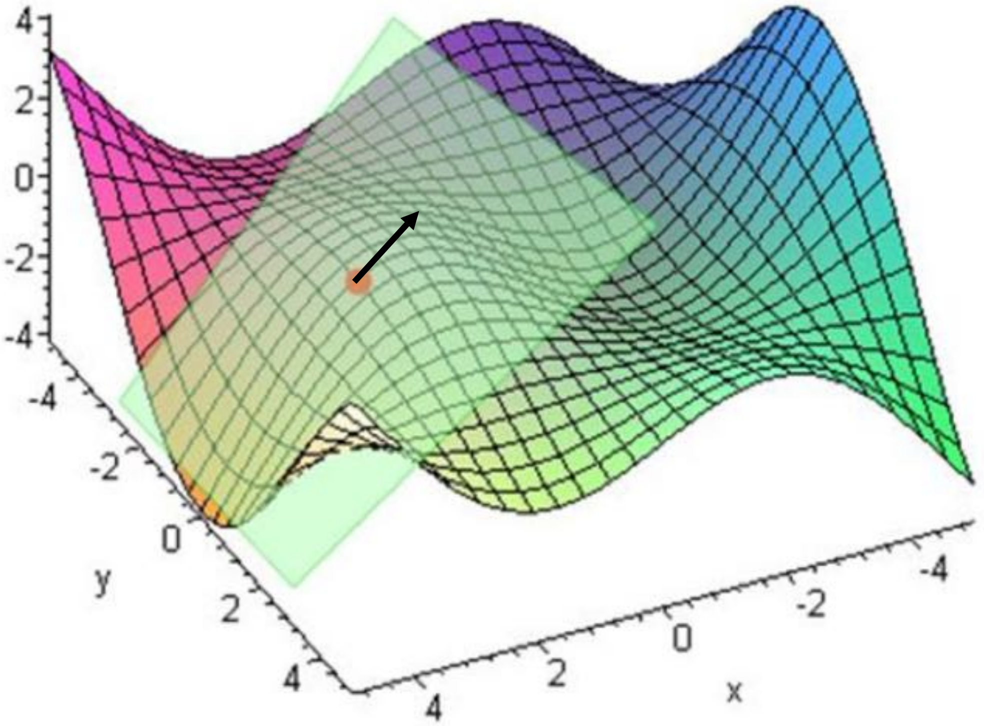
$$f(x) \approx f(x_0) + (x - x_0)^T \nabla f(x_0)$$

Когда достигается максимум $\langle x - x_0, \nabla f(x_0) \rangle$?

Ответ: когда $(x - x_0)$ и $\nabla f(x_0)$ параллельны

Наибольшее возрастание: $x - x_0 = \eta \nabla f(x_0)$
Наибольшее убывание: $x - x_0 = -\eta \nabla f(x_0)$

Многомерный случай



$$f(a) \approx f(x_0) + (a - x_0)^T \nabla f(x_0)$$

$$f(b) \approx f(x_0) + (b - x_0)^T \nabla f(x_0)$$

$$\Delta z = f(a) - f(b) = \frac{\partial f}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial f}{\partial y} \Delta y$$

Мы знаем как меняется функция
при небольшом изменении аргументов

Для максимизации выгодно пойти вдоль $\left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}\right)$

Градиентный спуск (GD)

$$f(x) \to \min_x$$

η — величина шага (гиперпараметр)

1. Инициализация

$$k = 0, \quad x_k = \text{начальное приближение}$$

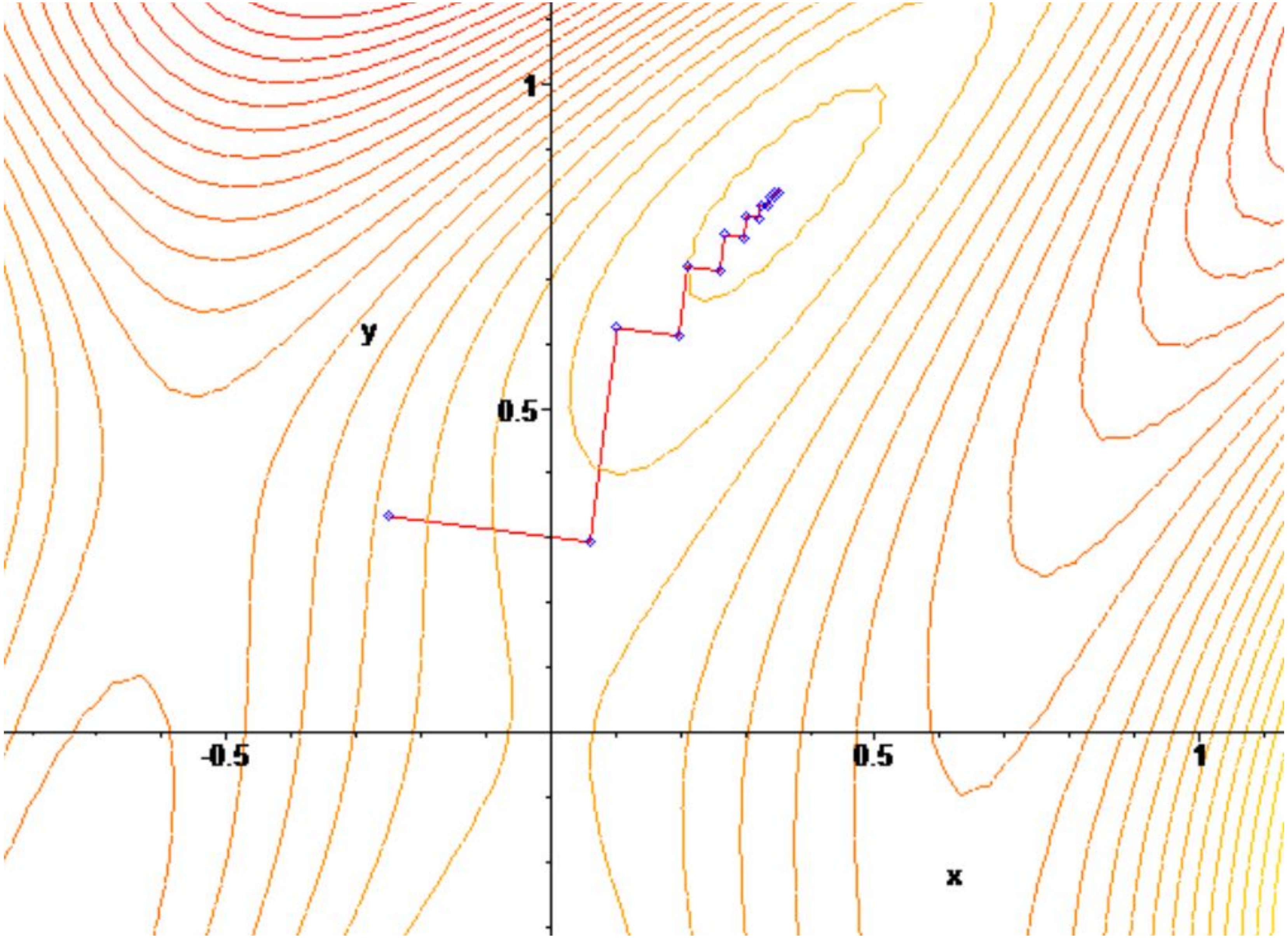
2. Шаг в сторону сильнейшего убывания

$$x_{k+1} = x_k - \eta \nabla f(x_k)$$

3. Повторение до сходимости

$$k := k + 1, \quad \text{перейти к } 2$$

Градиентный спуск: шаги



Градиентный спуск

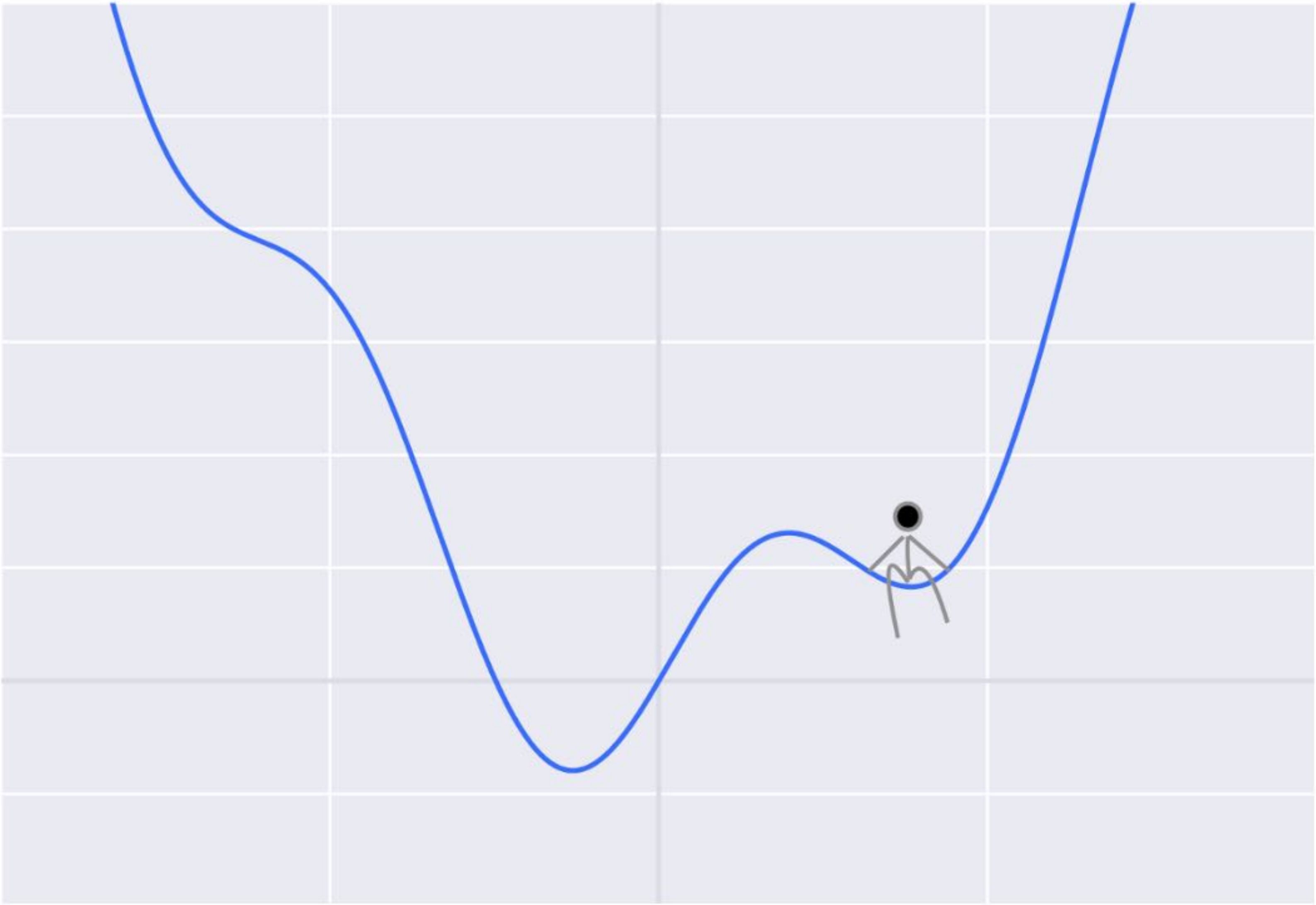
Плюсы

- Достаточно универсальный метод
- Легко реализуем

Минусы

- Попадает в локальные минимумы
- Шаги могут быть медленными
- Неэффективен для больших выборок
- Неприменим для недифференцируемых функций

Застревает в локальных минимумах



Bob chillin at a local optima

Стохастический градиент

Пусть D содержит очень много элементов.

- Долго считать градиент
- Можно сделать мало итераций за разумное время
- Плохое решение

Идея: приближенно оценивать градиент.

Стохастический градиент

Разложим функцию потерь:

$$L(D, \mu) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} l(x_i, \mu).$$

$$\nabla_\mu L(D, \mu) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \nabla_\mu l(x_i, \mu).$$

Пусть $I = (i_1, i_2, \ldots, i_m)$ — небольшая подвыборка D

Приблизим градиент:

$$\nabla_\mu L(D, \mu) \approx \frac{1}{m} \sum_{I} \nabla_\mu l(x_i, \mu).$$

Стохастический градиентный спуск (SGD)

$$\sum_{i=1}^{N} f_i(x) \to \min_x$$

η — величина шага, m — размер подвыборки

1. Инициализация

$$k = 0, \quad x_k = \text{начальное приближение}$$

2. Шаг *примерно* в сторону сильнейшего убывания

$$I := \text{случайная подвыборка размера } m$$

$$x_{k+1} = x_k - \eta \sum_I \nabla f_i(x_k)$$

3. Повторение до сходимости

$$k := k + 1, \quad \text{перейти к 2}$$

SGD mini-batches

На каждой итерации:

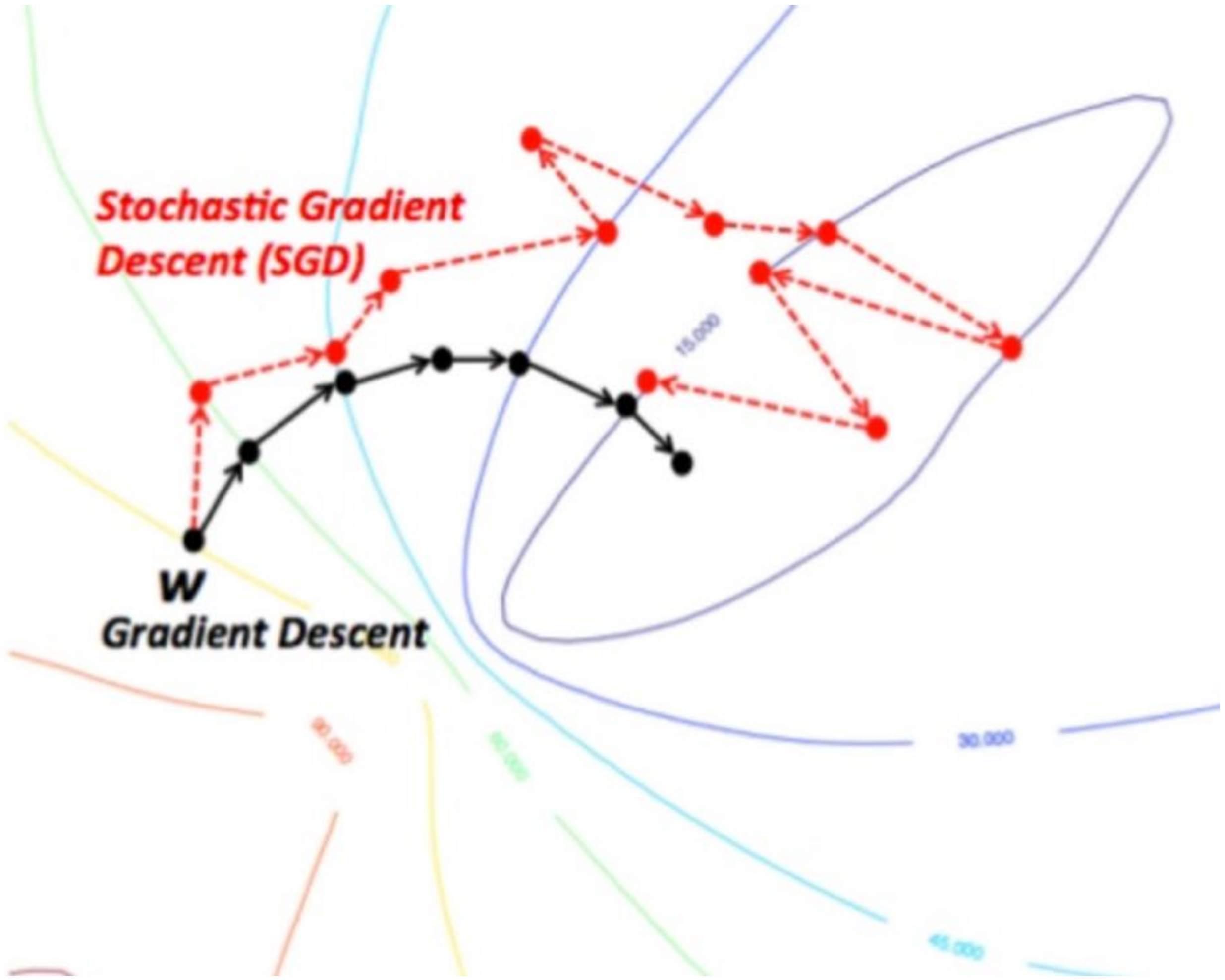
- Перемешать выборку
- Разбить выборку на равные части размера m (мини-батчи)

$$I_1 + I_2 + \ldots + I_{N/m} = \{1, \ldots, N\}$$

- Для $j = 1, \ldots, N/m$

$$x := x - \eta \sum_{I_j} \nabla f_i(x)$$

SGD: шаги



Шум в оценке градиента помогает выпрыгивать из локальных оптимумов

(S)GD + инерция (momentum)

$$f(x) \to \min_x$$

η — величина шага, α — влияние инерции

1. Инициализация

$$k = 0, \quad x_k = \text{начальное приближение}, \quad m_k = 0$$

2. Шаг в сторону сильнейшего убывания

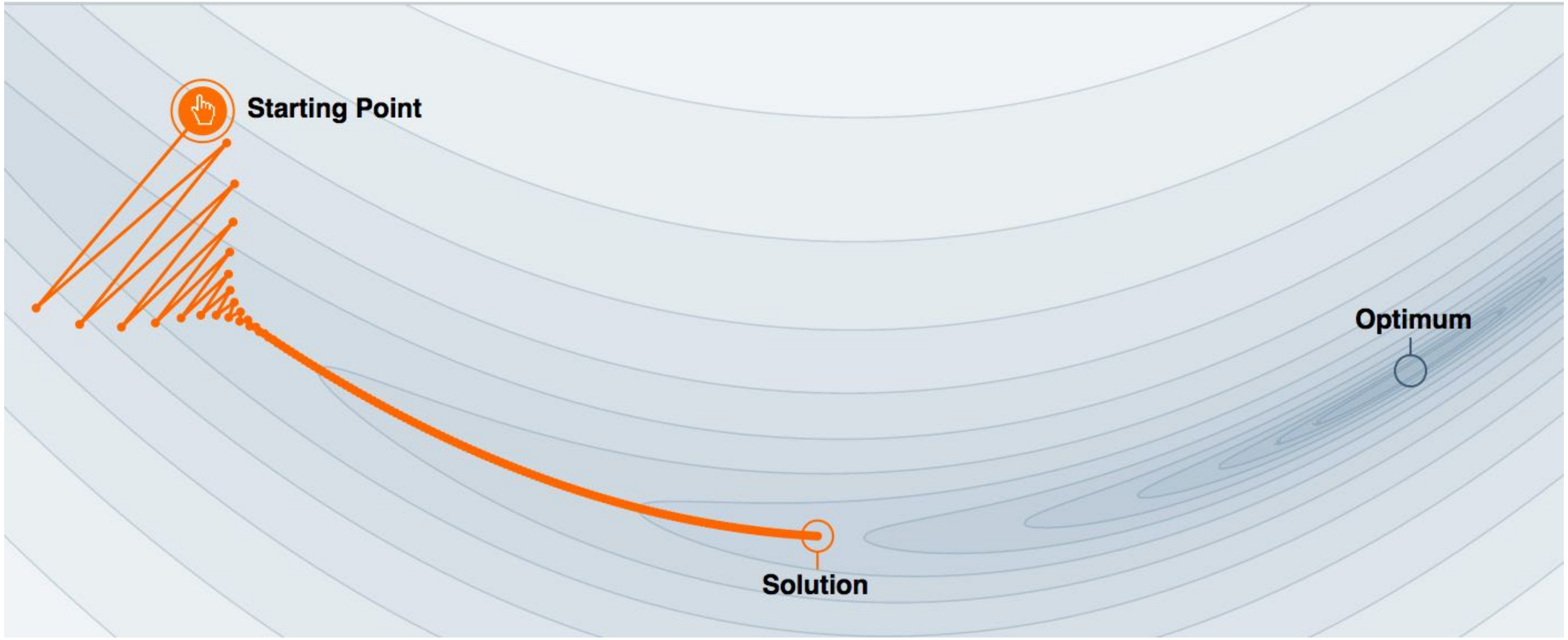
$$m_{k+1} := -\eta \nabla f(x_k) + \alpha m_k$$

$$x_{k+1} = x_k + m_{k+1}$$

3. Повторение до сходимости

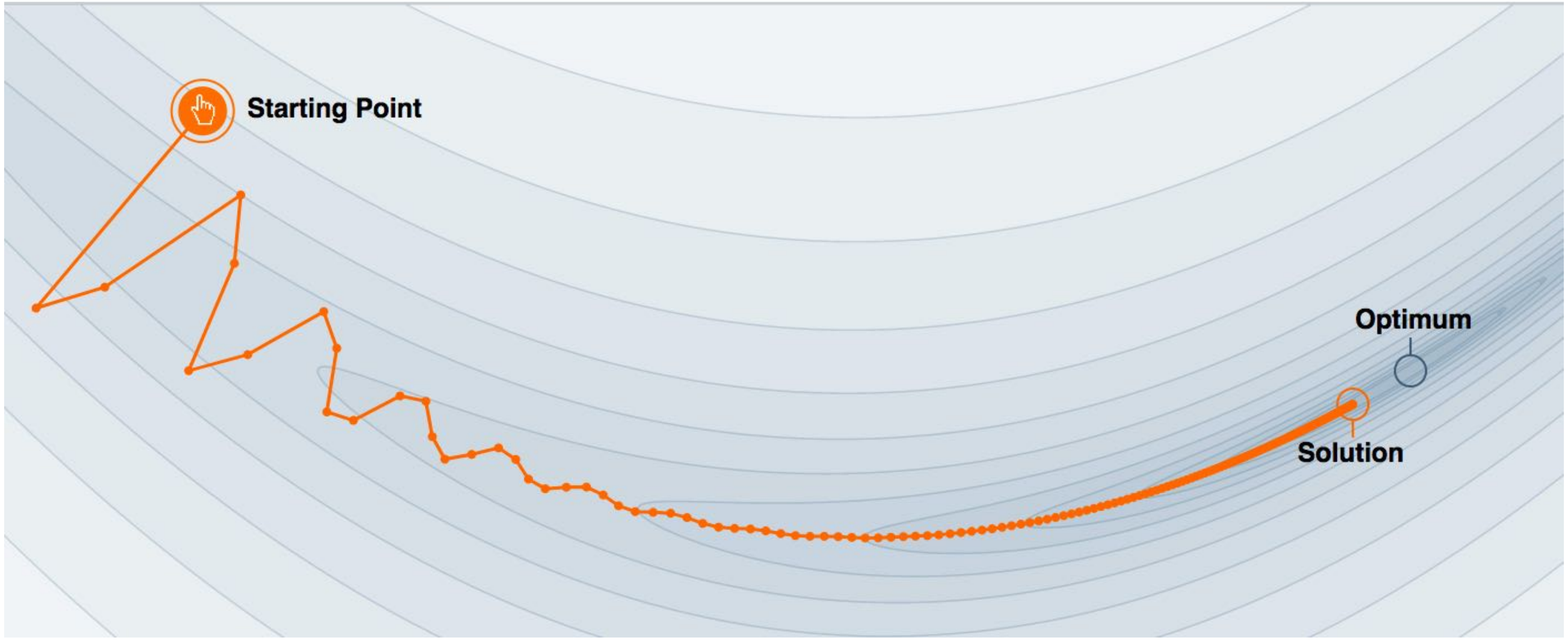
$$k := k + 1, \quad \text{перейти к } 2$$

Сходимость без инерции



https://distill.pub/2017/momentum/

Сходимость с инерцией



«Тяжелый мячик катится по поверхности»

GD + линейный поиск

$$f(x) \to \min_x$$

1. Инициализация

$$k = 0, \quad x_k = \text{начальное приближение}$$

2. Минимизация в направлении сильнейшего убывания

$$\alpha^* = \arg\min_\alpha f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))$$

$$x_{k+1} = x_k - \alpha^* \nabla f(x_k)$$

3. Повторение до сходимости

$$k := k + 1, \quad \text{перейти к } 2$$

(S)GD + переменный шаг

$$f(x) \to \min_x$$

η — базовая величина шага (гиперпараметр)

1. Инициализация

$$k = 0, \quad x_k = \text{начальное приближение}$$

2. Шаг в сторону сильнейшего убывания

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\eta}{k}\nabla f(x_k)$$

3. Повторение до сходимости

$$k := k + 1, \quad \text{перейти к 2}$$

Методы 2-го порядка

$$f(x) \to \min_x$$

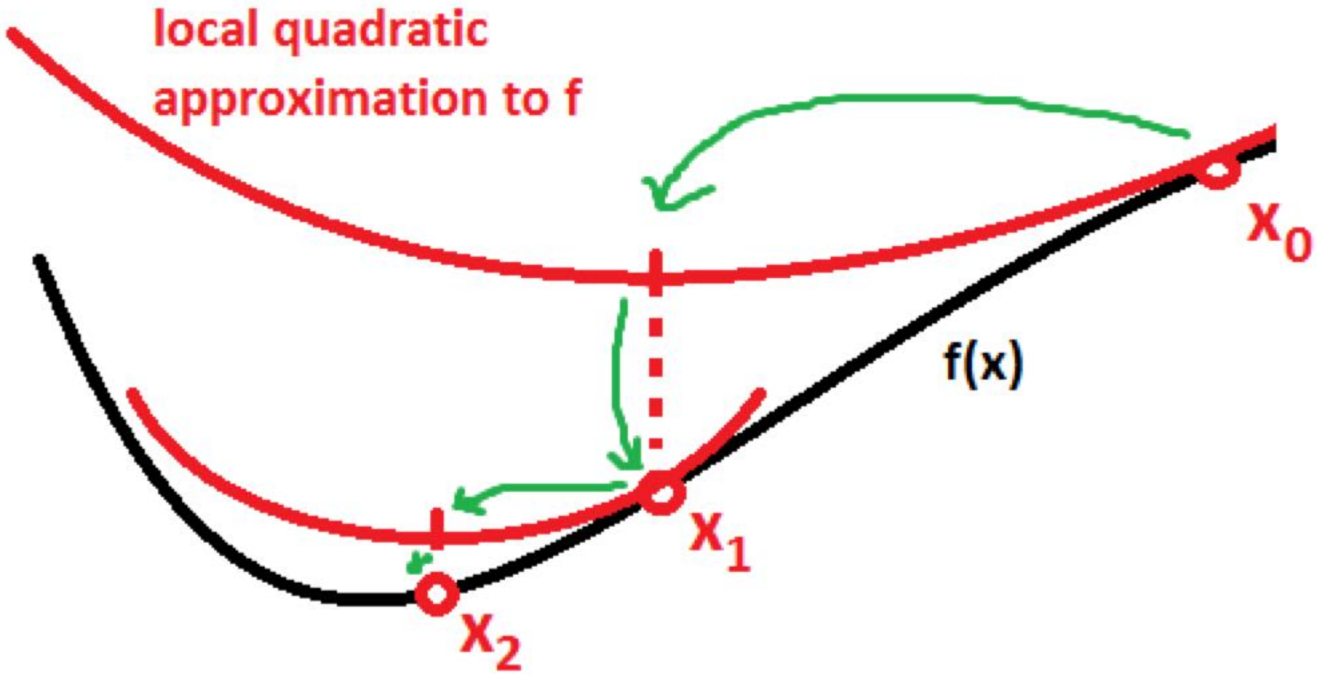
Разложим в ряд Тейлора до второй производной

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} f''(x_0)(x - x_0)^2$$

Минимизируем

$$f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} f''(x_0)(x - x_0)^2 \to \min_x$$

Методы 2-го порядка



Методы 2-го порядка

Минимизируем

$$f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} f''(x_0)(x - x_0)^2 \to \min_x$$

Минимум при

$$x = x_0 - \frac{f'(x_0)}{f''(x_0)}$$

Многомерный случай

$$f(x) \to \min_x$$

Разложим в ряд Тейлора до второй производной

$$f(x) \approx f(x_0) + (x - x_0)^T \nabla f(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^T \nabla^2 f(x_0)(x - x_0)$$

Минимизируем

$$f(x_0) + (x - x_0)^T \nabla f(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^T \nabla^2 f(x_0)(x - x_0) \to \min_x$$

Минимум при

$$x = x_0 - \left(\nabla^2 f(x_0)\right)^{-1} \nabla f(x_0)$$

Метод Ньютона

$$f(x) \to \min_x$$

η — величина шага (гиперпараметр)

1. Инициализация

$$k = 0, \quad x_k = \text{начальное приближение}$$

2. Шаг в сторону примерного минимума

$$x_{k+1} = x_k - \eta \boxed{\left(\nabla^2 f(x_k)\right)^{-1}} \nabla f(x_k)$$

3. Повторение до сходимости

$$k := k + 1, \quad \text{перейти к } 2$$

Метод Ньютона

- Плюсы:
  - Сходится за меньшее число шагов по сравнению с GD
- Минусы:
  - Долго вычислять Якобиан $\nabla^2 f(x_k)$

На практике используют квази-Ньютоновские методы, такие как L-BFGS

Методы 0 порядка

(Производную нельзя вычислить)

$$f(x) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) \to \min_x$$

Минимизируем вдоль одной координаты i

$$f(x_1, \ldots, x_{i-1}, z, x_{i+1}, \ldots, x_n) \to \min_z$$

Минимизация линейным поиском
(перебор всех значений в окрестности).

Покоординатный спуск

$$f(x) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) \to \min_x$$

1. Инициализация

$$k = 0, \quad x^k = \text{начальное приближение}$$

2. Минимизируем вдоль координаты i для $i = 1, \ldots, n$

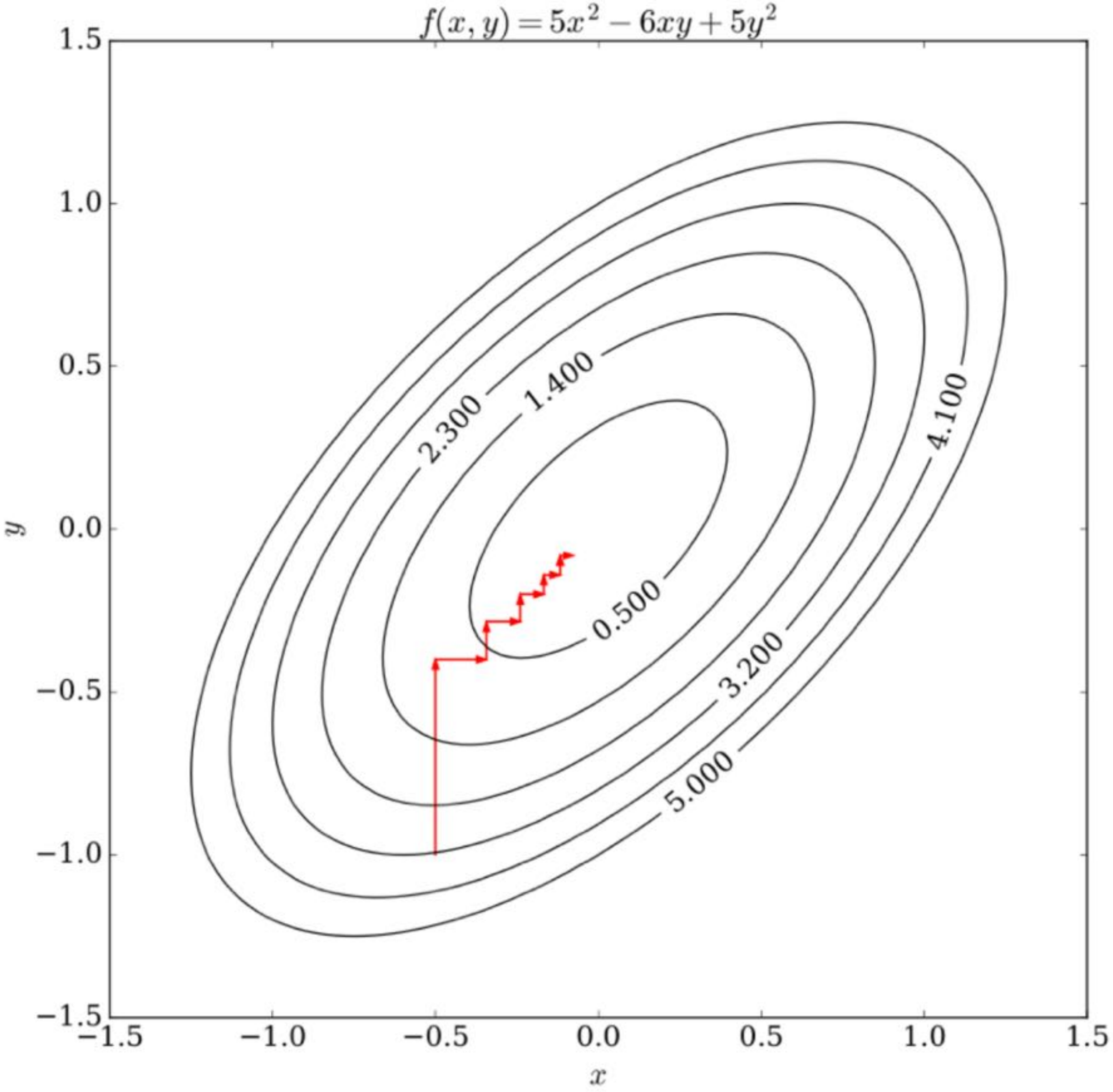
$$z^* = \arg\min_z f(x_1, \ldots, x_{i-1}, z, x_{i+1}, \ldots, x_n)$$

$$x^{k+1} = (x_1^k, \ldots, x_{i-1}^k, z^*, x_{i+1}^k, \ldots, x_n^k)$$

$$k := k + 1$$

3. Повторение до сходимости

Покоординатный спуск: шаги



Покоординатный спуск

- Плюсы:
  - Не нужно вычислять производную

- Минусы:
  - Долго работает

Ссылки

- https://hackernoon.com/life-is-gradient-descent-880c60ac1be8
- https://distill.pub/2017/momentum/
- http://slideplayer.com/slide/7341917/ Лекции по оптимизации
- http://ruder.io/optimizing-gradient-descent/