Градиентный спуск. Классифкация: конец

Маша Шеянова, masha.shejanova@gmail.com

Немного матанализа

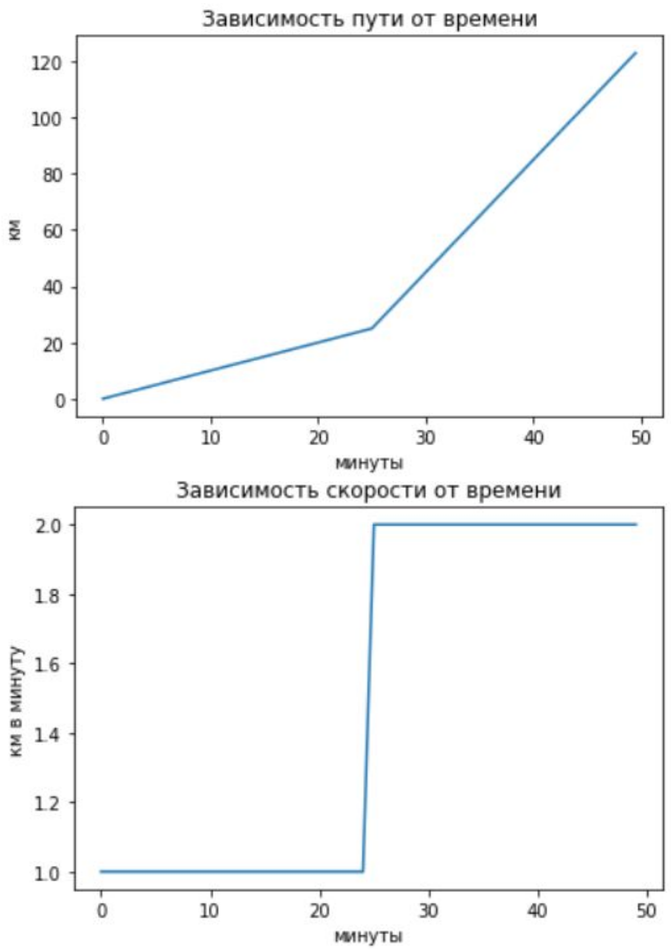
Что такое производная?

Мера, насколько быстро растёт функция.

Например, вот график зависимости пройденного пути от времени:

А вот — зависимость скорость от времени для того же случая:

Функция на втором графике — производная от функции на первом. Она показывает, что первые 25 минут скорость была 1 км в минуту, а потом удвоилась.

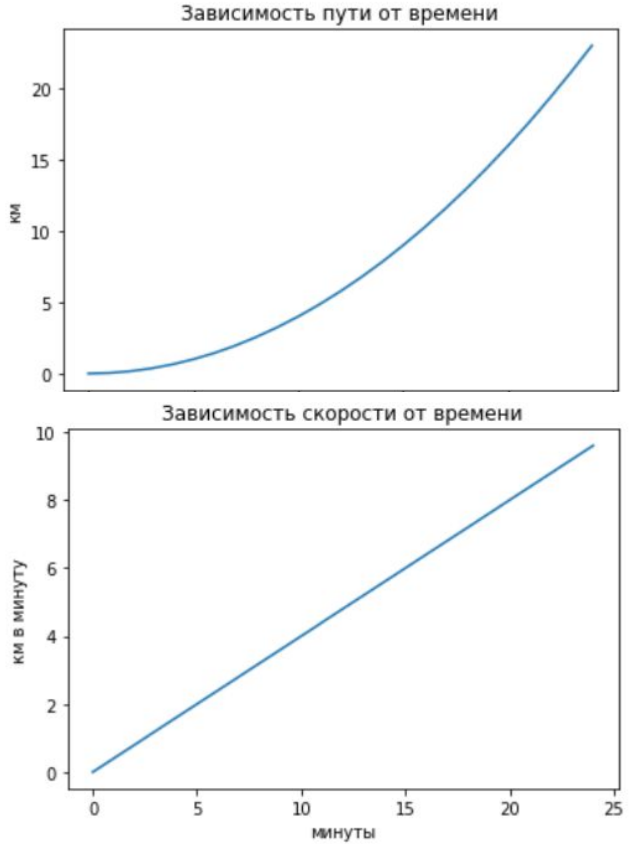


Интуитивное понимание производной

А вот в этом примере зависимость пути от времени нелинейна — скорость меняется в каждой точке.

Что отражает производная? Насколько скорость увеличилась ***в каждой отдельной точке*** графика сверху.

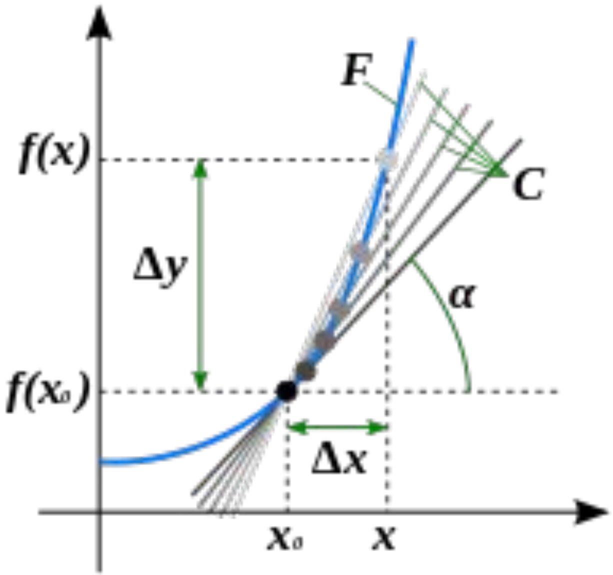
Но как посчитать это изменение в скорости?



Как посчитать производную?

Буквально, надо понять как сильно от небольшого изменения в ***x*** поменялся ***y***.

$$\Delta x = x - x_0 \qquad \Delta f = f(x) - f(x_0)$$



Причём это соотношение надо посчитать на бесконечно малом промежутке:

$$f'(x_0) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta f}{\Delta x}$$

Другие способы обозначать производную: $f'(x_0) = f'_x(x_0) = \mathrm{D}f(x_0) = \frac{df}{dx}(x_0)$

Как работают пределы

Предел (*lim*) — это значение, к которому стремится функция, когда её аргумент приближается к определённой точке.

Чаще всего нам интересно $x \to +/-\infty$ или $x \to 0$. В производной $\Delta x \to 0$.

Несколько полезных правил:

- можно сокращать константы в дроби
- предел константы = константа

Потренируемся считать производные

Допустим, есть такая функция: ***f(x) = ax + b***. Чему равна её производная?
Воспользуемся определением производной.

$f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \Delta f / \Delta x =$

$= \lim_{\Delta x \to 0} (f(x_1) - f(x_0)) / (x_1 - x_0) =$ *# раскроем Δf и Δx*

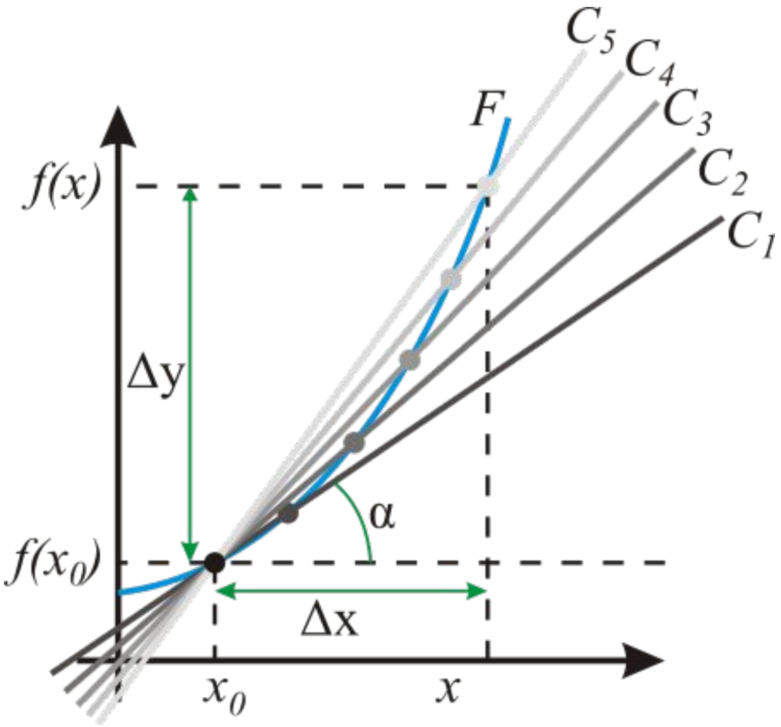
$= \lim_{\Delta x \to 0} (ax_1 + b - (ax_0 + b)) / (x_1 - x_0) =$ *# подставим значения функции*

$= \lim_{\Delta x \to 0} (ax_1 - ax_0)) / (x_1 - x_0) = \lim_{\Delta x \to 0} a * (\mathbf{x_1 - x_0}) / (\mathbf{x_1 - x_0}) =$ *# сократим числитель*

$= \lim_{\Delta x \to 0} a = a$ *# разделим обе части на $x_1 - x_0$*

Давайте теперь посчитаем производную функции ***f(x) = ax² + b***.

Производная в точке

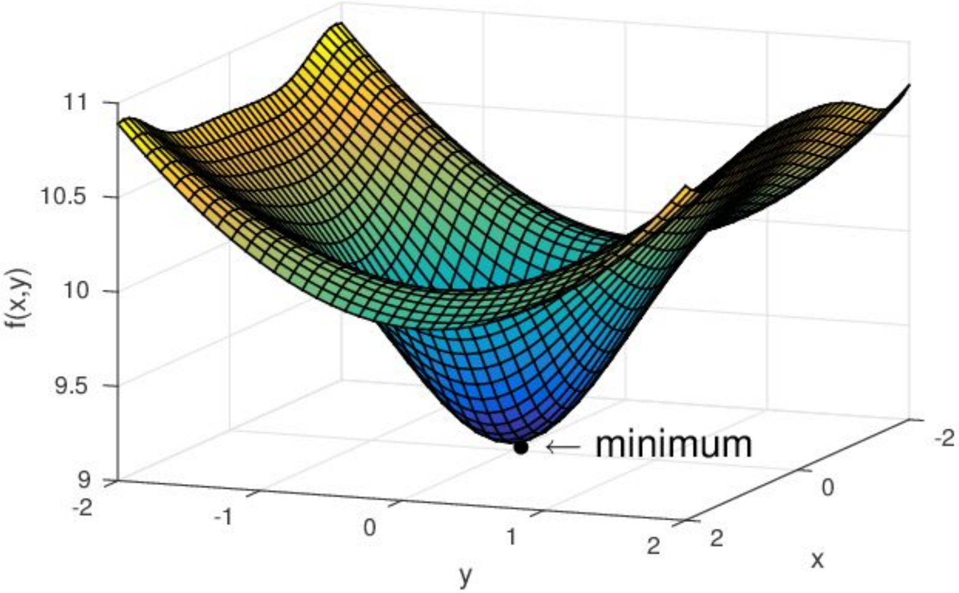


При x1 - x0 → 0, секущая переходит в касательную.

Тангенс угла α наклона этой касательной в точке касательной — и есть производная в точке x0.

Частная производная

Но что, если мы имеем дело с функцией от двух (или больше) переменных?

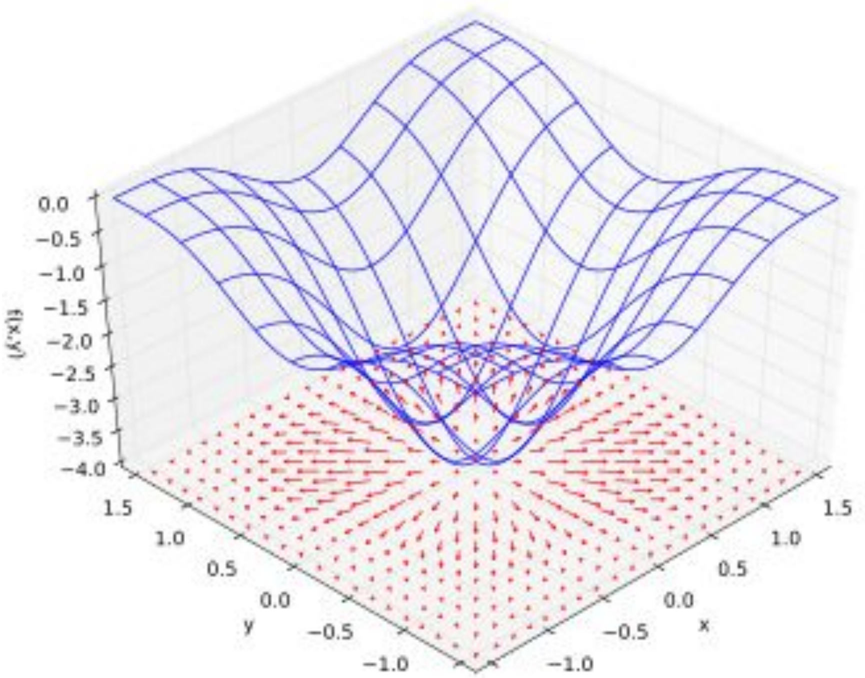


Частная производная

У функции от n переменных f(x1, x2, ... x_n) нет одной общей производной — зато есть n частные производные.

$$\frac{\partial f}{\partial x_k}(a_1, \cdots, a_n) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(a_1, \ldots, a_k + \Delta x, \ldots, a_n) - f(a_1, \ldots, a_k, \ldots, a_n)}{\Delta x}$$

Что такое градиент



Градиент — это вектор, элементы которого — значения всех возможных частных производных в конкретной точке.

Градиент соответствует вектору, указывающему направление наибольшего роста функции.

Градиентный спуск

Идея

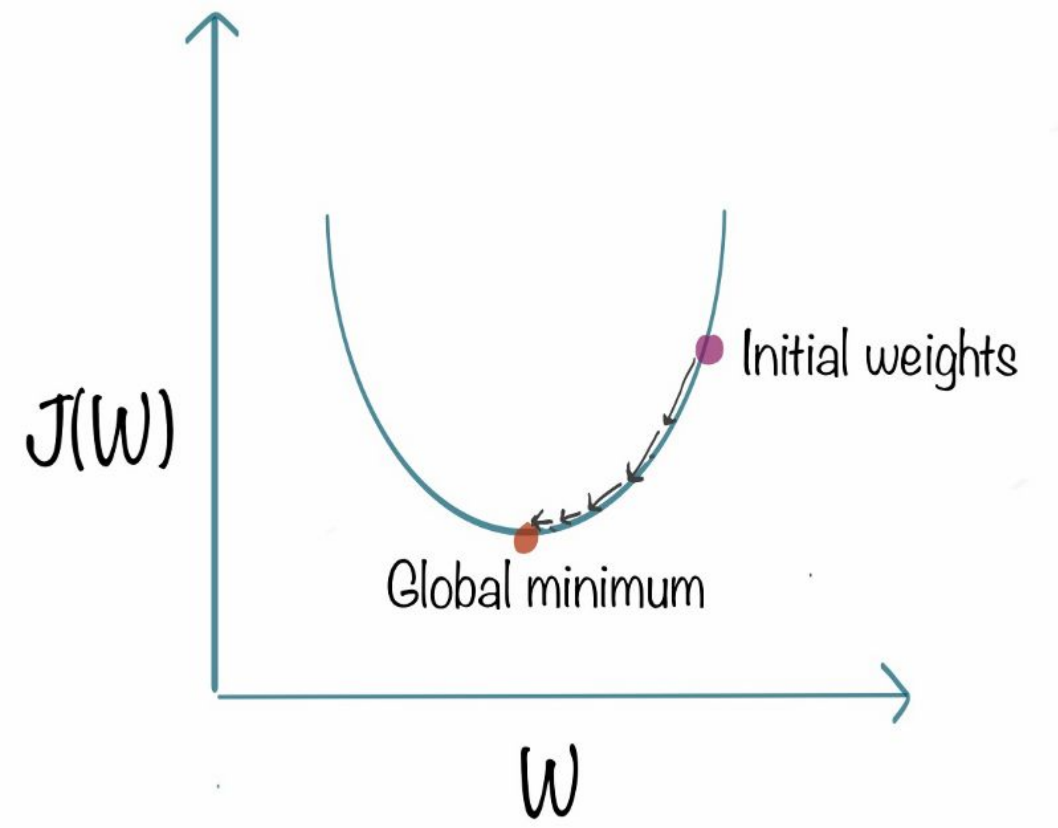
loss function = cost function = error function = функция потерь = J(W)

Её мы хотим минимизировать.

Теперь мы умеем находить, в каком направлении функция растёт быстрее всего. Но нам нужен минимум функции потерь, а не максимум!

Решение очевидно: найдём градиент и пойдём в обратную сторону.

С какой скоростью? Растёт быстро — с большой, медленно — с маленькой.

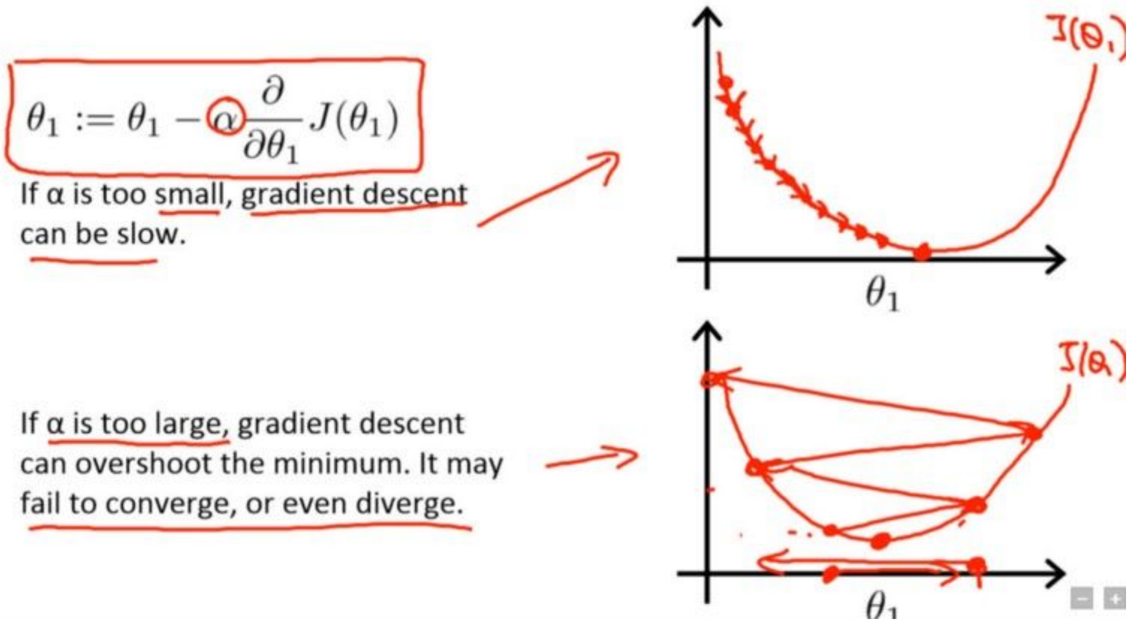


Источник картинки — очень понятно про то, как оно работает и какое бывает.

Шаги:

- подобрать случайные коэффициенты
- вычислить градиент функции потерь в этой точке
- обновить коэффициенты
- повторять, пока не сойдётся

Learning rate



Learning rate is a hyper-parameter that controls how much we are adjusting the weights of our network with respect the loss gradient. (отсюда)

Каким бывает градиентный спуск

- **Batch gradient descent**

  Считает градиент функции потерь с параметрами W сразу для всех обучающих данных. Работает жутко медленно.

- **Stochastic gradient descent (SGD)**

  Рандомно выбирает точку данных каждый раз

- **Mini-batch gradient descent**

  Выбираем кусочек выборки и по нему считаем

Что делать, если всё ещё ничего непонятно

Непонимание градиентного спуска, в принципе, не помешает вам решать типичные задачи готовыми инструментами. Но может помешать улучшать модель и решать проблемы, если что-то пойдет не так.

Если всё ещё ничего непонятно, keep calm and:

- пройдите небольшой курс по multivariate calculus на khan academy
- посмотрите вот это видео про градиентный спуск
- прочитайте эту и эту статью
- если удастся сформулировать вопросы, feel free to ask

Логистическая регрессия

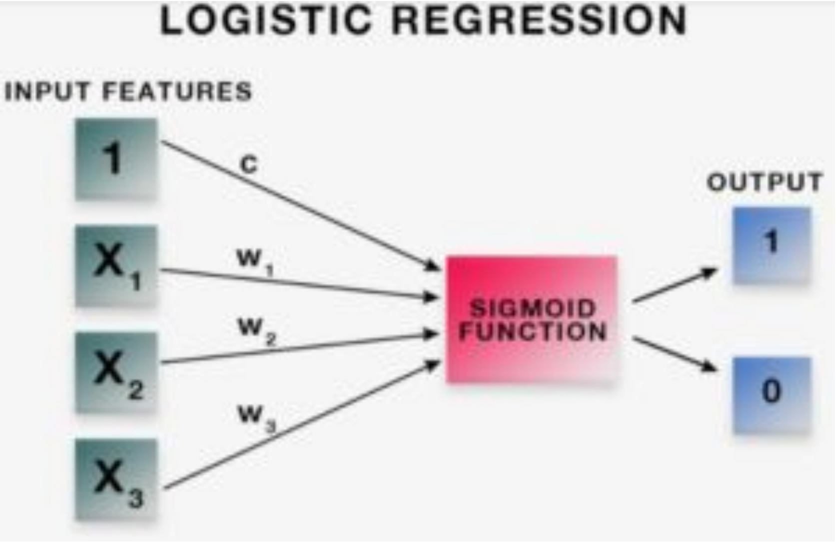
Для чего

Несмотря на название, это алгоритм классификации.

Подбирает веса коэффициентов, скармливает

x * w = (x1, x2, ...) * (w1, w2, ...)

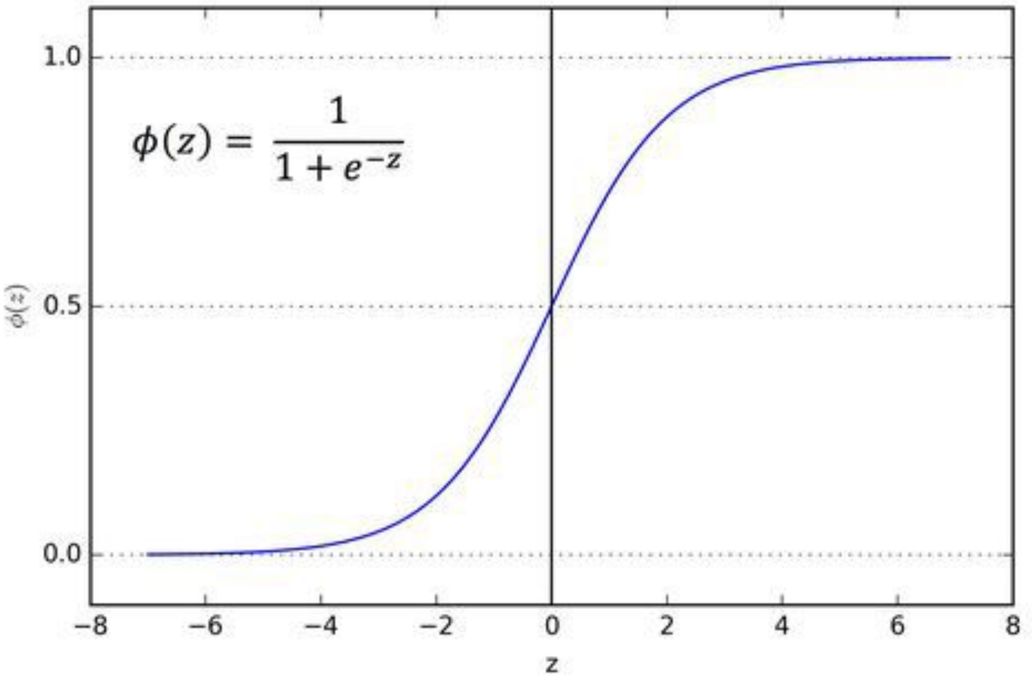
функции-сигмоиду, которая принимает значения от 0 (класс 1) до 1 (класс 2).



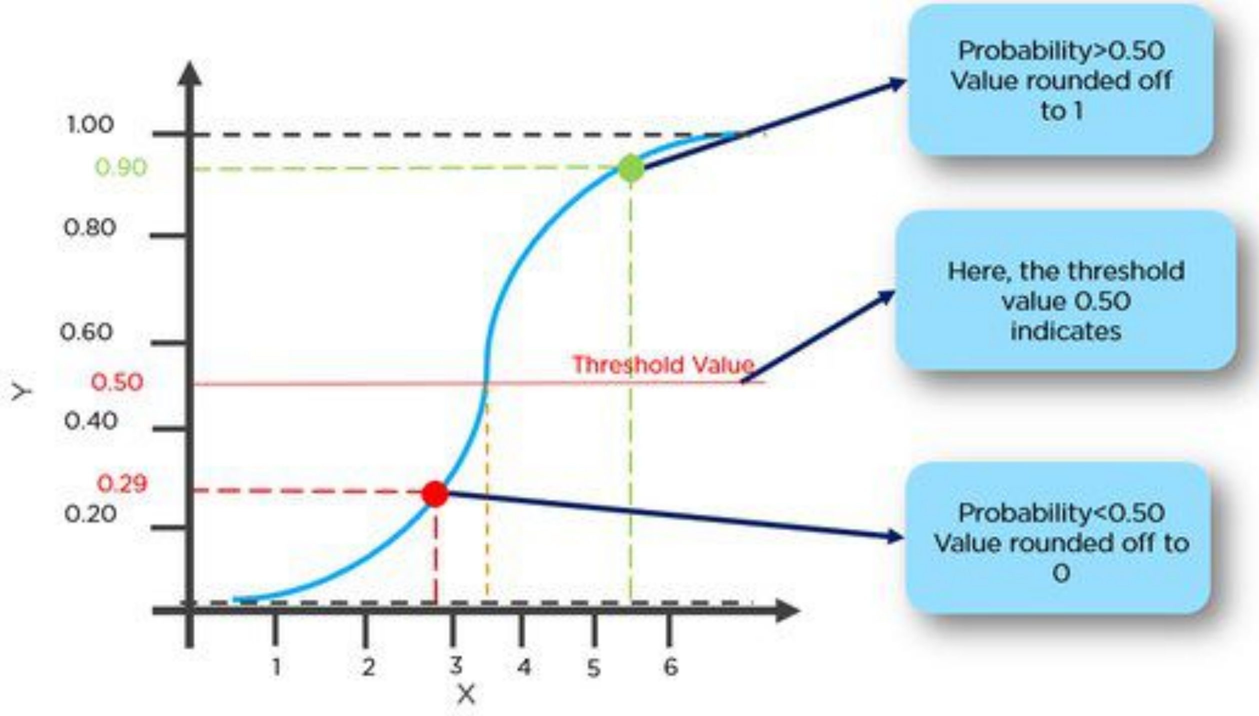
$$y = \text{logistic}\,(c + x_1{*}w_1 + x_2{*}w_2 + x_3{*}w_3 + \ldots\ldots + x_n{*}w_n)$$

$$y = 1 / 1 + e\,[-(c + x_1{*}w_1 + x_2{*}w_2 + x_3{*}w_3 + \ldots\ldots + x_n{*}w_n)]$$

Sigmoid function



Что в итоге


1.00
0.90
0.80
0.60
0.50
0.40
0.29
0.20
Y
1
2
3
4
5
6
X
Threshold Value
Probability>0.50
Value rounded off
to 1
Here, the threshold
value 0.50
indicates
Probability<0.50
Value rounded off to
0

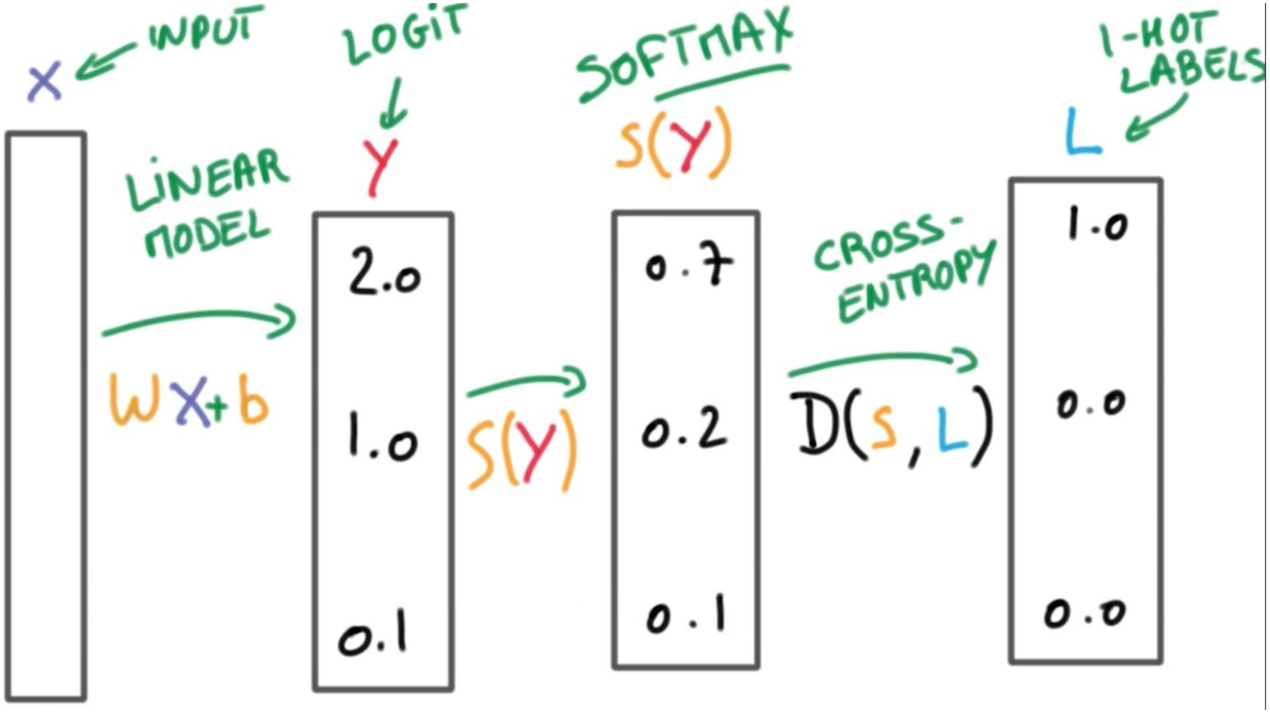
Мультиклассовая классификация и Softmax

Softmax — нормализация вектора вероятностей (= сделать так, чтобы сумма вероятностей была 1).

$$\sigma(\mathbf{z})_j = \frac{e^{z_j}}{\sum_{k=1}^{K} e^{z_k}} \quad \text{for } j = 1, \ldots, K \text{ and } \mathbf{z} = (z_1, \ldots, z_K) \in \mathbb{R}^K$$

Логистическая регрессия выдаёт вероятность принадлежности к опредедённому классу vs. все остальные — для каждого класса. Чтобы понять, как какому классу всё-таки объект относится, прогоняем эти вероятности через softmax.

Мультиклассовая классификация и Softmax



Гиперпараметры

Параметры vs гиперпараметры

Параметр — это внутренняя характеристика модели, значение которой может быть выведенно из данных. Это, например, коэффициент при признаке “слово *котик*”.

Гиперпараметр — это характеристика, “внешняя” по отношении к модели. Например, k в kNN. Его нельзя вывести из данных при обучении, и надо подбирать как-то отдельно.

(Определения из статьи).

Подбор гиперпараметров

Как подобрать гиперпараметры?

- можно пробовать менять разные варианты руками
- можно перебирать их в цикле

```
for df in range(0, 20):
    vec = TfidfVectorizer(min_df=df)
```

- а можно использовать Grid Search

```
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
```

Ресурсы

Почитать (англ)

- очень понятная статья про градиентный спуск
- Machine learning for humans: градиентный спуск, регессия
- gradient descent into madness
- градиентный спуск своими руками
- про learning rate
- логистическая регрессия с кодом
- понятно про softmax
- про Grid Search

Посмотреть

- почему градиент работает
- как работает градиентый спуск на примере нейросеток (5:20 — 12:20)