



ТЕХНОСФЕРА

Лекция 7 Методы оптимизации

Полыковский Даниил

19 марта 2018 г.

Постановка задачи

- ▶ $\theta_* = \min_{\theta} J(\theta)$
- ▶ В любой точке можем вычислить $\nabla_{\theta} J(\theta)$

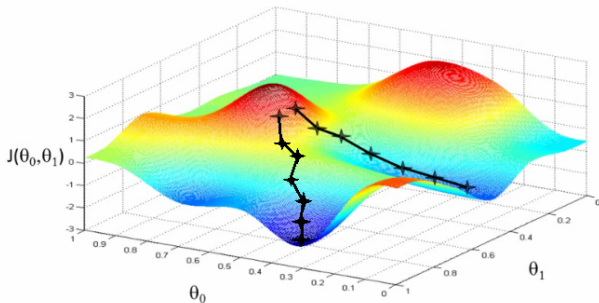


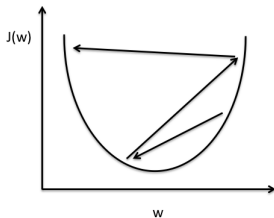
Рис.: Пример функции для оптимизации

Batch Gradient Descend

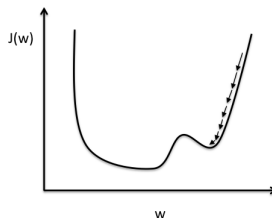
Формула пересчета:

$$\theta_t = \theta_{t-1} - \eta_t \nabla_{\theta} J(\theta_{t-1})$$

- Требуется обработать все объекты для одного шага
- Нет режима online обучения



Large learning rate: Overshooting.



Small learning rate: Many iterations until convergence and trapping in local minima.

Рис.: Выбор темпа обучения

SGD / Mini-batch SGD

- ▶ Какие функции оптимизируем?

SGD / Mini-batch SGD

- ▶ Какие функции оптимизируем?
- ▶ Большие суммы функций: $J(\theta) = \sum_{i=1}^N J_i(\theta)$
- ▶ Формула пересчета: $\theta_t = \theta_{t-1} - \eta_t \nabla_{\theta} J_i(\theta_{t-1})$
- ▶ Mini-batch SGD: $\theta_t = \theta_{t-1} - \eta_t \sum_{i \in \{i_1, i_2, \dots, i_k\}} \nabla_{\theta} J_i(\theta_{t-1})$
- ▶ Легко попасть в регион неопределенности, тяжело найти общий оптимум

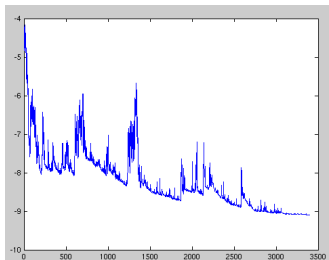


Рис.: Изменение значения J во время обучения

SGD / Mini-batch SGD

Для выпуклых функций гарантируется сходимость, если:

$$\eta_t \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$$

$$\sum_{t=0}^{\infty} \eta_t = \infty$$

$$\sum_{t=0}^{\infty} \eta_t^2 < \infty$$

Momentum

- ▶ $\nu_t = \gamma \nu_{t-1} + \eta_t \nabla_{\theta} J(\theta) \leftarrow$ “инерция”
- ▶ $\theta = \theta - \nu_t$
- ▶ Рекомендовано брать $\gamma = 0.9$
- ▶ Проблема: метод приводит к перескокам через локальный минимум

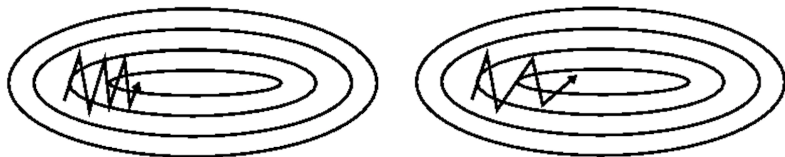


Рис.: Слева: без импульса, справа: с импульсом

Nesterov accelerated gradient

- ▶ Следующая позиция приближенно равна $\theta - \gamma\nu_{t-1}$
- ▶ Вычисление градиента в новой точке дает возможность скорректировать направление движения
- ▶ $\nu_t = \gamma\nu_{t-1} + \eta_t \nabla_{\theta} \mathcal{J}(\theta - \gamma\nu_{t-1})$
- ▶ $\theta = \theta - \nu_t$

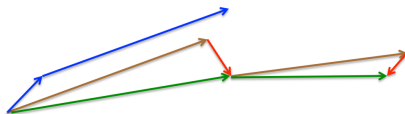


Рис.: NAG¹. brown = jump; red = correction, green = accumulated gradient; blue vectors = standard momentum

- ▶ Сначала делаем шаг в направлении накопленного градиента
- ▶ Затем вычисляем градиент там и делаем поправку

¹http://www.cs.toronto.edu/~tijmen/csc321/slides/lecture_slides_lec6.pdf

Методы

- ▶ SGD $\nu_t = \eta_t \nabla_{\theta} J_i(\theta_{t-1})$
Momentum $\nu_t = \gamma \nu_{t-1} + \eta_t \nabla_{\theta} J(\theta)$
NAG $\nu_t = \gamma \nu_{t-1} + \eta_t \nabla_{\theta} J(\theta - \gamma \nu_{t-1})$
- ▶ $\theta = \theta - \nu_t$
- ▶ Общая проблема: одинаковый шаг для всех параметров
- ▶ Трудно подобрать η_t
- ▶ Примеры расписаний: $\eta_t = \gamma^t \eta_0$, $\eta_t = \begin{cases} \alpha_1 & t \leq A \\ \alpha_2 & t > A \end{cases}$

Adagrad

- ▶ $\mathbf{g}_{t,i} = \nabla_{\theta_i} J(\theta)$
- ▶ $\theta_{t+1,i} = \theta_{t,i} - \frac{\eta}{\sqrt{G_{t,ii} + \epsilon}} \cdot \mathbf{g}_{t,i}$
- ▶ $G_{t,ii}$ – сумма квадратов значений $\mathbf{g}_{t,i}$ вплоть до текущего
- ▶ Стандартные значения: $\eta = 0.01$, $\epsilon = 10^{-8}$
- ▶ Мотивация: маленькие обновления для часто встречающихся параметров, большие для редких
- ? Какова проблема этого метода?

Adagrad

- ▶ $\mathbf{g}_{t,i} = \nabla_{\theta_i} J(\theta)$
- ▶ $\theta_{t+1,i} = \theta_{t,i} - \frac{\eta}{\sqrt{G_{t,ii} + \epsilon}} \cdot \mathbf{g}_{t,i}$
- ▶ $G_{t,ii}$ – сумма квадратов значений $\mathbf{g}_{t,i}$ вплоть до текущего
- ▶ Стандартные значения: $\eta = 0.01$, $\epsilon = 10^{-8}$
- ▶ Мотивация: маленькие обновления для часто встречающихся параметров, большие для редких
- ? Какова проблема этого метода?
 $G_{t,ii}$ не убывает \Rightarrow затухание обновлений

RMSProp / Adadelta

- ▶ Будем использовать последние несколько значений g_t^2 для подсчета G_t
- ▶ Экспоненциальное среднее: $E[g^2]_t = \gamma E[g^2]_{t-1} + (1 - \gamma)g_t^2$,
 $\gamma = 0.9$
- ▶ $\theta_t = \theta_{t-1} - \Delta\theta_t$
- ▶ $\Delta\theta_t = \frac{\eta}{\sqrt{E[g^2]_t + \epsilon}} g_t = \frac{\eta}{RMS[g]_t} g_t \leftarrow \text{RMSprop}$
- ▶ Adadelta: избавимся от η
- ▶ $\Delta\theta_t = \frac{RMS[\Delta\theta]_{t-1}}{RMS[g]_t} g_t$

Adadelta: интуиция

- ▶ Метод Ньютона: $\Delta\theta_t = (\nabla^2 J)^{-1} \cdot \nabla J$
- ▶ Диагональная аппроксимация: $\nabla^2 J \approx \text{diag}(\frac{\partial^2 J}{\partial \theta_{t,i}^2})$
- ▶ $\Delta\theta_{t,i} = (\frac{\partial^2 J}{\partial \theta_{t,i}^2})^{-1} \frac{\partial J}{\partial \theta_{t,i}}$
- ▶ $\frac{\partial^2 J}{\partial \theta_{t,i}^2} = \frac{\frac{\partial J}{\partial \theta_{t,i}}}{\Delta\theta_{t,i}}$

Adadelta: интуиция

- ▶ Метод Ньютона: $\Delta\theta_t = (\nabla^2 J)^{-1} \cdot \nabla J$
- ▶ Диагональная аппроксимация: $\nabla^2 J \approx \text{diag}(\frac{\partial^2 J}{\partial \theta_{t,i}^2})$
- ▶ $\Delta\theta_{t,i} = (\frac{\partial^2 J}{\partial \theta_{t,i}^2})^{-1} \frac{\partial J}{\partial \theta_{t,i}}$
- ▶ $\frac{\partial^2 J}{\partial \theta_{t,i}^2} = \frac{\frac{\partial J}{\partial \theta_{t,i}}}{\Delta\theta_{t,i}}$
- ▶ Не знаем числитель, но можем оценить при помощи RMS:
$$\frac{\partial^2 J}{\partial \theta_{t,i}^2} \approx \frac{RMS[g]_t}{RMS[\Delta\theta]_{t-1,i}}$$

Adam (Adaptive Moment Estimation)

- ▶
$$\begin{cases} m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) g_t \\ \nu_t = \beta_2 \nu_{t-1} + (1 - \beta_2) g_t^2 \end{cases}$$
- ▶ m_t, ν_t инициализируются нулями, поэтому долгий “разгон” \Rightarrow надо уменьшить инерцию в начале обучения
- ▶ Надо обеспечить несмещенность: $\mathbb{E}[m_t] = \mathbb{E}[g_t]$ и $\mathbb{E}[\nu_t] = \mathbb{E}[g_t^2]$
- ▶ Поправка:
$$\begin{cases} \hat{m}_t = \frac{m_t}{1 - \beta_1^t} \\ \hat{\nu}_t = \frac{\nu_t}{1 - \beta_2^t} \end{cases}$$
- ▶
$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{\sqrt{\hat{\nu}_t} + \epsilon} \hat{m}_t$$
- ▶ $\beta_1 = 0.9, \beta_2 = 0.999, \epsilon = 10^{-8}$

Критерии остановки

Когда остановить обучение?

- ▶ Превышен лимит по числу итераций или времени
- ▶ Качество на валидации начало ухудшаться
- ▶ $J(\theta_t) - J(\theta_*) \leq \epsilon$
- ▶ $J(\theta_t) \leq \epsilon J(\theta_0)$
- ▶ $\|\nabla J(\theta_t)\| \leq \epsilon \|\nabla J(\theta_0)\|$

Визуализация

- ▶ 2D визуализация (gif)
- ▶ Седловая точка (gif)

Вопросы

