Производная и градиентный спуск

Функции. Производная. Экстремумы функции. Выпуклость функции. Правила дифференцирования. Правила дифференцирования сложной функции. Chain-rule. Функция нескольких аргументов. Градиент. Градиентный спуск как метод оптимизации.

Даниил Корбут
Специалист по Анализу Данных

НЕТОЛОГИЯ

Даниил Корбут
DL Researcher
Insilico Medicine, Inc

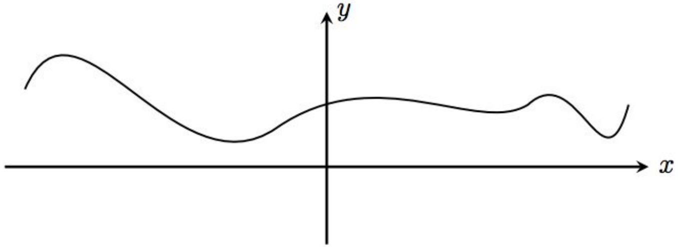
Окончил бакалавриат ФИВТ МФТИ (Анализ данных) в 2018г
Учусь на 2-м курсе магистратуры ФИВТ МФТИ
Работал в Statsbot и Яндекс. Алиса.
Сейчас в Insilico Medicine, Inc, занимаюсь генерацией активных молекул и исследованиями старения с помощью DL.

Функции и их свойства

Функция - это некоторое соответствие x -> f(x), причём для каждого x определено единственное значение f(x).

D(f) - область определения функции
E(f) - область значений функции

Будем работать только с функциями, у которых D(f) и E(f) - подмножество R.



Функции и их свойства

Каковы область определения и область значений следующих функций?

1) **$f(x) = 1 / (x-1)$**
2) **$f(x) = 2^x$**

1) **$D(f) = R \setminus \{1\}, E(f) = R \setminus \{0\}$**
2) **$D(f) = R, E(f) = (0, +\infty)$**

Функции и их свойства

Представление о функции, её свойствах и поведении можно получить, построив ее график. Функции бывают непрерывными и разрывными.

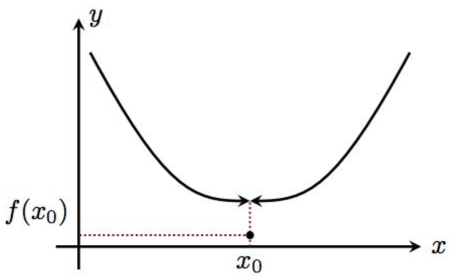


Рис. 2: Функция с устранимым разрывом

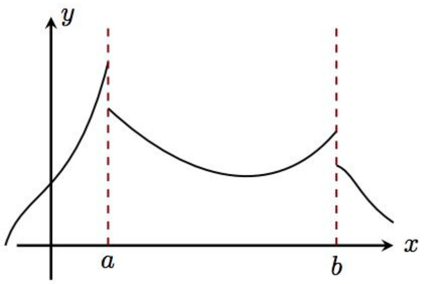


Рис. 3: Функция с разрывами в точках a и b.

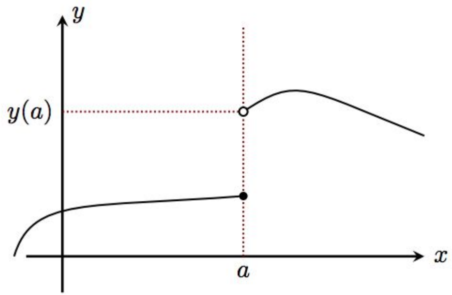


Рис. 4: Функция с разрывом типа «скачок».

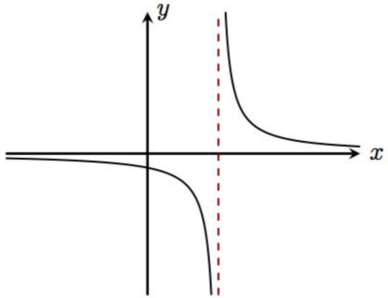


Рис. 5: Функция с бесконечным разрывом.

Предел функции

$$f(x) = (1+x)^{\frac{1}{x}}$$

Функция не определена в x=0, но её значение может быть вычислено в точках сколь угодно близких к ней

x	0.1	0.01	0.001	0.0001	...
$f(x)$	2.593..	2.704..	2.716..	2.718..	...

$$\lim_{x \to 0} (1+x)^{\frac{1}{x}} = e.$$

Не у всех функций есть конечный предел

$$g(x) = \frac{1}{x}$$

Функция неограниченно растёт при приближении к x = 0

x	0.1	0.01	0.001	0.0001	...
$1/x$	10	100	1000	10000	...

$$\lim_{x \to 0} \frac{1}{x} = \infty.$$

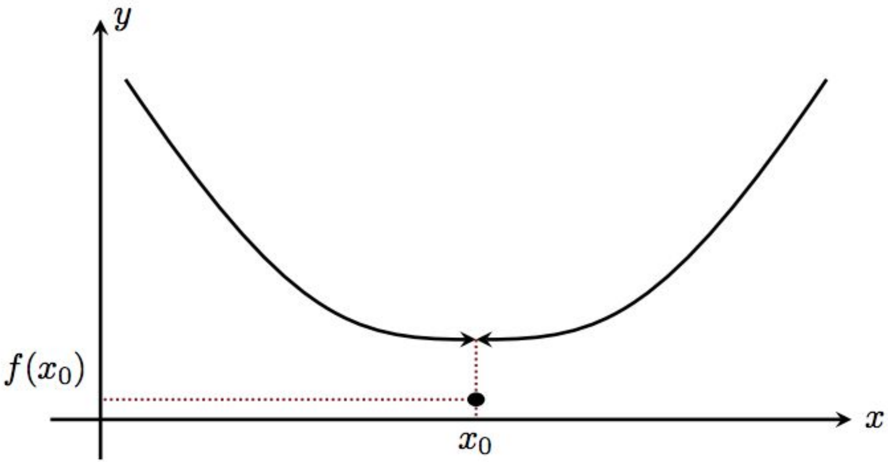
Предел функции

Понятие предела тесно связано с **понятием непрерывности** функции в точке.

Функция **непрерывна** в точке а, если:

!

$$\lim_{x\to a} f(x) = f(\lim_{x\to a} x) = f(a).$$



С помощью **понятия предела** определяется другое полезное понятие — **понятие производной**.

Производная функции

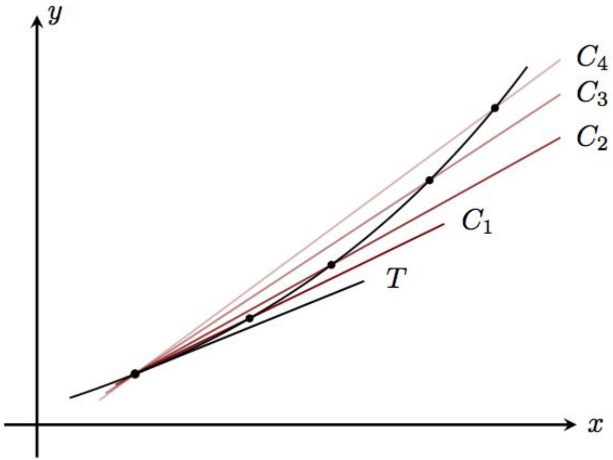
Производная - мгновенная скорость роста функции в заданной точке.

$$\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}=k.$$

Давайте посмотрим на линейную функцию y=kx+b

Как понять скорость роста для произвольной функции? **Предел!**

$$f'(x)=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}.$$



Гладкие функции - функции, производная которых непрерывна.

Производная сложной функции

Пусть имеются 2 функции f(x) и h(x), и область значений f(x) принадлежит области определения h(x). Тогда, h(f(x)) - применение одной функции к результату другой, называется **сложной функцией**.

Пример: f(x) = x+1, h(x) = ln(x), g(x) = h(f(x)) = ln(x+1)

$$df = f'(x_0)dx, \qquad dx = \Delta x.$$

Дифференциал - линейная часть приращения функции

$$f'(x_0) = \frac{df}{dx}(x_0).$$

Отсюда можно записать производную функцию через дифференциал

$$\frac{dg(h(x))}{dx} = \frac{dg(h(x))}{dh(x)}\frac{dh(x)}{dx} = \frac{dg(h)}{dh}\frac{dh(x)}{dx}$$

Производная сложной функции (пример)

$$\left(\frac{u(x)}{v(x)}\right)' = \frac{u(x)' \cdot v(x) - v(x)' \cdot u(x)}{v^2(x)}$$

$$(kf(x))' = kf'(x)$$

$$(u(x) \cdot v(x))' = u(x)' \cdot v(x) + v(x)' \cdot u(x)$$

$$(f+g)' = f' + g'$$

f(x) = sin(ln(x)+5x)

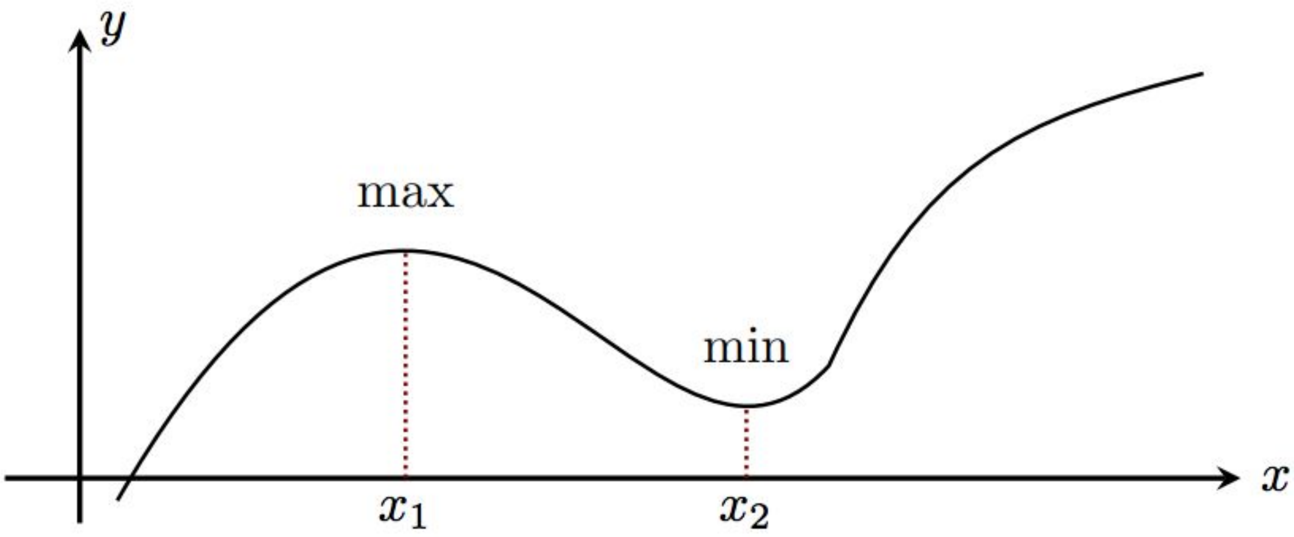
f’(x) = cos(ln(x)+5x) * (ln(x)+5x)’

f’(x) = cos(ln(x)+5x) * (1/x + 5)

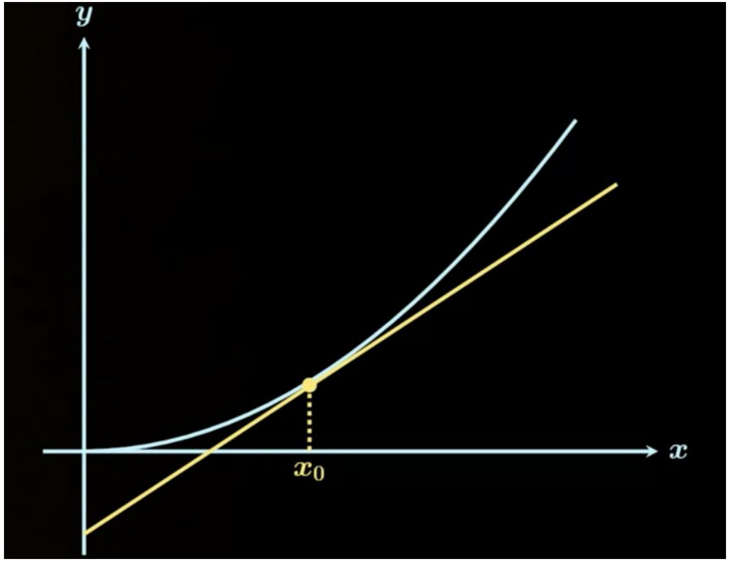
Экстремум функции

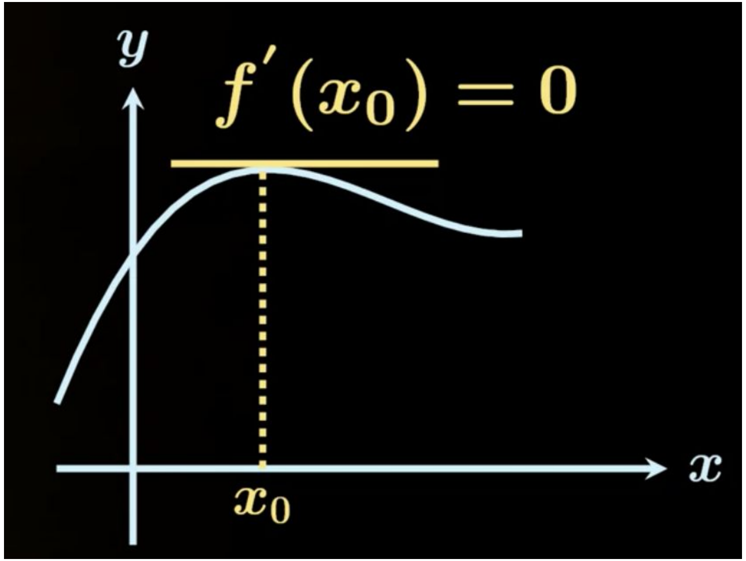
!

Точка x0 - называется **локальным минимумом** функции f(x), если существует такая окрестность U(x0), для которой f(x) > f(x0), x из U(x0). Аналогично для максимума.
В случае глобального минимума U(x0) = D(f).



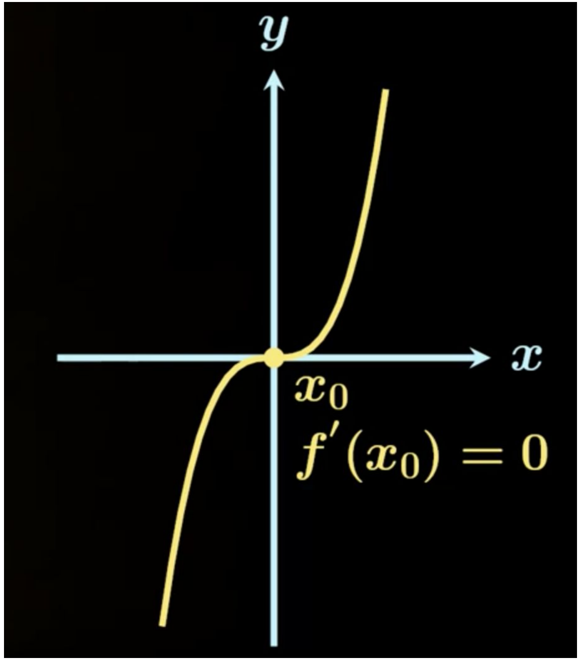
Экстремум функции и производная

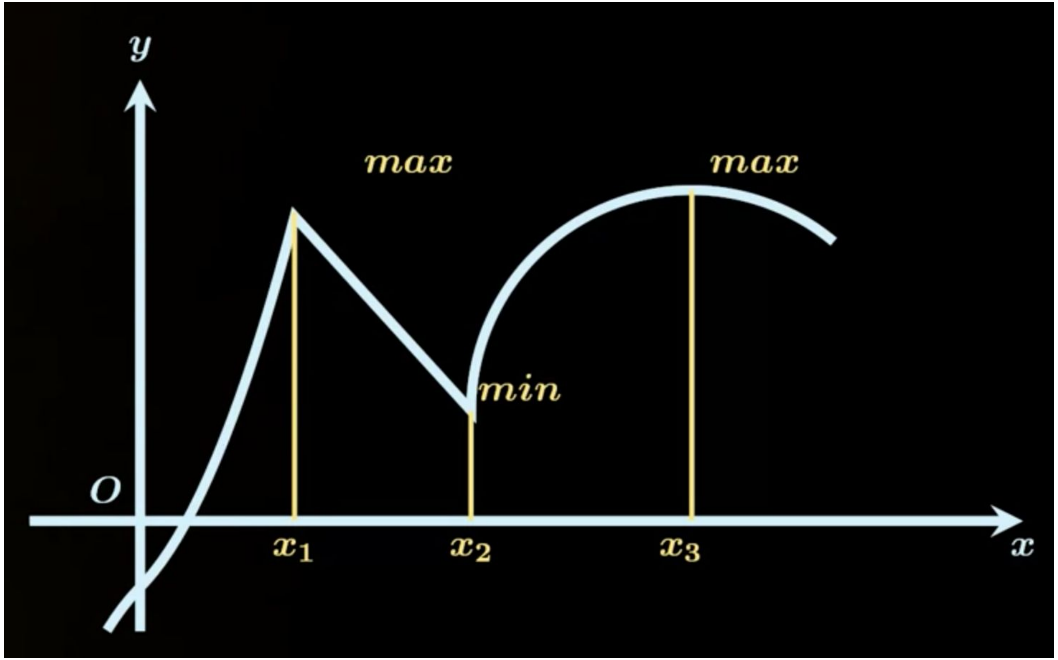




В точках локальных экстремумов производная (если она определена (!), пример дальше) обязана равняться нулю.
Это **необходимое** условие.

Экстремум функции и производная



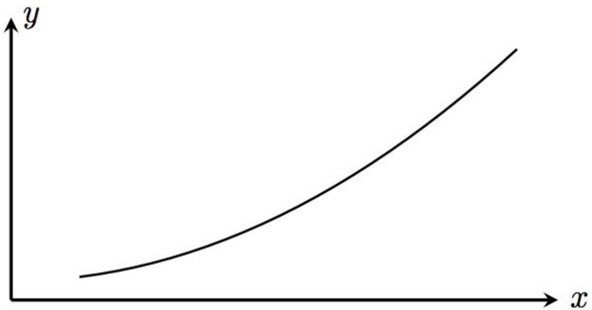


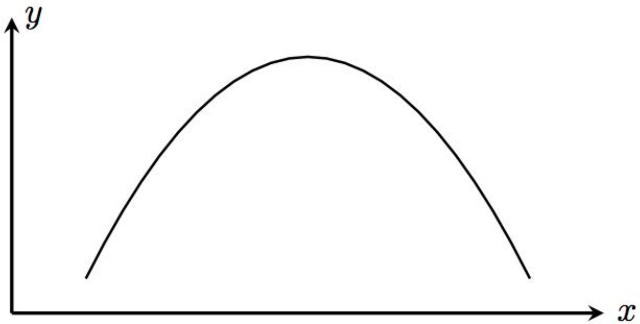
Однако равенство нулю производной **не является достаточным** условием локального экстремума. Также производная может быть вовсе не определена в точках локальных экстремумов.

Выпуклость функции и вторая производная

Как влияет знак производной на характер поведения функции?

1. $f'(x) \geq 0$ — функция возрастает,
2. $f'(x) > 0$ — функция строго возрастает,
3. $f'(x) \leq 0$ — функция убывает,
4. $f'(x) < 0$ — функция строго убывает.





Выпуклость функции и вторая производная

Давайте спустимся на уровень ниже: какому свойству функции соответствует монотонная производная?

1. $f''(x) \geq 0$ — функция $f(x)$ выпукла,
2. $f''(x) > 0$ — функция $f(x)$ строго выпукла,
3. $f''(x) \leq 0$ — функция $f(x)$ вогнута,
4. $f''(x) < 0$ — функция $f(x)$ строго вогнута.

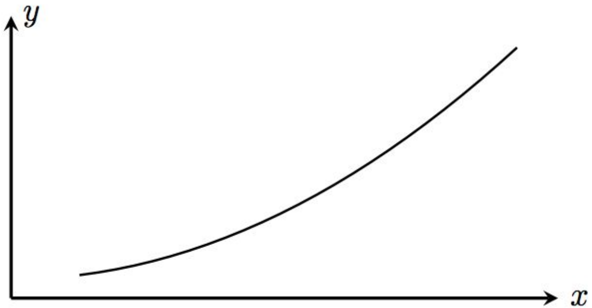


Рис. 11: Выпуклая функция

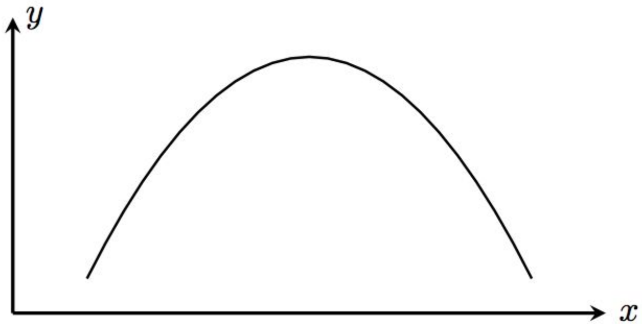


Рис. 12: Вогнутая функция

НЕТОЛОГИЯ

Выпуклость функции и вторая производная

Помните **необходимое** условие локального экстремума?

! Наложив некоторые условия на вторую производную, можно сделать их **достаточными**!

Достаточное условие экстремума Пусть выполнено необходимое условие экстремума, то есть в некоторой точке x_0 значение $f'(x_0) = 0$. Если в таком случае

1. $f''(x) > 0$ — функция будет строго выпукла и реализуется строгий минимум.
2. $f''(x) < 0$ — функция будет строго вогнута и реализуется строгий максимум.

Выпуклость функции и вторая производная

Посмотрим на графики выпуклой и вогнутой функций и проведём прямые, пересекающие их.

Что можно сказать о положении графика относительно прямой?

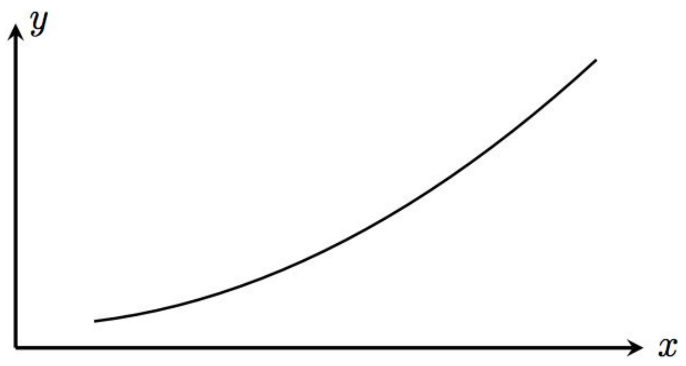


Рис. 11: Выпуклая функция

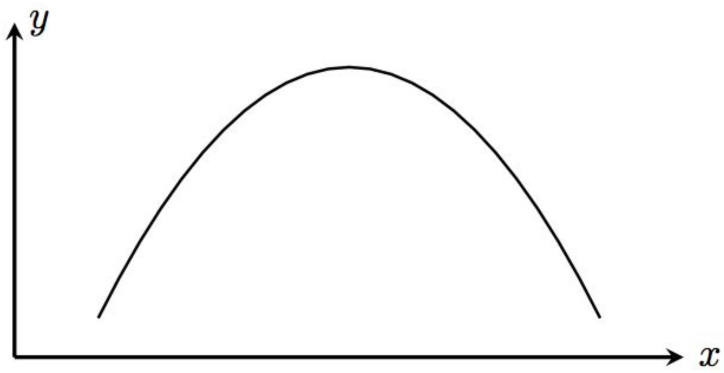


Рис. 12: Вогнутая функция

Выпуклость функции и вторая производная

Отсюда возникает более общее определение выпуклости/вогнутости функции.

Вещественнозначная функция, определённая на некотором интервале, **выпукла,** если для любых двух значений аргумента x, y и для любого числа t ∈ [0, 1] выполняется:

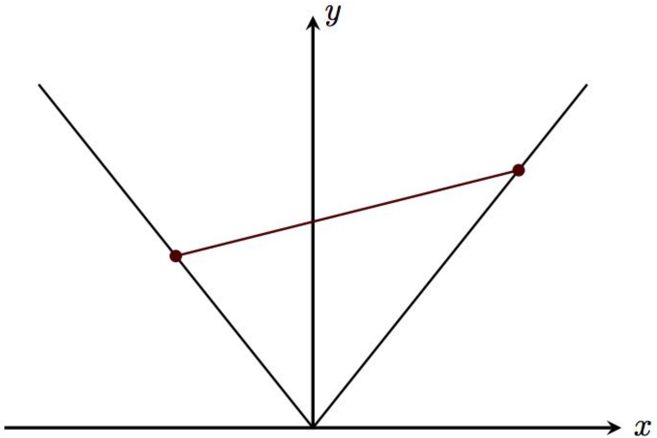
$$f(tx + (1-t)y) \leq tf(x) + (1-t)f(y).$$

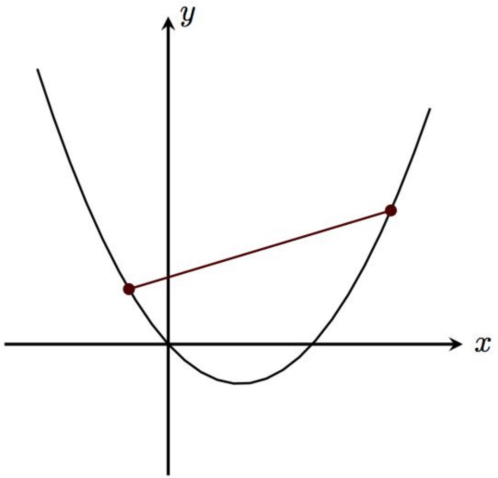
То есть, если соединить две точки на графике отрезком, он окажется выше графика функции f(x).

Выпуклость функции и вторая производная

Почему это определение более общее?

Оно подходит и для функций, производная которых не определена в некоторых точках.





Функция нескольких переменных

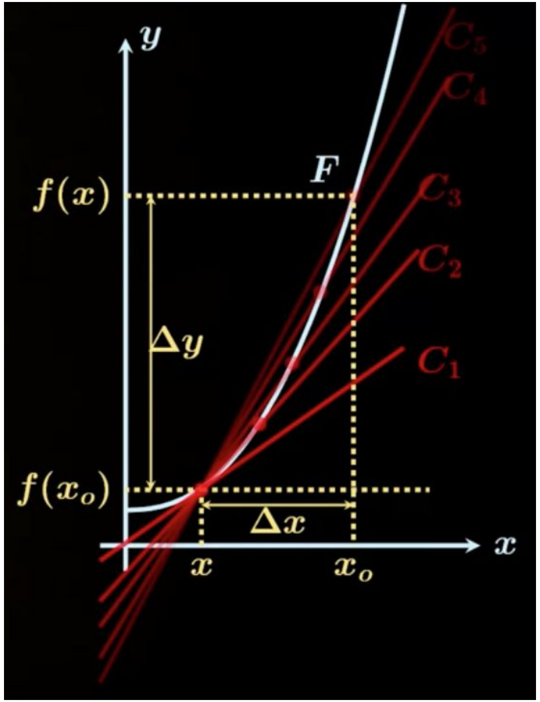
Пусть теперь x - не число из R, а вектор (x1, ..., xn), где каждое xi из R, а весь x из R^n.

D(f) - область определения функции (ничего не изменилось!)
E(f) - область значений функции (ничего не изменилось!)

Снова будем работать только с функциями, у которых D(f) и E(f) - подмножество R^n.

Функция нескольких переменных

Из одномерного случая помним: геометрический смысл производной - *угловой коэффициент касательной*.



Как посчитать производную функции нескольких переменных?

- $\dfrac{\Delta f}{\Delta x} \xrightarrow{\Delta x \to 0} f'_x$, y — фиксирован
- $\dfrac{\Delta f}{\Delta y} \xrightarrow{\Delta y \to 0} f'_y$, x — фиксирован

Частная производная

! **Частная производная** — это одно из обобщений понятия производной на случай функции нескольких переменных.

! **Частная производная** функции f(x, y) по x определяется как производная по x, взятая в смысле функции одной переменной, при условии постоянства оставшейся переменной y.

$$f'_x(x,y) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h,y) - f(x,y)}{h}, \qquad f'_y(x,y) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x,y+h) - f(x,y)}{h}.$$

https://www.coursera.org/learn/mathematics-and-python

Касательная плоскость

Пусть дана некоторая функция двух переменных f : R^2 → R. Она, вообще говоря, определяет некоторую поверхность z = f(x, y) в трехмерном пространстве.

Если в некоторой точке (x0, y0) функция дифференцируема как функция многих переменных, то в этой точке можно рассмотреть **касательную плоскость** к данной поверхности.

!

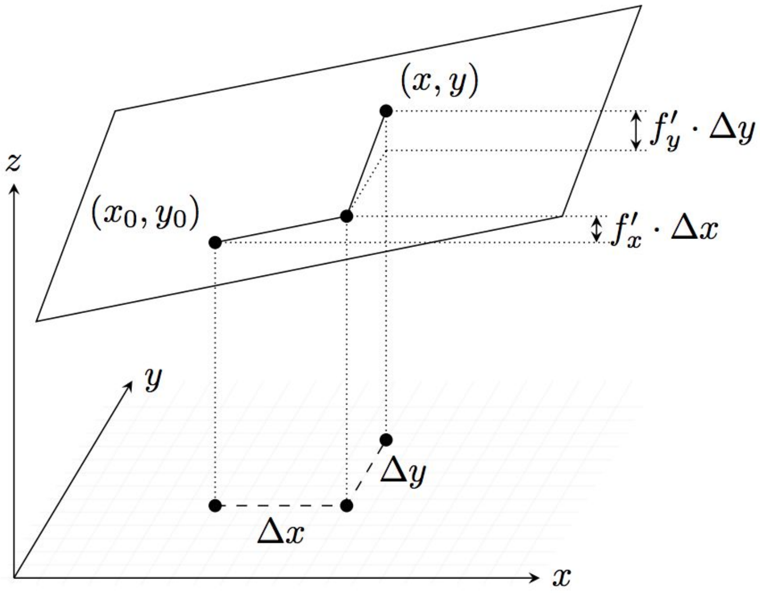
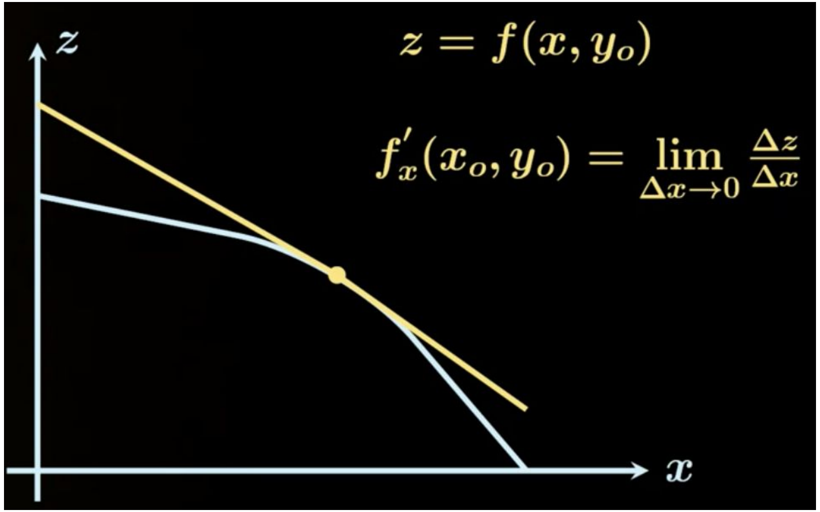


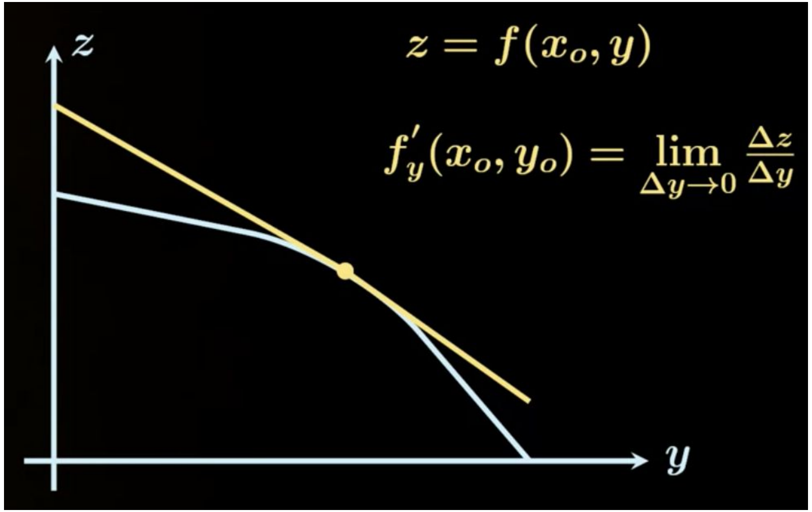
Рис. 1: Геометрический смысл частных производных.

Касательная плоскость

Таким образом, график функции $f(x, y)$ в окрестности точки можно приблизить касательной плоскостью:

$$f(x_0 + \Delta x, y_0 + \Delta y) \approx f(x_0, y_0) + f'_x(x_0, y_0)\Delta x + f'_y(x_0, y_0)\Delta y.$$





https://www.coursera.org/learn/mathematics-and-python

Градиент и линии уровня функции

Если f(x1, . . . , xn) — функция n переменных x1, ..., xn, то n-мерный вектор из частных производных:

$$\operatorname{grad} f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right)$$

!

называется **градиентом функции**.

!

Линией уровня функции называется множество точек, в которых функция принимает одно и то же фиксированное значение. Оказывается, что **градиент перпендикулярен линии уровня**.

Градиент в задачах оптимизации

Задачей оптимизации называется задача по нахождению экстремума функции, например минимума:

$$f(x_1, ..., x_n) \to \min$$

Такая задача часто встречается в приложениях, например при выборе оптимальных параметров рекламной компании, а также в задачах классификации.

Вспомним необходимые условия экстремума из прошлой лекции!

Градиент в задачах оптимизации

Но не всегда задачу можно решать аналитически. В таком случае используется численная оптимизация. Наиболее простым в реализации из всех методов численной оптимизации является метод градиентного спуска.

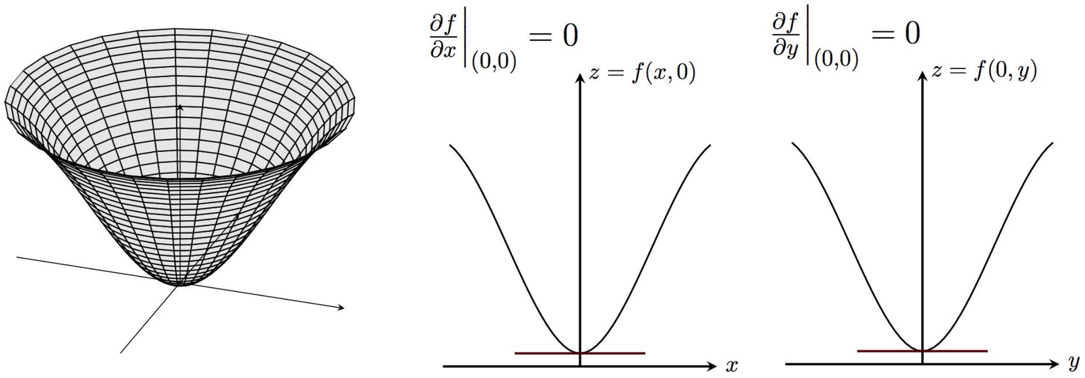


Рис. 2: Функция двух переменных достигает минимума в начале координат.

Градиентный спуск

Это итерационный метод. Решение задачи начинается с выбора начального приближения $\vec{x}^{[0]}$

После вычисляется приблизительное значение $\vec{x}^1$

Затем $\vec{x}^2$

и так далее…

!

$$\vec{x}^{[j+1]} = \vec{x}^{[j]} - \gamma^{[j]} \nabla F(\vec{x}^{[j]}), \qquad \text{где } \gamma^{[j]} \text{ — шаг градиентного спуска.}$$

Идея: идти в направлении наискорейшего спуска, а это направление задаётся антиградиентом $-\nabla F$.

https://www.coursera.org/learn/mathematics-and-python

Градиентный спуск

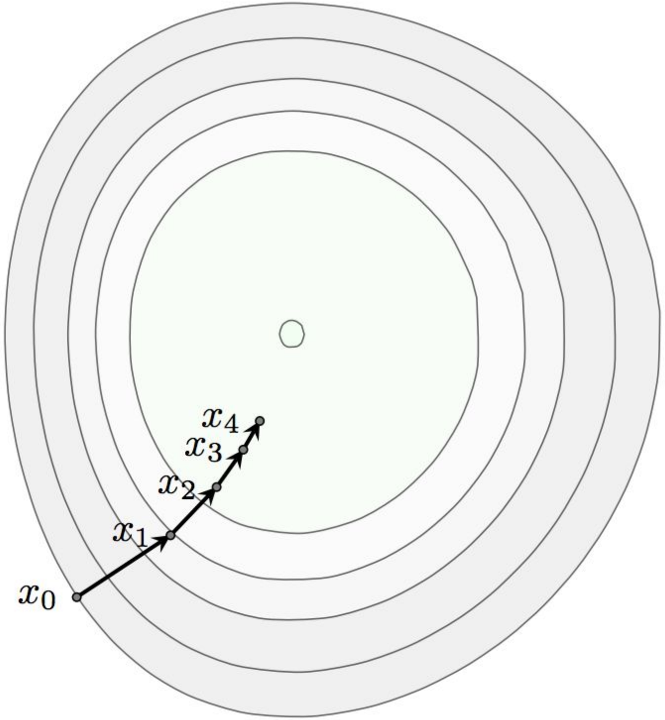


Рис. 3: Градиентный спуск

Аналогия: домик в низине

Если заблудились, то верным решением будет двигаться в направлении наискорейшего спуска

https://www.coursera.org/learn/mathematics-and-python

Спасибо за внимание!

НЕТОЛОГИЯ