بسم الله الرحمن الرحیم

یادگیری عمیق

مدرس: محمدرضا محمدی

زمستان ۱۴۰۱

الگوریتم‌های بهینه‌سازی

Optimization Algorithms

رویکرد ۳: حرکت در مسیر شیب

- تقریب مرتبه اول یک تابع یک‌بعدی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$f(x+\epsilon) = f(x) + \epsilon f'(x) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

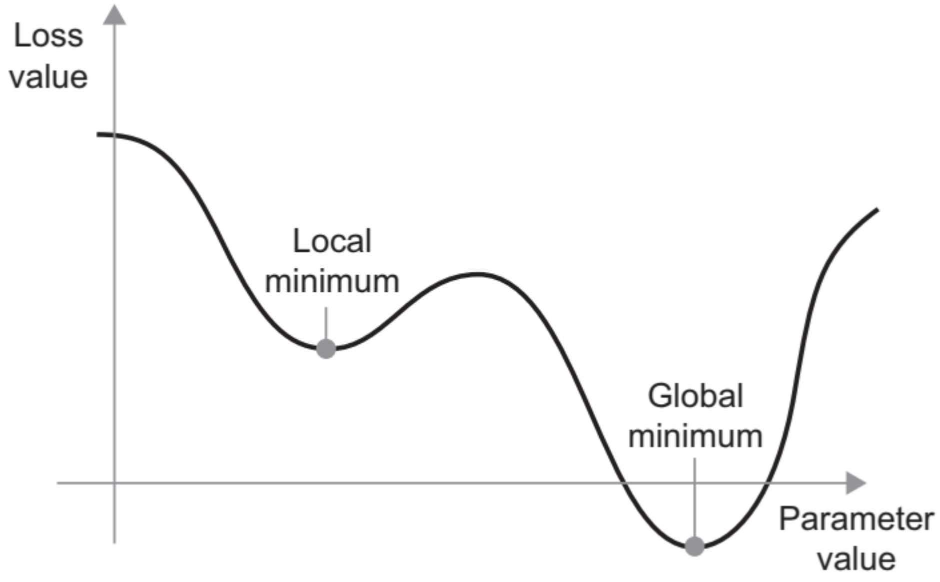
- اگر $\epsilon = -\eta f'(x)$ با $\eta > 0$ انتخاب شود

$$f\left(x - \eta f'(x)\right) = f(x) - \eta f'^2(x) + \mathcal{O}\left(\eta^2 f'^2(x)\right)$$

- اگر $f'(x) \neq 0$ باشد و η کوچک باشد:

$$f\left(x - \eta f'(x)\right) \lesssim f(x)$$

$$x \leftarrow x - \eta f'(x)$$

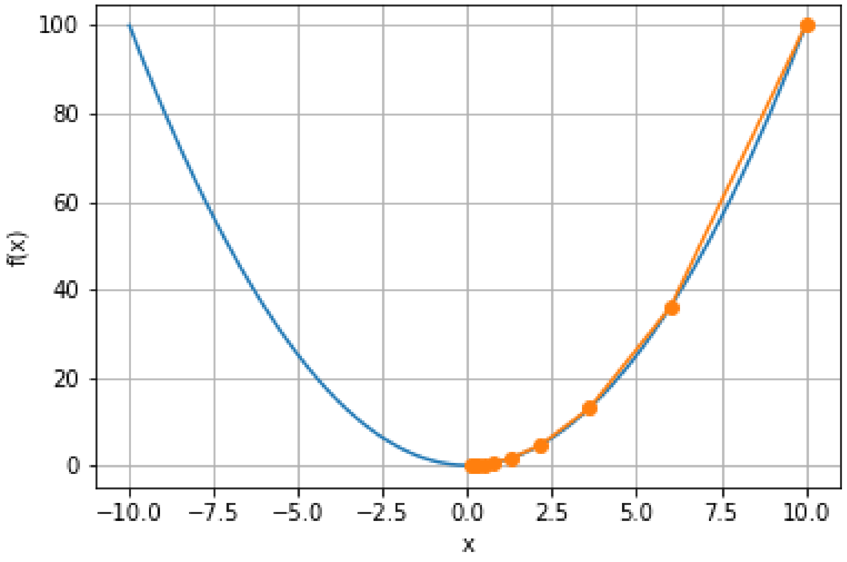


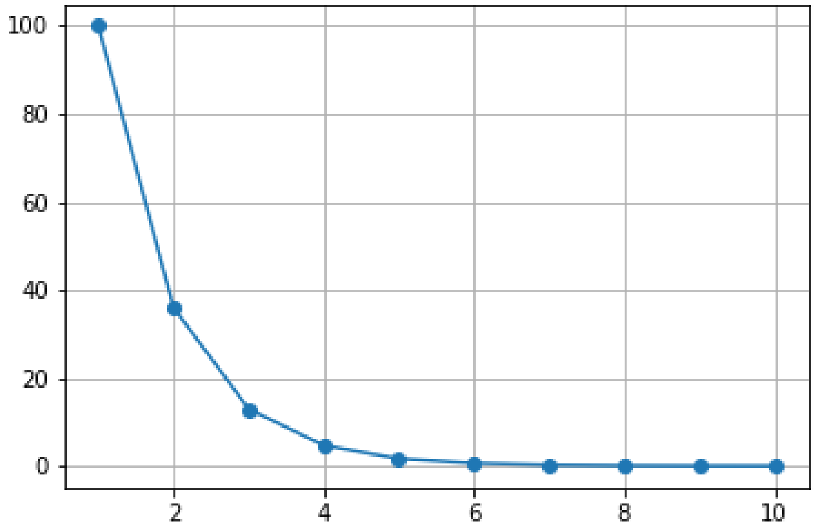
الگوریتم گرادیان کاهشی (Gradient Descent)

```
# Vanilla Gradient Descent

while True:
  weights_grad = evaluate_gradient(loss_fun, data, weights)
  weights += - step_size * weights_grad # perform parameter update
```

$\eta = 0.20$



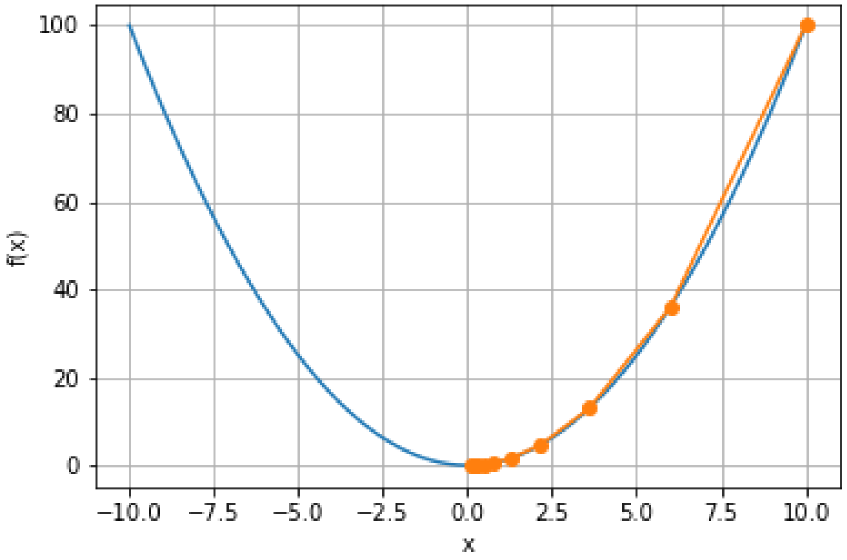


الگوریتم گرادیان کاهشی (Gradient Descent)

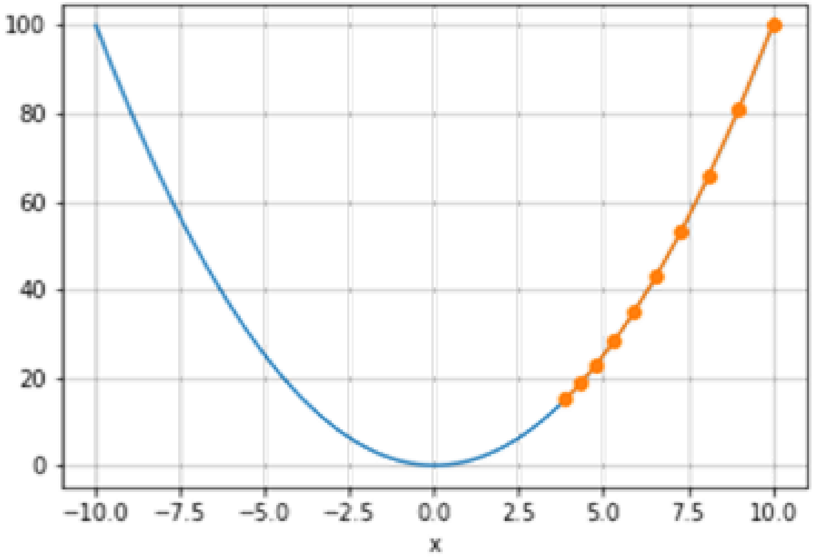
```
# Vanilla Gradient Descent

while True:
  weights_grad = evaluate_gradient(loss_fun, data, weights)
  weights += - step_size * weights_grad # perform parameter update
```

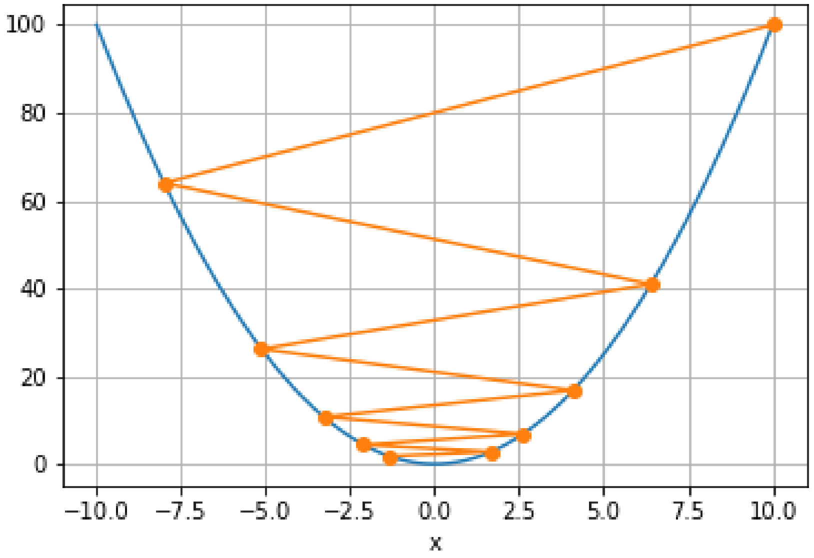
$\eta = 0.20$



$\eta = 0.05$

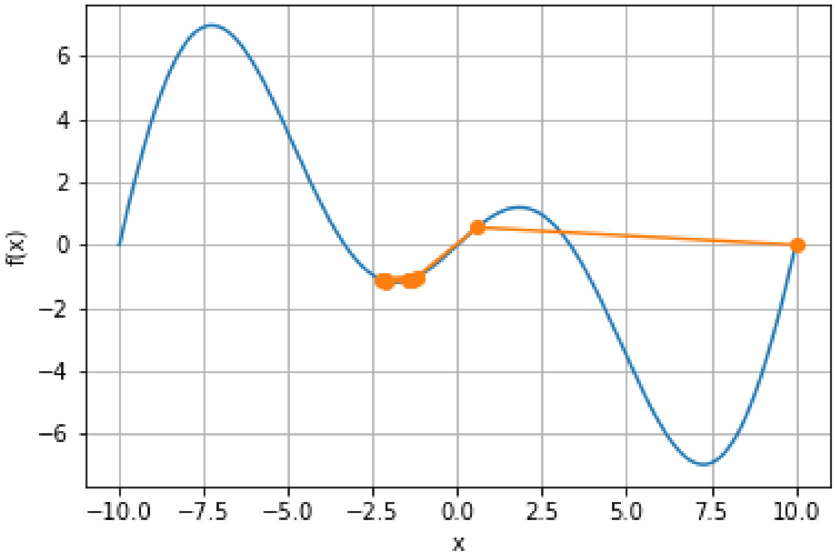


$\eta = 0.90$



الگوریتم گرادیان کاهشی (Gradient Descent)

- الگوریتم GD به سادگی ممکن است به بهینه محلّی همگرا شود



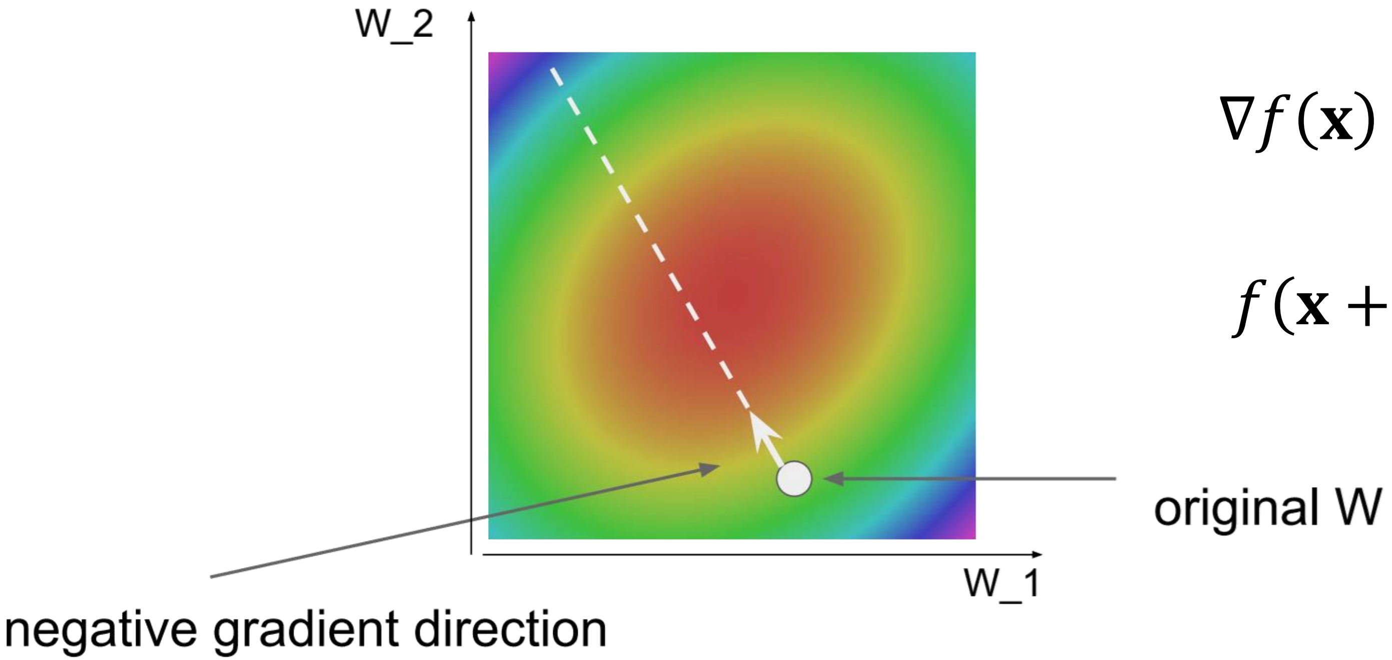
الگوریتم گرادیان کاهشی (Gradient Descent)

- در چند بعد، گرادیان تعریف می‌شود که برداری است شامل مشتق‌های جزئی در هر بُعد
- شیب در هر جهت دلخواه برابر است با ضرب داخلی جهت با بردار گرادیان
- جهت تندترین کاهش تابع برابر با منفی گرادیان است

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_d}\right]^{\mathrm{T}}$$

$$f(\mathbf{x}+\boldsymbol{\epsilon}) = f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\epsilon}^{\mathrm{T}}\nabla f(\mathbf{x}) + \mathcal{O}(\|\boldsymbol{\epsilon}\|^2)$$

$$\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} - \eta \nabla f(\mathbf{x})$$



روش‌های وفقی

- انتخاب مقدار درست برای نرخ آموزش η بسیار مهم و البته مشکل است
  - آیا می‌توان η را به صورت خودکار انتخاب کرد یا اصلا به آن نیاز نداشت؟
- می‌توان از انحنای منحنی (curvature) هم استفاده کرد
- روش نیوتن: در بسط تیلور از مرتبه دوم هم استفاده کنیم

$$f(\mathbf{x}+\boldsymbol{\epsilon}) = f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\epsilon}^{\mathrm{T}}\nabla f(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\boldsymbol{\epsilon}^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\mathbf{x})\boldsymbol{\epsilon} + \mathcal{O}(\|\boldsymbol{\epsilon}\|^3)$$

- ماتریس Hessian تابع f با ابعاد $d \times d$ به صورت $H \triangleq \nabla^2 f(\mathbf{x})$ نمایش داده می‌شود
  - برای dهای بزرگ از لحاظ مصرف حافظه و محاسبات سنگین خواهد بود
- تقریب مرتبه ۲ دارای یک بهینه سراسری و قابل محاسبه است

روش نیوتن

$$f(\mathbf{x}+\boldsymbol{\epsilon}) = f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\epsilon}^{\mathrm{T}}\nabla f(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\boldsymbol{\epsilon}^{\mathrm{T}}\mathbf{H}\boldsymbol{\epsilon} + \mathcal{O}(\|\boldsymbol{\epsilon}\|^3)$$

- برای یافتن مقدار بهینه این تابع تقریبی، می‌توان مشتق آن نسبت به $\boldsymbol{\epsilon}$ را برابر با صفر قرار داد

$$\nabla f(\mathbf{x}) + \mathbf{H}\boldsymbol{\epsilon} = 0 \quad \Rightarrow \boldsymbol{\epsilon} = -\mathbf{H}^{-1}\nabla f(\mathbf{x})$$

- بجای نرخ آموزش از معکوس ماتریس Hessian استفاده شده است
- مثال:

$$f(x) = x^2 - 2x + 3 \quad \Rightarrow f'(x) = 2x - 2 \quad \Rightarrow f''(x) = 2$$

$$x_0 = 12 \quad \Rightarrow x \leftarrow x + \epsilon = 12 - \frac{1}{2} \times 22 = 1$$

- در این مثال خاص در یک تکرار از هر نقطه شروعی به جواب بهینه می‌رسد

گرادیان کاهشی تصادفی (SGD)

- در یادگیری عمیق، تابع هدف به طور معمول میانگین تابع ضرر برای تمام نمونه‌های مجموعه داده آموزشی است

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f_i(\mathbf{x}) \Rightarrow \nabla f(\mathbf{x}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\mathbf{x})$$

- این محاسبات به صورت خطی با بزرگ شدن مجموعه داده افزایش می‌یابد
- در روش SGD، در هر تکرار گرادیان تنها برای یک نمونه محاسبه می‌شود

$$\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} - \eta \nabla f_i(\mathbf{x})$$

- هزینه هر گام به مقدار ثابت $\mathcal{O}(1)$ می‌رسد
- گرادیان تصادفی $\nabla f_i(\mathbf{x})$ یک تخمین بدون بایاس از $\nabla f(\mathbf{x})$ است

$$\mathbb{E}_i[\nabla f_i(\mathbf{x})] = \nabla f(\mathbf{x})$$

گرادیان کاهشی تصادفی (SGD)

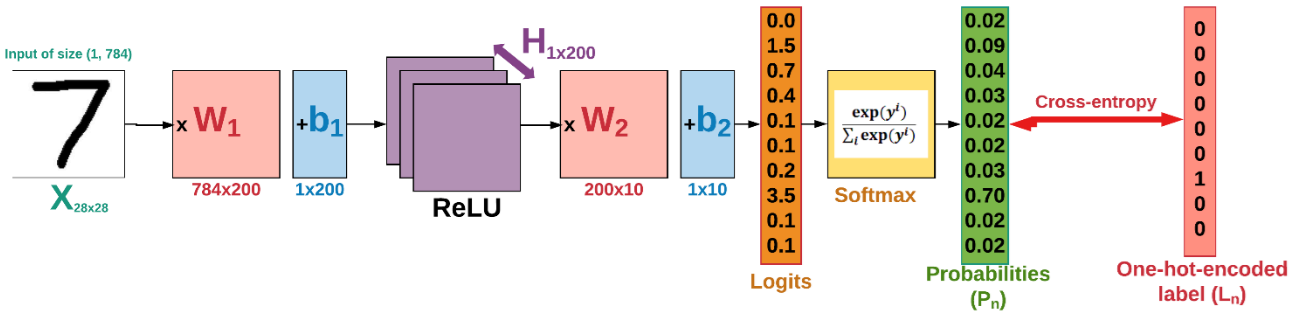
- بجای ۱ نمونه، می‌توان $\nabla f(\mathbf{x})$ آن را با استفاده از یک minibatch از نمونه‌ها تقریب زد
  - ۳۲/۶۴/۱۲۸ متداول هستند

```
# Vanilla Minibatch Gradient Descent

while True:
  data_batch = sample_training_data(data, 256) # sample 256 examples
  weights_grad = evaluate_gradient(loss_fun, data_batch, weights)
  weights += - step_size * weights_grad # perform parameter update
```

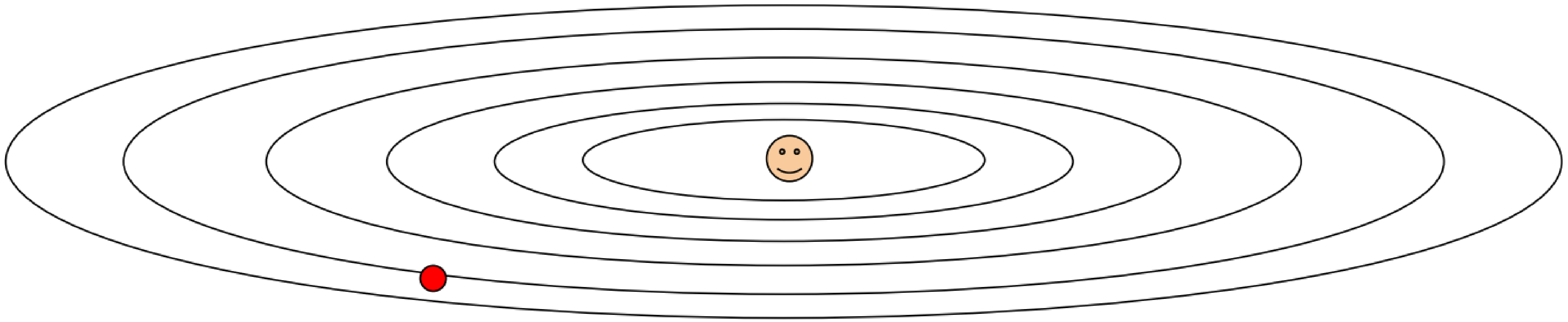
چرخه آموزش

- این تنظیم تدریجی، که آموزش نیز نامیده می شود، پایه یادگیری در بسیاری از الگوریتم‌های یادگیری ماشین است
  - یک batch از نمونه‌های آموزشی x و خروجی‌های مربوطه y انتخاب می‌شود
  - شبکه بر روی x اعمال می‌شود (forward pass) تا $\hat{y}$ بدست بیاید
  - تابع ضرر شبکه برای این batch از مقایسه y و $\hat{y}$ محاسبه می‌شود
  - تمام وزن‌های شبکه به گونه‌ای به روز می‌شوند که مقدار ضرر برای این batch کمی کاهش بیابد



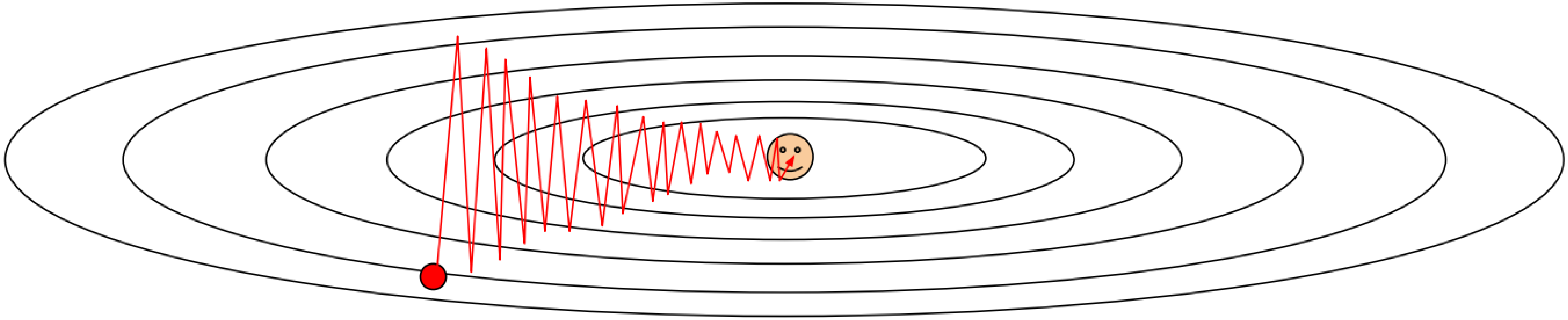
مشکلات SGD

- اگر تابع ضرر در یک راستا تغییرات بسیار سریعتری نسبت به یک راستای دیگر داشته باشد چه می‌شود؟
- الگوریتم GD چگونه عمل می‌کند؟ اندازه گام چه مقدار باشد؟



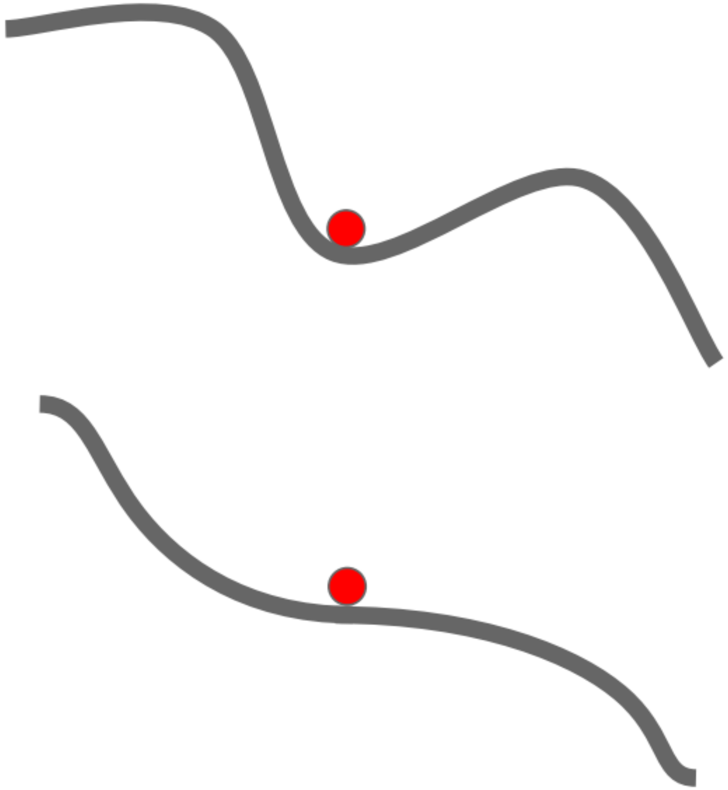
مشکلات SGD

- اگر تابع ضرر در یک راستا تغییرات بسیار سریعتری نسبت به یک راستای دیگر داشته باشد چه می‌شود؟
- الگوریتم GD چگونه عمل می‌کند؟
  - در یک راستا خیلی آهسته پیش می‌رود و در یک راستای دیگر نوسان می‌کند
  - اندازه گام چه مقدار باشد؟



مشکلات SGD

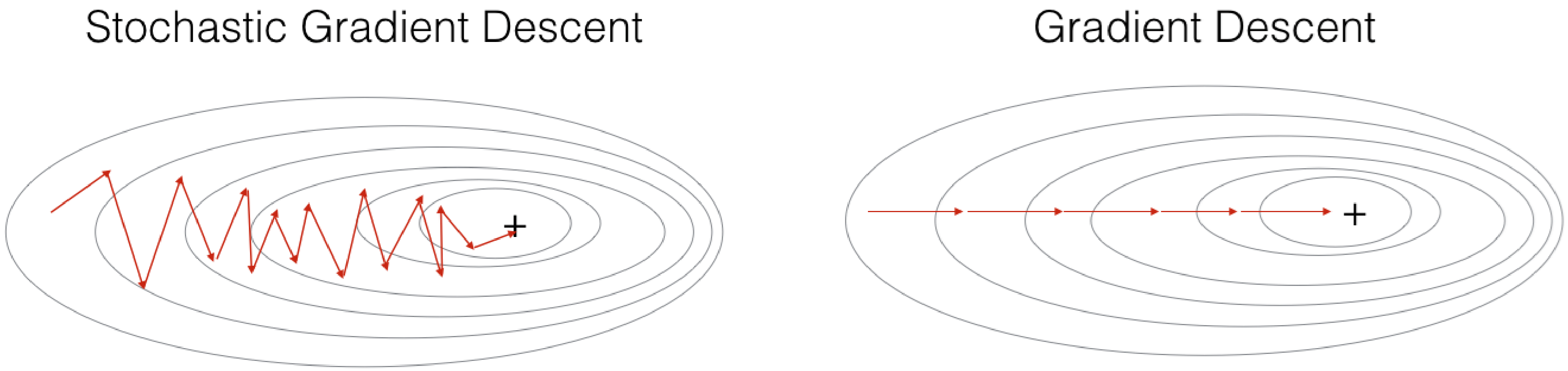
- اگر تابع ضرر دارای مینیمم محلی یا نقطه زینی باشد؟
- گرادیان صفر باعث توقف GD می‌شود
  - این مشکل در SGD کمتر است زیرا بعید است گرادیان یک نقطه در تمام minibatchها صفر باشد



مشکلات SGD

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \nabla f_i(\mathbf{x})$$

- گرادیان‌ها از minibatchها محاسبه می‌شوند و می‌توانند نویزی باشند!
- با وجود نویزی بودن گرادیان‌ها، به طور میانگین در مسیر درستی حرکت می‌کنند



SGD + Momentum

- تابع ضرر می‌تواند مشابه با ارتفاع یک زمینه تپه‌ای در نظر گرفته شود
- مقداردهی اولیه تصادفی برای پارامترها معادل با قرار دادن یک توپ با سرعت اولیه صفر در یک مکان است
- فرآیند بهینه‌سازی می‌تواند معادل با حرکت توپ به سمت عمیق‌ترین نقطه این زمین در اثر جاذبه مدل‌سازی شود

SGD + Momentum

SGD

$$x_{t+1} = x_t - \alpha \nabla f(x_t)$$

```
while True:
  dx = compute_gradient(x)
  x -= learning_rate * dx
```

SGD + Momentum

$$v_{t+1} = \rho v_t + \nabla f(x_t)$$
$$x_{t+1} = x_t - \alpha v_{t+1}$$

```
vx = 0
while True:
  dx = compute_gradient(x)
  vx = rho * vx + dx
  x -= learning_rate * vx
```

- با معادل فرض کردن گرادیان با شتاب، "سرعت" محاسبه می‌شود
- پارامتر ρ اصطکاک را شبیه‌سازی می‌کند
  - به طور معمول ۰.۹ یا ۰.۹۹ است
- یک پیاده‌سازی معادل هم به صورت روبرو است

$$v_{t+1} = \rho v_t - \alpha \nabla f(x_t)$$
$$x_{t+1} = x_t + v_{t+1}$$