Второе задание по методам оптимизации

Иван Ермаков

3

Логистическая регрессия

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\{ f(x) = \frac{1}{m} \left\langle \ln\left[1 + \exp\left(-b \odot (Ax)\right)\right], 1_m \right\rangle + \frac{\lambda}{2} \|x\|^2 \right\}$$
 (1)

Здесь b — вектор из b_i, A^T — матрица $m \times n$, в которой строки являются векторами a_i .

$$D f(x) = \lambda x - \frac{A^T}{m} \left(b \odot \frac{\exp\left(-b \odot (Ax)\right)}{1 + \exp\left(-b \odot (Ax)\right)} \right) = \lambda x - \frac{A^T}{m} \left(b \odot u \left[-b \odot (Ax)\right] \right)$$

$$u(y) = \frac{e^y}{1 + e^y} = \frac{1}{1 + e^{-y}}$$
(2)

Здесь использовано много свойств произведения Адамара.

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}y} = \frac{e^y(1+e^y) - e^{2y}}{(1+e^y)^2} = \frac{e^y}{(1+e^y)^2}$$
(3)

$$D^{2} f[dx] = \lambda dx + \frac{A^{T}}{m} \left(b \odot \frac{e^{y}}{(1 + e^{y})^{2}} \odot b \odot (Adx) \right)$$

$$\tag{4}$$

$$D^{2} f = \lambda + \frac{A^{T}}{m} \left\{ \left[\left(b \odot b \odot \frac{e^{y}}{(1 + e^{y})^{2}} [-b \odot (Ax)] \right) 1_{n}^{T} \right] \odot A \right\}$$
 (5)

Потратив еще немного времени, можно понять, что это выражение можно переписать как

$$D^{2} f = \lambda + \frac{1}{m} \cdot A^{T} \operatorname{diag} \{ b \odot b \odot v(-b \odot (Ax)) \} A$$
(6)

где

$$v(y) = \frac{e^y}{(1 + e^y)^2} \tag{7}$$

1 Эксперимент: траектория градиентного спуска

Построение графиков выполнено при помощи скрипта "gradplots/trajectory.py". Для хорошо обусловленной матрицы поиск останавливается за 109000 шагов, а для плохо обусловленной за 69000. Скорее всего так происходит из-за того, что в хорошо обсусловленной матрице метод постоянно проскакивает оптимальную точку из-за высокой требуемой точности.

Теперь все встало на свои места: для хорошо обусловленной матрицы метод сходится всего за 18 шагов. Для плохо обусловленной требуется 327 шагов. Видно, что в первом случае довольно быстро тракетория становится прямой, а во втором случае она все время колеблется вокруг оптимального пути и совершает больше шагов, чем нужно.

Для условия Вольфа ситуация аналогичная первому случаю: для хорошо обусловленной матрицы метод работает "слишком хорошо" и проскакивает точку экстремума. Метод сходится за 18 шагов. Для плохо обусловленной матрицы требуется всего 4 шага. Понятно, что в общем случае для хорошо обусловленой матрицы метод Вольфа тоже работает хорошо, и некоторое O(1) количество операций в конце, связанное с проскакиванием, роли не играет.

При этом, конечно, чем ближе прямая градиента к оптимальной точке, тем быстрее будут работать все методы, потому что траектория будет ближе к прямой.

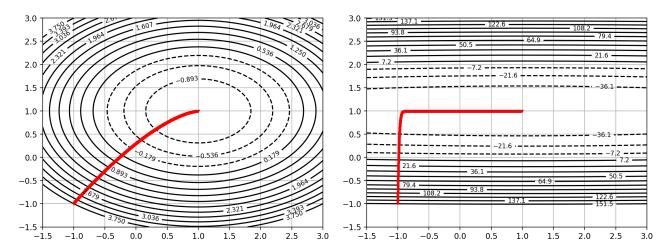


Рис. 1: Постоянный шаг, хорошо обусловленная мат- Рис. 2: Постоянный шаг, плохо обусловленная матрица.

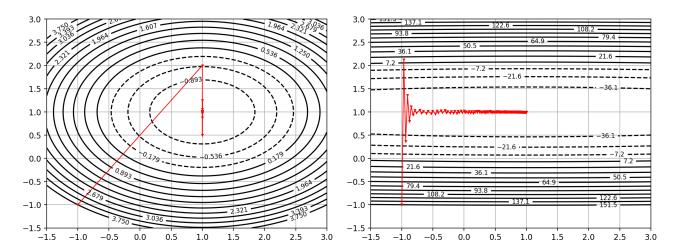


Рис. 3: Условие Армихо, хорошо обусловленная мат- Рис. 4: Условие Армихо, плохо обусловленная матририца. ца.

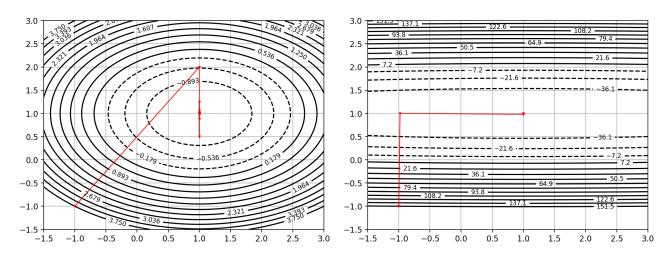


Рис. 5: Условие Вольфа, хорошо обусловленная мат- Рис. 6: Условие Вольфа, плохо обусловленная матририца.

ца.