

Metodi di ottimizzazione matematica

Vincenzo Bonifaci

IN550 – Machine Learning

Ottimizzazione matematica

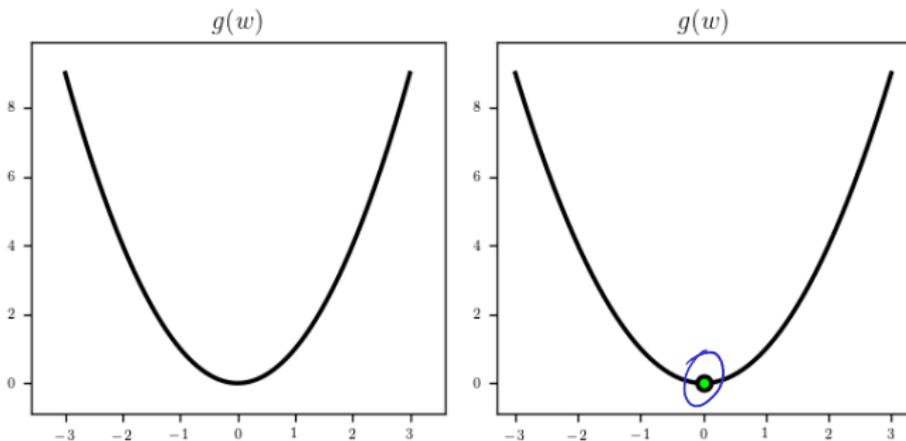
Problema di minimizzazione: minimize _{$w \in \mathbb{R}^N$} $g(w)$

Input: Una funzione $g : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$

Output: $w^* \in \mathbb{R}^N$ tale che $g(w^*) \leq g(w)$ per ogni $w \in \mathbb{R}^N$

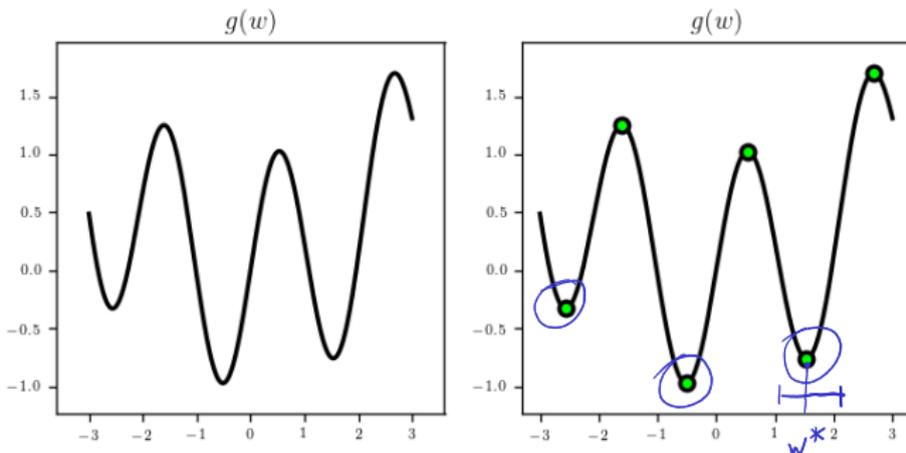
w^* è un *minimo globale* della funzione g

Minimi globali



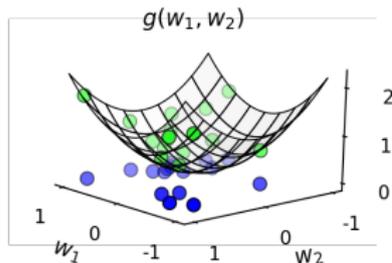
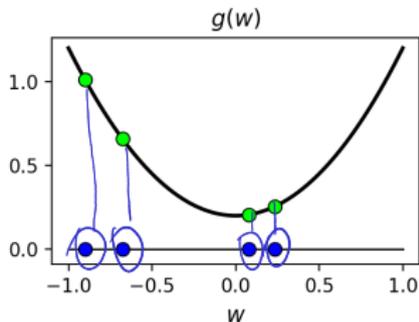
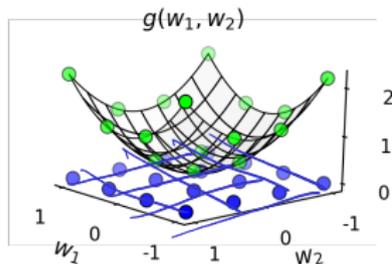
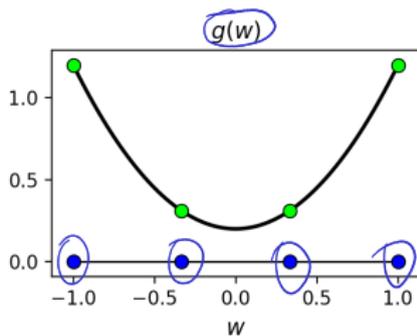
$w^* \in \mathbb{R}^N$ tale che $g(w^*) \leq g(w)$ per ogni w in \mathbb{R}^N

Minimi locali

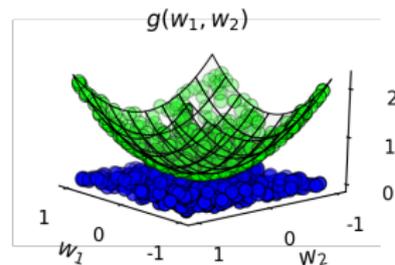
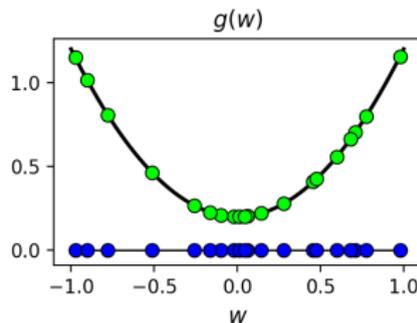
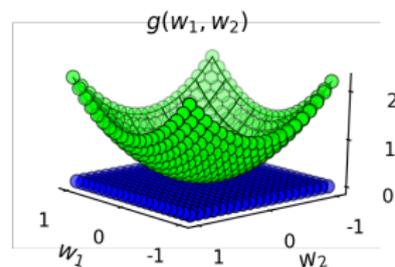
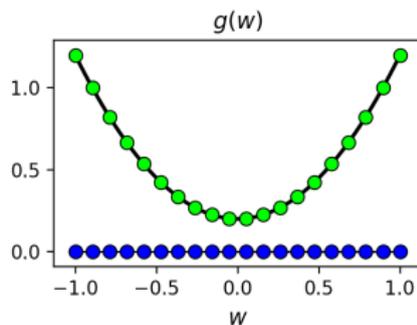


$w^* \in \mathbb{R}^N$ tale che $g(w^*) \leq g(w)$ per ogni w in un intorno di w^*

Due semplici metodi di approssimazione

 \mathbb{R}^1


Due semplici metodi di approssimazione

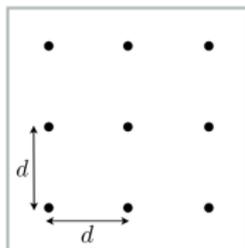


La maledizione della multidimensionalità

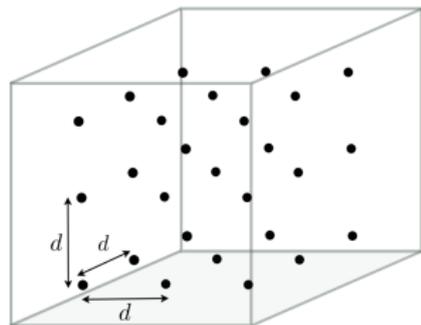
Se lato
 $= O(1)$




Numero di punti
 è $O(1/d)$

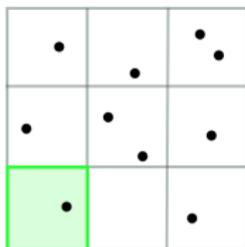
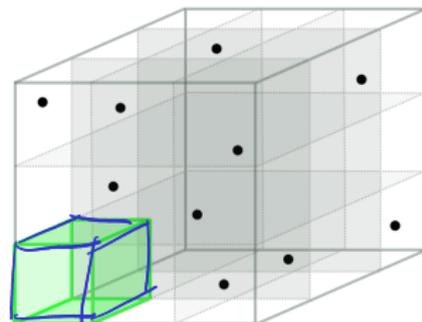


$O(1/d^2)$

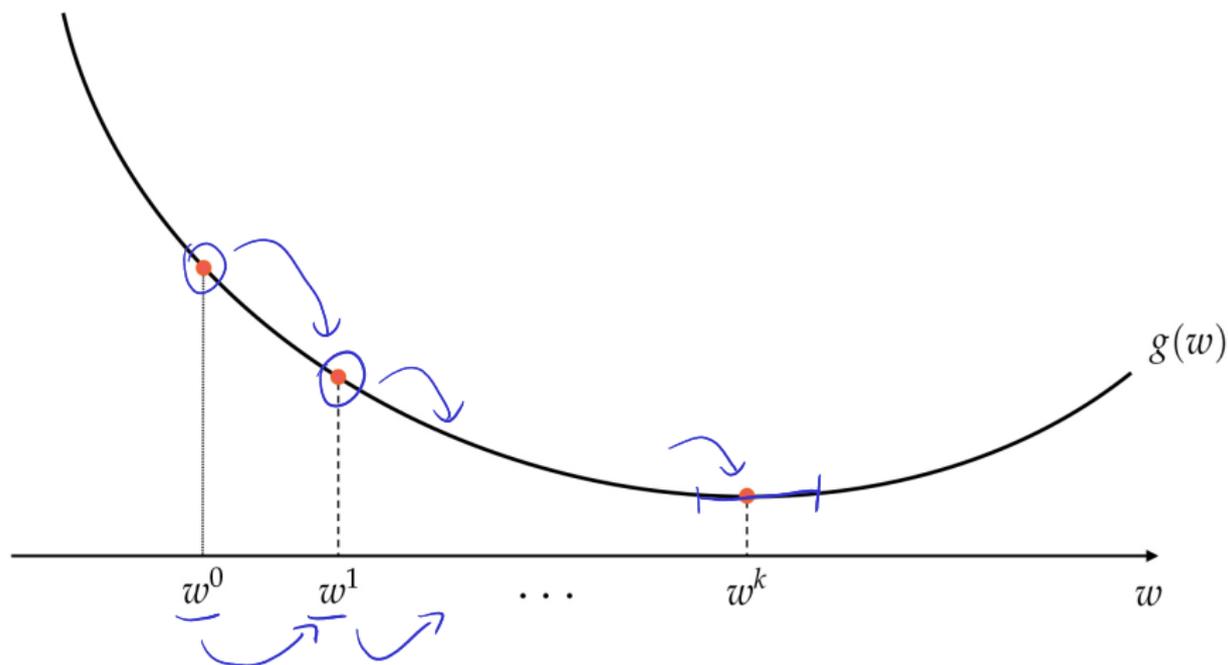


$O(1/d^N)$

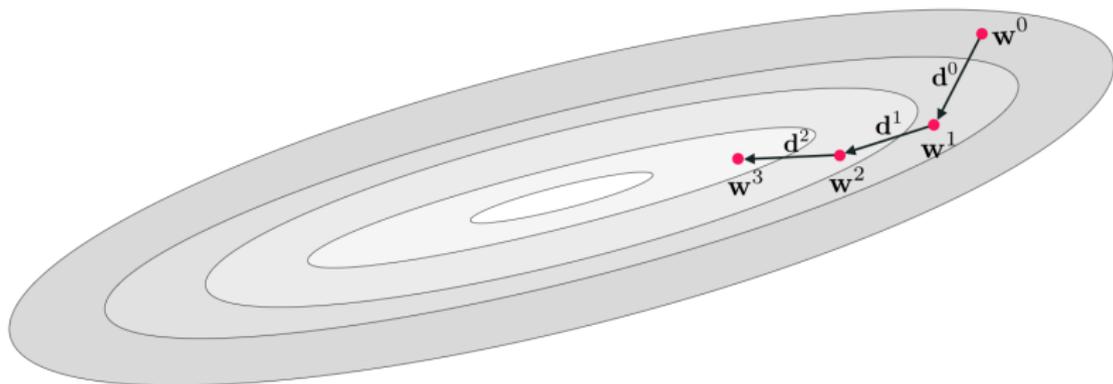
La maledizione della multidimensionalità


 $3/10$

 $1/10$

 $0/10$

Metodi di ricerca locale



Metodi di ricerca locale

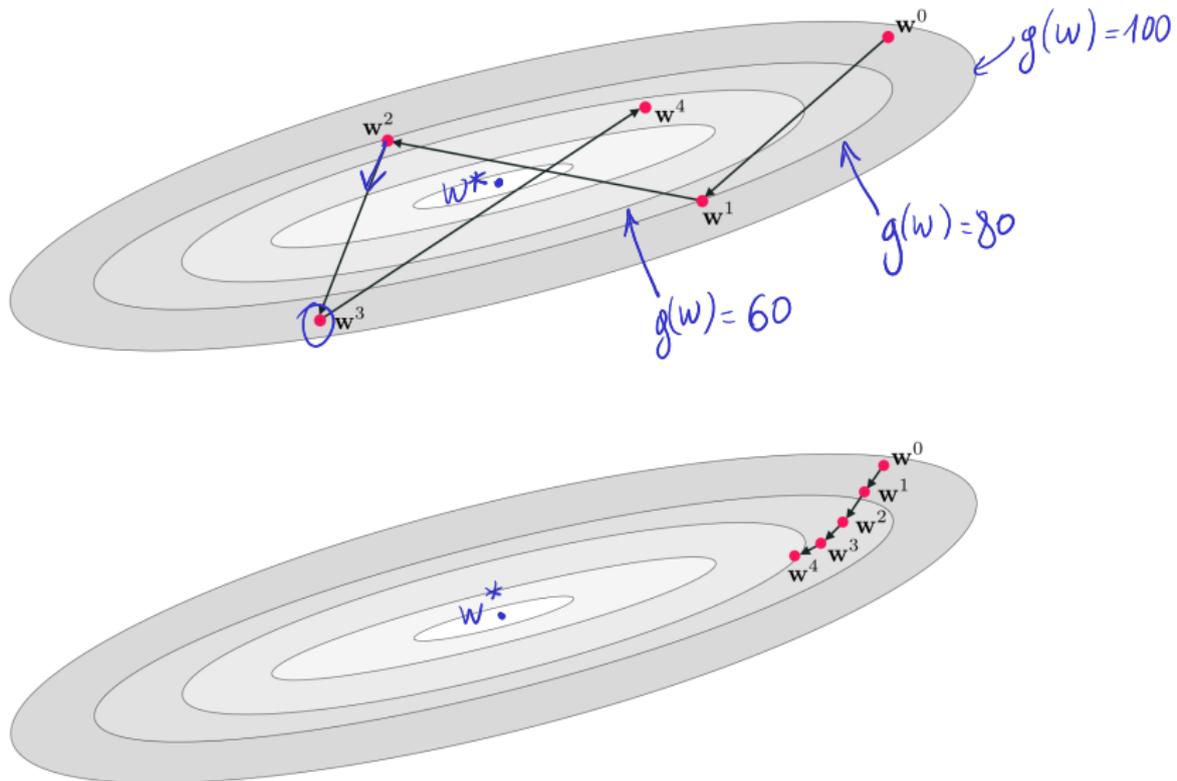


$$w^{(t+1)} = w^{(t)} + d^{(t)}$$

Una condizione desiderabile (**non sempre** soddisfatta) è che

$$g(w^{(0)}) > g(w^{(1)}) > g(w^{(2)}) > \dots > g(w^{(t)}) > \dots$$

Lunghezza del passo



Direzione di discesa e passo

Per controllare la lunghezza del passo possiamo porre, più in generale,

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} + \eta d^{(t)}$$

- $d^{(t)}$ è la *direzione di discesa* all'iterazione t
- $\eta > 0$ è il *parametro del passo* (*tasso di apprendimento* nel ML)

Poiché

$$\|w^{(t+1)} - w^{(t)}\| = \|\eta d^{(t)}\| = \eta \|d^{(t)}\|$$

la lunghezza del passo è direttamente proporzionale a η

Esempio di algoritmo di discesa: Randomized Local Search

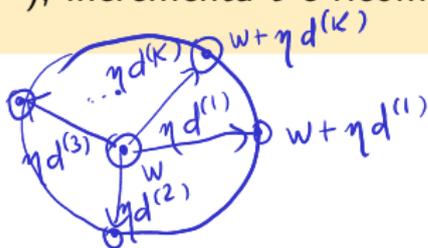
"Scatola
nera"

$$w \rightarrow \boxed{g(\cdot)} \rightarrow g(w)$$

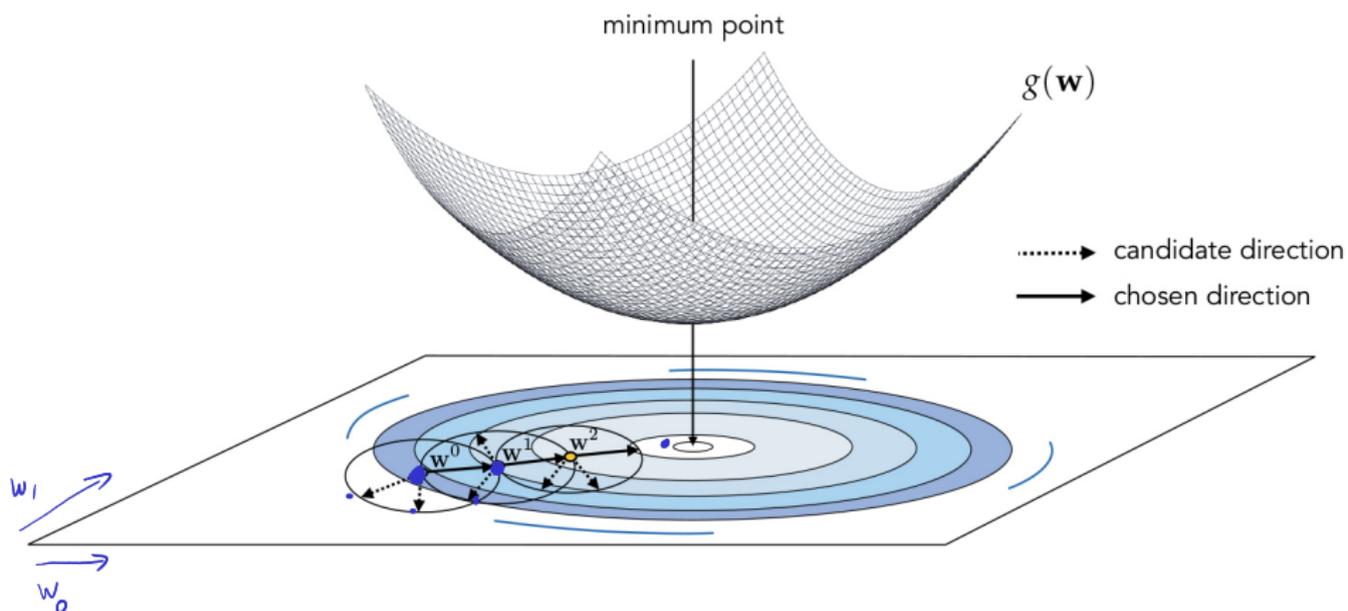
Randomized Local Search

Input: Funzione g , punto iniziale $w^{(1)}$ **Inizializzazione:** $t = 1$

- 1 Genera K direzioni casuali $\{d^{(k)}\}_{k=1}^K$
- 2 Valuta $g(w^{(t)} + \eta d^{(k)})$ per $k = 1, \dots, K$
- 3 Poni $w^{(t+1)} = w^{(t)} + \eta d^{(k)}$, dove k è l'indice corrispondente al valore più basso osservato
- 4 Se $g(w^{(t+1)}) < g(w^{(t)})$, incrementa t e ricomincia



Esempio



Metodi di ordine 0, 1, 2, ...

Randomized Local Search è un esempio di **metodo di ordine 0**

Un *metodo di ordine 0* utilizza solo i valori della funzione g

Un *metodo di ordine 1* utilizza, in più, i valori delle derivate prime di g

Un *metodo di ordine 2* utilizza, in più, i valori delle derivate seconde di g

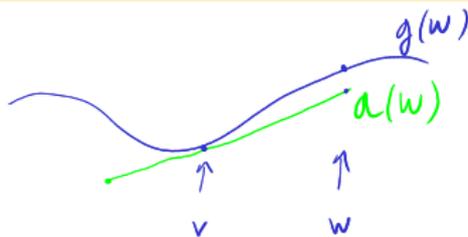
Approssimazioni di Taylor: Caso univariato ($N = 1$)

Approssimazione di ordine 1

$$a(w) = g(v) + g'(v)(w - v)$$

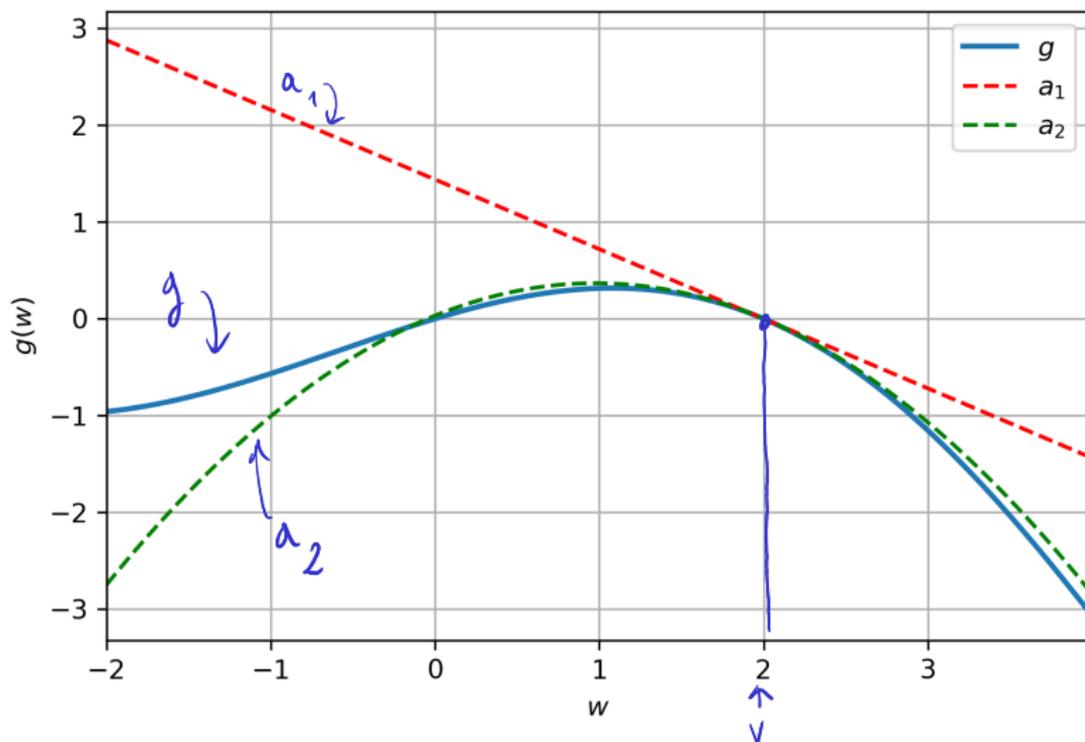
Approssimazione di ordine 2

$$a(w) = g(v) + g'(v)(w - v) + \frac{1}{2}g''(v)(w - v)^2$$



Esempio

$$g(w) = (w + 8)(w + 4)w(w - 2)(w - 8)/1000, \quad v = 2$$



Gradiente ed Hessiano

Gradiente di g nel punto v

$$\nabla_w g(v) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} \frac{\partial g}{\partial w_1}(v) \\ \frac{\partial g}{\partial w_2}(v) \\ \dots \\ \frac{\partial g}{\partial w_N}(v) \end{bmatrix}$$

$\frac{\partial^2 g}{\partial w_i \partial w_j}(v)$

Hessiano di g nel punto v

colonna j

riga i →

$$\nabla_w^2 g(v) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 g}{\partial w_1^2}(v) & \frac{\partial^2 g}{\partial w_1 \partial w_2}(v) & \dots & \frac{\partial^2 g}{\partial w_1 \partial w_N}(v) \\ \frac{\partial^2 g}{\partial w_2 \partial w_1}(v) & \frac{\partial^2 g}{\partial w_2^2}(v) & \dots & \frac{\partial^2 g}{\partial w_2 \partial w_N}(v) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 g}{\partial w_N \partial w_1}(v) & \frac{\partial^2 g}{\partial w_N \partial w_2}(v) & \dots & \frac{\partial^2 g}{\partial w_N^2}(v) \end{bmatrix}$$

Abbreviati in $\nabla g(v)$, $\nabla^2 g(v)$ se le variabili w sono chiare dal contesto

Approssimazioni di Taylor: Caso generale ($N \geq 1$)

Approssimazione di ordine 1

$$a(w) = \underbrace{g(v)}_{1 \times 1} + \underbrace{\nabla g(v)^T}_{1 \times N} \underbrace{(w - v)}_{N \times 1}$$

$g'(v)$

Approssimazione di ordine 2

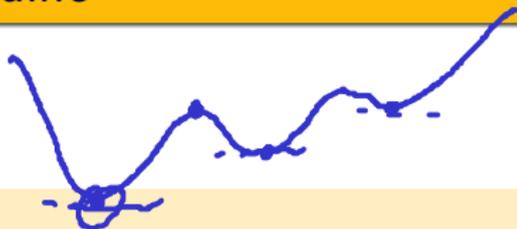
$$a(w) = \underbrace{g(v)}_{1 \times 1} + \underbrace{\nabla g(v)^T}_{1 \times N} \underbrace{(w - v)}_{N \times 1} + \frac{1}{2} \underbrace{(w - v)^T}_{1 \times N} \underbrace{\nabla^2 g(v)}_{N \times N} \underbrace{(w - v)}_{N \times 1}$$

$g''(v)$

$\nabla g(v)$ è il *gradiente* di g (vettore delle derivate prime) in v

$\nabla^2 g(v)$ è l'*Hessiano* di g (matrice delle derivate seconde) in v

Condizione di ottimalità al prim'ordine



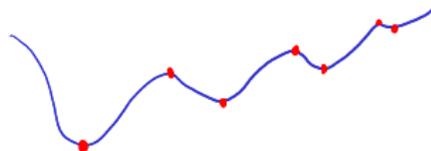
$$\nabla g(v) = 0$$

è una condizione **necessaria** affinché v sia un minimo globale di g

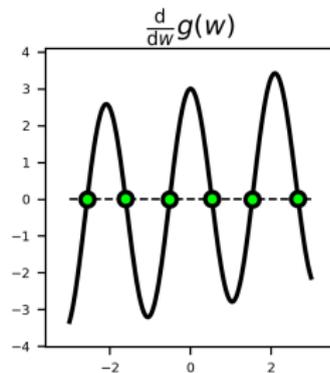
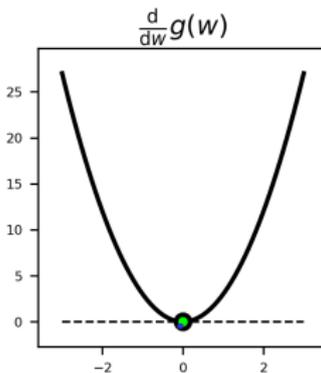
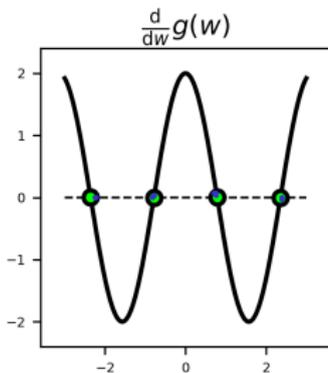
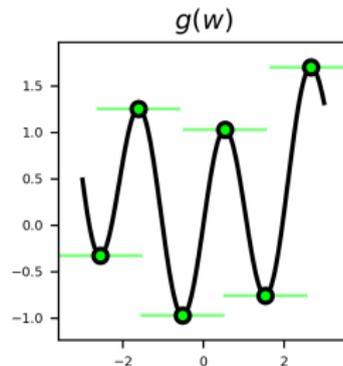
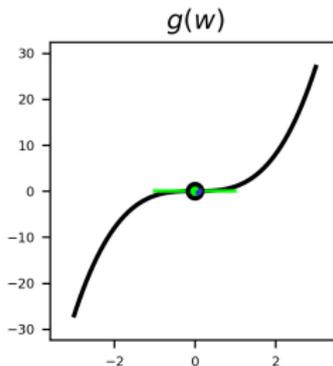
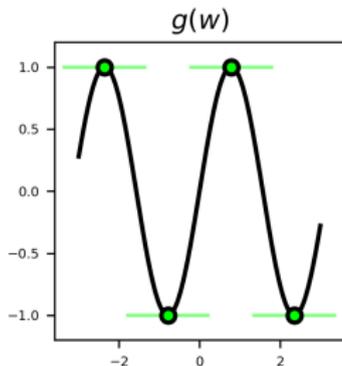
Non è (in generale) sufficiente: identifica solo i *punti critici* di g :

- minimi/massimi locali
- punti di sella

Anche detti *punti stazionari* della funzione

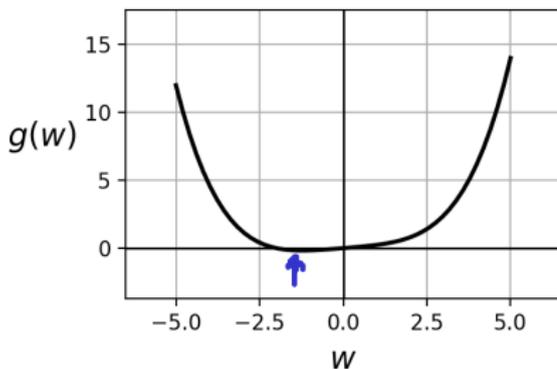


Punti critici: Esempi

 $\frac{d}{dw}$


Un esempio non banale

$$g(w) = \frac{1}{50}(w^4 + w^2 + 10w)$$



$$g'(w) = \frac{1}{50}(4w^3 + 2w + 10)$$

$$g'(w) = 0 \Leftrightarrow 4w^3 + 2w + 10 = 0$$

Richiede di risolvere
un'equaz. di 3° grado

Un altro esempio $(w \in \mathbb{R}^N \text{ con } N \geq 1)$

$$\frac{\partial}{\partial w_j} g(w) = b_j + 2(Cw)_j \quad \rightarrow \quad \nabla g = b + 2Cw$$

$$g(w) = a + \underbrace{b^T w}_{\text{lineare in } w} + \underbrace{w^T C w}_{\text{quadratica in } w}$$

con $a \in \mathbb{R}$, $b \in \mathbb{R}^N$, $C \in \mathbb{R}^{N \times N}$ (C simmetrica)

$$\nabla g(w) = 0 \Leftrightarrow Cw = -\frac{1}{2}b$$

Es. $b=0$

$$C = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$$

$$w = \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow w^T C w = 2w_0^2 + w_0 w_1 + w_1 w_0 + 3w_1^2$$

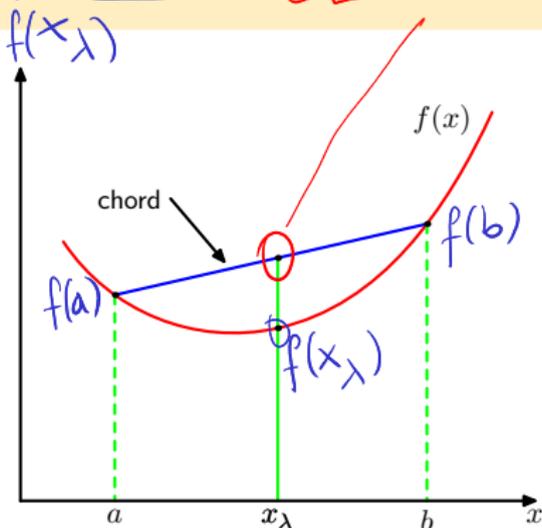
$$\frac{\partial g}{\partial w_0} = 4w_0 + 2w_1 = 2 \begin{pmatrix} 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \end{pmatrix}$$

Funzioni convesse

Funzione convessa (definizione di ordine 0)

Una funzione $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ è **convessa** se per ogni $\lambda \in [0, 1]$, $a, b \in \mathbb{R}^N$,

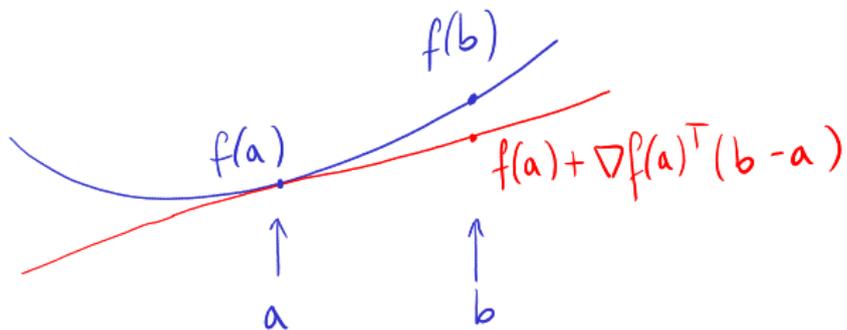
$$f(\lambda a + (1 - \lambda)b) \leq \lambda f(a) + (1 - \lambda)f(b)$$



Funzioni convesse: definizione alternativa (ordine 1)

Se f è differenziabile, f è convessa se e solo se

$$f(b) \geq f(a) + \nabla f(a)^T (b - a) \quad \text{per ogni } a, b \in \mathbb{R}^N$$



Funzioni convesse: definizione alternativa (ordine 2)

Se f è due volte differenziabile, f è convessa se e solo se

Hessiano in $x \rightsquigarrow \nabla^2 f(x)$

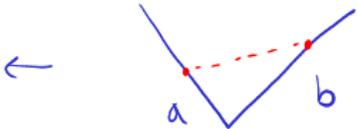
ha tutti gli **autovalori** non-negativi, per ogni $x \in \mathbb{R}^N$

λ è un autovalore di A

se esiste vettore v : $Av = \lambda v$
(autovettore)

Funzioni convesse vs. non convesse: Esempi

Esempi con $N = 1$:

- $g(w) = w^3$ $g''(w) = 6w \not\geq 0$
 non è convessa
- $g(w) = e^w$ $g''(w) = e^w > 0$
 è convessa
- $g(w) = \sin(w)$ $g''(w) = -\sin(w) \not\geq 0$
 non è convessa
- $g(w) = w^2$ $g''(w) = 2 > 0$
 è convessa
- $g(w) = |w|$ ← 
 è convessa

$$\begin{aligned}
 |\lambda a + (1-\lambda)b| &\leq \\
 &\leq |\lambda a| + |(1-\lambda)b| \\
 &= \lambda |a| + (1-\lambda) |b|
 \end{aligned}$$

Funzioni convesse vs. non convesse: Esempi

Esempi con $N > 1$:

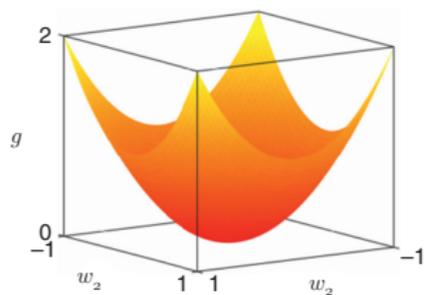
$$g(w) = \frac{1}{2}w^\top Qw + r^\top w + b$$

con Q simmetrica

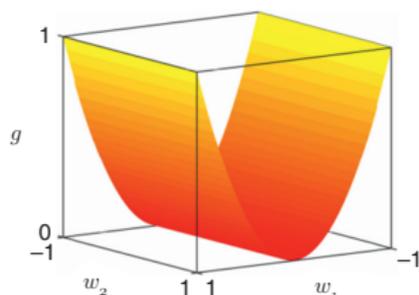
$$\nabla^2 g(w) = Q$$

- con $Q = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$ è convessa
- con $Q = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ è convessa
- con $Q = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$ non è convessa

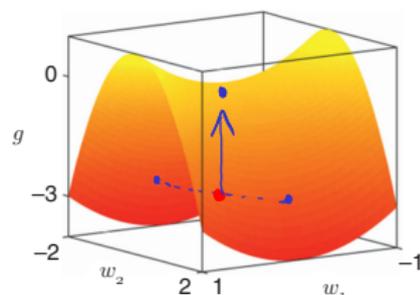
Funzioni convesse vs. non convesse: Esempi



convessa



convessa



non convessa

Alcuni criteri sufficienti di convessità

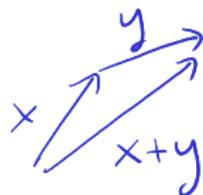
- Ogni funzione lineare è convessa
- Se f è convessa e $c \geq 0$, $c \cdot f(x)$ è convessa
- Se f e g sono convesse, $f(x) + g(x)$ è convessa
- Se f e g sono convesse, $\max(f(x), g(x))$ è convessa
- Se a è lineare e f è convessa, $f(a(x))$ è convessa $f \circ a$
- Se C è simmetrica con autovalori ≥ 0 , $x^T C x$ è convessa
- ↶ ■ Se $C = v \cdot v^T$, $x^T C x$ è convessa
- Se $\nabla^2 f$ è simmetrica con autovalori ≥ 0 , $f(x)$ è convessa

NB. Se f è convessa e a è lineare,
 $a(f(x))$ non è in generale convessa. Esempio: $f(x) = x^2$
 $a(z) = -z$

Norme

Una *norma* è una funzione $\|\cdot\| : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ con le seguenti proprietà:

- 1 $\|x\| = 0$ se e solo se $x = 0_{N \times 1}$
- 2 $\|x\| \geq 0$ per ogni $x \in \mathbb{R}^N$
- 3 $\|cx\| = c \|x\|$ per ogni $x \in \mathbb{R}^N$ e $c > 0$
- 4 $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$



Esempi:

- norma euclidea: $l_2(x) = (\sum_j |x_j|^2)^{1/2}$
- norma l_1 : $l_1(x) = \sum_j |x_j|$
- norma l_p : $l_p(x) = (\sum_j |x_j|^p)^{1/p}$ per qualche $p \geq 1$
- norma uniforme: $l_\infty(x) = \max_j |x_j|$

Ogni norma è una funzione convessa (perché?)

→ Si consideri
 $\|\lambda x + (1-\lambda)y\|$

Condizione di ottimalità per funzioni convesse

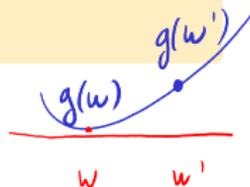
Se g è convessa e differenziabile, la condizione

$$\nabla g(w) = 0$$

è **necessaria e sufficiente** affinché w sia un minimo globale.

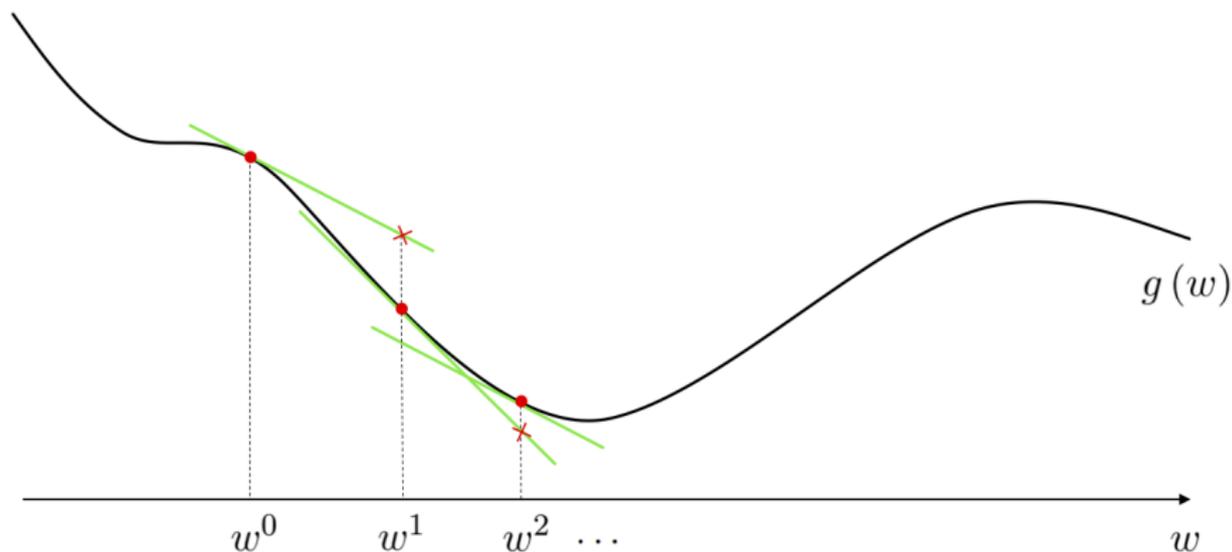
Infatti, per ogni w' ,

$$g(w') \geq g(w) + \underbrace{\nabla g(w)}_0^\top (w' - w) = g(w)$$



⇒ Nelle funzioni convesse, i minimi locali sono anche globali

Discesa del gradiente [Gradient Descent]



Algoritmo di discesa del gradiente (GD)

Algoritmo Gradient Descent (versione generica)

Input: Funzione g , punto iniziale $w^{(1)}$

1 Per $t = 1, \dots, T$:

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta \cdot \nabla g(w^{(t)})$$

2 Restituisci il $w^{(t)}$ col minimo valore di $g(w^{(t)})$, $t = 1, \dots, T$

L'algoritmo ha due parametri: η (passo) e T (numero di passi) (chiamati *iperparametri* per non confonderli con le variabili w da ottimizzare)

Convergenza di GD

Teorema (Convergenza di GD – Versione 1)

Sia $g : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ convessa. Se esistono costanti $D, G > 0$ tali che:

- $\|w^{(1)} - w^*\| \leq D,$
- $\|\nabla g(w^{(t)})\| \leq G$ per $t = 1, \dots, T,$

allora GD con $\eta = D/(G\sqrt{T})$ soddisfa

$$g(w^{\text{GD}}) - g(w^*) \leq \frac{DG}{\sqrt{T}}$$

\Rightarrow GD converge al valore minimo di g per T crescente

L'errore decresce asintoticamente almeno come $1/\sqrt{T}$



Convergenza di GD

Teorema (Convergenza di GD – Versione 2)

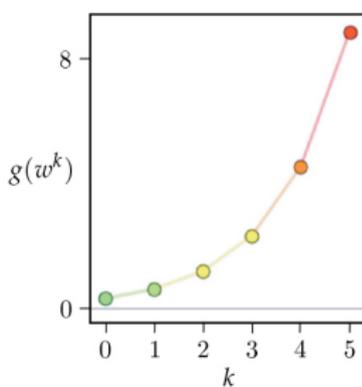
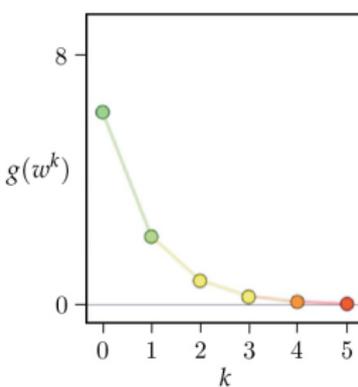
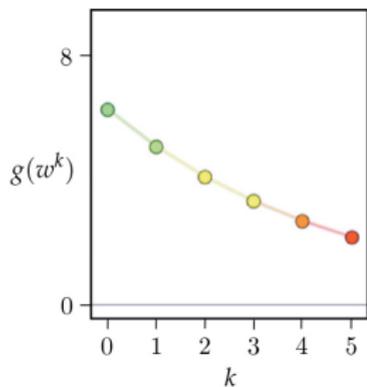
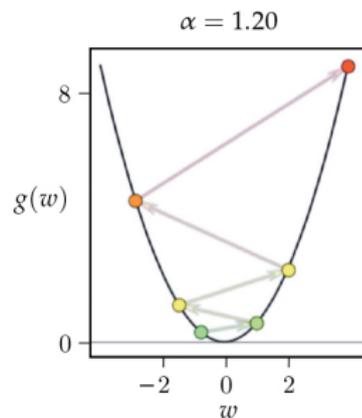
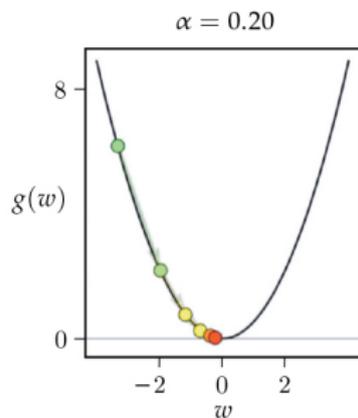
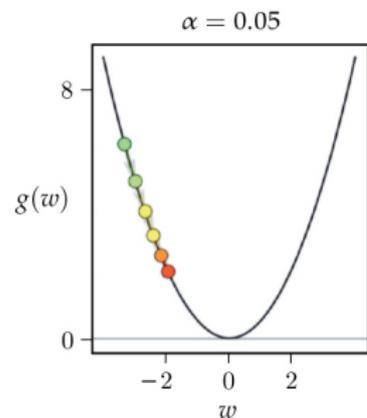
Sia $g : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ convessa e β -smooth. Allora GD con $\eta = 1/\beta$ soddisfa

$$g(w^{\text{GD}}) - g(w^*) \leq \frac{2\beta \|w^{(1)} - w^*\|^2}{T - 1}$$

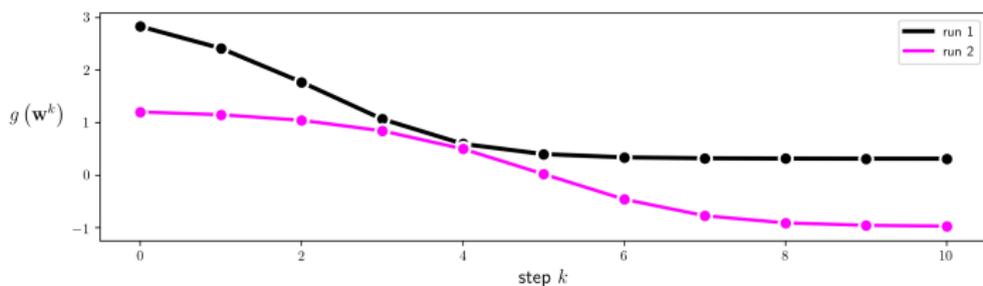
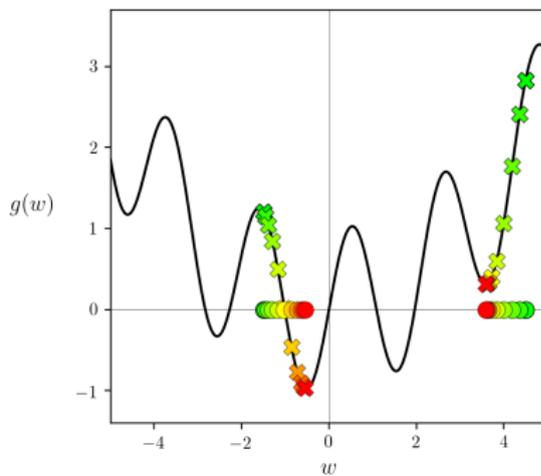
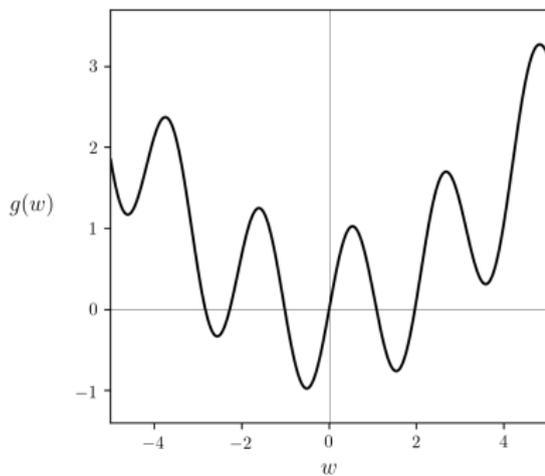
Nota. Una funzione convessa $g : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ è detta β -smooth se $\forall x, y$

$$g(y) - g(x) - \nabla g(x)^\top (y - x) \leq \frac{\beta}{2} \|x - y\|^2$$

In questo scenario l'errore decresce asintoticamente almeno come $1/T$

Esempio con diversi valori del passo η 

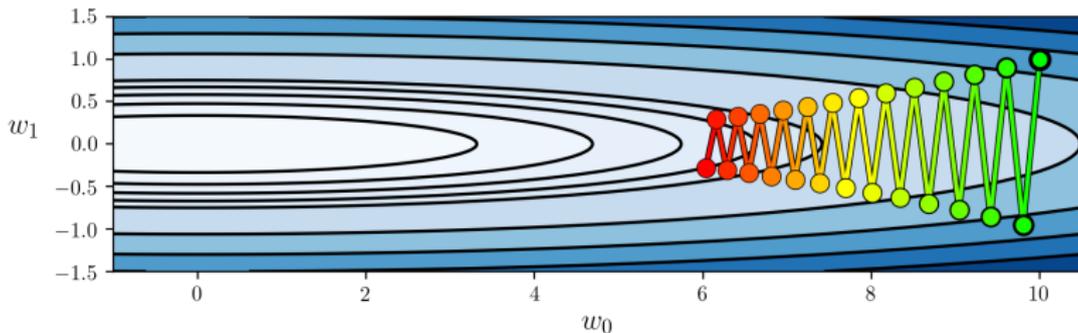
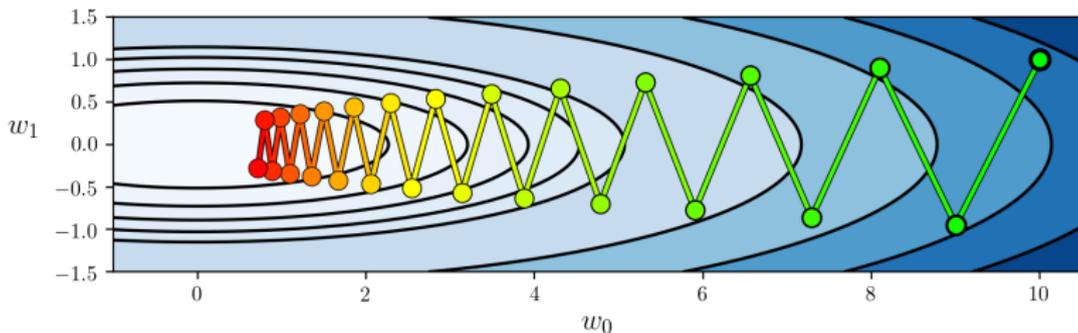
Esempio non convesso



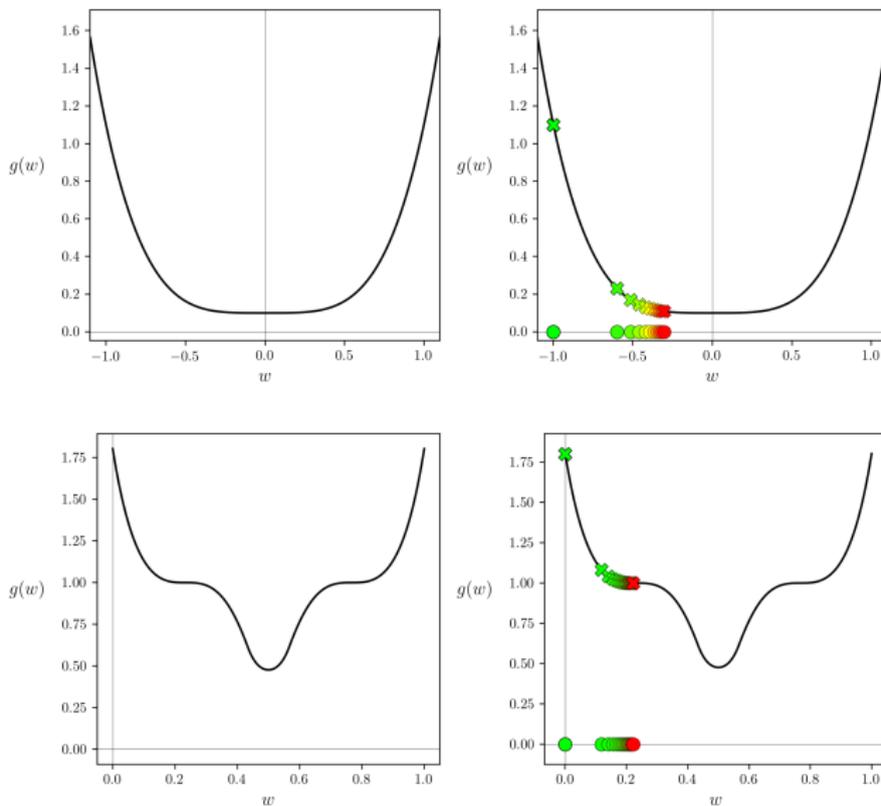
Due problematiche di GD

- La **direzione** del gradiente negativo può oscillare, portando l'algoritmo a muoversi a “zig-zag” e convergere lentamente
- La **magnitudine** del gradiente negativo si contrae vicino ai punti critici, rallentando la discesa

Movimento a zig-zag: Esempi

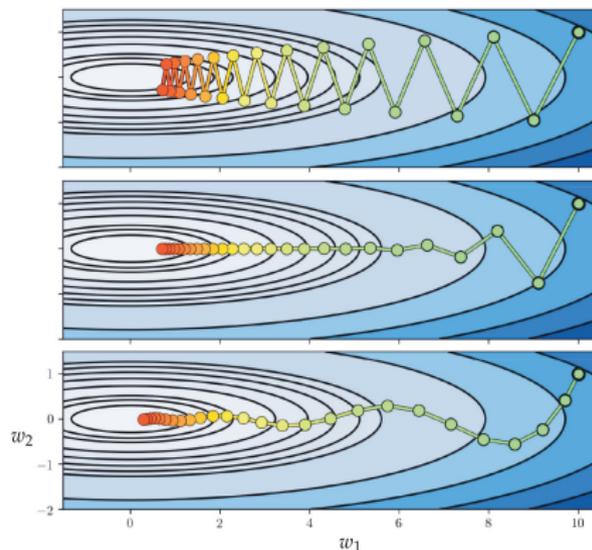


Rallentamento vicino ai punti critici: Esempi



Varianti sofisticate di GD

- Momentum
- Gradiente normalizzato
- Adagrad/RMSprop
- Adam



Discussi nell'Appendice A del libro di testo

Metodi del secondo ordine

GD è un esempio di *metodo del primo ordine* in quanto utilizza solo:

- i valori della funzione, $g(x)$ (scalari)
- i valori del gradiente, $\nabla g(x)$ (vettori $N \times 1$)

I *metodi del secondo ordine* utilizzano anche

- i valori dell'Hessiano, $\nabla^2 g(x)$ (matrici $N \times N$)

Il *metodo di Newton* ne è l'esempio più noto

L'uso di questi metodi nel ML è limitato dal fatto che richiedono la manipolazione esplicita di matrici $N \times N$ (ad ogni passo dell'algoritmo)

Metodo di Newton

Metodo di Newton-Raphson

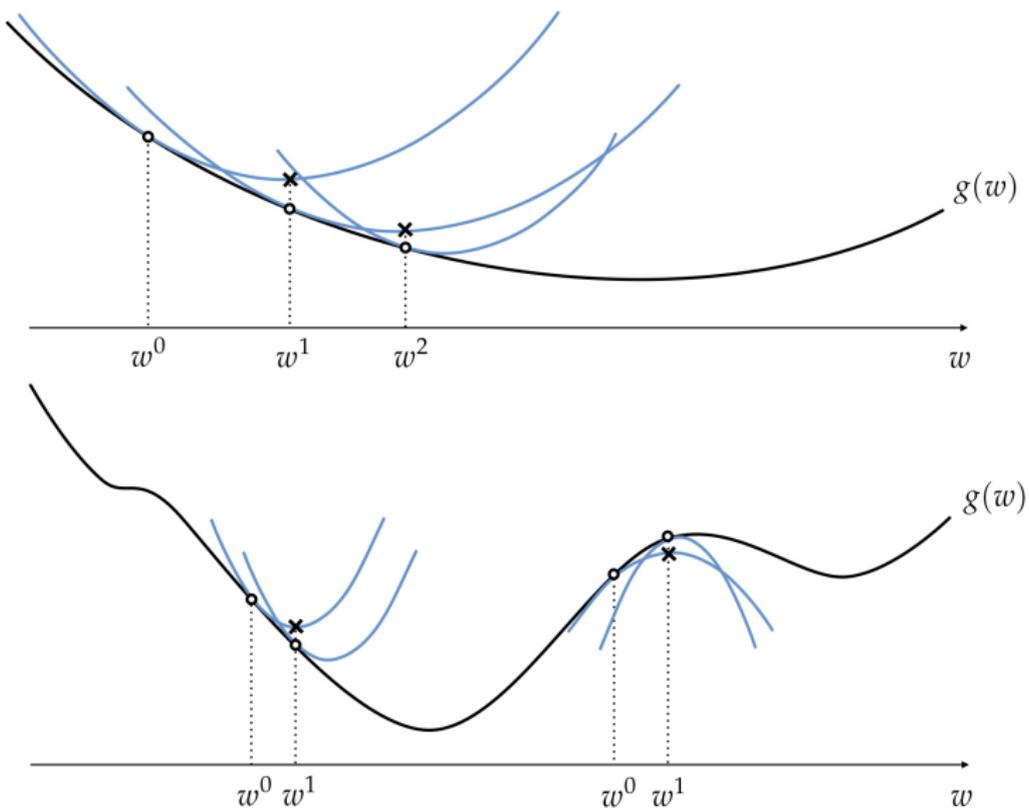
Input: Funzione g , punto iniziale $w^{(1)}$

1 Per $t = 1, \dots, T$:

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - [\nabla^2 g(w^{(t)})]^{-1} \nabla g(w^{(t)})$$

2 Restituisci $w^{(T)}$

Esempio



Vantaggi e svantaggi dei metodi del secondo ordine

- Richiedono tipicamente meno iterazioni per convergere
- La singola iterazione è più computazionalmente costosa (richiede di invertire un Hessiano $N \times N$)
- Applicabili solo a funzioni differenziabili e convesse (altrimenti l'Hessiano non è definito, o non è sempre invertibile)