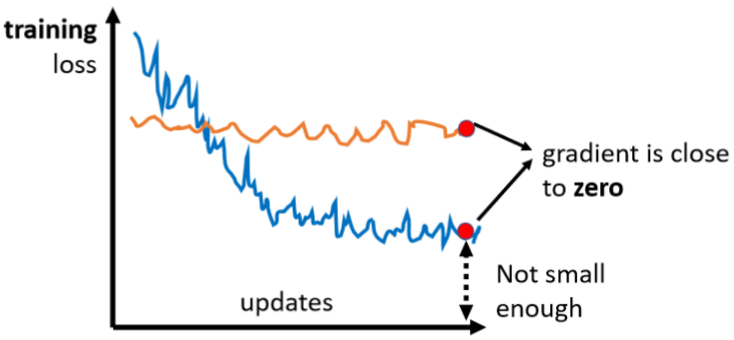
When gradient is small

Critical Point

Training Fails because

现在我们要讲的是Optimization的部分,所以我们要讲的东西基本上跟Overfitting没有什麼太大的关联,我们只讨论Optimization的时候,怎麼把gradient descent做得更好,那為什麼Optimization会失败呢?



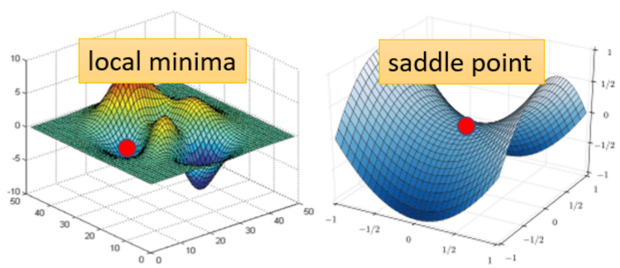
你常常在做Optimization的时候,你会发现,**随著你的参数不断的update,你的training的loss不会再下降**,但是你对这个loss仍然不满意,就像我刚才说的,你可以把deep的network,跟linear的model,或比较shallow network 比较,发现说它没有做得更好,所以你觉得deepnetwork,没有发挥它完整的力量,所以Optimization显然是有问题的

但有时候你会甚至发现,一开始你的model就train不起来,一开始你不管怎麼update你的参数,你的loss通通都掉不下去,那这个时候到底发生了什麼事情呢?

过去常见的一个猜想,是因為我们现在走到了一个地方,**这个地方参数对loss的微分為零**,当你的参数对loss微分為零的时候,gradient descent就没有办法再update参数了,这个时候training就停下来了,loss当然就不会再下降了。

讲到gradient為零的时候,大家通常脑海中最先浮现的,可能就是local minima,所以常有人说做deep learning,用gradient descent会卡在local minima,然后所以gradient descent不work,所以deep learning不work。

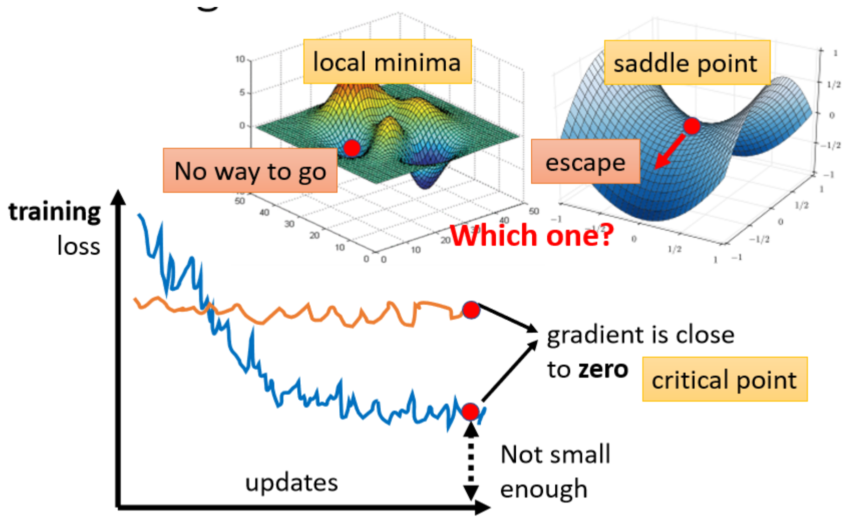
但是如果有一天你要写,跟deep learning相关paper的时候,你千万不要讲卡在local minima这种事情,别人会觉得你非常没有水準,為什麼



因為**不是只有local minima的gradient是零**,还有其他可能会让gradient是零,比如说 saddle point,所谓的saddle point,其实就是gradient是零,但是不是local minima,也不是local maxima的地方,像在右边这个例子裡面 红色的这个点,它在左右这个方向是比较高的,前后这个方向是比较低的,它就像是一个马鞍的形状,所以叫做saddle point,那中文就翻成鞍点

像saddle point这种地方,它也是gradient為零,但它不是local minima,那像这种gradient為零的点,统称為critical point,所以**你可以说你的loss,没有办法再下降,也许是因為卡在了critical point,但你不能说是卡在local minima,因為saddle point也是微分為零的点**

但是今天如果你发现你的gradient,真的很靠近零,卡在了某个critical point,我们有没有办法知道,到底是local minima,还是saddle point？其实是有办法的



為什麼我们想要知道到底是卡在local minima,还是卡在saddle point呢

- 因為如果是**卡在local minima,那可能就没有路可以走了**,因為四周都比较高,你现在所在的位置已经是最低的点,loss最低的点了,往四周走 loss都会比较高,你会不知道怎麼走到其他的地方去
- 但saddle point就比较没有这个问题,如果你今天是**卡在saddle point的话,saddle point旁边还是有路可以走的,**还是有路可以让你的loss更低的,你只要逃离saddle point,你就有可能让你的loss更低

所以鉴别今天我们走到,critical point的时候,到底是local minima,还是saddle point,是一个值得去探讨的问题,那怎麼知道今天一个critical point,到底是属於local minima,还是saddle point呢?

Warning of Math

这边需要用到一点数学,以下这段其实没有很难的数学,就只是微积分跟线性代数,但如果你没有听懂的话,以下这段skip掉是没有关係的

那怎麼知道说一个点,到底是local minima,还是saddle point呢?

你要知道我们loss function的形状,可是我们怎麼知道,loss function的形状呢,network本身很复杂,用复杂network算出来的loss function,显然也很复杂,我们怎麼知道loss function,长什麼样子,虽然我们没有办法完整知道,整个loss function的样子

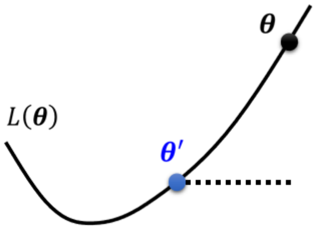
Tayler Series Approximation

但是如果给定某一组参数,比如说蓝色的这个θ',在θ'附近的loss function,是有办法被写出来的,它写出来就像是这个样子

Tayler Series Approximation

$L(\boldsymbol{\theta})$ around $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}'$ can be approximated below

$$L(\boldsymbol{\theta}) \approx L(\boldsymbol{\theta}') + (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}')^T \boldsymbol{g} + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}')^T H (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}')$$



所以这个$L(\theta)$完整的样子写不出来,但是它在θ'附近,你可以用这个式子来表示它,这个式子是,Tayler Series Appoximation泰勒级数展开,这个假设你在微积分的时候,已经学过了,所以我就不会细讲这一串是怎麼来的,但我们就只讲一下它的概念,这一串裡面包含什麼东西呢?

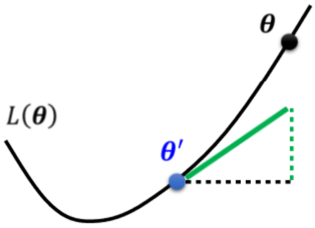
- 第一项是$L(\theta')$,就告诉我们说,当θ跟θ'很近的时候,$L(\theta)$应该跟$L(\theta')$还蛮靠近的
- 第二项是$(\theta - \theta')^T g$

  $L(\boldsymbol{\theta})$ around $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}'$ can be approximated below

  $$L(\boldsymbol{\theta}) \approx L(\boldsymbol{\theta}') + \boxed{(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}')^T \boldsymbol{g}} + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}')^T H (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}')$$

  Gradient $\boldsymbol{g}$ is a *vector*

  $$\boldsymbol{g} = \nabla L(\boldsymbol{\theta}') \qquad \boldsymbol{g}_i = \frac{\partial L(\boldsymbol{\theta}')}{\partial \boldsymbol{\theta}_i}$$

  g是一个向量,这个g就是我们的gradient,我们用绿色的这个g来代表gradient,这个**gradient会来弥补,θ'跟θ之间的差距**,我们虽然刚才说θ'跟θ,它们应该很接近,但是中间还是有一些差距的,那这个差距,第一项我们用这个gradient,来表示他们之间的差距,有时候gradient会写成$\nabla L(\theta')$,这个地方的g是一个向量,**它的第i个component,就是θ的第i个component对L的微分**,光是看g还是没有办法,完整的描述L(θ),你还要看第三项
- 第三项跟Hessian有关,这边有一个H

  $L(\boldsymbol{\theta})$ around $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}'$ can be approximated below

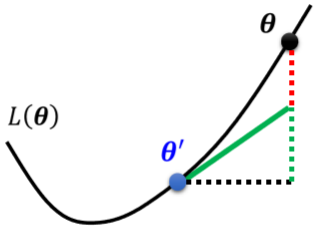
  $$L(\boldsymbol{\theta}) \approx L(\boldsymbol{\theta}') + \boxed{(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}')^T \boldsymbol{g}} + \boxed{\frac{1}{2}(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}')^T H (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}')}$$

  Gradient $\boldsymbol{g}$ is a *vector*

  $$\boldsymbol{g} = \nabla L(\boldsymbol{\theta}') \qquad \boldsymbol{g}_i = \frac{\partial L(\boldsymbol{\theta}')}{\partial \boldsymbol{\theta}_i}$$

  Hessian H is a *matrix*

  $$H_{ij} = \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\theta}_i \partial \boldsymbol{\theta}_j} L(\boldsymbol{\theta}')$$

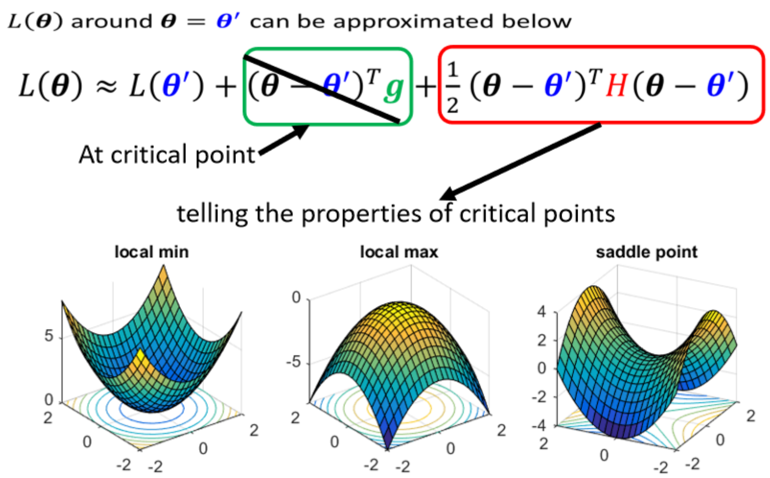
  

这个H叫做Hessian,它是一个矩阵,这个第三项是,再$(\theta-\theta')^TH(\theta-\theta')$,所以第三项会再补足,再加上gradient以后,与真正的L(θ)之间的差距.**H裡面放的是L的二次微分,它第i个row,第j个column的值,就是把θ的第i个component,对L作微分,再把θ的第j个component,对L作微分,再把θ的第i个component,对L作微分,做两次微分以后的结果** 就是这个H_{ij}

如果这边你觉得有点听不太懂的话,也没有关係,反正你就记得这个$L(\theta)$,这个loss function,这个error surface在θ'附近,可以写成这个样子,这个式子跟两个东西有关係,**跟gradient有关係,跟hessian有关係,gradient就是一次微分,hessian就是裡面有二次微分的项目**

Hession

那如果我们今天走到了一个critical point,意味著gradient為零,也就是绿色的这一项完全都不见了



*g***是一个zero vector,绿色的这一项完全都不见了**,只剩下红色的这一项,所以当在critical point的时候,这个loss function,它可以被近似為$L(\theta')$,加上红色的这一项

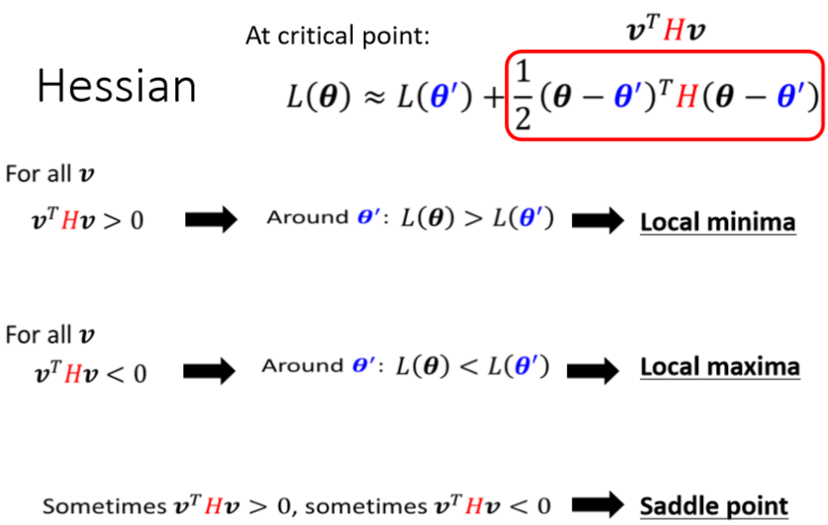
我们可以**根据红色的这一项来判断**,在θ'附近的error surface,到底长什麼样子

知道error surface长什麼样子,我就可以判断

θ'它是一个local minima,是一个local maxima,还是一个saddle point

我们可以靠这一项来了解,这个error surface的地貌,大概长什麼样子,知道它地貌长什麼样子,我们就可以知道说,现在是在什麼样的状态,这个是Hessian

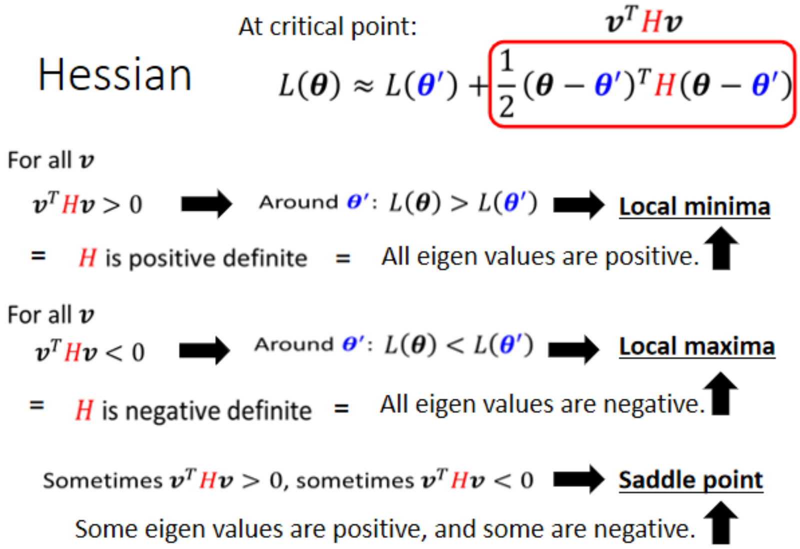
那我们就来看一下怎麼根据Hessian,怎麼根据红色的这一项,来判断θ'附近的地貌



我们现在為了等一下符号方便起见,我们**把$(\theta-\theta')$用v这个向量来表示**

- 如果今天对任何可能的v,v^THv**都大於零**,也就是说 现在θ不管代任何值,v可以是任何的v,也就是θ可以是任何值,不管θ代任何值,**红色框框裡面通通都大於零**,那意味著说 $L(\theta) > L(\theta')$。$L(\theta)$不管代多少 只要在θ'附近,$L(\theta)$都大於$L(\theta')$,**代表$L(\theta')$是附近的一个最低点,所以它是local minima**
- 如果今天反过来说,对所有的v而言,v^THv**都小於零,也就是红色框框裡面永远都小於零**,也就是说θ不管代什麼值,红色框框裡面都小於零,意味著说$L(\theta) < L(\theta')$,**代表$L(\theta')$是附近最高的一个点,所以它是local maxima**
- 第三个可能是假设,v^THv,**有时候大於零 有时候小於零**,你代不同的v进去 代不同的θ进去,红色这个框框裡面有时候大於零,有时候小於零,意味著说在θ'附近,有时候L(θ)>L(θ') 有时候L(θ)<L(θ'),在L(θ')附近,有些地方高 有些地方低,这意味著什麼,**这意味著这是一个saddle point**

但是你这边是说我们要代所有的v,去看v^THv是大於零,还是小於零.我们怎麼有可能把所有的v,都拿来试试看呢,所以有一个更简便的方法,去确认说这一个条件或这一个条件,会不会发生.



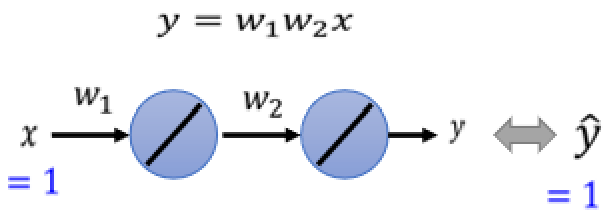
这个就直接告诉你结论,线性代数理论上是有教过这件事情的,如果今天对所有的v而言,v^THv都大於零,那这种矩阵叫做**positive definite 正定矩阵**,positive definite的矩阵,**它所有的eigen value特征值都是正的**

所以如果你今天算出一个hessian,你不需要把它跟所有的v都乘看看,你只要去直接看这个H的eigen value,如果你发现

- **所有eigen value都是正的**,那就代表说这个条件成立,就v^THv,会大於零,也就代表说是一个local minima。所以你从hessian metric可以看出,它是不是local minima,你只要算出hessian metric算完以后,看它的eigen value发现都是正的,它就是local minima。
- 那反过来说也是一样,如果今天在这个状况,对所有的v而言,v^THv小於零,那H是negative definite,那就代表所有**eigen value都是负的**,就保证他是local maxima
- **那如果eigen value有正有负**,那就代表是saddle point,

那假设在这裡你没有听得很懂的话,你就可以记得结论,**你只要算出一个东西,这个东西的名字叫做hessian,它是一个矩阵,这个矩阵如果它所有的eigen value,都是正的,那就代表我们现在在local minima,如果它有正有负,就代表在saddle point。**

那如果刚才讲的,你觉得你没有听得很懂的话,我们这边举一个例子

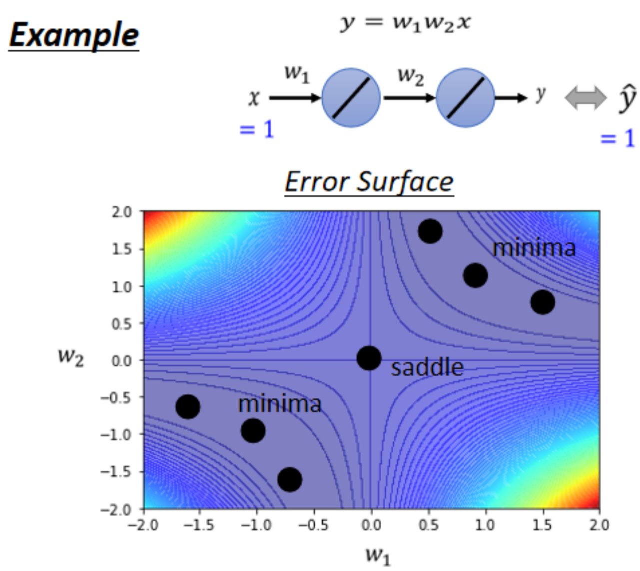


我们现在有一个史上最废的network,输入一个x,它只有一个neuron，乘上w_1,而且这个neuron,还没有activation function,所以x乘上w_1以后 之后就输出,然后再乘上w_2 然后就再输出,就得到最终的数据就是y.总之这个function非常的简单

$$y = w_1 \times w_2 \times x$$

我们有一个史上最废的training set,这个data set说,我们只有一笔data,这笔data是x,是1的时候,它的level是1 所以输入1进去,你希望最终的输出跟1越接近越好

而这个史上最废的training,它的error surface,也是有办法直接画出来的,因為反正只有两个参数 w_1 w_2,连bias都没有,假设没有bias,只有w_1跟w_2两个参数,这个network只有两个参数 w_1跟w_2,那我们可以穷举所有w_1跟w_2的数值,算出所有w_1 w_2数值所代来的loss,然后就画出error surface 长这个样



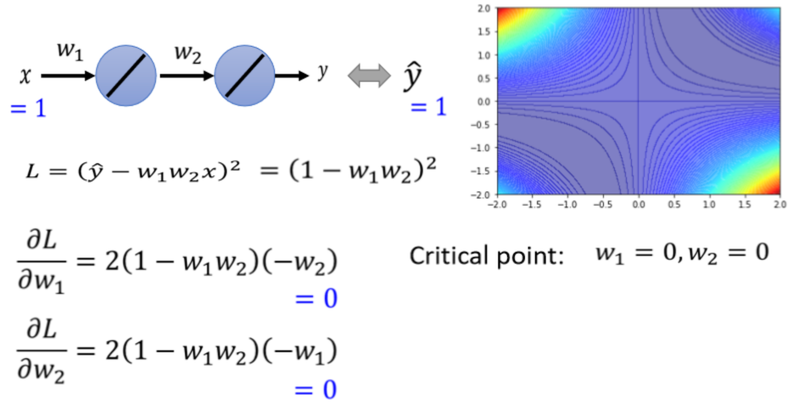
四个角落loss是高的,好 那这个图上你可以看出来说,有一些critical point,这个黑点点的地方(0,0),**原点的地方是critical point**,然后事实上,**右上三个黑点也是一排critical point,左下三个点也是一排critical point**

如果你更进一步要分析,他们是saddle point,还是local minima的话,那圆心这个地方,**原点这个地方 它是saddle point**,為什麼它是saddle point呢

你往左上这个方向走 loss会变大,往右下这个方向走 loss会变大,往左下这个方向走 loss会变小,往右下这个方向走 loss会变小,它是一个saddle point

而这两群critical point,它们都是local minima,所以这个山沟裡面,有一排local minima,这一排山沟里面有一排local minima,然后在原点的地方,有一个saddle point,这个是我们把error surface,暴力所有的参数,得到的loss function以后,得到的loss的值以后,画出error surface,可以得到这样的结论

现在假设如果不暴力所有可能的loss,如果要直接算说一个点,是local minima,还是saddle point的话 怎麼算呢



我们可以把loss的function写出来,这个loss的function 这个L是

$$L = (\hat{y} - w_1 w_2 x)^2$$

正确答案 $\hat{y}$减掉model的输出,也就是w_1 w_2x,这边取square error,这边**只有一笔data,所以就不会summation over所有的training data**,因為反正只有一笔data,x代1 $\hat{y}$代1,我刚才说过只有一笔训练资料最废的,所以只有一笔训练资料,所以loss function就是$L = (\hat{y} - w_1 w_2 x)^2$,那你可以把这一个loss function,它的gradient求出来,w_1对L的微分,w_2对L的微分写出来是这个样子

$$\frac{\partial L}{\partial w_1} = 2(1 - w_1 w_2)(-w_2)$$

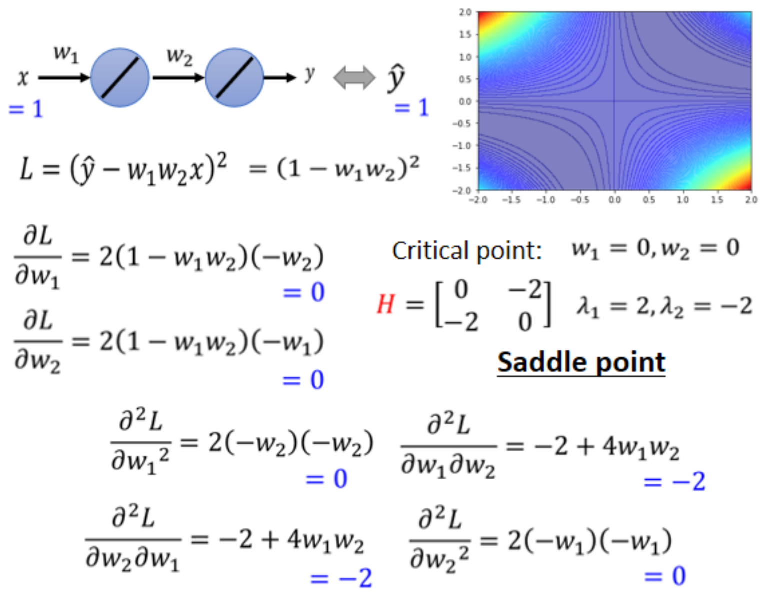
$$\frac{\partial L}{\partial w_2} = 2(1 - w_1 w_2)(-w_1)$$

这个东西

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial L}{\partial w_1} \\ \frac{\partial L}{\partial w_2} \end{bmatrix}$$

就是所谓的g,所谓的gradient,什麼时候gradient会零呢,什麼时候会到一个critical point呢?

举例来说 如果w_1=0 w_2=0,就在圆心这个地方,如果w_1代0 w_2代0,w_1对L的微分 w_2对L的微分,算出来就都是零 就都是零,这个时候我们就知道说,原点就是一个critical point,但**它是local maxima,它是local maxima,local minima,还是saddle point呢,那你就要看hessian才能够知道了**



当然 我们刚才已经暴力所有可能的w_1 w_2了,所以你已经知道说,它显然是一个saddle point,但是现在假设还没有暴力所有可能的loss,所以我们要看看能不能够用H,用Hessian看出它是什麼样的critical point,那怎麼算出这个H呢

H它是一个矩阵,这个矩阵裡面元素就是L的二次微分,所以这个矩阵裡面第一个row,第一个coloumn的位置,就是w_1对L微分两次,第一个row 第二个coloumn的位置,就是先用w_2对L作微分,再用w_1对L作微分,然后这边就是w_1对L作微分,w_2对L作微分,然后w_2对L微分两次,这四个值组合起来,就是我们的hessian,那这个hessian的值是多少呢

这个hessian的式子,我都已经把它写出来了,你只要把w_1=0 w_2=0代进去,代进去 你就得到在原点的地方,hessian是这样的一个矩阵

$$\begin{bmatrix} 0 & -2 \\ -2 & 0 \end{bmatrix}$$

这个hessian告诉我们,它是local minima,还是saddle point呢,那你就要看这个矩阵的eigen value,算一下发现,这个矩阵有两个eigen value,2跟-2 **eigen value有正有负,代表saddle point**

所以我们现在就是用一个例子,跟你操作一下 告诉你说,你怎麼从hessian看出一个点,它一个critical point 它是saddle point,还是local minima,

Don't afraid of saddle point

At critical point: $L(\boldsymbol{\theta}) \approx L(\boldsymbol{\theta}') + \overbrace{\boxed{\frac{1}{2}(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}')^T H(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}')}}^{\boldsymbol{v}^T H \boldsymbol{v}}$

Sometimes $\boldsymbol{v}^T H \boldsymbol{v} > 0$, sometimes $\boldsymbol{v}^T H \boldsymbol{v} < 0$ ➡ Saddle point

H may tell us parameter update direction!

如果今天你卡的地方是saddle point,也许你就不用那麼害怕了,因為如果你今天你发现,你停下来的时候,是因為saddle point 停下来了,那其实就有机会可以放心了

因為H它不只可以帮助我们判断,现在是不是在一个saddle point,它还指出了我们参数,可以update的方向,就之前我们参数update的时候,都是看gradient 看g,但是我们走到某个地方以后,发现g变成0了 不能再看g了,g不见了 gradient没有了,但如果是一个saddle point的话,还可以再看H,怎麼再看H呢,H怎麼告诉我们,怎麼update参数呢

At critical point: $L(\boldsymbol{\theta}) \approx L(\boldsymbol{\theta}') + \overbrace{\boxed{\frac{1}{2}(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}')^T H(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}')}}^{\boldsymbol{v}^T H \boldsymbol{v}}$

Sometimes $\boldsymbol{v}^T H \boldsymbol{v} > 0$, sometimes $\boldsymbol{v}^T H \boldsymbol{v} < 0$ ➡ Saddle point

H may tell us parameter update direction!

$\boldsymbol{u}$ is an eigen vector of H

λ is the eigen value of $\boldsymbol{u}$

$\lambda < 0$

$$\Rightarrow \underset{<0}{\boldsymbol{u}^T H \boldsymbol{u}} = \boldsymbol{u}^T(\lambda \boldsymbol{u}) = \underset{<0}{\lambda\|\boldsymbol{u}\|^2}$$

$$L(\boldsymbol{\theta}) \approx L(\boldsymbol{\theta}') + \frac{1}{2}\overset{\boldsymbol{u}}{(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}')}^T H \overset{\boldsymbol{u}}{(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}')} \Rightarrow L(\boldsymbol{\theta}) < L(\boldsymbol{\theta}')$$

$\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}' = \boldsymbol{u}$ $\quad \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}' + \boldsymbol{u}$ $\quad$ Decrease L

我们这边假设μ是H的eigenvector特征向量,然后λ是u的eigen value特征值。

如果我们把这边的v换成μ的话,我们把μ乘在H的左边,跟H的右边,也就是$\mu^T H \mu$, $H\mu$会得到$\lambda\mu$,因為μ是一个eigen vector。H乘上eigen vector特征向量会得到特征向量λ eigen value乘上eigen vector即$\lambda\mu$

$$\boldsymbol{u}^T H \boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}^T(\lambda \boldsymbol{u}) = \lambda\|\boldsymbol{u}\|^2$$

所以我们在这边得到u^T乘上λu,然后再整理一下,把u^T跟u乘起来,得到‖u‖²,所以得到λ‖u‖²

$$\overbrace{\boxed{\frac{1}{2}(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}')^T H(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}')}}^{\boldsymbol{v}^T H \boldsymbol{v}}$$

假设我们这边v,代的是一个eigen vector,我们这边θ减θ',放的是一个eigen vector的话,会发现说我们这个红色的项裡面,其实就是λ‖u‖²

At critical point: $L(\boldsymbol{\theta}) \approx L(\boldsymbol{\theta}') + \overbrace{\boxed{\frac{1}{2}(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}')^T H(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}')}}^{\boldsymbol{v}^T H \boldsymbol{v}}$

Sometimes $\boldsymbol{v}^T H \boldsymbol{v} > 0$, sometimes $\boldsymbol{v}^T H \boldsymbol{v} < 0$ ➡ Saddle point

H may tell us parameter update direction!

$\boldsymbol{u}$ is an eigen vector of H

λ is the eigen value of $\boldsymbol{u}$

$\lambda < 0$

➡ $\underbrace{\boldsymbol{u}^T H \boldsymbol{u}}_{<0} = \boldsymbol{u}^T(\lambda \boldsymbol{u}) = \underbrace{\lambda \|\boldsymbol{u}\|^2}_{<0}$

$$L(\boldsymbol{\theta}) \approx L(\boldsymbol{\theta}') + \frac{1}{2}\overbrace{(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}')}^{\boldsymbol{u}}{}^T H \overbrace{(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}')}^{\boldsymbol{u}} \Rightarrow L(\boldsymbol{\theta}) < L(\boldsymbol{\theta}')$$

$\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}' = \boldsymbol{u}$ $\quad$ $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}' + \boldsymbol{u}$ $\quad$ Decrease L

那今天如果λ**小於零**,eigen value小於零的话,那λ‖u‖²就会小於零,因為‖u‖²一定是正的,所以eigen value是负的,那这一整项就会是**负的**,也就是u的transpose乘上H乘上u,它是负的,也就是**红色这个框裡是负的**

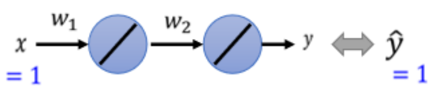
所以这意思是说假设$\theta-\theta' = \mu$,那这一项$(\theta-\theta')^T H(\theta-\theta')$就是负的,也就是$L(\theta) < L(\theta')$

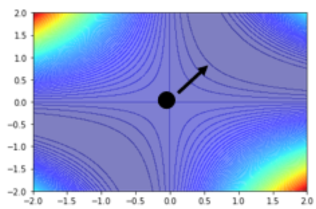
也就是说假设$\theta-\theta' = \mu$,也就是,**你在θ'的位置加上u,沿著u的方向做update得到θ,你就可以让loss变小**

因為根据这个式子,你只要θ减θ'等於u,loss就会变小,所以你今天只要让θ等於θ'加u,你就可以让loss变小,你只要沿著u,也就是eigen vector的方向,去更新你的参数 去改变你的参数,你就可以让loss变小了

所以虽然在critical point没有gradient,如果我们今天是在一个**saddle point**,你也不一定要惊慌,你只要**找出负的eigen value,再找出它对应的eigen vector,用这个eigen vector去加θ',就可以找到一个新的点,这个点的loss比原来还要低**

举具体的例子





$L = (\hat{y} - w_1 w_2 x)^2 = (1 - w_1 w_2)^2$

$$\frac{\partial L}{\partial w_1} = 2(1 - w_1 w_2)(-w_2)$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_2} = 2(1 - w_1 w_2)(-w_1)$$

Critical point: $w_1 = 0, w_2 = 0$

$H = \begin{bmatrix} 0 & -2 \\ -2 & 0 \end{bmatrix}$ $\quad \lambda_1 = 2, \lambda_2 = -2$

Saddle point

$\lambda_2 = -2$ $\quad$ Has eigenvector $\boldsymbol{u} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$

Update the parameter along the direction of $\boldsymbol{v}_2$

You can escape the saddle point and decrease the loss.

(this method is seldom used in practice)

刚才我们已经发现,原点是一个critical point,它的Hessian长这个样,那我现在发现说,这个Hessian有一个负的eigen value,这个eigen value等於-2,那它对应的eigen vector,它有很多个,其实是无穷多个对应的eigen vector,我们就取一个出来,我们取$\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$是它对应的一个eigen vector,那我们其实只要顺著这个u的方向,顺著$\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$这个vector的方向,去更新我们的参数,就可以找到一个,比saddle point的loss还要更低的点

如果以今天这个例子来看的话,你的saddle point在(0,0)这个地方,你在这个地方会没有gradient,Hessian的eigen vector告诉我们,只要往$\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$的方向更新,你就可以让loss变得更小,也就是说你可以逃离你的saddle point,然后让你的loss变小,所以从这个角度来看,似乎saddle point并没有那麼可怕

如果你今天在training的时候,你的gradient你的训练停下来,你的gradient变成零,你的训练停下来,是因為saddle point的话,那似乎还有解

但是当然实际上,在实际的implementation裡面,你几乎不会真的把Hessian算出来,这个要是二次微分,要计算这个矩阵的computation,需要的运算量非常非常的大,更遑论你还要把它的eigen value,跟eigen vector找出来,所以在实作上,你几乎没有看到,有人用这一个方法来逃离saddle point

等一下我们会讲其他,也有机会逃离saddle point的方法,他们的运算量都比要算这个H,还要小很多,那今天之所以我们把,这个saddle point跟 eigen vector,跟Hessian的eigen vector拿出来讲,是想要告诉你说,如果是卡在saddle point,也许没有那麼可怕,最糟的状况下你还有这一招,可以告诉你要往哪一个方向走.

Saddle Point v.s. Local Minima

讲到这边你就会有一个问题了,这个问题是,那到底**saddle point跟local minima,谁比较常见呢**,我们说,saddle point其实并没有很可怕,那如果我们今天,常遇到的是saddle point,比较少遇到local minima,那就太好了,那到底saddle point跟local minima,哪一个比较常见呢?这边我们要讲一个不相干的故事,先讲一个故事

• A.D. 1543

这个故事发生在1543年,1543年发生了什麼事呢,那一年君士坦丁堡沦陷,这个是君士坦丁堡沦陷图,君士坦丁堡本来是东罗马帝国的领土,然后被鄂图曼土耳其帝国佔领了,然后东罗马帝国就灭亡了,在鄂图曼土耳其人进攻,君士坦丁堡的时候,那时候东罗马帝国的国王,是君士坦丁十一世,他不知道要怎麼对抗土耳其人,有人就献上了一策,找来了一个魔法师叫做狄奥伦娜

來源《三體III·死神永生》

Saddle Point v.s. Local Minima

- The Magician Diorena（魔法師狄奧倫娜）

Source of image: https://read01.com/mz2DBPE.html#.YECz22gzbIU

这是真实的故事,出自三体的故事,这个狄奥伦娜这样说,狄奥伦娜是谁呢,他有一个能力跟张飞一样,张飞不是可以万军从中取上将首级,如探囊取物吗,狄奥伦娜也是一样,他可以直接取得那个苏丹的头,他可以从万军中取得苏丹的头,大家想说狄奥伦娜怎麼这麼厉害,他真的有这麼强大的魔法吗,所以大家就要狄奥伦娜,先展示一下他的力量,这时候狄奥伦娜就拿出了一个圣杯,大家看到这个圣杯就大吃一惊,為什麼大家看到这个圣杯,要大吃一惊呢,因為这个圣杯,本来是放在圣索菲亚大教堂的地下室,而且它是被放在一个石棺裡面,这个石棺是密封的,没有人可以打开它.

- The Magician Diorena（魔法師狄奧倫娜）

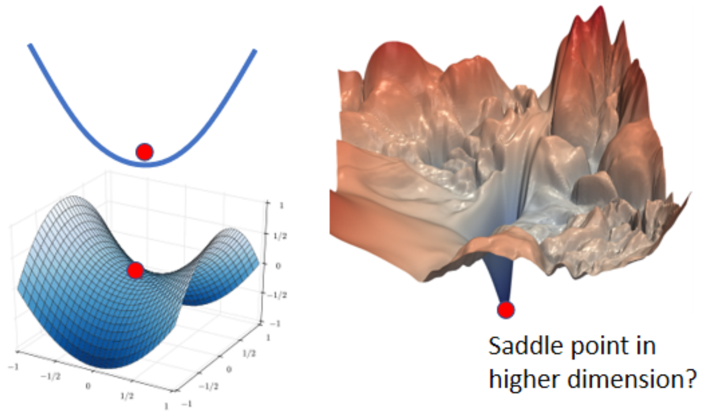
From 3 dimensional space, it is sealed.

It is not in higher dimensions.

Source of image: https://read01.com/mz2DBPE.html#.YECz22gzbIU

但是狄奥伦娜他从裡面取得了圣杯,而且还放了一串葡萄进去,君士坦丁十一世為了要验证,狄奥伦娜是不是真的有这个能力,就带了一堆人真的去撬开了这个石棺,发现圣杯真的被拿走了,裡面真的有一串新鲜的葡萄,就知道狄奥伦娜真的有,这个万军从中取上将首级的能力,那為什麼迪奥伦娜可以做到这些事呢,那是因為这个石棺你觉得它是封闭的,那是因為你是从三维的空间来看,从三维的空间来看,这个石棺是封闭的,没有任何路可以进去,但是狄奥伦娜可以进入四维的空间,从高维的空间中,这个石棺是有路可以进去的,它并不是封闭的,至於狄奥伦娜有没有成功刺杀苏丹呢,你可以想像一定是没有嘛,所以君坦丁堡才沦陷,那至於為什麼没有,大家请见於三体这样 就不雷大家,

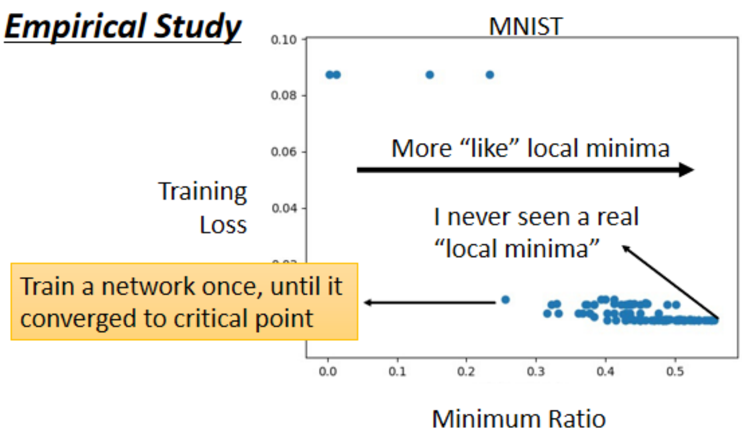
总之这个**从三维的空间来看,是没有路可以走的东西,在高维的空间中是有路可以走的,error surface会不会也一样呢**



When you have lots of parameters, perhaps local minima is rare?

所以你在一维的空间中,一维的一个参数的error surface,你会觉得好像到处都是local minima,但是会不会在二维空间来看,它就只是一个saddle point呢,常常会有人画类似这样的图,告诉你说Deep Learning的训练,是非常的复杂的,如果我们移动某两个参数,error surface的变化非常的复杂,是这个样子的,那显然它有非常多的local minima,我的这边现在有一个local minima,但是会不会这个local minima,只是在二维的空间中,看起来是一个local minima,在更高维的空间中,它看起来就是saddle point,在二维的空间中,我们没有路可以走,那会不会在更高的维度上,因為更高的维度,我们没办法visualize它,我们没办法真的拿出来看,会不会在更高维的空间中,其实有路可以走的,那如果维度越高,是不是可以走的路就越多了呢,所以 今天我们在训练,一个network的时候,我们的参数往往动輒百万千万以上,所以我们的error surface,其实是在一个非常高的维度中,对不对,我们参数有多少,就代表我们的error surface的,维度有多少,参数是一千万就代表error surface,它的维度是一千万,竟然维度这麼高,会不会其实,根本就有非常多的路可以走呢,那既然有非常多的路可以走,会不会其实local minima,根本就很少呢,

而经验上,如果你自己做一些实验的话,也支持这个假说



$$\text{Minimum ratio} = \frac{\text{Number of } \textbf{Positive} \text{ Eigen values}}{\text{Number of Eigen values}}$$

这边是训练某一个network的结果,每一个点代表,训练那个network训练完之后,把它的Hessian拿出来进行计算,所以这边的每一个点,都代表一个network,就我们训练某一个network,然后把它训练训练,训练到gradient很小,卡在critical point,把那组参数出来分析,看看它比较像是saddle point,还是比较像是local minima

- 纵轴代表training的时候的loss,就是我们今天卡住了,那个loss没办法再下降了,那个loss是多少,那很多时候,你的loss在还很高的时候,训练就不动了 就卡在critical point,那很多时候loss可以降得很低,才卡在critical point,这是纵轴的部分
- 横轴的部分是minimum ratio,minimum ratio是**eigen value的数目分之正的eigen value的数目**,又**如果所有的eigen value都是正的,代表我们今天的critical point,是local minima,如果有正有负代表saddle point**,那在实作上你会发现说,你几乎找不到完全所有eigen value都是正的critical point,你看这边这个例子裡面,这个minimum ratio代表eigen value的数目分之正的eigen value的

数目,最大也不过0.5到0.6间而已,代表说只有一半的eigen value是正的,还有一半的eigen value是负的,

所以今天虽然在这个图上,越往右代表我们的critical point越像local minima,**但是它们都没有真的,变成local minima**,就算是在最极端的状况,我们仍然有一半的case,我们的eigen value是负的,这一半的case eigen value是正的,代表说在所有的维度裡面有一半的路,这一半的路 如果要让loss上升,还有一半的路可以让loss下降。

所以从经验上看起来,其实local minima并没有那麼常见,多数的时候,你觉得你train到一个地方,你gradient真的很小,然后所以你的参数不再update了,往往是因為你卡在了一个saddle point。