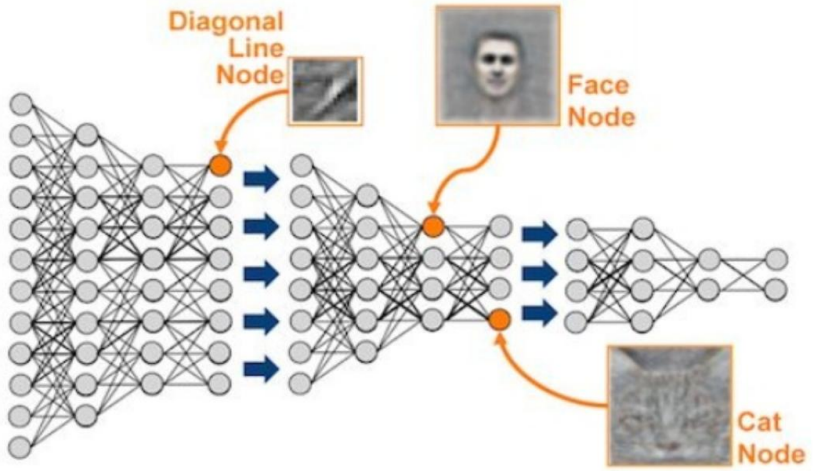
Основы практического использования нейронных сетей.

Лекция 2. Алгоритмы обучения для глубоких НС.

Дмитрий Буряк.
к.ф.-м.н.
dyb04@yandex.ru

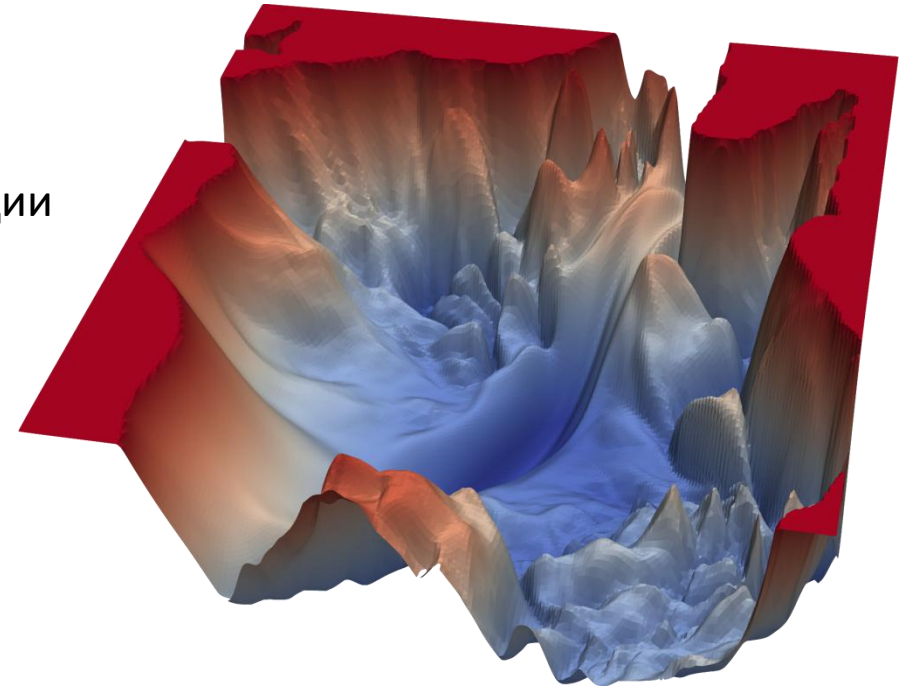
Глубокие НС vs традиционные НС

- Традиционные (shallow) НС:
  - 1-2 внутренних слоев;
  - необходимость предварительного выделения признаков, предобработка данных;
  - «простота» обучения.
- Глубокие НС:
  - >2 слоев;
  - моделирование абстракций в данных;
  - большое число слоев и нейронов -> большое число весов.
  - адаптирование алгоритмов обучения.
  - высокие требования к вычислительным ресурсам.



Трудности обучения глубоких НС

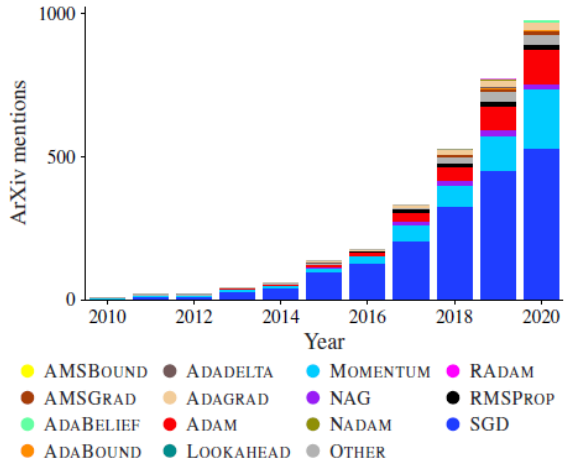
- ❑ Локальные минимумы функции ошибки
- ❑ Сложный ландшафт целевой функции
- ❑ Неравномерность обновления параметров сети
- ❑ Выбор закона изменения скорости обучения



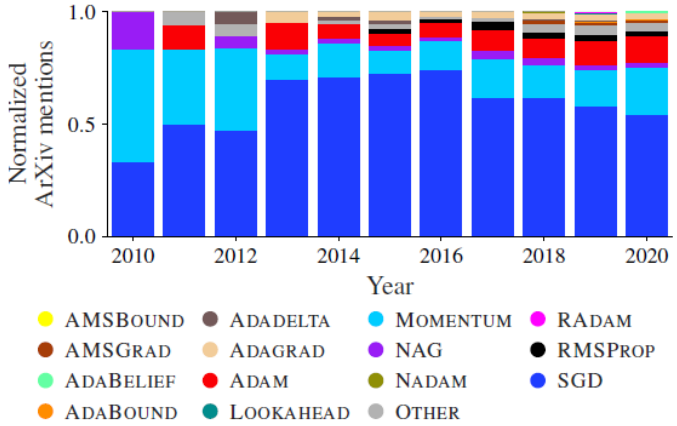
https://www.cs.umd.edu/~tomg/projects/landscapes/

Выбор алгоритма обучения

- ❑ Существует более 100 алгоритмов оптимизации для НС*.
- ❑ Эмпирическое сравнение эффективности различных алгоритмов.
- ❑ Не существует исследований, которые сравнивают все (почти все) алгоритмы.



Количество упоминаний оптимизаторов в статьях на сайте arxiv.org*



Относительное число упоминаний оптимизаторов в статьях на сайте arxiv.org*

** https://arxiv.org/abs/2007.01547*

Стохастический градиентный спуск

- ❑ Основной алгоритм для глубокого обучения.
- ❑ Базируется на принципах градиентного спуска.
- ❑ Вычисление градиента по каждому примеру вычислительно затратно → выбор случайных подмножест из обучающей выборки.

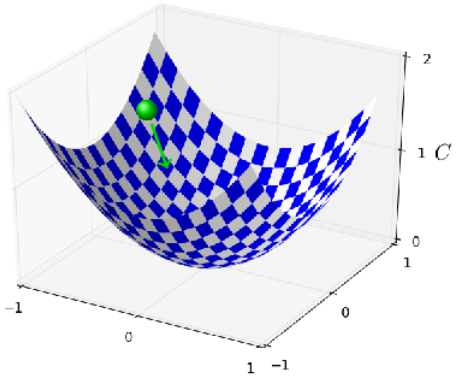
$$w_k \to w'_k = w_k - \eta \frac{\partial C}{\partial w_k}$$

$$b_l \to b'_l = b_l - \eta \frac{\partial C}{\partial b_l}.$$

$$\nabla C \approx \frac{1}{m} \sum_{j=1}^{m} \nabla C_{X_j}$$

$$w_k \to w'_k = w_k - \frac{\eta}{m} \sum_j \frac{\partial C_{X_j}}{\partial w_k}$$

$$b_l \to b'_l = b_l - \frac{\eta}{m} \sum_j \frac{\partial C_{X_j}}{\partial b_l},$$



Методы оптимизации 2-го порядка

$$C(w+\Delta w) \approx C(w) + \nabla C \cdot \Delta w + \frac{1}{2}\Delta w^T H \Delta w$$

$$\Delta w = -H^{-1}\nabla C$$

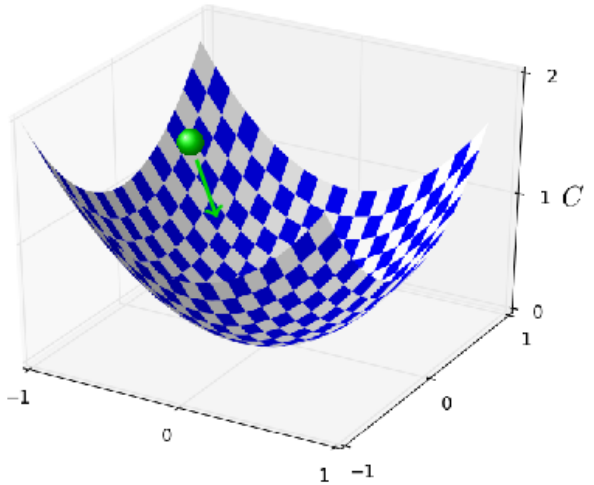
- Оценка Гессиана ~ скорость изменения градиента.
- Требует много памяти: 1000000 весов → 10^{12} элементов Гессиана → >3Tb RAM .
- Методы частичной апроксимации Гессиана (L-BFGS).
- Аппроксимация требует использования всех примеров из обучающей выборки.

Использование момента

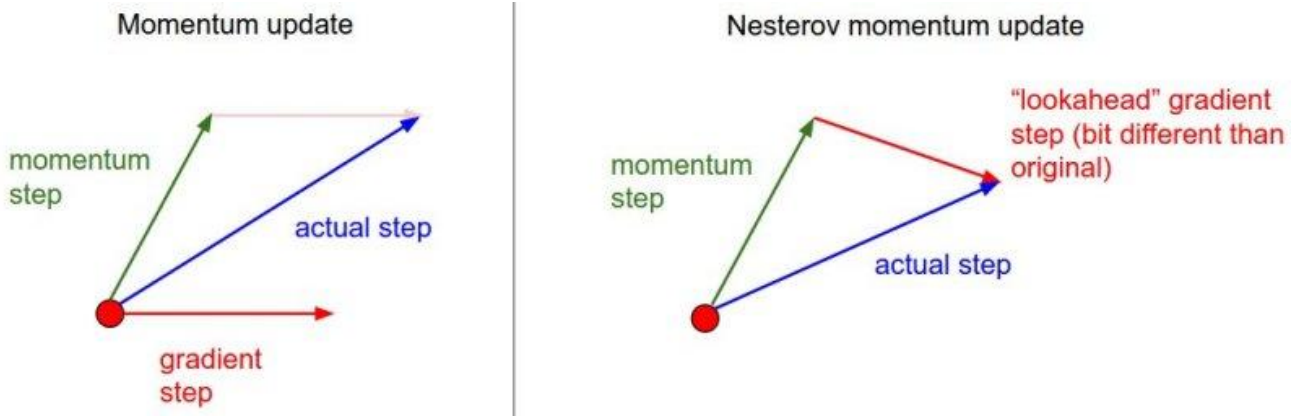
- Идея накопления импульса.
- Оценка «скорости» градиента.
- Применение коэффициента «трения» ~ коэффициент момента.

$$v \to v' = \mu v - \eta \nabla C$$
$$w \to w' = w + v'.$$

- Изменение коэффициента момента в процессе обучения 0.5→0.9



Момент Нестерова (NAG)

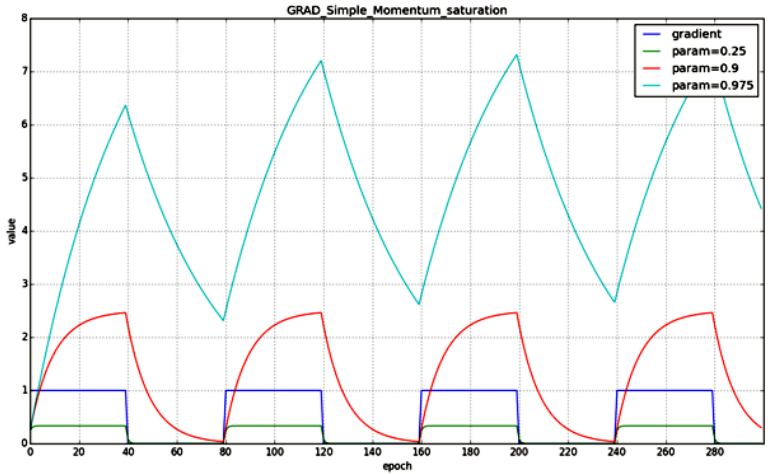


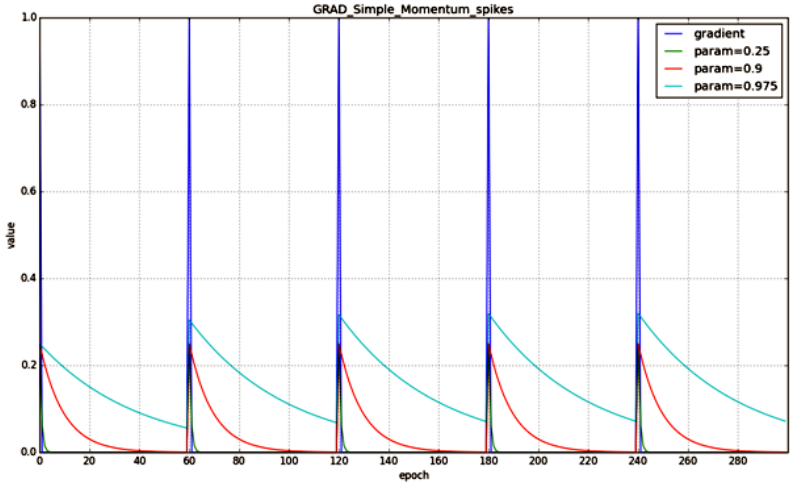
- Оценка градиента в предсказанной позиции функции ошибки

Обзор алгоритмов обучения*. Момент.

$$v_t = \gamma v_{t-1} + \eta g_t \qquad g_t = \nabla_\theta C(\theta)$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - v_t \qquad \gamma = 0.9$$

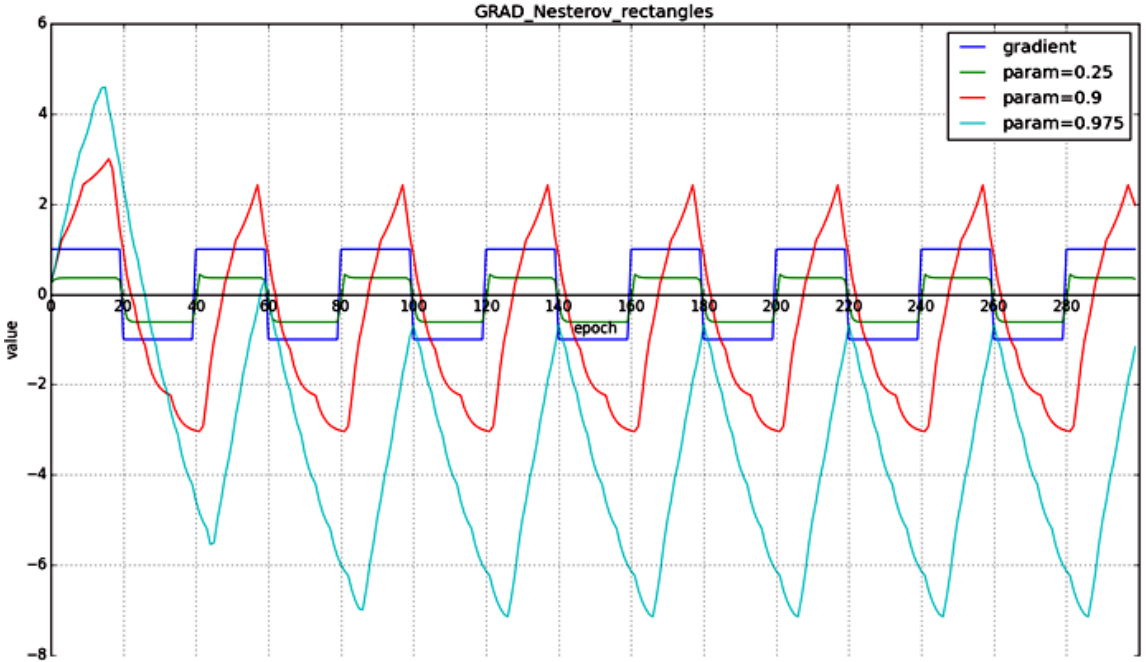




** https://habrahabr.ru/post/318970/*

Обзор алгоритмов обучения. Момент Нестерова (NAG).

$$v_t = \gamma v_{t-1} + \eta g_t(\theta - \gamma v_{t-1})$$
$$\theta_{t+1} = \theta_t - v_t$$



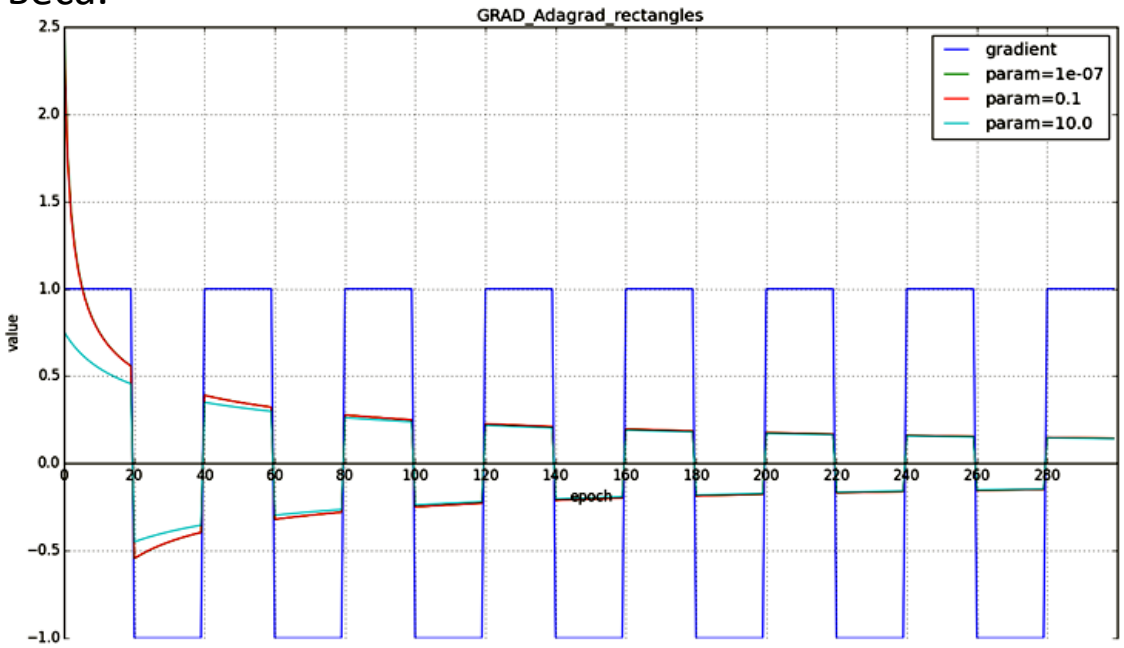
Обзор алгоритмов обучения. Adagrad.

- Учет частоты обновления веса.
- Устойчивость к выбору скорости обучения.

$$G_t = G_t + g_t^2$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{\sqrt{G_t + \epsilon}} g_t$$

ϵ — сглаживающий параметр

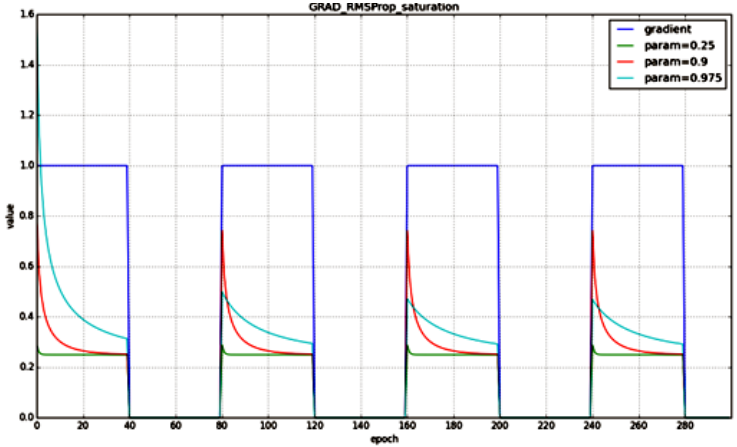


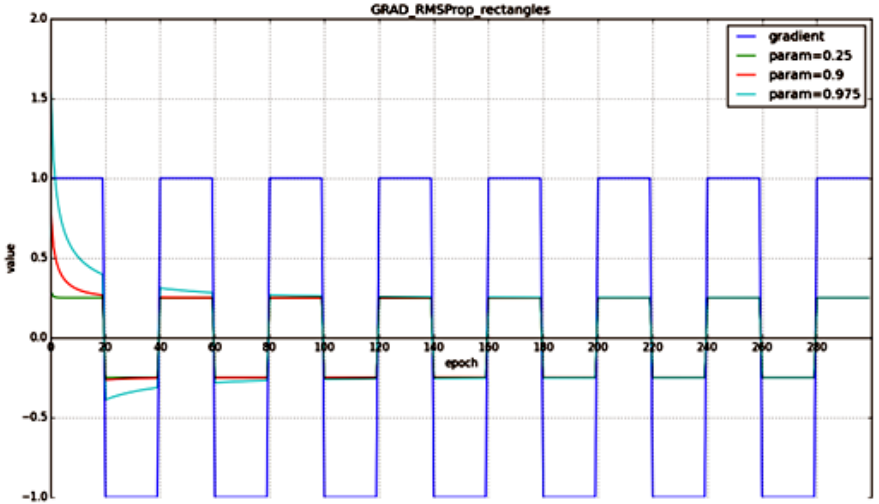
Обзор алгоритмов обучения. RMSProp.

- Учет частоты обновления веса за счет усреднения.

$$E[g^2]_t = \gamma E[g^2]_{t-1} + (1-\gamma) g_t^2$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{\sqrt{E[g^2]_t + \epsilon}} g_t$$





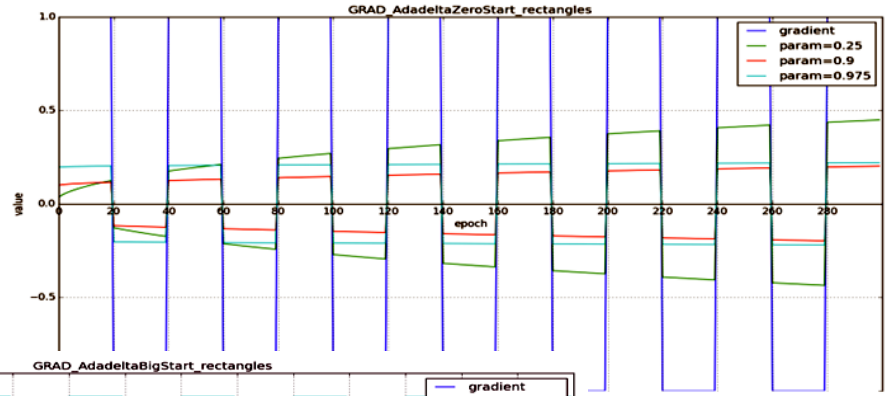
Обзор алгоритмов обучения. Adadelta.

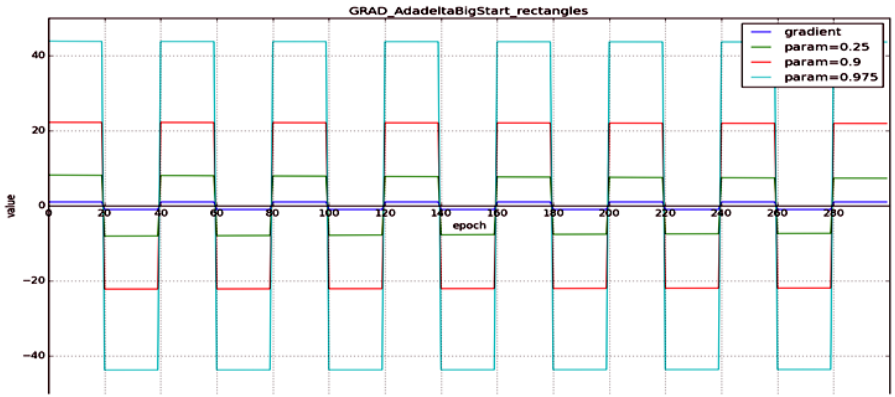
$$\Delta\theta = -\frac{RMS[\Delta\theta]_{t-1}}{RMS[g]_t} g_t$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{RMS[\Delta\theta]_{t-1}}{RMS[g]_t} g_t$$

$$E[\Delta\theta^2]_t = \gamma E[\Delta\theta^2]_{t-1} + (1-\gamma)\Delta\theta_t^2$$

$$RMS[\Delta\theta]_t = \sqrt{E[\Delta\theta^2]_t + \epsilon}$$





Обзор алгоритмов обучения. Adam.

- Момент + учет частоты обновления веса.

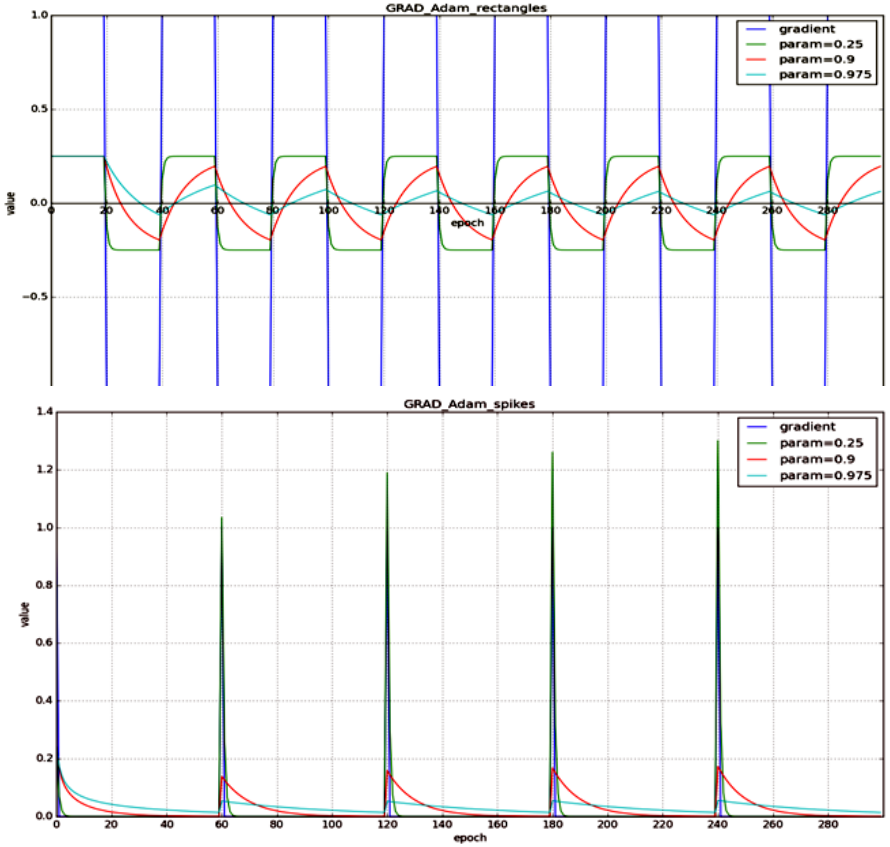
$$m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) g_t$$

$$v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2) g_t^2$$

$$\hat{m}_t = \frac{m_t}{1 - \beta_1^t}, \; \hat{v}_t = \frac{v_t}{1 - \beta_2^t}$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{\sqrt{\hat{v}_t + \epsilon}} \hat{m}_t$$

$$\beta_1 = 0.9, \beta_2 = 0.999, \epsilon = 10^{-8}$$



Обзор алгоритмов обучения. Adamax.

$$v_t = \beta_2^p v_{t-1} + (1-\beta_2^p)|g_t|^p$$

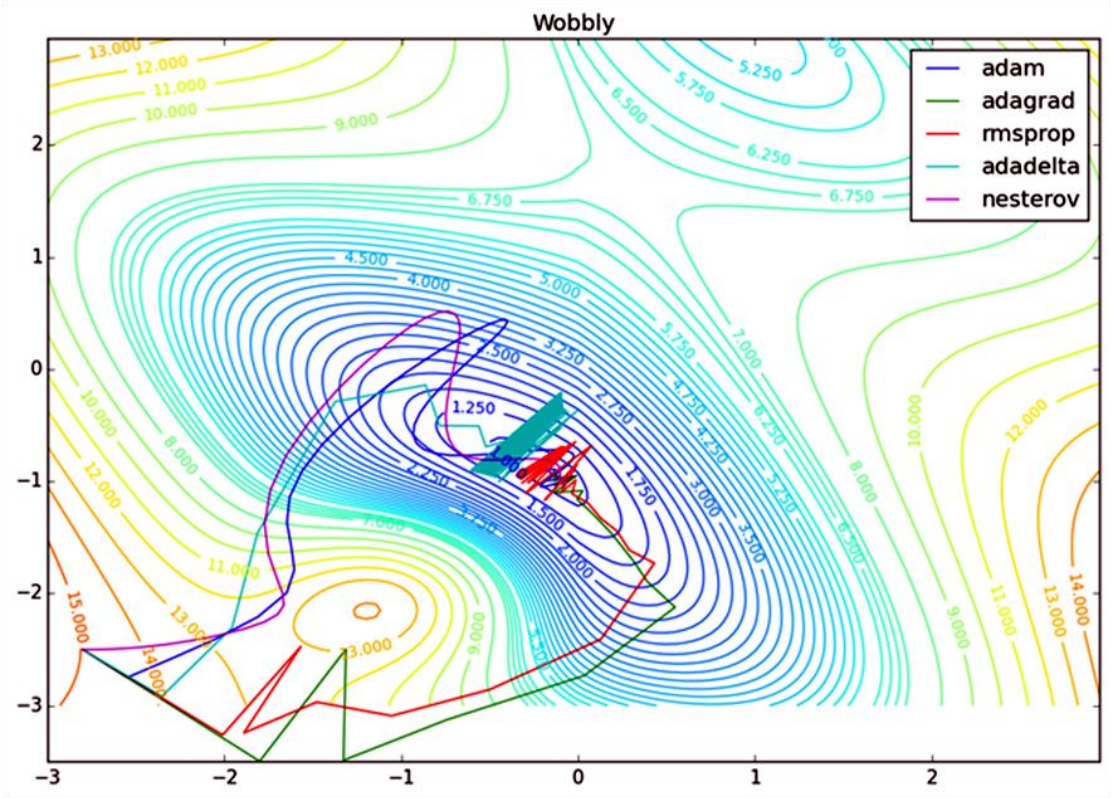
$$u_t = \lim_{p\to\infty} v_t^{\frac{1}{p}} = \lim_{p\to\infty}\left[\beta_2^p v_{t-1} + (1-\beta_2^p)|g_t|^p\right] = \lim_{p\to\infty}\left(\sum_{i=1}^{t}\beta_2^{p(t-i)}|g_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}$$
$$= max(\beta_2^{t-1}|g_1|, \beta_2^{t-2}|g_2|, \ldots, \beta_2|g_{t-1}|, |g_t|)$$

$$m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1-\beta_1) g_t$$

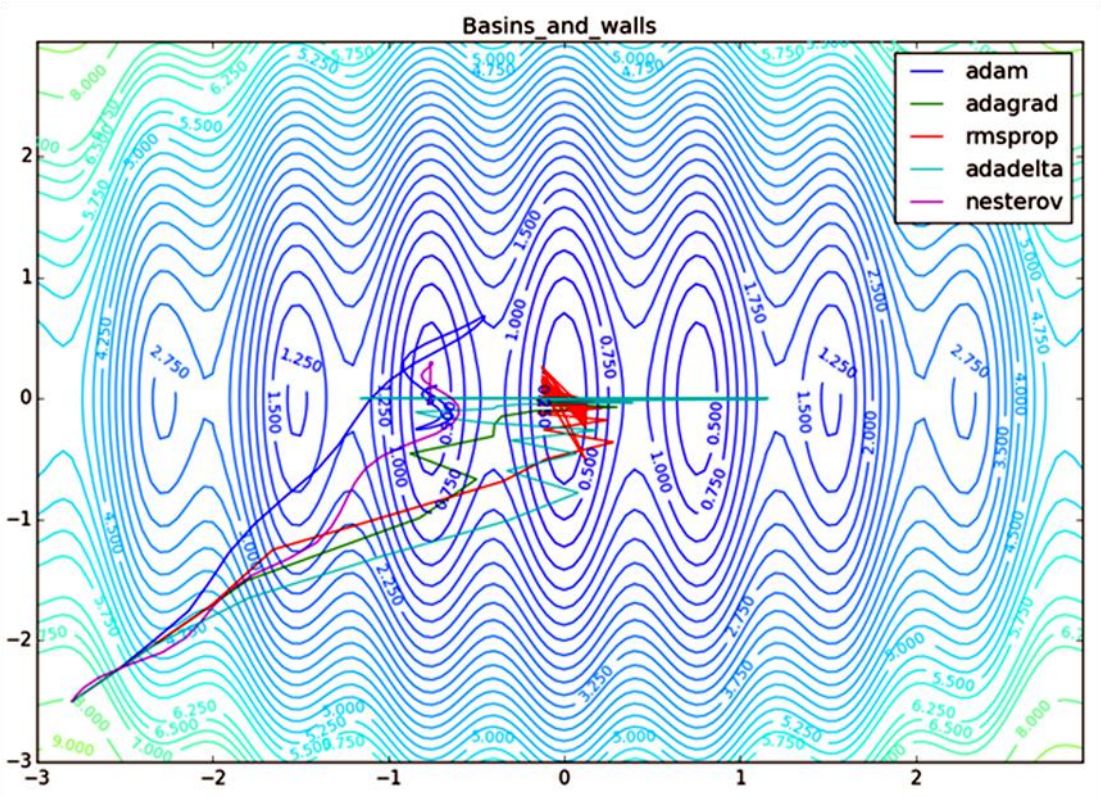
$$\hat{m}_t = \frac{m_t}{1-\beta_1^t}$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{u_t}\hat{m}_t$$

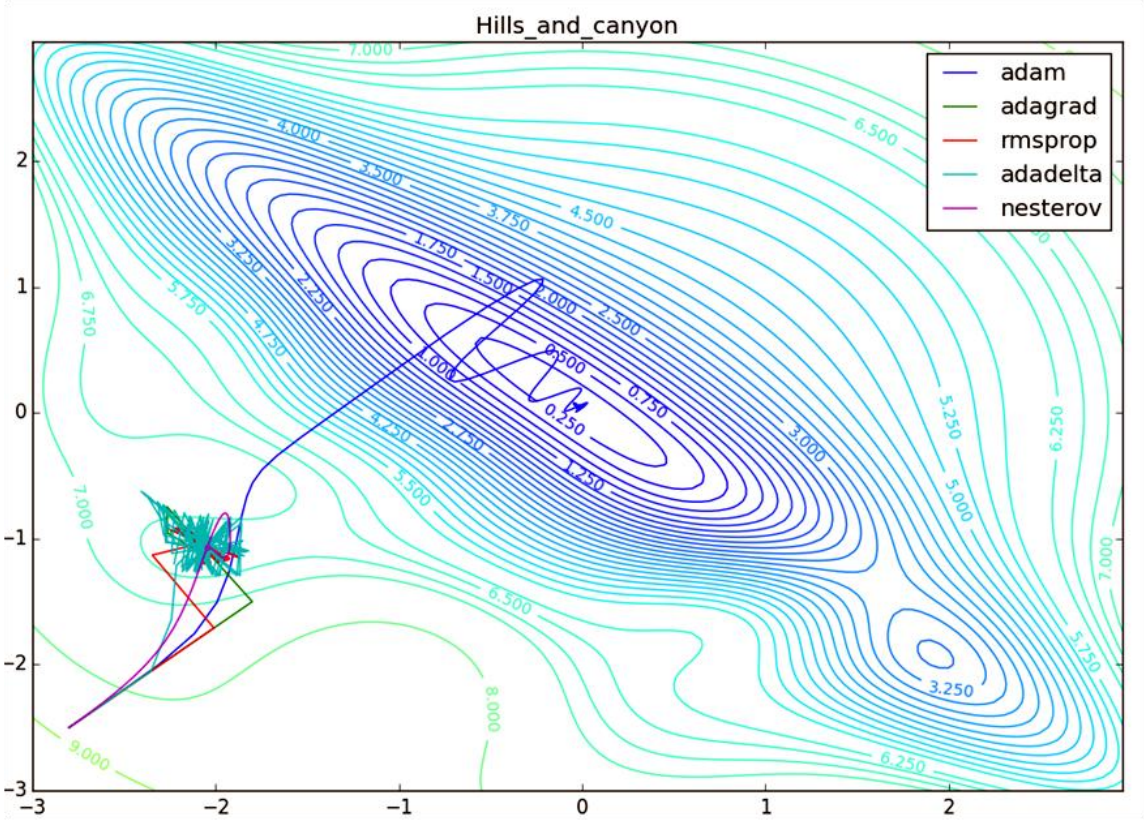
Обзор алгоритмов обучения. Эксперименты (1).



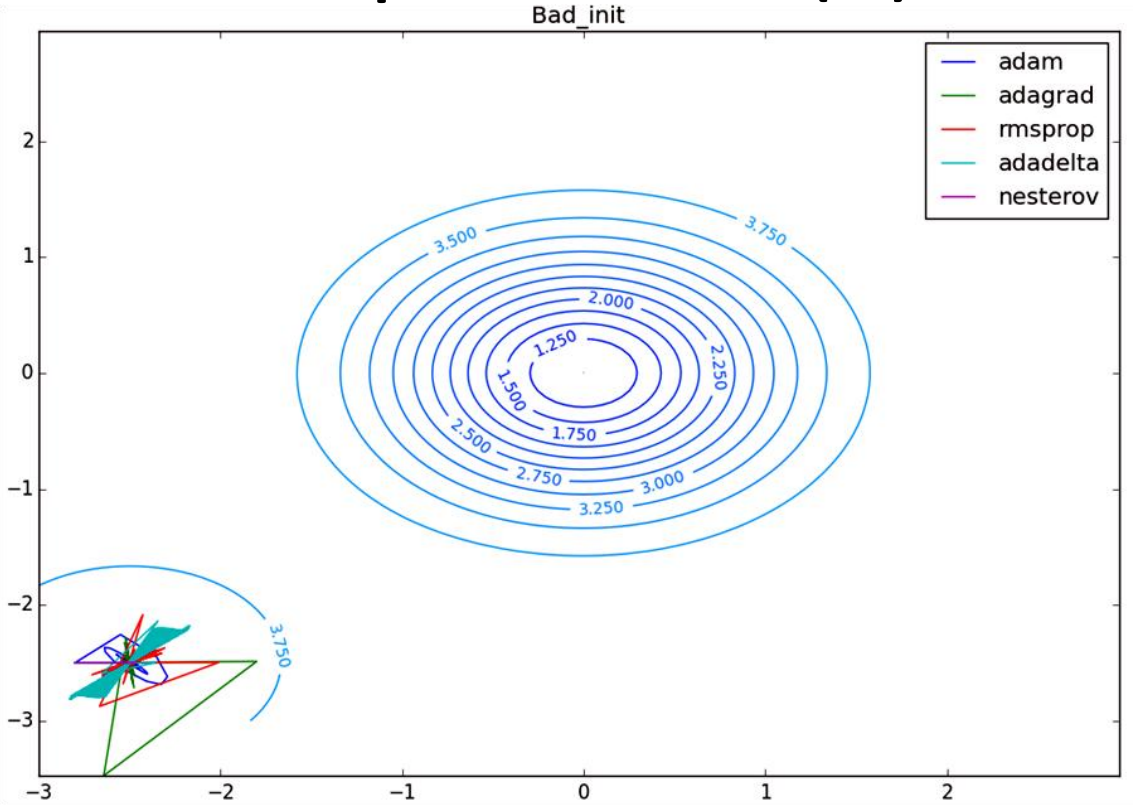
Обзор алгоритмов обучения. Эксперименты (2).



Обзор алгоритмов обучения. Эксперименты (3).



Обзор алгоритмов обучения. Эксперименты (4).



Алгоритм обучения AdaBelief.

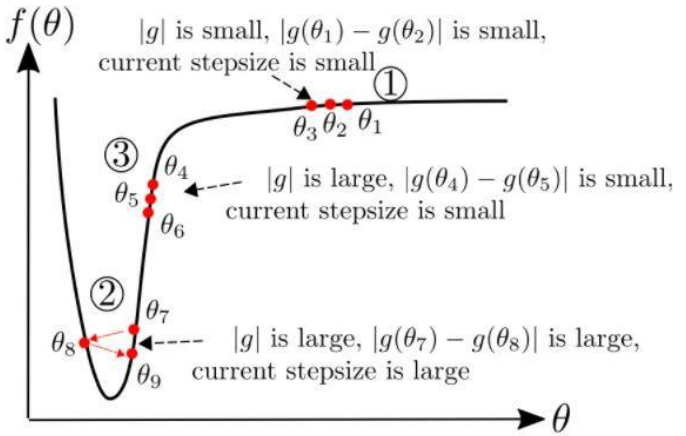
- AdaBelief : Adapting Stepsizes by the Belief in Observed Gradients (2020)
  - Высокая скорость сходимости;
  - Хорошая обобщающая способность

Algorithm 1: Adam Optimizer

Initialize $\theta_0, m_0 \leftarrow 0, v_0 \leftarrow 0, t \leftarrow 0$
While θ_t not converged
$t \leftarrow t+1$
$g_t \leftarrow \nabla_\theta f_t(\theta_{t-1})$
$m_t \leftarrow \beta_1 m_{t-1} + (1-\beta_1) g_t$
$v_t \leftarrow \beta_2 v_{t-1} + (1-\beta_2) g_t^2$
Bias Correction
$\widehat{m_t} \leftarrow \frac{m_t}{1-\beta_1^t}, \widehat{v_t} \leftarrow \frac{v_t}{1-\beta_2^t}$
Update
$\theta_t \leftarrow \prod_{\mathcal{F}, \sqrt{\widehat{v_t}}} \left(\theta_{t-1} - \frac{\alpha \widehat{m_t}}{\sqrt{\widehat{v_t}} + \epsilon} \right)$

Algorithm 2: AdaBelief Optimizer

Initialize $\theta_0, m_0 \leftarrow 0, s_0 \leftarrow 0, t \leftarrow 0$
While θ_t not converged
$t \leftarrow t+1$
$g_t \leftarrow \nabla_\theta f_t(\theta_{t-1})$
$m_t \leftarrow \beta_1 m_{t-1} + (1-\beta_1) g_t$
$s_t \leftarrow \beta_2 s_{t-1} + (1-\beta_2)(g_t - m_t)^2$
Bias Correction
$\widehat{m_t} \leftarrow \frac{m_t}{1-\beta_1^t}, \widehat{s_t} \leftarrow \frac{s_t+\epsilon}{1-\beta_2^t}$
Update
$\theta_t \leftarrow \prod_{\mathcal{F}, \sqrt{\widehat{s_t}}} \left(\theta_{t-1} - \frac{\alpha \widehat{m_t}}{\sqrt{\widehat{s_t}} + \epsilon} \right)$

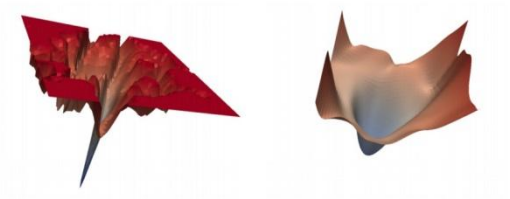


	Область 1	Область 2	Область 3
SGD/Момент	-	-	+
Adam	+	+	-
AdaBelief	+	+	+

https://arxiv.org/abs/2010.07468

Алгоритм обучения SAM.

- SAM: Sharpness-aware Minimization (2020)
  - Поиск минимума в окрестности с близкими значениями → повышение обобщающей способности



$$L_S(\boldsymbol{w}) \triangleq \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} l(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{y}_i)$$

$$L_{\mathscr{D}}(\boldsymbol{w}) \triangleq \mathbb{E}_{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\sim D}[l(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})]$$

$$L_{\mathscr{D}}(\boldsymbol{w}) \leq \max_{\|\boldsymbol{\epsilon}\|_2 \leq \rho} L_{\mathcal{S}}(\boldsymbol{w}+\boldsymbol{\epsilon}) + h\left(\frac{\|\boldsymbol{w}\|_2^2}{\rho^2}\right)$$

$$L_{\mathcal{S}}^{SAM}(\boldsymbol{w}) \triangleq \max_{||\boldsymbol{\epsilon}||_p \leq \rho} L_S(\boldsymbol{w}+\boldsymbol{\epsilon})$$

$$\nabla_{\boldsymbol{w}} L_{\mathcal{S}}^{SAM}(\boldsymbol{w}) \approx \nabla_{\boldsymbol{w}} L_{\mathcal{S}}(w)|_{\boldsymbol{w}+\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{w})}$$

$$\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{w}) = \rho\ \text{sign}\left(\nabla_{\boldsymbol{w}} L_{\mathcal{S}}(\boldsymbol{w})\right) \frac{|\nabla_{\boldsymbol{w}} L_{\mathcal{S}}(\boldsymbol{w})|^{q-1}}{\left(\|\nabla_{\boldsymbol{w}} L_{\mathcal{S}}(\boldsymbol{w})\|_q^q\right)^{1/p}}$$

https://arxiv.org/abs/2010.01412

Input: Training set $\mathcal{S} \triangleq \cup_{i=1}^{n}\{(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{y}_i)\}$, Loss function $l : \mathcal{W} \times \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \to \mathbb{R}_+$, Batch size b, Step size $\eta > 0$, Neighborhood size $\rho > 0$.
Output: Model trained with SAM
Initialize weights $\boldsymbol{w}_0$, $t = 0$;
while *not converged* **do**
  Sample batch $\mathcal{B} = \{(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{y}_1), ...(\boldsymbol{x}_b, \boldsymbol{y}_b)\}$;
  Compute gradient $\nabla_{\boldsymbol{w}} L_{\mathcal{B}}(\boldsymbol{w})$ of the batch's training loss;
  Compute $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{w})$ per equation 2;
  Compute gradient approximation for the SAM objective (equation 3): $\boldsymbol{g} = \nabla_w L_{\mathcal{B}}(\boldsymbol{w})|_{\boldsymbol{w}+\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{w})}$;
  Update weights: $\boldsymbol{w}_{t+1} = \boldsymbol{w}_t - \eta \boldsymbol{g}$;
  $t = t + 1$;
end
return $\boldsymbol{w}_t$

Algorithm 1: SAM algorithm

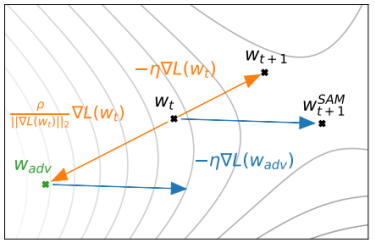


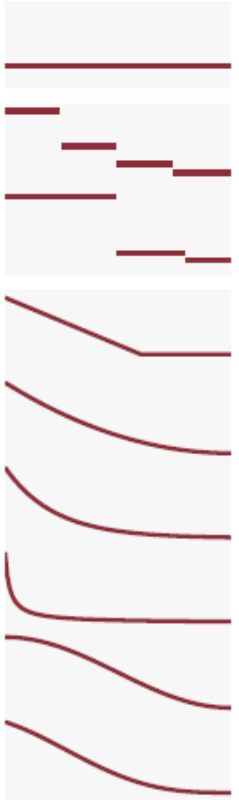
Figure 2: Schematic of the SAM parameter update.

- Применение стандартных оптимизаторов
- Специальная функция потерь
- Удвоенные вычислительные затраты

Изменение скорости обучения

- Изменение скорости обучения повышает эффективность обучения НС.
- Существует множество схем изменения скорости обучения.
- Простейшие схемы:
  - Ступенчатое уменьшение
    - в ***к*** раз каждые ***n*** итераций обучения;
    - уменьшение коэффициента обучения, если ошибка на подтверждающей выборке перестала уменьшаться.
  - Экспоненциальное $\eta = \alpha_0 e^{-\beta t}$
  - Гиперболическое $\eta = \frac{\alpha_0}{1+\beta t}$

Схемы изменения скорости обучения (1)

Name		Ref.	Illustration
Constant			
Step Decay	constant factor		
	multi-step		
Smooth Decay	linear decay	e.g. (Goodfellow et al., 2016)	
	polynomial decay		
	exponential decay		
	inverse time decay	e.g. (Bottou, 2012)	
	cosine decay	(Loshchilov & Hutter, 2017)	
	linear cosine decay	(Bello et al., 2017)	

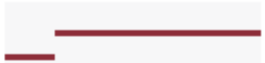
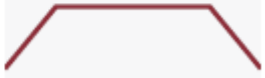
** https://arxiv.org/abs/2007.01547*

Схемы изменения скорости обучения (2)

Name		Ref.	Illustration
Cyclical	triangular	(Smith, 2017)	
	triangular + decay	(Smith, 2017)	
	triangular + exponential decay	(Smith, 2017)	
	cosine + warm restarts	(Loshchilov & Hutter, 2017)	
	cosine + warm restarts + decay	(Loshchilov & Hutter, 2017)	

** https://arxiv.org/abs/2007.01547*

Схемы изменения скорости обучения (3)

Name		Ref.	Illustration
Warmup	constant warmup	e.g. (He et al., 2016)	
	gradual warmup	(Goyal et al., 2017)	
	gradual warmup + multi-step decay	(Goyal et al., 2017)	
	gradual warmup + step number decay	(Vaswani et al., 2017)	
	slanted triangular	(Howard & Ruder, 2018)	
	long trapezoid	(Xing et al., 2018)	
Super-Convergence	1cycle	(Smith & Topin, 2017)	

** https://arxiv.org/abs/2007.01547*

Сравнение оптимизаторов

- R.M. Schmidt, et al., 2021 (*https://arxiv.org/abs/2007.01547)*
- <15 оптимизаторов> x <8 задач> x <4 схемы изменения скорости обучения> x <4 вида настройки гиперпараметров>
- **Выводы:**
  - **Не существует «лучшего» оптимизатора, эффективность зависит от задачи.**
  - **Есть пул наиболее стабильных оптимизаторов: Adam, NAG, RMSProp, … .**
  - **Проверка разных оптимизаторов (с настройками по-умолчанию) ≈ настройка гиперпараметров для одного оптимизатора.**
  - **Эффективность схемы изменения скорости обучения зависит от задачи.**
  - **Направление будущих исследований: разработка методов эффективных для конкретных типов задач, автоматическая оптимизация внутренних параметров, новые типы алгоритмов.**

Вопросы

- ❑ Основные проблемы обучения НС
- ❑ Почему в алгоритмах обучения не применяют методы оптмизации 2-го порядка?
- ❑ Отличие обучения с моментом от момента Нестерова?