

Методы оптимизации в глубоком обучении

Андрей Бояров



Recap: Многоклассовая классификация

$$p(y = 1 | x) = \frac{1}{1 + \exp(-\langle w, x \rangle)}$$

- Как быть, если классов больше, чем два? Предположим, что классов 3

$$\sigma(\vec{z})_i = \frac{e^{z_i}}{\sum_{j=1}^K e^{z_j}}$$

σ = softmax

\vec{z} = input vector

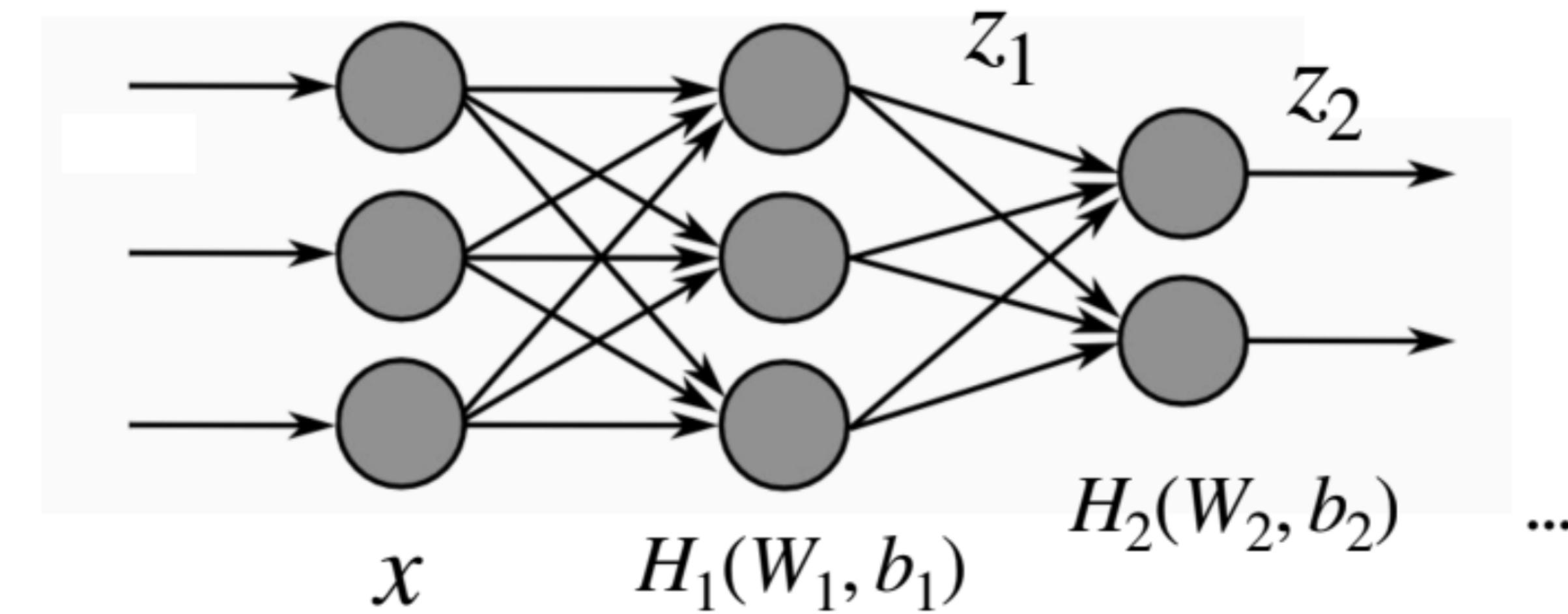
e^{z_i} = standard exponential function for input vector

K = number of classes in the multi-class classifier

e^{z_j} = standard exponential function for output vector

$$\text{softmax} \left(\begin{bmatrix} w_{00} & w_{01} \\ w_{10} & w_{11} \\ w_{20} & w_{21} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} z_0 \\ z_1 \\ z_2 \end{bmatrix}$$

Recap: многослойная сеть



$$z_1 = \text{Activation}(H_1(x)) = \text{Activation}(W_1 \times x + b_1)$$

$$z_2 = \text{Activation}(H_2(z_1)) = \text{Activation}(W_2 \times z_1 + b_2)$$

$$W^{t+1} = W^t - \eta \times \nabla Loss_W$$

Recap: Метод обратного распространения ошибки

x = input

$z = Wx + b_1$

$h = \text{ReLU}(z)$

$\theta = Uh + b_2$

$\hat{y} = \text{softmax}(\theta)$

$J = CE(y, \hat{y})$

Какие градиенты нам нужно посчитать, чтобы обновить веса слоёв?

$$\frac{\partial J}{\partial U}$$

$$\frac{\partial J}{\partial b_2}$$

$$\frac{\partial J}{\partial W}$$

$$\frac{\partial J}{\partial b_1}$$

Какие эффективно посчитать эти градиенты?

Ответ: chain rule

$$\frac{\partial J}{\partial U} = \frac{\partial J}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial U}$$

$$\frac{\partial J}{\partial b_2} = \frac{\partial J}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial b_2}$$

Recap: backprop одномерный случай

Backpropagation: a simple example

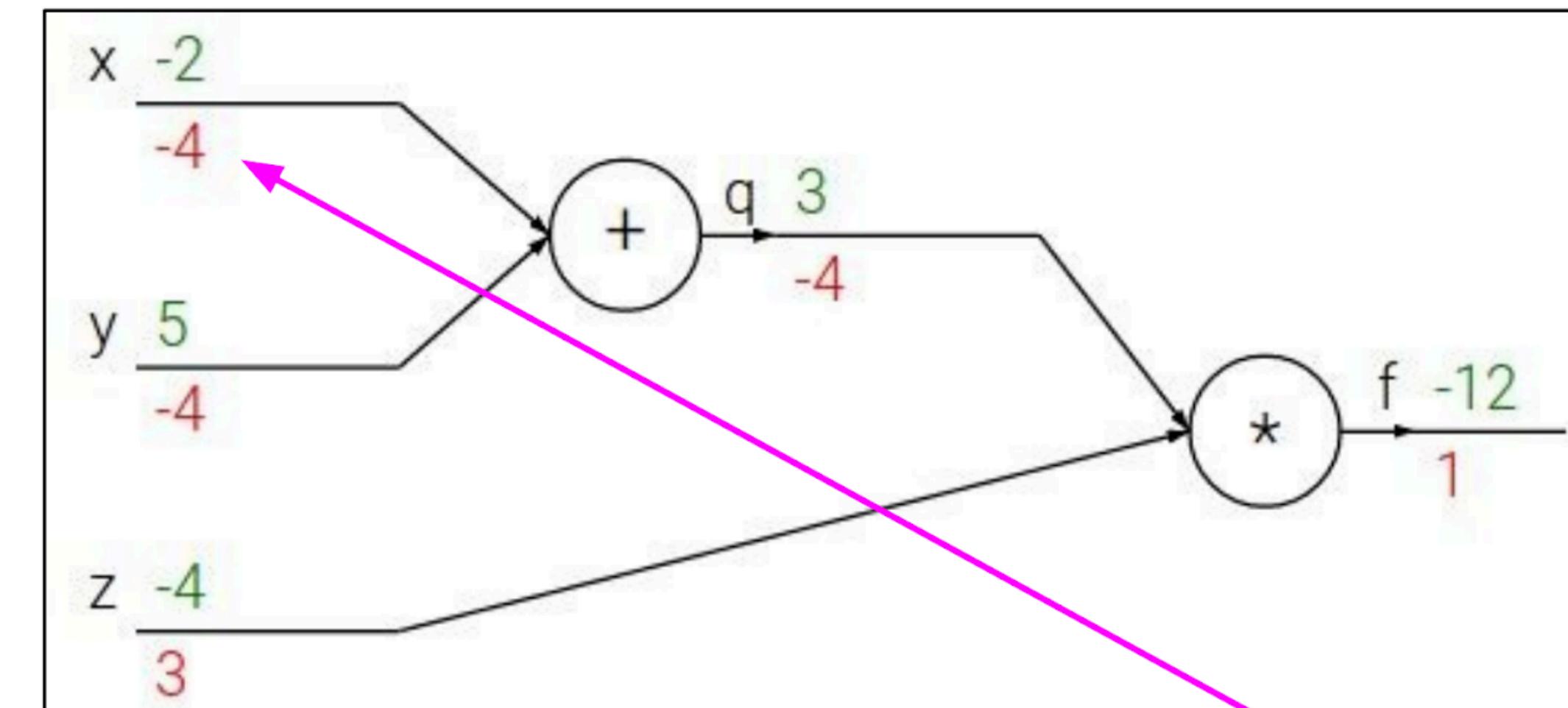
$$f(x, y, z) = (x + y)z$$

e.g. $x = -2$, $y = 5$, $z = -4$

$$q = x + y \quad \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \frac{\partial q}{\partial y} = 1$$

$$f = qz \quad \frac{\partial f}{\partial q} = z, \frac{\partial f}{\partial z} = q$$

Want: $\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}$



Chain rule:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial x}$$

Upstream
gradient Local
gradient

$$\frac{\partial f}{\partial x}$$

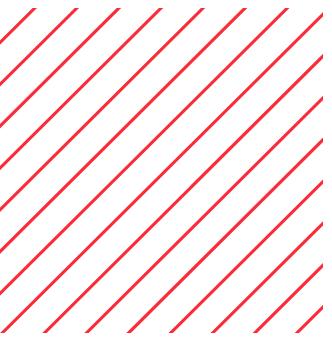
Recap: Якобиан

$$\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = [f_1(x_1, \dots, x_n), f_2(x_1, \dots, x_n), \dots, f_m(x_1, \dots, x_n)]$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} w_{01} & w_{02} & w_{03} \\ w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$



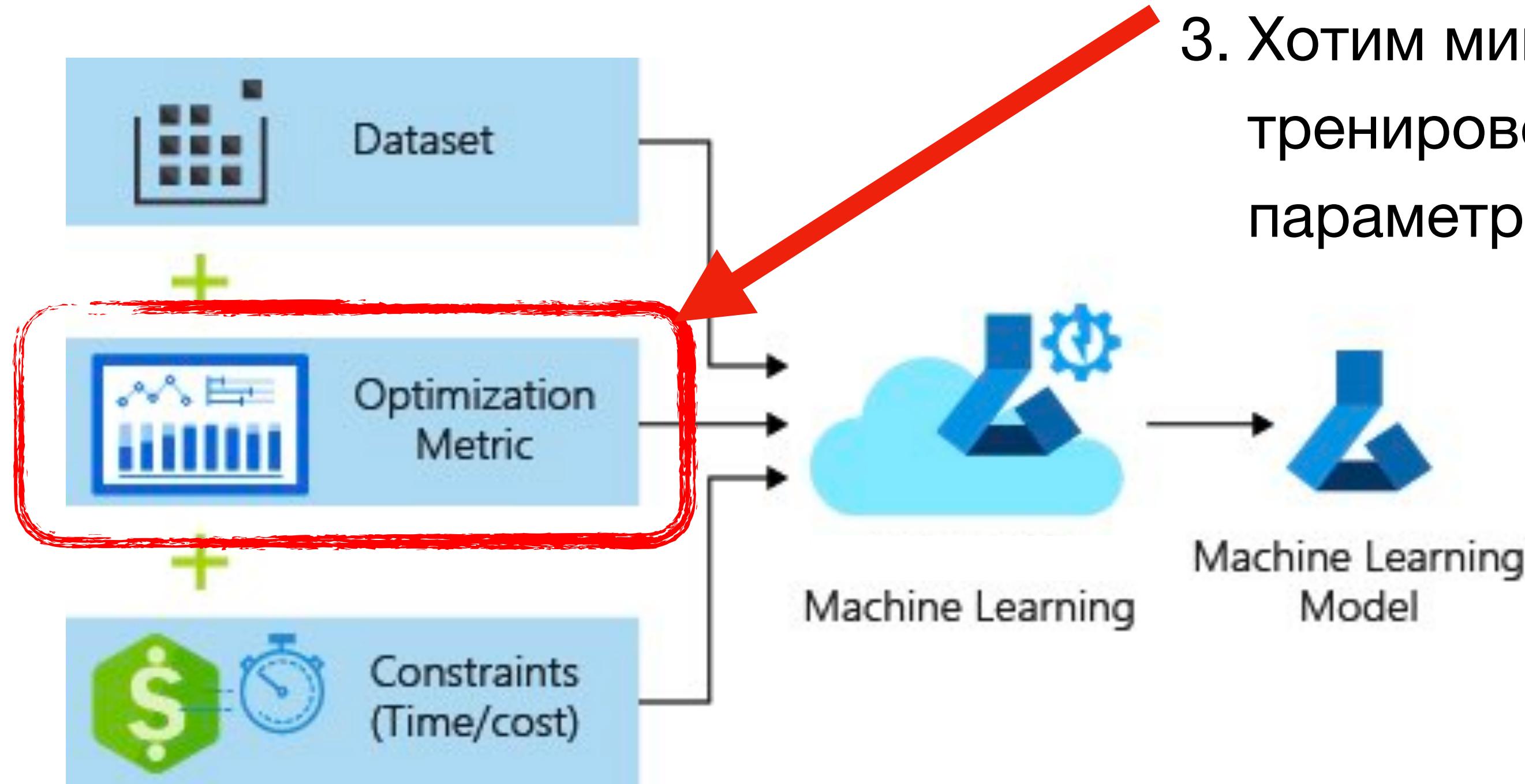
План лекции

1. Постановка задачи оптимизации в машинном обучении
2. Сложности оптимизации глубоких нейронных сетей
3. Методы оптимизации
4. Learning rate
5. Регуляризация
6. Адаптация нейронных сетей с помощью оптимизации

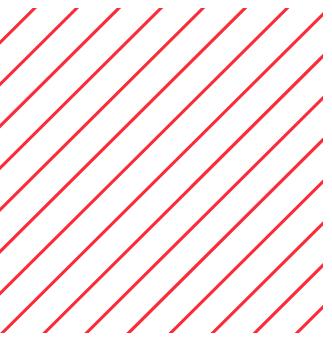
Постановка задачи оптимизации в машинном обучении



Machine learning pipeline



1. Параметризованная модель
2. Функция потерь
3. Хотим минимизировать функцию потерь на тренировочных данных путём подбора параметров модели



Примеры функций потерь

- Классификация
 - Бинарная: $l(\hat{f}, X, Y) = I\{\hat{f}(X) \neq Y\}$ ($\hat{f}(X), Y \in \{-1, 1\}$)
 - Hinge loss: $l(\hat{f}, X, Y) = \max\{0, 1 - Y\hat{f}(X)\}$
 - Softmax
- Регрессия: $l(\hat{f}, X, Y) = (\hat{f}(X) - Y)^2$ ($\hat{f}(X), Y \in \{-1, 1\}$)

Empirical risk minimization (ERM)

Введём некоторую **меру на семействе алгоритмов** F :

$$L(\hat{f}) = E_{X,Y} \left[l\left(\hat{f}_{\{x_i, y_i\}_{i=1}^n}, X, Y\right) \middle| \{x_i, y_i\}_{i=1}^n \right], \text{ for } \hat{f} = \hat{f}_{\{x_i, y_i\}_{i=1}^n} \in F$$

Оценка по принципу **минимизации эмпирического риска**:

$$\hat{f}_{ERM} = \arg \min_{f \in F} \sum_{i=1}^n l(f, x_i, y_i), \quad L(f_*) = \inf_{f \in F} L(f)$$

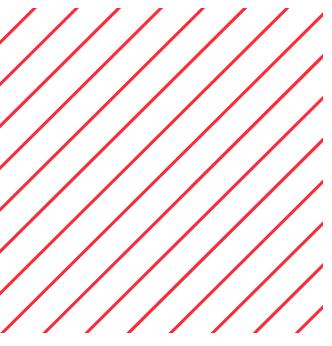
Статистическая теория обучения:

$$P \left(L(\hat{f}_{ERM}) - L(f_*) \leq C \sqrt{\frac{V}{n}} + \sqrt{\frac{2 \ln(\sigma^{-1})}{n}} \right) \geq 1 - \sigma,$$

где C - константа,

V - параметр семейства F , σ - уровень доверия

V – размерность Вапника-Червоненкиса (VC)



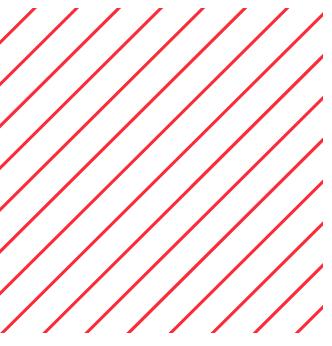
Maximum Likelihood Estimation (MLE)

Пусть $x_k, k = 1, \dots, n$ - н.о.р. с плотностью распределения $p_x(x|\theta)$

Оценка по методу максимума правдоподобия:

$$\begin{aligned}\tilde{\theta}_{MLE}(x) &= \arg \max_{\theta} p_x(x|\theta) = \arg \max_{\theta} \ln p_x(x|\theta) = \\ &= \arg \max_{\theta} \ln \prod_{i=1}^n p_{x_i}(x_i|\theta) = \arg \max_{\theta} \sum_{i=1}^n \ln p_{x_i}(x_i|\theta),\end{aligned}$$

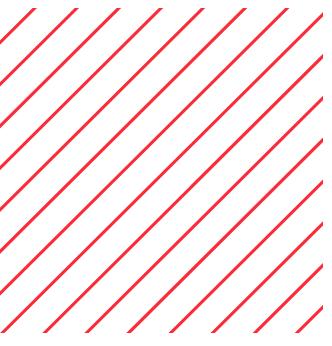
1. MLE-оценка является **состоятельной** при выполнении условий на $p_x(x|\theta)$
2. Из всех состоятельных оценок MLE-оценка является **наилучшей** (в смысле выполнения равенства Рао-Крамера)



Пример: метод наименьших квадратов

$$y_i = kx_i + b + \varepsilon_i \quad \varepsilon_i \in N(0, \sigma^2), \quad \theta = (k, b)^T,$$

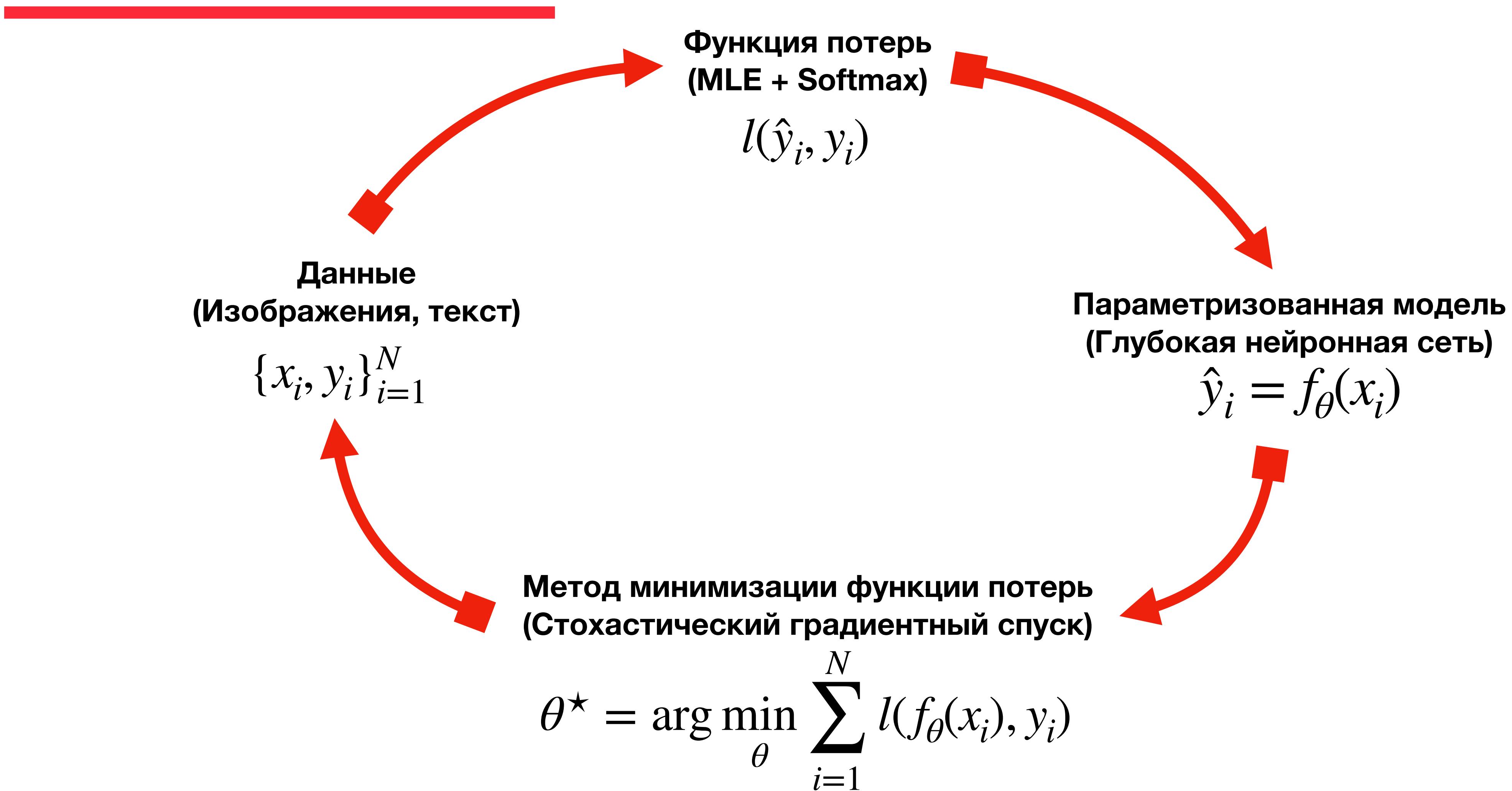
$$\mathbf{x} = A\theta + \varepsilon, \quad \mathbf{x} = \{y_i\}_{i=1}^n, \quad A = \begin{pmatrix} x_1 & \dots & x_n \\ 1 & \dots & 1 \end{pmatrix}^T, \quad \tilde{\theta}_{MLE}(\mathbf{x}) = \arg \min_{\theta} \|A\theta - \mathbf{x}\|_2^2.$$



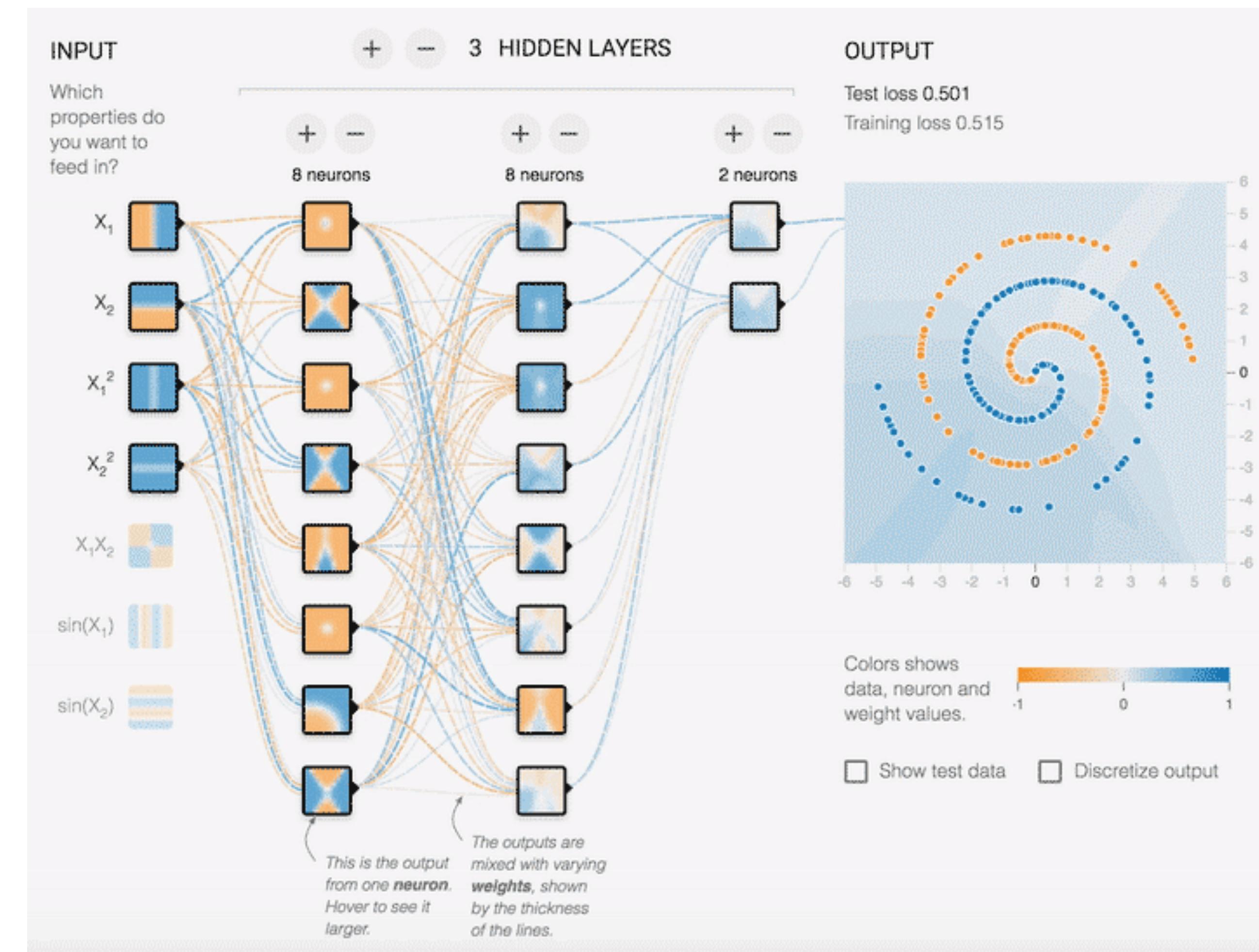
The No Free Lunch Theorem (Wolpert, 1996)

- Любой алгоритм классификации имеет в среднем **по всем возможным распределениям**, порождающим данные, **одинаковую вероятность ошибки** при классификации ранее не наблюдавшейся точки данных.
- К счастью, нам не нужно строить **универсальный** алгоритм машинного обучения.
- Нам нужно понять, какое **распределение данных** лучше всего подходит к решаемой нами задаче, и какой **алгоритм машинного обучения** лучше всего подойдёт для таких данных.

Задача оптимизации в машинном обучении



Пример: оптимизация параметров нейронной сети

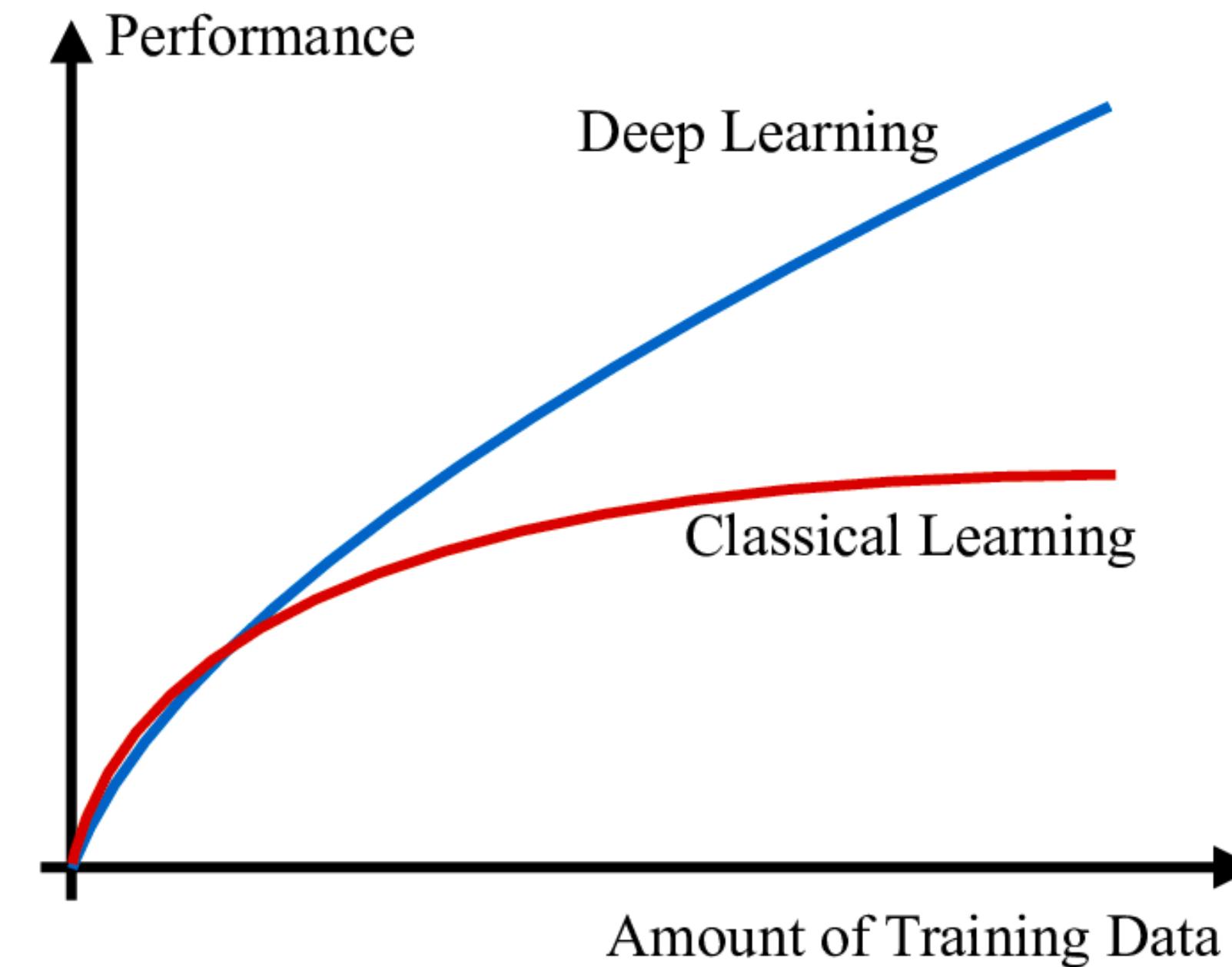


Сложности оптимизации глубоких нейронных сетей



Универсальная теорема аппроксимации (Cybenko, 1989)

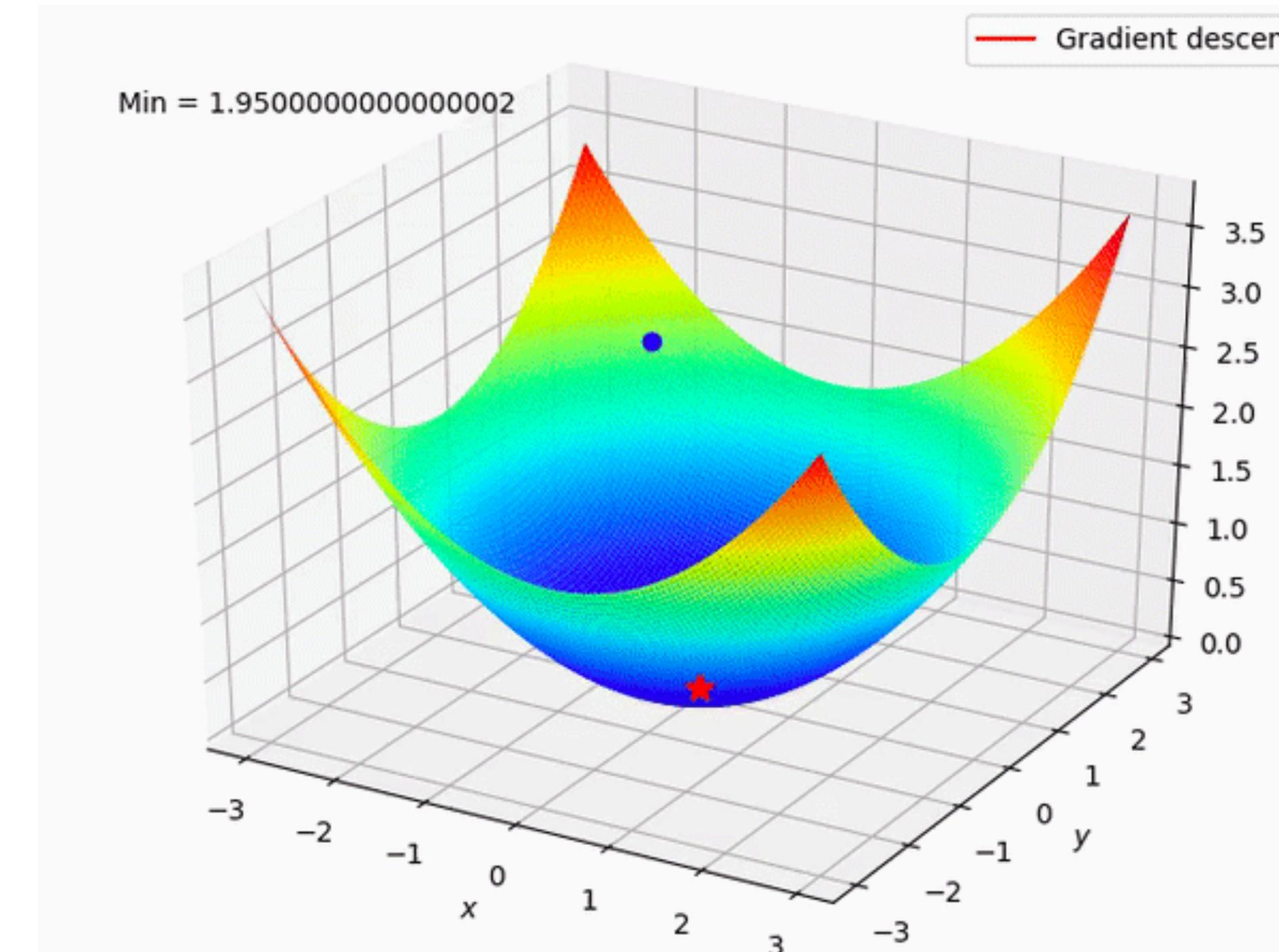
- Нейронная сеть прямого распространения сигнала с одним скрытым слоем может аппроксимировать **любую непрерывную функцию** многих переменных с **любой точностью**.
- Но для этого может понадобится **огромное количество нейронов** в этом скрытом слое.
- Поэтому используют **несколько слоёв**, что влечёт ряд сложностей.



Оптимизационная поверхность: логистическая регрессия

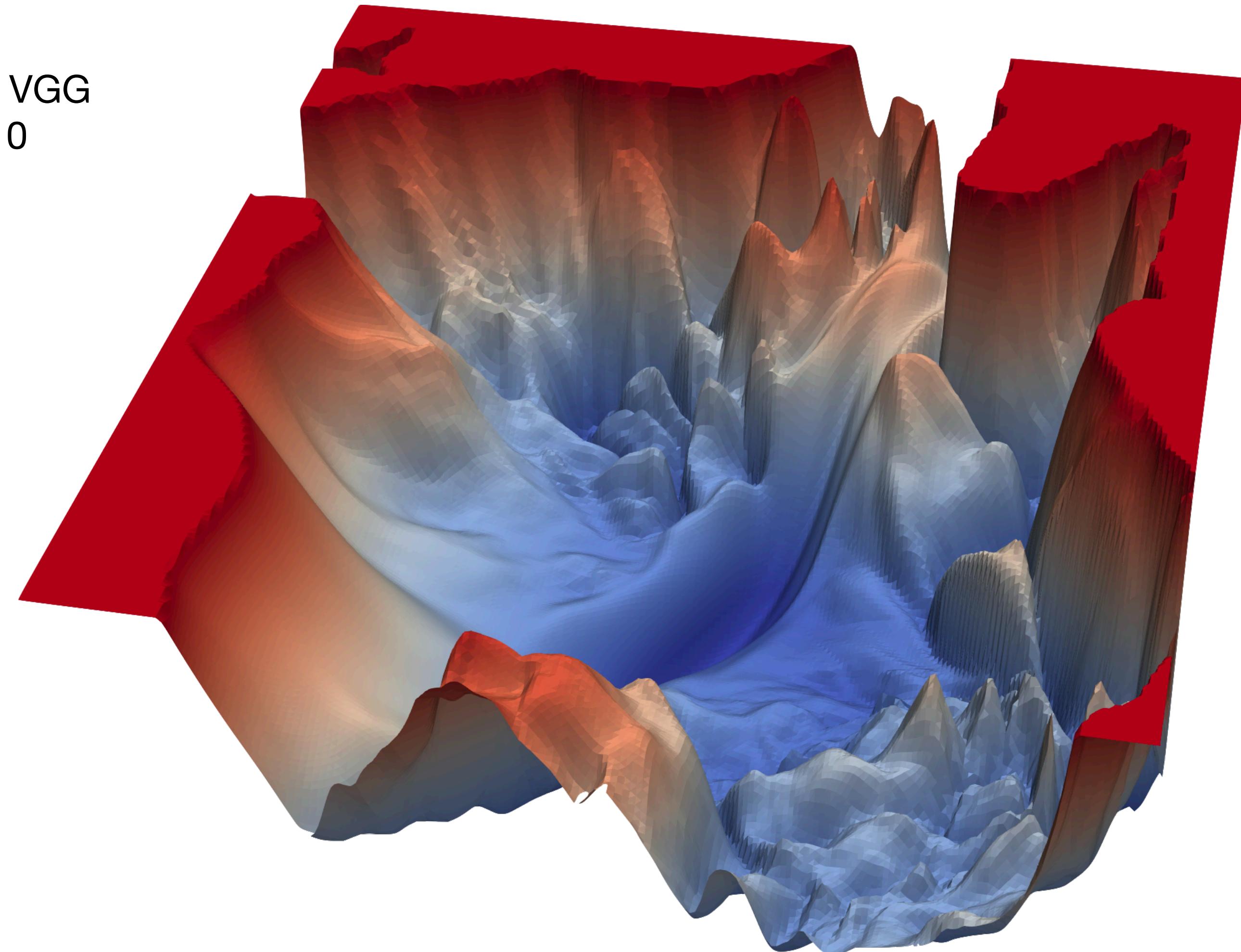
$$p(y = 1 | x) = \frac{1}{1 + \exp(-\langle w, x \rangle)}$$

MLE функция потерь:

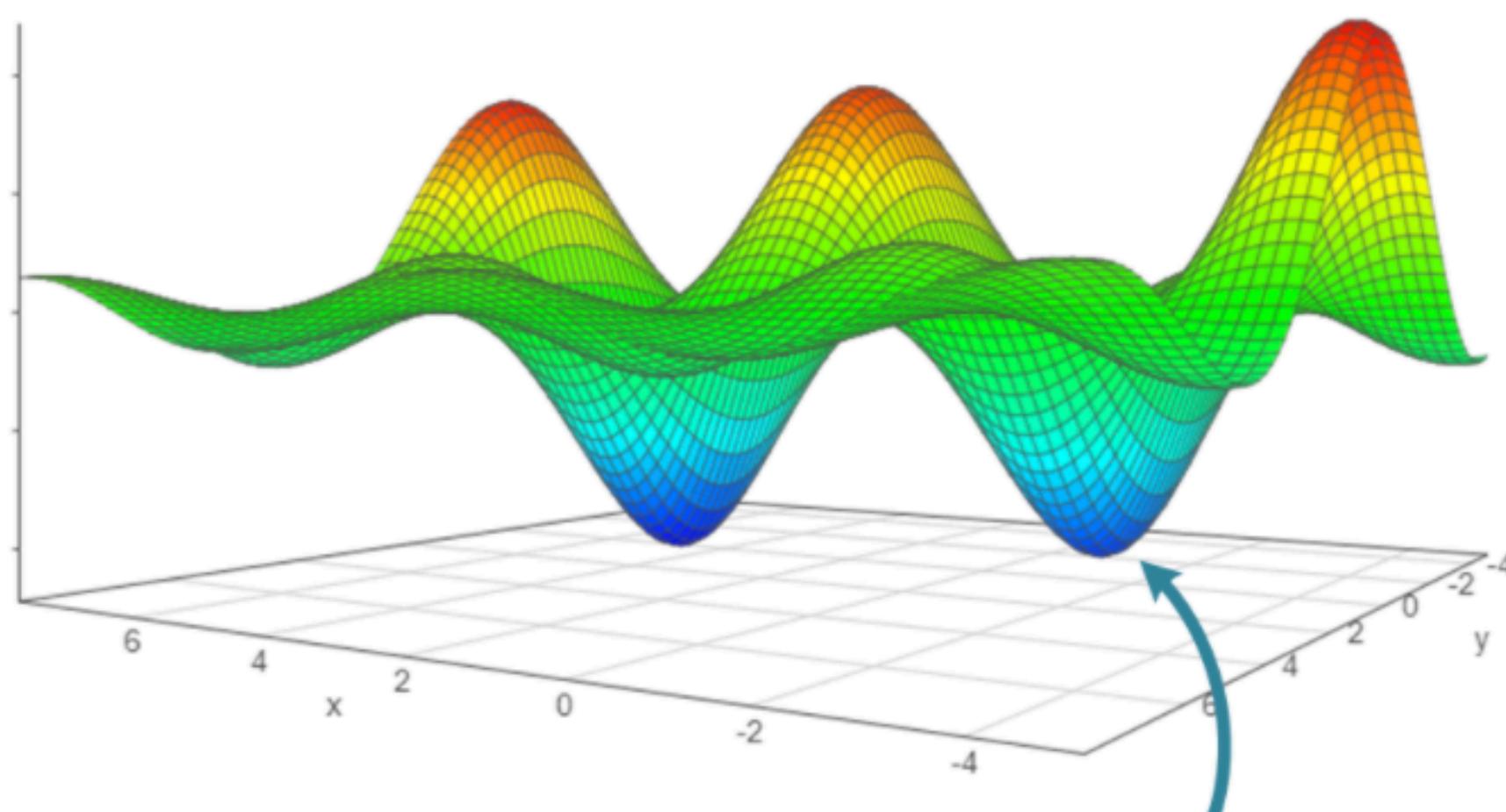


Оптимизационная поверхность: глубокая нейронная сеть

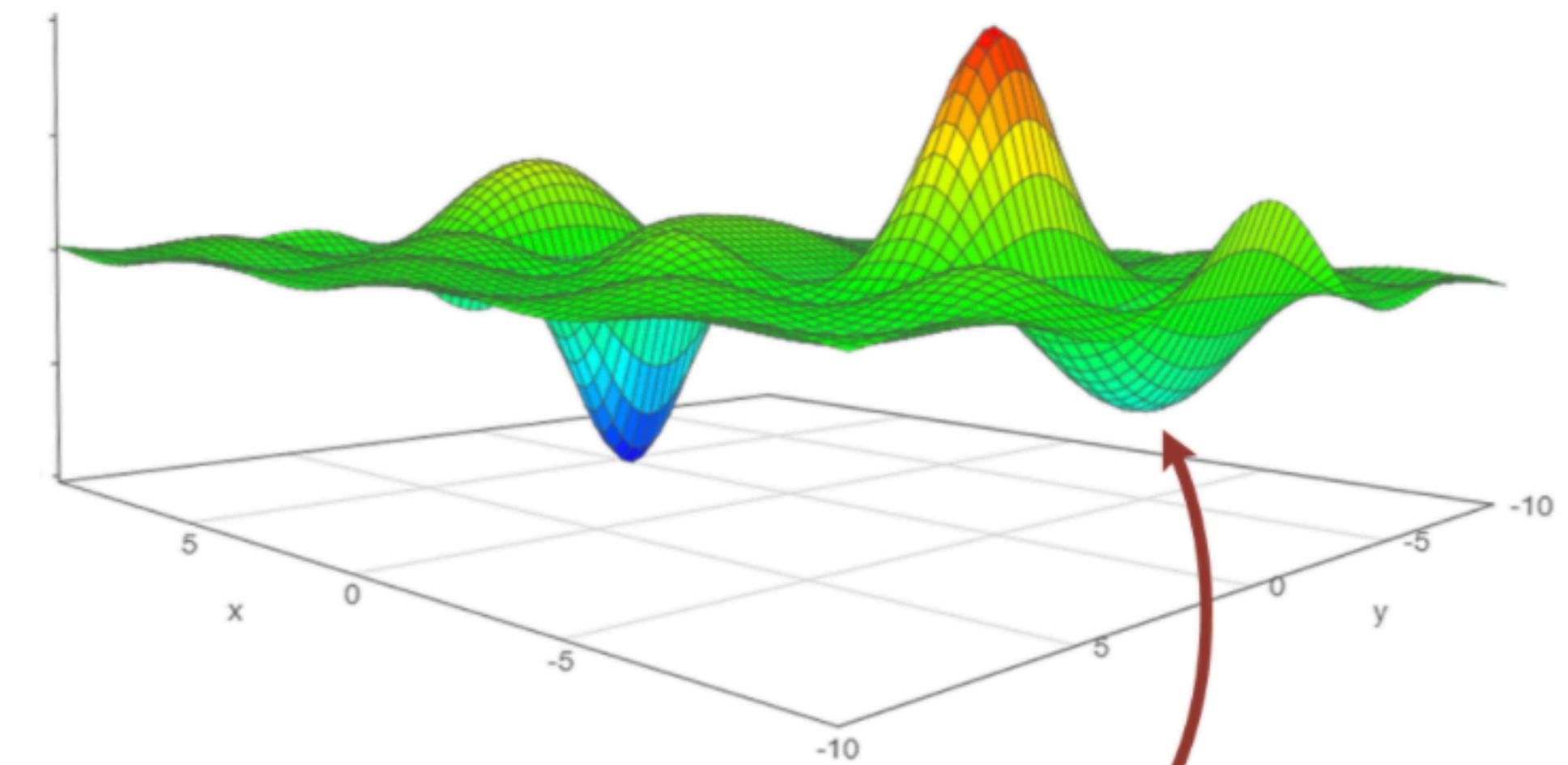
- Свёрточная сеть VGG
- Датасет: CIFAR-10



Локальные минимумы

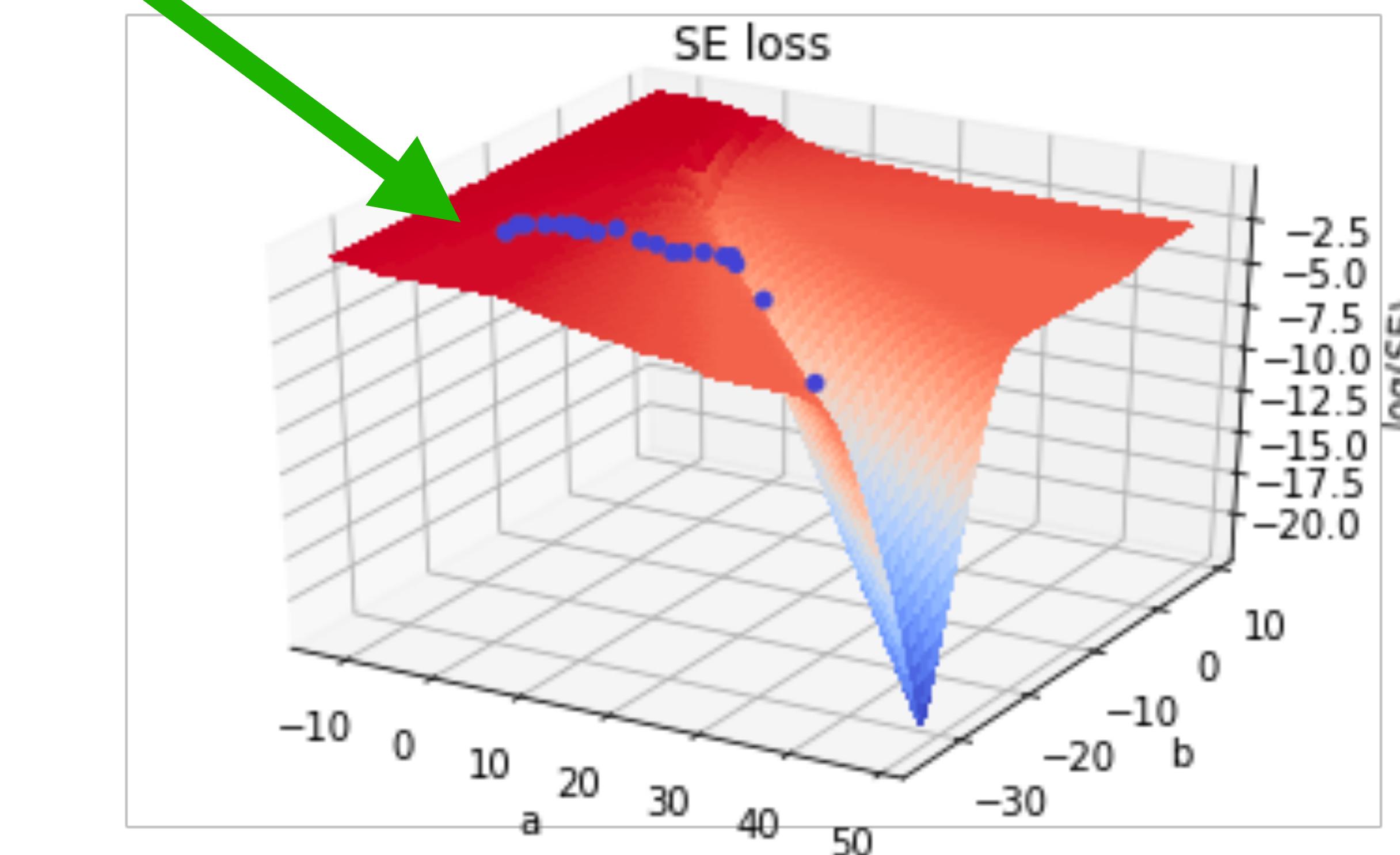


Good local minimum

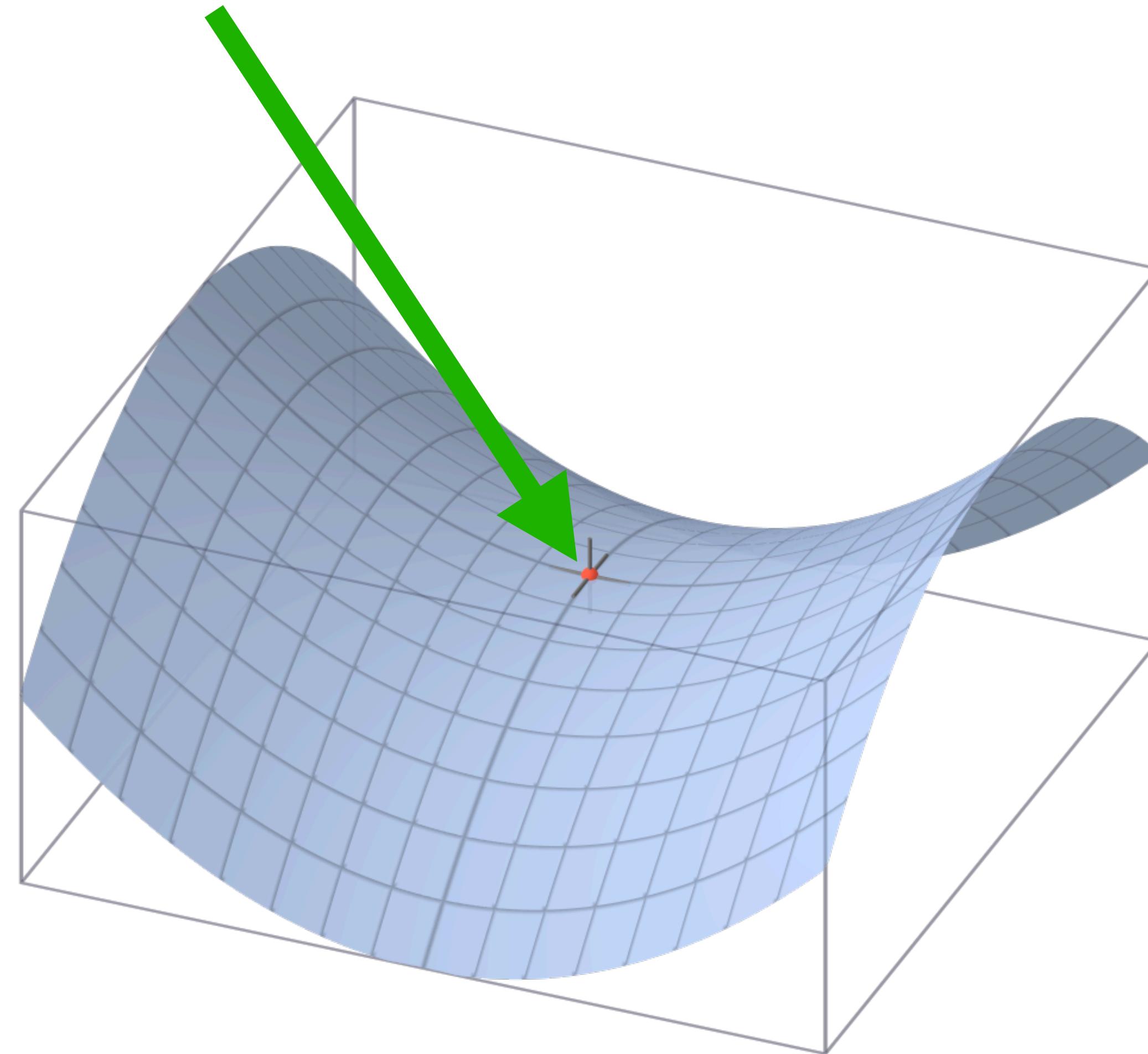


Poor local minimum

Плато



Седловая точка

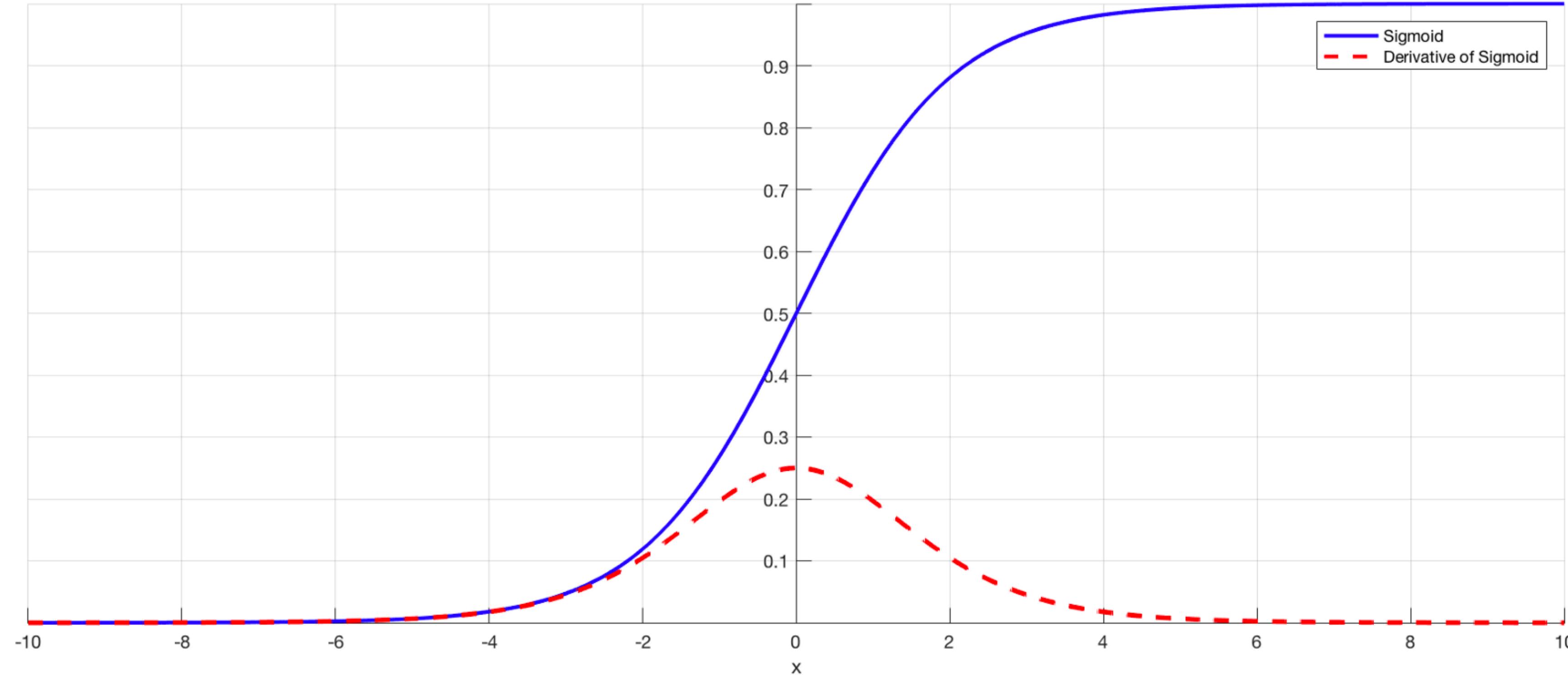


- Стационарная точка (производная равна 0)
- Не является экстремумом

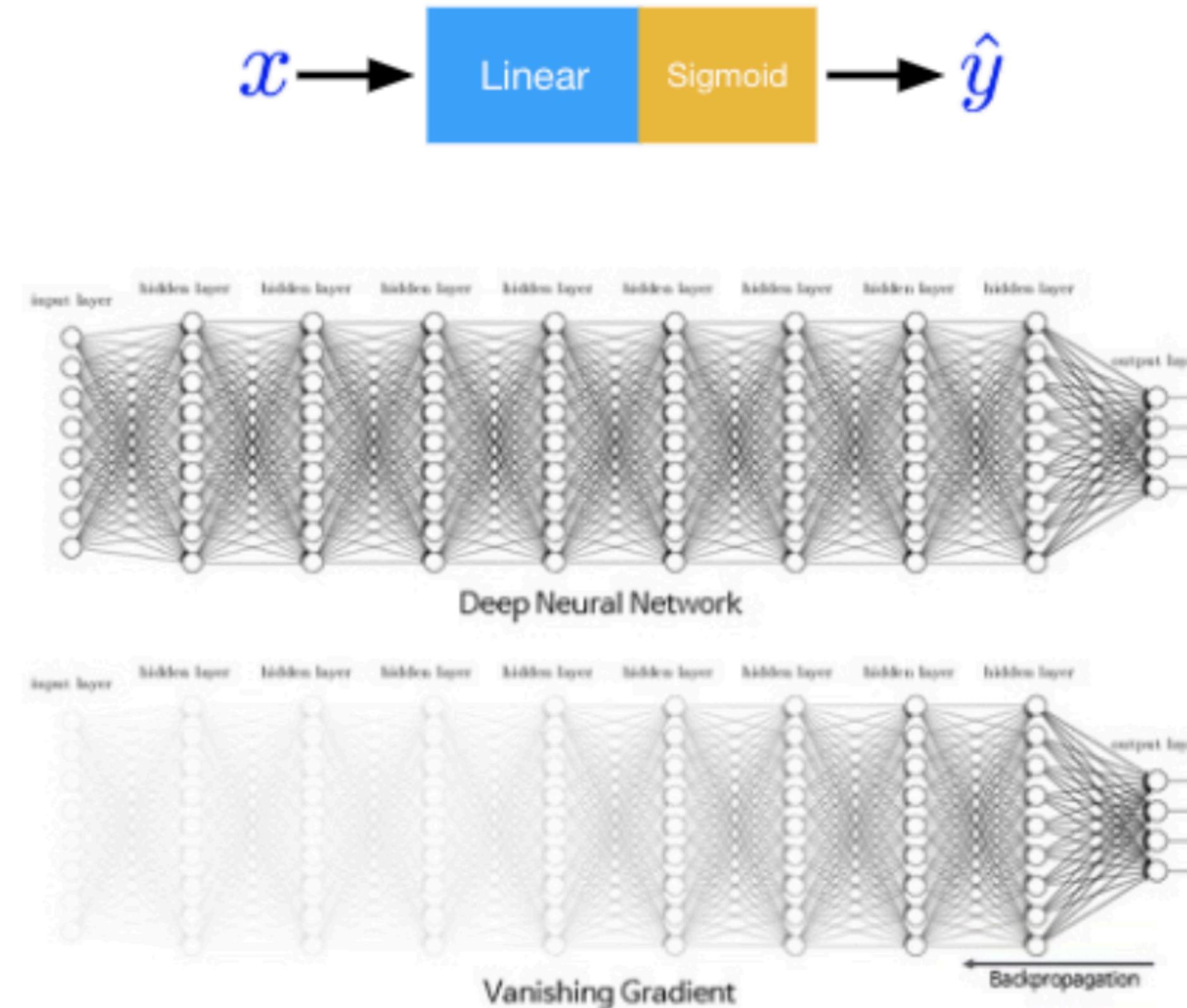
Размытие градиента (vanishing gradient)

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$

$$\sigma'(x) = \sigma(x)(1 - \sigma(x))$$



Размытие градиента (vanishing gradient)



- Варианты борьбы: другие функции активации (ReLU)
- Обратная ситуация: взрыв градиента (exploding gradient)

Методы оптимизации

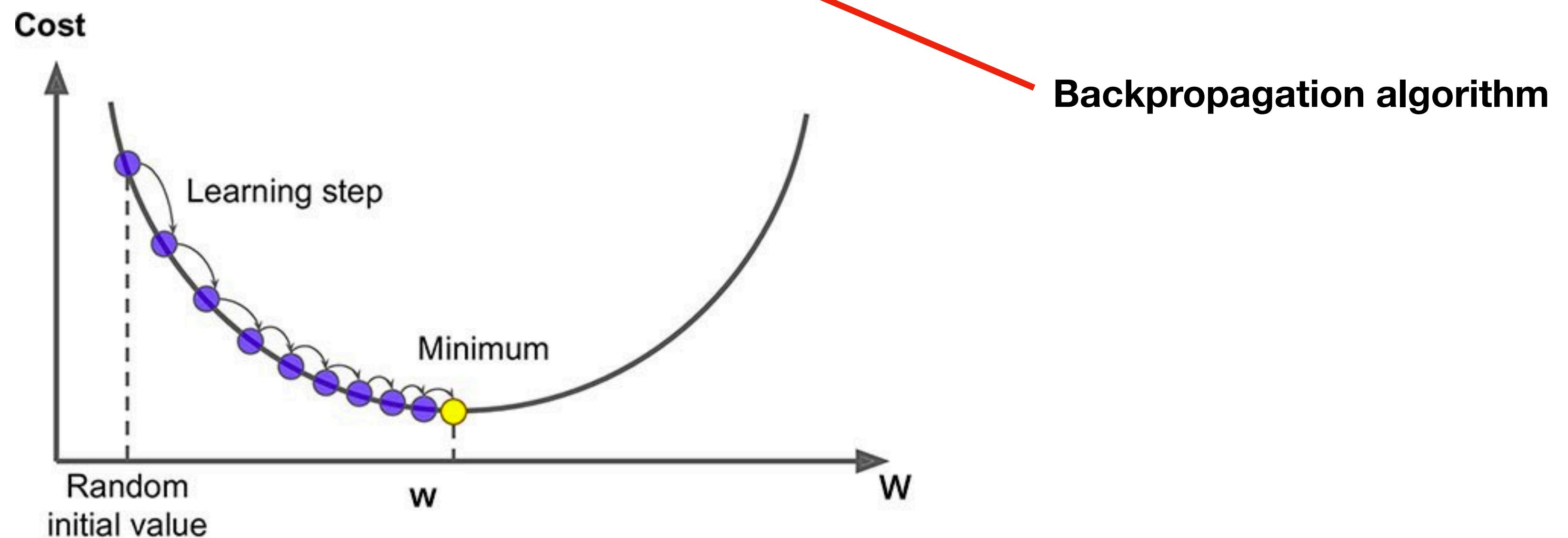


Gradient descent

ФУНКЦИЯ ПОТЕРЬ: $J(\theta) = \sum_{i=1}^N l(f_\theta(x_i), y_i)$, где N – все доступные тренировочные данные

η – шаг алгоритма (learning rate)

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta \nabla_{\theta} J(\theta)$$



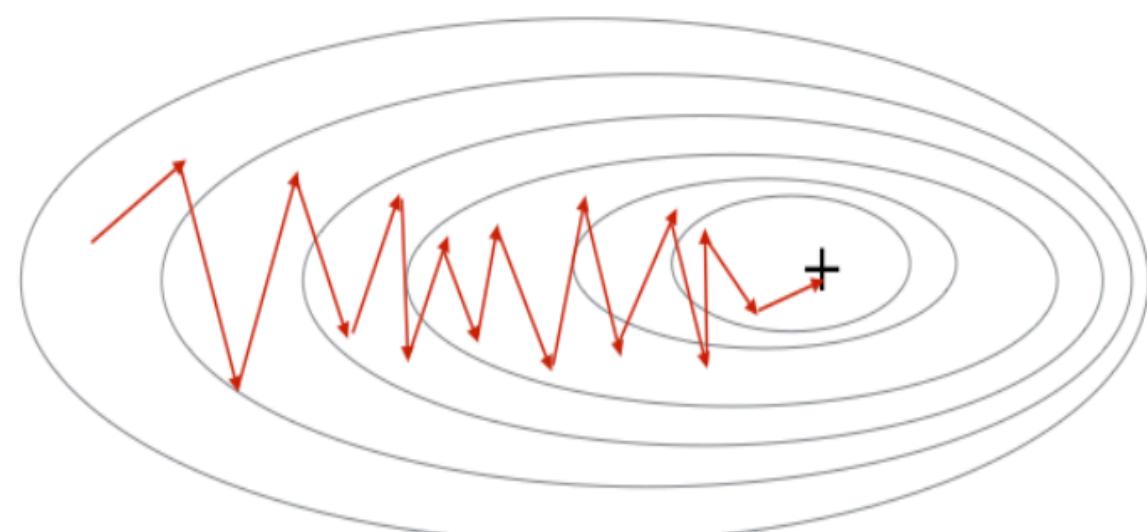
Stochastic gradient descent

Обновляем параметры для одного элемента данных (x_i, y_i) $J(\theta) = l(f_\theta(x_i), y_i)$

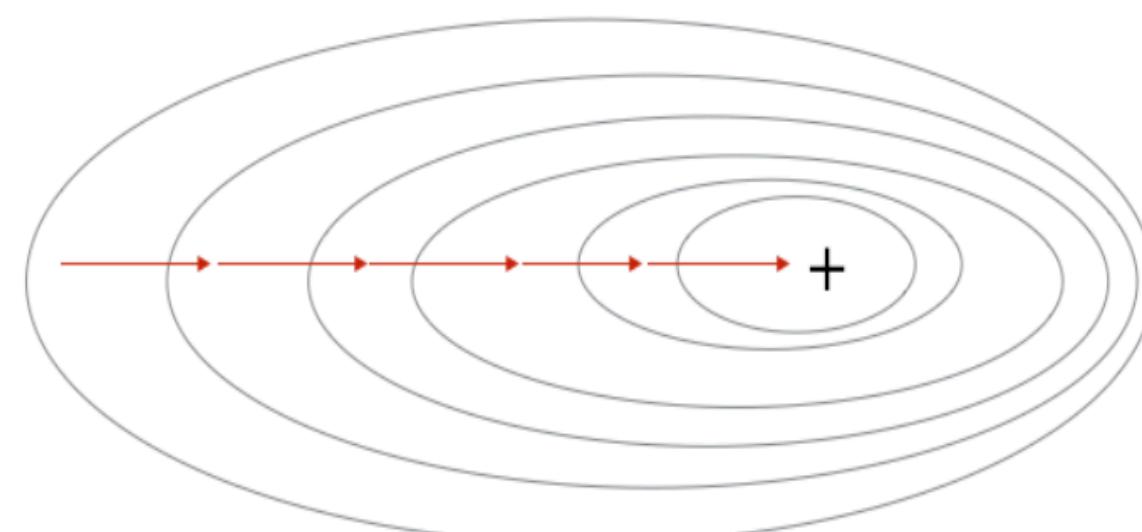
$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta \nabla_\theta J(\theta)$$

$$\mathbb{E}_i(-\nabla_\theta l(f_\theta(x_i), y_i)) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \nabla_\theta l(f_\theta(x_i), y_i) = -\nabla_\theta J(\theta)$$

Stochastic Gradient Descent



Gradient Descent



- Проще реализуемый
- Помогает с проблемой локальных минимумов

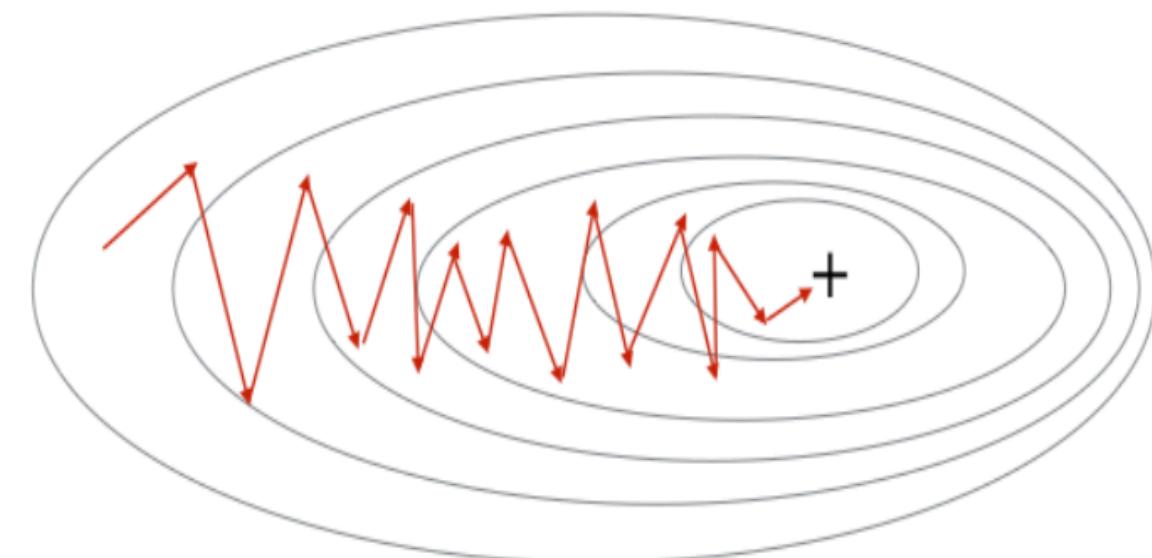
Mini-batch gradient descent

Обновляем параметры не для одного, а для M элементов данных

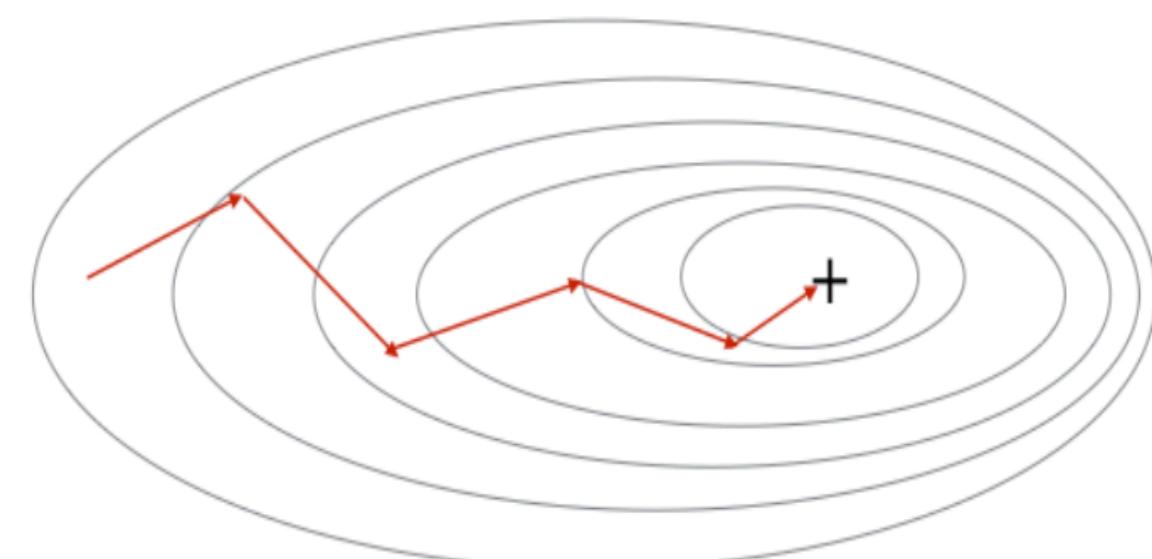
$$J(\theta) = \sum_{i=1}^M l(f_\theta(x_i), y_i)$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta \nabla_{\theta} J(\theta)$$

Stochastic Gradient Descent



Mini-Batch Gradient Descent

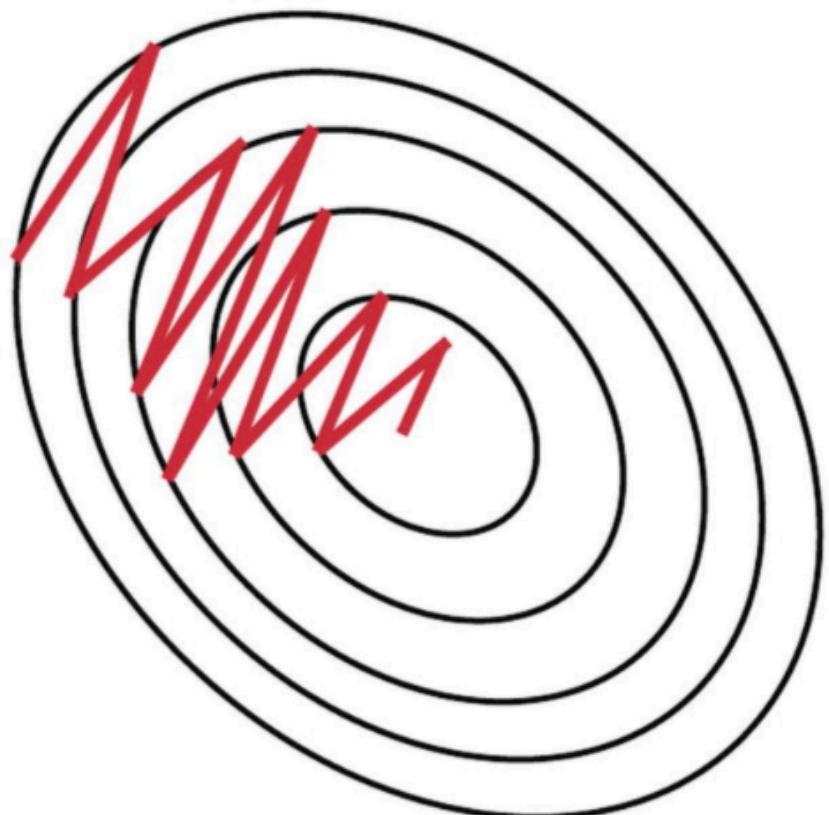


- Вычислительно эффективнее
- Размер батча M обычно берут 64, 256, 512, 1024
- В дальнейшем рассматриваем именно такой вариант функции потерь
- Часто под SGD имеют ввиду этот метод

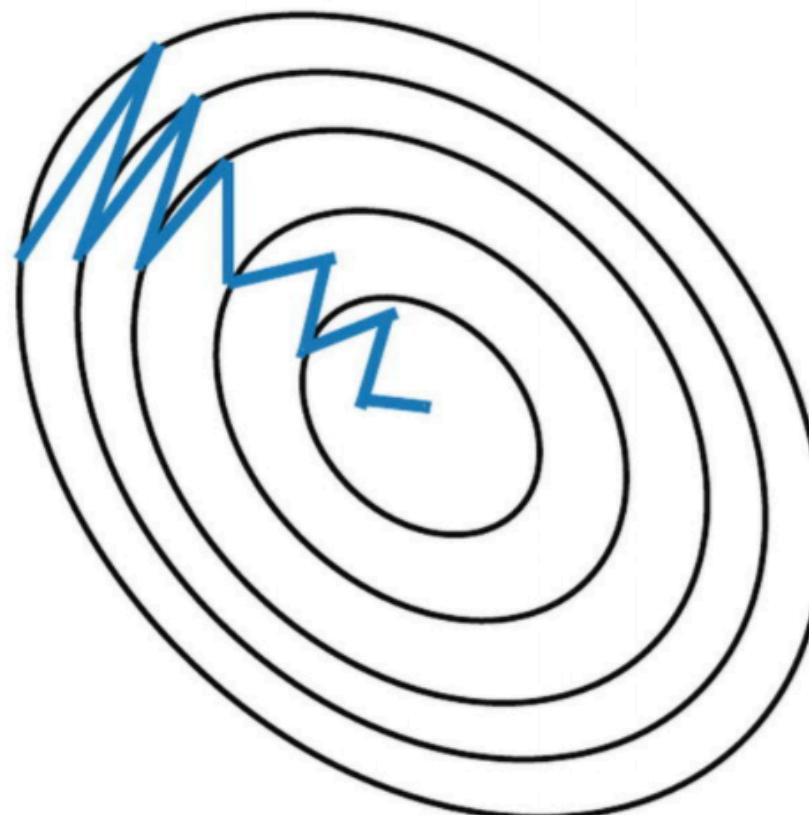
Momentum (Polyak, 1964)

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

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



Stochastic Gradient
Descent **without**
Momentum



Stochastic Gradient
Descent **with**
Momentum

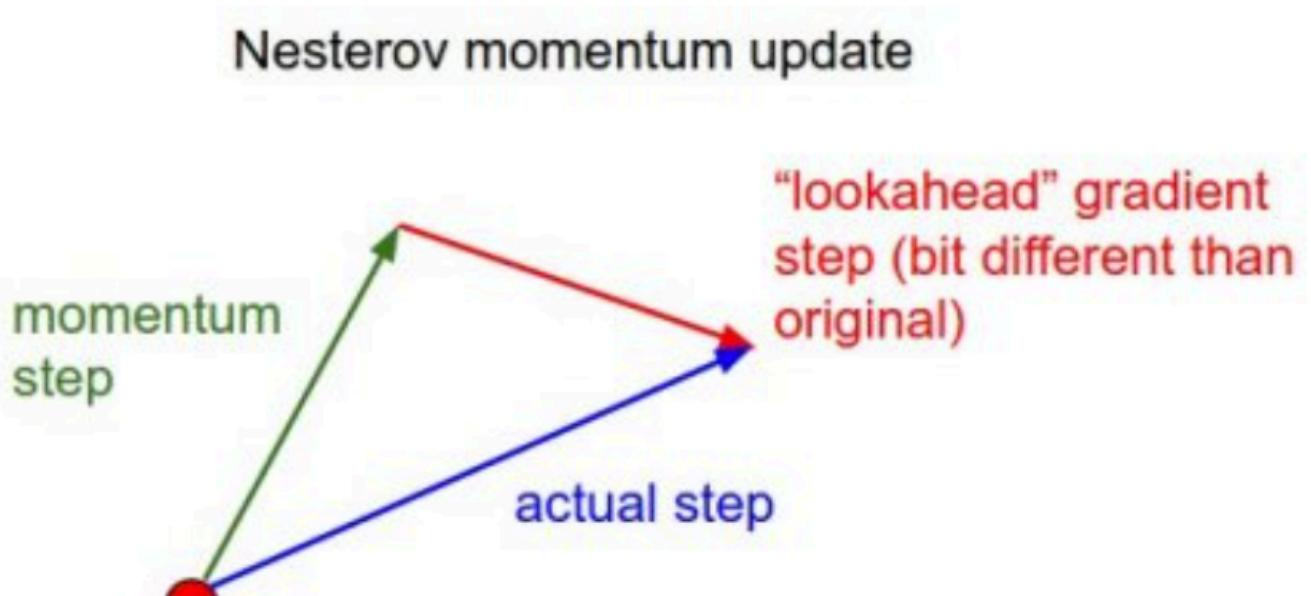
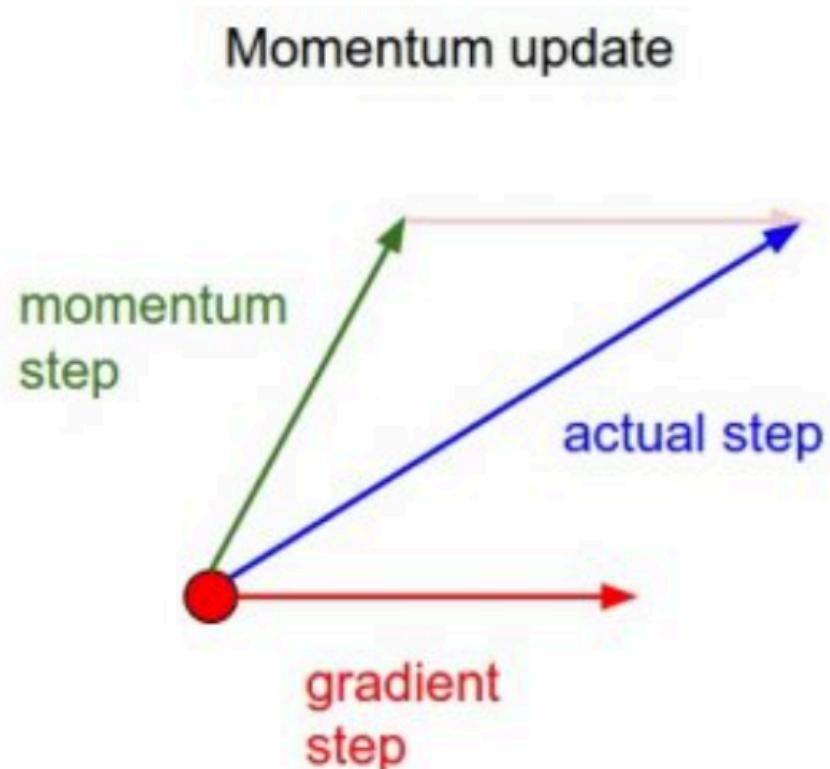
SGD with and without momentum

- Рядом с оптимумом часто возникают области, где SGD осциллирует
- Часто используют $\gamma = 0.9$

Nesterov Momentum (Nesterov, 1983, Sutskever et al., 2013)

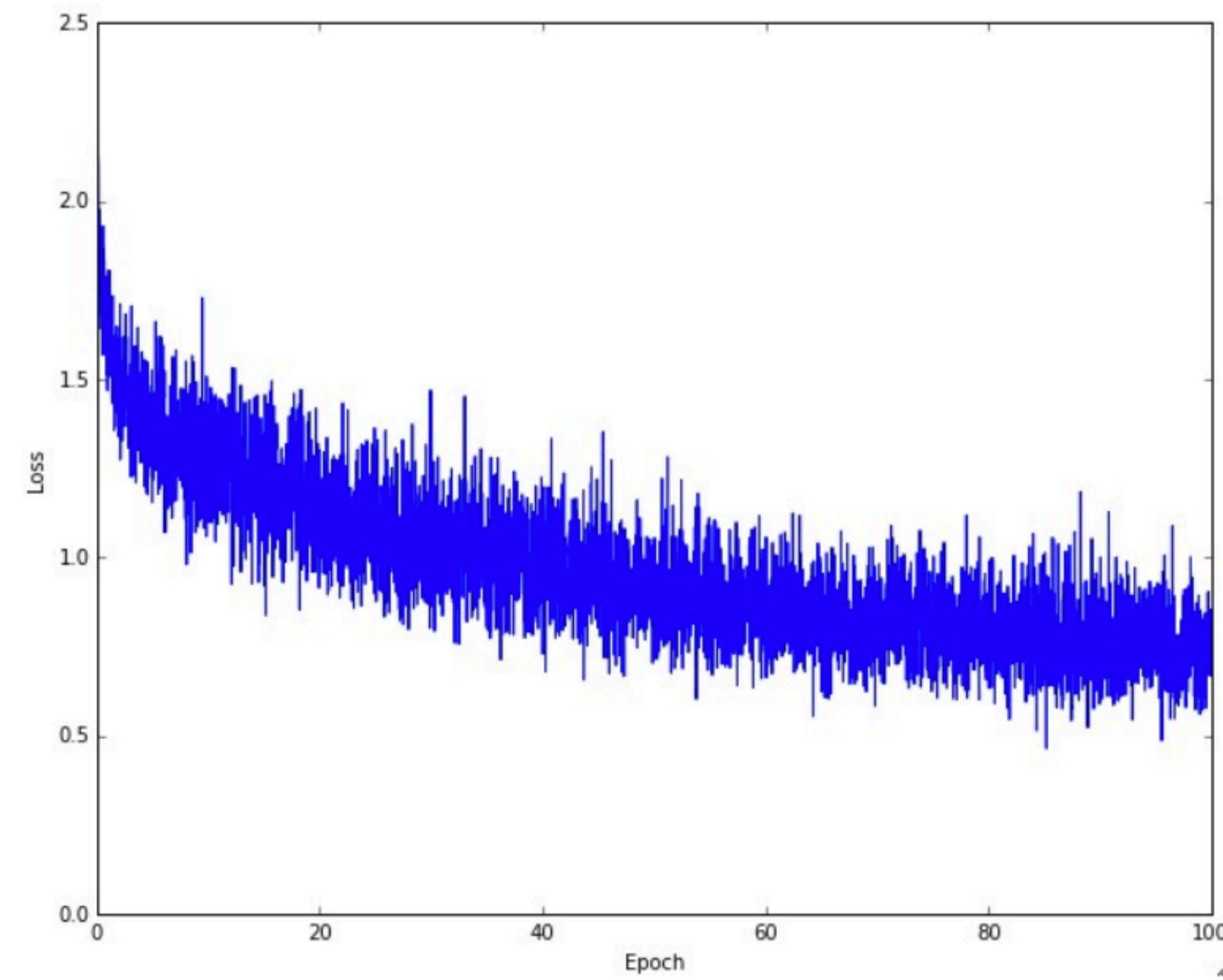
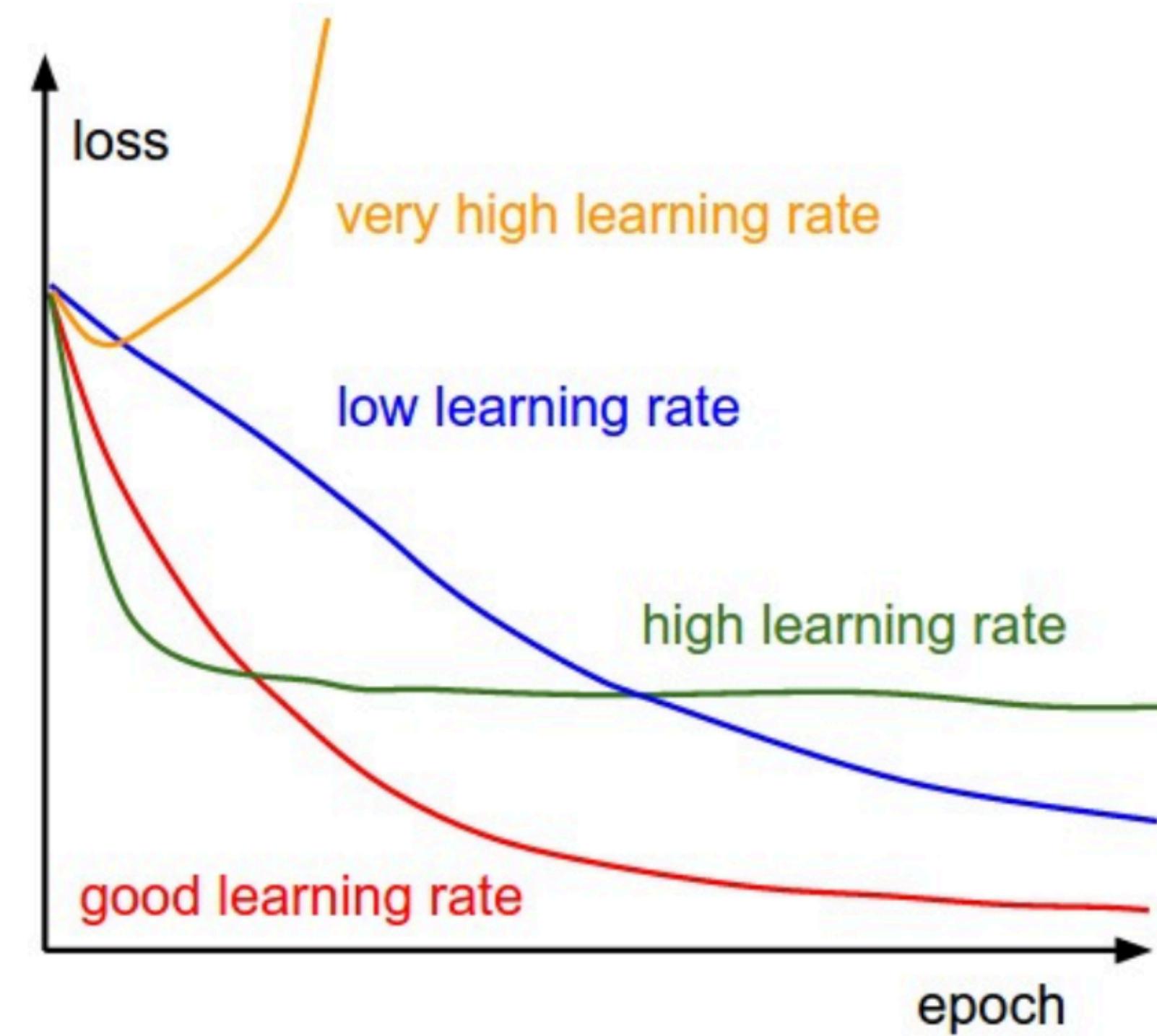
$$v_t = \gamma v_{t-1} + \eta \nabla_{\theta} J(\theta - \gamma v_{t-1})$$

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

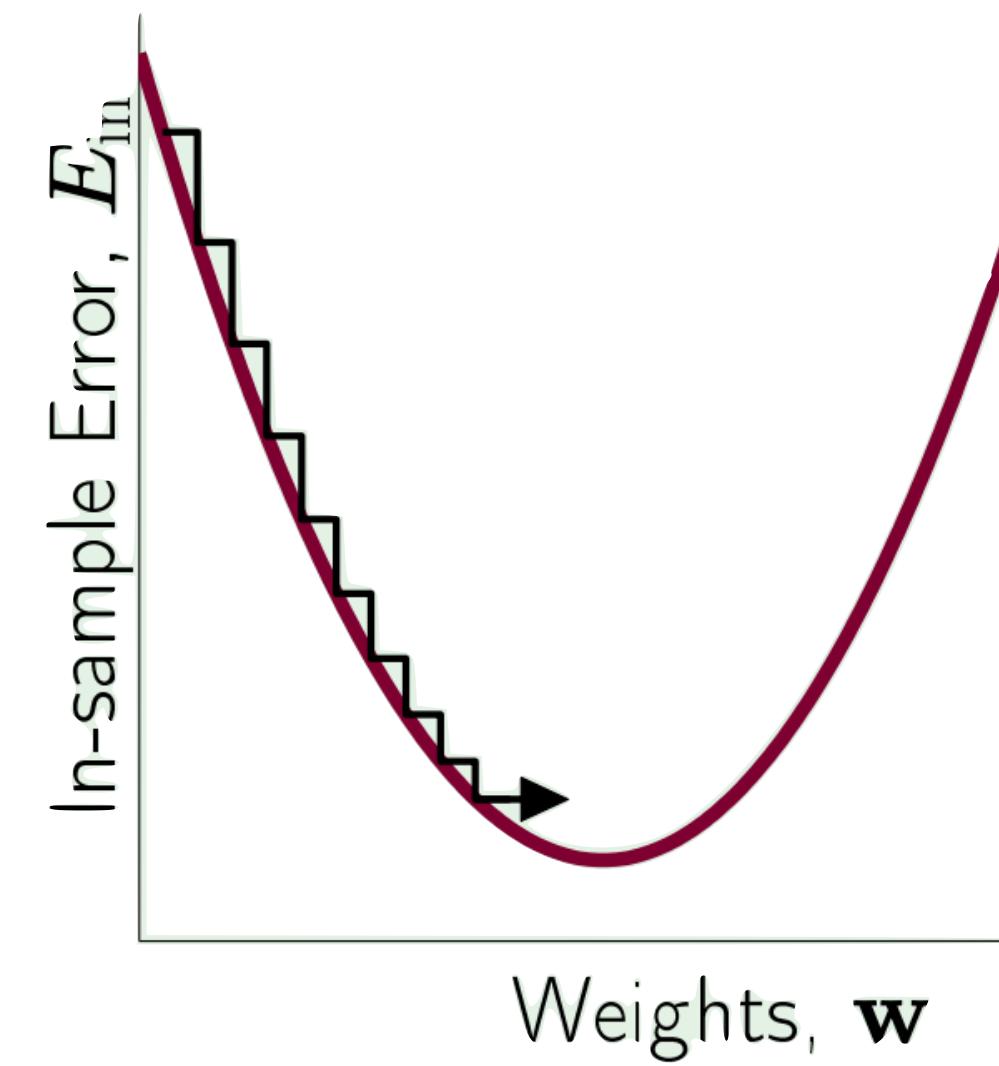


- Будем вычислять градиент для будущей позиции параметра
- Метод более устойчив, чем обычный Momentum

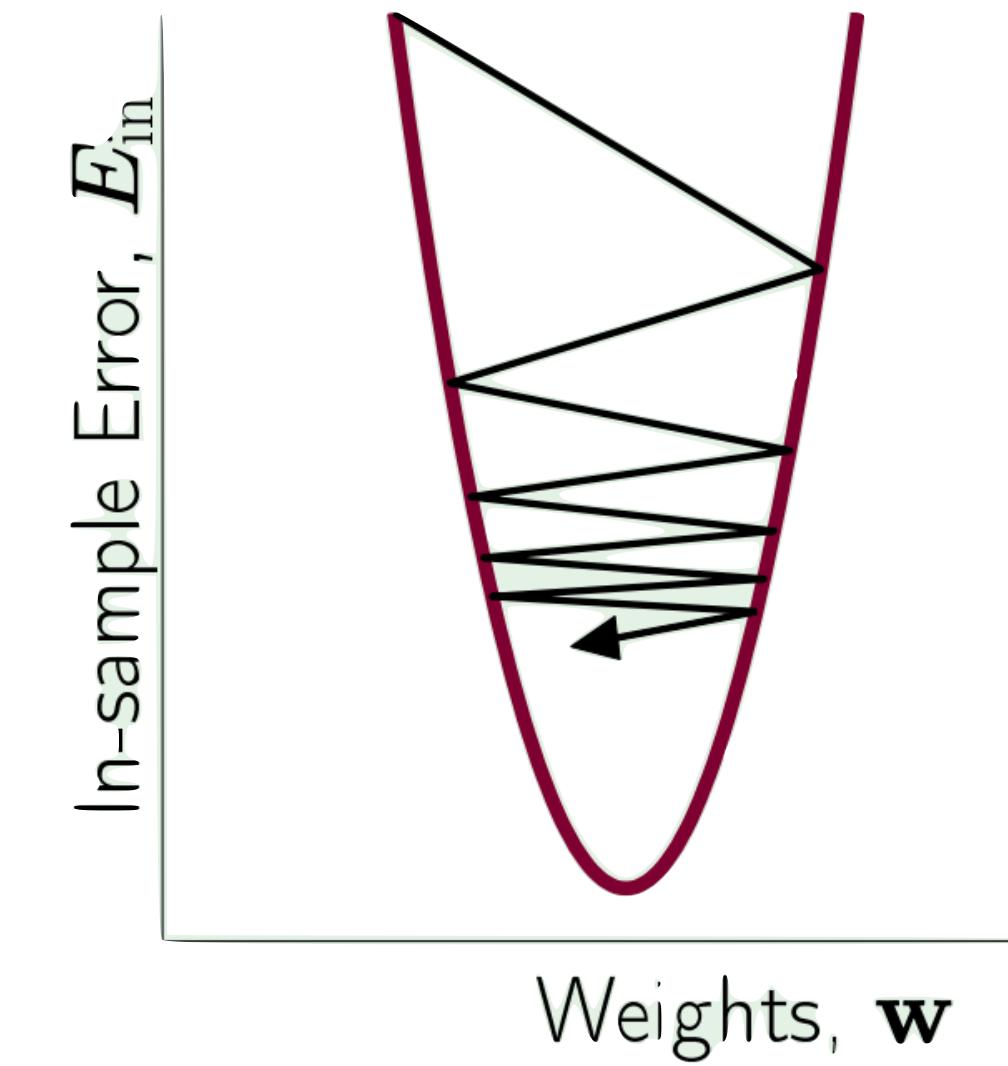
Значение learning rate



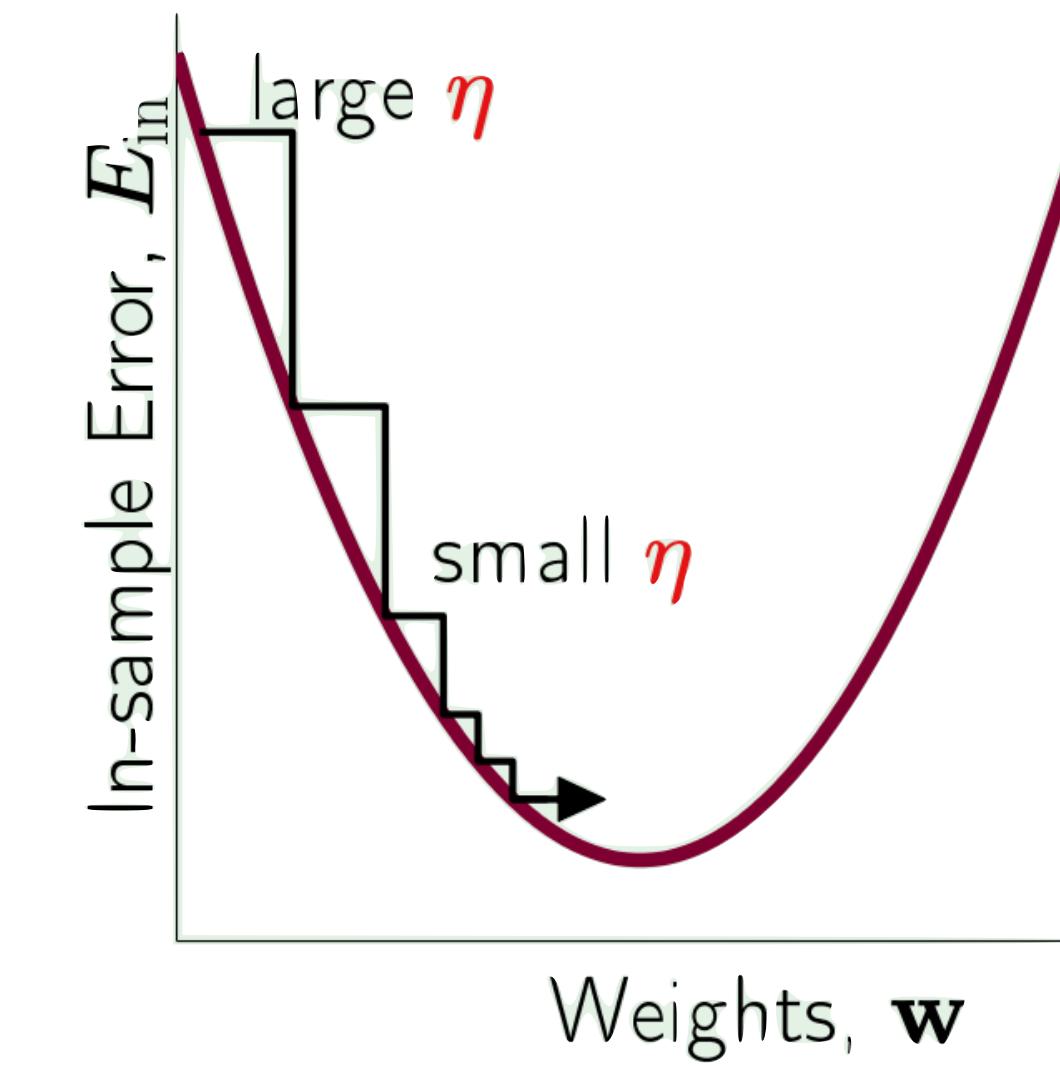
Адаптация learning rate



η too small



η too large

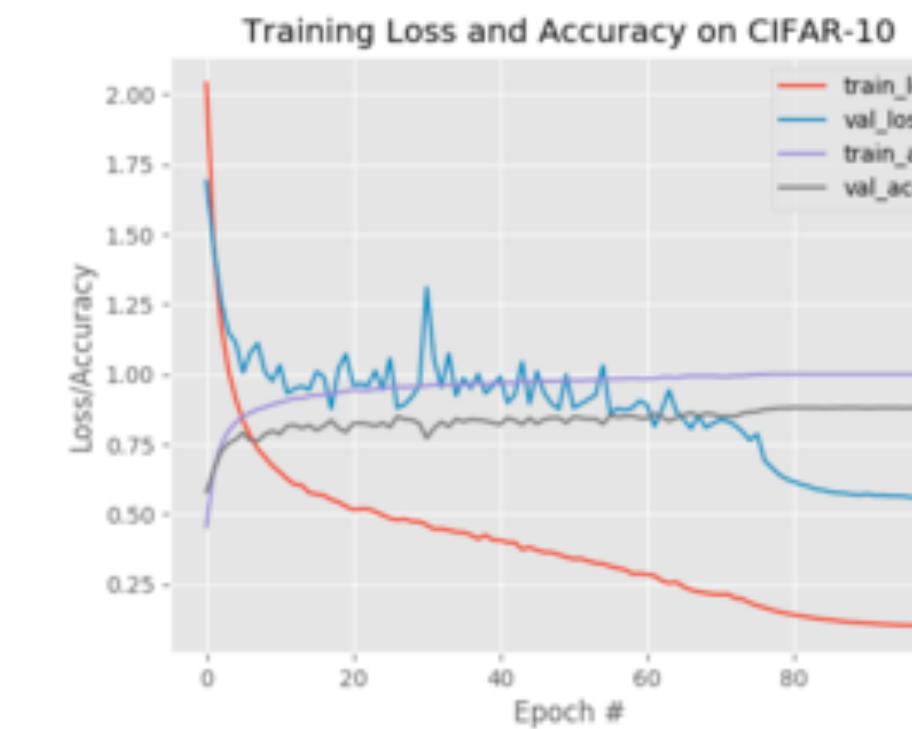
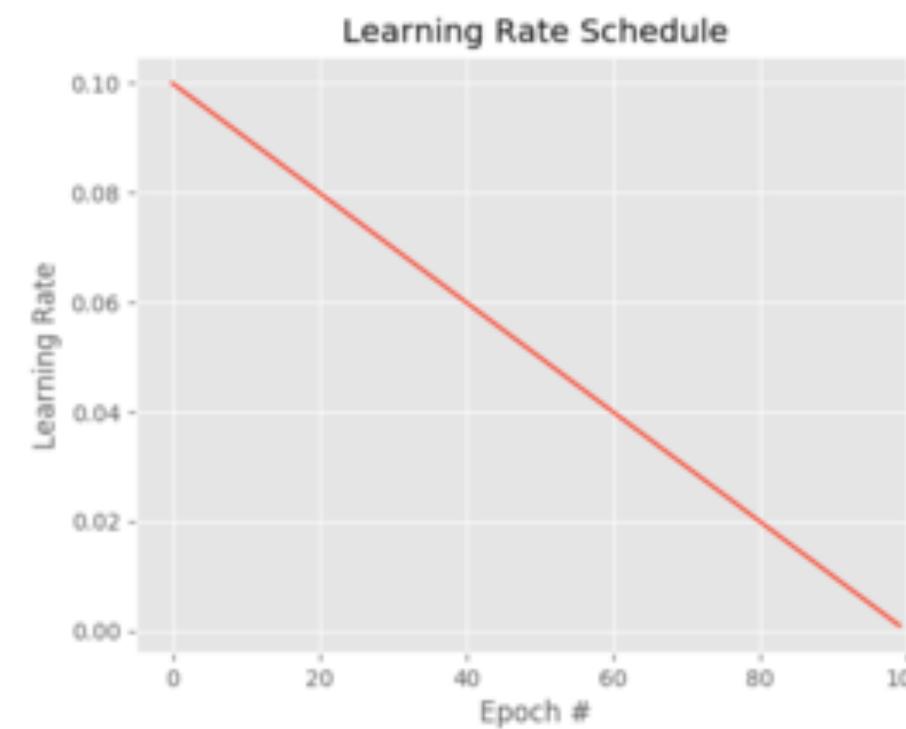


variable η – just right

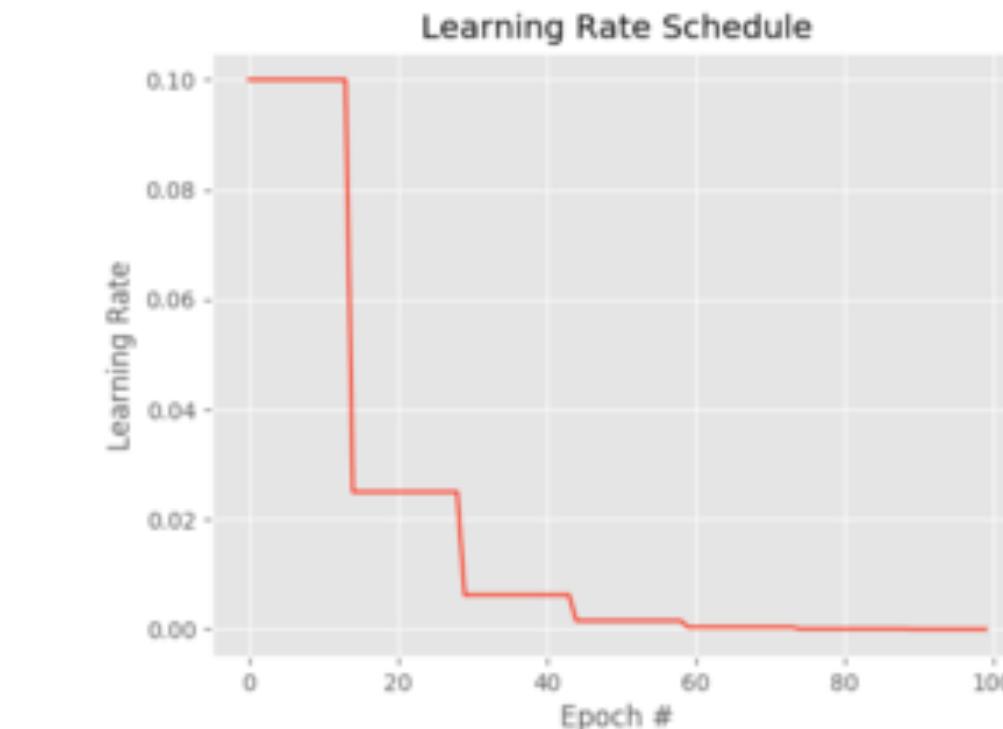
Основная идея: если значение градиента **большое**, то шаг должен быть **уменьшиться**,
если значение градиента **маленькое**, то шаг должен **увеличиться**

Изменение learning rate (scheduler)

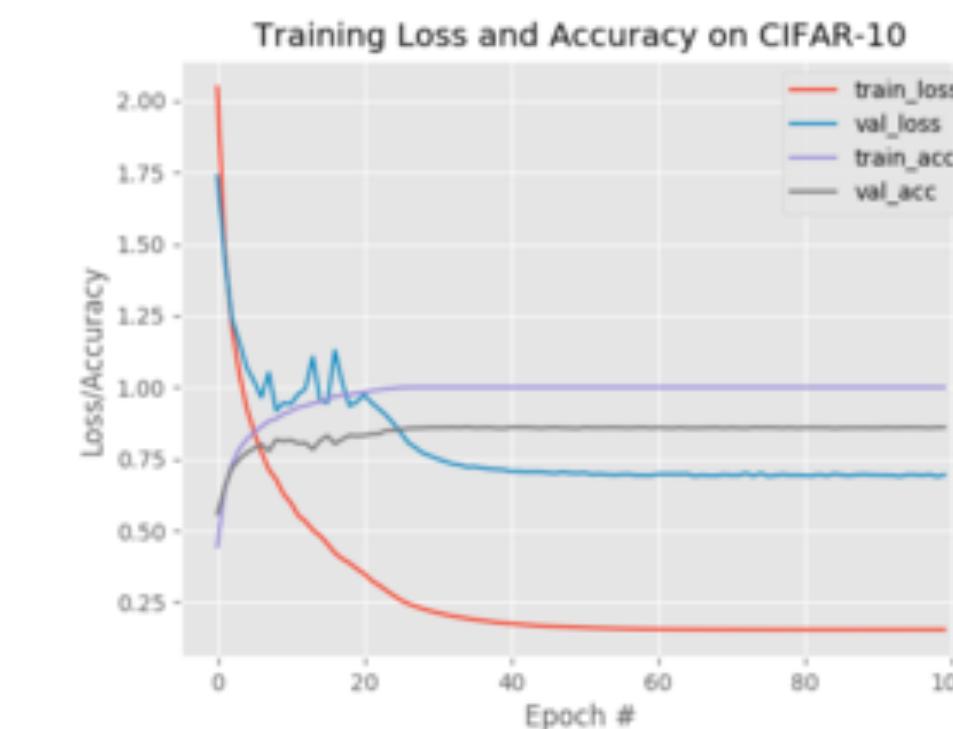
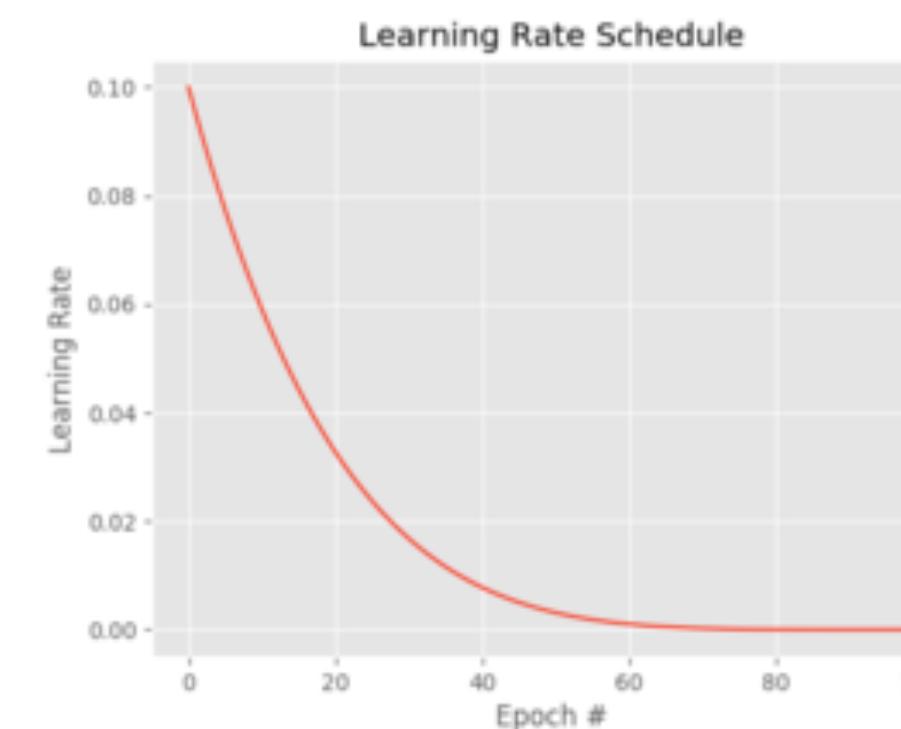
Линейный (Linear)

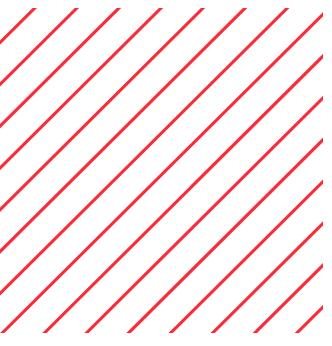


Пошаговый (Step-based)



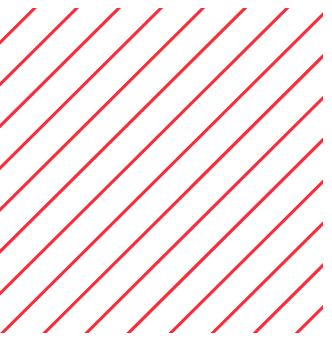
Экспоненциальный (Exponential)





Адаптивный подбор learning rate

- Следующие методы адаптивно подбирают его, обратно пропорционально квадратному корню величины градиента:
 - Adagrad (Duchi et al., 2011)
 - Adadelta (Zeiler, 2012)
 - RMSprop (Hinton, 2016)
 - AdaBelief (Zhuang, 2020)



Adaptive Moment Estimation (Adam) (Kingma et al., 2015)

$$g_t = \nabla_{\theta} J(\theta)$$

$m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) g_t$ – первый момент градиента

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

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

$$\hat{v}_t = \frac{v_t}{1 - \beta_2^t}$$

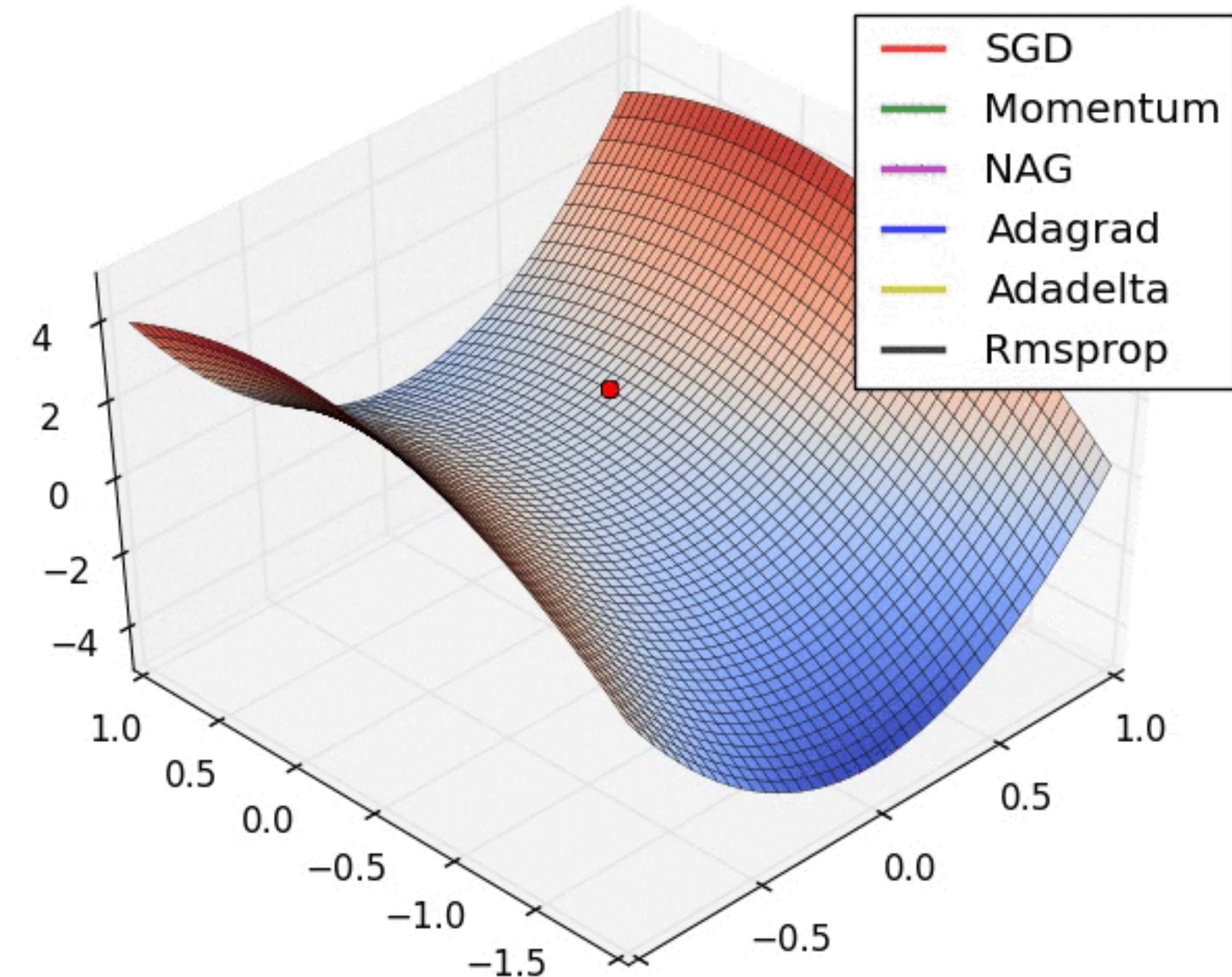
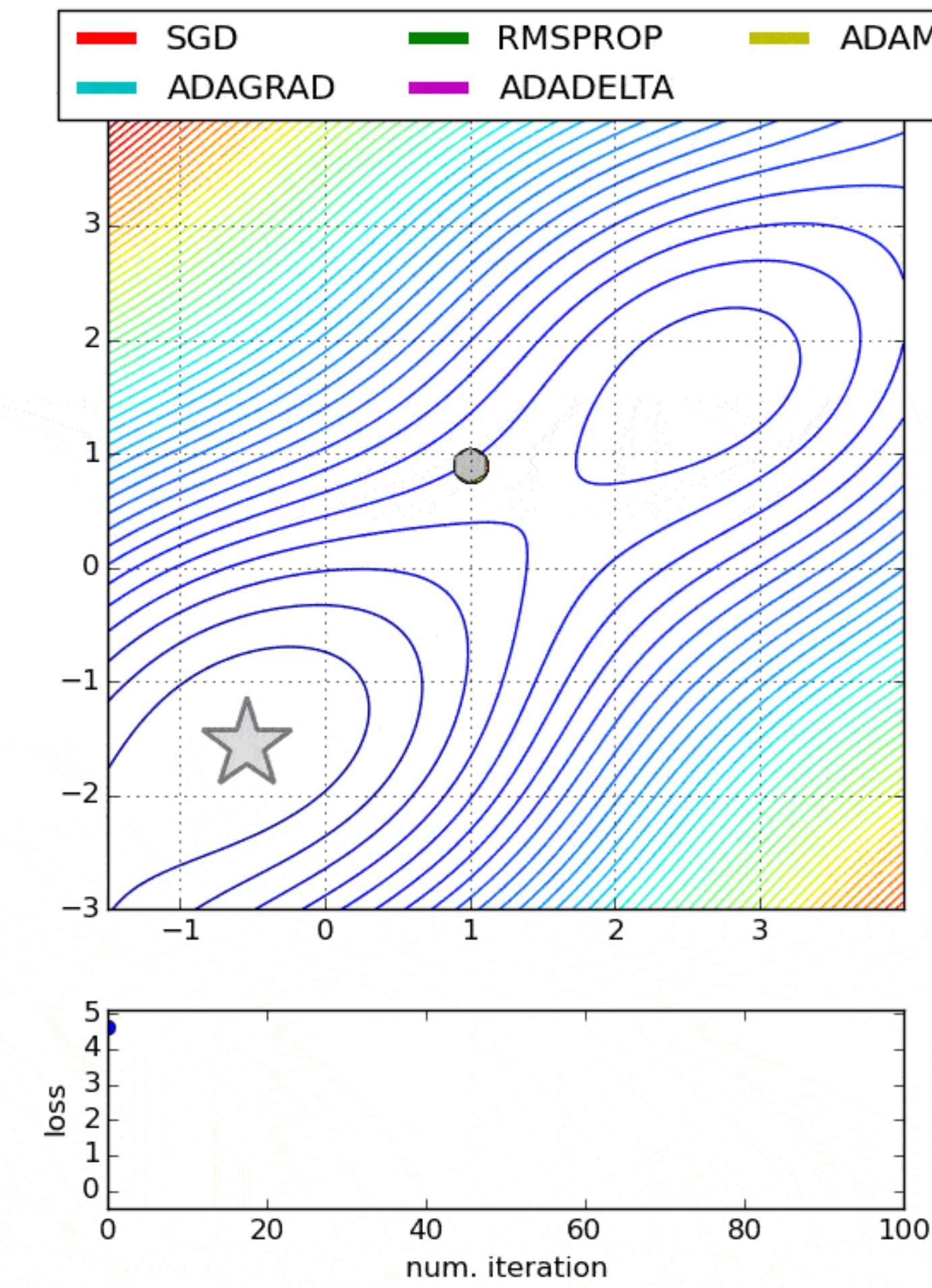
– поправки моментов на смещение

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

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

- Наиболее успешный (в среднем) на практике метод

Сравнение методов



Сравнение методов

CIFAR-10 - CNN

A slightly larger convolutional network for the Cifar-10 data set, with three conv and three fully-connected layers.

	Optimizer	Test Accuracy	Speed
#1	Adam	84.75 %	36.0
#2	Momentum	84.41 %	40.7
#3	SGD	83.71 %	42.5

SVHN - Wide ResNet

16-4

The **Wide ResNet 16-4** for the Street View House Numbers data set using the variant with 16 conv layers and a widening factor of 4.

	Optimizer	Test Accuracy	Speed
#1	Momentum	95.53 %	10.8
#2	SGD	95.37 %	28.3
#3	Adam	95.25 %	12.1

F-MNIST - VAE

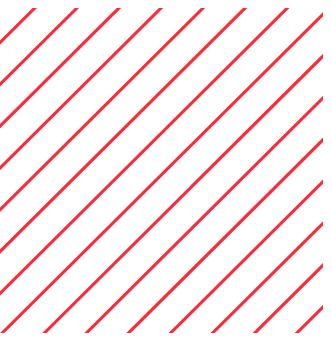
A basic variational autoencoder for the Fashion-MNIST data set with three convolutional and three deconvolutional layers.

	Optimizer	Test Loss	Speed
#1	Adam	23.07	1.0
#2	SGD	23.80	1.0
#3	Momentum	59.23	1.0

Tolstoi - Char RNN

A recurrent neural network for character-level language modeling on the novel *War and Peace* by Leo Tolstoy using two LSTM layers.

	Optimizer	Test Accuracy	Speed
#1	SGD	62.07 %	47.7
#2	Momentum	61.30 %	88.0
#3	Adam	61.23 %	62.8



Без использования градиента (прямые методы)

- **Стохастическая аппроксимация:** известны только значения $f(\theta_t)$
- Алгоритм Роббинса-Монро (1951)
 - $\theta_{t+1} = \theta_t - \beta_t(f(\theta_t) - \alpha)$
 - Сходится при ряде ограничений на $f(\theta_t)$
- **Simultaneous perturbation stochastic approximation** (SPSA) (Spall, 1992)
 - $$\theta_{t+1} = \theta_t - \alpha_t \Delta_t \frac{f(\theta_t + \beta_t \Delta_t) - f(\theta_t - \beta_t \Delta_t)}{2\beta_t}$$
 - Δ_t – случайное возмущение, α_t , β_t – параметры
 - Метод сходится при почти любом шуме в измерениях $f(\theta_t)$
- Методы стохастической аппроксимации применяются, когда нет возможности качественно измерить градиент, например, в обучении с подкреплением (reinforcement learning)

Резюме



Andrej Karpathy 
@karpathy

...
3e-4 is the best learning rate for Adam, hands down.

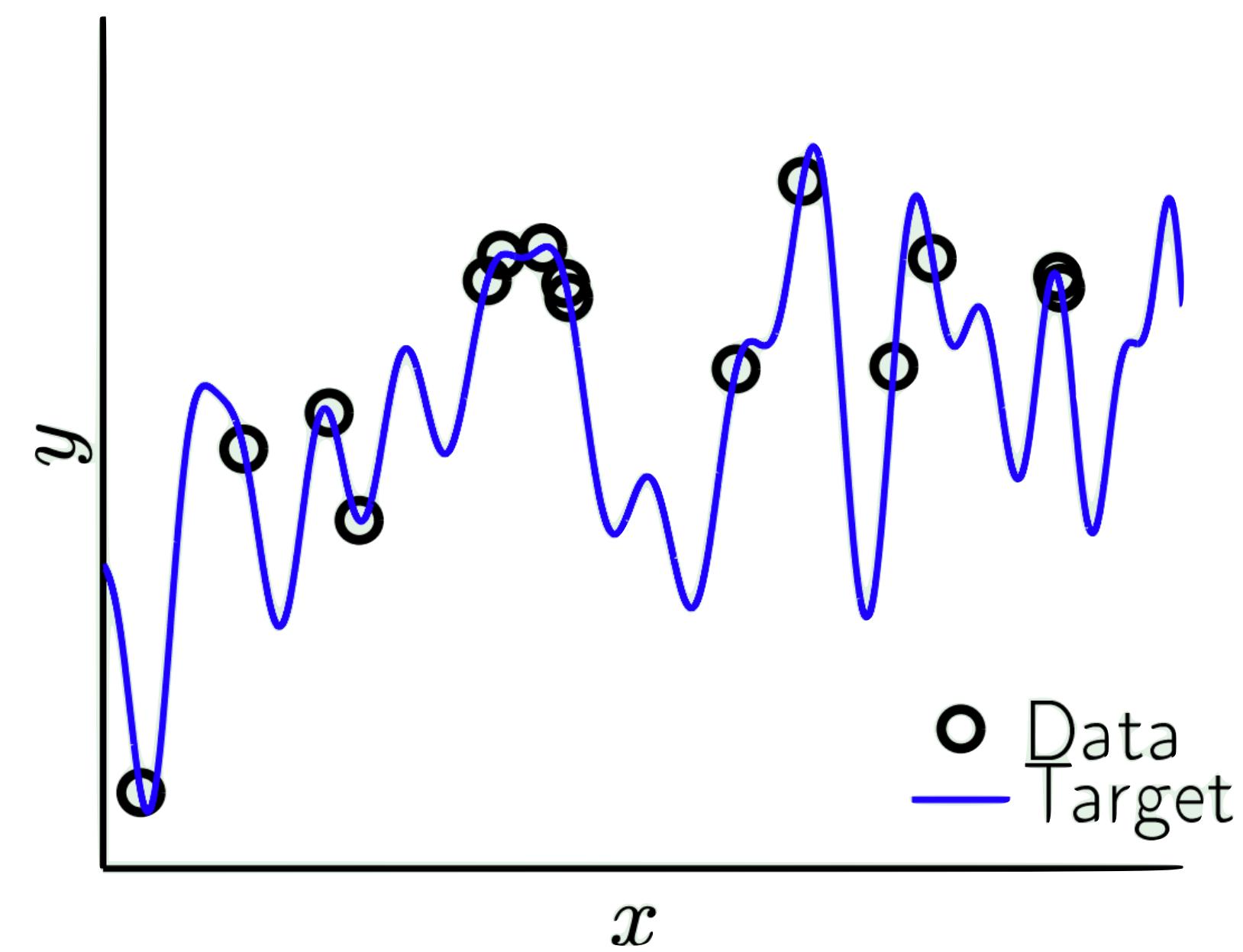
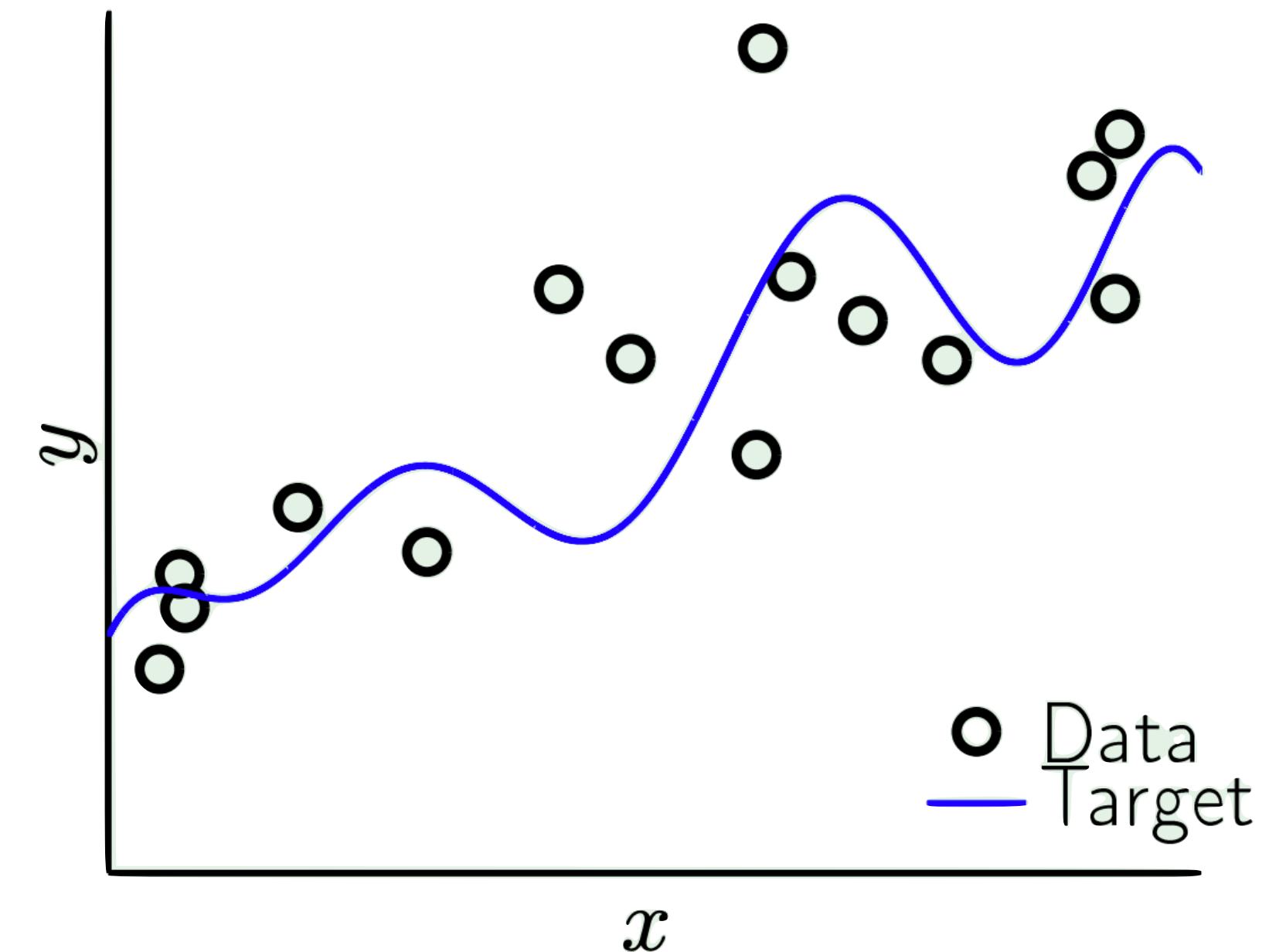
[Перевести твит](#)

6:01 AM · 24 нояб. 2016 г. · Twitter Web Client

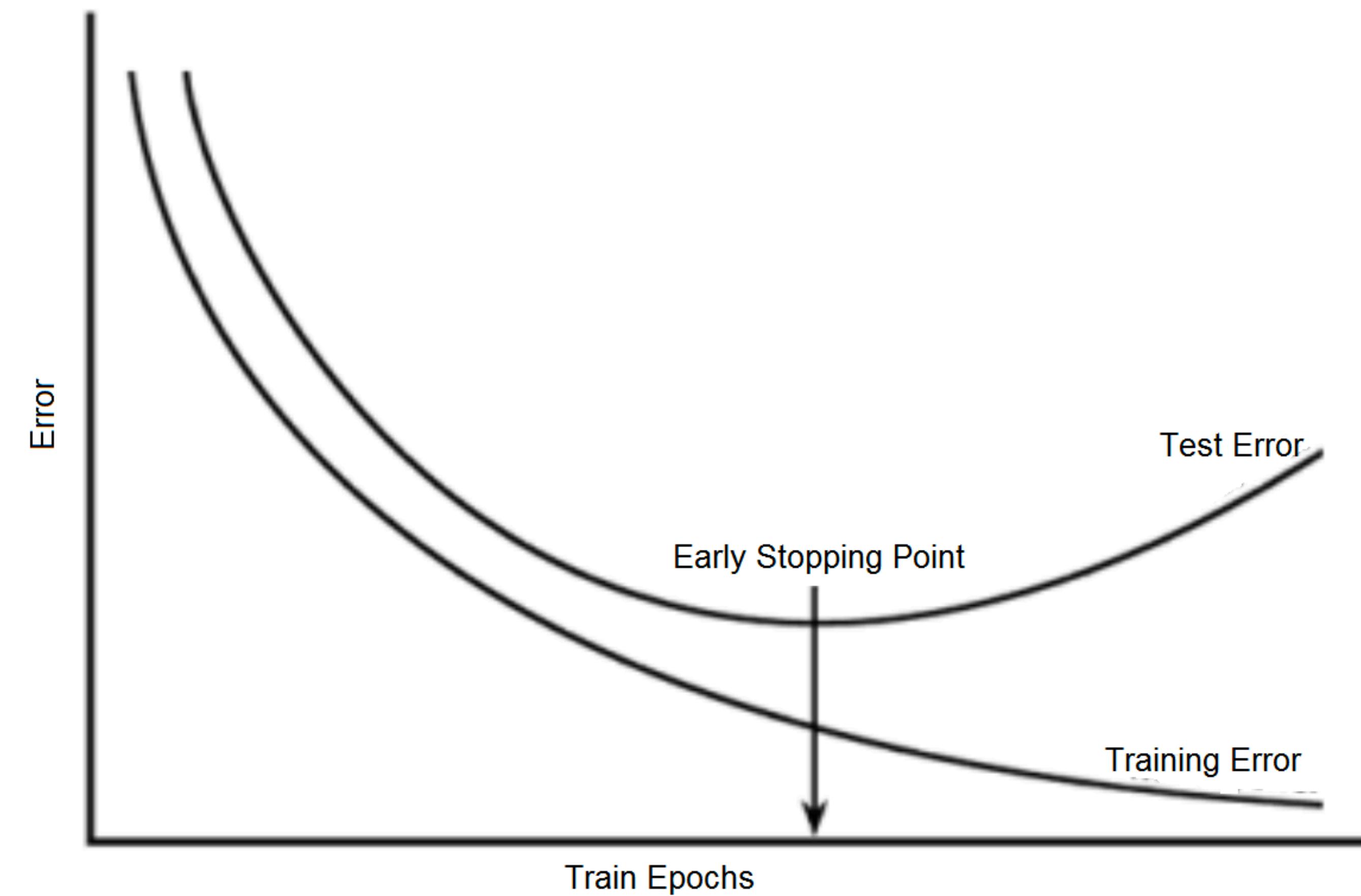
Регуляризация нейронных сетей



Переобучение



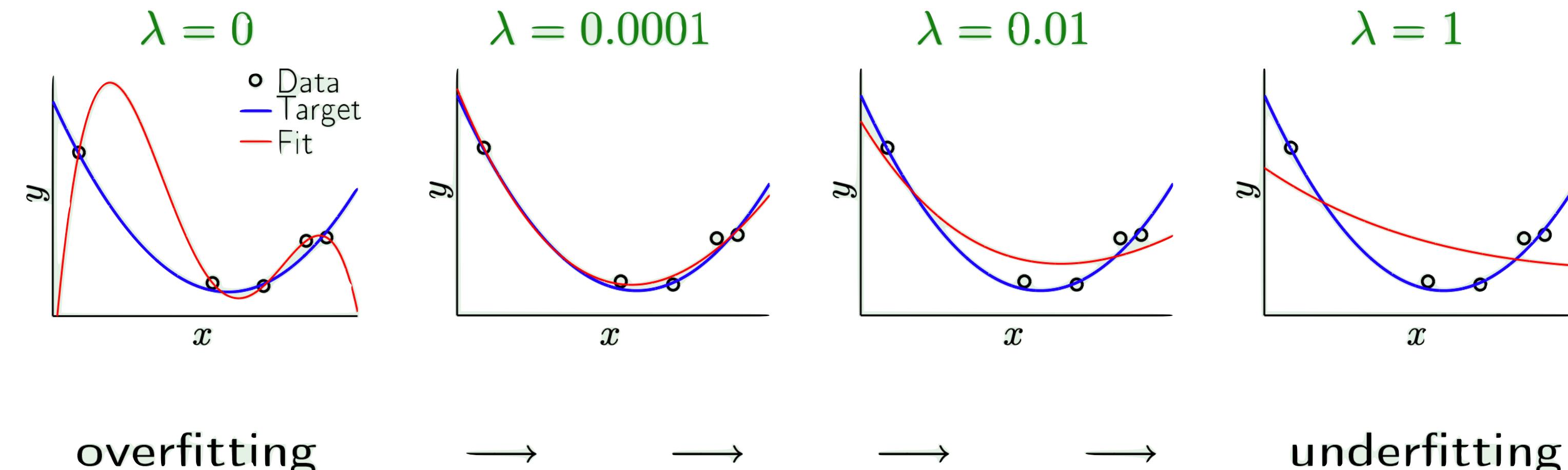
Early stopping



L2 регуляризация

$$\theta^* = \arg \min_{\theta} \sum_{i=1}^N l(f_{\theta}(x_i), y_i) + \lambda \sum_{j=1}^T \theta_j^2$$

- Интуиция: хотим, чтобы параметры модели были не очень большими
- λ – параметр регуляризации

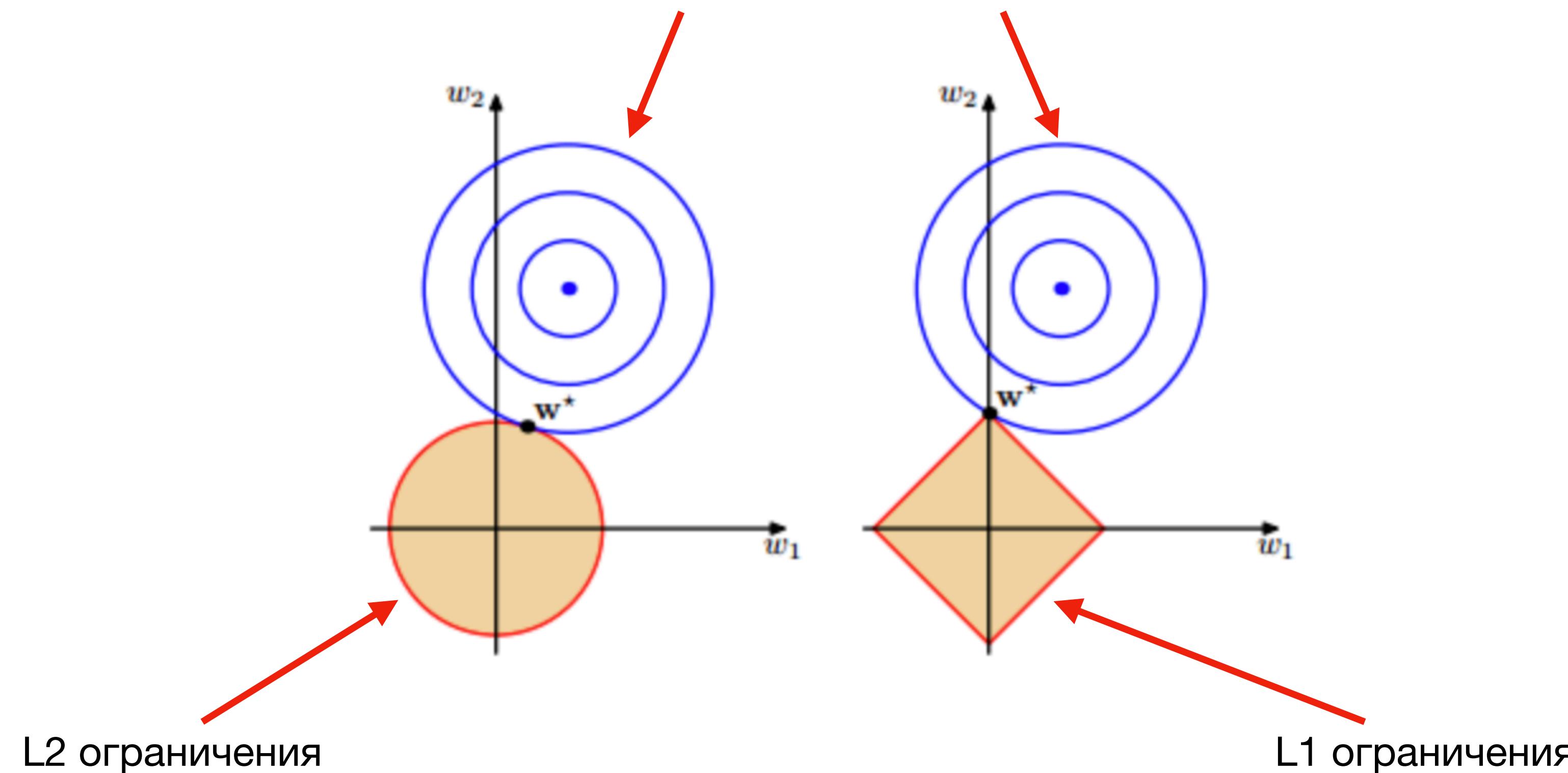


L1 регуляризация (LASSO)

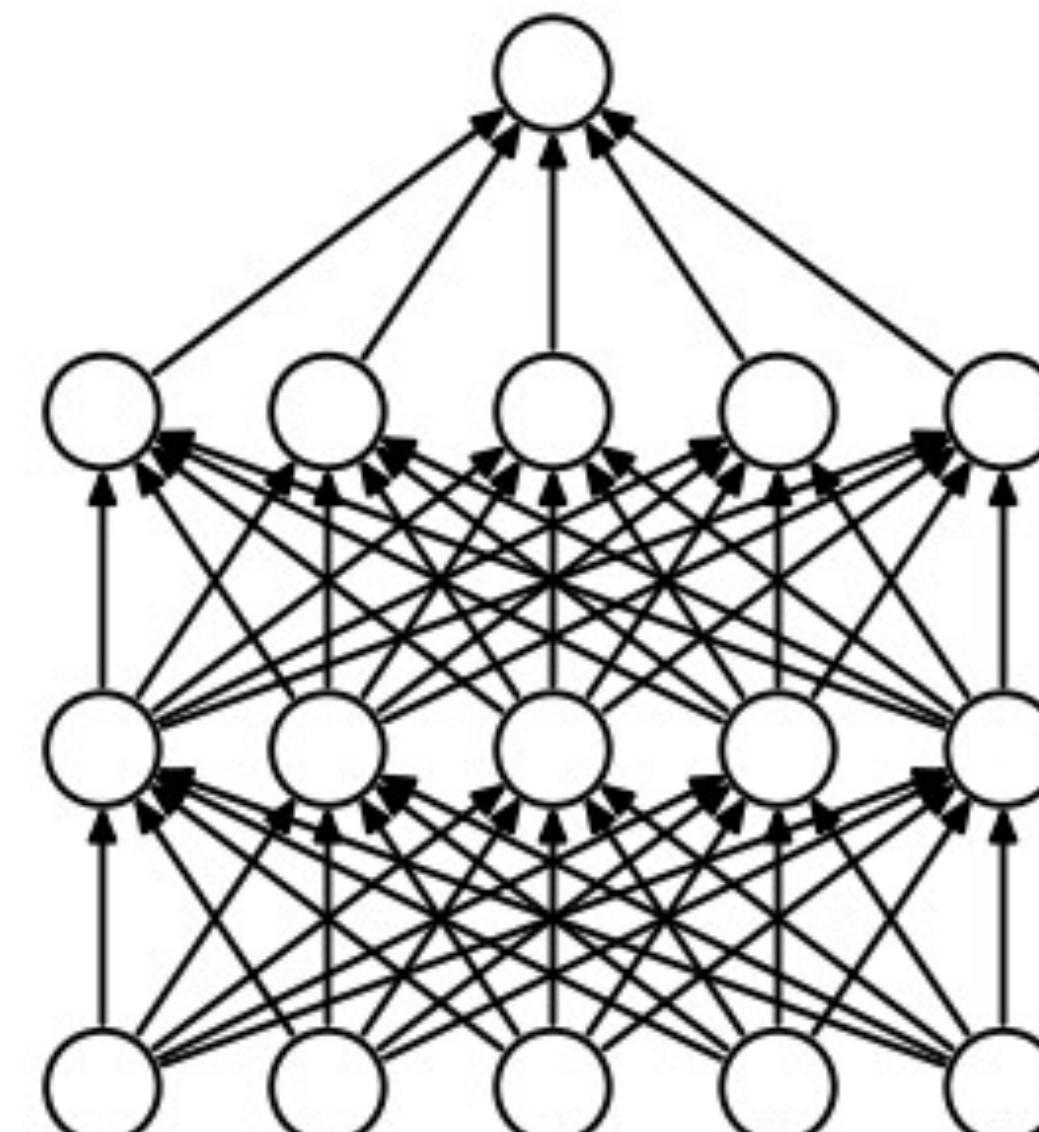
- $\theta^* = \arg \min_{\theta} \sum_{i=1}^N l(f_{\theta}(x_i), y_i) + \lambda \sum_{j=1}^T |\theta_j|$
- Интуиция: хотим, чтобы незначимые параметры модели были близки к 0
- λ — параметр регуляризации

L2 vs L1

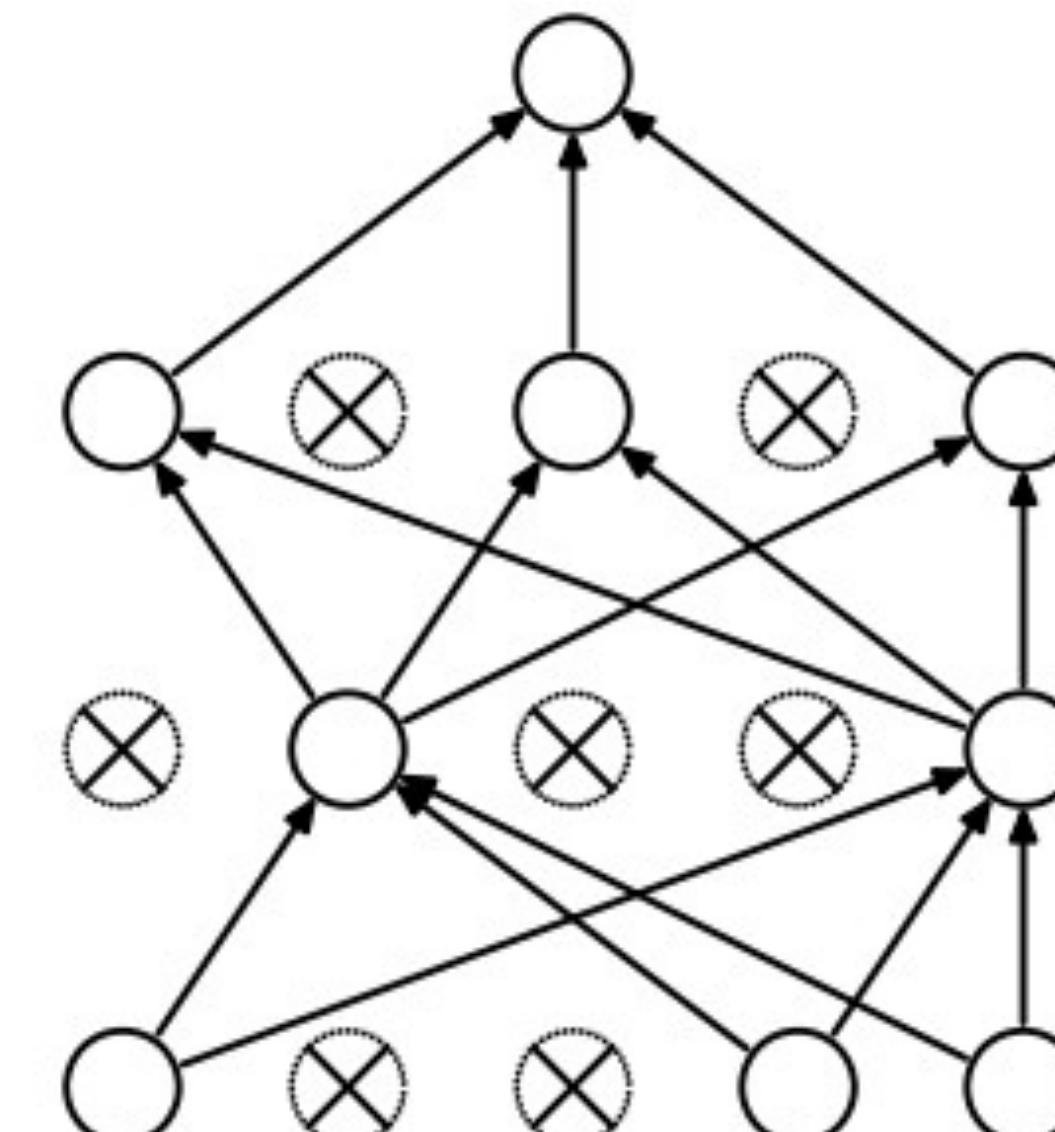
Функция потерь без регуляризации



Dropout (Srivastava et al., 2014)



(a) Standard Neural Net



(b) After applying dropout.

Адаптация нейронных сетей с помощью оптимизации

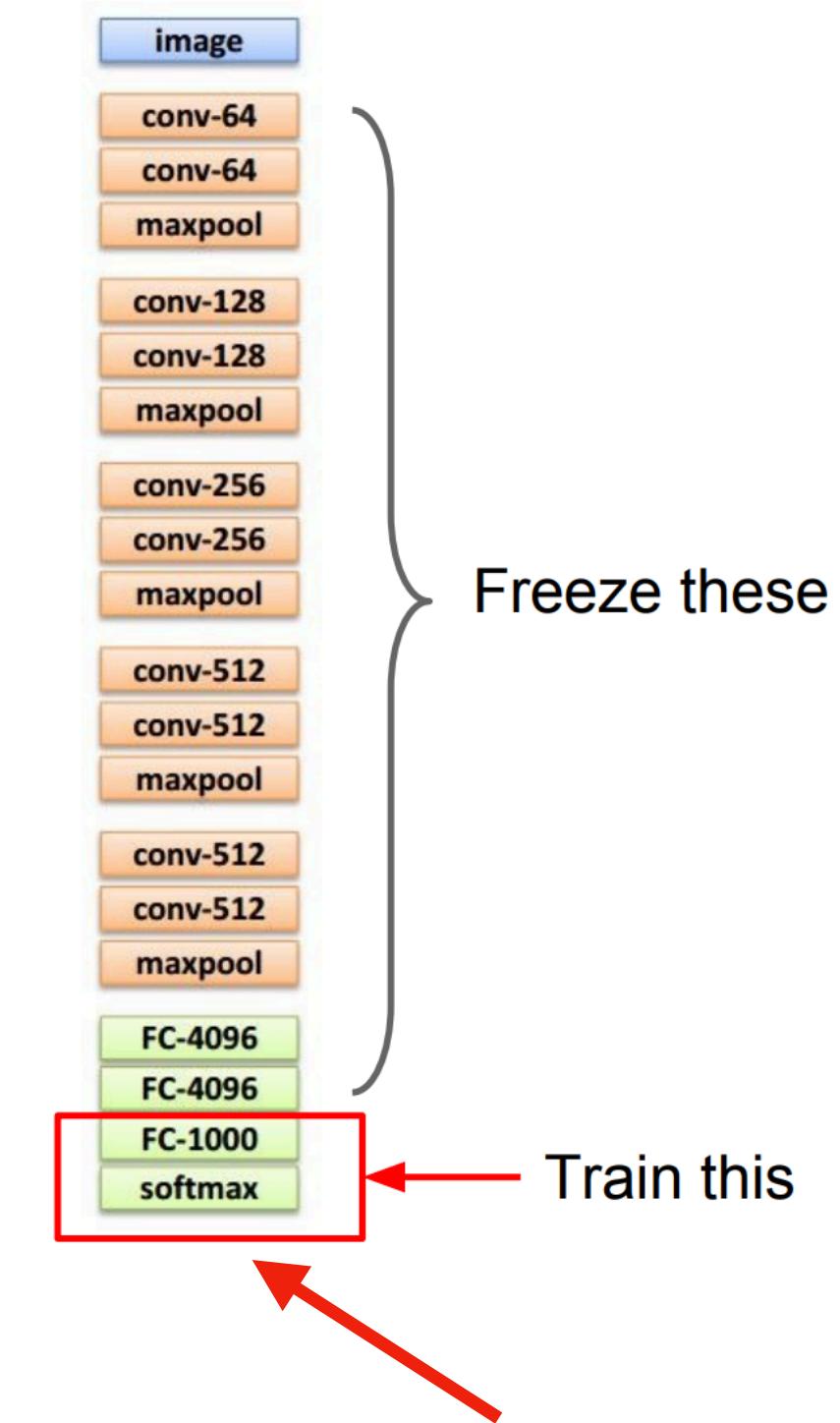


Transfer learning

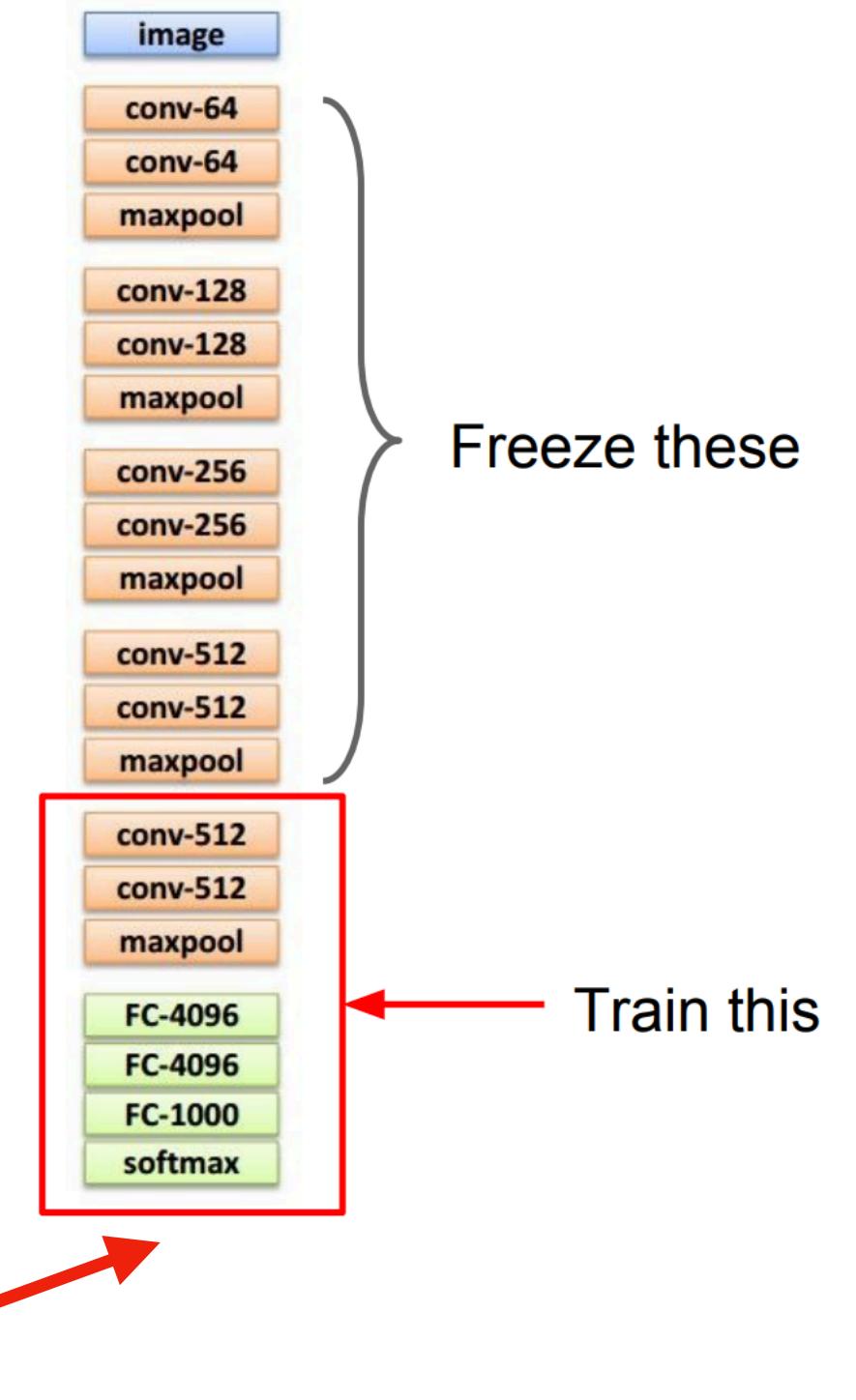
1. Обучим нейронную сеть
на базе ImageNet



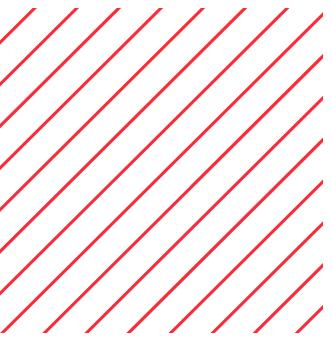
2. Мало новых данных



3. Среднее количество
новых данных



Небольшой learning rate



Заключение

- Постановка задачи оптимизации в глубоком обучении
- Сложности и особенности этой оптимизации
- Основные методы оптимизации
- Learning rate
- Регуляризация
- Transfer learning
- В следующий раз: сверхточные нейронные сети