SHARPNESS-AWARE MINIMIZATION FOR EFFICIENTLY IMPROVING GENERALIZATION

Адыгамов Ильяс, Гусева Полина, Кириллов Дмитрий, Дроздова Анастасия

НИУ Высшая школа экономики

06 октября 2021 г.

План

- 🕕 Доклад
 - О чем эта работа?
 - Теоретическая предпосылка
 - Выведение метода
 - Схема метода
 - Эксперименты
 - m-острота
 - Спектр гессиана
- 2 Контекст
- В Рецензия
- Эксперименть

О чем эта работа?

- Обощающая способность зависит от гладкости функционала в точке оптимума
- Можно добавить в функционал штраф за остроту
- Результат заметно лучше обобщающая способность и новые SOTA в некоторых задачах

Интуитивно понятный пример того, что делает метод

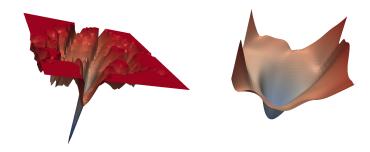


Рис.: Слева изображена поверхность функционала вокруг минимума для обычного SGD. Справа - для SAM

Теоретическая предпосылка

Theorem (stated informally)

For any $\rho > 0$, with high probability over training set S generated from distribution \mathcal{D} ,

$$L_{\mathscr{D}}(\mathbf{w}) \leq \max_{\|\mathbf{\epsilon}\|_2 \leq \rho} L_{\mathcal{S}}(\mathbf{w} + \mathbf{\epsilon}) + h(\|\mathbf{w}\|_2^2/\rho^2),$$

where $h: \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}_+$ is a strictly increasing function (under some technical conditions on $L_{\mathscr{D}}(\mathbf{w})$).

Переписав правую часть можно выделить "слагаемое негладкости"

$$[\max_{\|\boldsymbol{\epsilon}\|_2 \leq \rho} L_{\mathcal{S}}(\boldsymbol{w} + \boldsymbol{\epsilon}) - L_{\mathcal{S}}(\boldsymbol{w})] + L_{\mathcal{S}}(\boldsymbol{w}) + h(\|\boldsymbol{w}\|_2^2/\rho^2)$$

Выведение метода

Запишем функцию потерь

$$\min_{m{w}} L_{\mathcal{S}}^{SAM}(m{w}) + \lambda ||m{w}||_2^2$$
 где $L_{\mathcal{S}}^{SAM}(m{w}) \triangleq \max_{||m{\epsilon}||_{
ho} \leq
ho} L_{\mathcal{S}}(m{w} + m{\epsilon})$ (1)

 ϵ оптимальный можно выразить так

$$\hat{\epsilon}(\mathbf{w}) = \rho \operatorname{sign}(\nabla_{\mathbf{w}} L_{\mathcal{S}}(\mathbf{w})) |\nabla_{\mathbf{w}} L_{\mathcal{S}}(\mathbf{w})|^{q-1} / \left(\|\nabla_{\mathbf{w}} L_{\mathcal{S}}(\mathbf{w})\|_{q}^{q} \right)^{1/p}$$
(2)

где 1/p+1/q=1. Подставив это выражение в $\ (1)$ и продифференциировав, получаем

$$\nabla_{\mathbf{w}} L_{\mathcal{S}}^{SAM}(\mathbf{w}) \approx \nabla_{\mathbf{w}} L_{\mathcal{S}}(\mathbf{w})|_{\mathbf{w} + \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{w})} + \frac{d\hat{\mathbf{e}}(\mathbf{w})}{d\mathbf{w}} \nabla_{\mathbf{w}} L_{\mathcal{S}}(\mathbf{w})|_{\mathbf{w} + \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{w})}$$
(3)

Итоговый метод

- **1** Вычислить $\nabla_{\boldsymbol{w}} L_{\mathcal{S}}(\boldsymbol{w})$
- $oldsymbol{0}$ Вычислить ϵ оптимальное

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

Вычислить градиент(слагаемые второго порядка отброшены)

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

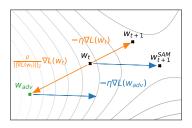


Рис.: Схема обновления параметров в методе SAM

- Авторы просто подменяют процесс оптимизации на SAM.
- Наборы данных: CIFAR-{10, 100}, ImageNet, SVHN, Fashion-MNIST.
- Задачи: image classification from scratch, finetuning, learning with noisy labels.
- Каждый эксперимент запускается по 5 раз и берется среднее.
- Framework: JAX, Hardware: 8 x V100 and TPUv3 for ImageNet.
- Модели: WideResNet with ShakeShake, PyramidNet with ShakeDrop, ResNet-50, 101, 152 for ImageNet, EffecientNet-b7 and EffecientNet-L2 for finetuning.
- Аугментации.

Model	Epoch	SAM		Standard Training (No SAM)	
iviodei		Top-1	Top-5	Top-1	Top-5
ResNet-50	100	$22.5_{\pm 0.1}$	$6.28_{\pm 0.08}$	$22.9_{\pm 0.1}$	$6.62_{\pm0.11}$
	200	$\textbf{21.4}_{\pm0.1}$	$5.82_{\pm 0.03}$	$22.3_{\pm 0.1}$	$6.37_{\pm 0.04}$
	400	$\boldsymbol{20.9}_{\pm0.1}$	$5.51_{\pm 0.03}$	$22.3_{\pm 0.1}$	$6.40_{\pm 0.06}$
ResNet-101	100	$20.2_{\pm 0.1}$	$5.12_{\pm 0.03}$	21.2 _{±0.1}	$5.66_{\pm 0.05}$
	200	$\textbf{19.4}_{\pm0.1}$	$4.76_{\pm 0.03}$	$20.9_{\pm 0.1}$	$5.66_{\pm 0.04}$
	400	$19.0_{\pm < 0.01}$	$4.65_{\pm 0.05}$	$22.3_{\pm 0.1}$	$6.41_{\pm 0.06}$
ResNet-152	100	$19.2_{\pm < 0.01}$	$4.69_{\pm 0.04}$	$20.4_{\pm < 0.0}$	$5.39_{\pm 0.06}$
	200	$\textbf{18.5}_{\pm0.1}$	$4.37_{\pm 0.03}$	$20.3_{\pm 0.2}$	$5.39_{\pm 0.07}$
	400	$18.4_{\pm < 0.01}$	$4.35_{\pm 0.04}$	$20.9_{\pm < 0.0}$	$5.84_{\pm 0.07}$

Таблица: Доля ошибок для экспериментов на ImageNet.

m-острота(m-sharpness)

Как считать градиент SAM параллельно?

Авторы распределяют данные равномерно по GPU(каждый получает по <math>m объектов) и на каждом считают градиент SAM независимо. Результаты усредняют.

Получившуюся меру авторы называют m-остротой

То есть

$$L_{\mathcal{S}}^{SAM}(oldsymbol{w}) riangleq \max_{\|oldsymbol{\epsilon}\|_{oldsymbol{arepsilon}} L_{\mathcal{S}}(oldsymbol{w} + oldsymbol{\epsilon})$$

переходит в

$$L_{\mathcal{S}}^{SAM}(oldsymbol{w}) riangleq \sum_{b \sim Unif^m(X)} \max_{||oldsymbol{\epsilon}||_p \leq
ho} L_b(oldsymbol{w} + oldsymbol{\epsilon})$$

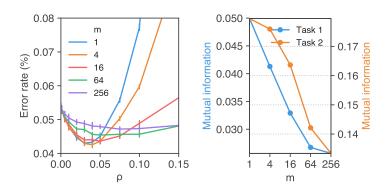


Рис.: (слева) Ошибка на тесте, как функция от ρ для разных значений m. (справа) Предсказывающая способность m-негладкости для обощаемости при разных значениях m (большие значения говорят о большей корреляции). Левая шкала показывает значения для "Task 1 правая - для "Task 2".

Спектр гессиана

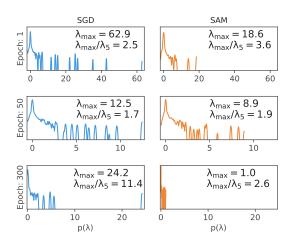


Рис.: Изменение спектра гессиана во время обучения для SGD(слева) и для SAM(справа).

Выводы

- Авторы представили новый метод с хорошим теоретическим обоснованием.
- Подтвердили полезность метода экспериментально.
- Можно пробовать заменять классическую оптимизацию на SAM в своих задачах.

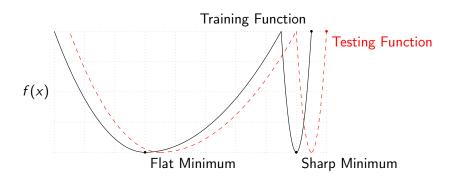
План

- 🕕 Доклад
 - О чем эта работа?
 - Теоретическая предпосылка
 - Выведение метода
 - Схема метода
 - Эксперименты
 - m-острота
 - Спектр гессиана
- 2 Контекст
- З Рецензия
- Эксперименть

Авторы

- Pierre Foret магистр Barkley. Был одним из организаторов соревнования по оценке генерализации на NIPS 2020.
- Ariel Kleiner до значительного перерыва публиковал работы по высокопроизводительному машинному обучению и большим данным
- Hossein Mobahi и Behnam Neyshabur более заслуженные исследователи (h-index 22 ± 1). В последние годы увеличивалось количество исследование обобщающей способности моделей

На что опирается



_

¹Nitish Shirish Keskar и др. "On large-batch training for deep learning:

На что опирается

- Масштабное сравнение [6] разных метрик генерализации, которое показало перспективность "sharpness" подхода
- В исследовании [1] была использована схожая техника вывода теоретических оценок

Конкуренты

- Похожая работа [11], в которой с той же мотивацией демонстрируют, что небольшое изменение параметров сети может сильно испортить качество.
- ② SWA [5] собирает несколько наборов весов в процессе оптимизации и усредняет их
- В работе [12] получился весьма похожий шаг оптимизатора. Заметно больший теоретический анализ и меньше экспериментальных данных.

Вклад

Репозиторий	*	
google-research/sam	290	- ∕X
davda54/sam	700	O PyTorch
sayakpaul/Sharpness-Aware-Minimization-TensorFlow	27	1 TensorFlow

- 60 работ цитируют SAM. Сам метод в них активно не используется, но все сравниваются с полученными результатами
- ASAM [9] предлагает модификацию инвариантную к шкалированию весов

План

- 🚺 Доклад
 - О чем эта работа?
 - Теоретическая предпосылка
 - Выведение метода
 - Схема метода
 - Эксперименты
 - m-острота
 - Спектр гессиана
- 2 Контекст
- З Рецензия
- Эксперименты

Сильные стороны статьи

- Проведено обширное эмпирическое исследование того, как SAM влияет на качество предсказаний. Использовались разные архитектуры, наборы данных и методы регуляризации.
- Эксперименты показали, что метод действительно дает значимое улучшение.
- Статья написана четко и понятно, ее легко читать.
- Метод описан достаточно подробно, так что результаты можно вопроизвести.

Слабые стороны статьи

- **Нет сравнений с близкими работами** [2, 5, 12] и прямыми конкурентами
- Аналогичный метод был предложен под названием extragradient method [8] и неоднократно появлялся в недавних работах по оптимизации [3]. Он в статье не упомянут.
- У метода нет теоретического обоснования, так как взятая за основу оценка держится только в очень специфичных условиях.
- Поведение метода во время обучения не изучено, поскольку эксперименты фокусируются только на улучшении метрик.

Воспроизводимость

- Экспериментальная установка в статье описана подробно. В аппендиксе приведены подобранные гиперпараметры, код на JAX выложен в открытый доступ.
- Существуют неофициальные реализации, в которых попытались воспроизвести результаты в классификации CIFAR-10.

Реализация Модель		C SAM	Без SAM
davda54	WRN 16-8	97.1%	96.8%
sayakpaul	ResNet20	80.5%	83.1%

План

- 🕕 Доклад
 - О чем эта работа?
 - Теоретическая предпосылка
 - Выведение метода
 - Схема метода
 - Эксперименты
 - m-острота
 - Спектр гессиана
- 2 Контекст
- В Рецензия
- Эксперименты

- Наборы данных: FashionMNIST, CIFAR10
- ullet Параметры SAM: p=2, ho=0.05
- Косинусное расписание длины шага
- ConvNet: $\alpha = 0.1$ (FMNIST), $\alpha = 0.01$ (CIFAR), momentum=0.9, weight_decay=0.0001
- ResNet: $\alpha = 1.0$ (CIFAR), momentum=0.9, weight_decay=0.0001

Набор данных	Модель	SGD	SAM
Fashion-MNIST	ConvNet	0.8730	0.8751
CIFAR10	ConvNet	0.7171	0.6952
CIFAR10	ResNet	0.7349	0.7579

• Графики функции потерь в области оптимума для сверточной сети, получены с помощью [10].

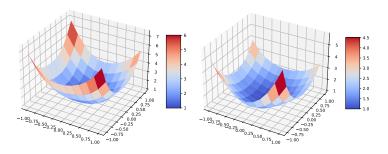


Рис.: Функция потерь в области оптимума. Слева: SGD, справа: SAM

• Графики функции потерь в области оптимума для ResNet.

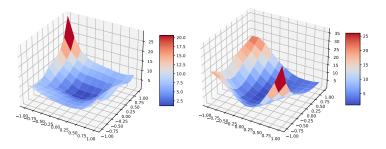


Рис.: Функция потерь в области оптимума. Слева: SGD, справа: SAM

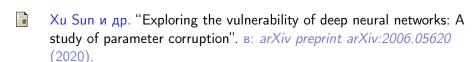
Источники I

- Niladri S Chatterji, Behnam Neyshabur и Hanie Sedghi. "The intriguing role of module criticality in the generalization of deep networks". В: arXiv preprint arXiv:1912.00528 (2019).
- Pratik Chaudhari и др. "Entropy-SGD: Biasing Gradient Descent Into Wide Valleys". в: *CoRR* abs/1611.01838 (2016). arXiv: 1611.01838. URL: http://arxiv.org/abs/1611.01838.
- Jelena Diakonikolas и L. Orecchia. "Accelerated Extra-Gradient Descent: A Novel Accelerated First-Order Method". в: ITCS. 2018.
- Pierre Foret и др. "Sharpness-Aware Minimization for Efficiently Improving Generalization". в: CoRR abs/2010.01412 (2020). arXiv: 2010.01412. URL: https://arxiv.org/abs/2010.01412.
- Pavel Izmailov и др. "Averaging Weights Leads to Wider Optima and Better Generalization". в: CoRR abs/1803.05407 (2018). arXiv: 1803.05407. URL: http://arxiv.org/abs/1803.05407.

Источники II

- Yiding Jiang и др. "Fantastic generalization measures and where to find them". в: arXiv preprint arXiv:1912.02178 (2019).
- Nitish Shirish Keskar и др. "On large-batch training for deep learning: Generalization gap and sharp minima". в: arXiv preprint arXiv:1609.04836 (2016).
- G. M. Korpelevich. "The extragradient method for finding saddle points and other problems". B: 1976.
- Jungmin Kwon и др. "ASAM: Adaptive Sharpness-Aware Minimization for Scale-Invariant Learning of Deep Neural Networks". в: CoRR abs/2102.11600 (2021). arXiv: 2102.11600. URL: https://arxiv.org/abs/2102.11600.
- Hao Li и др. "Visualizing the Loss Landscape of Neural Nets". в: Neural Information Processing Systems. 2018.

Источники III



Colin Wei и Tengyu Ma. "Improved Sample Complexities for Deep Networks and Robust Classification via an All-Layer Margin". B: CoRR abs/1910.04284 (2019). arXiv: 1910.04284. URL: http://arxiv.org/abs/1910.04284.