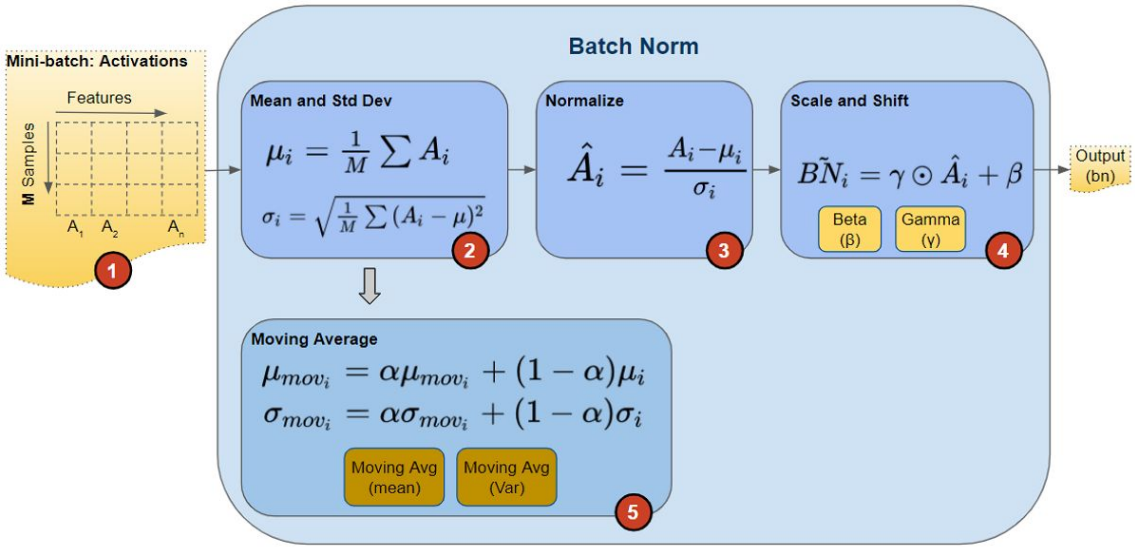
On the Periodic Behavior of Neural Network Training with Batch Normalization and Weight Decay

Напоминание: batch normalization [1]

Суть данного метода заключается в том, что некоторым слоям нейронной сети на вход подаются данные, предварительно обработанные и имеющие нулевое математическое ожидание и единичную дисперсию.



Напоминание: weight decay [2]

Это регуляризация.

$$Loss(y, y') = L(y, y') + weight\_decay * sum(x^2)$$

Напоминание: scale-invariant функции

Это функции для которых верно, что $f(\alpha x) = f(x)$ для любого $\alpha > 0$.

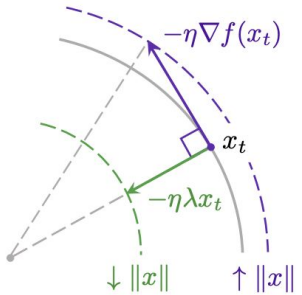
Как выглядит обучение scale-invariant нейронной сети

Для scale-invariant функций верно, что:

$$\begin{cases} \langle \nabla f(x), x \rangle = 0, \ \forall x \\ \nabla f(\alpha x) = \dfrac{1}{\alpha} \nabla f(x), \ \forall x, \ \alpha > 0. \end{cases}$$

Если нейронная сеть является scale-invariant функцией, то при ее обучении с использованием регуляризации, изменение параметров формироваться из двух компонент:

$$x_{t+1} = x_t - \eta\lambda x_t - \eta \nabla f(x_t)$$



А как сделать нейронную сеть scale-invariant?

- Добавить больше batch normalization слоев
- Зафиксировать обучаемые параметры batch normalization слоев
- Зафиксировать веса последнего слоя

Архитектура моделей и обучения в этом исследовании

- Функция потерь – кросс энтропия
- Размер батча 128
- Обучение длится 1000 эпох

Дополнительная терминология

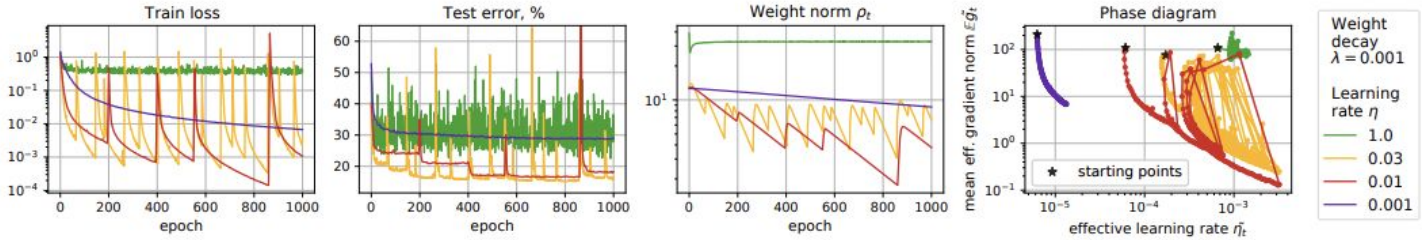
Эффективный градиент – градиент для точки на единичной сфере. Для scale-invariant функций это $\nabla f(x/||x||) = \nabla f(x)||x||$.

Эффективный learning rate – $\eta_{eff} = \eta/||x||^2$.

Что за periodic behaviour?

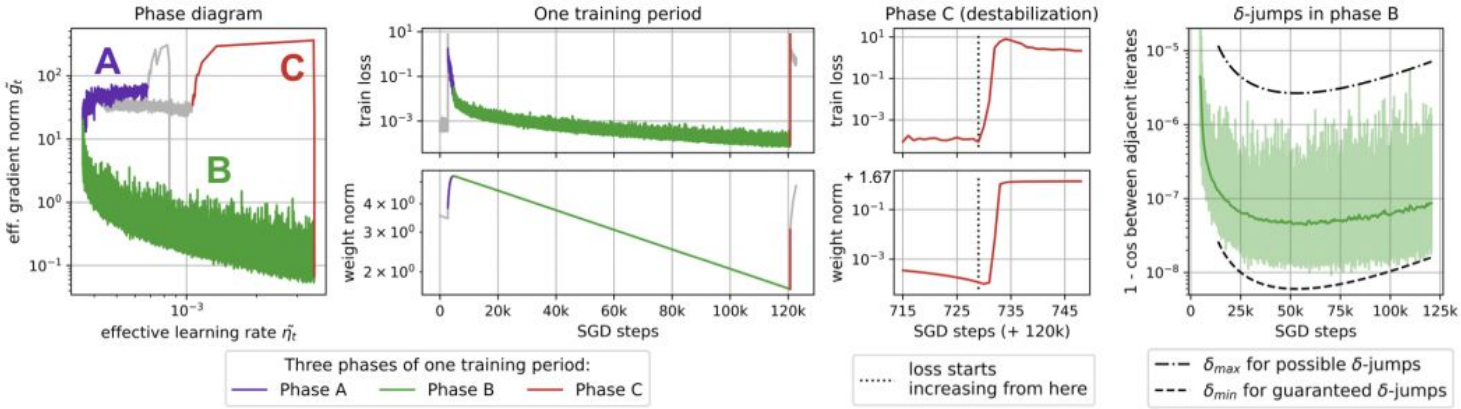
Авторы заметили, что различные статистики (ошибка на обучающей выборке, на тестовой, норма весов и т.д.) ведут себя практически как периодические функции в процессе обучения при следующих условиях:

- Используемая нейронная сеть является scale-invariant функцией
- Используется стандартный SGD с weight decay и константным learning rate

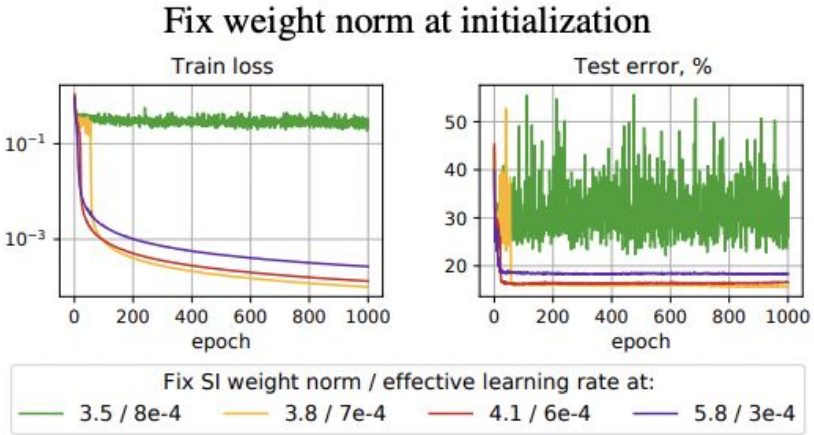


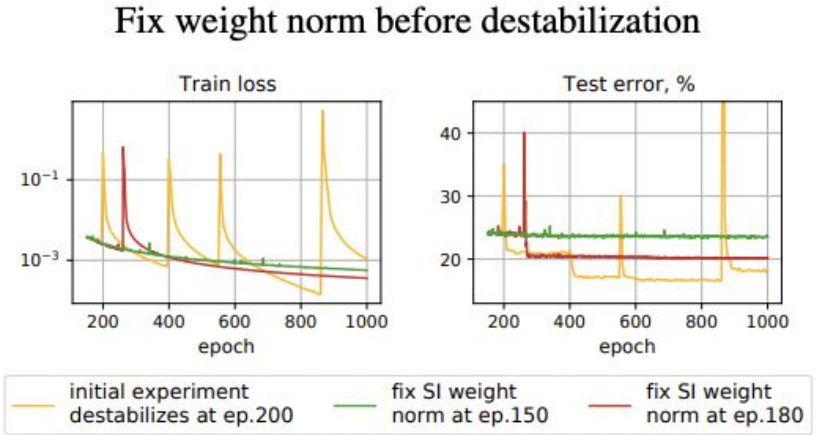
Периодическое поведение scale-invariant ConvNet на датасете CIFAR-10

А что происходит внутри одного “периода”?



Это точно из-за batch normalization и регуляризации?





Почему случается фаза C?

Пусть процесс обучения совершает **δ-прыжок**, если косинусное расстояние весов модели между итерациями превысило некоторое $\delta > 0$:

$$1 - \cos(x_t, x_{t+1}) > \delta$$

Предположим, что если модель не совершает δ-прыжок со значительным δ, то дестабилизации не происходит. Тогда в каких случаях модель совершает δ-прыжок?

Утверждение 1 Если f(x) scale-invariant функция оптимизируемая с ограниченным эффективных градиентом $0 \le l \le g_t \le L < +\infty$, тогда для достаточно малого δ и $(1-\eta\lambda) \le 1$ верны следующие условия:

$$||x_t||^2 \le \eta L/\sqrt{2\delta} \Rightarrow \text{δ-прыжок возможен}$$

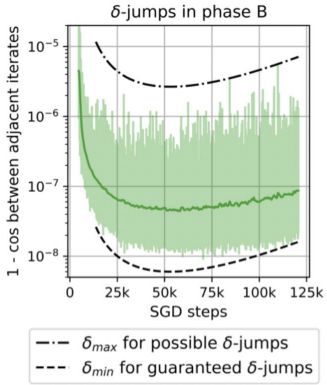
$$||x_t||^2 \le \eta l/\sqrt{2\delta} \Rightarrow \text{δ-прыжок гарантирован}$$

Почему случается фаза C?

Утверждение 1 Если f(x) scale-invariant функция оптимизируемая с ограниченным эффективных градиентом $0 \le l \le g_t \le L < +\infty$, тогда для достаточно малого δ и $(1-\eta\lambda)\le 1$ верны следующие условия:

$$||x_t||^2 \le \eta L/\sqrt{2}\delta \Rightarrow \delta\text{-прыжок возможен}$$

$$||x_t||^2 \le \eta l/\sqrt{2}\delta \Rightarrow \delta\text{-прыжок гарантирован}$$



Когда случается фаза C?

Утверждение 2 Пусть κ=√(η/2λ). Если f(x) scale-invariant функция оптимизируемая с ограниченным эффективных градиентом 0 ≤ l ≤ gt ≤ L < +∞ и 2ηλL≤l:

1. Если $\rho_0^2 > \kappa l$ и $\delta < \eta\lambda(L^2/l^2)$, тогда **минимальное** время требующееся для δ-прыжка

$$t_{\min} = \max\left\{0, \frac{\log\left(\rho_0^2 - \kappa\ell\right) - \log\left(\frac{\eta L}{\sqrt{2\delta}} - \kappa\ell\right)}{-\log(1-4\eta\lambda)}\right\}$$

2. Если $\rho_0^2 > \kappa L$ и $\delta < \eta\lambda(L^2/l^2)$, тогда **максимальное** время требующееся для δ-прыжка

$$t_{\max} = \max\left\{0, \frac{\log\left(\rho_0^2 - \kappa L\right) - \log\left(\frac{\eta \ell}{\sqrt{2\delta}} - \kappa L\right)}{-\log(1-2\eta\lambda)}\right\}$$

Почему норма весов так себя ведет?

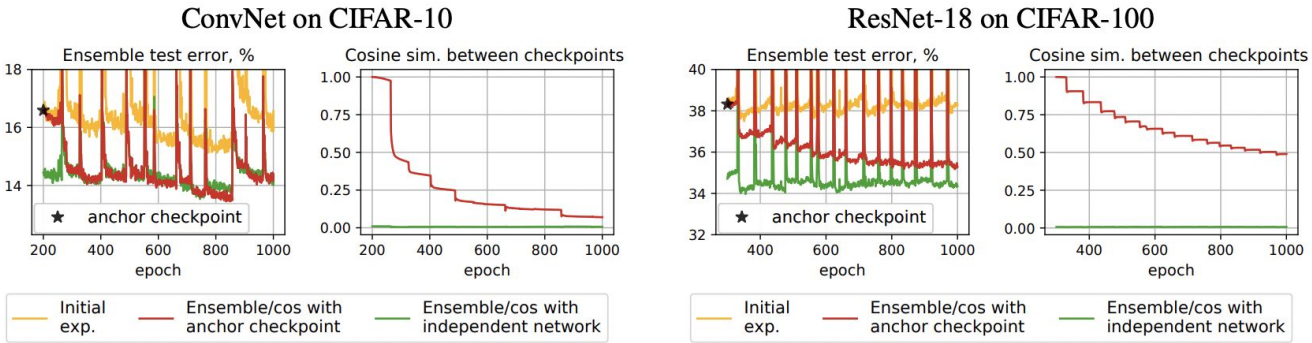
Утверждение 3 Пусть $\kappa=\sqrt{(\eta/2\lambda)}$. Если $f(x)$ scale-invariant функция оптимизируемая с ограниченным эффективных градиентом $0 \le l \le gt \le L < +\infty$ и $2\eta\lambda L \le l$, тогда $\kappa l \le \rho^2_t \le \kappa L$, при $t>>1$. Более того, если $\rho^2_0 > \kappa L$, то ρ^2_t сходится $[\kappa l, \kappa L]$ линейно за $O(1/\eta\lambda)$ итераций.

Эмпирические наблюдения

- При использовании более высокого learning rate периодическое поведение стабилизируется при более высокой норме весов. То же самое верно и для weight decay
- В начале процесса обучения наблюдается *разогревочная* фаза. При достижении определенной нормы весов периодическое поведение становится стабильным

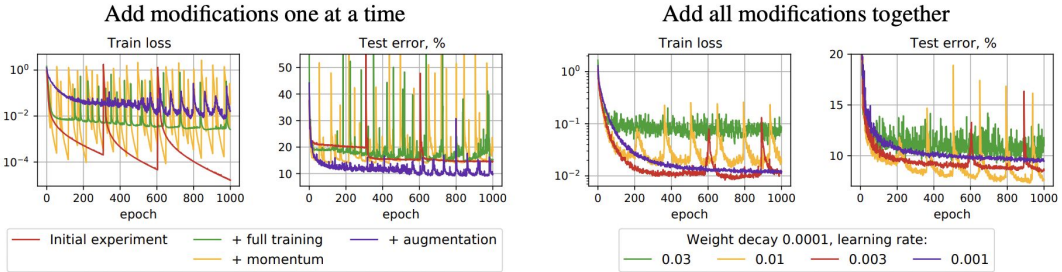
Эмпирические наблюдения

Если обучение сходится к одному и тому же минимуму в разные периоды, то косинусная близость весов должна быть ближе к 1, а ошибка ансамбля этих моделей должна быть близка к ошибке любой из них. Напротив, если дестабилизация приводит к слишком большому скачку весов это эквивалентно обучению модели из новой случайной точки, соответственно, косинусная близость двух минимумов должна быть ближе к 0 и ошибка ансамбля этих моделей должна быть близка к ошибке ансамбля двух независимо обученных моделей.



Что происходит на практике?

- При использовании не scale-invariant нейронной сети периодичность сохраняется, однако меняется частота периодов
- При использовании SGD с моментумом периодичность сохраняется, однако увеличивается частота периодов
- При использовании аугментации периодичность поведения начинается наблюдается значительно позже, так как более высокая ошибка приводит к “перевесу” градиентной части направления оптимизации



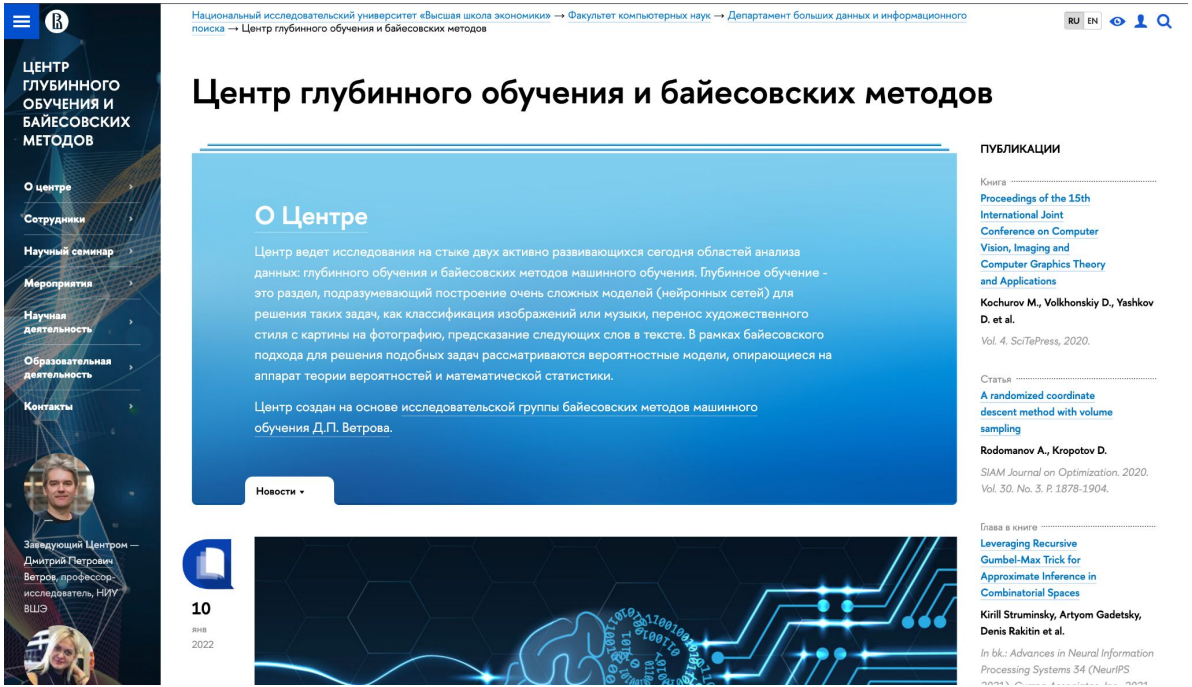
Библиография

1. Ekaterina Lobacheva, Maxim Kodryan, Nadezhda Chirkova, Andrey Malinin, Dmitry Vetrov. *On the Periodic Behavior of Neural Network Training with Batch Normalization and Weight Decay*. NeurIPS, 2021.
2. Batch Norm Explained Visually — How it works, and why neural networks need it
3. This thing called Weight Decay
4. Shibani Santurkar, Dimitris Tsipras, Andrew Ilyas, Aleksander Madry. *How Does Batch Normalization Help Optimization?* NeurIPS, 2018.

Обзор-рецензия

Авторы статьи

- Сотрудники центра глубинного обучения и байесовских методов НИУ ВШЭ
- Преподаватели на курсах ФКН ПМИ



35-ая конференция NeurIPS 2021

- Статья на Хабре: “Самое важное с конференции NeurIPS 2021”
- 10 статей исследователей ФКН приняты на конференцию

На что опирались авторы?

- Ioffe, S. and Szegedy, C. (2015). Batch normalization: Accelerating deep network training by reducing internal covariate shift.
- Bjorck, N., Gomes, C. P., Selman, B., and Weinberger, K. Q. (2018). Understanding batch normalization.

Цитирования

- 10 цитирований и ссылок по google scholar
- Упоминание в towardsdatascience

Сильные стороны

- Простая интересная идея
- Несложные математические выкладки
- Неожиданный результат

Слабые стороны и точки роста

- Как избежать такого поведения при обучении своей сети?
- Много условий на данные и методы

Собственно это я бы и хотел предложить в качестве улучшений: описать как избежать такого поведения у сети и попробовать обобщить теорию.