Широкие и узкие оптимумы

Методы обучения широких оптимумов (SWA и SAM)

План

- Разобраться что такое широкие и узкие оптимумы и почему мы хотим получать именно широкие
- Рассмотреть модели SWA и SAM которые позволяют нам обучаться под широкие оптимумы

Что такое широкие и узкие оптимумы?

Narrow optimum
Eigenvalues of Hessian very large
Loss increases rapidly as parameters change

Broad optimum
Eigenvalues of Hessian close to zero
Loss increases slowly as parameters change

Чем хороши широкие оптимумы?

- Широкие оптимумы повышают обобщающую способность нашей модели
- Узкие оптимумы наоборот крайне неустойчивы и поэтому обладают более низкой обобщающей способностью

SWA (Stochastic Weight Averaging): Основные идеи

- Вспоминаем FGE (Fast Geometric Ensembling)
- Результаты были хорошие, но тяжёлый инференс
- А что будет, если усреднять не предсказания моделей, а их веса?
- А будет чудо: получим хорошие предсказания и всего одну предсказывающую модель на выходе

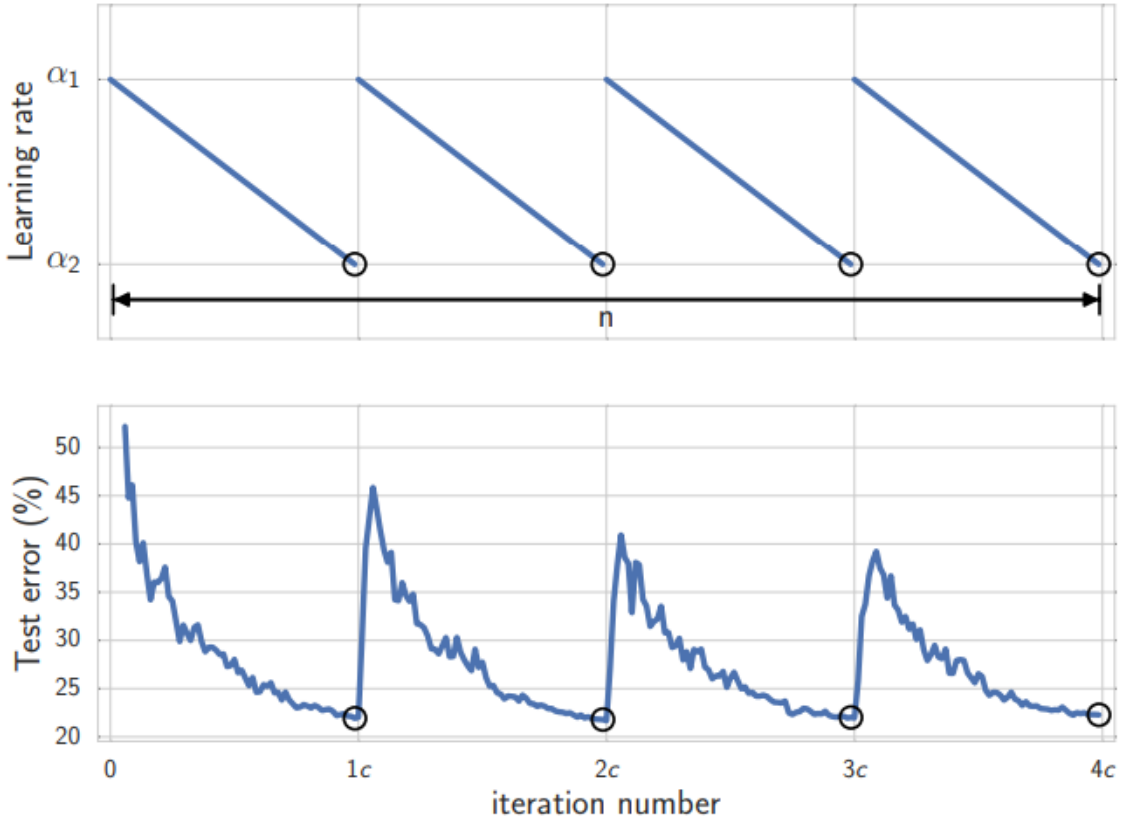
SWA
Learning Rate

Возьмём LearningRate как у FGE:

$$\alpha(i) = (1 - t(i))\alpha_1 + t(i)\alpha_2,$$
$$t(i) = \frac{1}{c}\left(\mathrm{mod}(i-1, c) + 1\right).$$

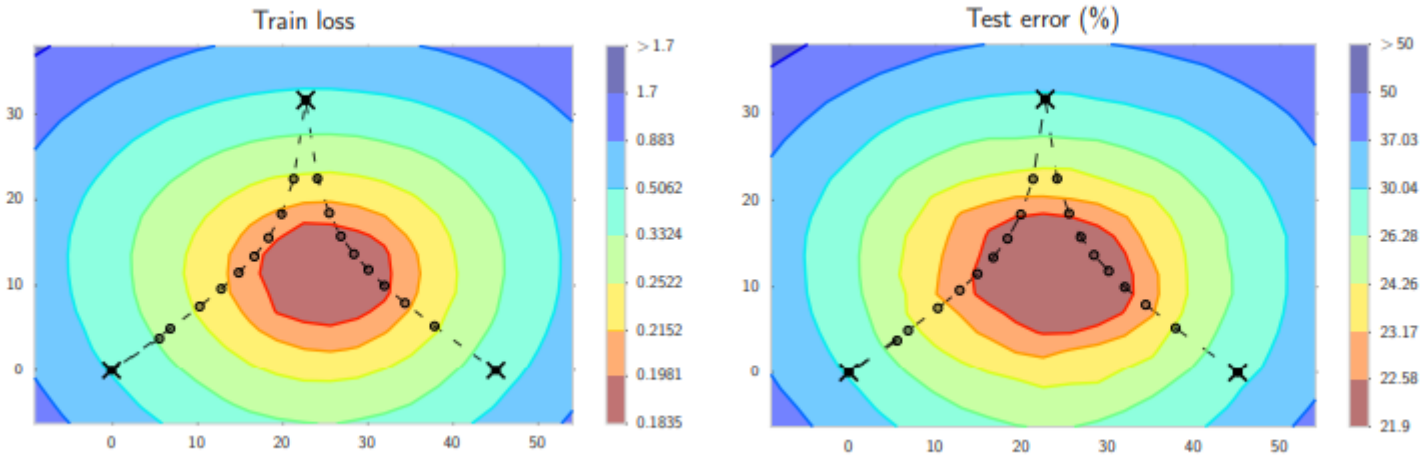
То есть наш LR будет циклично снижаться от α_1 до α_2

SWA
Learning Rate



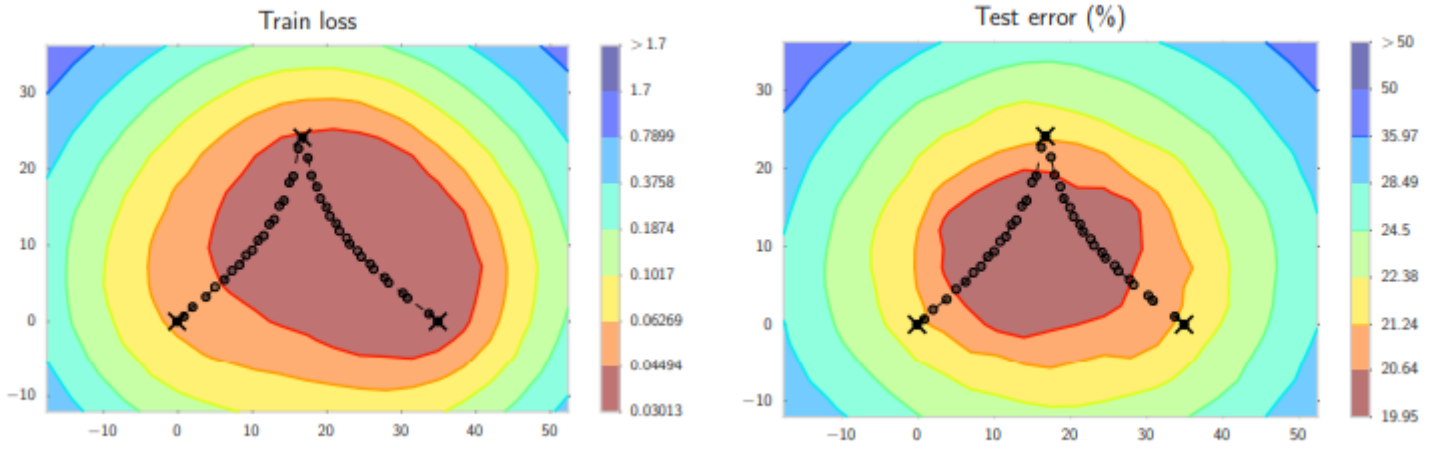
SWA
Learning Rate (мотивация)

- Если взять константный LR, то мы будем быстро приближаться к минимуму, однако потом будем “перескакивать”



SWA
Learning Rate (мотивация)

- С другой стороны, если взять наш цикличный LR, то мы будем дольше идти к минимуму, но зато за несколько циклов найдём сразу несколько локальных минимумов и вряд ли перескочим искомый



SWA

- Давайте попытаемся совместить плюсы каждого подхода
- Для начала будем использовать constant LR
- Затем с какого-то момента возьмём наш cyclic LR и дообучим модель с ним
- Таким образом получим быстро и хорошо обучаемую модель

SWA
Алгоритм

Algorithm 1 Stochastic Weight Averaging

Require:
weights $\hat{w}$, LR bounds α_1, α_2,
cycle length c (for constant learning rate $c = 1$), number of iterations n

Ensure: w_{SWA}

$w \leftarrow \hat{w}$ {Initialize weights with $\hat{w}$}
$w_{\text{SWA}} \leftarrow w$
for $i \leftarrow 1, 2, \ldots, n$ **do**
  $\alpha \leftarrow \alpha(i)$ {Calculate LR for the iteration}
  $w \leftarrow w - \alpha \nabla \mathcal{L}_i(w)$ {Stochastic gradient update}
  if $\mathrm{mod}(i, c) = 0$ **then**
    $n_{\text{models}} \leftarrow i/c$ {Number of models}
    $w_{\text{SWA}} \leftarrow \frac{w_{\text{SWA}} \cdot n_{\text{models}} + w}{n_{\text{models}} + 1}$ {Update average}
  end if
end for
{Compute BatchNorm statistics for w_{SWA} weights}

SWA и FGE

Покажем, что SWA и FGE выдают близкие результаты

$$w_{SWA} = \frac{1}{n}\sum w_i$$

Пускай $\Delta_i = w_i - w_{SWA}$ тогда получаем, что $\sum \Delta_i = 0$

Линеаризуем f в точке w_{SWA} $f(w_j) = f(w_{SWA}) + < \nabla f(w_{SWA}), \Delta_j > + O(\|\Delta_j\|^2)$

$$f_{FGE} = \frac{1}{n}\sum f(w_i)$$

$$f_{FGE} - f(w_{SWA}) = \frac{1}{n}(< \nabla f(w_{SWA}), \sum \Delta_j >) + O(\|\Delta_j\|^2) = O(\|\Delta_j\|^2)$$

SWA
Сравнение результатов

$$w_{\text{SWA}}(t, d) = w_{\text{SWA}} + t \cdot d,$$
$$w_{\text{SGD}}(t, d) = w_{\text{SGD}} + t \cdot d,$$

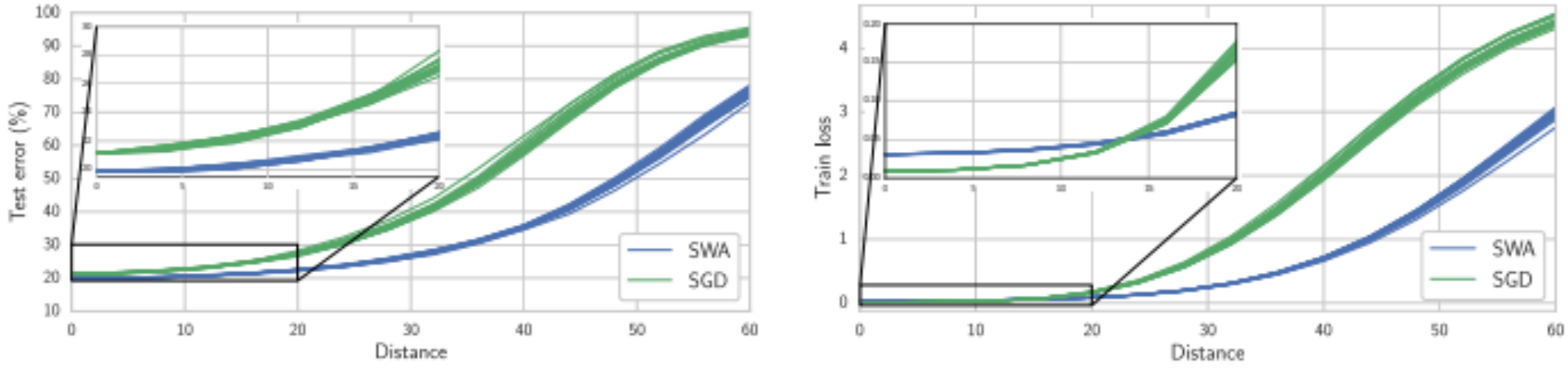
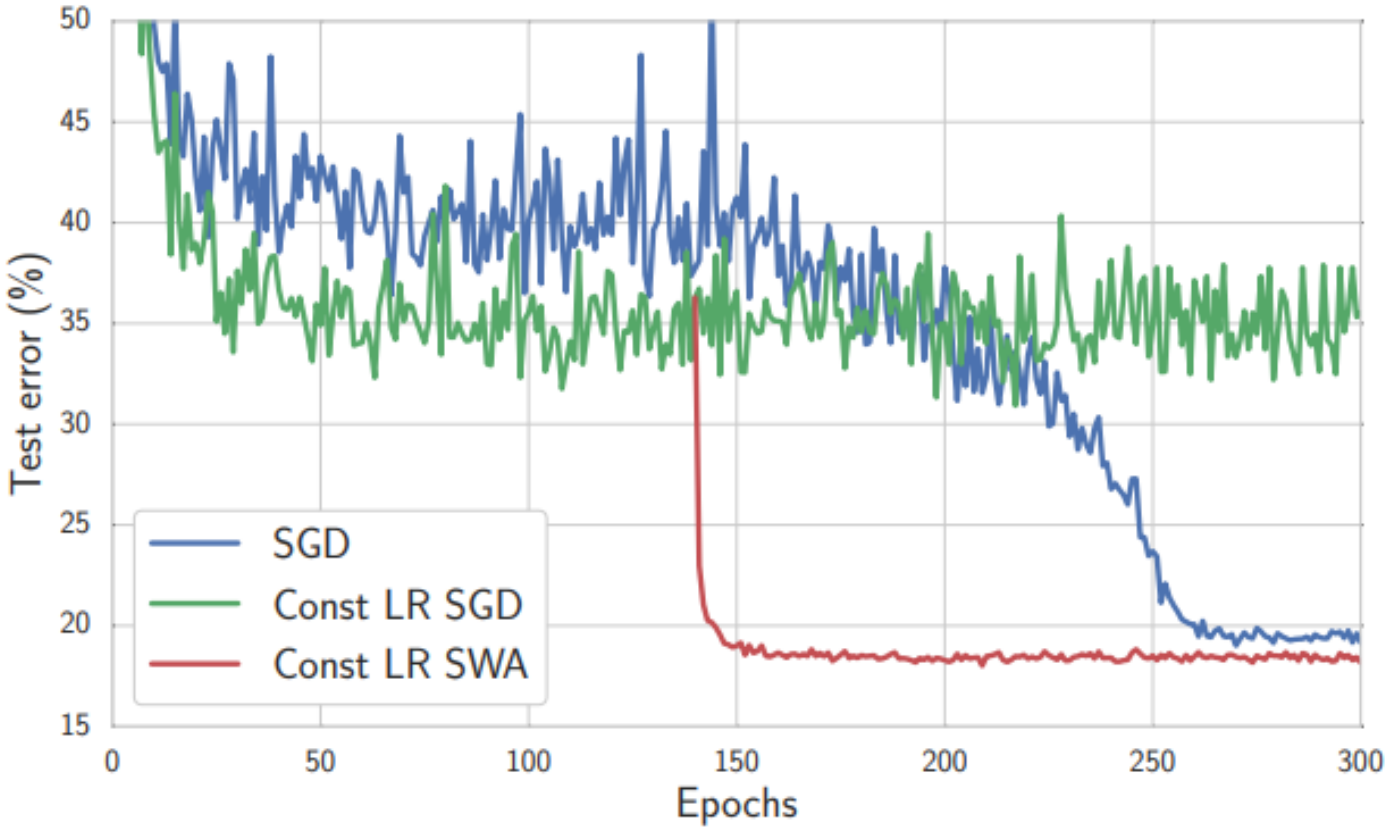


Figure 4: (**Left**) Test error and (**Right**) L_2-regularized cross-entropy train loss as a function of a point on a random ray starting at SWA (blue) and SGD (green) solutions for Preactivation ResNet-164 on CIFAR-100. Each line corresponds to a different random ray.

SWA
Сравнение результатов

DNN (Budget)	SGD	FGE (1 Budget)	SWA		
			1 Budget	1.25 Budgets	1.5 Budgets
		CIFAR-100			
VGG-16 (200)	72.55 ± 0.10	74.26	73.91 ± 0.12	74.17 ± 0.15	74.27 ± 0.25
ResNet-164 (150)	78.49 ± 0.36	79.84	79.77 ± 0.17	80.18 ± 0.23	80.35 ± 0.16
WRN-28-10 (200)	80.82 ± 0.23	82.27	81.46 ± 0.23	81.91 ± 0.27	82.15 ± 0.27
PyramidNet-272 (300)	83.41 ± 0.21	–	–	83.93 ± 0.18	84.16 ± 0.15
		CIFAR-10			
VGG-16 (200)	93.25 ± 0.16	93.52	93.59 ± 0.16	93.70 ± 0.22	93.64 ± 0.18
ResNet-164 (150)	95.28 ± 0.10	95.45	95.56 ± 0.11	95.77 ± 0.04	95.83 ± 0.03
WRN-28-10 (200)	96.18 ± 0.11	96.36	96.45 ± 0.11	96.64 ± 0.08	96.79 ± 0.05
ShakeShake-2x64d (1800)	96.93 ± 0.10	–	–	97.16 ± 0.10	97.12 ± 0.06

SWA
Сравнение результатов

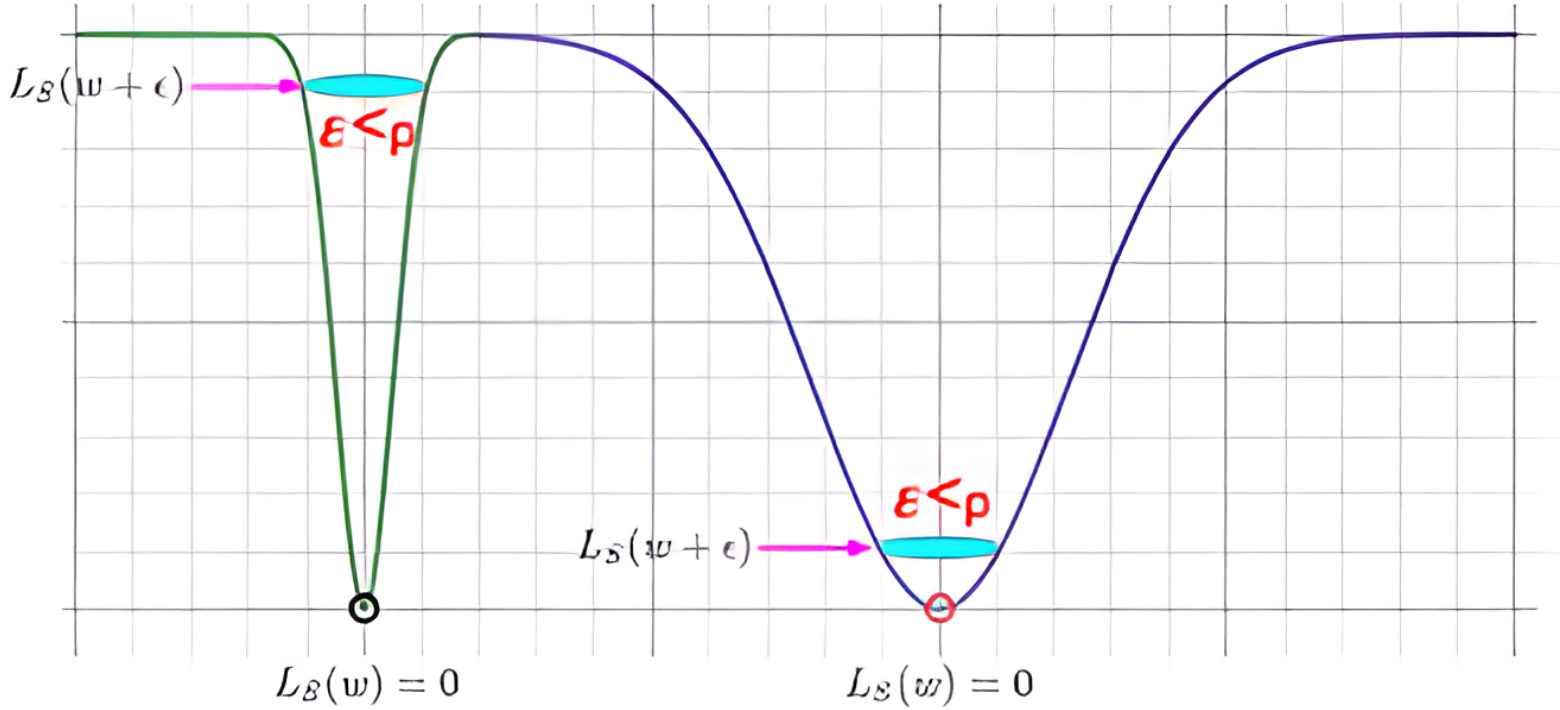


SAM(Sharpness-Aware Minimization) Основные идеи

- Сейчас мы минимизируем функцию потерь в точке, давайте попробуем минимизировать функцию потерь в некоторой окрестности
- Будем искать такую область максимум в которой минимален, среди всех областей
- Таким образом получим целую область на которой значение функции потерь маленькое, а, значит, найдём широкий оптимум

SAM
Функция потерь

$$\min_{\boldsymbol{w}} L_{\mathcal{S}}^{SAM}(\boldsymbol{w}) + \lambda ||\boldsymbol{w}||_2^2 \quad \text{where} \quad L_{\mathcal{S}}^{SAM}(\boldsymbol{w}) \triangleq \max_{||\boldsymbol{\epsilon}||_p \leq \rho} L_S(\boldsymbol{w} + \boldsymbol{\epsilon}),$$



SAM
Формулы, формулы, формулы...

$$\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{w}) = \rho \, \text{sign}\left(\nabla_{\boldsymbol{w}} L_{\mathcal{S}}(\boldsymbol{w})\right) |\nabla_{\boldsymbol{w}} L_{\mathcal{S}}(\boldsymbol{w})|^{q-1} \Big/ \left(\|\nabla_{\boldsymbol{w}} L_{\mathcal{S}}(\boldsymbol{w})\|_q^q \right)^{1/p} \tag{2}$$

$$\nabla_{\boldsymbol{w}} L_{\mathcal{S}}^{SAM}(\boldsymbol{w}) \approx \nabla_{\boldsymbol{w}} L_{\mathcal{S}}(w)|_{\boldsymbol{w}+\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{w})}. \tag{3}$$

SAM
Алгоритм

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

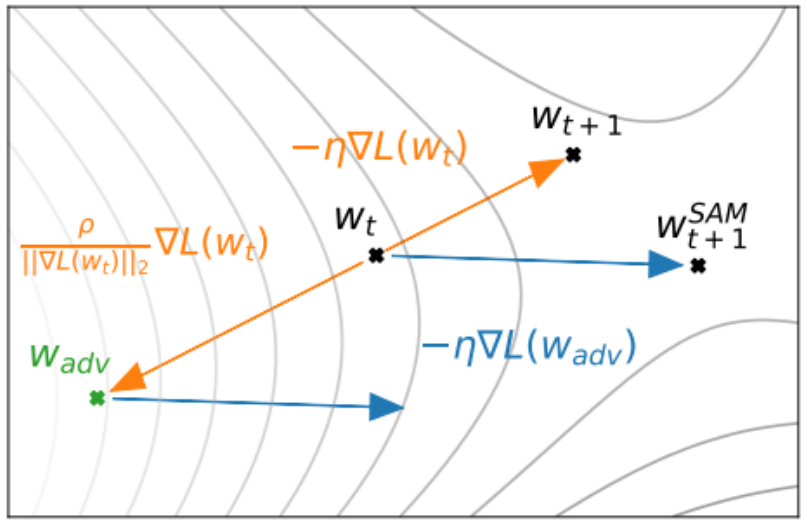


Figure 2: Schematic of the SAM parameter update.

SAM
Сравнение результатов

		CIFAR-10		CIFAR-100	
Model	Augmentation	SAM	SGD	SAM	SGD
WRN-28-10 (200 epochs)	Basic	**2.7**$_{\pm 0.1}$	3.5$_{\pm 0.1}$	**16.5**$_{\pm 0.2}$	18.8$_{\pm 0.2}$
WRN-28-10 (200 epochs)	Cutout	**2.3**$_{\pm 0.1}$	2.6$_{\pm 0.1}$	**14.9**$_{\pm 0.2}$	16.9$_{\pm 0.1}$
WRN-28-10 (200 epochs)	AA	**2.1**$_{\pm <0.1}$	2.3$_{\pm 0.1}$	**13.6**$_{\pm 0.2}$	15.8$_{\pm 0.2}$
WRN-28-10 (1800 epochs)	Basic	**2.4**$_{\pm 0.1}$	3.5$_{\pm 0.1}$	**16.3**$_{\pm 0.2}$	19.1$_{\pm 0.1}$
WRN-28-10 (1800 epochs)	Cutout	**2.1**$_{\pm 0.1}$	2.7$_{\pm 0.1}$	**14.0**$_{\pm 0.1}$	17.4$_{\pm 0.1}$
WRN-28-10 (1800 epochs)	AA	**1.6**$_{\pm 0.1}$	2.2$_{\pm <0.1}$	**12.8**$_{\pm 0.2}$	16.1$_{\pm 0.2}$
Shake-Shake (26 2x96d)	Basic	**2.3**$_{\pm <0.1}$	2.7$_{\pm 0.1}$	**15.1**$_{\pm 0.1}$	17.0$_{\pm 0.1}$
Shake-Shake (26 2x96d)	Cutout	**2.0**$_{\pm <0.1}$	2.3$_{\pm 0.1}$	**14.2**$_{\pm 0.2}$	15.7$_{\pm 0.2}$
Shake-Shake (26 2x96d)	AA	**1.6**$_{\pm <0.1}$	1.9$_{\pm 0.1}$	**12.8**$_{\pm 0.1}$	14.1$_{\pm 0.2}$
PyramidNet	Basic	**2.7**$_{\pm 0.1}$	4.0$_{\pm 0.1}$	**14.6**$_{\pm 0.4}$	19.7$_{\pm 0.3}$
PyramidNet	Cutout	**1.9**$_{\pm 0.1}$	2.5$_{\pm 0.1}$	**12.6**$_{\pm 0.2}$	16.4$_{\pm 0.1}$
PyramidNet	AA	**1.6**$_{\pm 0.1}$	1.9$_{\pm 0.1}$	**11.6**$_{\pm 0.1}$	14.6$_{\pm 0.1}$
PyramidNet+ShakeDrop	Basic	**2.1**$_{\pm 0.1}$	2.5$_{\pm 0.1}$	**13.3**$_{\pm 0.2}$	14.5$_{\pm 0.1}$
PyramidNet+ShakeDrop	Cutout	**1.6**$_{\pm <0.1}$	1.9$_{\pm 0.1}$	**11.3**$_{\pm 0.1}$	11.8$_{\pm 0.2}$
PyramidNet+ShakeDrop	AA	**1.4**$_{\pm <0.1}$	1.6$_{\pm <0.1}$	**10.3**$_{\pm 0.1}$	10.6$_{\pm 0.1}$

SAM
Сравнение результатов

Model	Epoch	SAM		Standard Training (No SAM)	
		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$_{\pm 0.11}$
	200	**21.4**$_{\pm 0.1}$	5.82$_{\pm 0.03}$	22.3$_{\pm 0.1}$	6.37$_{\pm 0.04}$
	400	**20.9**$_{\pm 0.1}$	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$_{\pm 0.1}$	5.66$_{\pm 0.05}$
	200	**19.4**$_{\pm 0.1}$	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	**18.5**$_{\pm 0.1}$	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$_{\pm 0.07}$

SAM
Сравнение результатов