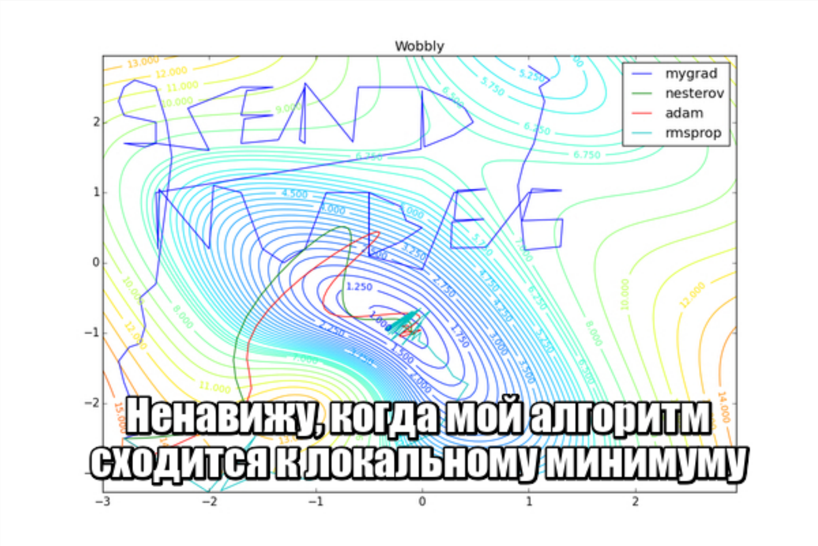
Занятие 4. Оптимизация параметров нейронных сетей. Инициализация параметров

Гирдюк Дмитрий Викторович

15 марта 2025

СПбГУ, ПМ–ПУ, ДФС

Стартер [1]


Wobbly
mygrad
nesterov
adam
rmsprop
SEND NUDES
Ненавижу, когда мой алгоритм
сходится к локальному минимуму

Метод градиентного спуска

- Попробуем за час (академический) освежить в памяти метод градиентного спуска, а также бегло познакомиться с его вариациями в контексте оптимизации параметров нейронных сетей
- Кратко по обозначениям в этой части: θ – параметры, которые хотим оптимизировать, L – лосс-функция
- Метод градиентного спуска:

$$\theta_{t+1} \leftarrow \theta_t - \lambda \nabla_\theta L(\theta_t)$$

- Почему не актуально в контексте глубокого обучения?

Градиентный спуск II

- Выбрав начальное приближение для весов, наше финальное положение будет однозначно определено
- И путь этот может занять очень много времени – особенно для датасетов с сотнями миллионов примеров и миллиардами параметров
- Не говоря уже про "сложный" ландшафт лосс-функции и проблемы с выбором длины шага/скорости обучения λ

Стохастический градиентный спуск

- Стохастический градиентный спуск (Stochastic Gradient Descent, SGD):
$$\theta_{t+1} \leftarrow \theta_t - \lambda \frac{1}{|B_t|} \sum_{i \in B_t} \nabla_\theta l(\theta_t)$$
где B_t – это мини-батч из (перемешанных) примеров
- Далее для упрощения записи будем подразумевать под $\nabla_\theta L(\theta_t)$ именно стохастический градиент
- Вычислительно менее затратно (в смысле шага оптимизации), двигаемся криво-косо, но в нужном направлении (хотя размер мини-батча имеет существенное значение), имеет шанс выпригивать из седловых точек (близкий к 0 градиент) и избегать локальных минимумов

Стохастический градиентный спуск II

- Зачастую используется в паре с различными схемами изменения скорости обучения (learning rate scheduler), о них позже
- Есть набор оценок сходимости GD и SGD для выпуклого и невыпуклого случая, но там все достаточно печально: сильно зависит от начального приближения (квадратично или хуже от расстояния между начальной точкой и оптимумом) [2]

Метод импульса

- Идем дальше, как вам такая идея: попробуем на каждом шаге ориентироваться не только на антиградиент, но и на историю движения
- Сделаем это на основе экспоненциального сглаживания

$$v_{t+1} \leftarrow \beta v_t + \lambda \nabla_\theta L(\theta_t)$$

$$\theta_{t+1} \leftarrow \theta_t - v_{t+1}$$

- Интерпретация следующая: если некоторое время двигаемся в определенном направлении (накопили импульс/momentum), то его резкое изменение может быть не самой лучшей идеей
- Из проблем, у нас еще один гиперпараметр β. Впрочем, настраивают его достаточно редко и оставляют равным 0.9

Импульс Нестерова

- Немного скорректируем предыдущую идею, считаем градиент не в текущей точке, а в той, в которой мы окажемся с учетом импульса

$$v_{t+1} \leftarrow \beta v_t + \lambda \nabla_\theta L(\theta_t - \beta v_t)$$

$$\theta_{t+1} \leftarrow \theta_t - v_{t+1}$$

- Эта идея позволяет повысить устойчивость и скорость сходимости в определенных случаях
- На самом деле есть альтернативные варианты импульса/моментума Нестерова (в англоязычной литературе Nesterov Accelerated Gradient, NAG), а также масса дополнительных модификаций. Подробно можно почитать вот тут [3]

Adagrad

- Идея Adagrad (adaptive gradient) состоит в том, чтобы корректировать скорость обучения отдельных параметров на основе исторической информации: шаг изменения должен быть меньше у тех параметров, которые в большей степени варьируются в данных, и больше у менее изменчивых

$$\theta_{t+1} \leftarrow \theta_t - \frac{\lambda}{\sqrt{G_t} + \epsilon} \nabla_\theta L(\theta_t)$$

  тут $G_t \leftarrow G_{t-1} + g_t^2$, а $g_t = \left(\nabla_\theta L(\theta_t)\right)^2$
- Можете выделить плюсы и минусы?

RMSProp

- Проблема Adagrad в том, что сумма квадратов градиентов некоторых параметров может достаточно быстро вырасти, что, в свою очередь, приведет к проблеме затуханию обновлений
- Для исправления предлагается не суммировать квадраты градиентов, а считать экспоненциальное среднее

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

- И получаем RMSProp

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\lambda}{\sqrt{E[g^2]_t + \epsilon}} \nabla_\theta J(\theta_t)$$

Adam

- Adam (adaptive momentum estimation) сочетает в себе идеи накопления импульса и адаптивного обновления весов вариабельных признаков

$$m_t \leftarrow \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1)\nabla_\theta L(\theta_t)$$

$$v_t \leftarrow \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2)(\nabla_\theta L(\theta_t))^2$$

$$m_t \leftarrow \frac{m_t}{1 - \beta_1^t}, \quad v_t \leftarrow \frac{v_t}{1 - \beta_2^t}$$

$$\theta_{t+1} \leftarrow \theta_t - \frac{\lambda}{\sqrt{v_t} + \epsilon} m_t$$

- Обратите внимание на коэффициенты в 3 строчке. Как вы думаете, для чего они добавляются?
- Его незначительная модификация до сих пор выбор по умолчанию вне зависимости от предметной области

AdamW

- Обычно в реализациях Adam'а присутствует возможность для регуляризации, называемая weight decay. Она эквивалентна L_2 регуляризации в некоторых случаях, но не для Adam'а
- В Adam, прежде чем считать моменты m_t и v_t, предлагается скорректировать градиент:

$$g_t \leftarrow g_t + \lambda\theta_{t-1}$$

- В AdamW градиенты используются исходны, а регуляризация добавляется на последнем шаге при обновлении параметров

$$\theta_{t+1} \leftarrow \theta_t - \eta\left(\frac{1}{\sqrt{\hat{v}_t} + \epsilon}\hat{m}_t + \lambda\theta_{t-1}\right)$$

Что, еще?

- *AMSgrad*, NAdam, RAdam, LookAhead, AggMo, YellowFin, LAMB, QHM, QHAdam, Demon, AdaPlus, Lion...
- По умолчанию используйте AdamW. Есть время и ресурсы на активный перебор гиперпараметров – пробуйте современные альтернативы, в первую очередь ориентируясь на размер батча
- Самое время задать себе вопрос, а сколько суммарно параметров будет задействовано при обучении нейронных сетей, скажем, используя AdamW?

Промежуточный итог по оптимизаторам

- Кратко познакомились с основными идеями, используемыми в оптимизаторах нейронных сетей
- Для интересующихся, вот тут несколько устаревший (2017), но все еще актуальный обзор с иллюстрациями поведения градиента и отдельных компонент оптимизаторов [1], уже упомянутый блогпост по вариантам импульса Нестерова [3], сравнение оптимизаторов в 2020 [4]
- Отдельного внимания заслуживает глава из учебника по МЛ Яндекса, в рамках которой разбираются стохастические оптимизаторы с точки зрения алгоритмов онлайн-обучения [5]

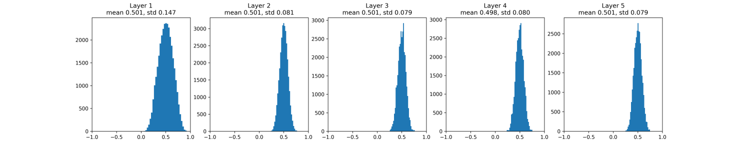
Инициализация параметров

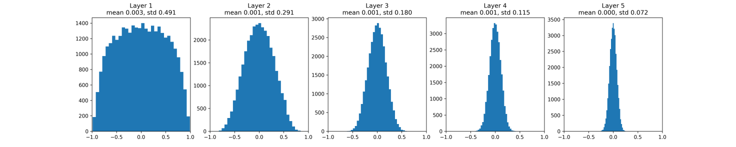
- Мы рассмотрели различные способы настройки параметров весов, но опустили очень важный момент: как параметры должны быть инициализированы?
- Некорректная инициализация параметров может привести к проблемам исчезающих или взрывающихся градиентов. Это, в свою очередь, может свести на нет все попытки обучить нейронную сеть
- Начнем с исключения очевидных вариантов: почему в общем случае не следует инициализировать параметры нулями? А произвольной константой?

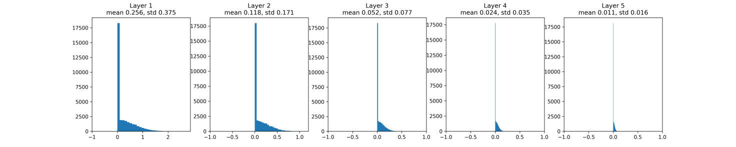
Рандомная инициализация

- Простейший вариант – инициализировать веса значениями нормального распределения с нулевым матожиданием и небольшим значением среднеквадратического отклонения (например, 0.01)
- Подобная инициализация нарушает симметрию, и вполне может работать для не очень глубоких сетей
- В зависимости от значения σ с ростом количества слоев будет наблюдаться постепенное уменьшение или увеличение абсолютных значений активации
- В этих двух ситуациях значения активаций могут стать настолько малыми или настолько большими, что их невозможно будет представить с помощью арифметики с плавающей точкой/запятой
- Проиллюстрируем это для 3 функций активации: сигмоида, гирперболический тангенс и ReLU

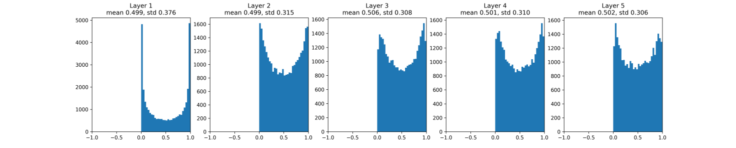
Рандомная инициализация, std $= 0.01$: $\sigma, \tanh, \mathrm{ReLU}$

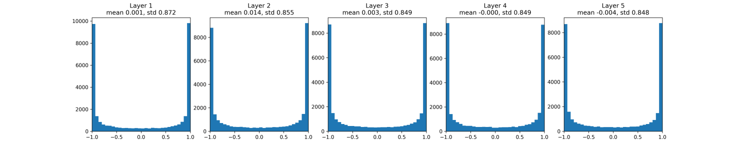


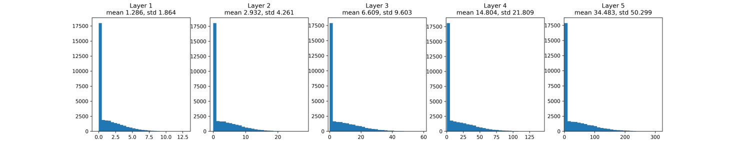




Рандомная инициализация, std $= 0.05$







Инициализация Xavier

- Хорошо, выходит, что все упирается в значение дисперсии

$$\mathsf{Var}(y_i) = \mathsf{Var}\left(\sum_{j=1}^{n} w_{ij}x_j\right) = \sum_{j=1}^{n} \mathsf{Var}\left(w_{ij}x_j\right) =$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \left(E[w_{ij}^2]E[x_j^2] - E[w_{ij}]^2 E[x_j]^2\right) =$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \left(E[w_{ij}]^2 \mathsf{Var}(x_j) + \mathsf{Var}(w_{ij})\mathsf{Var}(x_j) + \mathsf{Var}(w_{ij})E[x_j]^2\right) =$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \mathsf{Var}(w_{ij})\mathsf{Var}(x_j) = n_{\mathsf{in}}\mathsf{Var}(w_{ij})\mathsf{Var}(x_i)$$

- Тут предполагается, что веса инициализируются из симметричного и центрированного в нуле распределения. Аналогичные предположения для входов x_j (для каких функций активации этой справделиво?)

Инициализация Xavier II

- Выходит, что если мы установим дисперсию $\mathsf{Var}(w_{ij})$ равной $\frac{1}{n_{\mathbf{in}}}$, то дисперсия $\mathsf{Var}(y_i)$ будет равна дисперсии входов с предыдущего слоя
- Аналогичный анализ можно провести и для градиентов, что покажет необходимость инициализации параметров с дисперсией равной $\frac{1}{n_{\mathbf{out}}}$

Инициализация Xavier III

- Тогда для случая нормального распределения предлагается следующий подход к инициализации

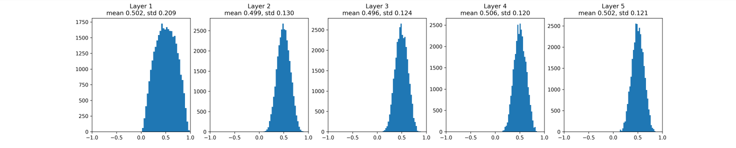
$$W \sim \mathcal{N}\left(0, \sqrt{\frac{2}{n_{in} + n_{out}}}\right)$$

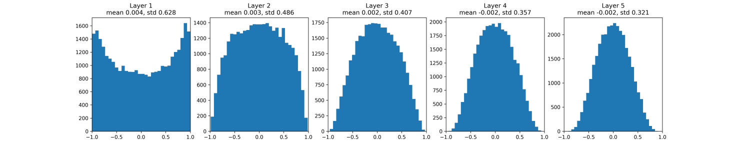
- и для случая равномерного распределения

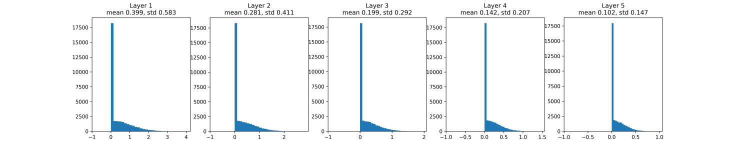
$$W \sim \mathcal{U}\left(-\sqrt{\frac{6}{n_{in} + n_{out}}}, \sqrt{\frac{6}{n_{in} + n_{out}}}\right)$$

- Данный подход принято называть в честь первого автора статьи [6] (Более 26500 цитирований!)

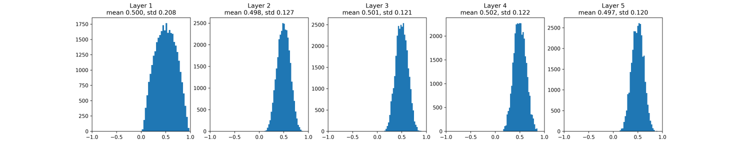
Инициализация Xavier, нормальное распределение

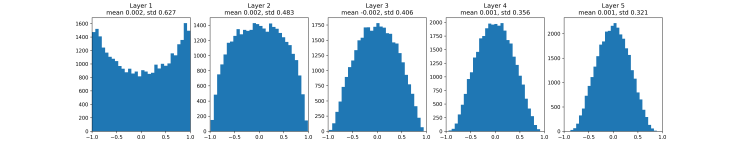


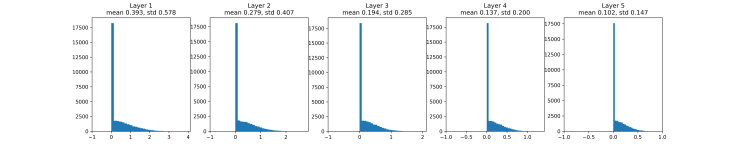




Инициализация Xavier, равномерное распределение







Ограничения инициализации Xavier

- Анализ в статье [6] был проведен для сигмоиды и гиперболического тангенса
- Рекомендация состояла в использовании последнего с указанным подходом к инициализации ввиду его симметричности относительно нуля (мы использовали это свойство при вычислении дисперсии активаций)
- Что делать в случае несимметричной относительно нуля ReLU?

Случай ненулевого матожидания активаций

- Как изменится формула для дисперсии, если x_j не симметричны относительно нуля?

$$\mathsf{Var}(y_i) = \sum_{j=1}^{n} \left(E[w_{ij}^2] E[x_j^2] - E[w_{ij}]^2 E[x_j]^2 \right) =$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \mathsf{Var}(w_{ij}) E[x_j^2] = n_{\mathsf{in}} \mathsf{Var}(w_{ij}) E[x_i^2]$$

Случай ненулевого матожидания активаций II

- Если на предыдущем слое веса инициализированы из симметричного относительно нуля распределения, а смещения нулевые, то y_i' с предыдущего слоя (важно, до применения ReLU) имеют симметричные и центрированные в нуле распределения, причем

$$E[x_i^2] = \frac{1}{2}E[(y_i')^2] = \frac{1}{2}\mathsf{Var}(y_i')$$

- Что дает

$$\mathsf{Var}(y_i) = \frac{1}{2}n_{\mathsf{in}}\mathsf{Var}(w_{ij})\mathsf{Var}(y_i')$$

Инициализация Kaiming

- Все то, что мы проделали на предыдущих слайдах, было сделано в работе [7] (тоже 25000+ цитирований!)
- Аналогичным образом инициализация параметров названа в честь первого автора работы
- Для случая нормального распределения

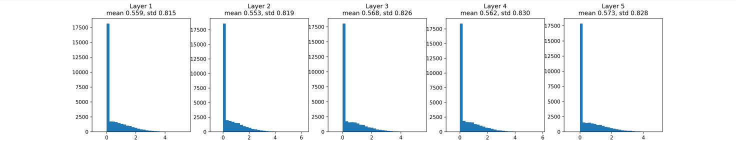
$$W \sim \mathcal{N}\left(0, \sqrt{\frac{2}{n_{in}}}\right)$$

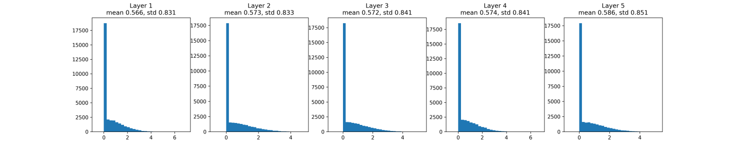
- и для случая равномерного распределения

$$W \sim \mathcal{U}\left(-\sqrt{\frac{6}{n_{in}}}, \sqrt{\frac{6}{n_{in}}}\right)$$

- Еще раз отметим, что все смещения предполагается инициализировать нулями (во всех подходах)

Инициализация Kaiming, ReLU





Подытожим

- Рассмотрели вопросы оптимизации параметров нейронных сетей, разобрали основные алгоритмы оптимизации, использующиеся в современных библиотеках глубокого обучения
- Изучили основные способы инициализации параметров нейронных сетей (инициализация параметров в pytorch [8])
- На следующем занятии познакомимся с новым для нас типом слоев, свертками или сверточными сетями, проявившими себя в задачах компьютерного зрения

Использованные источники i

1. *Siarshai*. **Методы оптимизации нейронных сетей.** URL: https://habr.com/ru/articles/318970/1.
2. *Stich S. U.* **Unified Optimal Analysis of the (Stochastic) Gradient Method.** // arXiv e-prints. 2019. DOI: 10.48550/arXiv.1907.04232. arXiv: 1907.04232 [cs.LG].
3. *Melville J.* **Nesterov Accelerated Gradient and Momentum.** URL: https://jlmelville.github.io/mize/nesterov.html.
4. *Chen J.* **An updated overview of recent gradient descent algorithms.** URL: https://johnchenresearch.github.io/demon/.
5. *Морозов А.* **Онлайн-обучение и стохастическая оптимизация.** URL: https://education.yandex.ru/handbook/ml/article/metody-optimizacii-v-deep-learning.

6. *Glorot X., Bengio Y.* **Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks.** // Proceedings of the Thirteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics. Т. 9. PMLR, 2010. С. 249—256. (Proceedings of Machine Learning Research). URL: `https://proceedings.mlr.press/v9/glorot10a.html`.
7. **Delving Deep into Rectifiers: Surpassing Human-Level Performance on ImageNet Classification.** /. K. He [и др.] // arXiv e-prints. 2015. Февр. DOI: `10.48550/arXiv.1502.01852`. arXiv: `1502.01852 [cs.CV]`.
8. *PyTorch*. **Parameters initialization module.** URL: `https://pytorch.org/docs/stable/nn.init.html`.