Лекция 4. Оптимизация. Регуляризация

Денис Деркач, Дмитрий Тарасов

Слайды от А. Маевского, М. Гущина, А. Кленицкого, М Борисяка

LAMBDA • HSE

02 февраля 2026 года

Функции потерь

Оценка максимального правдоподобия

Модель $f(x, \theta)$ определяет параметры распределения вероятности $P(y|x)$:

$$P(y|x) = P(y|f(x, \theta))$$

Функция правдоподобия:

$$L(\theta) = P(D|\theta) = \prod_{i=1}^{N} P(y_i|f(x_i, \theta))$$

Метод максимального правдоподобия (maximum likelihood estimation):

$$\theta = \underset{\theta}{\operatorname{argmax}}\, L(\theta) = \underset{\theta}{\operatorname{argmax}} \left[\prod_{i=1}^{N} P(y_i|f(x_i, \theta)) \right]$$

Оценка максимального правдоподобия

$$\theta = \underset{\theta}{\operatorname{argmax}} \left[\log \left(\prod_{i=1}^{N} P(y_i | f(x_i, \theta)) \right) \right]$$

$$= \underset{\theta}{\operatorname{argmax}} \left[\sum_{i=1}^{N} \log \left(P(y_i | f(x_i, \theta)) \right) \right]$$

$$= \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} \left[- \sum_{i=1}^{N} \log \left(P(y_i | f(x_i, \theta)) \right) \right]$$

Negative log-likelihood loss:

$$\mathcal{L} = - \sum_{i=1}^{N} \log \left(P(y_i | f(x_i, \theta)) \right)$$

Ординарная регрессия

Предположим, что шум распределен нормально с центром в нуле:

$$y = f(x, \theta) + \epsilon, \qquad \epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

то есть

$$P(y|x, \theta, \sigma) = \mathcal{N}(y|f(x, \theta), \sigma^2)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} exp\left[-\frac{(y - f(x, \theta))^2}{2\sigma^2}\right]$$

$$\mathcal{L} = -\sum_{i=1}^{N} \log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} exp\left[-\frac{(y - f(x, \theta))^2}{2\sigma^2}\right]\right)$$
$$= \sum_{i=1}^{N}\left[-\log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right) + \frac{(y - f(x, \theta))^2}{2\sigma^2}\right] \to (y - f(x, \theta))^2$$

Получили обычный метод наименьших квадратов

Обобщённые линейные модели и другие

- Можем предсказывать и среднее, и дисперсию:

$$\theta = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{N} \left[-\log \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi f_2(x,\theta)^2}} \right) + \frac{(y - f_1(x,\theta))^2}{2 f_2(x,\theta)^2} \right]$$

- Если использовать распределение Лапласа, то получим MAE
- Если использовать распределение Пуассона, то можем предсказывать счетчики событий
- Если использовать бета-распределение, то можем предсказывать пропорции

Бинарная классификация

Распределение Бернулли

$$P(y|\lambda) = \lambda^y(1-\lambda)^{1-y} = \begin{cases} \lambda, & y = 1 \\ 1-\lambda, & y = 0 \end{cases}$$

Чтобы оценивать λ - вероятность от 0 до 1, используем сигмоиду:

$$f(x, \theta) = \sigma(x, \theta)$$

$$P(y|f(x,\theta)) = f(x,\theta)^y(1-f(x,\theta))^{1-y}$$

Функция потерь - binary cross-entropy

$$\mathcal{L}(\theta) = \sum_{i=1}^{N} [-y_i \log f(x_i, \theta) - (1-y_i)\log(1-f(x_i,\theta))]$$

Многоклассовая классификация

Softmax:

$$softmax_k(z) = \frac{e^{z_k}}{\sum_{j=1}^{K} e^{z_j}}$$

$$P(y = k|f(x, \theta)) = softmax_k\left[f(x, \theta)\right]$$

Функция потерь - cross-entropy (aka softmax loss)

$$\mathcal{L}(\theta) = -\sum_{i=1}^{N} \log\left(softmax_{y_i}\left[f(x, \theta)\right]\right)$$

Softmax поведение на границах

$$softmax_k(z) = \frac{e^{z_k}}{\sum_{j=1}^{K} e^{z_j}}$$

Из-за численного переполнения

- При больших отрицательных значениях z можем получить 0 в знаменателе
- При больших положительных значениях z можем получить бесконечность

Трюк:

$$\frac{e^{z_k+c}}{\sum_{j=1}^{K} e^{z_j+c}} = \frac{e^{z_k}e^{c}}{\sum_{j=1}^{K} e^{z_j}e^{c}} = \frac{e^{z_k}}{\sum_{j=1}^{K} e^{z_j}}$$

$$z_k \to z_k - \max_j z_j$$

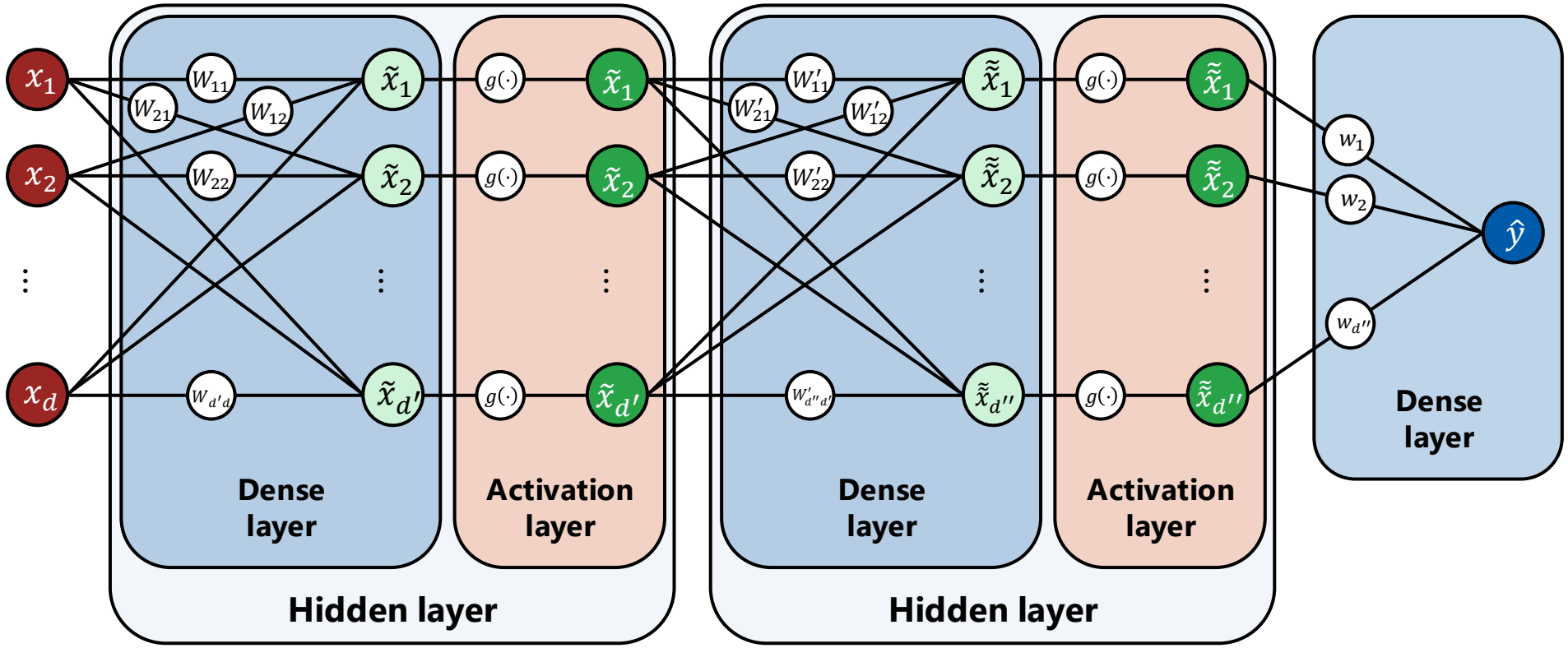
Другие функции потерь

- Hinge loss
- Focal loss
- Dice loss
- Triplet loss
- Contrastive loss

И многие другие..

Оптимизация

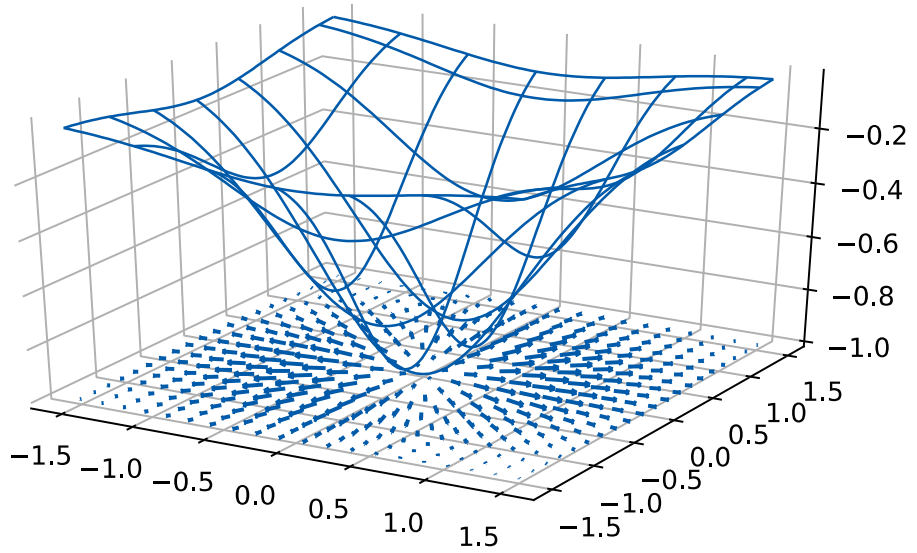
Нейронная сеть как функция



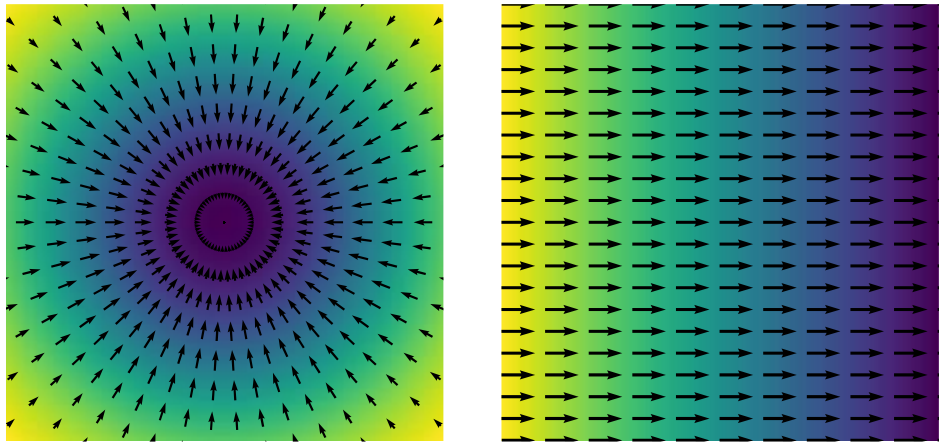
$$\hat{y} = W_{out} \cdot \ldots \cdot W_{h2} \cdot W_{h1} x$$

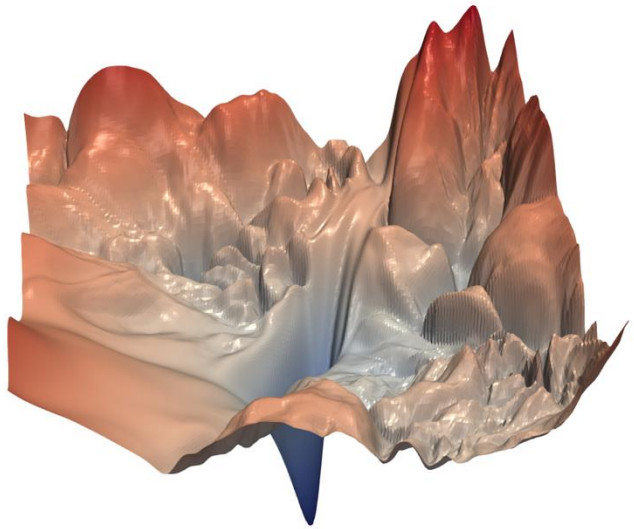
Градиент

- Градиент: $\nabla_x f(x) \equiv \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_d}\right)$
- Указывает на самый быстрый рост функции



NB: Neural NetLoss function landscape
(in 2 random directions around an optimum)





Немного интуиции

- Для простоты давайте пока опустим функции активации.
- Тогда выход нейронной сети, состоящей только из плотных слоев, будет:

$$\hat{y} = W_{out} \cdot \ldots \cdot W_{h2} \cdot W_{h1} x$$

- Обратите внимание, что градиент относительно любой из весовых матриц W_{hk} пропорционален **произведению** всех других матриц
- Например, для матриц 1×1, если все они имеют масштаб $S \in \mathbb{R}$, градиент g:

$$g \sim S^{m-1},$$

где m — глубина сети

- Если S слишком большое, градиенты **взорвутся**;
- Если S слишком маленькое, они **исчезнут**.

Оптимизация градиентного спуска

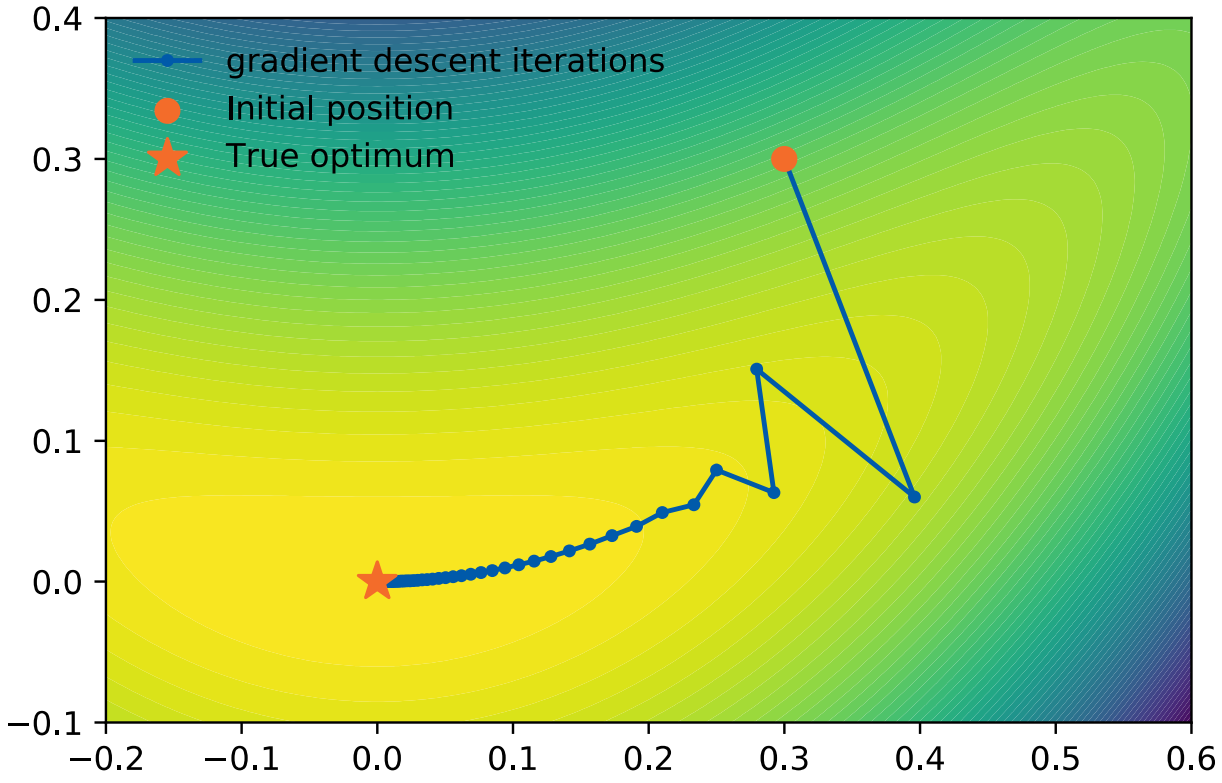
- Можно оптимизировать функции, начиная с некоторой начальной точки $x^{(0)}$ и двигаясь против градиента

$$x^{(k)} \longleftarrow x^{(k-1)} - \alpha \nabla_x f\left(x^{(k-1)}\right)$$

где $\alpha \in \mathbb{R},\ \alpha > 0$ – **темп обучения** (learning rate).

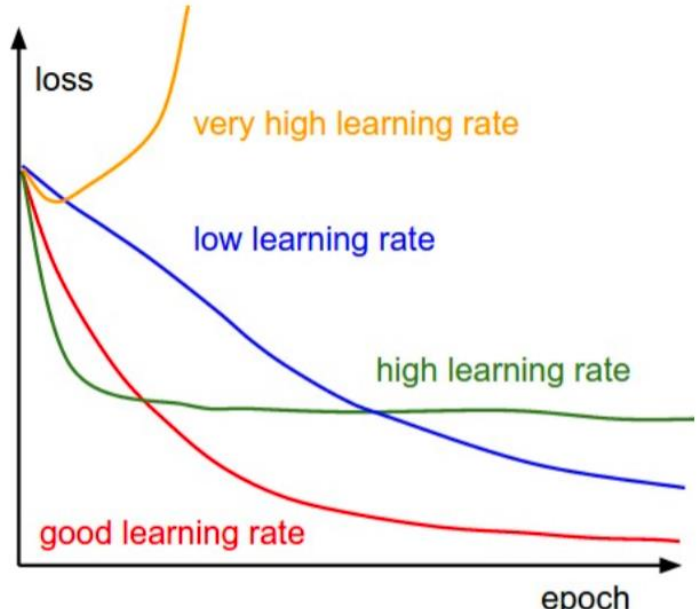
- Для гладких выпуклых функций с единственным минимумом x^*:

$$f\left(x^{(k)}\right) - f(x^*) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$$

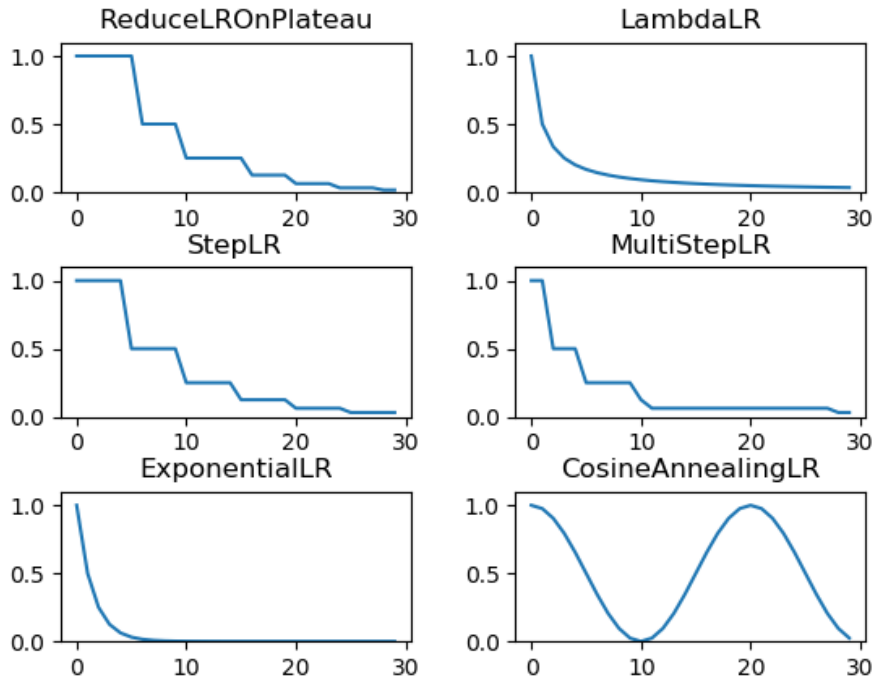


Сценарии

- Важно правильно настроить learning rate и придумать расписание

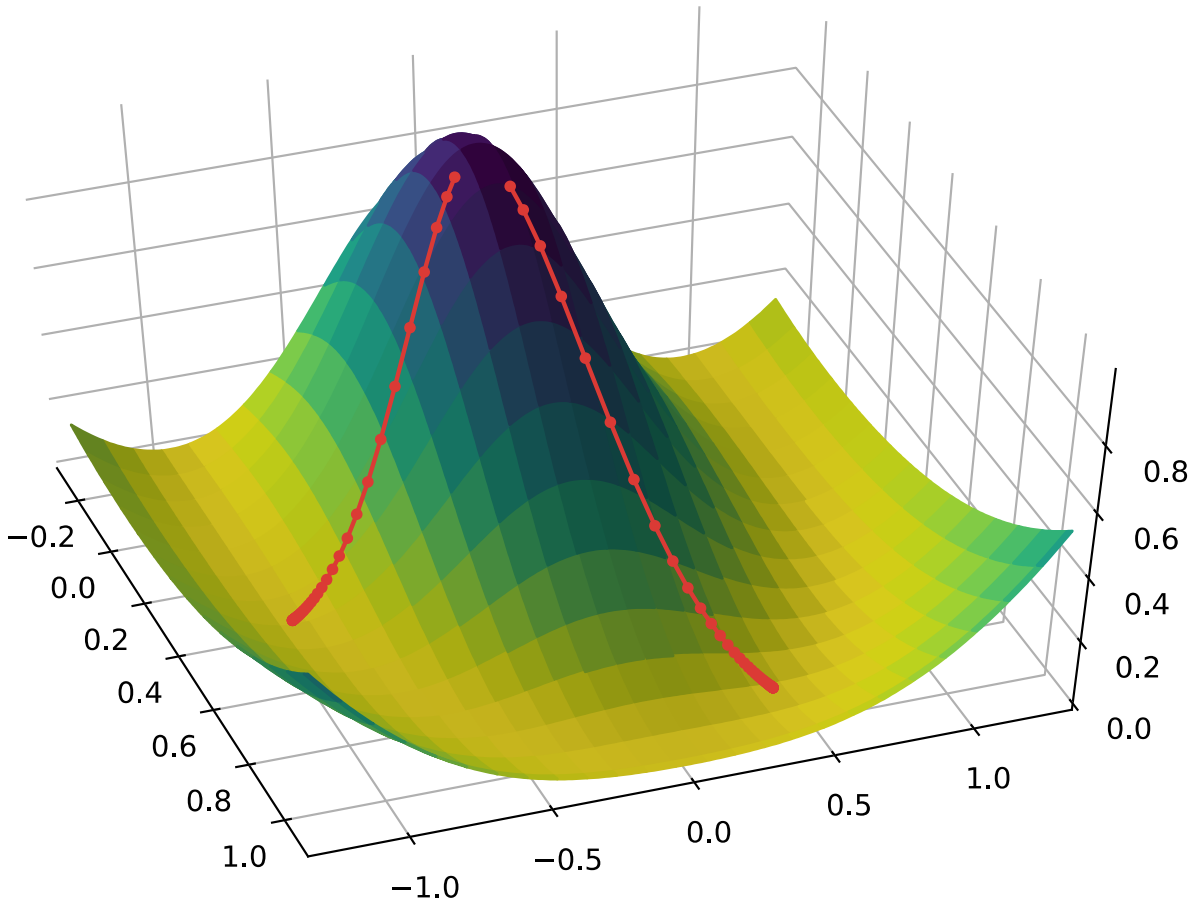


- Можно уменьшать learning rate со временем по расписанию
  - В начале хотим активно исследовать пространство параметров, чтобы найти хорошую область
  - В конце хотим более детально исследовать найденную область
  - Используем ReduceLROnPlateau для зависимости от ошибок на валидации.



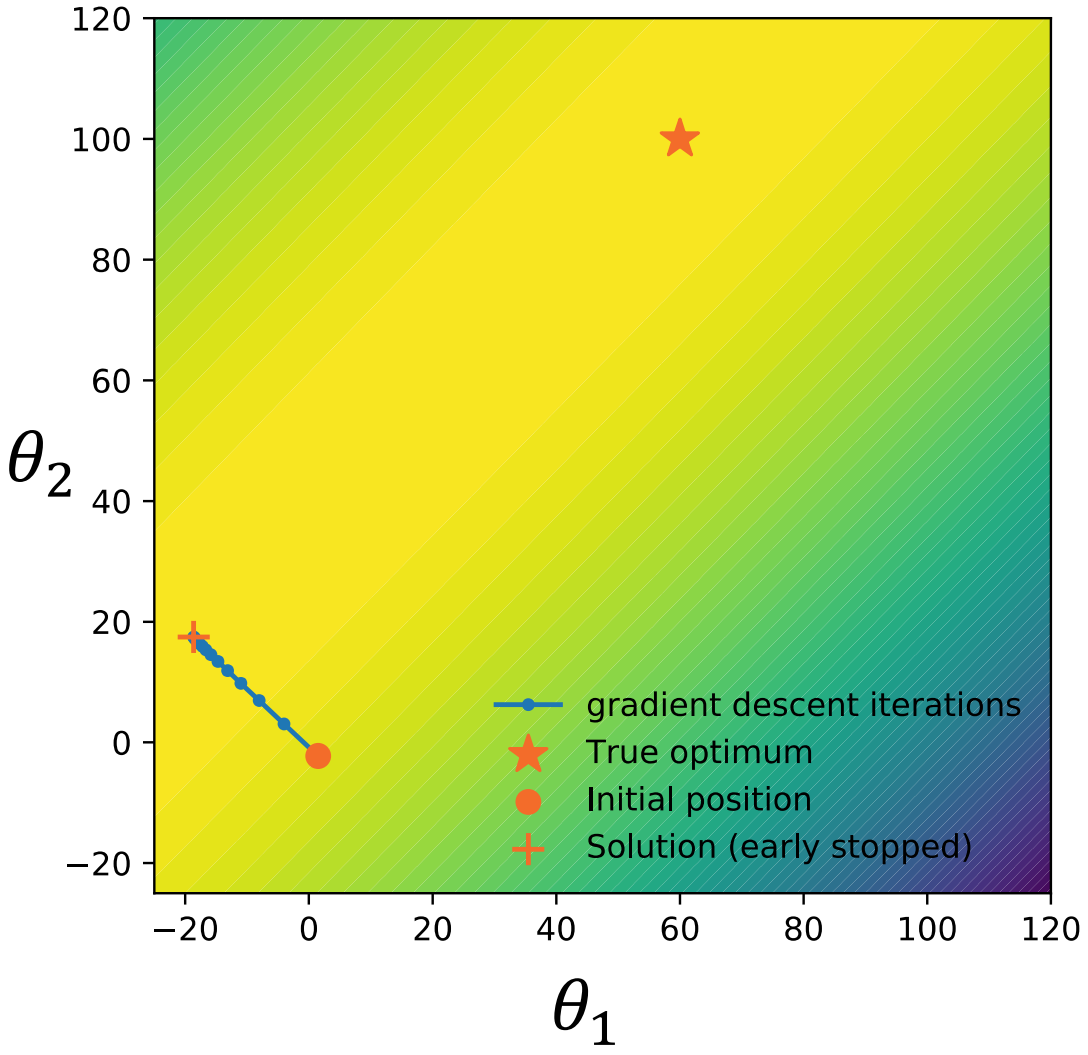
https://greeksharifa.github.io/pytorch/2018/11/10/pytorch-usage-03-How-to-Use-PyTorch/

Градиентный спуск для невыпуклых функций



- Может достичь минимума, который не является глобальным
- Результат зависит от начальной точки

Градиентный спуск как средство регуляризации



- Большие значения параметров обычно означают переобучение
- Можно избежать этой проблемы, инициализируя параметры малыми значениями и останавливая градиентный спуск на ранней стадии (early stopping)

Стохастический градиентный спуск (SGD)

- В машинном обучении мы оптимизируем функции потерь, которые обычно являются средними по объектам:

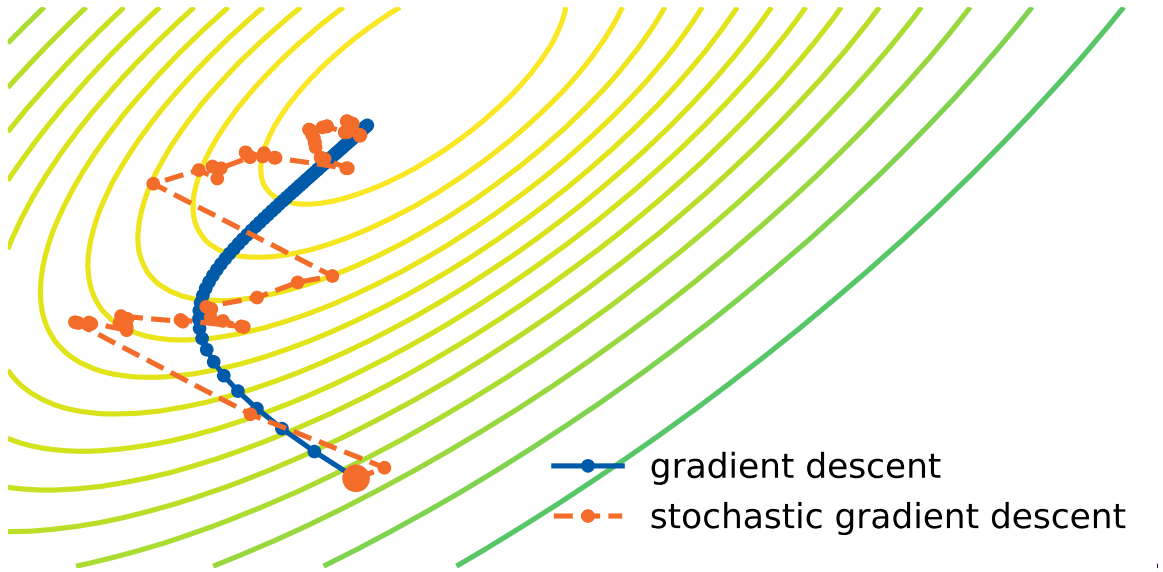
$$L = \frac{1}{N} \sum_{i=1 \ldots N} \mathcal{L}\left(y_i, \hat{f}_\theta(x_i)\right)$$

- Для больших N, градиентный спуск неэффективен с точки зрения вычислений и может быть неосуществим с точки зрения потребления памяти
- Альтернатива:
  - На каждом шаге k взять случайный $l_k \in \{1, \ldots, N\}$
  - Оптимизировать: $\theta^{(k)} \leftarrow \theta^{(k-1)} - \eta \nabla_\theta \mathcal{L}\left(y_{l_k}, \hat{f}_\theta(x_{l_k})\right)\Big|_{\theta = \theta^{(k-1)}}$

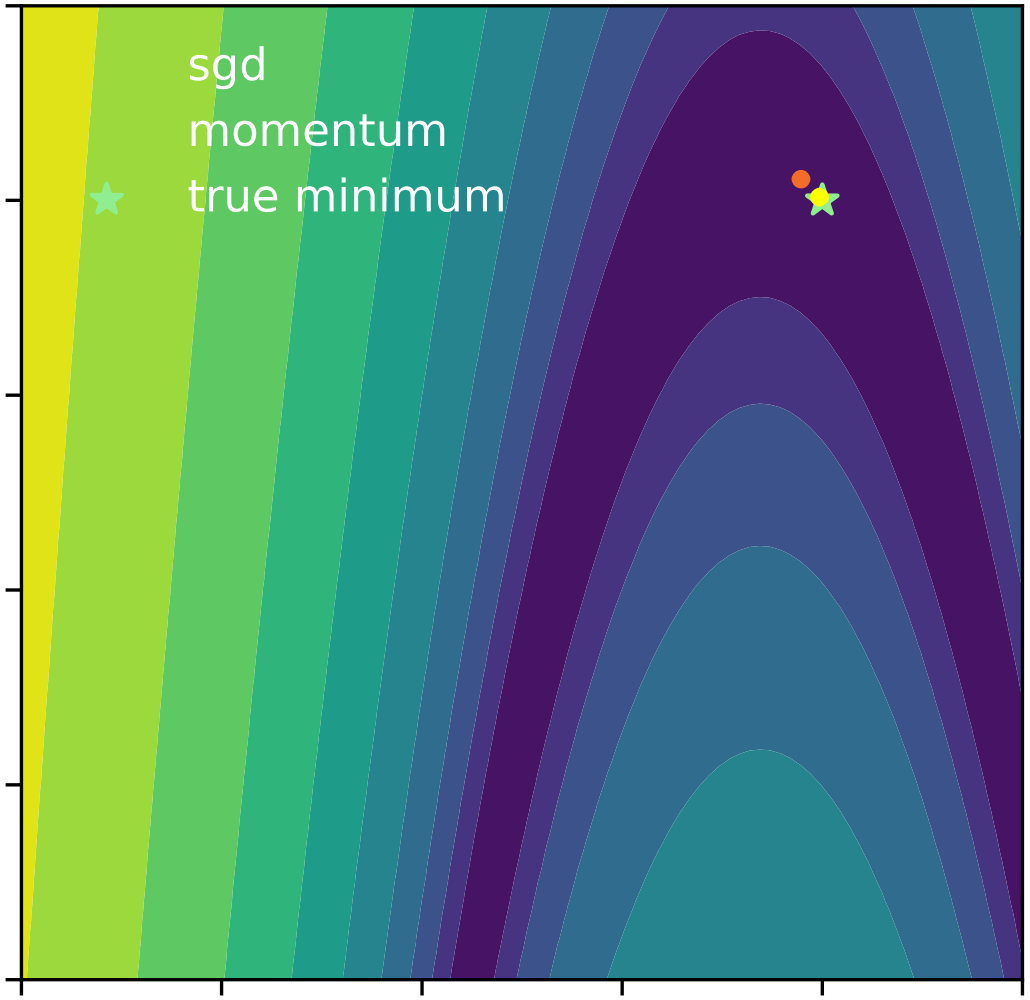
SGD и мини-батчи

- SGD:
  - На каждом шаге k взять случайный $l_k \in \{1, \dots, N\}$, тогда изменение:
  - $\theta^{(k)} \leftarrow \theta^{(k-1)} - \eta \nabla_\theta \mathcal{L}\left(y_{l_k}, \hat{f}_\theta(x_{l_k})\right)\Big|_{\theta = \theta^{(k-1)}}$
- Мини-пакетный (батч) SGD:
  - Перемешаем обучающий НД, затем итерируем по нему пакетами (батчами) фиксированного размера.
  - На каждой итерации оцениваем градиенты потерь на данном участке.

    B: $g = \sum_{i \in B} \nabla_\theta \mathcal{L}\left(y_i, \hat{f}_\theta(x_i)\right)$
  - Модифицируем параметры: $\theta^{(k)} \leftarrow \theta^{(k-1)} - \eta \cdot g$



Импульсный (momentum) SGD



- Идея: ввести инерцию (как у мяча, катящегося с горы)
  - Помогает выйти из небольших локальных минимумов
  - Позволяет использовать более широкий диапазон скоростей обучения*

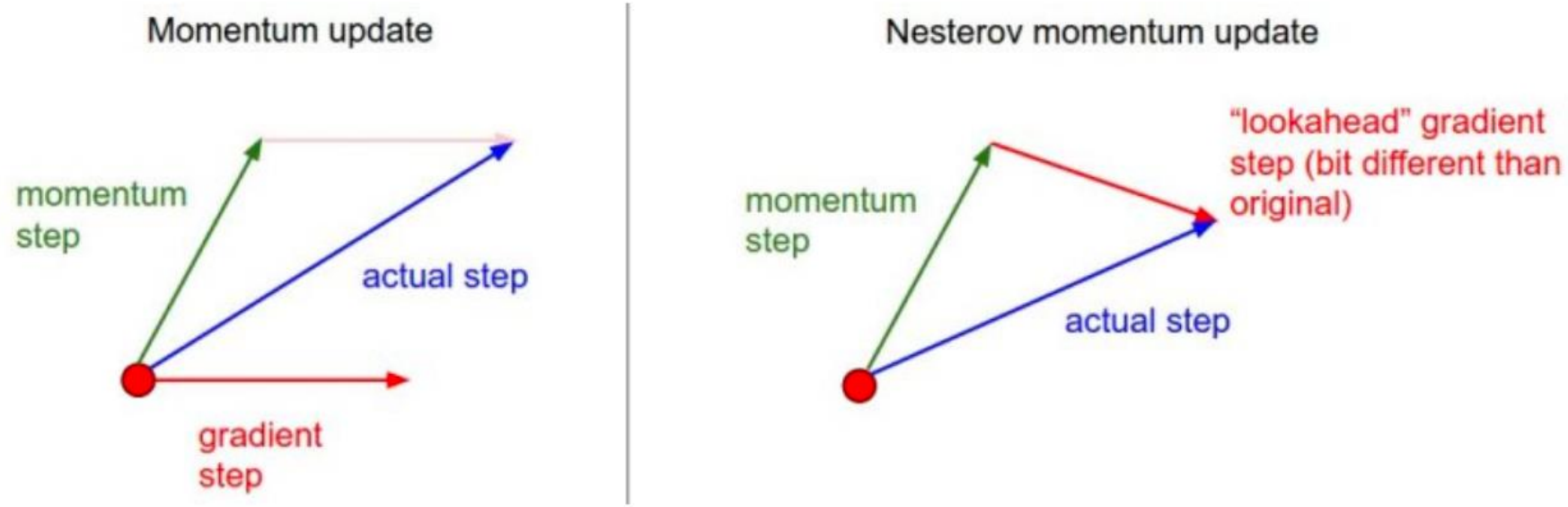
$$m^{(k)} \leftarrow \beta \cdot m^{(k-1)} + (1-\beta) \cdot \left.\frac{\partial L}{\partial \theta}\right|_{\theta=\theta^{(k-1)}}$$

$$\theta^{(k)} \leftarrow \theta^{(k-1)} - \eta \cdot m^{(k)}$$

  - Фактически, экспоненциальное сглаживание.
  - Дороже и капризнее обычного SGD

* https://distill.pub/2017/momentum/

Метод Нестерова



- На самом деле мы уже знаем, что сдвинемся на βm_{t-1} на промежуточном шаге
- Можем вычислить градиент в этой точке, на полпути

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

AdaGrad

- **Идея**: давайте быстрее двигаться по тем параметрам, которые не сильно меняются, и медленнее по быстро меняющимся параметрам:

- Обозначим $g_t = \nabla_\theta L(\theta_t)$

- Накапливаем историю градиентов

$$v_t = \sum_{\tau=1}^{t} g_t^2$$

и учитываем ее

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\alpha}{\sqrt{v_t + \epsilon}} g_t$$

- Learning rate все время уменьшается, но с разной скоростью для разных параметров

RMSprop

- Идея: настроить скорость обучения отдельно для разных компонентов вектора параметров, избегая **проблемы** Adagrad с исчезающим градиентом
- Считать скользящее среднее

$$v_t = \beta v_{t-1} + (1 - \beta) g_t^2$$

- обновлять параметры с его использованием

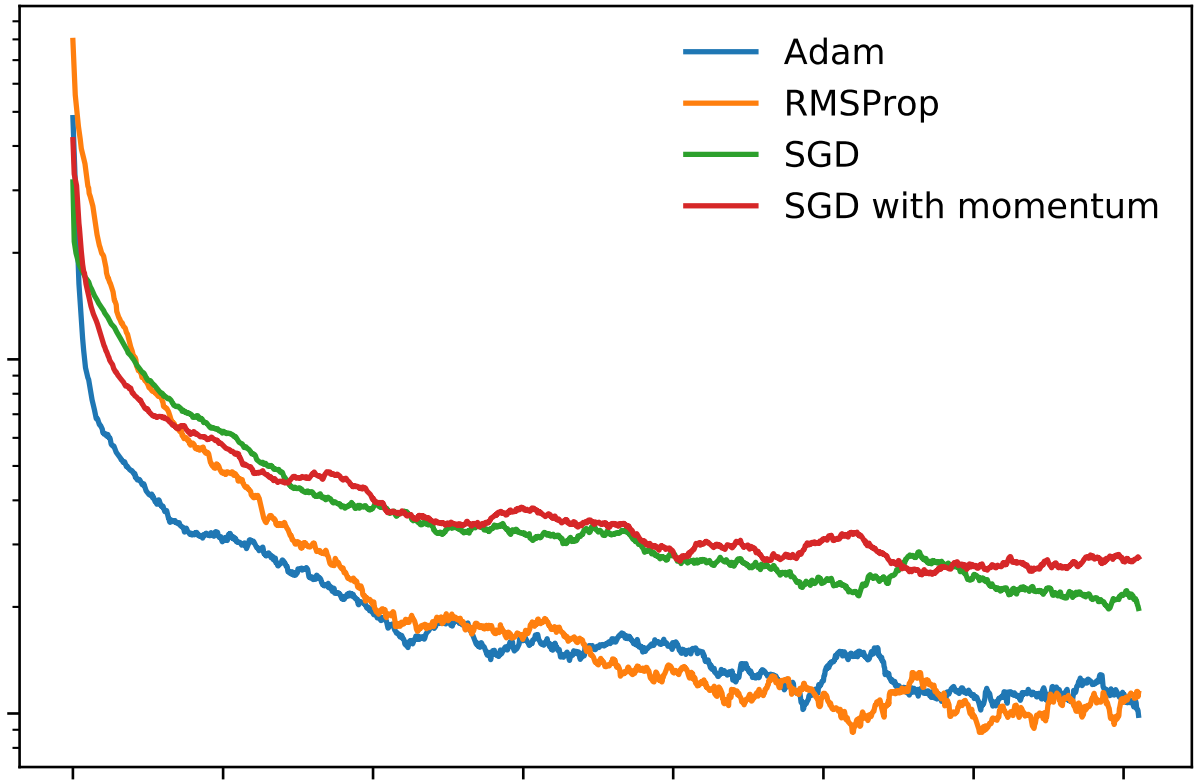
$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\alpha}{\sqrt{v_t + \epsilon}} g_t$$

Adam

- Скомбинируем идеи (momentum + RMSprop)
- Обычно хороший алгоритм для начала оптимизации

$$m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) g_t$$
$$v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2) g_t^2$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\alpha}{\sqrt{v_t + \epsilon}} m_t$$



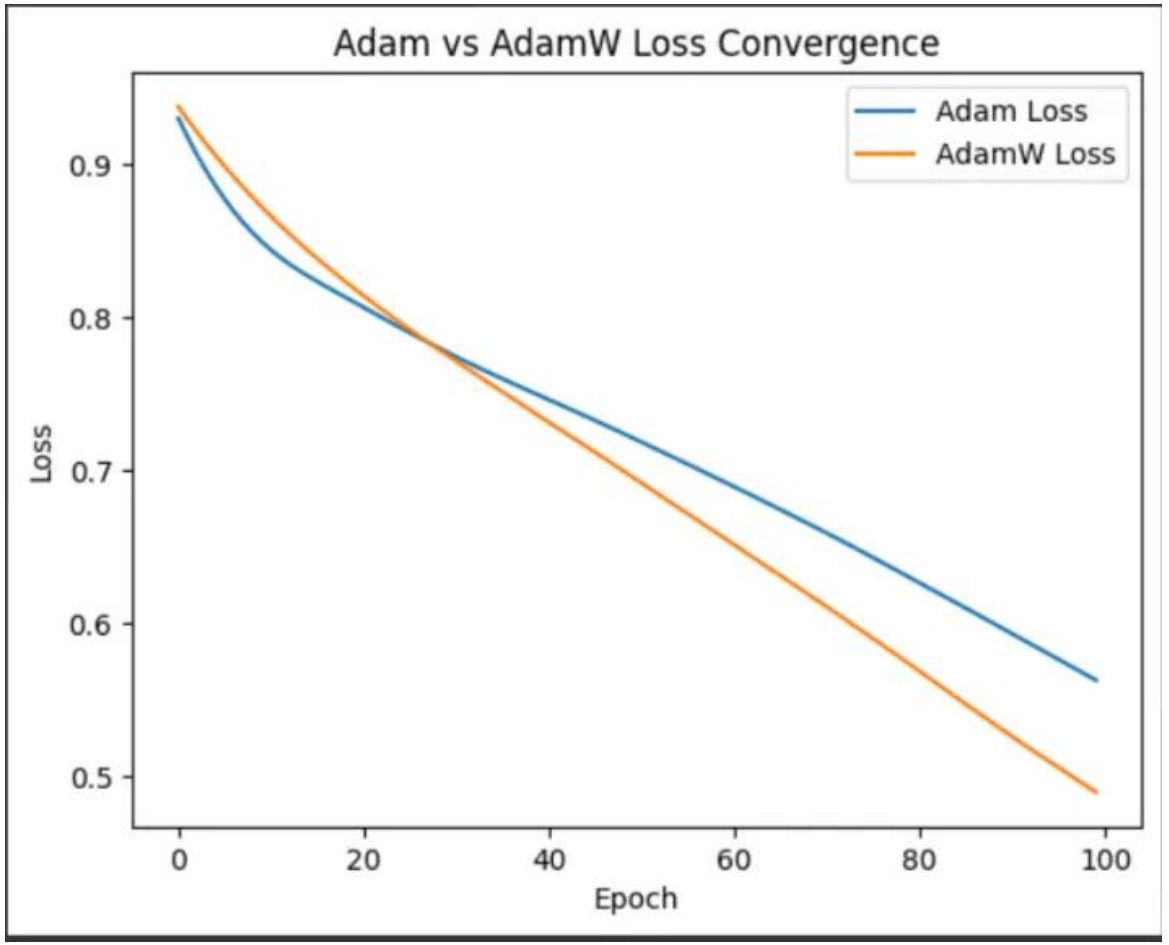
AdamW

- Вместо добавления механизма затухания весов к функции потерь, этот механизм применяет затухание весов непосредственно во время обновления параметров, что приводит к более стабильной регуляризации и лучшей обобщающей способности.

$$m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1)\nabla f(\theta_t)$$

$$v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2)(\nabla f(\theta_t))^2$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta \frac{m_t}{\sqrt{v_t} + \epsilon}$$



Schedule-free optimization

$$
\begin{aligned}
y_t &= (1-\beta)z_t + \beta x_t, \\
z_{t+1} &= z_t - \gamma \nabla f(y_t, \zeta_t), \\
x_{t+1} &= (1-c_{t+1})\, x_t + c_{t+1} z_{t+1}, \\
c_{t+1} &= \frac{1}{t+1}
\end{aligned}
$$

x - последовательность, в которой должны происходить оценки потерь test/val, которая отличается от первичных итераций z и мест оценки градиента y. Обновления в z соответствуют базовому оптимизатору, в данном случае простому градиентному спуску / SGD.

Полученный алгоритм не должен иметь расписания уменьшения LR, при этом ведёт себя оптимальнее других.

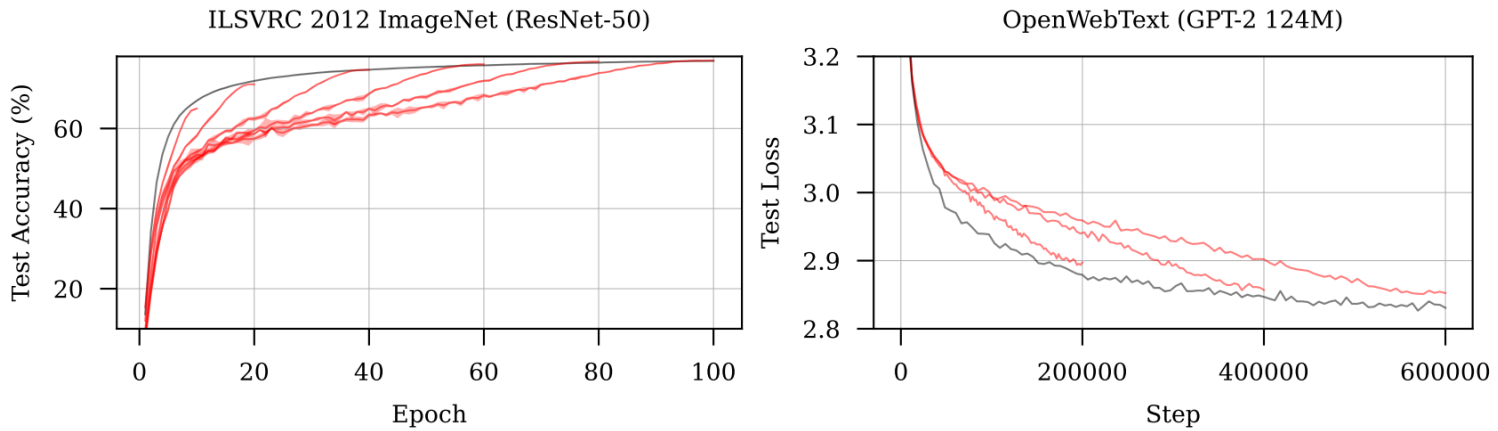


Figure 1: Schedule-Free methods (black) closely track the Pareto frontier of loss v.s. training time in a single run. Both Schedule-Free SGD (left) and AdamW (right) match or exceed the performance of cosine learning rate schedules of varying lengths (red).

https://arxiv.org/pdf/2405.15682

Muon (MomentUm Orthogonalized by Newton-Schulz)

Шаг Ньютона-Шульца:

приблизительная ортогонализация матрицы обновления, то есть в применении следующей операции:

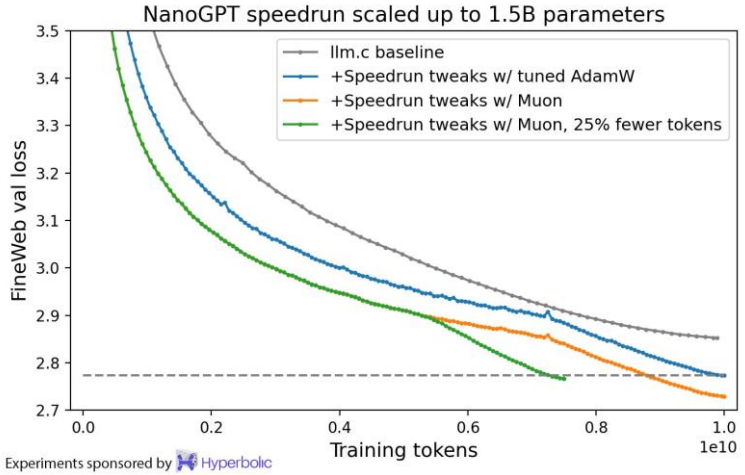
$$\mathrm{Ortho}(G) = \arg\min_O \{\|O - G\|_F : \text{either } O^\top O = I \text{ or } OO^\top = I\}$$

Ортогонализация эффективно увеличивает масштаб «редких направлений» в омтимизации, которые имеют небольшую величину в обновлении, но тем не менее важны для обучения.

Algorithm 2 Muon

Require: Learning rate η, momentum μ

1: Initialize $B_0 \leftarrow 0$
2: **for** $t = 1, \ldots$ **do**
3: Compute gradient $G_t \leftarrow \nabla_\theta \mathcal{L}_t(\theta_{t-1})$
4: $B_t \leftarrow \mu B_{t-1} + G_t$
5: $O_t \leftarrow \mathrm{NewtonSchulz5}(B_t)$
6: Update parameters $\theta_t \leftarrow \theta_{t-1} - \eta O_t$
7: **end for**
8: **return** θ_t



https://kellerjordan.github.io/posts/muon/

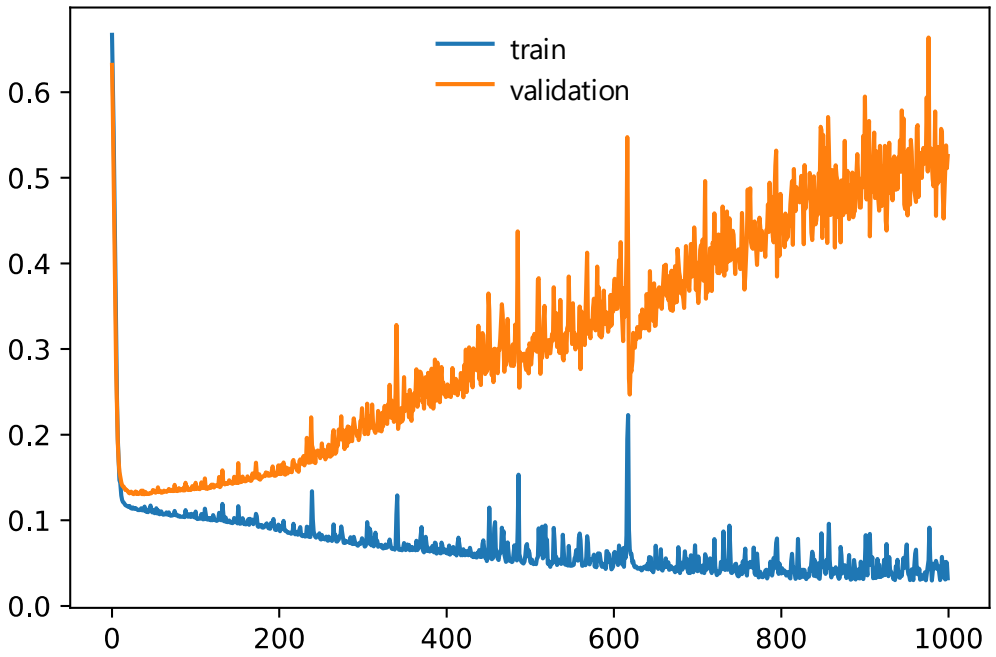
Саммари

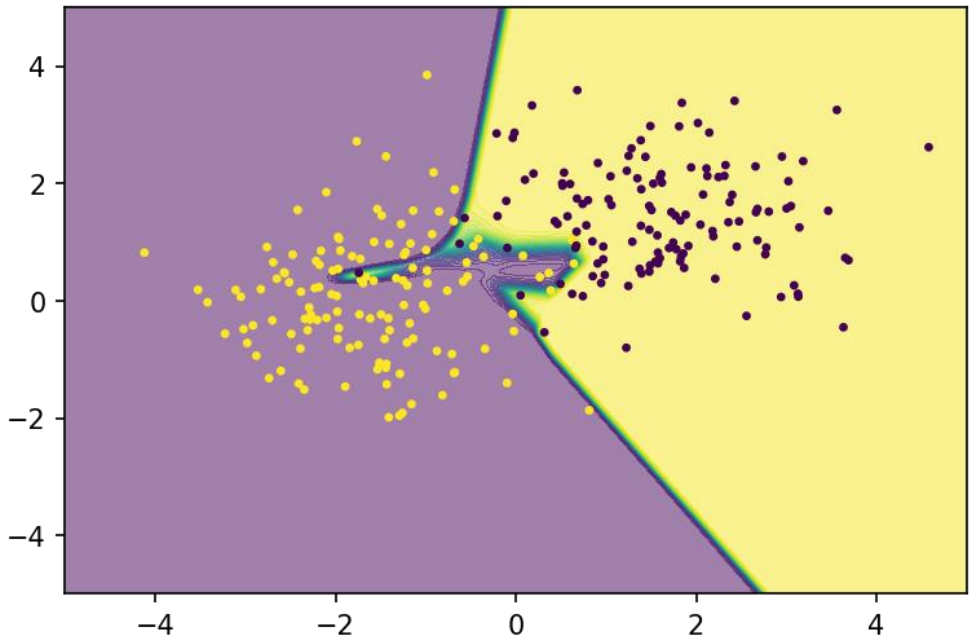
- Множество разнообразных алгоритмов оптимизации
- Хороший старт с Adam
- Muon – лидер в современных приложениях

Переобучение

Проблема переобучения

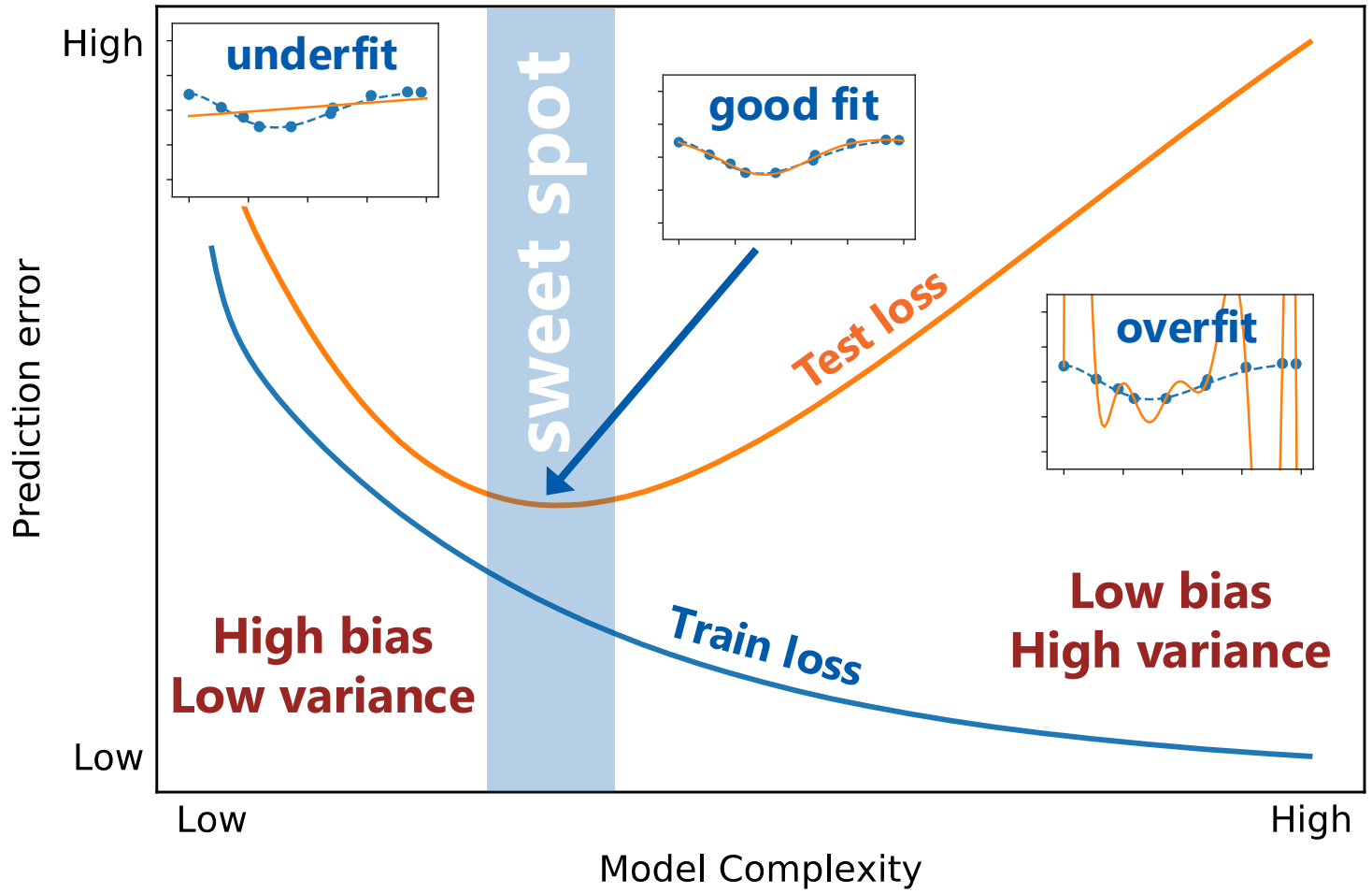
- Будучи очень сложными моделями, нейронные сети склонны к переобучению





Bias-variance

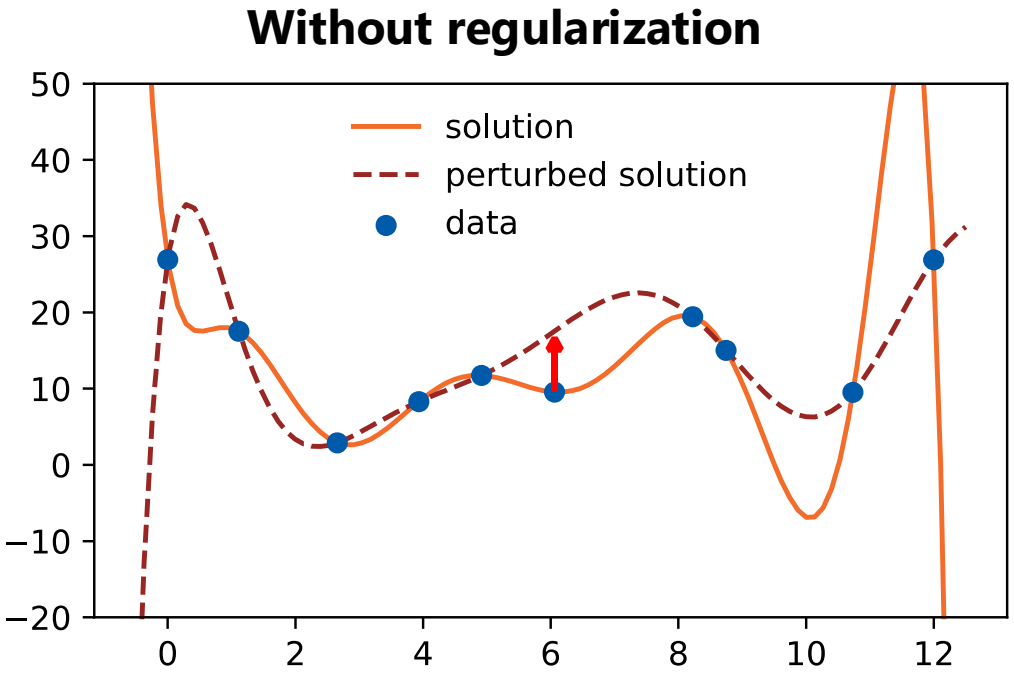
- Будучи очень сложными моделями, нейронные сети склонны к переобучению

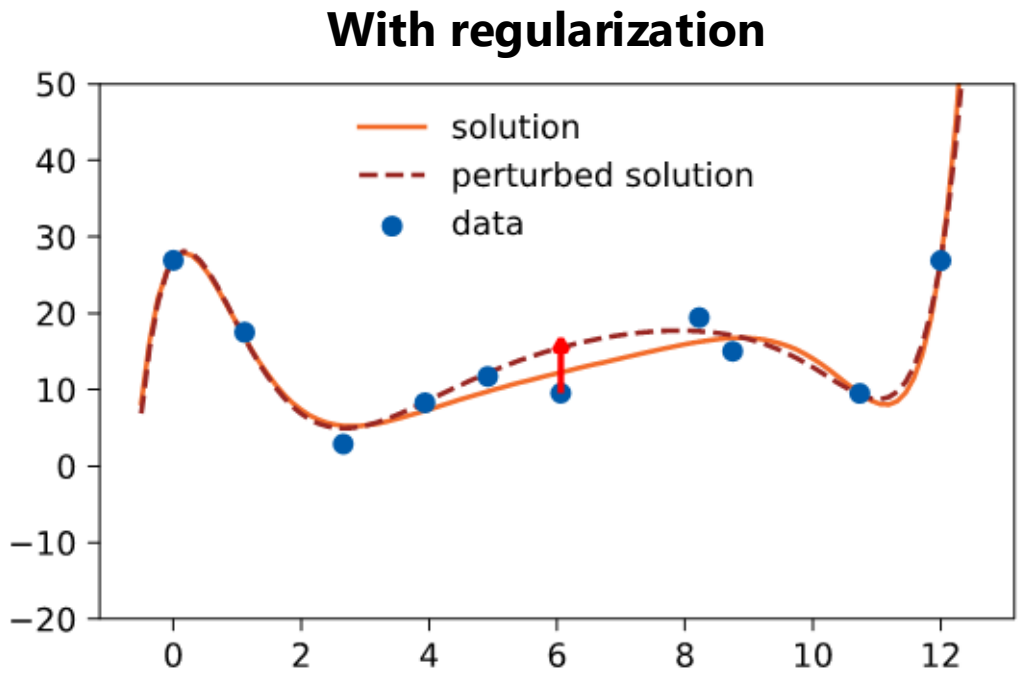


Обычно есть выбор между смещением и дсиперсией.

Bias-Variance trade-off

Регуляризация





NB: регуляризованная модель больше не является несмещённой!

То есть мы увеличили смещение, чтобы уменьшить дисперсию.

Разные методы регуляризации

L2 regularization (Ridge):

$$\mathcal{L} = \|X\theta_\tau - y_\tau\|^2 + \alpha\|\theta_\tau\|^2$$

L2 norm:

$$\|x\|^2 \equiv \sum_{i=1\ldots d} x_i^2$$

L1 regularization (Lasso):

$$\mathcal{L} = \|X\theta_\tau - y_\tau\|^2 + \alpha\|\theta_\tau\|_1$$

L1 norm:

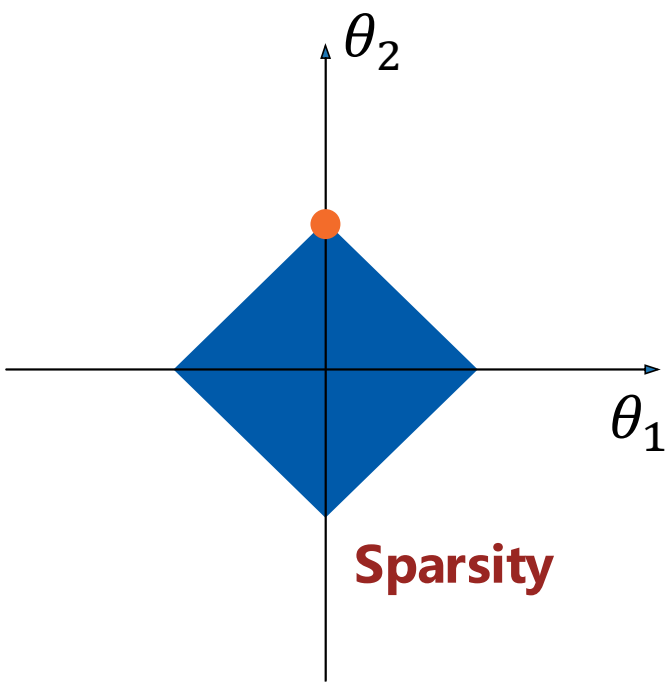
$$\|x\|_1 \equiv \sum_{i=1\ldots d} |x_i|$$

Elastic net:

$$\mathcal{L} = \|X\theta_\tau - y_\tau\|^2 + \alpha\|\theta_\tau\|^2 + \beta\|\theta_\tau\|_1$$

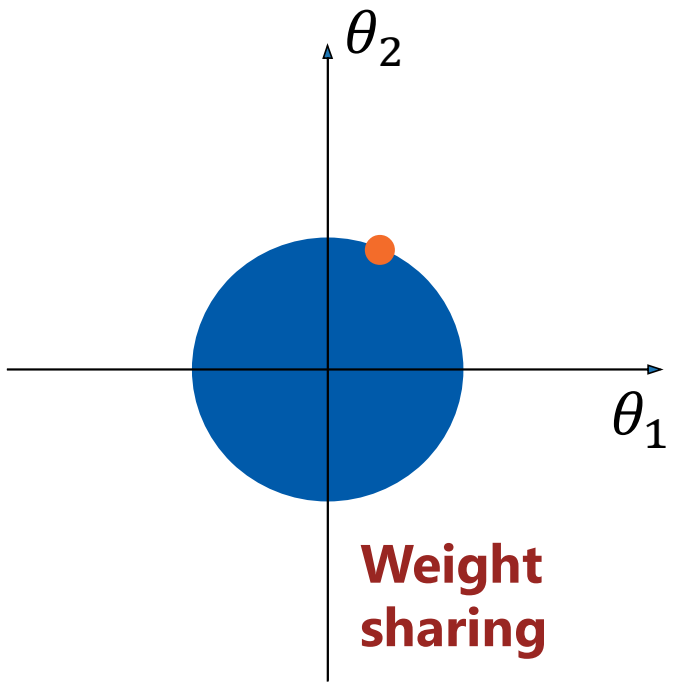
Свойства регуляризации

L1



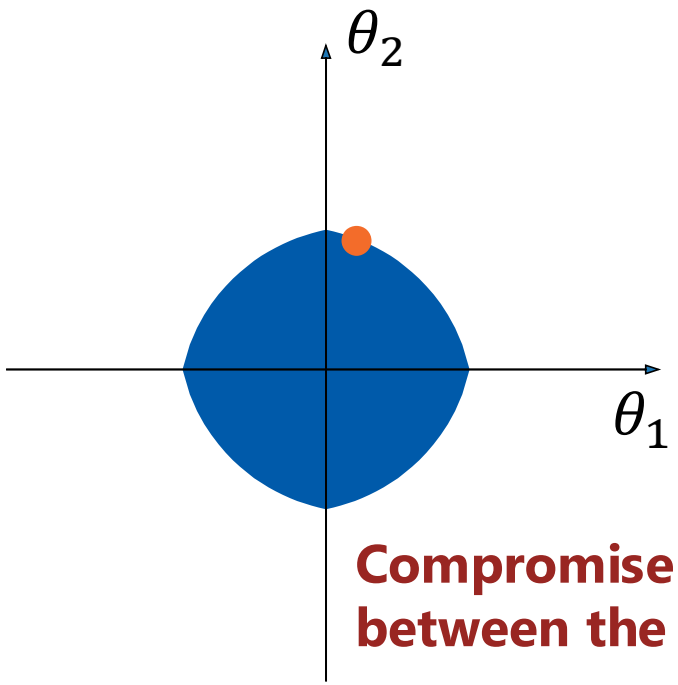
Sparsity

L2



Weight sharing

Elastic Net

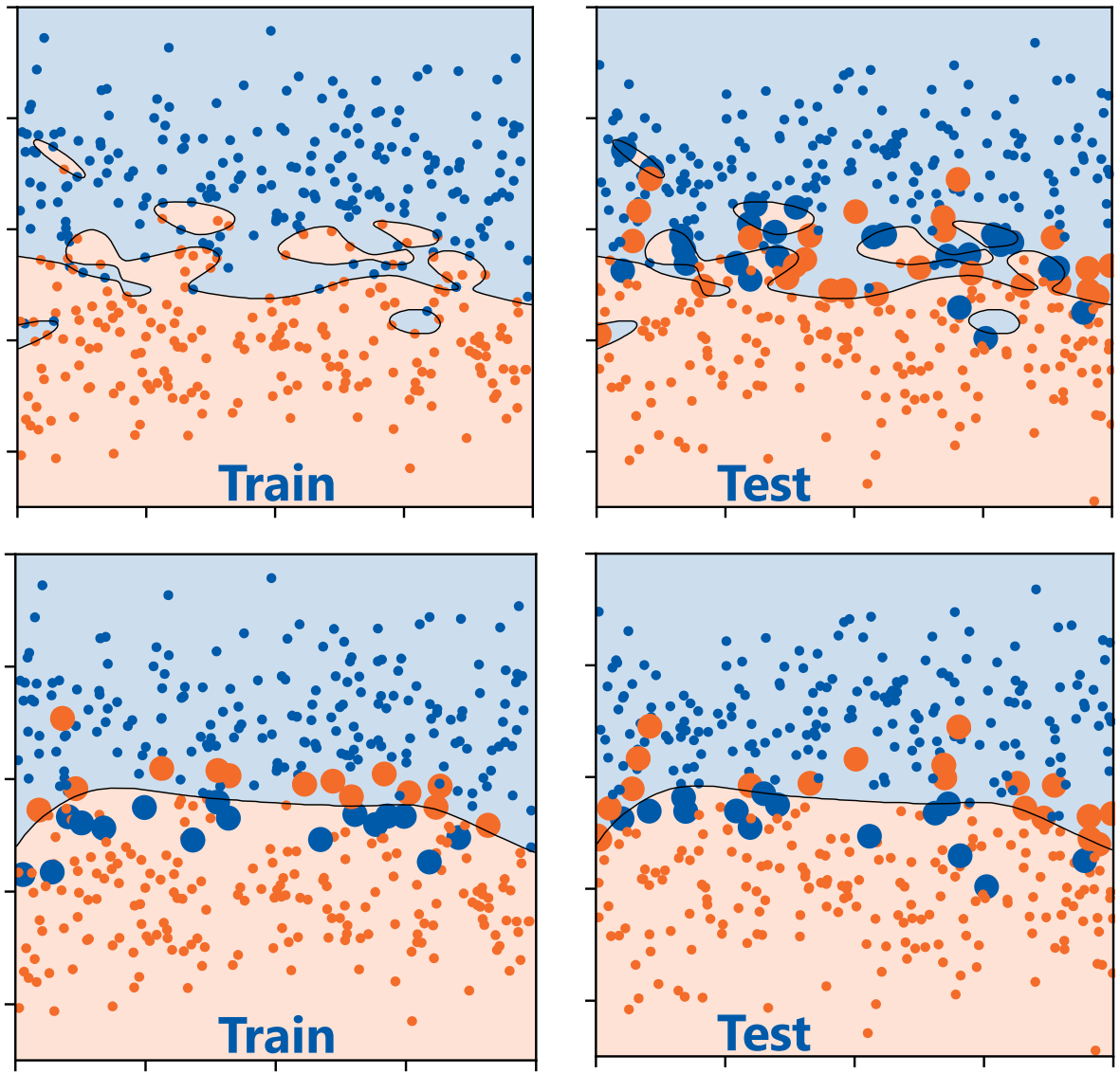


Compromise between the two

Все они смещают вес в сторону меньших значений.

Однако они вызывают различные свойства решения.

Пример: L2-регуляризованная классификация



Without regularization

Регуляризируя модель, мы увеличиваем функцию потерь в обучении и уменьшаем потери при тестировании.

With regularization

Это улучшает обобщаемость модели.

Регуляризация и подходы

MSE loss ⇔ Prob. model with normal label noise!

Частотный подход:
Регуляризация эквивалентна предположению в модели о распределении данных

L2 регуляризация это разрешение модели учитывать нормальный шум

Normal prior ⇔ L2 regularization

Байесовский подход:
Регуляризация эквивалентна априорному предположению о распределении данных

Байесовские нейронные сети = регуляризация

L2 регуляризация это априорное нормальное распределение

Аугментация данных

Что если брать регуляризацию из данных, зная некоторые свойства

https://www.baeldung.com/cs/ml-data-augmentation

Примеры аугментаций:

- Для изображений - flip, rotation, crop, rescale,...
- Для звука - добавляем фоновый шум, меняем высоту звука
- Для текстов - замена на синонимы, backtranslation
- Для последовательностей - пропускаем элементы, меняем местами

Зашумление данных

Добавляем шум в данные

- на входе
- зашумление весов
- на выходе - зашумляем метки

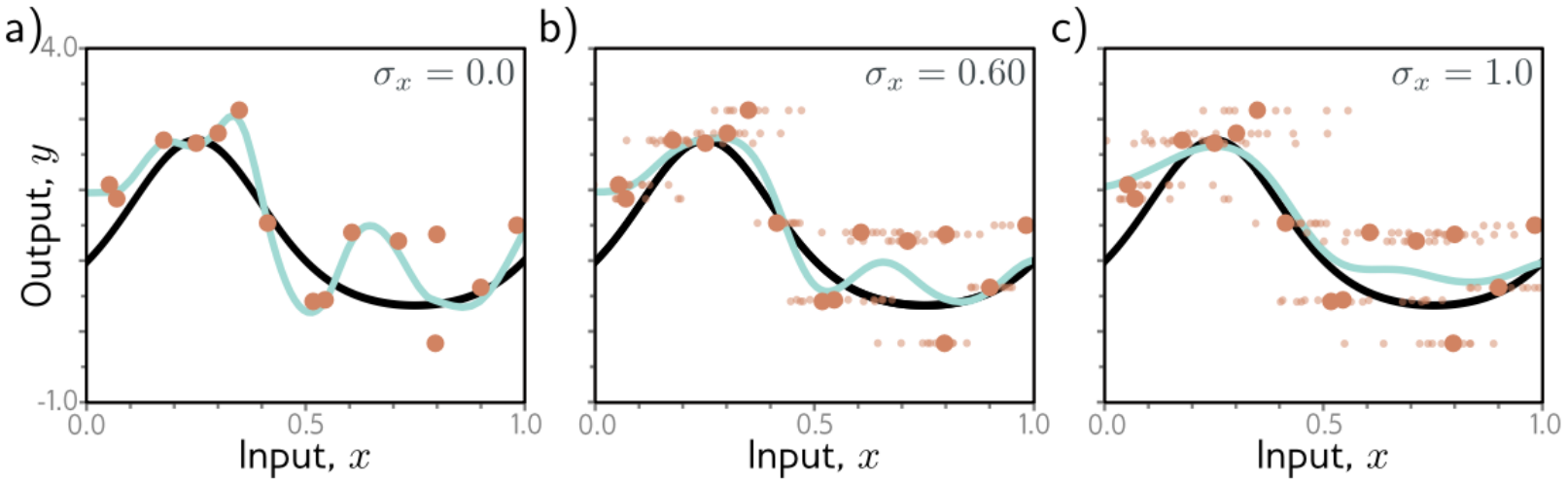
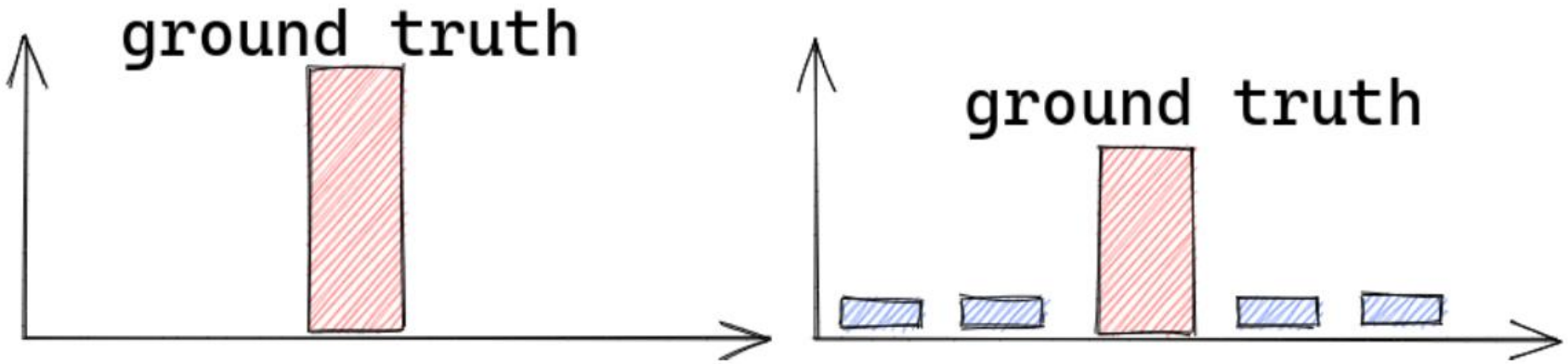


Image credit

Зашумление меток

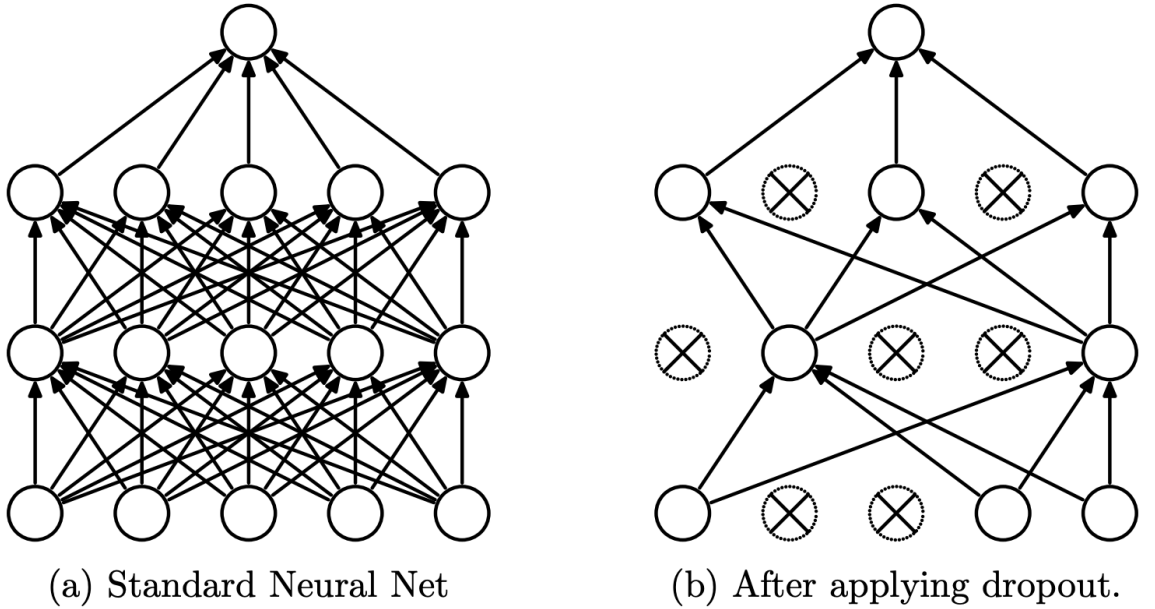


Вероятность правильной метки $1 - \epsilon$, всех остальных - $\epsilon/(K-1)$

Dropout

- При обучении – ставим активацию нейронов 0 с вероятностью p
- При тестировании – умножаем на $1 - p$
  - то есть приравниваем матожиданию
- Заставляет нейрон учиться работать со случайно выбранной выборкой других нейронов
- Заставляет его создавать полезные признаки, а не полагаться на другие нейроны для исправления своих ошибок.

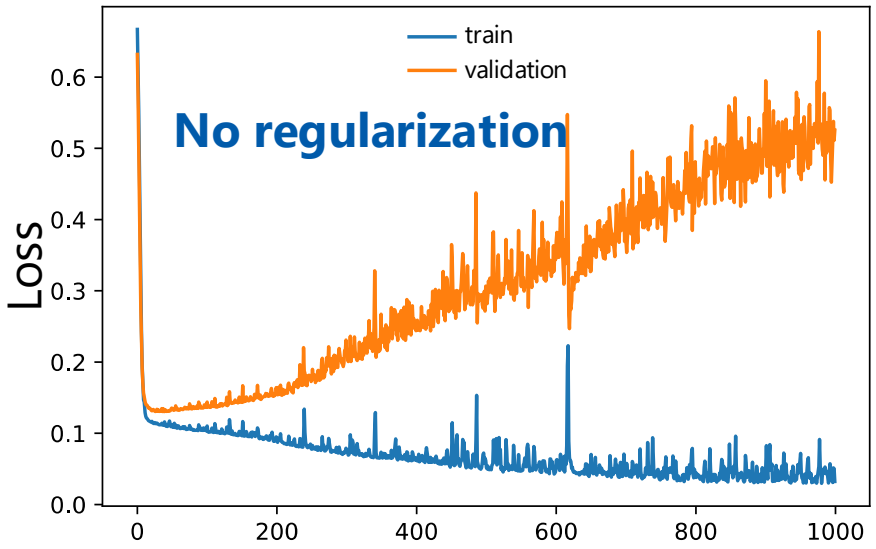
Image from:
http://jmlr.org/papers/v15/srivastava14a.html

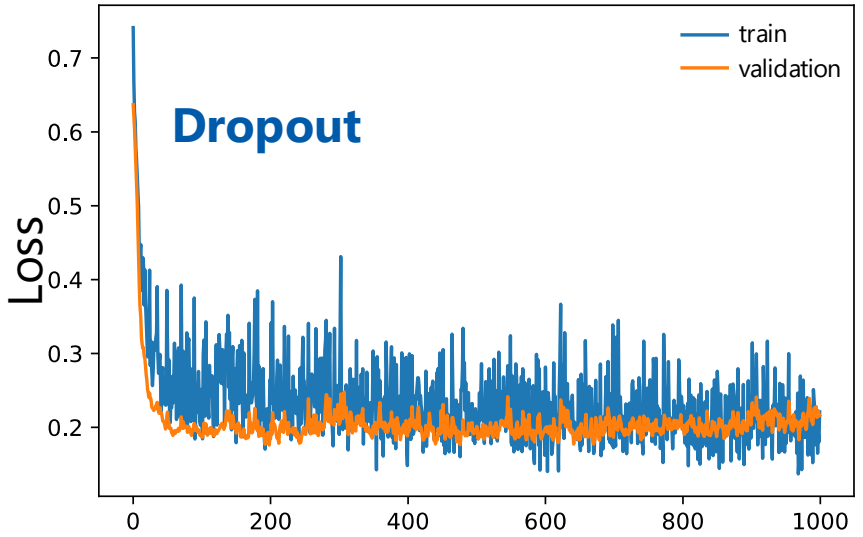


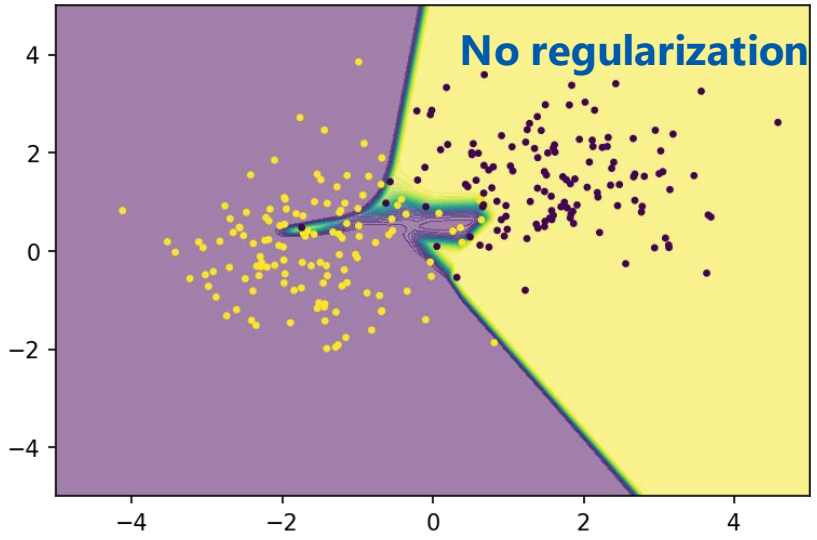
(a) Standard Neural Net

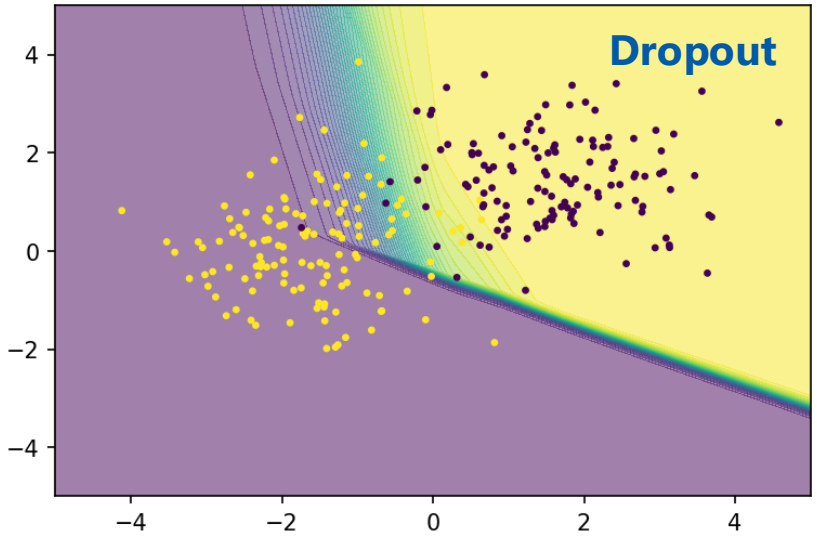
(b) After applying dropout.

Пример прореживания (dropout)









В этом примере dropout приводит к гораздо лучшему (хотя все еще не идеальному) соответствию с меньшей ошибкой теста.

Нормализационные слои

Пакетная нормализация (Batch normalization)

- Первоначально этот метод был предложен для смягчения «внутреннего ковариационного сдвига»
- Работает следующим образом (входы слоя x_i, выходы y_i):
  - рассчитать выборочное среднее значение и дисперсию входных данных для одного батча B

$$\mu_B = \frac{1}{|B|}\sum_{i \in B} x_i \qquad \sigma_B^2 = \frac{1}{|B|}\sum_{i \in B}(x_i - \mu_B)^2$$

  - нормализуем входные данные, затем масштабируем и сдвигаем (с обучаемыми параметрами (γ, β):

$$y_i = \gamma \cdot \frac{x_i - \mu_B}{\sqrt{\sigma_B^2 + \epsilon}} + \beta$$

internal covariate shift

обновления в одном слое изменяют входные распределения последующих слоев

Пакетная нормализация

- Во многих случаях оказалось чрезвычайно эффективным.
  - Более быстрая и стабильная сходимость
- Позже было доказано, что это **не уменьшает** ковариационный сдвиг.
- По сути, удаляет степени свободы «сдвиг» и «масштабирование» из предыдущего слоя.

internal covariate shift

the updates in one layer change the input distributions of the subsequent layers

$$y_i = \gamma \cdot \frac{x_i - \mu_B}{\sqrt{\sigma_B^2 + \epsilon}} + \beta$$

Пакетная нормализация

- По какому измерению следует проводить нормализацию? Обычно это делается так:
  - Batch of 1D vectors [Batch_dim x Features_dim]
    - separately for each component in Features_dim, i.e. over Batch_dim
  - Batch of ND objects [Batch_dim x Spacial_dim1 x … x Channel_dim]
    - separately for each component in Channel_dim, i.e. over Batch_dim x Spacial_dim1 x …

Пакетная нормализация

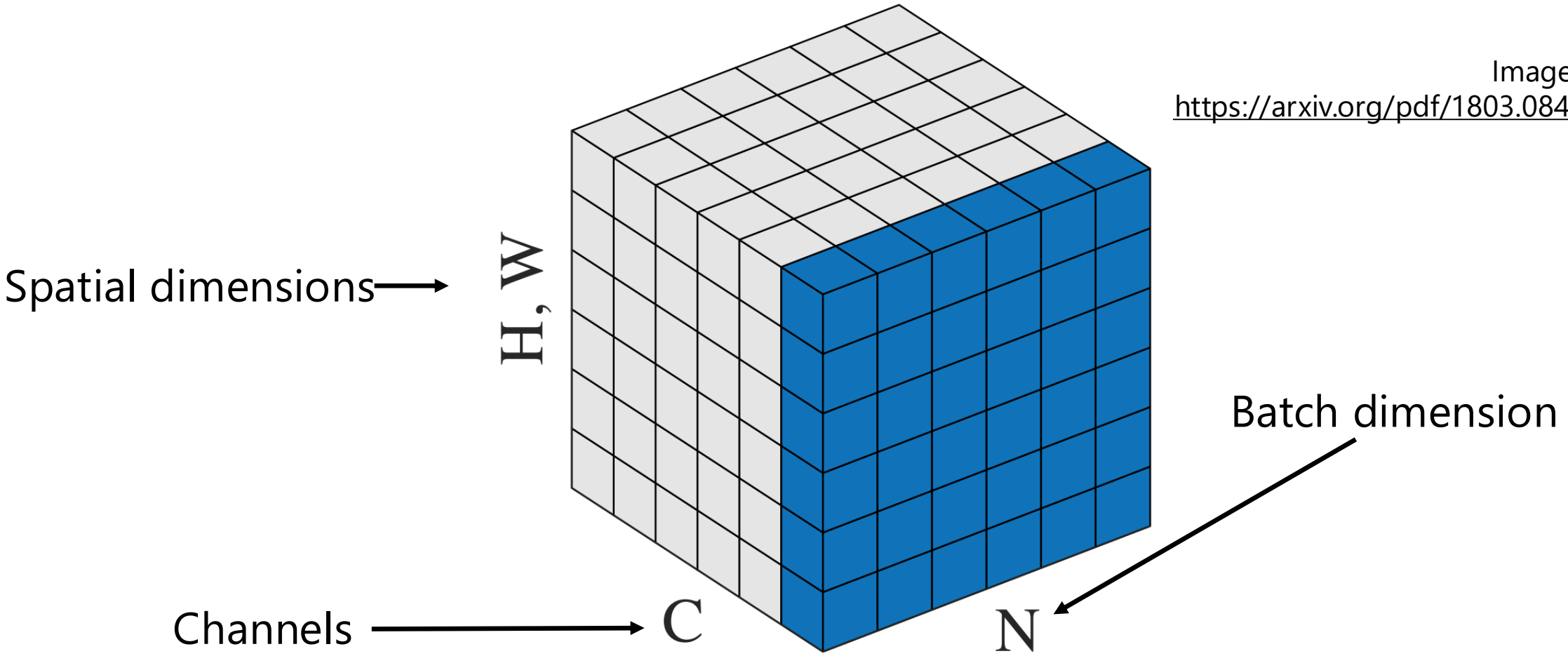
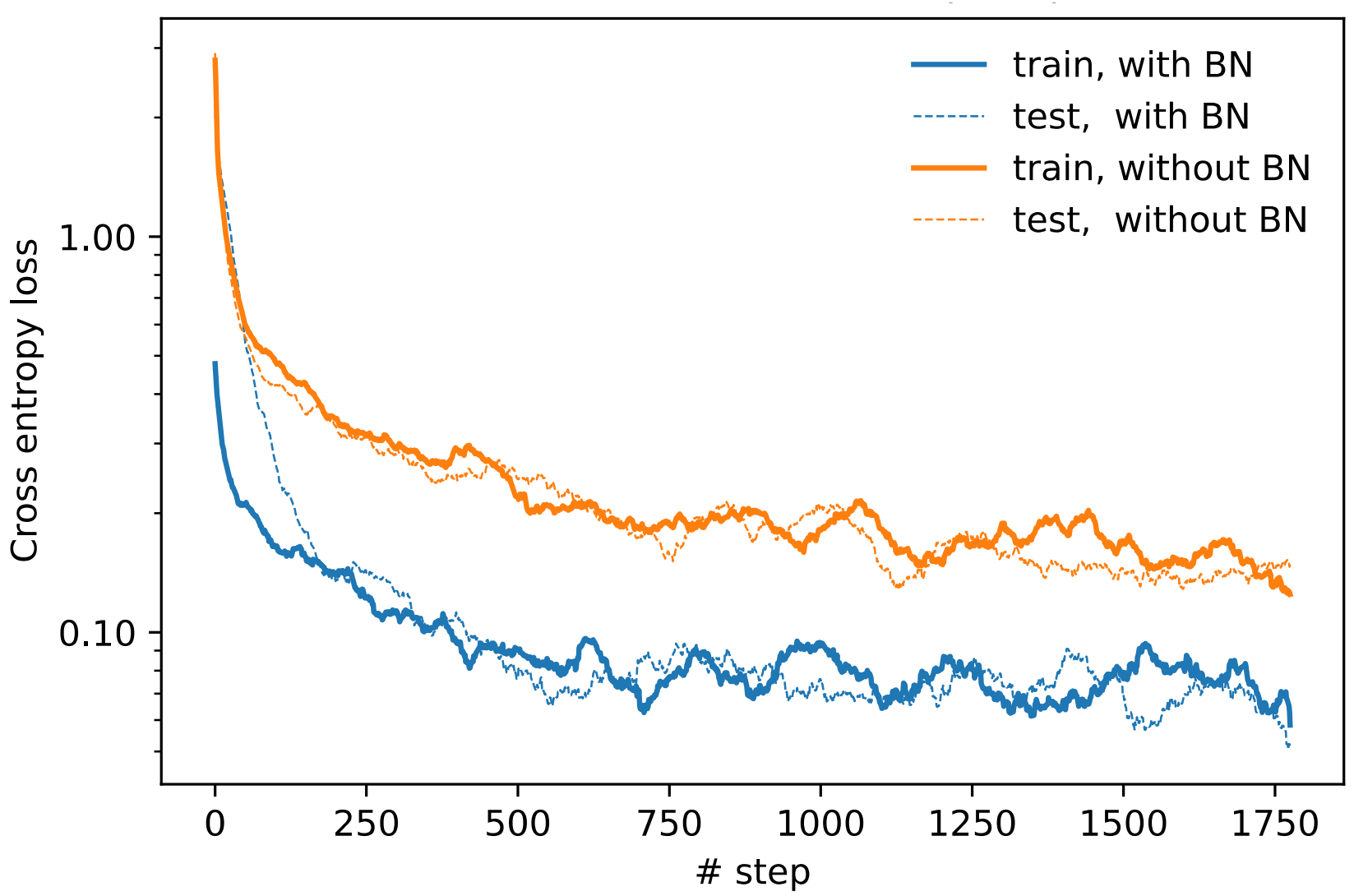


Image from https://arxiv.org/pdf/1803.08494.pdf

Пакетная нормализация во время вывода результатов

- Расчет статистики по пакетам во время тестирования может быть проблематичным.
  - Например, когда есть только один объкт
- Вместо этого: вычисляем скользящее среднее и дисперсию во время обучения, применяйте их во время тестирования.

Example: CNN on MNIST



(shown: moving average loss)

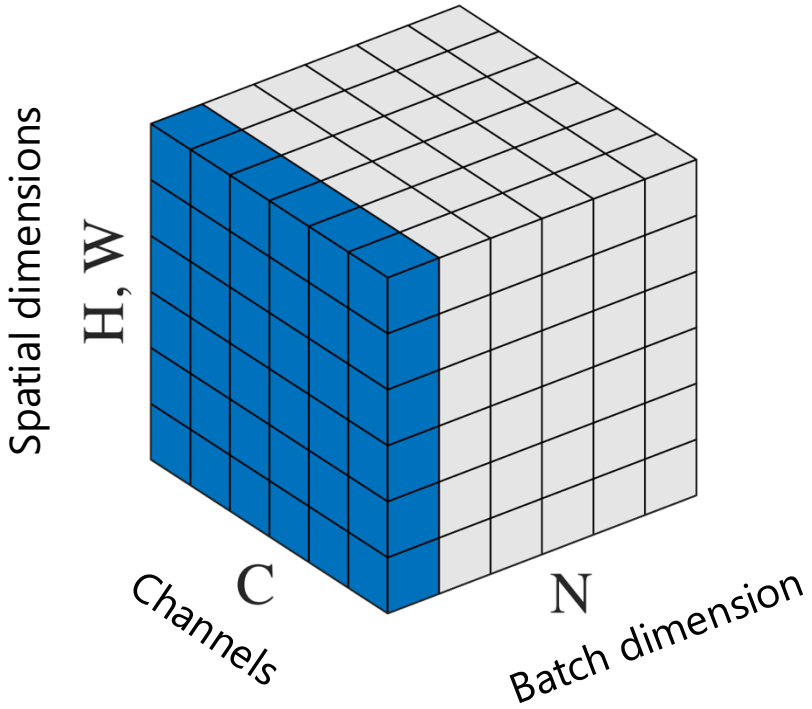
Нормализация слоёв

- Нормализация пакетов устанавливает ограничения на размер пакета.
  - Если значение слишком мало, то дисперсия выборочных статистик будет слишком высокой.

Layer Normalization

- Нормализация пакетов устанавливает ограничения на размер пакета
  - Если значение слишком мало, то дисперсия выборочных статистик будет слишком высокой
- Проблема для рекуррентных сетей
- Альтернатива: **Layer Normalization**
  - Математические расчеты те же, за исключением того, что статистика вычисляется по каналам, а не по элементам пакета.
  - Однако эффект совершенно иной
    - e.g. Нормализация слоев «запутывает» различные нейроны внутри слоя.

Image from
https://arxiv.org/pdf/1803.08494.pdf



Выводы

- Нейронные сети можно регуляризовать с помощью штрафов L1/L2 или ранней остановки.
- Дропаут заставляет нейроны создавать полезные признаки, а не полагаться на другие нейроны для исправления своих ошибок.
- Пакетная нормализация — чрезвычайно мощный метод регуляризации, хотя причина этого не совсем ясна.