深度学习中学习率策略的研究

朱梦

初稿于 2025-05-02，修改于 2025-06-22

1. 学习率适中

学习率太大容易导致发散，太小需要迭代的步数过多。因此，从“节能”和“加速”的角度来看，学习率不宜过小。如果不考虑算力和时间，那么过小的学习率是否可取呢？设损失函数为 $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$，由泰勒级数有：

$$\mathrm{d}\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) \approx < \mathrm{d}\boldsymbol{\theta}, \nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) > \triangleq < \mathrm{d}\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{g} > \tag{1}$$

如果将 $\boldsymbol{\theta}$ 视作为沿着某种时间参数 t 变换的轨迹 $\boldsymbol{\theta}(t)$，那么考虑式(1)的变化率有：

$$\frac{\mathrm{d}\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}(t))}{\mathrm{d}t} = \left\langle \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}(t)}{\mathrm{d}t}, \boldsymbol{g}(t) \right\rangle = < \boldsymbol{\theta}^{(1)}(t), \boldsymbol{g}(t) > \tag{2}$$

其中，$\boldsymbol{\theta}^{(1)}(t)$ 表示 $\boldsymbol{\theta}(t)$ 的一阶导函数。希望 $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}(t))$ 随着 t 的递增而递减（损失值越小越好），所以满足：$\frac{\mathrm{d}\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}(t))}{\mathrm{d}t} \leq 0$。当 $||\boldsymbol{\theta}^{(1)}(t)||_2$ 固定时，上式右端的最小值在梯度的反方向 $-\boldsymbol{g}(t)$ 取得，故梯度的负方向为最速下降方向：

$$\boldsymbol{\theta}^{(1)}(t) = -\boldsymbol{g}(t) \tag{3}$$

那么求解参数 $\boldsymbol{\theta}$ 转换为式(3)所示的常微分方程。可以证明式(3)最终可以收敛至一个不动点（$\boldsymbol{\theta}^{(1)}(t) = \lim_{t\to\infty} \boldsymbol{g}(t) = \mathbf{0}$），且此不动点为极小值点。

然而，不知损失函数为 $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$ 的具体表达式，故无法求出解析解。采用欧拉法求解：

$$\frac{\boldsymbol{\theta}(t) - \boldsymbol{\theta}(t-\eta)}{\eta} = -\boldsymbol{g}(t) \tag{4}$$

即：

$$\boldsymbol{\theta}(t) = \boldsymbol{\theta}(t-\eta) - \eta\boldsymbol{g}(t) \tag{5}$$

这就是最朴素的梯度下降法，其中 η 表示学习率。利用泰勒级数展开 $\boldsymbol{\theta}(t)$：

$$\boldsymbol{\theta}(t) = \boldsymbol{\theta}(t-\eta) + \eta\boldsymbol{\theta}^{(1)}(t-\eta) + \frac{1}{2}\eta^2\boldsymbol{\theta}^{(2)}(t-\eta) + \cdots + \frac{1}{n!}\eta^n\boldsymbol{\theta}^{(n)}(t-\eta) \tag{6}$$

省略剩余证明过程，可以证明：

$$\boldsymbol{\theta}^{(1)}(t) = -(\boldsymbol{g}(t) + \frac{1}{4}\eta||\boldsymbol{g}(t)||_2^2) \tag{7}$$

由式(7)可知，离散化的迭代过程隐式地带来了梯度惩罚项，而梯度惩罚项有助于模型抵达更加平滑的区域，有利于提升泛化性能，故 η 不能趋于零。

2. 学习率衰减策略

（一）设输入为字典 $\{t_1 : r_{\text{min}}\}$ 表示：当 $0 < t \leq t_1$ 时，学习率衰减因子 r_t 从 1 均匀递减至 r_{min}；当 $t > t_1$ 时，学习率衰减因子 r_t 保持 r_{min} 固定不变。那么有：

$$r_t = \begin{cases} 1 + \frac{r_{\text{min}}-1}{t_1}t, & \text{如果} 0 < t \leq t_1, \\ r_{\text{min}}, & \text{如果} t > t_1 \end{cases} \tag{8}$$

（二）设输入为字典 $\{t_1 : 1, t_2 : r_{\text{min}}\}$ 表示：当 $0 < t \leq t_1$ 时，学习率衰减因子 r_t 从 0 均匀递增至 1（即 warmup）；当 $t_1 < t \leq t_2$ 时，学习率衰减因子 r_t 从 1 均匀递减至 r_{min}；当 $t > t_2$ 时，学习率衰减因子 r_t 保持 r_{min} 固定不变。那么有：

$$r_t = \begin{cases} \frac{t}{t_1}, & \text{如果} 0 < t \leq t_1, \\ 1 + \frac{r_{\text{min}}-1}{t_2-t_1}(t-t_1), & \text{如果} t_1 < t \leq t_2, \\ r_{\text{min}}, & \text{如果} t > t_2 \end{cases} \tag{9}$$

（三）设输入为字典 $\{t_1 : r_{\text{min}}, t_2 : r_{\text{min}}, t_3 : 1\}$ 表示：当 $0 < t \bmod t_3 \leq t_1$ 时，学习率衰减因子 r_t 从 1 均匀递减至 r_{min}；当 $t_1 < t \bmod t_3 \leq t_2$ 时，学习率衰减因子 r_t 保持 r_{min} 固定不变；当 $t_2 < t \bmod t_3 \leq t_3$ 时，学习率衰减因子 r_t 从 r_{min} 均匀递增至 1。那么有：

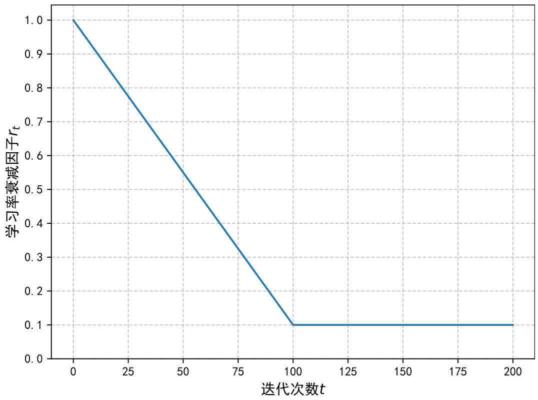
$$r_t = \begin{cases} 1 + \frac{r_{\text{min}}-1}{t_1}(t \bmod t_3), & \text{如果} 0 < t \bmod t_3 \leq t_1, \\ r_{\text{min}}, & \text{如果} t_1 < t \bmod t_3 \leq t_2, \\ r_{\text{min}} + \frac{1-r_{\text{min}}}{t_3-t_2}(t \bmod t_3 - t_2), & \text{如果} t_2 < t \bmod t_3 \leq t3 \end{cases} \tag{10}$$

（四）设输入为字典 $\{t_1 : 1, t_2 : r_{\text{min}}, t_3 : r_{\text{min}}, t_4 : 1\}$ 表示：当 $0 < t \leq t_1$ 时，学习率衰减因子 r_t 从 0 均匀递增至 1（即 warmup）；当 $t_1 < t \leq t_2$ 时，学习率衰减因子 r_t 从 1 均匀递减至 r_{min}；当 $t_2 < t \leq t_3$ 时，学习率衰减因子 r_t 保持

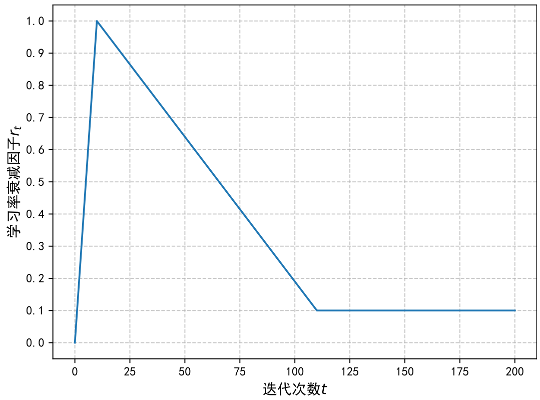
$r_{\min}$ 固定不变；当 $t_3 < t \le t_4$ 时，学习率衰减因子 r_t 从 $r_{\min}$ 均匀递增至 1；对于 $t > t_4$，周期重复 $t_1 \sim t_4$。那么有：

$$r_t = r(t) = \begin{cases} \frac{t}{t_1}, & \text{如果} 0 < t \le t_1, \\ 1 + \frac{r_{\min}-1}{t_2-t_1}(t-t_1), & \text{如果} t_1 < t \le t_2, \\ r_{\min}, & \text{如果} t_2 < t \le t_3, \\ r_{\min} + \frac{1-r_{\min}}{t_4-t_3}(t-t_3), & \text{如果} t_3 < t \le t4, \\ r(t_1 + (t-t_1) \bmod (t_4-t_1)), & \text{如果} t > t4 \end{cases} \tag{11}$$

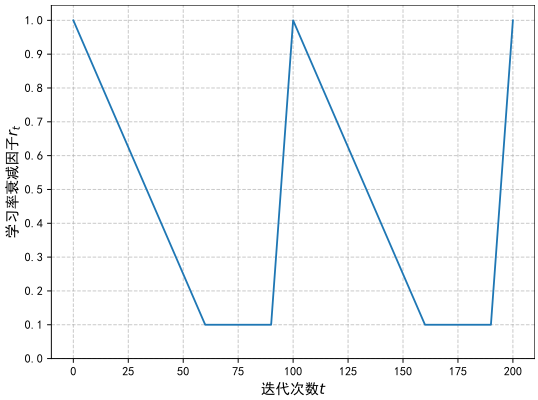
（五）总结。图1可视化了上述四种学习率衰减策略。对于 post-norm 结构或深层模型，建议启用 warmup。对于希望探索更多可能性，建议启用周期。结合博客《优化算法的分析及改进（一）：基于动量累积或不同参数元素更新步长相同的优化算法》可得，对于 SGD/SGDM 类优化算法，$r_{\min}$ 可设置为 0.1 或者 0.01；对于 Adam 类优化算法，$r_{\min}$ 可设置为 0.1 或者 0.01；对于 Lion/Tiger 类优化算法，$r_{\min}$ 可设置为 $1e-4$ 或者 $1e-5$。



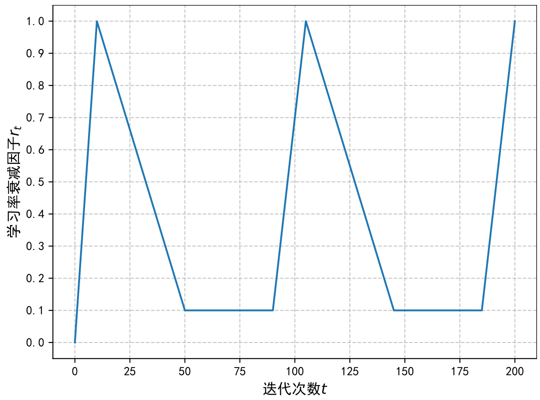
(a) 无 warmup，无周期



(b) 有 warmup，无周期



(c) 无 warmup，有周期



(d) 有 warmup，有周期

图 1　学习率衰减策略