基于 L-BFGS 方法的神经网络训练

pangbo

2024 年 2 月 19 日

1 背景

在深度学习领域，绝大部分情况下会选择一阶优化方法进行神经网络模型参数优化，本文将尝试使用二阶拟牛顿类优化方法进行神经网络训练。通过与常见的神经网络优化方法进行对比，分析深度学习领域中二阶拟牛顿类优化方法的优势和劣势。

1.1 全连接网络

深度学习是机器学习的一个分支，它是一种基于神经网络的机器学习技术，用于模仿人脑的功能，支持从大量数据中进行预测和分类。神经网络本质上是一个有众多参数的复杂函数，训练的过程就是对这些参数进行调整，最终使其较好地拟合数据。

全连接网络是最简单的神经网络结构，它的每个神经元都与前一层的所有神经元相连，形成一个密集的连接结构。全连接网络的每个神经元都有一个权重向量和一个偏置项，输入向量限于权重向量进行内积，加上偏置项，再通过激活函数进行非线性变换，便可以得到神经元的输出。

单层全连接网络可以表示成如下的数学形式：

$$
\begin{aligned}
z^{(l)} &= W^{(l)}a^{(l-1)} + b^{(l)} \\
a^{(l)} &= f(z^{(l)})
\end{aligned}
$$

其中 $a^{(l-1)}$ 是上一层神经元的输出，$W^{(l)}$ 是第 l 层的权重矩阵，$b^{(l)}$ 是偏置项，每一层的 W、b 的集合被称为这个神经网络的参数，f 是激活函数，$a^{(l)}$ 是当前层神经元的输出。类比于生物神经元，a 是神经元的轴突，用于输出信号，$W^{(l)}$ 代表了神经元之间的连接关系。

神经网络的训练过程，就是通过调整权重矩阵和偏置项，使得网络的输出尽可能地接近于真实值。为了衡量网络输出的误差，我们需要定义一个损失函数。损失函数会输出一个标量，这个标量代表了网络输出与真实值的差距。对于回归问题，常用的损失函数是均方误差，对于分类问题，常用的损失函数是交叉熵。

记损失函数为 L，模型参数为 θ，样本输入为 x，真实值为 y^*，模型预测结果为 $y = f(x;\theta)$。则神经网络的训练过程可以表示为如下的优化问题：

$$
\min_{\theta} L(f(x;\theta), y^*)
$$

这是一个典型的无约束优化问题，优化目标为最小化损失函数。

对于一个线性全连接网络，无论有多少层，都可以用一个线性变换来表示。因此，为了能够表示更复杂的函数，我们需要引入非线性变换，即激活函数。常用的激活函数有 sigmoid 函数、tanh 函数、ReLU 函数等。这些激活函数的引入，使得神经网络可以表示更复杂的函数，从而提高了神

经网络的表达能力。但同时，也使得整个网络所描述的变得复杂，难以从理论上快速找到其全局最优解。

1.2 随机梯度下降

梯度下降是一种一阶优化方法，基本思想是沿着梯度的反方向，以一定的步长进行迭代，直到达到收敛条件。梯度下降算法的迭代公式如下：

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta \nabla L(\theta_t)$$

损失函数值被看作一个关于模型参数的函数，通过求导找到最速下降方向，然后沿着这个方向进行参数更新。对于神经网络，使用线搜索确定步长的计算开销较大，因此一般使用较为固定的步长，即学习率 η。

梯度下降算法的收敛性较好，但是每次迭代的计算开销较大，因为每次迭代都需要在整个训练集上计算梯度。在实际实现过程中，受限于内存容量，一般每次迭代只计算一个小批量样本的梯度，然后进行参数更新。这种算法被称为随机梯度下降算法，随机梯度下降及其变种是深度学习中最常用的优化算法。

1.3 拟牛顿类算法

牛顿法的基本思想是利用迭代点处的一阶导数（梯度）和二阶导数（Hessian 矩阵）对目标函数进行二次函数近似，然后把二次模型的极小点作为新的迭代点，并不断重复这一过程，直至求得满足精度的近似极小值。牛顿法的迭代公式如下：

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta [\nabla^2 L(\theta_t)]^{-1} \nabla L(\theta_t)$$

牛顿法在选择下降路径时，能更好地拟合目标函数的局部曲面，在许多情况下，牛顿法能获得更快的收敛速度。但是牛顿法的计算开销较大，因为每次迭代都需要计算 Hessian 矩阵的逆矩阵。为了降低计算开销，人们提出了拟牛顿法，它通过近似 Hessian 矩阵的逆矩阵，来降低计算开销。BFGS 公式是目前最有效的拟牛顿更新公式之一，它将 Hessian 矩阵的逆矩阵近似为一个对称正定矩阵，并限制每轮的更新的秩为 2。

BFGS 公式需要记录上一轮的拟牛顿矩阵，其大小与待优化参数的平方成正比，对于神经网络这种拥有大量参数的优化问题，保存拟牛顿矩阵的内存开销较大。为了降低内存开销，人们提出了 L-BFGS 算法，它只需要保存最近的 m 轮的梯度和更新步长，从而将内存开销降低到 $O(md)$，其中 d 是参数的维度。

本文将尝试使用 L-BFGS 算法进行神经网络的训练。

2 L-BFGS 算法

对于 BFGS 公式，其迭代形式可以表示为

$$H_{k+1} = (V_k)^T H_k V_k + \rho_k s_k s_k^T \tag{1}$$

其中

$$
\begin{aligned}
V_k &= I - \rho_k y_k s_k^T \\
\rho_k &= \frac{1}{y_k^T s_k} \\
y_k &= \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) \\
s_k &= x_{k+1} - x_k
\end{aligned}
$$

在公式1中，H_k 是第 k 轮的拟牛顿矩阵，可以继续套用公式1获得，以此类推，L-BFGS 算法无需保存拟牛顿矩阵，从而减少内存开销。

对于迭代 m 次的 L-BFGS 算法，H_k 的计算过程如下：

$$
\begin{aligned}
H_k =& V_{k-1}^T V_{k-2}^T \cdots V_{k-m}^T H_0 V_{k-m} V_{k-m+1} \cdots V_{k-1} \\
&+ V_{k-1}^T V_{k-2}^T \cdots V_{k-m+1}^T \rho_{k-m} s_{k-m} s_{k-m}^T V_{k-m+1} V_{k-m+2} \cdots V_{k-1} \\
&+ V_{k-1}^T V_{k-2}^T \cdots V_{k-m+2}^T \rho_{k-m+1} s_{k-m+1} s_{k-m+1}^T V_{k-m+2} V_{k-m+3} \cdots V_{k-1} \\
&\quad \cdots\cdots \\
&+ V_{k-1}^T \rho_{k-2} s_{k-2} s_{k-2}^T V_{k-1} \\
&+ \rho_{k-1} s_{k-1} s_{k-1}^T
\end{aligned} \tag{2}
$$

公式 2在实际实现中，V 矩阵是一个 $d \times d$ 矩阵，这意味着计算过程中依然有大量的内存开销峰值，此外公式 2涉及大量重复的矩阵乘法，计算开销也较大。

在实际的 L-BFGS 算法实现中，常使用两次循环递推进行计算，其伪代码见算法1。

Algorithm 1: Two-loop recursion for L-BFGS

Input: Gradient g_k, Scaling factor γ_k, History size m, Past gradients $\{s_{k-i}, y_{k-i}\}_{i=1}^m$

Output: Search direction d_k

Function `TwoLoopRecursion`(g_k, γ_k, $\{s_{k-i}, y_{k-i}\}_{i=1}^m$)**:**

- $q \leftarrow g_k$
- **for** $i = k-1 \to k-m$ **do**
  - $\alpha_i \leftarrow \frac{s_i^\top q}{y_i^\top s_i}$
  - $q \leftarrow q - \alpha_i y_i$
- $r \leftarrow \gamma_k q$
- **for** $i = k-m \to k-1$ **do**
  - $\beta \leftarrow \frac{y_i^\top r}{y_i^\top s_i}$
  - $r \leftarrow r + s_i(\alpha_i - \beta)$
- **return** $-r$

算法1与公式 2形式有较大差异，接下来我们将证明算法1实现的正确性。

证明. 首先考虑第一个循环，其递推形式为

$$
\begin{aligned}
\alpha_i &= \rho_i s_i^T q_{i+1} \\
q_i &= q_{i+1} - \alpha_i y_i
\end{aligned}
$$

于是

$$
\begin{aligned}
q_i &= q_{i+1} - \alpha_i y_i \\
&= (I - \rho_i y_i s_i^T) q_{i+1} \\
&= V_i q_{i+1}
\end{aligned}
$$

因为 $q_k = \nabla f_k$，所以对于 $i = k-1, k-2, \cdots, k-m$ 都有 $q_i = V_i V_{i+1} \cdots V_{k-1} \nabla f_k$。

再考虑第二个循环，其递推形式为

$$
\begin{aligned}
\beta_i &= \rho_i y_i^T r_{i-1} \\
r_i &= r_{i-1} + s_i(\alpha_i - \beta_i)
\end{aligned}
$$

于是

$$
\begin{aligned}
r_i &= r_{i-1} + s_i(\rho_i s_i^T q_{i+1} - \rho_i y_i^T r_{i-1}) \\
&= (I - \rho_i s_i y_i^T) r_{i-1} + \rho_i s_i s_i^T q_{i+1} \\
&= V_i^T r_{i-1} + \rho_i s_i s_i^T V_{i+1} V_{i+2} \cdots V_{k-1} \nabla f_k
\end{aligned}
$$

展开递归，

$$
\begin{aligned}
r_i =& V_i^T V_{i-1}^T r_{i-2} + V_i^T \rho_{i-1} s_{i-1} s_{i-1}^T V_i V_{i+1} \cdots V_{k-1} \nabla f_k + \rho_i s_i s_i^T V_{i+1} V_{i+2} \cdots V_{k-1} \nabla f_k \\
=& V_i^T V_{i-1}^T \cdots V_{k-m}^T r_{k-m-1} \\
&+ V_i^T V_{i-1}^T \cdots V_{k-m+1}^T \rho_{k-m} s_{k-m} s_{k-m}^T V_{k-m+1} V_{k-m+2} \cdots V_{k-1} \nabla f_k \\
&+ V_i^T V_{i-1}^T \cdots V_{k-m+2}^T \rho_{k-m+1} s_{k-m+1} s_{k-m+1}^T V_{k-m+2} V_{k-m+3} \cdots V_{k-1} \nabla f_k \\
&\quad \cdots\cdots \\
&+ V_i^T \rho_{i-1} s_{i-1} s_{i-1}^T V_i V_{i+1} \cdots V_{k-1} \nabla f_k \\
&+ \rho_i s_i s_i^T V_{i+1} V_{i+2} \cdots V_{k-1} \nabla f_k
\end{aligned}
$$

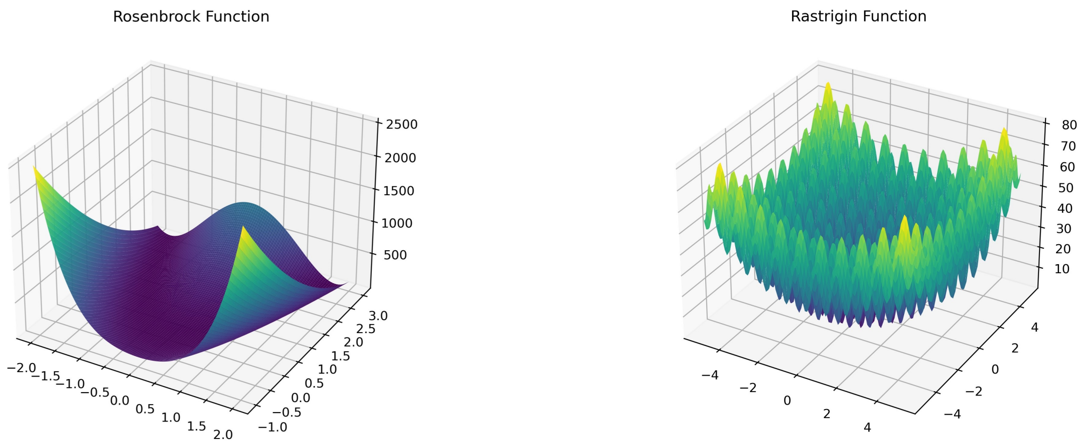
其中递归的初始值为

$$
r_{k-m-1} = H_0 q_{k-m} = H_0 V_{k-m} V_{k-m+1} \cdots V_{k-1} \nabla f_k
$$

最终有

$$
\begin{aligned}
r_{k-1} =& V_{k-1}^T V_{k-2}^T \cdots V_{k-m}^T H_0 V_{k-m} V_{k-m+1} \cdots V_{k-1} \nabla f_k \\
&+ V_{k-1}^T V_{k-2}^T \cdots V_{k-m+1}^T \rho_{k-m} s_{k-m} s_{k-m}^T V_{k-m+1} V_{k-m+2} \cdots V_{k-1} \nabla f_k \\
&+ V_{k-1}^T V_{k-2}^T \cdots V_{k-m+2}^T \rho_{k-m+1} s_{k-m+1} s_{k-m+1}^T V_{k-m+2} V_{k-m+3} \cdots V_{k-1} \nabla f_k \\
&\quad \cdots\cdots \\
&+ V_{k-1}^T \rho_{k-2} s_{k-2} s_{k-2}^T V_{k-1} \nabla f_k \\
&+ \rho_{k-1} s_{k-1} s_{k-1}^T \nabla f_k
\end{aligned}
$$

观察上式与公式 2的形式，不难发现 $r_{k-1} = H_k \nabla f_k$。也就是说 $-r_{k-1}$ 就是我们要找的下降方向，算法1是正确的。 □



(a) Rosenbrock 函数　　(b) Rastrigin 函数

图 1: 函数图像

3 实验

3.1 简单优化问题

我们首先尝试使用 L-BFGS 算法求解两个经典的优化问题，分别为 Rosenbrock 函数和 Rastrigin 函数。

- Rosenbrock 函数

$$f(x) = (a - x_0)^2 + b \cdot (x_1 - x_0^2)^2$$

- Rastrigin 函数

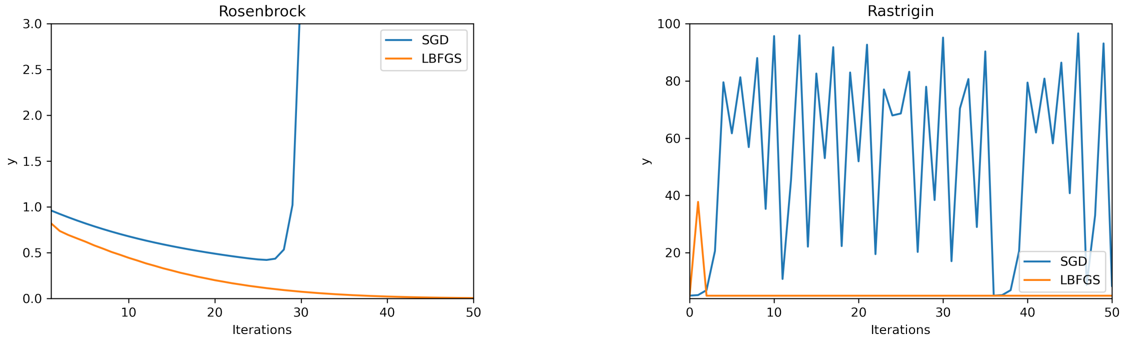
$$f(\mathbf{x}) = An + \sum_{i=1}^{n} \left[x_i^2 - A\cos(2\pi x_i) \right]$$

这两个函数对于二维输入的函数图像如图1所示，这是两个典型的非凸函数，能在一点程度上反映优化算法的性能。

我们使用 L-BFGS 算法与梯度下降求解这两个函数的最小值，优化结果如图2所示。可以看出，L-BFGS 算法能够在较少的迭代次数内找到较好的解，而梯度下降算法难以在这样的非凸优化问题上获得一个收敛的结果。

3.2 神经网络训练

我们选用手写数据集 MNIST 作为训练数据集，尝试使用多种优化算法对一个简单卷积神经网络进行训练。我们选用的三种优化方法分别为随机梯度下降、Adam 算法和 L-BFGS 算法。其中随机梯度下降是一阶优化方法，Adam 算法是一种基于梯度的一阶优化方法，在随机梯度下降的基础上，引入了动量项和二阶矩项，动态调节单次参数更新的步长，从而提高了训练速度。L-BFGS 算法则为我们实现的拟牛顿方法。



(a) Rosenbrock 函数 (b) Rastrigin 函数

图 2: 优化结果

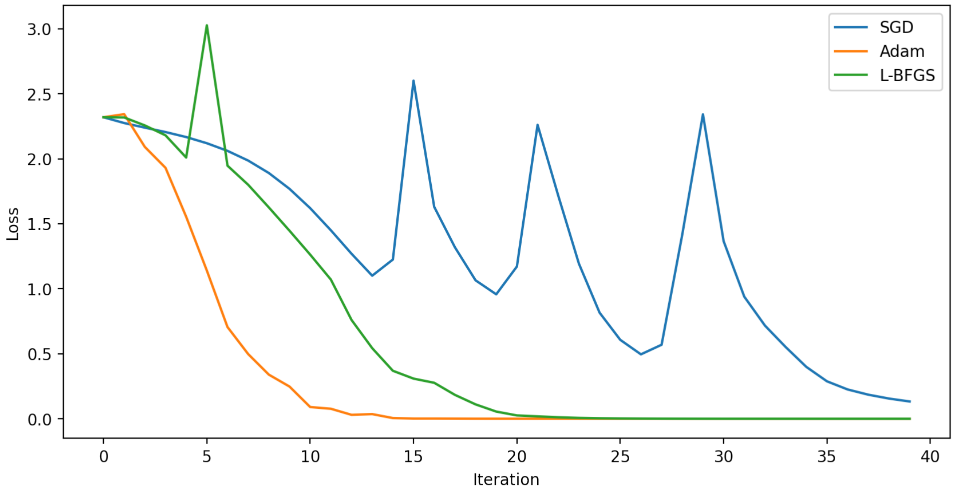


图 3: 固定样本的训练结果

首先，我们选择固定的样本进行训练，相比于真实的神经网络场景，这是一个简化的环境。真实的神经网络训练中，由于样本量较大，不能一次性放入模型计算，只能分批选出样本计算损失，这导致需要优化的目标是随时变化的，而不是固定的。在我们的简化环境中，我们只选择了少量样本，因此可以直接计算所有样本的损失，从而得到固定的优化目标。在固定样本上的训练结果如图3所示，可以看到 Adam 算法的收敛速度最快，L-BFGS 算法次之，随机梯度下降最慢。

然后，我们在完整的 MNIST 数据集上训练，训练过程中的损失函数值如图4所示。

图4中，L-BFGS 算法看似获得了最快的优化速度，但这需要每轮在相同输入下进行十轮内部更新，这导致优化相同的总轮数时，L-BFGS 算法消耗的时间大约为其他算法的两倍。如果不允许内部更新，L-BFGS 算法消耗的时间与其他算法接近，但是优化结果会明显变差，如图5所示，LGBFS-1 曲线代表了不允许内部多次更新的情况。

4 总结

本文尝试使用 L-BFGS 算法对神经网络进行训练，通过与随机梯度下降和 Adam 算法进行对比，分析了 L-BFGS 算法的优势和劣势。L-BFGS 算法在优化目标固定的情况下，能够获得较快的

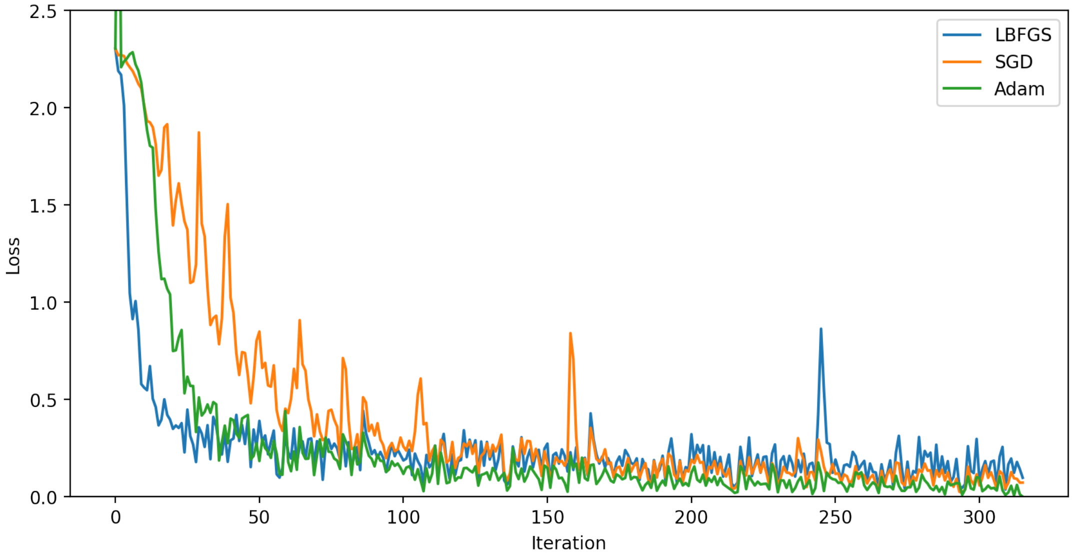


图 4: 三种优化方法在 MNIST 数据集上的训练结果

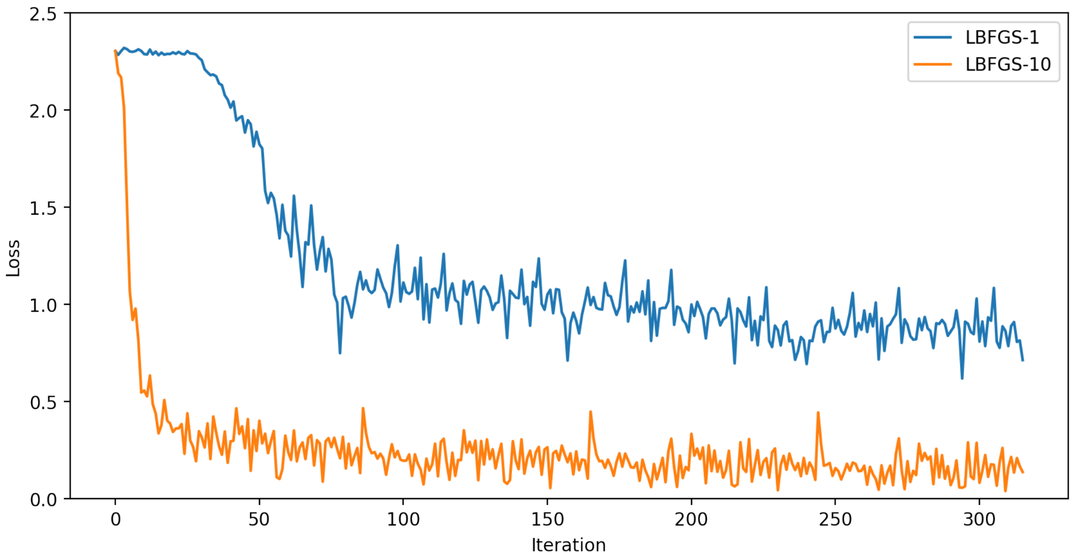


图 5: L-BFGS 算法在不允许内部更新时的训练结果

收敛速度，但是在优化目标随时变化的情况下，L-BFGS 算法的收敛速度较慢，甚至无法收敛。

此外，相较于 Adam 算法，L-BFGS 算法依然更复杂，所需要的计算开销也更大。同时，现在的深度学习领域有数据集规模越来越大的趋势，研究人员更倾向于让模型在更多的数据上训练，而不是对少量数据获得更好的拟合，如果过于关注对部分数据的拟合，反而可能让模型产生过拟合。基于一阶梯度的优化方法可以给模型提供更多的“探索”机会，从而获得更好的泛化能力。当前，Adam 算法已经可以满足绝大多数深度学习任务的训练需求，当前的研究重点更多放在如何设计更好的网络结构上。

综上所述，L-BFGS 算法是一种优秀的优化问题求解算法，但是在实际的深度学习领域，它的应用场景较为有限。

附：代码

lbfgs.py

```
import torch
from collections import deque

class LBFGS():
    def __init__(self, params, lr = 0.01 , max_iter=100,
            memory_size=10, line_search_fn=None):
        self.max_iter = max_iter
        self.memory_size = memory_size
        self.line_search_fn = line_search_fn
        self.s = deque(maxlen=memory_size)
        self.y = deque(maxlen=memory_size)
        self.rho = deque(maxlen=memory_size)
        self._params = list(params)
        self.last_s = None
        self.last_grad = None
        self.lr = lr

    def update_memory(self, s, y):
        ys = torch.dot(y, s)
        if ys > 1e-10:
            self.s.append(s)
            self.y.append(y)
            self.rho.append(1. / ys)

    @torch.no_grad()
    def compute_direction(self, grad):
        y = self.y[-1]
        s = self.s[-1]
```

```
        ys = torch.dot(y, s)
        q = grad.clone()
        alpha = []
        for s, y, rho in zip(reversed(self.s), reversed(self.y), reversed(self.rho)
            alpha_i = rho * torch.dot(s, q)
            q.add_(y, alpha=-alpha_i)
            alpha.append(alpha_i)

        H_diag = ys / y.dot(y)
        r = torch.mul(q, H_diag)
        for s, y, rho, alpha_i in zip(self.s, self.y, self.rho, reversed(alpha)):
            beta = rho * torch.dot(y, r)
            r.add_(s, alpha=alpha_i - beta)
        return -r

    def zero_grad(self):
        for p in self._params:
            if p.grad is not None:
                p.grad.detach_()
                p.grad.zero_()

    def _gather_flat_grad(self):
        views = []
        for p in self._params:
            if p.grad is None:
                view = p.new(p.numel()).zero_()
            elif p.grad.is_sparse:
                view = p.grad.to_dense().view(-1)
            else:
                view = p.grad.view(-1)
            views.append(view)
        return torch.cat(views, 0)

    def _add_grad(self, step_size, update):
        offset = 0
        for p in self._params:
            numel = p.numel()
            p.add_(update[offset:offset + numel].view_as(p), alpha=step_size)
            offset += numel
        assert offset == self._gather_flat_grad().numel()

    @torch.no_grad()
```

```
    def step(self, closure = None):
        loss = None
        if closure is not None:
            closure = torch.enable_grad()(closure)
            loss = closure()
            loss = loss.item()
        grad = self._gather_flat_grad()
        if grad is None:
            raise ValueError("Function must compute gradients.")
        if self.last_grad is not None and self.last_s is not None:
            self.update_memory(self.last_s, grad - self.last_grad)
            self.last_grad = None
            self.last_s = None
        if len(self.s) > 0:
            p = self.compute_direction(grad)
        else:
            p = -grad
        alpha = self.lr
        s = alpha * p
        self._add_grad(alpha, p)

        self.last_s = s
        self.last_grad = grad.clone()

        return loss
```

train.py

```
import torch
from torchvision import datasets, transforms
import torch.nn as nn
import numpy as np
from lbfgs import LBFGS

class SimpleCNN(nn.Module):
    def __init__(self):
        super(SimpleCNN, self).__init__()
        self.conv1 = nn.Conv2d(1, 16, kernel_size=3, stride=1, padding=1)
        self.relu1 = nn.ReLU()
        self.pool1 = nn.MaxPool2d(kernel_size=2, stride=2)
        self.conv2 = nn.Conv2d(16, 32, kernel_size=3, stride=1, padding=1)
        self.relu2 = nn.ReLU()
```

```python
        self.pool2 = nn.MaxPool2d(kernel_size=2, stride=2)
        self.fc1 = nn.Linear(7 * 7 * 32, 128)
        self.relu3 = nn.ReLU()
        self.fc2 = nn.Linear(128, 10)

    def forward(self, x):
        x = self.conv1(x)
        x = self.relu1(x)
        x = self.pool1(x)
        x = self.conv2(x)
        x = self.relu2(x)
        x = self.pool2(x)
        x = x.view(-1, 7 * 7 * 32)
        x = self.fc1(x)
        x = self.relu3(x)
        x = self.fc2(x)
        return x


root = "~/data/MNIST"

# load the dataset and pre-process
transform=transforms.Compose([
    transforms.ToTensor(),
    transforms.Normalize((0.1307,), (0.3081,))
    ])
train_dataset = datasets.MNIST(root, train=True, transform=transform)


model = SimpleCNN()
model.cuda()
dataloader = torch.utils.data.DataLoader(train_dataset, batch_size=128)
criterion = nn.CrossEntropyLoss()
optimizer = LBFGS(model.parameters(), lr=0.01)
loss_list = []
for epoch in range(4):
    for batch_idx, (x, target) in enumerate(dataloader):
        x = x.cuda()
        target = target.cuda()
        def closure():
            optimizer.zero_grad()
            output = model(x)
```

```
            loss = criterion(output, target)
            loss.backward()
            return loss
        for i in range(10):
            loss = optimizer.step(closure)
            loss_list.append(loss)
```