ICLR2020满分论文 | 为什么梯度裁剪能加速模型训练？

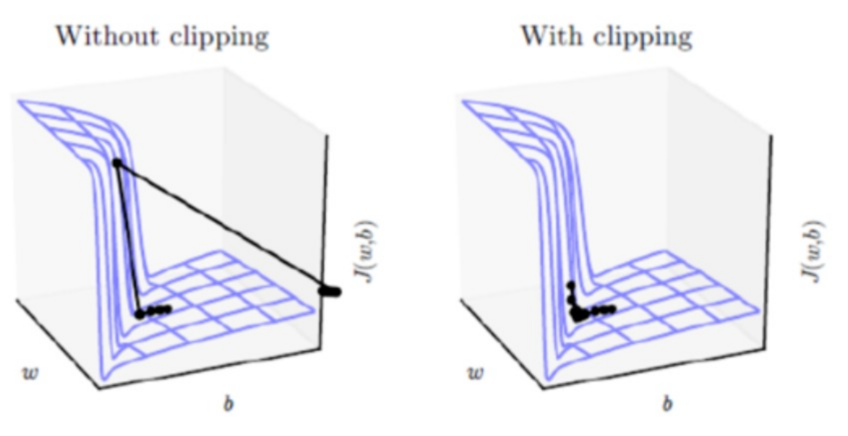
原创 苏剑林 夕小瑶的卖萌屋 2020-06-15 22:20:00 手机阅读

一只小狐狸带你解锁 **炼丹术&NLP** 秘籍

作者：苏剑林（来自追一科技，人称“苏神”）

前言

需要许多时间步计算的循环神经网络，如LSTM、GRU，往往存在梯度爆炸的问题。其目标函数可能存在悬崖一样斜率较大的区域，这是由于时间步上几个较大的权重相乘导致的。当参数接近这样的悬崖区域时，如果更新梯度不足够小，很有可能就会直接跳过这样的悬崖结构，然后被弹射到非常远的地方。梯度裁剪（gradient clipping），是这类问题的常用解决办法。它的**核心思想就是根据目标函数的光滑程度对梯度进行缩放**[1]。



本文介绍来自MIT的一篇ICLR2020满分论文《Why gradient clipping accelerates training: A theoretical justification for adaptivity》。顾名思义，这篇论文就是分析为什么梯度裁剪能加速深度学习的训练过程。原文很长，公式很多，还有不少研究复杂性的概念，说实话对笔者来说里边的大部分内容也是懵的，不过大概能捕捉到它的核心思想：**引入了比常用的L约束更宽松的约束条件，从新的条件出发论证了梯度裁剪的必要性**。本文就是来简单描述一下这个过程，供读者参考。

论文链接：https://arxiv.org/pdf/1905.11881.pdf

Arxiv访问慢的小伙伴也可以在订阅号后台回复关键词【**0615**】下载论文PDF。

梯度裁剪

假设需要最小化的函数为$f(\theta)$，θ就是优化参数，那么梯度下降的更新公式就是（**滑动查看完整公式**）

$$\theta \leftarrow \theta - \eta\nabla_\theta f(\theta) \tag{1}$$

其中η就是学习率。而所谓梯度裁剪（gradient clipping），就是根据梯度的模长来对更新量做一个缩放，比如

$$\theta \leftarrow \theta - \eta\nabla_\theta f(\theta) \times \min\left\{1, \frac{\gamma}{\|\nabla_\theta f(\theta)\|}\right\}$$

或者

$$\theta \leftarrow \theta - \eta\nabla_\theta f(\theta) \times \frac{\gamma}{\|\nabla_\theta f(\theta)\| + \gamma} \tag{3}$$

其中 $\gamma > 0$ ，是一个常数。这两种方式都被视为梯度裁剪，总的来说就是控制更新量的模长不超过一个常数。其实从下面的不等式就可以看到其实两者基本是等价的：

$$\frac{1}{2}\min\left\{1, \frac{\gamma}{\|\nabla_\theta f(\theta)\|}\right\} \leq \frac{\gamma}{\|\nabla_\theta f(\theta)\| + \gamma} \leq \min\left\{1, \frac{\gamma}{\|\nabla_\theta f(\theta)\|}\right\} \tag{4}$$

L约束

有不少优化器相关的理论结果，在其证明中都假设了待优化函数$f(\theta)$的梯度满足如下的L约束：

$$\|\nabla_\theta f(\theta + \Delta\theta) - \nabla_\theta f(\theta)\| \leq L\|\Delta\theta\| \tag{5}$$

由于 $\frac{\|\nabla_\theta f(\theta+\Delta\theta) - \nabla_\theta f(\theta)\|}{\|\Delta\theta\|}$ 是梯度的波动程度，实际上衡量的就是 $f(\theta)$ 的光滑程度，所以上述约束也称为“L光滑性条件（L-smooth）”[2]。值得提醒的是，不同的场景可能会需要不同的L约束，比如有时候我们要假设模型输出关于输入满足L约束，有时候我们要假设模型输出关于参数满足L约束，而上面假设的是模型 loss 的梯度关于参数满足L约束。如果条件 (5) 成立，那么很多优化问题都将大大简化。因为我们可以证明[3]：

$$f(\theta + \Delta\theta) \leq f(\theta) + \langle\nabla_\theta f(\theta), \Delta\theta\rangle + \frac{1}{2}L\|\Delta\theta\|^2 \tag{6}$$

对于梯度下降来说，$\Delta\theta = -\eta\nabla_\theta f(\theta)$，代入上式得到

$$f(\theta + \Delta\theta) \leq f(\theta) + \left(\frac{1}{2}L\eta^2 - \eta\right)\|\nabla_\theta f(\theta)\|^2 \tag{7}$$

因此，为了保证每一步优化都使得 $f(\theta)$ 下降，一个充分条件是 $\frac{1}{2}L\eta^2 - \eta < 0$ ，即 $\eta < \frac{2}{L}$ ，而 $\frac{1}{2}L\eta^2 - \eta$ 的最小值在 $\eta = \frac{1}{L} < \frac{2}{L}$ 时取到，所以只需要让学习率为 $\frac{1}{L}$ ，那么每步迭代都可以使得 $f(\theta)$ 下降，并且下降速度最快。

放松约束

条件 (5) 还可以带来很多漂亮的结果，然而问题是在很多实际优化问题中条件 (5) 并不成立，比如四次函数 $f(\theta) = \theta^4$ 。这就导致了理论与实际的差距。而本文要介绍的论文，则引入了一个新的更宽松的约束：

$$\|\nabla_\theta f(\theta + \Delta\theta) - \nabla_\theta f(\theta)\| \leq (L_0 + L_1\|\nabla_\theta f(\theta)\|)\|\Delta\theta\| \tag{8}$$

也就是将常数 L 换成动态的 $L_0 + L_1\|\nabla_\theta f(\theta)\|$ ，原文称之为“(L0, L1)-smooth”，这里也称为“(L0, L1)约束”。显然这个条件就宽松多了，比如可以检验 θ^4 是满足这个条件的，因此基于此条件所推导出的理论结果适用范围会更广。

在新的约束之下，不等式 (6) 依旧是成立的，只不过L换成对应的动态项：

$$f(\theta + \Delta\theta) \leq f(\theta) + \langle\nabla_\theta f(\theta), \Delta\theta\rangle + \frac{1}{2}(L_0 + L_1\|\nabla_\theta f(\theta)\|)\|\Delta\theta\|^2 \tag{9}$$

代入$\Delta\theta = -\eta\nabla_\theta f(\theta)$得到

$$f(\theta + \Delta\theta) \leq f(\theta) + \left(\frac{1}{2}(L_0 + L_1\|\nabla_\theta f(\theta)\|)\eta^2 - \eta\right)\|\nabla_\theta f(\theta)\|^2 \tag{10}$$

所以很明显了，现在要保证每一步下降，那么就要求

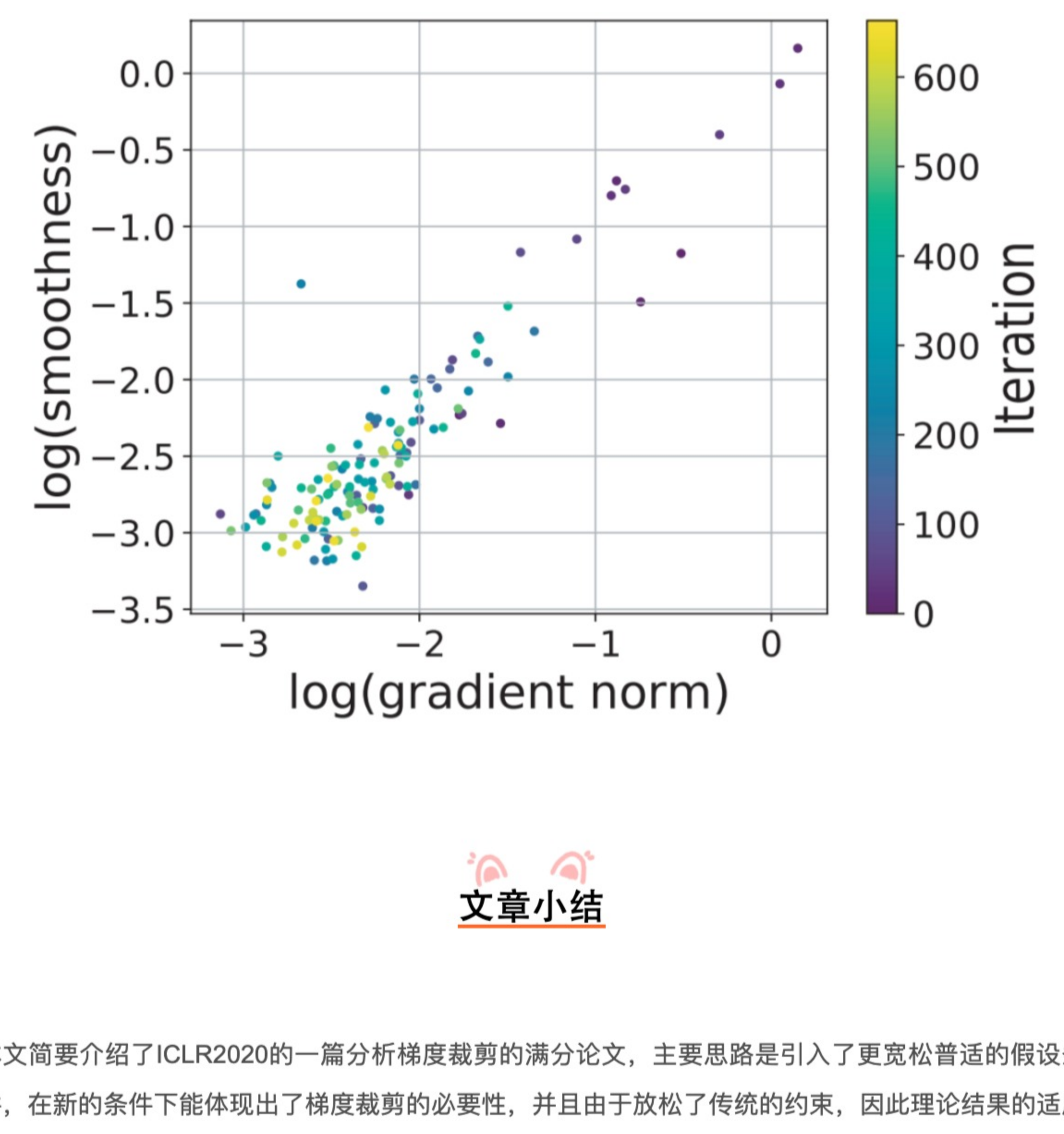
$$\eta < \frac{2}{L_0 + L_1\|\nabla_\theta f(\theta)\|} \tag{11}$$

以及最优学习率是

$$\eta = \frac{1}{L_0 + L_1\|\nabla_\theta f(\theta)\|} \tag{12}$$

这就导出了梯度裁剪 (3)。而保证了每一步都下降，那么就意味着在优化过程中每一步都没有做无用功，所以也就加速了训练过程。

作者们是怎么提出这个条件 (8) 的呢？论文中说是做实验观察出来的：观察到损失函数的光滑程度与梯度模长呈“线性相关”关系.png，如下图所示。但笔者感觉吧，至少应该还有些从结果反推的成分在里边，不然谁那么无聊会去观察这两者的关系呢？



文章小结

本文简要介绍了ICLR2020的一篇分析梯度裁剪的满分论文，主要思路是引入了更宽松普适的假设条件，在新的条件下能体现出了梯度裁剪的必要性，并且由于放松了传统的约束，因此理论结果的适用范围更广，这也就表明，梯度裁剪确实是很多场景下都适用的技巧之一。

参考文献

[1]参考文献 Ian Goodfellow et. al, "Deep Learning", MIT press, 2016
[2]关于L约束可以作者其他博客：《深度学习中的Lipschitz约束：泛化与生成模型》、《BN究竟起了什么作用？一个闭门造车的分析》。
[3]证明过程可参考https://kexue.fm/archives/6992。