ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. МАТЕМАТИКА, ИНФОРМАТИКА, ПРОЦЕССЫ УПРАВЛЕНИЯ, 2023, том 514, № 2, с. 49–59

УДК 004.85

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АДАПТИВНОЙ СПЕКТРАЛЬНОЙ НОРМАЛИЗАЦИИ НА КАЧЕСТВО ГЕНЕРАТИВНЫХ МОДЕЛЕЙ И СТАБИЛЬНОСТЬ ИХ ОБУЧЕНИЯ

© 2023 г. Е. А. Егоров[1,*], А. И. Рогачев[1,]**

Представлено академиком РАН А.И. Аветисяном
Поступило 04.09.2023 г.
После доработки 08.09.2023 г.
Принято к публикации 18.10.2023 г.

При использовании для обучения генеративно-состязательных сетей (GAN) функции потерь, основанной на расстоянии Вассерштейна (т.н. Wasserstein GAN), теоретически необходимым является ограничение выразительной способности дискриминатора (нормализация дискриминатора). Такое ограничение повышает стабильность обучения GAN ценой меньшей выразительности итоговой модели. Спектральная нормализация является одним из алгоритмов нормализации и заключается в применении фиксированной операции независимо к каждому слою дискриминатора. Однако для разных задач оптимальная сила ограничения дискриминатора различается, поэтому возникает необходимость в параметризованном методе нормализации. В данной работе предлагаются варианты модификации алгоритма спектральной нормализации, позволяющие изменять силу ограничения дискриминатора. Помимо параметризации, в предлагаемых методах сила ограничения может меняться во время обучения в отличие от оригинального алгоритма. Для каждого из предложенных методов исследуется качество получаемых моделей.

Ключевые слова: генеративно-состязательные сети, Wasserstein GAN, спектральная нормализация, физика высоких энергий

DOI: 10.31857/S2686954323601884, **EDN:** GMMMKT

1. ВВЕДЕНИЕ

Эксперименты в физике высоких энергий требуют большого объема генерации симулированных данных для надежной интерпретации результатов экспериментов. Особенно остро эта проблема стоит для экспериментов на Большом адронном коллайдере (LHC), поскольку вычислительные ресурсы, требуемые для анализа имеющихся данных, существенно превосходят возможности симуляции данных с помощью имеющегося инструментария, пакета Geant [1]. Одним из решений этой проблемы может быть использование суррогатных генеративных моделей, генерирующих отклики детектора для частиц с использованием напрямую геометрических и кинематических параметров частиц [2]. Будучи обученной на откликах частиц, смоделированных ресурсоемкой детальной мелкошаговой симуляцией Geant, такая модель позволяет исключить компоненты моделирования Geant из массовой симуляции событий. Наиболее эффективно такой подход работает для калориметров, где замена детальной симуляции развития электромагнитных и адронных ливней прямой суррогатной моделью позволяет на порядки ускорить получение отклика калориметра для частиц моделируемого события. Эффективность использования суррогатных моделей отклика калориметра на основе генеративно-состязательных сетей (GAN) в применении к электромагнитному калориметру детектора LHCb была продемонстрирована в работе [2]. Работа [3] наметила пути улучшения качества суррогатной модели для специфических, физически мотивированных метрик.

В рассматриваемой задаче, помимо быстрой скорости работы, от GAN требуется высокое качество генерации. Это необходимо, чтобы модель могла использоваться вместо детальной симуляции. Однако обучению GAN свойственны нестабильность и существенное влияние на него стохастических процессов. Для решения этих проблем мы предлагаем применять регуляризацию, ограничивая липшицеву константу дискриминатора (т.н. нормализация дискриминатора). Такое

[1]*Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, Москва, Россия*
**E-mail: yegyegorov@gmail.com*
***E-mail: airogachev@hse.ru*

ограничение не только является теоретически необходимым условием при использовании функции потерь для Wasserstein GAN [4], но и существенно помогает стабилизировать обучение модели. Выбор способа нормализации – это компромисс между выразительной способностью сети и стабильностью ее обучения, и хотелось бы иметь возможность регулировать степень нормализации, чтобы добиться оптимального баланса в рамках задачи. Спектральная нормализация (Spectral Normalization) [5] оказывается эффективной на практике и превосходит наивные методы, однако не имеет параметров, позволяющих адаптировать силу нормализации под отдельные практические случаи. Предполагается, что некоторое ее параметризованное обобщение позволит подбирать оптимальную степень ограничения дискриминатора, тем самым улучшая качество итоговой модели. В данной работе представлены подобные обобщения и их сравнение с оригинальным методом на примере задачи генерации результатов физического эксперимента (получение отклика калориметра).

2. ОПИСАНИЕ ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ

2.1. Wasserstein GAN

Генеративно-состязательные сети (Generative adversarial networks, GAN) [6] – метод обучения генеративных моделей. Он заключается в одновременном обучении двух моделей: *генератора* и *дискриминатора*. Генератор и дискриминатор учатся попеременно: генератор – генерировать объекты из целевого (истинного) распределения, а дискриминатор – различать выходы генератора и наблюдения из истинного распределения, в чем и состоит "состязание". В данной статье в качестве и генератора, и дискриминатора используются нейронные сети.

Обучение обычно представляет собой оптимизацию некоторой функции потерь генератором и дискриминатором в разных направлениях (минимизацию и максимизацию). Одна из таких функций основывается на 1-расстоянии Вассерштейна и используется в Wasserstein GAN (WGAN) [4].

Обозначим за $\mathbb{P}_r$ целевое распределение, а за $\mathbb{P}_g$ – распределение выхода генератора на некотором нормированном[2] пространстве объектов $\mathscr{X}$. Тогда 1-расстояние Вассерштейна между $\mathbb{P}_r$ и $\mathbb{P}_g$ определяется как

$$W(\mathbb{P}_r,\mathbb{P}_g) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{\gamma\in\prod(\mathbb{P}_r,\mathbb{P}_g)} \mathbb{E}_{(x,y)\sim\gamma}\left[\|x-y\|_{\mathscr{X}}\right],$$

где $\prod(\mathbb{P}_r,\mathbb{P}_g)$ – множество всех совместных распределений на $\mathscr{X}\times\mathscr{X}$, маргинальными распределениями которых являются соответственно $\mathbb{P}_r$ и $\mathbb{P}_g$.

Для липшицевой функции $f : U \mapsto V$ (где U, V – некоторые нормированные пространства) обозначим за $\|f\|_L$ наименьшую константу, для которой выполняется условие липшицевости, т.е.

$$\|f\|_L \stackrel{\text{def}}{=} \inf\{K\in\mathbb{R}_{\geq 0} \mid \forall x,y\in U : \\ : \|f(x)-f(y)\|_V \leq K\cdot\|x-y\|_U\}.$$

Утверждается [7], что

$$W(\mathbb{P}_r,\mathbb{P}_g) = \sup_{\|f\|_L\leq 1}\left(\mathbb{E}_{x\sim\mathbb{P}_r}[f(x)] - \mathbb{E}_{x\sim\mathbb{P}_g}[f(x)]\right), \quad (1)$$

где супремум берется по всем функциям $f:\mathscr{X}\mapsto\mathbb{R}$, которые являются липшицевыми с константой 1.

Если в качестве функции $f(x)$ использовать нейронную сеть (дискриминатор) и обучать ее на максимизацию оценки $\mathbb{E}_{x\sim\mathbb{P}_r}[f(x)] - \mathbb{E}_{x\sim\mathbb{P}_g}[f(x)]$ по выборкам из $\mathbb{P}_r$, $\mathbb{P}_g$, то из (1) ожидается, что эта оценка будет приближаться к $W(\mathbb{P}_r,\mathbb{P}_g)$. Следовательно, минимизация этой же оценки генератором будет соответствовать приближению $\mathbb{P}_g$ к $\mathbb{P}_r$, т.е. желаемому обучению генератора. И именно такую оценку вида

$$\mathscr{L}(X_r,X_g) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} f(x_r^{(i)}) - \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} f(x_g^{(i)}), \quad (2)$$

где $X_r = (x_r^{(1)},\ldots,x_r^{(m)})$, $x_r^{(i)}\sim\mathbb{P}_r$, $X_g = (x_g^{(1)},\ldots,x_g^{(m)})$, $x_g^{(i)}\sim\mathbb{P}_g$ – выборки настоящих и сгенерированных объектов соответственно, предлагается использовать в качестве функции потерь при обучении WGAN с отрицательным и положительным знаками для дискриминатора и генератора соответственно.

Нетрудно показать, что при замене условия $\|f\|_L\leq 1$ на $\|f\|_L\leq K$ в (1) для произвольного $K\geq 0$ правая часть равенства будет равна $K\cdot W(\mathbb{P}_r,\mathbb{P}_g)$, что при обучении с помощью градиентного спуска будет соответствовать изменению шага в K раз вдоль того же направления. Следовательно, ожидаемо от функции дискриминатора достаточно липшицевости с некоторой небольшой константой, а не в точности с 1.

Для того чтобы поддерживать условие ограниченности липшицевой константы дискриминатора, применяются различные методы нормализации. Одним из таких методов является спектральная нормализация [5].

[2] Для нормированного пространства V за $\|\cdot\|_V$ далее будет обозначаться норма, заданная на этом пространстве.

2.2. Спектральная нормализация

Утверждение 1. *Для сети вида* $f(x) = (f_{p+1} \circ \sigma_p \circ \ldots \circ \sigma_1 \circ f_1)(x)$, *где*

1. $f_i(x) = W_i \cdot x$ — линейный слой

2. $\sigma_i(x)$ — некоторая функция активации такая, что $\|\sigma_i\|_L = 1$ (например, ReLU или LeakyReLU) утверждается [5], что

$$\|f\|_L \le \prod_{i=1}^{p+1} \|W_i\|_2. \tag{3}$$

Алгоритм спектральной нормализации заключается в том, что матрица весов каждого линейного слоя W_i заменяется на $W_i' = \frac{W_i}{\|\widehat{W_i}\|_2}$, где $\|\widehat{W_i}\|_2$ — оценка спектральной нормы матрицы W_i, получаемая в результате применения степенного метода (power iteration). В результате, из (3), липшицева константа всей сети оказывается ограничена сверху 1. Для сверточных слоев все матрицы-ядра конкатенируются в одну матрицу, оценка спектральной нормы которой используется в качестве делителя при нормировании.

Ограничение липшицевой константы дискриминатора в методе спектральной нормализации обеспечивается жестким нормированием слоев так, что спектральная норма каждого из них в точности становится равна 1 (с поправкой на неточность используемой оценки нормы). Это существенно ограничивает выразительную способность сети, поэтому в данной работе предлагается ослабить это ограничение.

2.3. ABCAS

Метод ABCAS (Adaptive Bound Control of spectral norm as Automatic Stabilizer) [8] развивает идею спектральной нормализации. В нем дискриминатор ограничивается в большей степени (его липшицева константа меньше), чем в оригинальном методе, причем степень ограничения меняется по ходу обучения. Для этого поддерживается значение $r \in \mathbb{R}_{\ge 0}$, и матрица весов каждого из слоев дискриминатора, которые нормируются в методе спектральной нормализации, дополнительно умножается на $m = 0.9^r$. Таким образом, нормируемая матрица весов W_i заменяется на $W_i' = \frac{m}{\|\widehat{W_i}\|_2} \cdot W_i$. Значение r обновляется после каждой итерации обучения генератора по следующей оценке расстояния между истинным и генерируемым распределениями:

$$\mathrm{dist} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \max_{x \in X_r} f(x) - \max_{x \in X_g} f(x),$$

где X_r, X_g — выборки из настоящих и сгенерированных объектов соответственно, а $f(x)$ — дискриминатор. Чем больше эта оценка, тем больше r и, соответственно, сильнее ограничение дискриминатора. Авторы обосновывают данную стратегию выбора r тем, что экспериментально усиление ограничения на дискриминатор при увеличении расстояния между истинным и генерируемым распределениями приводит к желаемому уменьшению этого расстояния.

ABCAS в ходе экспериментов в рамках решаемой задачи рассматривается в качестве альтернативного способа нормализации, являющегося параметризованным обобщением спектральной нормализации.

3. ПРЕДЛАГАЕМЫЕ МЕТОДЫ

Простейшим способом изменить липшицеву константу сети, тем самым изменив ее выразительную способность, является умножение ее выхода на некоторое число. В условиях из Утверждения 1 при использовании спектральной нормализации и дополнительном умножении выхода сети на $c \in \mathbb{R}_{>0}$ ее липшицева константа будет ограничена сверху c. Эта идея является основной для всех предложенных далее методов.

Умножение на фиксированную константу

Самым наивным способом является умножение выхода дискриминатора, к которому применяется спектральная нормализация, на фиксированную константу. Это добавляет параметризацию, однако выбор оптимальной константы требует некоторого перебора, что может быть вычислительно трудно.

Умножение на обучаемый множитель

В качестве развития прошлого способа предлагается умножать выход дискриминатора на обучаемый множитель, что избавит от необходимости подбирать константу, а также сделает метод более гибким ввиду возможности изменения множителя во время обучения. Однако так вовсе теряется гарантия на ограниченность липшицевой константы дискриминатора, ведь обучаемый множитель может принимать сколь угодно большие значения.

Регуляризация обучаемого множителя

Одним из способов ограничения роста множителя является его регуляризация. В качестве нее предлагается прибавлять дополнительное регуляризационное слагаемое к функции потерь дискриминатора. Обозначим обучаемый множитель за c, тогда одним из простейших вариантов регуляризационного слагаемого является

$$R(c) = \lambda \cdot c^p, \quad \lambda \in \mathbb{R}_{>0}, \quad p \in \mathbb{R}_{\geq 1}. \tag{4}$$

Однако такая регуляризация приводит к необходимости тщательного подбора λ, т.к. при относительно больших значениях множитель с некоторого момента будет почти монотонно убывать до нуля, а при малых — неограниченно увеличиваться. Желаемым же поведением является сходимость множителя к некоторому ненулевому значению.

В качестве более подходящей регуляризации предлагается “штрафовать” множитель лишь при значениях больше некоторого, например, 1. Для этого предлагается использовать следующее регуляризационное слагаемое по аналогии с ℓ_p-регуляризацией:

$$R(c) = \lambda \cdot \max(0, c - \text{offset})^p, \quad p \in \mathbb{R}_{\geq 1}, \tag{5}$$

где offset > 0 — некоторое “нештрафуемое” значение множителя, которое следует подбирать экспериментально. В качестве стартового значения множителя используется offset. Подобная регуляризация не позволит множителю расти, но в то же время не будет его так сильно ограничивать, как (4). Далее регуляризация со слагаемым вида (5) будет обозначаться как ℓ_p^{offset}-регуляризация.

Умножение выходов слоев дискриминатора на разные множители

В методе спектральной нормализации поддерживается условие равенства спектральной нормы матрицы весов каждого нормируемого слоя 1. Однако из Утверждения 1 достаточным является лишь ограничение произведения этих норм сверху 1. Предположительно, возможность равенства норм матриц весов различных слоев дискриминатора разным значениям может улучшить результат, увеличив выразительную способность дискриминатора.

Предлагается для каждого слоя, нормируемого алгоритмом спектральной нормализации, добавить умножение выхода на отдельный обучаемый множитель. Изначально этот множитель для каждого слоя будет равен 1. Чтобы ограничить рост липшицевой константы дискриминатора, как и ранее, предлагается использовать регуляризационное слагаемое по аналогии с ℓ_p^{offset}-регуляризацией для одного обучаемого множителя:

$$R(\overline{c}) = \lambda \cdot \max\left(0, \left(\prod_{i=1}^{k} c_i\right) - \text{offset}\right)^p, \quad p \in \mathbb{R}_{\geq 1}, \tag{6}$$

где $\overline{c} = (c_1, \ldots, c_k)$, $c_i > 0$ — множитель для i-го нормируемого слоя. Далее регуляризация со слагаемым вида (6) будет обозначаться как ℓ_p^{offset}-регуляризация, так же, как и для случая с одним обучаемым множителем.

4. ЭКСПЕРИМЕНТЫ

4.1. Постановка задачи генерации и процедура обучения

Задача симуляции физического эксперимента рассматривается как задача условной генерации. В ней генерируемое значение зависит от условия, которым являются входные показатели частицы: координаты позиции входа (2 числа) и вектор импульса (3 числа). Объектом генерации является матрица размера 30×30 с неотрицательными элементами. Схематически эксперимент изображен на рис. 1. Примеры целевых матриц приведены на рис. 2.

Для генерации используется алгоритм WGAN с условной генерацией, как в [2][3]. В качестве условия дополнительно используются значения двух функций, вычисляемых по входным показателям частицы: длина и угол поворота вектора точки входа частицы относительно центра детектора. Используемые архитектуры моделей генератора и дискриминатора приведены в приложении А. Дополнительно использовалась меньшая сеть дискриминатора: с вдвое меньшим числом выходных каналов для каждого сверточного слоя и соответственно уменьшенными линейными слоями (суммарное число параметров уменьшилось примерно в 4 раза).

Ряд гиперпараметров был зафиксирован для всех проводимых экспериментов:

В качестве алгоритма оптимизации как для генератора, так и для дискриминатора был взят RMSProp, т.к. он используется в оригинальном методе WGAN. Количество итераций обучения дискриминатора перед итерацией обучения генератора (`n_critic`) равно 5 по той же причине. Размер подвыборки, используемой для одного шага оптимизации, (batch) равен 200, как наибольшему (чтобы ускорить обучение) значению из опробованных, при котором качество генерации не ухудшается. Обучение велось в течение 150 эпох[4], т.к. практически для всех методов значения использованных метрик к 150-й эпохе уже продолжительное время находились примерно на одном уровне, и потенциала для дальнейших изменений по графикам не наблюдалось.

---

[3] GitHub-репозиторий с используемой реализацией процедуры обучения и измерения метрик — `https://github.com/TrickmanOff/GAN_project`

[4] Эпоха в данном контексте — один проход по всей обучающей выборке при выполнении шагов обучения генератора.

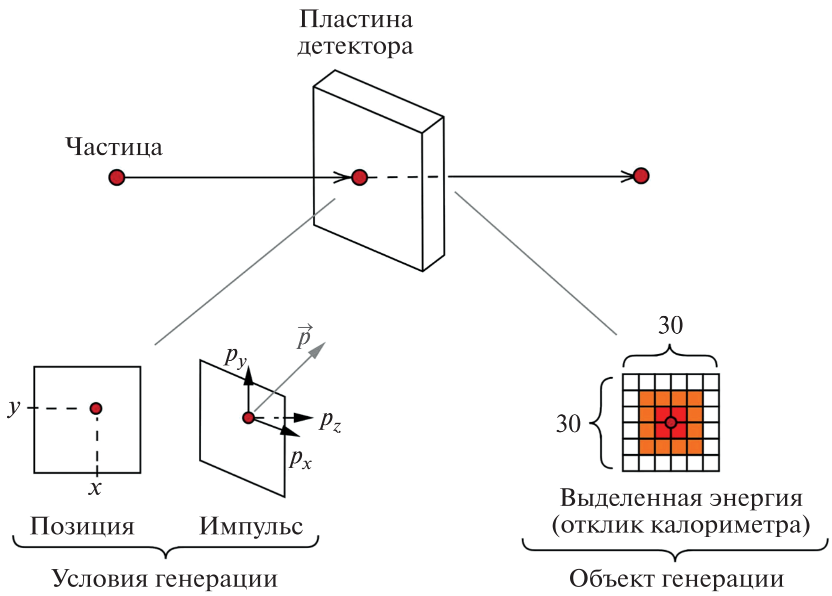

Рис. 1. Задача генерации результата физического эксперимента.

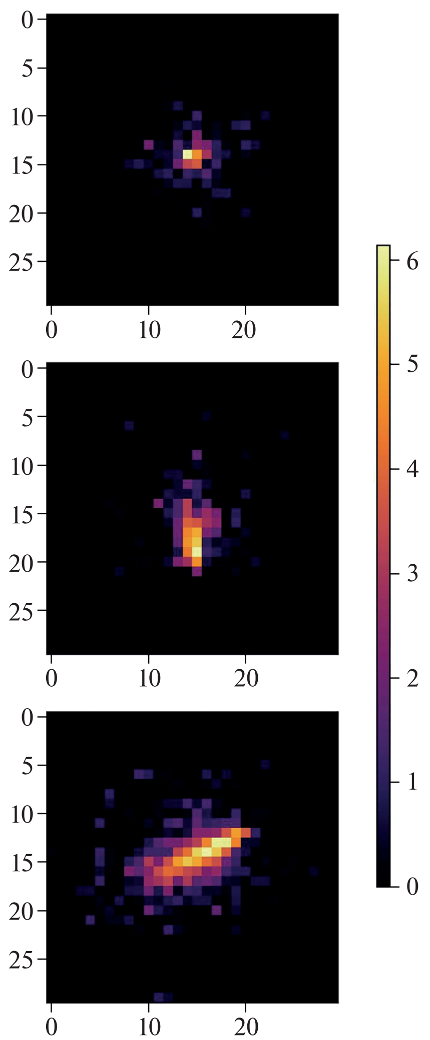

Рис. 2. Примеры матриц энергии.

Остальные гиперпараметры подбирались для каждого метода отдельно путем перебора нескольких вручную заданных значений. Из них выбирались те, при которых значения метрик итоговой модели в среднем по нескольким запускам процедуры обучения оказывались наилучшими.

4.2. Оценка качества генерации

За основу метрики качества генерации в рассматриваемой задаче была взята PRD (Precision-Recall for Distributions) [9].

$\mathrm{PRD}(\mathbb{P}_g, \mathbb{P}_r)$ определяется как множество пар (α, β) из $[0,1]^2$, удовлетворяющих некоторому условию такому, что α в некотором смысле соответствует точности (precision), а β – полноте (recall) приближения $\mathbb{P}_r$ с помощью $\mathbb{P}_g$ по аналогии с задачей классификации. Образуемая этим множеством кривая (PRD-кривая) рассматривается как аналог PR-кривой. В качестве метрики используется площадь под этой кривой – PRD-AUC (аналогично метрике PR-AUC). В [9] представлен алгоритм нахождения примерной PRD-кривой для GAN путем приближения распределений $\mathbb{P}_g$ и $\mathbb{P}_r$ дискретными с помощью кластеризации объектов сгенерированной и истинной выборок.

Оригинальная метрика PRD не учитывает условие, тогда как в данной работе рассматривается именно задача условной генерации и хотелось бы оценивать близость именно условных целевого и генерируемого распределений. Чтобы учесть условия, предлагается некоторым образом разбить их множество на небольшое число непересекающихся подмножеств. Затем рассмотреть условные распределения $\mathbb{P}_g$, $\mathbb{P}_r$ при попадании условия в каждое из этих подмножеств как отдельные распределения. Далее для каждой пары условных генерируемого и истинного распределений вычислить PRD-AUC, как для безусловных, и затем усреднить полученные значения по всем подмножествам.

Более формально, пусть y – случайная величина (условие) на некотором множестве условий $\mathcal{Y}$. Задача условной генерации – приблизить условное распределение $P_r(x|y)$, $x \in \mathcal{X}$ для каждого $y \in \mathcal{Y}$.

Определение 1. *Обозначим за PRD-AUC*$(\mathbb{P}_g, \mathbb{P}_r)$ *значение PRD-AUC для распределений* $\mathbb{P}_g$, $\mathbb{P}_r$. *Пусть* $\mathcal{B} = \{B_k\}_{k=1}^q$ – *некоторое конечное разбиение* $\mathcal{Y}$ (*т.е.* $\coprod_{k=1}^q B_k = \mathcal{Y}$). *Введем метрику усредненной PRD-AUC по разбиению множества условий* $\mathcal{B}$[5] *как*

$$\text{PRD-AUC}_{\mathcal{B}}(\mathbb{P}_g, \mathbb{P}_r) \stackrel{\text{def}}{=} \\ = \frac{1}{q}\sum_{k=1}^{q} \text{PRD-AUC}(P_g(x|y \in B_k), P_r(x|y \in B_k)). \quad (7)$$

На практике предлагается вычислять метрику как оценку теоретического значения по выборкам из $P_g(x, y)$ и $P_r(x, y)$, как и в алгоритме из [9] вычисляется оригинальная PRD-AUC.

Более формально:

Определение 2. *Пусть*

1. $X_g^{\text{cond}} = \{(x_g^{(i)}, y_g^{(i)})\}_{i=1}^{n_g}$ – выборка сгенерированных объектов (из $\mathbb{P}_g$), где $x_g^{(i)} \sim P_g(x|y_g^{(i)})$, т.е. объект сгенерирован при условии $y_g^{(i)}$.

2. $X_r^{\text{cond}} = \{(x_r^{(j)}, y_r^{(j)})\}_{j=1}^{n_r}$ – выборка настоящих объектов (из $\mathbb{P}_r$), где $x_r^{(j)} \sim P_r(x|y_r^{(j)})$, т.е. объект из целевого распределения при условии $y_r^{(j)}$.

3. $\widehat{\text{PRD-AUC}}(X_g, X_r)$ – оценка PRD-AUC$(\mathbb{P}_g, \mathbb{P}_r)$ (результат применения алгоритма из [9]).

Тогда оценка PRD-AUC$_{\mathcal{B}}(\mathbb{P}_g, \mathbb{P}_r)$:

$$\widehat{\text{PRD-AUC}_{\mathcal{B}}}(\mathbb{P}_g, \mathbb{P}_r) = \\ = \frac{1}{q}\sum_{k=1}^{q} \widehat{\text{PRD-AUC}}(\{x_g^{(i)} | i : y_g^{(i)} \in B_k\}, \quad (8) \\ \{x_r^{(j)} | j : y_r^{(j)} \in B_k\}).$$

[5] Далее в тексте эта метрика для краткости будет называться “условной средней PRD-AUC”, когда будет ясно, о каком разбиении множества условий идет речь.

Таблица 1. Сравнение простейших методов со спектральной нормализацией. В каждом из столбцов записаны значения условной средней PRD-AUC по описанному ранее разбиению множества условий. “E” означает, что значения PRD-AUC вычислялись по эмбеддингам из сверточной сети, “P” – что по вектору из физических статистик. “max” перед названием метрики означает ее максимальное значение за все эпохи обучения. Каждое значение в таблице имеет формат “{среднее значение} ± {стандартное отклонение}”, где статистики для каждого метода вычислены по 5 независимым запускам процедуры обучения. В скобках после названий методов указаны коэффициенты скорости обучения (learning rate) для генератора и дискриминатора соответственно, их значения были выбраны как лучшие по совокупности рассматриваемых метрик в результате перебора нескольких вариантов. “SN” – сокращение для Spectral Normalization. Эти обозначения будут использоваться и далее

	max bins-E	max bins-P
no normalization (1e-3, 1e-5)	0.72 ± 0.09	0.87 ± 0.02
weight clipping, $c = 0.1$ (1e-3, 1e-5)	0.72 ± 0.08	0.87 ± 0.02
vanilla SN (1e-3, 1e-5)	0.77 ± 0.04	0.87 ± 0.01

Именно по формуле (8) будет вычисляться значение условной средней PRD-AUC в дальнейших экспериментах.

Для рассматриваемой задачи разбиение множества условий было выбрано по координатам

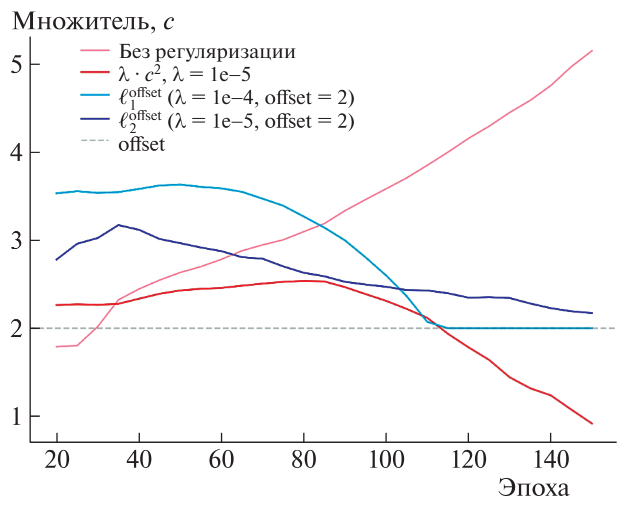

Рис. 3. Изменение множителя в ходе обучения WGAN при умножении выхода дискриминатора на обучаемый множитель после применения спектральной нормализации для разных вариантов регуляризации множителя. Стартовое значение множителя равно 1 или, если указано, offset. Значения коэффициентов скорости обучения для всех методов одинаковы – (1e-3, 1e-4). Можно видеть, что при ℓ_p^{offset}-регуляризации множитель сходится к значению offset.

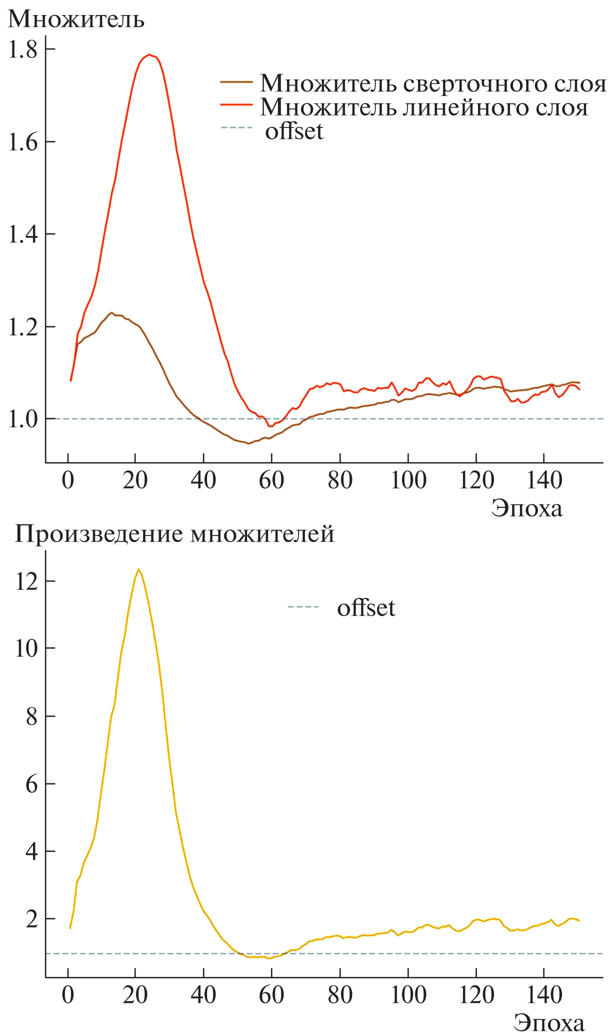

Рис. 4. Изменение множителей при умножении выходов нормируемых слоев на отдельные обучаемые множители с ℓ_2^{offset}-регуляризацией. Сверху – графики изменения отдельных множителей, снизу – их произведения. Всего обучаемых множителей 7, но ввиду архитектуры сети дискриминатора множители для слоев одного типа (сверточные или линейные) практически совпадают, поэтому приведены значения лишь двух множителей. Коэффициенты скорости обучения – (1e-3, 1e-4).

входа частицы (2 числа). А именно, был взят минимальный прямоугольник, содержащий все значения координат из обучающей выборки. Далее он был разбит равномерно двумя отрезками по каждой координате. Таким образом, получилось его разбиение на 9 прямоугольников, соответствующих 9 подмножествам условий.

Метрика PRD-AUC и ее условная вариация далее вычисляются не по объектам выборок напрямую (матрица 30 × 30), а по следующим эмбеддингам:

1. результат применения сверточной сети, некоторым образом обученной на аналогичных данных, к матрице (размерность – 64);

2. вектор, состоящий из нескольких экспертно заданных физических статистик, вычисленных по матрице (размерность – 4).

5. РЕЗУЛЬТАТЫ

5.1. Оригинальная спектральная нормализация

Были проведены эксперименты для сравнения спектральной нормализации с обучением вовсе без нормализации дискриминатора и с использованием наивного усечения весов (weight clipping [4]: после каждой итерации обучения все веса дискриминатора приводятся к диапазону $[-c, c]$ для некоторого $c \in \mathbb{R}_{\geq 0}$).

В табл. 1 можно видеть, что использование спектральной нормализации улучшает результат, причем как по средним значениям метрик, так и по их дисперсиям, что говорит о более стабильном процессе обучении. Визуально графики метрик подтверждают это.

Было замечено, что значения метрики PRD-AUC (без учета условий) для всех методов примерно одинаковы. Вероятно, это вызвано тем, что значения координаты входа частицы для большей части объектов из используемого набора данных сосредоточены в одной области (около центра детектора). Из-за этого PRD-AUC почти не учитывает качество генерации при координате, отдаленной от этой области, тогда как оно при этом существенно ухудшается (ввиду меньшего количества обучающих примеров). В отличие от оригинальной PRD-AUC, условная средняя PRD-AUC учитывает разные области координат входа с равным весом, из-за чего лучше отражает качество генерации для разных значений условий и позволяет различать модели по качеству.

5.2. Адаптивная нормализация с обучаемыми множителями

На рис. 3 можно видеть ожидаемое поведение обучаемого множителя, на который умножается выход дискриминатора, при различных предложенных подходах к его регуляризации. При ℓ_1^{offset}- и ℓ_2^{offset}-регуляризации наблюдается желаемое поведение: множитель сходится к значению offset. Также при такой регуляризации часто имеет место почти монотонный рост множителя, а затем его почти монотонное падение до значения offset. Как было замечено в ходе экспериментов, подобное поведение вызвано тем, что в начале обучения абсолютные значения функции потерь WGAN значительно превосходят значения регуляризационного слагаемого, и, следовательно,

Таблица 2. Сравнение результатов предложенных методов с оригинальной спектральной нормализацией и ABCAS

	max bins-E	max bins-P
vanilla SN (1e-3, 1e-5)	0.766 ± 0.04	0.873 ± 0.01
SN * 4 (1e-3, 1e-5)	0.748 ± 0.01	0.870 ± 0.00
SN * coef, no reg (1e-3, 1e-4)	0.714 ± 0.05	0.855 ± 0.02
SN * coef, ℓ_1^{offset}-reg, λ = 1e-4, offset=2 (1e-3, 1e-5)	0.771 ± 0.02	0.872 ± 0.01
SN * coef, ℓ_2^{offset}-reg, λ = 1e-3, offset=2 (1e-3, 1e-5)	0.775 ± 0.02	0.878 ± 0.01
SN * coef, ℓ_2^{offset}-reg, λ = 1e-3, offset=0.5 (1e-3, 1e-5)	0.758 ± 0.02	0.869 ± 0.01
SN * coefs, ℓ_2^{offset}-reg, λ = 1e-5, offset=0.5 (1e-3, 1e-5)	0.782 ± 0.02	0.875 ± 0.01
ABCAS, $m = 0.9^r$, $\beta = 6$ (1e-3, 1e-5)	0.760 ± 0.03	0.865 ± 0.00

“SN * 4” – умножение выхода дискриминатора на фиксированную константу (4).

“SN * coef, no reg” – умножение выхода дискриминатора на обучаемый множитель без регуляризации.

“SN * coef, ℓ_1^{offset}-reg” – с ℓ_1^{offset}-регуляризацией.

“SN * coef, ℓ_2^{offset}-reg” – с ℓ_2^{offset}-регуляризацией.

“SN * coefs, ℓ_2^{offset}-reg” – умножение выходов нормируемых слоев дискриминатора на отдельные обучаемые множители с ℓ_2^{offset}-регуляризацией.

β – гиперпараметр в методе ABCAS: чем его значение больше, тем слабее ограничение, накладываемое на дискриминатор.

Таблица 3. Сравнение результатов предложенных методов с оригинальной спектральной нормализацией и ABCAS при использовании меньшей сети дискриминатора. “E” без “bins” означает метрику PRD-AUC (без учета условий), вычисленную по эмбеддингам сверточной сети. Для большего дискриминатора ее значения не приводились, т.к. они были примерно равны для всех методов

	max E	max bins-E	max bins-P
no normalization (1e-3, 1e-5)	0.940 ± 0.01	0.597 ± 0.05	0.826 ± 0.01
vanilla SN (1e-3, 1e-4)	0.962 ± 0.01	0.660 ± 0.01	0.842 ± 0.00
SN * 2 (1e-4, 1e-5)	0.976 ± 0.00	0.753 ± 0.03	0.874 ± 0.01
SN * coef, no reg (1e-3, 1e-4)	0.962 ± 0.00	0.667 ± 0.03	0.852 ± 0.01
SN * coef, ℓ_2^{offset}-reg, λ = 1e-4, offset=1 (1e-3, 1e-5)	0.981 ± 0.00	0.758 ± 0.02	0.870 ± 0.01
SN * coefs, ℓ_2^{offset}-reg, λ = 1e-5, offset=1 (1e-3, 1e-5)	0.920 ± 0.04	0.563 ± 0.12	0.822 ± 0.02
ABCAS, $m = 0.9^r$, $\beta = 4$ (1e-3, 1e-4)	0.965 ± 0.01	0.647 ± 0.04	0.850 ± 0.01

регуляризация почти не влияет на процесс оптимизации. По ходу обучения функция потерь приближается к нулю и принимает значения все ближе к регуляризационному слагаемому, из-за чего регуляризация начинает влиять на оптимизацию все сильнее.

При умножении выходов слоев дискриминатора на разные множители с ℓ_2^{offset}-регуляризацией произведение множителей зачастую ведет себя похоже на множитель при умножении лишь выхода сети с $\ell_1^{\text{offset}}/\ell_2^{\text{offset}}$-регуляризацией, как показано на рис. 4. Однако принимаемые произведением множителей значения существенно больше, чем у одного множителя.

Результаты всех рассмотренных методов представлены в табл. 2.

Можно видеть, что регуляризация множителя существенно улучшает результат: вариант с умножением выхода дискриминатора на множитель без регуляризации оказывается наихудшим. Многие методы показывают результаты, близкие к спектральной нормализации. Заметно превосходит ее лишь умножение выходов нормируемых слоев дискриминатора на отдельные обучаемые множители с ℓ_2^{offset}-регуляризацией. Помимо большего среднего, наблюдается уменьшение дисперсии в сравнении с оригинальным алгоритмом, что позволяет говорить о большей стабильности обучения. При этом значимый прирост на-

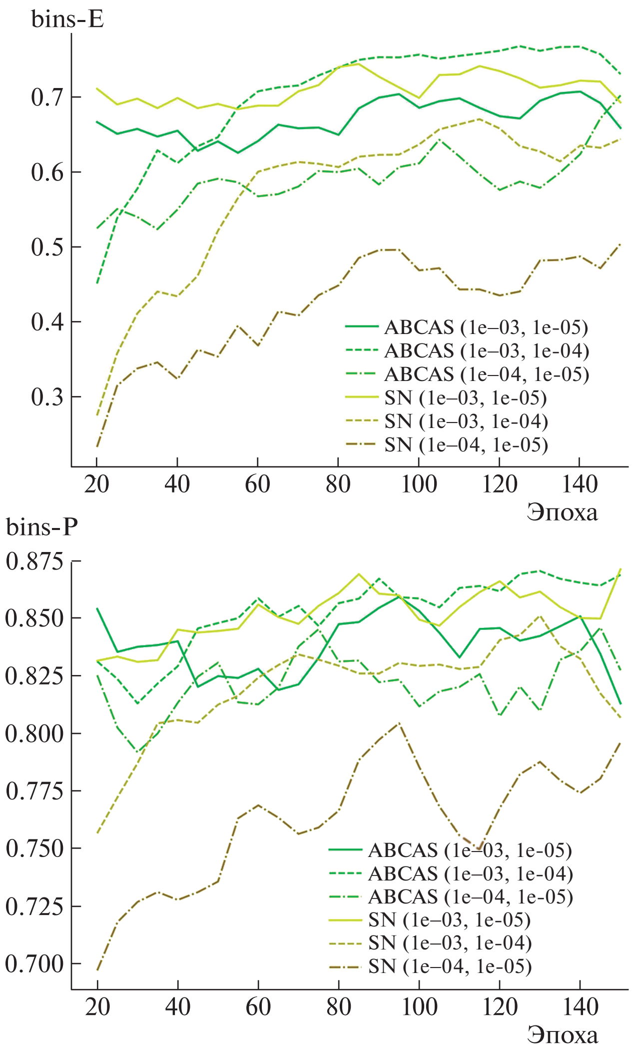

Рис. 5. Значения условной средней PRD-AUC для спектральной нормализации (SN) и ABCAS при разных значениях коэффициентов скорости обучения. Изображено скользящие среднее по трем точкам, чтобы сгладить графики, т.к. значения метрик вычислялись раз в 5 эпох. Для каждого метода и значения коэффициентов был взят лучший результат из нескольких запусков процедуры обучения. Можно видеть, что при использовании ABCAS для неоптимальных значений коэффициентов скорости обучения падение метрик гораздо менее значительно в сравнении со спектральной нормализацией.

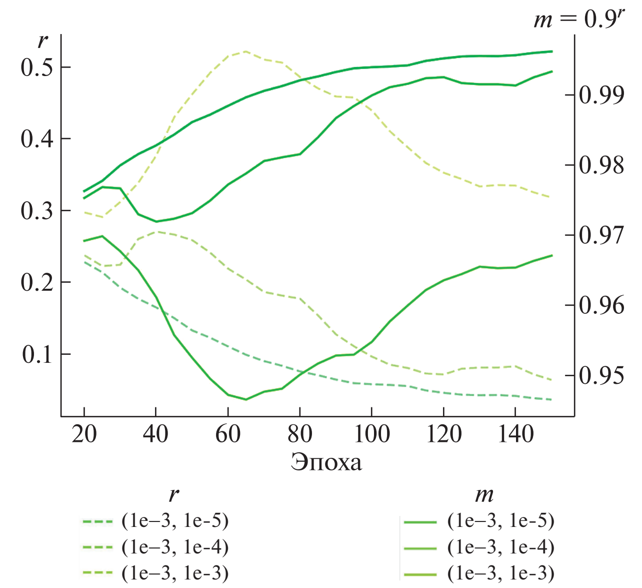

Рис. 6. Изменение r по ходу обучения при применении ABCAS для разных наборов коэффициентов скорости обучения. Можно видеть, что при неоптимальных значениях коэффициентов скорости обучения метод сильнее ограничивает дискриминатор на первых эпохах в ответ на увеличение оценки расстояния между генерируемым и истинным распределениями.

блюдается только по максимуму условной средней PRD-AUC по эмбеддингам из сверточной сети. Однако, предположительно, остается простор для подбора более оптимальных гиперпараметров, т.к. их значения оказывают сильное влияние на результат. Модификации с умножением лишь выхода дискриминатора на обучаемый множитель при некоторых наборах гиперпараметров тоже оказываются лучше оригинального метода по этой метрике.

При использовании меньшего дискриминатора разница между методами становится более значимой, как можно видеть в табл. 3. Несмотря на то что множество перебираемых значений гиперпараметров для предложенных методов было сужено в сравнении с экспериментами для исходного дискриминатора, некоторые из методов показывают улучшение результата относительно спектральной нормализации. Лучшим оказывается умножение выхода дискриминатора на обучаемый множитель с ℓ_2^{offset}-регуляризацией, значительно превосходя спектральную нормализацию по всем метрикам, как по средним значениям, так и по дисперсии. В данном случае, в отличие от большей сети дискриминатора, умножение выходов нормируемых слоев на отдельные множители оказывается хуже оригинального метода. Однако, предположительно, это связано с неоптимальными гиперпараметрами.

5.3. Выявленное свойство ABCAS

При подобранных значениях коэффициентов скорости обучения результаты ABCAS оказываются в среднем близки к результатам спектральной нормализации. Однако при неоптимальных значениях коэффициентов, когда результаты спектральной нормализации существенно ухудшаются в сравнении с лучшими, значения метрик при применении ABCAS значительно превосходят оригинальный алгоритм. Помимо этого, их графики гораздо стабильнее, что можно видеть на рис. 5. Причем почти одинаковые итоговые результаты наблюдаются при изменении коэффициента скорости обучения дискриминатора на порядки при неизменном коэффициенте для генератора. Подобное изменение может существенно влиять на обучение GAN, что и наблюдается для остальных методов, но при использовании ABCAS это влияние гораздо менее выражено.

Такая стабильность ABCAS, вероятно, закономерна, т.к. при неоптимальных значениях коэффициентов скорости обучения можно видеть отличительное поведение значения r. А именно, оно увеличивается на протяжении первых эпох (что соответствует увеличивающейся оценке расстояния между распределениями и усиливающемуся ограничению на дискриминатор), а затем уменьшается, как показано на рис. 6. Предположительно, бóльшая стабильность обучения достигается из-за большего ограничения дискриминатора на первых эпохах.

Подобная особенность ABCAS потенциально полезна при подборе гиперпараметров модели, т.к. она может избавить от необходимости тщательного подбора коэффициентов скорости обучения, которые имеют сильное влияние на результат обучения GAN.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Были представлены модификации алгоритма спектральной нормализации, основанные на дополнительном умножении выходов слоев сети дискриминатора на обучаемые множители с их регуляризацией через функцию потерь. Для оценки качества предложенных методов в рамках задачи условной генерации было введено обобщение метрики PRD-AUC с учетом условий генерации – условная средняя PRD-AUC. На примере двух архитектур дискриминатора с помощью некоторых из предложенных методов для рассматриваемой задачи генерации результатов физического эксперимента удалось стабильно превзойти оригинальный алгоритм и ABCAS по условной средней PRD-AUC.

Также в ходе экспериментов для рассматриваемой задачи была выявлена устойчивость ABCAS к изменению коэффициентов скорости обучения относительно спектральной нормализации и предложенных методов. В случае сохранения этого свойства и в других задачах использование ABCAS может позволить сократить перебор гиперпараметров.

Приложения

А. АРХИТЕКТУРА ИСПОЛЬЗУЕМЫХ МОДЕЛЕЙ

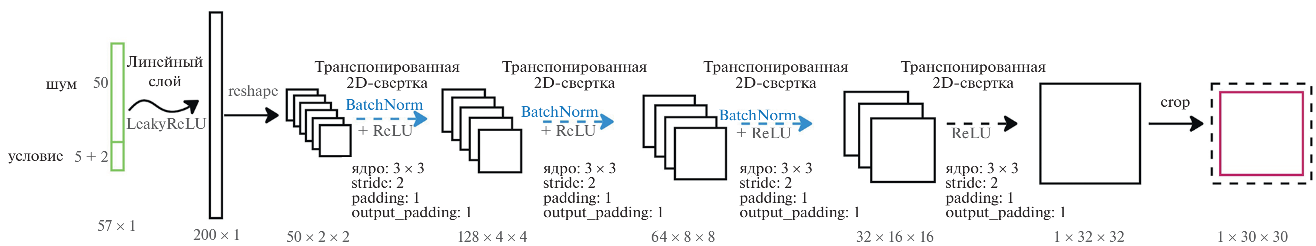

Рис. 7. Архитектура используемого генератора.

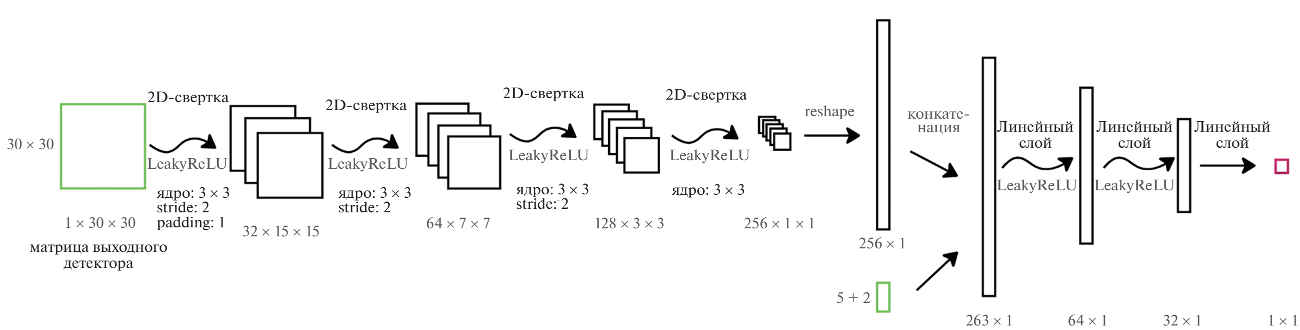

Рис. 8. Архитектура используемого дискриминатора.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ и с использованием суперкомпьютерного комплекса НИУ ВШЭ [10], за предоставление доступа к которому авторы выражают благодарность.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Agostinelli S. et al.* "Geant4 – a simulation toolkit". B: Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 506.3. 2003. P. 250–303. https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8
2. *Chekalina V. et al.* "Generative Models for Fast Calorimeter Simulation: the LHCb case". B: EPJ Web of Conferences 214. 2019. P. 02034. https://doi.org/10.1051/epjconf/201921402034
3. *Rogachev A., Ratnikov F.* "GAN with an Auxiliary Regressor for the Fast Simulation of the Electromagnetic Calorimeter Response". B: Journal of Physics: Conference Series 2438.1. 2023. P. 012086. https://doi.org/10.1088/1742-6596/2438/1/012086
4. *Arjovsky M., Chintala S., Bottou L.* "Wasserstein Generative Adversarial Networks". In v. 70. ICML. 2017. P. 214–223. https://doi.org/10.5555/3305381.3305404
5. *Takeru Miyato и др.* "Spectral Normalization for Generative Adversarial Networks". B: International Conference on Learning Representations. 2018.
6. *Goodfellow I.J. et al.* "Generative Adversarial Nets". In v. 2. Advances in NIPS. 2014. P. 2672–2680. https://doi.org/10.5555/2969033.2969125
7. *Villani C.* Optimal Transport: Old and New. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften. Springer Berlin Heidelberg, 2016. isbn: 9783662501801.
8. *Shota Hirose и др.* "ABCAS: Adaptive Bound Control of spectral norm as Automatic Stabilizer". B: IEEE International Conference on Consumer Electronics. 2023. P. 1–5. https://doi.org/10.1109/ICCE56470.2023.10043368
9. *Mehdi S.M. Sajjadi et al.* "Assessing Generative Models via Precision and Recall". B: NIPS'18. 2018. P. 5234–5243. https://doi.org/10.5555/3327345.3327429
10. *Kostenetskiy P.S., Chulkevich R.A., Kozyrev V.I.* "HPC Resources of the Higher School of Economics". B: Journal of Physics: Conference Series 1740.1 (янв. 2021. P. 012050. https://doi.org/10.1088/1742-6596/1740/1/012050

ADAPTIVE SPECTRAL NORMALIZATION FOR GENERATIVE MODELS

E. A. Egorov[a] and A. I. Rogachev[a]

[a] *HSE University, Moscow, Russia*

Presented by Academician of the RAS A.I. Avetisyan

When using Wasserstein GAN loss function for training generative adversarial networks (GAN), it is theoretically necessary to limit the discriminators' expressive power (so called discriminator normalization). Such limitation increases the stability of GAN training at the expense of a less expressive final model. Spectral normalization is one of the normalization algorithms that involves applying a fixed operation independently to each discriminator layer. However, the optimal strength of the discriminator limitation varies for different tasks, which requires a parameterized normalization method. This paper proposes modifications to the spectral normalization algorithm that allow changing the strength of the discriminator limitation. In addition to parameterization, the proposed methods can change the degree of limitation during training, unlike the original algorithm. The quality of the obtained models is explored for each of the proposed methods.

Keywords: generative adversarial network, Wasserstein GAN, spectral normalization, high energy physics