薰风读论文: Deep Residual Learning 手把手带你理解 ResNet



薰风初入弦 🛂

上海交通大学 计算机科学与技术博士在读

已关注

56 人赞同了该文章

这是薰风读论文的第2篇投稿,除了论文本身更多的是对文章思路的梳理和个人的思考。欢迎讨论~也很好奇你是喜欢只讲论文,还是喜欢多写讨论?

一、引言: 为什么会有ResNet? Why ResNet?

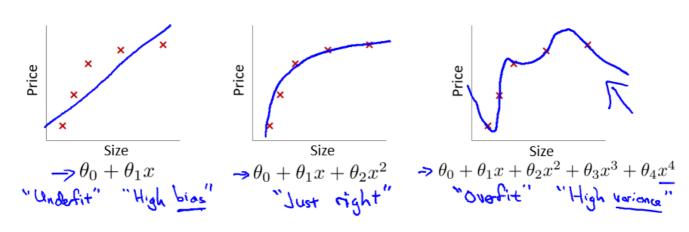
神经网络叠的越深,则学习出的效果就一定会越好吗?

答案无疑是否定的,人们发现当模型层数增加到某种程度,模型的效果将会不升反降。也就是说,深度模型发生了退化 (degradation) 情况。

那么,为什么会出现这种情况?

1. 过拟合? Overfitting?

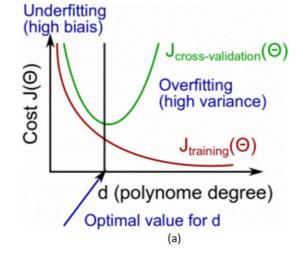
首先印入脑海的就是Andrew Ng机器学习公开课[1]的过拟合问题



Andrew Ng的课件截图

在这个多项式回归问题中,左边的模型是欠拟合 (under fit) 的此时有很高的偏差 (high bias) ,中间的拟合比较成功,而右边则是典型的过拟合 (overfit) ,此时由于**模型过于复杂**,导致了高方差 (high variance) 。

然而,很明显当前CNN面临的效果退化不是因为过拟合,因为过拟合的现象是"高方差,低偏差",即测试误差大而训练误差小。但实际上,深层CNN的训练误差和测试误差都很大。



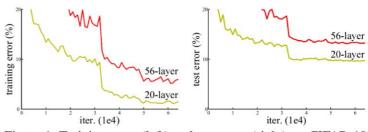


Figure 1. Training error (left) and test error (right) on CIFAR-10 with 20-layer and 56-layer "plain" networks. The deeper network has higher training error, and thus test error. Similar phenomena on ImageNet is presented in Fig. 4.

(b)

(a) 欠拟合与过拟合 (b) 模型退化

2. 梯度爆炸/消失? Gradient Exploding/Vanishing?

除此之外,最受人认可的原因就是"梯度爆炸/消失(弥散)"了。为了理解什么是梯度弥散,首先回顾一下反向传播的知识。

假设我们现在需要计算一个函数 $f(x,y,z)=(x+y)\times z$, x=-2 , y=5 , z=-4 在时的梯度,那么首先可以做出如下所示的计算图。

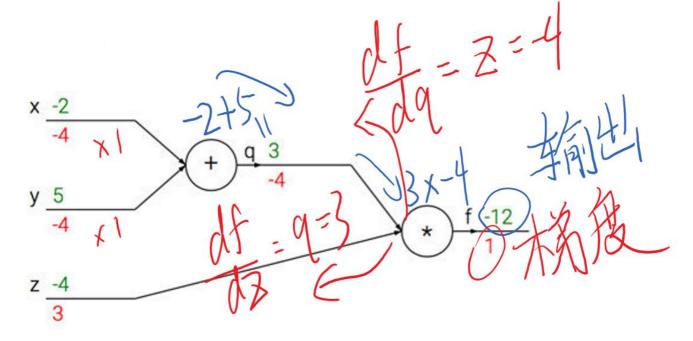
将 x=-2,y=5,z=-4 带入,其中,令 x+y=q,一步步计算,很容易就能得出 f(-2,5,-4)=-12 。

这就是前向传播(计算图上部分绿色打印字体与蓝色手写字体),即:

$$\begin{cases} f = q \cdot z \\ q = x + y \end{cases}$$

前向传播是从输入一步步向前计算输出,而反向传播则是从输出反向一点点推出输入的梯度(计算图下红色的部分)。

$$\begin{cases} \frac{df}{dq} = z \\ \frac{df}{dz} = q \\ \frac{df}{dx} = \frac{df}{dq} \cdot \frac{dq}{dx}, \frac{df}{dy} = \frac{df}{dq} \cdot \frac{dq}{dy} \end{cases}$$



原谅我字丑.....

注: 这里的反向传播假设输出端接受之前回传的梯度为1 (也可以是输出对输出求导=1)

观察上述反向传播,不难发现,在输出端梯度的模值,经过回传扩大了3~4倍。

这是由于反向传播结果的**数值大小**不止取决于求导的式子,很大程度上也取决于**输入的模值。**当计算图每次输入的模值都大于1,那么经过很多层回传,梯度将不可避免地呈几何倍数增长(每次都变成3~4倍,重复上万次,想象一下310000有多大……),直到Nan。这就是梯度爆炸现象。

当然反过来,如果我们每个阶段输入的模恒小于1,那么梯度也将不可避免地呈几何倍数下降(比如每次都变成原来的三分之一,重复一万次就是3-10000),直到0。这就是梯度消失现象。值得一提的是,由于人为的参数设置,梯度更倾向于消失而不是爆炸。

由于至今神经网络都以反向传播为参数更新的基础,所以梯度消失问题听起来很有道理。然而,事实也并非如此,至少不止如此。

我们现在无论用Pytorch还是Tensorflow,都会自然而然地加上Bacth Normalization(简称BN), **而BN的作用本质上也是控制每层输入的模值**,因此梯度的爆炸/消失现象理应在很早就被解决了(至少解决了大半)。

不是过拟合,也不是梯度消失,这就很尴尬了……CNN没有遇到我们熟知的两个老大难问题,却还是随着模型的加深而导致效果退化。无需任何数学论证,我们都会觉得这不符合常理。等等,不符合常理……

3. 为什么模型退化不符合常理?

按理说,当我们堆叠一个模型时,理所当然的会认为效果会越堆越好。因为,假设一个比较浅的网络已经可以达到不错的效果,**那么即使之后堆上去的网络什么也不做,模型的效果也不会变差**。

然而事实上,这却是问题所在。"什么都不做"恰好是当前神经网络最难做到的东西之一。

MobileNet V2的论文[2]也提到过类似的现象,由于非线性激活函数Relu的存在,每次输入到输出的过程都几乎是不可逆的(信息损失)。我们很难从输出反推回完整的输入。

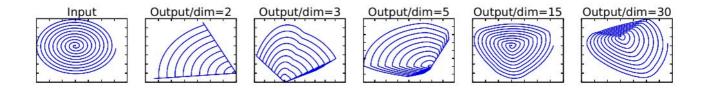


Figure 1: Examples of ReLU transformations of low-dimensional manifolds embedded in higher-dimensional spaces. In these examples the initial spiral is embedded into an n-dimensional space using random matrix T followed by ReLU, and then projected back to the 2D space using T^{-1} . In examples above n=2,3 result in information loss where certain points of the manifold collapse into each other, while for n=15 to 30 the transformation is highly non-convex.

Mobilenet v2是考虑的结果是去掉低维的Relu以保留信息

也许赋予神经网络无限可能性的"非线性"让神经网络模型走得太远,却也让它忘记了为什么出发(想想还挺哲学)。这也使得特征随着层层前向传播得到完整保留(什么也不做)的可能性都微乎 其微。

用学术点的话说,这种神经网络丢失的"不忘初心"/"什么都不做"的品质叫做**恒等映射** (identity mapping)。

因此,可以认为Residual Learning的初衷,其实是让模型的内部结构至少有恒等映射的能力。以保证在堆叠网络的过程中,网络至少不会因为继续堆叠而产生退化!

二、深度残差学习 Deep Residual Learning

1. 残差学习 Residual Learning

前面分析得出,如果深层网络后面的层都是是**恒等映射**,那么模型就可以转化为一个浅层网络。那现在的问题就是**如何得到恒等映射**了。

事实上,已有的神经网络很难拟合潜在的恒等映射函数H(x) = x。

但如果把网络设计为H(x) = F(x) + x, 即直接把恒等映射作为网络的一部分。就可以把问题转化为学习一个残差函数F(x) = H(x) - x.

只要F(x)=0, 就构成了一个恒等映射H(x)=x。 而且, 拟合残差至少比拟合恒等映射容易得多。

不是寻找输入到输出的映射 而是寻找到"输出减输入"

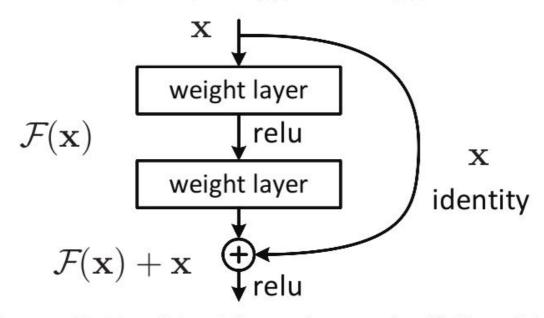


Figure 2. Residual learning: a building block.

Residual Block的结构

图中右侧的曲线叫做跳接(shortcut connection),通过跳接在**激活函数前**,将上一层(或几层)**之前的输出与本层**计算的**输出相加**,将求和的结果输入到激活函数中做为本层的输出。

用数学语言描述,假设Residual Block的输入为 x ,则输出 y 等于:

$$\mathbf{y} = \mathcal{F}(x, \{W_i\}) + x$$

其中 $\mathcal{F}(x,\{W_i\})$ 是我们学习的目标,即输出输入的残差 y-x 。以上图为例,残差部分是中间有一个Relu激活的双层权重,即:

$$\mathcal{F} = W_2 \sigma(W_1 x)$$

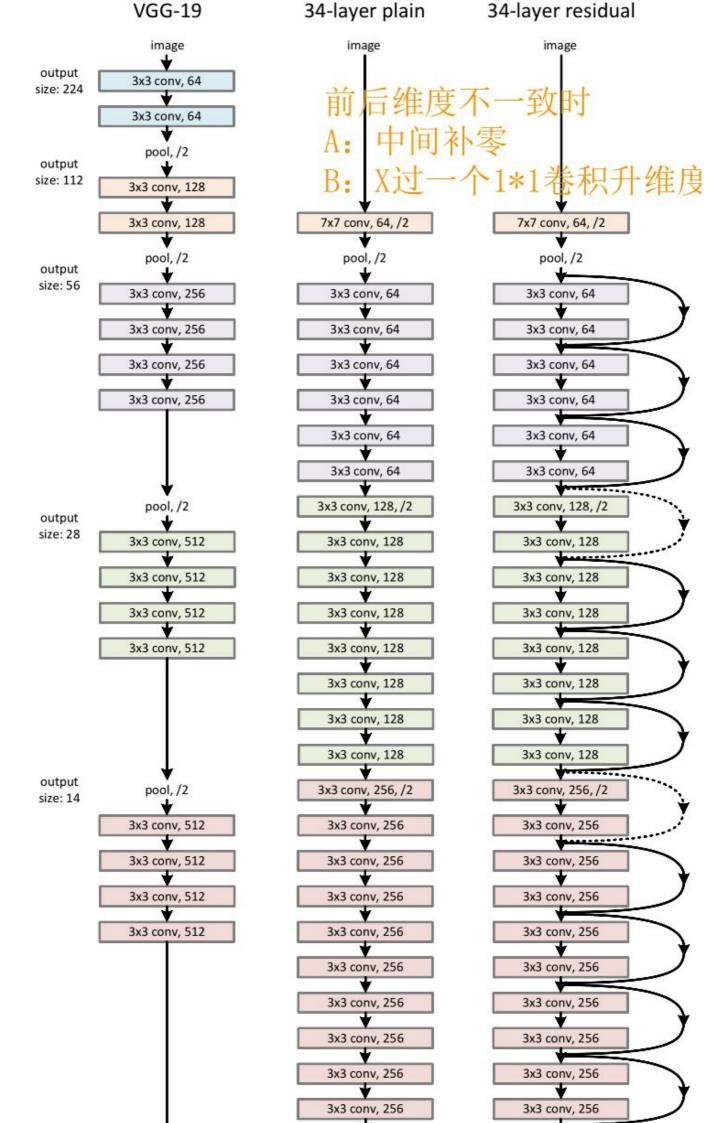
其中 σ 指代Relu, 而 W_1, W_2 指代两层权重。

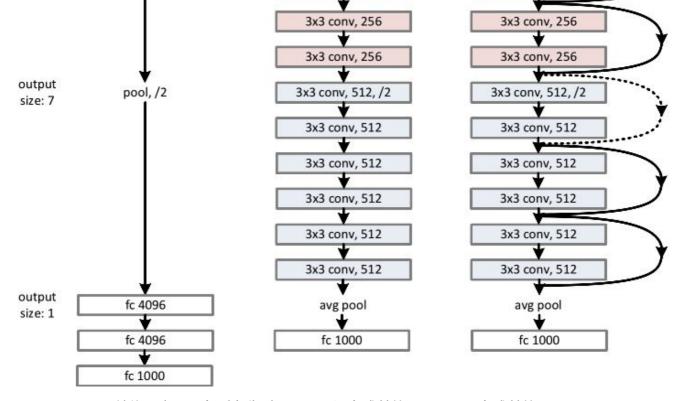
顺带一提,这里一个Block中必须至少含有两个层,否则就会出现很滑稽的情况:

$$\mathbf{y} = \mathcal{F}(x, \{W_i\}) + x = (W_1 x) + x = (W_1 + 1)x$$

显然这样加了和没加差不多......

2.网络结构与维度问题





ResNet结构示意图(左到右分别是VGG,没有残差的PlainNet,有残差的ResNet)

论文中原始的ResNet34与VGG的结构如上图所示,可以看到即使是当年号称"Very Deep"的VGG,和最基础的Resnet在深度上相比都是个弟弟。

可能有好奇心宝宝发现了,跳接的曲线中大部分是实现,但也有少部分虚线。这些虚线的代表这些 Block前后的维度不一致,因为去掉残差结构的Plain网络还是参照了VGG经典的设计思路:每隔x 层,空间上/2 (下采样) 但深度翻倍。

也就是说,**维度不一致体现在两个层面**:

空间上不一致 **深度上**不一致

空间上不一致很简单,只需要在跳接的部分给输入x加上一个线性映射 W_s ,即:

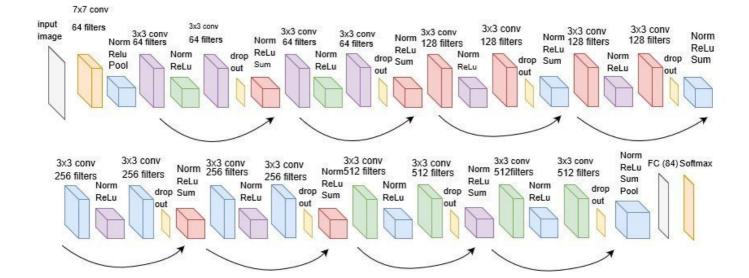
$$\mathbf{y} = \mathcal{F}(\mathbf{x}, \{W_i\}) + \mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y} = \mathcal{F}(\mathbf{x}, \{W_i\}) + W_s \mathbf{x}$$

而对于**深度上**的不一致,则有两种解决办法,一种是在跳接过程中加一个1*1的卷积层进行升维,另一种则是直接简单粗暴地补零。事实证明两种方法都行得通。

注:深度上和空间上维度的不一致是分开处理的,但很多人将两者混为一谈(包括目前某乎一些高赞文章),这导致了一些人在模型的实现上感到困惑(比如当年的我)。

3. torchvision中的官方实现

事实上论文中的ResNet并不是最常用的,我们可以在Torchvision的模型库中找到一些很不错的例子,这里拿Resnet18为例:



运行代码:

```
import torchvision
model = torchvision.models.resnet18(pretrained=False) #我们不下载预训练权重
print(model)
```

得到输出:

```
ResNet(
  (conv1): Conv2d(3, 64, kernel_size=(7, 7), stride=(2, 2), padding=(3, 3), bias=False
  (bn1): BatchNorm2d(64, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stats=Tru
  (relu): ReLU(inplace)
  (maxpool): MaxPool2d(kernel_size=3, stride=2, padding=1, dilation=1, ceil_mode=False
  (layer1): Sequential(
    (0): BasicBlock(
      (conv1): Conv2d(64, 64, kernel size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1), bias=
      (bn1): BatchNorm2d(64, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stats
      (relu): ReLU(inplace)
      (conv2): Conv2d(64, 64, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1), bias=
      (bn2): BatchNorm2d(64, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stats
    )
    (1): BasicBlock(
      (conv1): Conv2d(64, 64, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1), bias=
      (bn1): BatchNorm2d(64, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stats
      (relu): ReLU(inplace)
      (conv2): Conv2d(64, 64, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1), bias=
      (bn2): BatchNorm2d(64, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stats
    )
  (layer2): Sequential(
    (0): BasicBlock(
      (conv1): Conv2d(64, 128, kernel_size=(3, 3), stride=(2, 2), padding=(1, 1), bias
      (bn1): BatchNorm2d(128, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stat
      (relu): ReLU(inplace)
```

```
(conv2): Conv2d(128, 128, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1), bia
    (bn2): BatchNorm2d(128, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stat
    (downsample): Sequential(
      (0): Conv2d(64, 128, kernel_size=(1, 1), stride=(2, 2), bias=False)
      (1): BatchNorm2d(128, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stat
    )
  )
  (1): BasicBlock(
    (conv1): Conv2d(128, 128, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1), bia
    (bn1): BatchNorm2d(128, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stat
    (relu): ReLU(inplace)
    (conv2): Conv2d(128, 128, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1), bia
    (bn2): BatchNorm2d(128, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stat
 )
)
(layer3): Sequential(
  (0): BasicBlock(
    (conv1): Conv2d(128, 256, kernel_size=(3, 3), stride=(2, 2), padding=(1, 1), bia
    (bn1): BatchNorm2d(256, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stat
    (relu): ReLU(inplace)
    (conv2): Conv2d(256, 256, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1), bia
    (bn2): BatchNorm2d(256, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stat
    (downsample): Sequential(
      (0): Conv2d(128, 256, kernel_size=(1, 1), stride=(2, 2), bias=False)
      (1): BatchNorm2d(256, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stat
   )
  )
  (1): BasicBlock(
    (conv1): Conv2d(256, 256, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1), bia
    (bn1): BatchNorm2d(256, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stat
    (relu): ReLU(inplace)
    (conv2): Conv2d(256, 256, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1), bia
    (bn2): BatchNorm2d(256, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stat
  )
)
(layer4): Sequential(
  (0): BasicBlock(
    (conv1): Conv2d(256, 512, kernel_size=(3, 3), stride=(2, 2), padding=(1, 1), bia
    (bn1): BatchNorm2d(512, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stat
    (relu): ReLU(inplace)
    (conv2): Conv2d(512, 512, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1), bia
    (bn2): BatchNorm2d(512, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stat
    (downsample): Sequential(
      (0): Conv2d(256, 512, kernel_size=(1, 1), stride=(2, 2), bias=False)
      (1): BatchNorm2d(512, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stat
   )
  (1): BasicBlock(
```

```
(conv1): Conv2d(512, 512, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1), bia
    (bn1): BatchNorm2d(512, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stat
        (relu): ReLU(inplace)
        (conv2): Conv2d(512, 512, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1), bia
        (bn2): BatchNorm2d(512, eps=1e-05, momentum=0.1, affine=True, track_running_stat
    )
    )
    (avgpool): AvgPool2d(kernel_size=7, stride=1, padding=0)
    (fc): Linear(in_features=512, out_features=1000, bias=True)
)
```

薰风说 Thinkings

上述的内容是我以自己的角度思考作者提出ResNet的心路历程,我比作者蔡很多,所以难免出现思考不全的地方。

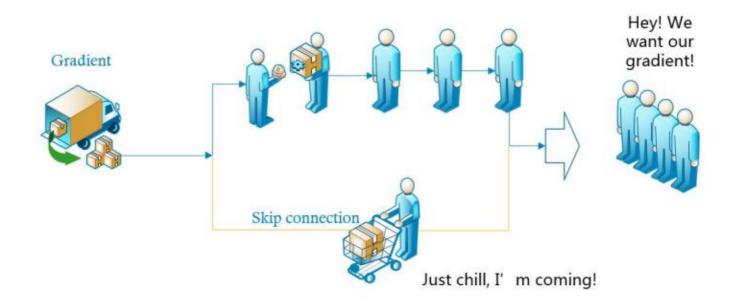
ResNet是如此简洁高效,以至于模型提出后还有无数论文讨论 "ResNet到底解决了什么问题(The Shattered Gradients Problem: If resnets are the answer, then what is the question?)" [4]

论文[4]认为,即使BN过后梯度的模稳定在了正常范围内,但**梯度的相关性实际上是随着层数增加持续衰减的**。而经过证明,ResNet可以有效减少这种相关性的衰减。

对于 L 层的网络来说,没有残差表示的Plain Net梯度相关性的衰减在 $\frac{1}{2^L}$,而ResNet的衰减 却只有 $\frac{1}{\sqrt{L}}$ 。这也验证了ResNet论文本身的观点,网络训练难度随着层数增长的速度不是线性,而至少是多项式等级的增长(如果该论文属实,则可能是指数级增长的)

而对于"梯度弥散"观点来说,在输出引入一个输入x的恒等映射,则梯度也会对应地引入一个常数1,这样的网络的确不容易出现梯度值异常,在某种意义上,起到了稳定梯度的作用。

除此之外, shortcut类似的方法也并不是第一次提出,之前就有"Highway Networks"。可以只管理解为,以往参数要得到梯度,需要快递员将梯度一层一层中转到参数手中(就像我取个快递,都显示要从"上海市"发往"闵行分拣中心",闵大荒日常被踢出上海籍)。而跳接实际上给梯度开了一条"高速公路"(取快递可以直接用无人机空投到我手里了),效率自然大幅提高,不过这只是个比较想当然的理由。



上面的理解很多论文都讲过,但我个人最喜欢下面两个理解。

第一个已经由Feature Pyramid Network[5]提出了,那就是跳连接相加可以实现不同分辨率特征的组合,因为浅层容易有高分辨率但是低级语义的特征,而深层的特征有高级语义,但分辨率就很低了。

第二个理解则是说,引入跳接实际上让模型自身**有了更加"灵活"的结构**,即在训练过程本身,模型可以选择在每一个部分是"更多进行卷积与非线性变换"还是"更多倾向于什么都不做",抑或是将两者结合。模型在训练便可以自适应本身的结构,这听起来是多么酷的一件事啊!

有的人也许会纳闷,我们已经知道一个模型的来龙去脉了,那么在一个客观上已经十分优秀的模型,强加那么多主观的个人判断有意思吗?

然而笔者还是相信,更多角度的思考有助于我们发现现有模型的不足,以及值得改进的点。比如我最喜欢的两个理解就可以引申出这样的问题"虽然跳接可以结合不同分辨率,但ResNet显然没有充分利用这个优点,因为每个shortcut顶多跨越一种分辨率(大部分还不会发生跨越)"。

那么"如果用跳接组合更多分辨率的特征,模型的效果会不会更好?"这就是DenseNet回答我们的问题了。