Regularization: Add term to loss 正则化: 增加损失项

Regularization: Add term to loss

$$L = rac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j
eq y_i} \max(0, f(x_i; W)_j - f(x_i; W)_{y_i} + 1) + \lambda R(W)$$

In common use:

L2 regularization $R(W) = \sum_{k} \sum_{l} W_{k,l}^2$ (Weight decay)

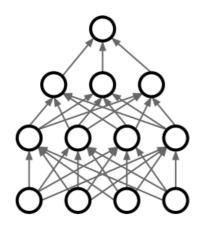
L1 regularization $R(W) = \sum_{k} \sum_{l} |W_{k,l}|$

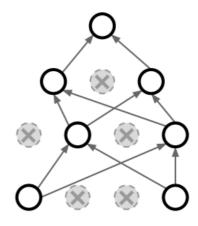
Elastic net (L1 + L2) $R(W) = \sum_{k} \sum_{l} \beta W_{k,l}^2 + |W_{k,l}|$

这里面我们在损失函数上加入额外的一项,我们有一项是让模型拟合数据,另一项则是正则项,L2正则化在神经网络中可能意义并不是很明确,有时候我们会在神经网络中选择其他方案。

Regularization: Dropout

In each forward pass, randomly set some neurons to zero Probability of dropping is a hyperparameter; 0.5 is common





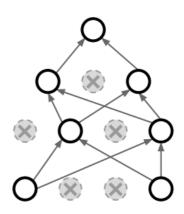
一个在神经网络中非常常用的方法就是dropout, Dropout非常简单,每次在网络中正向传递时,我们在每一层随机。将一部分神经元置零,每次正向传递时,随机被置零的神经元都不是完全相同的,。每次处理网络中的一层,我们经过一层网络,算出这一层的值,随机将其中一些置成零,然后继续在网络中前进,如果我们把左边这个全连接网络和右边经过dropout的版本进行对比,你会发现dropout后的网络,像是同样的网络变小了一号,我们只用到了其中一部分神经元,而且每次遍历,每次正向传递都是不同的部分。

Regularization: Dropout

```
def train_step(X):
    """ X contains the data """

# forward pass for example 3-layer neural network
H1 = np.maximum(0, np.dot(W1, X) + b1)
U1 = np.random.rand(*H1.shape)
```

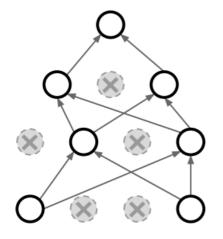
Example forward pass with a 3-layer network using dropout



Dropout的实现非常简单,只需要两行代码,每行dropout一次。这是一个三层的神经网络,我们加上了dropout,唯一需要我们做的就是加上这行,随机将一部分神经元置零,这个实现起来非常简单。

Regularization: Dropout

How can this possibly be a good idea?



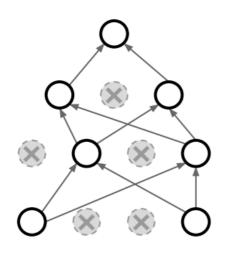
Forces the network to have a redundant representation; Prevents co-adaptation of features



但问题是这个想法为什么可取?我们认真地在训练时将一部分神经元置成零,看看这样做是否有意义,一个比较勉强的解释是,人们觉得dropout避免了特征间的相互适应,假设我们要分类判断是不是猫,可能在网络里,一个神经元学到了有一只耳朵,一个学到了尾巴,一个学到了输入图像有毛,然后这些特征被组合到一起,来判断是否是猫,但是在加入dropout后,判断是不是猫时,网络就不能依赖这些特征组合在一起,给出的结果,而是要通过不同的零散的特征来判断,这也许某种程度上抑制了过拟合。

Regularization: Dropout

How can this possibly be a good idea?



Another interpretation:

Dropout is training a large **ensemble** of models (that share parameters).

Each binary mask is one model

An FC layer with 4096 units has $2^{4096} \sim 10^{1233}$ possible masks! Only $\sim 10^{82}$ atoms in the universe...

另一种最近出现的关于Dropout的解释是,这是在单一模型中进行集成学习,如果你们观察左图,在dropout之后,我们是在一个子网络中,用所有神经元的子集进行运算,每一种可能的dropout方式都可以产生一个不同的子网络,所以dropout像是同时对一群共享参数的网络进行集成学习。顺便说一下,因为dropout的可能性随神经元个数呈指数倍增长,你不可能穷举每种情况,这可以看作是一个超级无比巨大的网络集合在同时被训练。

Dropout: Test time

Dropout makes our output random!

Output Input (label) (image) $y = f_W(x,z) \quad \text{Random} \quad \text{mask}$

Want to "average out" the randomness at test-time

$$y = f(x) = E_z[f(x,z)] = \int p(z)f(x,z)dz$$

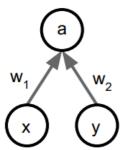
But this integral seems hard ...

那么测试的时候又是什么样呢?当我们使用了dropout,我们把神经网络基本的运算都改变了,之前我们的神经网络里有权重w的函数f,输入x,并且得到输出y,但是现在我们额外有了一个输入z表示dropout中被置零的项,z的值是随机的,测试时引入一些随机性可能不是一个好主意,所以我们就想要平均这个随机性,如果把它写出来,你可以想象,通过一些积分来边缘化随机性,但是在实践中,这个积分是完全难以处理的,我们不知道怎样对这进行求解,一脸懵逼,你可能想做的一件事是,通过采样来逼近这个积分,在这儿,你可以对z的多次取样,然后在测试的时候把它们平均化,但是这仍然会引入一些随机性,这有点不好。

Dropout: Test time

Want to approximate the integral

$$y = f(x) = E_z [f(x, z)] = \int p(z)f(x, z)dz$$



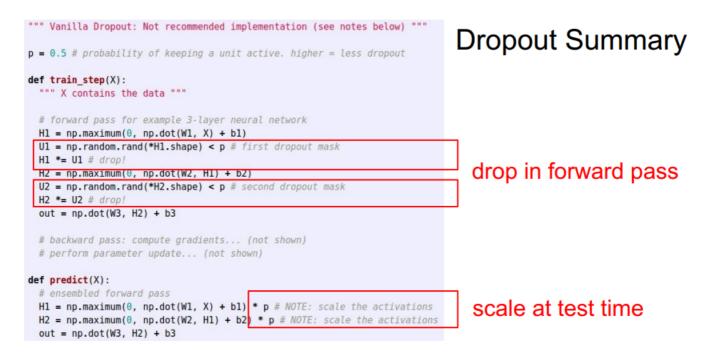
Consider a single neuron.

At test time we have: $E\left[a\right] = w_1 x + w_2 y$ During training we have: $E\left[a\right] = \frac{1}{4}(w_1 x + w_2 y) + \frac{1}{4}(w_1 x + 0 y) + \frac{1}{4}(w_1 x + w_2 y)$ by dropout probability

by dropout probability

Figure Advance this is a second of the second o

辛运的是,在dropout的情况下,实际上我们可以用一种省事的方式局部逼近这个积分,如果我们考虑单个神经元输出是a,输入是x和y,以及两个权重,然后在测试时我们得到a的值是w1*x+w2*y。现在想象一下,我们训练了这个网络,在训练期间,我们使用了dropout,丢弃神经网络单元的概率是0.5,现在,这个例子中,训练期间的期望值,可以算出解析解,有四个可能的dropout的掩码集合,我们将通过这四个掩码得到的值进行平均,我们可以看到a的期望,在训练期间为0.5*(w1*x+w2*y),这里有一点不统一,测试时平均值是w1*x+w2*y,训练时却只有一半。我们能做的一件省事的事情就是,在测试时我们没有任何随机性,而是用dropout的概率乘以这个输出,现在这些期望值是一样的,这有点像简易地局部逼近这个复杂的积分,这就是人们对于dropout,在实践中非常普遍的做法。



在dropout时,对于预测函数,我们用dropout的概率乘以我们输出层的输出。总结起来,dropout在正向传播中非常简单,你只需要添加两行到你的实现中随机对一些节点置零,然后在测试时的预测函数内,你仅仅增加了一点点乘法,乘以你的概率,Dropout超级简单,它有时对于正则化神经网络有很大帮助。

More common: "Inverted dropout"

```
p = 0.5 # probability of keeping a unit active. higher = less dropout
def train_step(X):
 # forward pass for example 3-layer neural network
 H1 = np.maximum(0, np.dot(W1, X) + b1)
 U1 = (np.random.rand(*H1.shape) < p) / p # first dropout mask. Notice /p!
 H1 *= U1 # drop!
 H2 = np.maximum(0, np.dot(W2, H1) + b2)
 U2 = (np.random.rand(*H2.shape) < p) / p # second dropout mask.
 H2 *= U2 # drop!
 out = np.dot(W3, H2) + b3
 # backward pass: compute gradients... (not shown)
 # perform parameter update... (not shown)
                                                                     test time is unchanged!
def predict(X):
 # ensembled forward pass
 H1 = np.maximum(0, np.dot(W1, X) + b1) # no scaling necessary
 H2 = np.maximum(0, np.dot(W2, H1) + b2)
 out = np.dot(W3, H2) + b3
```

顺便说一下,有时你会看到一个常见的技巧,反转dropout,也许在测试的时候,你更关心效率,所以你想在测试的时候消除乘以概率p的这一额外的乘法,那么你可以做的是,在测试的时候,你使用整个权重矩阵,但是在训练的时候,除以p,因为训练可能发生在GPU上,你真的不在乎在训练的时候,做一个额外的乘法运算,然而在测试的时候,你想要这个过程尽可能高效。

Regularization: A common pattern

Training: Add some kind of randomness

$$y = f_W(x, z)$$

Testing: Average out randomness (sometimes approximate)

$$y = f(x) = E_z[f(x,z)] = \int p(z)f(x,z)dz$$

Example: Batch Normalization

Training:

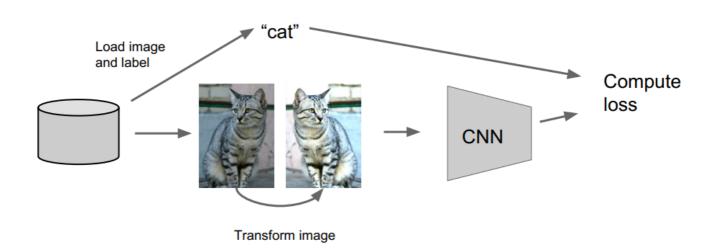
Normalize using stats from random minibatches

Testing: Use fixed stats to normalize

Dropout在我们看来是这样一个具体实例,这里有一个更通用的正则化策略,在训练期间,我们给网络添加一些随机性,以防止它过拟合训练数据,一定程度上扰乱它,防止它完美地拟合训练数据,现在在测试的时候,我们要抵消掉所有随机性,希望能够提高我们的泛化能力,dropout可能是最常见的使用这种策略的例子,但是实际上,Batch Normalization也符合这个想法,记得在Batch Normalization中,在训练的时候,一个数据点可能和其它不同的数据点出现在不同的小批量中,对于单个数据点来说,在训练过程中该点会如何被正则化,具有一定的随机性,但是在测试过程中,我们通过使用一些基于全局估计的正则化来抵消掉这个随机性,而不是采用每一小批量估算,实际上,Batch Normalization倾向于具有和dropout类似的正则化效果,因为它们在训练的时候,都随机引入某种随机性或者噪声,但是又在测试的时候抵消掉它们。实际上,当你使用Batch Normalization来训练神经网络的时候,有时你一点儿都不会使用dropout,仅仅是Batch Normalization给你的

网络,增加了足够的正则化效果,dropout某种程度上更好,因为你实际上可以通过改变参数p调整正则化的力度,但是在Batch Normalization中,并没有这种控制机制。

Regularization: Data Augmentation

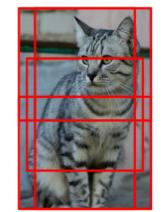


另一种符合这种范式的策略就是这种数据增强的想法,在训练的时候,有一个最初的版本,我们有自己的数据,也有自己的标签,在每一次迭代中,我们使用它去更新我们的卷积神经网络,但是我们可以做的是在训练过程中,以某种方式随机地旋转图像,使得标签可以保留不变,现在我们用这些随机转换的图像进行训练,而不是原始的图像,有时你可能会看到随机的水平翻转。

Data Augmentation Random crops and scales

Training: sample random crops / scales ResNet:

- 1. Pick random L in range [256, 480]
- Resize training image, short side = L
- 3. Sample random 224 x 224 patch



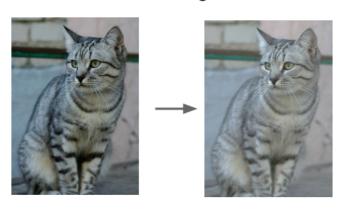
Testing: average a fixed set of crops ResNet:

- 1. Resize image at 5 scales: {224, 256, 384, 480, 640}
- 2. For each size, use 10 224 x 224 crops: 4 corners + center, + flips

假如,你采用了一张猫的图像并水平翻转了它,它依旧是一只猫,你可以从图像中随机抽取不同尺度大小的裁剪图像,因为猫随机地裁剪图像依然是一只猫,然后在测试过程中,通过评估一些固定的裁剪图像来抵消这种随机性,通常是四个角落和中间,以及它们的翻转。比较常见的就是,当你阅读ImageNet上论文的时候,他们会总结,他们模型的单个裁剪图像效果,这个就像整个图像一样,和它们模型的10种裁剪方式的效果,包括这5种标准裁剪,加上它们的翻转。

Data Augmentation Color Jitter

Simple: Randomize contrast and brightness



More Complex:

- Apply PCA to all [R, G, B] pixels in training set
- Sample a "color offset" along principal component directions
- Add offset to all pixels of a training image

(As seen in [Krizhevsky et al. 2012], ResNet, etc)

同样,在数据增强中,有时会使用色彩抖动,你可能会在训练的时候随机改变图像的对比度和亮度,你也可以通过色彩抖动来得到一些更复杂的结果,当你试图在你的数据空间的主成分分析方向上产生色彩抖动,或者其它什么时候。你会以某种与数据相关的方式进行色彩抖动,但是这是不太常见的。

Data Augmentation Get creative for your problem!

Random mix/combinations of:

- translation
- rotation
- stretching
- shearing,
- lens distortions, ... (go crazy)

一般来说,数据增强是非常普遍的事情,你可以将其应用于任何问题,不管你想要解决什么问题,可以考虑,在不更改标签的前提下,对数据进行转换,现在在训练的时候,你只需将这些随机转换应用于你的输入数据,这种方式对网络有正则化效果,因为你在训练的时候,你又增加了某种随机性,然后在测试的时候将它们淡化。

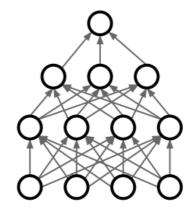
Regularization: A common pattern

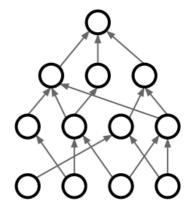
Training: Add random noise

Testing: Marginalize over the noise

Examples:

Dropout
Batch Normalization
Data Augmentation
DropConnect





现在我们已经看到了这种模式的三个例子,Dropout、Batch Normalization和数据增强,但是还有很多其他的例子,一旦你学会这个模式,当你阅读其它论文的时候,你可能会认出它们。还有一种与dropout相关的算法,叫做dropconnect,DropConnect是同样的想法,但不是在每次正向传播中将激活函数置零,而是随机将权重矩阵的一些值置零,它们有一样的效果。

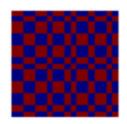
Regularization: A common pattern

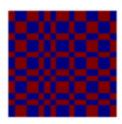
Training: Add random noise

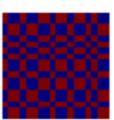
Testing: Marginalize over the noise

Examples:

Dropout
Batch Normalization
Data Augmentation
DropConnect
Fractional Max Pooling







另一个我喜欢的想法,虽然不太常用,但是我认为是一个非常好的想法,就是部分最大化池化的想法,一般的,当你进行2*2的最大池化时,以前我们会把固定的2*2的区域,在前向传播的前面进行池化,但是现在通过部分最大化池化,每次我们在池化层操作时,我们将随机池化,我们正在池化的区域,如右图所示,展示了3个不同的,在训练时可能遇到的随机池化区域,在测试的时候,有很多方法可以得到抵消随机性,要么使用一些固定的池化区域,要么选择很多样本对它们取平均,这是一个很好的想法,虽然并不常用。

Regularization: A common pattern

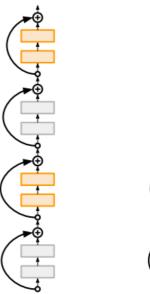
Training: Add random noise

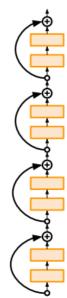
Testing: Marginalize over the noise

Examples:

Dropout
Batch Normalization
Data Augmentation
DropConnect
Fractional Max Pooling
Stochastic Depth







另一个令人眼前一亮的论文是2016年发表的,它就是随机深度,如左图所示,我们有一个很深的网络,在训练时,我们随机的从网络中丢弃部分层,在训练时,我们消除一些层,只用部分层,在测试的时候,我们用全部的网络,有点不可思议,这是一个神奇的研究,效果有点趋向Drouput的正则化效果和其他的类似策略,这是非常前沿的研究,在实际操作的时候并不常用,但他的想法不错!

大多数时候使用Batch Normalization就够了,可以加Dropout。