机器学习纳米学位

毕业项目 优达学城

2018-7-10

I. 问题的定义

项目概述

本项目来源于kaggle比赛，目标是训练机器学习分类模型，对输入图片判断类别是猫还是狗，是一个监督学习二分类问题。 本项目使用的主要技术的是卷积神经网络（Convolution Neural Network，CNN),卷积神经网络具有强大的自动提取图片特征的能力，广泛应用于图像分类，目标检测，语义分割等各个视觉领域。在图像分类问题上，人们已经设计出很多强大的CNN模型(VGG, Xception, ResNet等)，取得了远胜于传统SVM方法的准确率。

问题陈述

本项目面临的主要问题有

1. 模型大小与计算资源的矛盾： 通常来说，卷积神经网络的层数越深，可训练参数数量越多，模型的拟合能力越强。但是更大的模型意味着更大的显存消耗和更长的训练时间。本项目kaggle上原始数据集的图片尺寸比较大,一般在300x300pixels以上。所以层数特别深的模型难以从头开始训练。
2. 模型泛化能力的问题： 本项目提供的训练集一共有25000图片，两个类别各占一半，还要预留20%的图片作为验证集，实际用于训练的图片只有20000张。测试集图片有12500张。我们希望获得在测试集和训练集上都表现优良的分类模型，如果用拟合能力很强的大模型直接训练会出现过拟合倾向。为了保证模型的泛化能力同时不增加太多训练时间，需要合理采用正则化方法抑制模型的过拟合。

评价指标

本项目是一个二分类问题，用对数损失(Log loss,亦称交叉熵)作评价指标，交叉熵是分类问题常用的损失函数，它反映的是两个概率分布之间的差异，可以方便的进行求导，计算公式为.

$$Logloss = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}[y_i \log(y_l) + (1-y_i)\log(1-y_l)]$$

其中y_l表示一张图片的类别被预测为狗的概率，y_i是1如果此图片的真实类别是狗，否则是0

为了对模型做正则化，抑制过拟合，给损失函数加上一项最后全连接层权值的L2范数。

$$R(w) = \lambda \sum_{i=1}^{n} |w_i^2|$$

其中 λ是L2损失函数的系数，λ越大表示正则化程度越大

完整的模型训练损失函数为

$$Loss = Logloss + R(w)$$

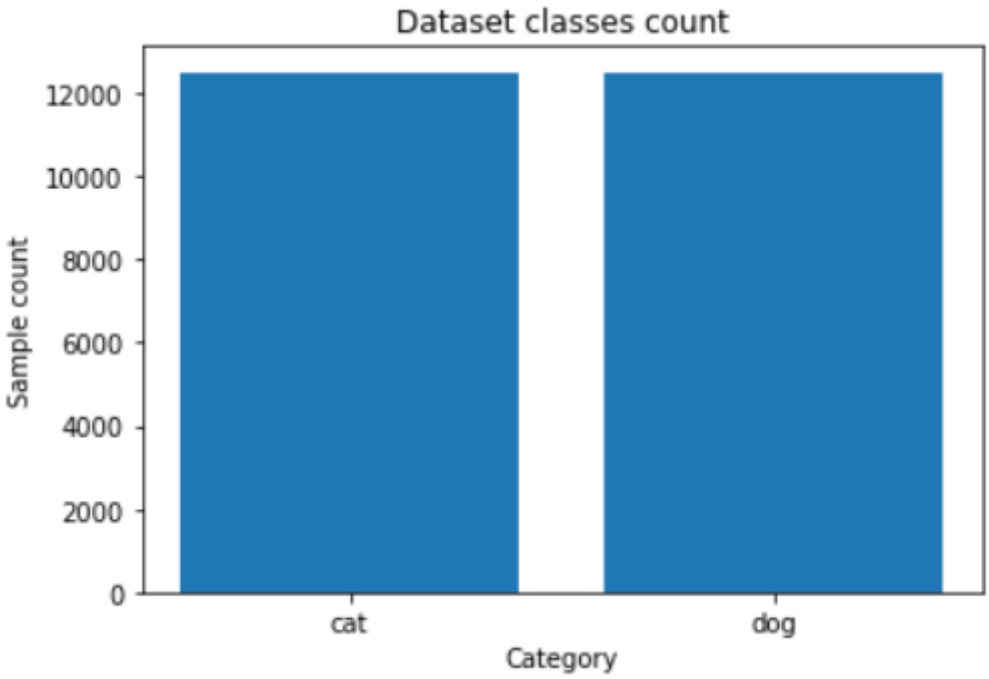
最终评价模型的指标仍然是Logloss

II. 分析

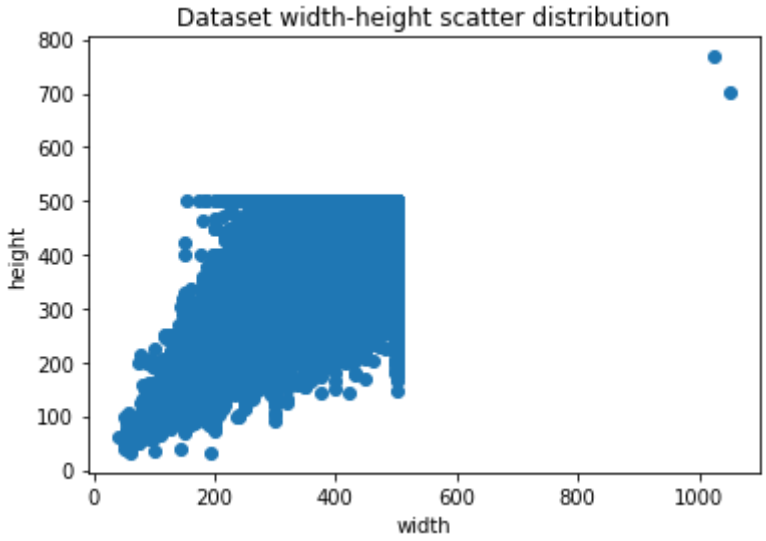
数据的探索和可视化

本项目使用的数据集包含训练集train文件夹和测试集test文件夹，train包含25000个图片，每张图片用 “类别.编号.jpg”命名，test包含12500图片，只用“编号.jpg”命名。为了适应keras图片生成器的读取模式，首先需要根据类别把train分为两个文件夹，每个文件夹用类别命名。 下面是训练集图片的统计信息

训练图片类别分布



训练图片的宽度和高度散点图



训练图片随机采样示例

从图中可以初步看出

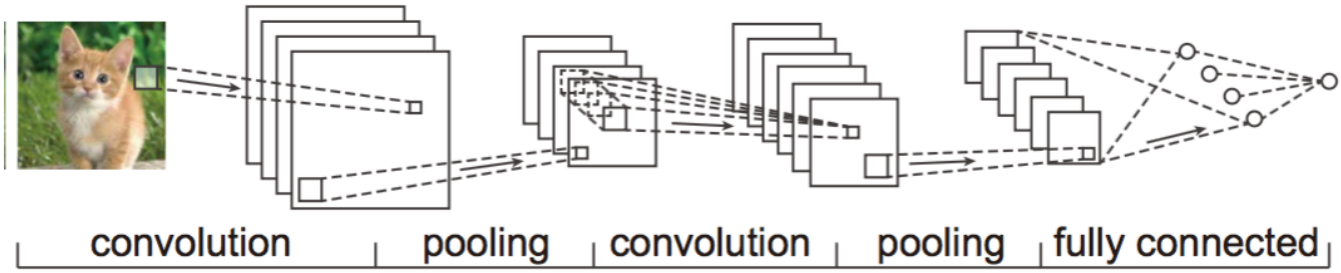
1. 训练图片类别经过挑选，两个各占50%，没有类别不平衡问题
2. 训练图片尺寸不一致，宽度和高度大部分分布在200-500像素之间，有个别异常大的图片尺寸600像素以上
3. 训练图片视角，光线和目标位置相差很大，有的图片是猫狗的正脸，有的包含全身，部分图片甚至有多个目标出现

算法和技术

1.卷积神经网络

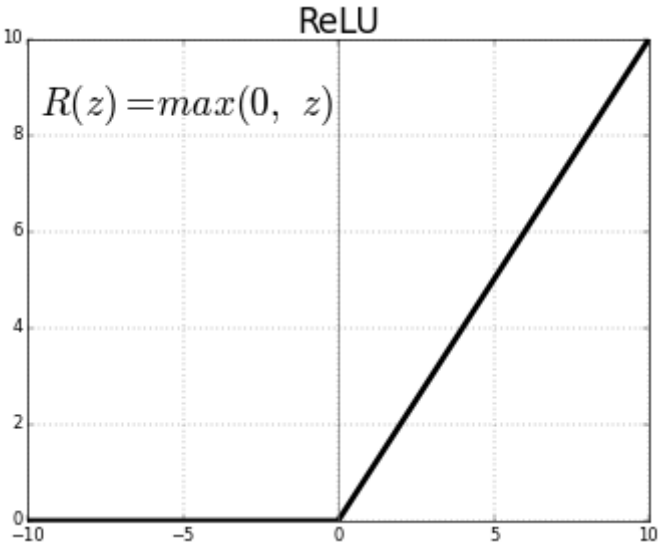
本项目用到的核心算法是卷积神经网络。卷积神经网络（Convolutional Neural Network, CNN）是一种前馈神经网络【1】，卷积网络的核心特点是在卷积层中使用卷积核运算来替代传统矩阵相乘的神经网络，这一结构使得卷积神经网络能够利用输入数据的二维结构，在图像数据上，卷积神经网络表现异常优秀。卷积神经网络的取得成功的主要原因是成功提取了图片的空间相关性。卷积核在图片上滑动采样得到的特征图相当于图像的特征映射，CNN提取的这些特征对缩放，旋转，平移具有不变性。同时CNN具有局部连接和权值共享的特点。

局部连接是指每个神经元只与上一层特征图的一部分区域连接，这块区域的大小相当于CNN的感受野。权值共享是指CNN的卷积核在不同的通道使用的权值是相同的。这大大减少了网络的参数数量，减小了训练CNN的难度和过拟合的风险。

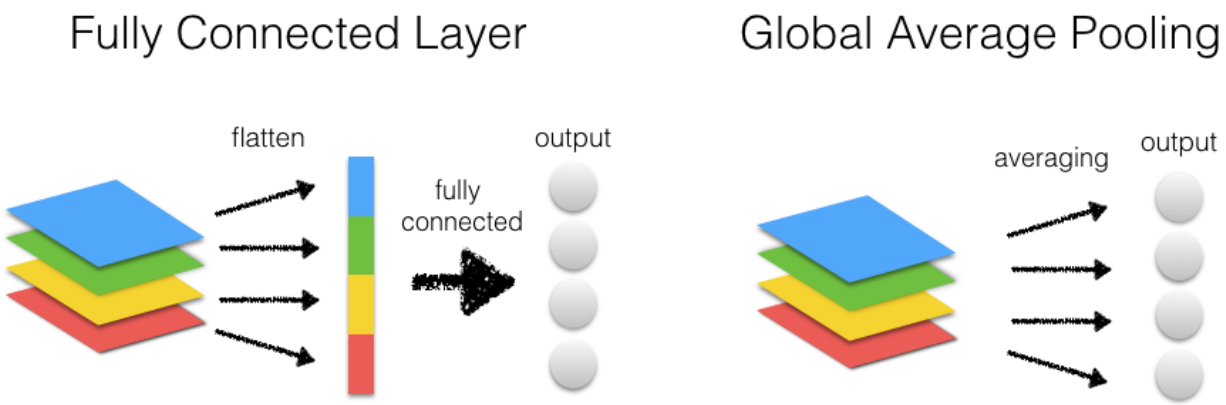


经典的卷积神经网络由一个或多个卷积层和全连通层组成，同时也包括池化层和 Dropout层。 卷积层（Convolutional layer），卷积神经网络中每层卷积层由若干卷积单元组成，每个卷积单元的参数都是通过反向传播算法最佳化得到的。卷积运算的目的是提取输入的不同特征，第一层卷积层可能只能提取一些低级的特征如边缘、线条和角等层级，更多层的网路能从低级特征中迭代提取更复杂的特征。

线性整流层(Rectified linear layer，Relu)在神经网络中起激活神经元的作用。其图像如图所示，Relu函数时神经网络中最常用的激活函数，它的梯度在大于零一侧的恒为1，不易发生梯度消失和梯度爆炸。激活函数的使用为神经网络引入了非线性，使有限深度的神经网络可以逼近任意函数。



池化层(Pooling layer)，一般作用于获得卷积层的的激活输出之后，池化函数使用某一位置的相邻输出的整体统计特征来替代网络在该位置的输出。常用的池化函数，有最大池化(MaxPooling)，利用相邻矩形区域内的最大激活值代替单个神经元的输出。而平均池化(AveragePooling)则是利用相邻矩形区域内激活值的平均数。GlobalAveragePooling则是将最后一层卷积测特征图整张图上进行池化，这样每个通道可以形成一个特征点，便于输出到全连接层。 池化层能帮助神经网络在输入做出少量平移时，保证输入的表示近似不变(invariant)。也就是说池化单元具有平移不变性，这样可以有效减缓卷积网络的过拟合。



全连接层(Fully connected layer)是卷积神经网络中负责最后分类任务的神经网络。它通常位于网络的后端，负责把前面卷积层提取出的特征向量映射到损失函数的输入中。全连接层也是通过反向求导传播梯度的方式训练的，因此可以很方便的与卷积层联合在一起训练

2. 迁移学习

本项目用到的另一个关键技术是迁移学习(Transfer learning).所谓迁移学习，就是能让现有的模型算法稍加调整即可应用于一个新的领域和功能的一项技术。前文中已经提到，本数据集的图片分辨率较高，如果从头开始搭建深度卷积网络训练可能要花费很长的时间才能收敛到比较理想的效果。好在人们已经在ImageNet数据集上训练了大量表现良好的模型，而ImageNet数据集的1000个类别中包含大量动物类，猫和狗都是其中之一。因此使用ImageNet上预训练过的网络就是顺其自然的选择了。

预训练网络(Pretrained model)的前几层卷积通常用来提取图片的高层次特征，如最基本的边缘，纹理等。更深的卷积层用来提取更细致的特征，网络的最后几层用来做分类，把提取到的特征映射到概率空间。常用的预训练模型有VGG16, InceptionV3, Xception, ResNet等。下图是各个预训练模型在ImageNet数据集上的表现和模型大小。

Model	Size	Top-1 Accuracy	Top-5 Accuracy	Parameters	Depth
Xception	88 MB	0.790	0.945	22,910,480	126
VGG16	528 MB	0.715	0.901	138,357,544	23
VGG19	549 MB	0.727	0.910	143,667,240	26
ResNet50	99 MB	0.759	0.929	25,636,712	168
InceptionV3	92 MB	0.788	0.944	23,851,784	159
InceptionResNetV2	215 MB	0.804	0.953	55,873,736	572
MobileNet	17 MB	0.665	0.871	4,253,864	88
DenseNet121	33 MB	0.745	0.918	8,062,504	121
DenseNet169	57 MB	0.759	0.928	14,307,880	169
DenseNet201	80 MB	0.770	0.933	20,242,984	201

可以看出，通常模型的准确率高复杂度也越高，其中InceptionV3【2】模型有非常不错的准确率并且模型体积也较小，是用于迁移学习的极佳选择。本项目选择ImageNet上预训练过的InceptionV3模型作为迁移学习的预训练网络。

3. Dropout

Dropout是一种常用的神经网络正则化方法。具体方法是在神经网络中间层输出神经元进入下一层的输入时，以一定的概率把输出神经元的激活值随机设为0.Dropout的实质是集成了大量神经网络的Bagging方法。把一些神经元设为0相当于暂时删除了这个单元。这样每个输入到网络的训练batch所对应的网络结果是不同的，不同样本对应不同模型，相当于做到了集成学习中的Bagging策略。Dropout可以非常高效的实现正则化，有效抑制模型的过拟合趋势。

4. Adam优化器

本项目训练神经网络采用的是Adam优化器。Adam是一种学习率自适应的优化算法，其最大的特点在于通过计算梯度的一阶矩估计和二阶矩估计而为不同的参数设计独立的自适应性学习率。下图是Adam优化器的学习步骤【3】

算法 8.7 Adam 算法

Require: 步长 ϵ（建议默认为：0.001）

Require: 矩估计的指数衰减速率，ρ_1 和 ρ_2 在区间 $[0, 1)$ 内。（建议默认为：分别为 0.9 和 0.999）

Require: 用于数值稳定的小常数 δ（建议默认为：10^{-8}）

Require: 初始参数 $\boldsymbol{\theta}$

初始化一阶和二阶矩变量 $\boldsymbol{s} = 0, \boldsymbol{r} = 0$

初始化时间步 $t = 0$

while 没有达到停止准则 **do**

从训练集中采包含 m 个样本 $\{\boldsymbol{x}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{x}^{(m)}\}$ 的小批量，对应目标为 $\boldsymbol{y}^{(i)}$。

计算梯度：$\boldsymbol{g} \leftarrow \frac{1}{m} \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \sum_i L(f(\boldsymbol{x}^{(i)}; \boldsymbol{\theta}), \boldsymbol{y}^{(i)})$

$t \leftarrow t + 1$

更新有偏一阶矩估计：$\boldsymbol{s} \leftarrow \rho_1 \boldsymbol{s} + (1 - \rho_1)\boldsymbol{g}$

更新有偏二阶矩估计：$\boldsymbol{r} \leftarrow \rho_2 \boldsymbol{r} + (1 - \rho_2)\boldsymbol{g} \odot \boldsymbol{g}$

修正一阶矩的偏差：$\hat{\boldsymbol{s}} \leftarrow \frac{\boldsymbol{s}}{1 - \rho_1^t}$

修正二阶矩的偏差：$\hat{\boldsymbol{r}} \leftarrow \frac{\boldsymbol{r}}{1 - \rho_2^t}$

计算更新：$\Delta\boldsymbol{\theta} = -\epsilon \frac{\hat{\boldsymbol{s}}}{\sqrt{\hat{\boldsymbol{r}}} + \delta}$（逐元素应用操作）

应用更新：$\boldsymbol{\theta} \leftarrow \boldsymbol{\theta} + \Delta\boldsymbol{\theta}$

end while

Adam优化器主要有一下几个优点： 1.计算效率高，内存需求小 2.参数更新步长不受梯度大小影响，由alpha,beta1,beta2等超参数控制，有上下限范围 3.可以适应目标不稳定的函数，可以应对稀疏梯度和噪音情况。

Adam优化器是使用最广泛的优化器之一，本项目采用预训练的模型做迁移学习，为了使模型收敛的更稳定，采用了1e-4的初始学习率。

基准指标

本项目采用kaggle上测试集的最终提交结果作为评判标准，打分标准是对数损失函数。项目采用的基准指标是kaggle排行榜的前10%，即交叉熵低于0.061

III. 方法

数据预处理

InceptionV3的预训练模型要求输入图片像素归一化到[-1,1]之间，在ImageNet上图片大小统一缩放到299x299,为了采用迁移学习，本项目的图片也需要做相同的预处理，keras中有方便的预处理函数可以调用。图片经过InceptionV3前向传播后需要经过GlobalAveragePooling层池化，得到长度为2048的特征向量再送入分类器网络进行分类。除此之外，图片不需要做其他处理，一个泛化能力足够强的深度学习模型应该能适应各种视角，光照等条件带来的不确定性。为了节省训练时间，本项目也没有使用数据增强。

训练集中存在少量误标和异常的图片，为了进行异常值筛选，采用ImageNet上预训练过的InceptionV3模型现在训练集上预测一遍，找出预测与标记不一致的图片再进行人工挑选，以确保训练集的可靠性。一开始采用top5,top10的分类预测作为异常筛选范围，发现误检率很高，经过多次试验最终选定top-50的分类结果进行异常值检测，共发现78张异常图片，从可视化结果看大部分是无关的文字和图片，或者图中有多个动物等难以分类的情况，误检率很低。从训练集中删除了这些图片之后再划分文件夹进行下面的步骤。最终采用的训练集共包含24922张图片。

执行过程

本项目使用keras 2.0.6版本的深度学习工具。为了保证代码的可读性和可复用性，定义了一个类InceptionV3专门用来做迁移学习，构造函数中可指定weight_decay,drop_rate等超参数控制模型的正则化程度，可以选择预训练的网络权值并指定冻结多少层做fine-tune。

```
class InceptionV3:

    weights_path = "saved_weights"
    models_path = "saved_models"
    input_shape = (299,299,3)

    def __init__(self, num_classes=2,pretrained=True,
                 drop_rate=0.25,weight_decay=0):
        self.num_classes = num_classes
        self.drop_rate = drop_rate
        self.weight_decay = weight_decay
        self.cls_model = None
        self.pretrained = pretrained

        input_tensor = Input(InceptionV3.input_shape)
        x = Lambda(inception_v3.preprocess_input)(input_tensor)
        if self.pretrained:
            self.backend = inception_v3.InceptionV3(weights='imagenet',
                                                    include_top=False, input_tensor=x)
        else:
            self.backend = inception_v3.InceptionV3(weights=None,
                                                   include_top=False,input_tensor=x)

        if not os.path.exists(InceptionV3.weights_path):
            os.mkdir(InceptionV3.weights_path)
        if not os.path.exists(InceptionV3.models_path):
            os.mkdir(InceptionV3.models_path)
```

```
def build(self, fine_tune=True,layer_to_freeze=281, lr=0.001):
    self.base_model = Model(input=self.backend.input, output=GlobalAveragePooling2D()(self.backend.output))

    self.cls_model = Sequential()
    self.cls_model.add(Dropout(0.5,input_shape=self.base_model.output.shape.as_list()[1:]))
    self.cls_model.add(Dense(self.num_classes, activation='softmax',kernel_regularizer=regularizers.l2(self.weight_decay)))

    if fine_tune:
        for i,layer in enumerate(self.base_model.layers):
            if i<layer_to_freeze:
                layer.trainable = False

    self.cls_model_compile(lr)
```

一开始采用冻结模型前面所有卷积层的方法，只用小学习率训练最后的分类层，但是试验发现把整个模型载入显存再冻结权值训练的方法，训练时间依然很长，主要原因是keras的生成器需要不断去磁盘中读取图片，经过预处理层，卷积层，池化层的前向传播才能到达分类层。反复循环这个过程会造成进程的IO等待时间变长。显卡和CPU使用率来回跳动。

```
Found 20000 images belonging to 2 classes.
Found 5000 images belonging to 2 classes.
Epoch 1/6
1250/1250 [==============================] - 477s - loss: 0.0787 - acc: 0.9720 - val_loss: 0.0417 - val_acc: 0.9838
Epoch 2/6
1250/1250 [==============================] - 477s - loss: 0.0387 - acc: 0.9860 - val_loss: 0.0379 - val_acc: 0.9843
Epoch 3/6
1250/1250 [==============================] - 477s - loss: 0.0217 - acc: 0.9932 - val_loss: 0.0428 - val_acc: 0.9870
Epoch 4/6
1250/1250 [==============================] - 478s - loss: 0.0150 - acc: 0.9951 - val_loss: 0.0455 - val_acc: 0.9860
Epoch 5/6
1250/1250 [==============================] - 478s - loss: 0.0132 - acc: 0.9954 - val_loss: 0.0502 - val_acc: 0.9850
Epoch 6/6
1250/1250 [==============================] - 477s - loss: 0.0076 - acc: 0.9977 - val_loss: 0.0607 - val_acc: 0.9839
```

后来经过试验，决定把整个训练集和测试集的图片全部分批传入预训练网络，把输入的特征向量保存到磁盘，再单独构建一个全连接的分类模型训练。在训练的时候相当于把整个训练集的特征向量全部导入了内存，这样省去了IO等待时间，同时占用的显存大大减少，在普通显卡上几秒钟中就能训练出一个分类模型。

```
@staticmethod
def save_weights(train_dir, test_dir, batch_size=32):
    gen = ImageDataGenerator()
    train_generator = gen.flow_from_directory(train_dir, (InceptionV3.input_shape[0],InceptionV3.input_shape[1]),
                                              shuffle=False, batch_size=batch_size)

    test_generator = gen.flow_from_directory(test_dir, (InceptionV3.input_shape[0],InceptionV3.input_shape[1]),
                                             shuffle=False, batch_size=batch_size,classes=None,class_mode=None)
    X_train =self.base_model.predict_generator(train_generator,
                                               steps=(train_generator.samples)//batch_size,verbose=1)
    X_test = self.base_model.predict_generator(test_generator,
                                               steps=(test_generator.samples)//batch_size,verbose=1)
    with h5py.File(os.path.join(InceptionV3.weights_path,"inception_v3.hdf5")) as f:
        f.create_dataset("train", data=X_train)
        f.create_dataset("test", data=X_test)
        f.create_dataset("label", data=train_generator.classes)
```

模型调参

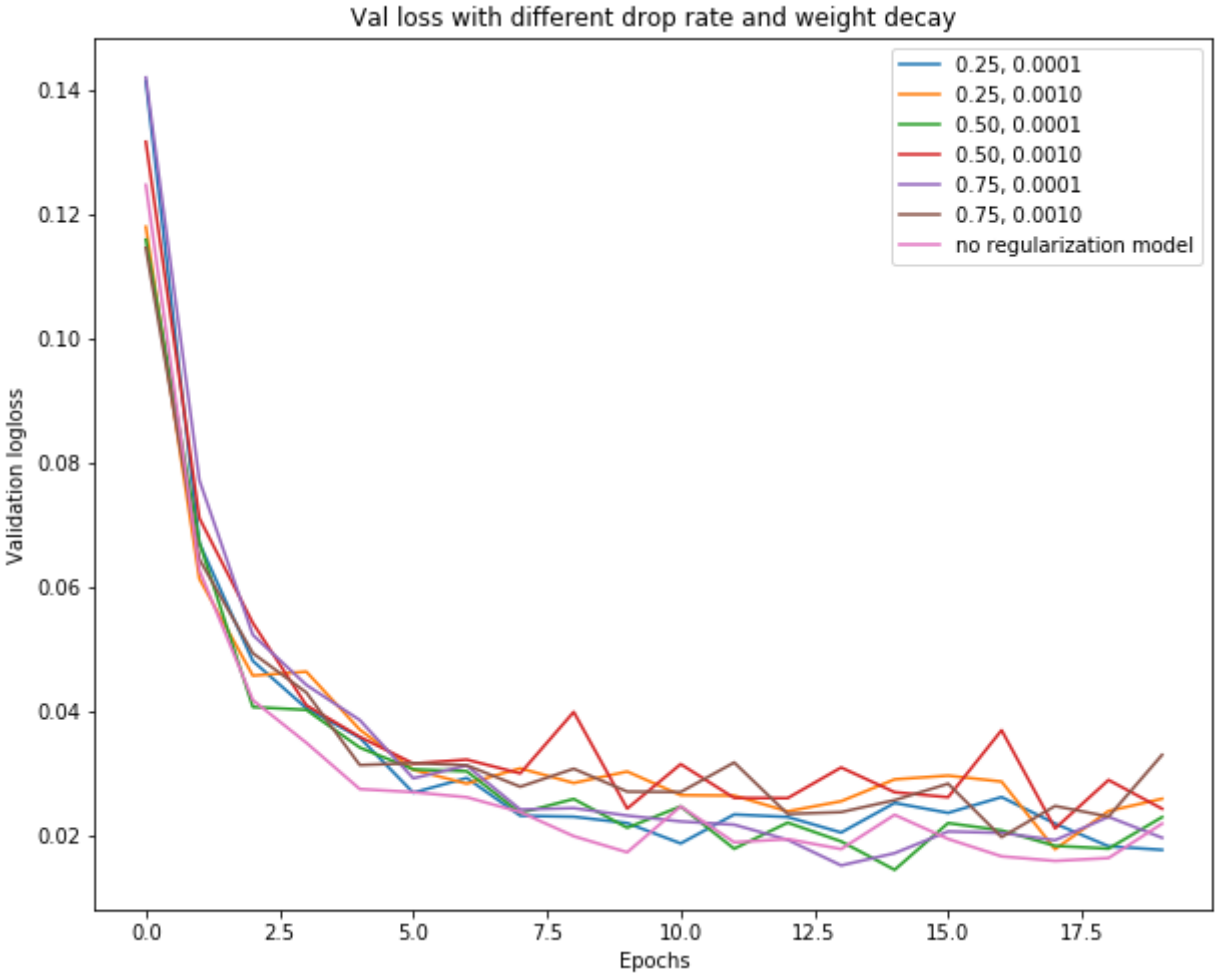
前文已经提到，训练集的规模较小，为了抑制过拟合趋势，需要采用一定的正则化手段，本项目主要采用了Dropout和L2损失函数的方法做正则化。其中Dropout的概率和L2损失函数的系数是模型的两个重要超参数。为了找到最优的参数组合，选择在验证集上用网格搜索法就行调参，再加上不加任何正则化的模型，一共得到7个模型

```
drop_rate_set = [0.25, 0.5, 0.75]
weight_decay_set = [1e-4, 1e-3]
val_loss_records = []
val_acc_records = []
train_loss_records = []

i = 1
for drop_rate in drop_rate_set:
    for weight_decay in weight_decay_set:
        model = InceptionV3(num_classes=2, pretrained=True,
                 drop_rate=drop_rate,weight_decay=weight_decay)
        model.build(fine_tune=True, layer_to_freeze=313, lr=1e-4)
        history = model.fit(X_train, y_train, batch_size=64, epochs=20, validation_split=0.2)
        model.save_model("model_"+str(i)+".hdf5")
        i += 1
        val_loss_records.append(history.history['val_loss'])
        val_acc_records.append(history.history['val_acc'])
        train_loss_records.append(history.history['loss'])

        del model
        gc.collect()
```

下面是不同参数的模型在验证集上的表现对比

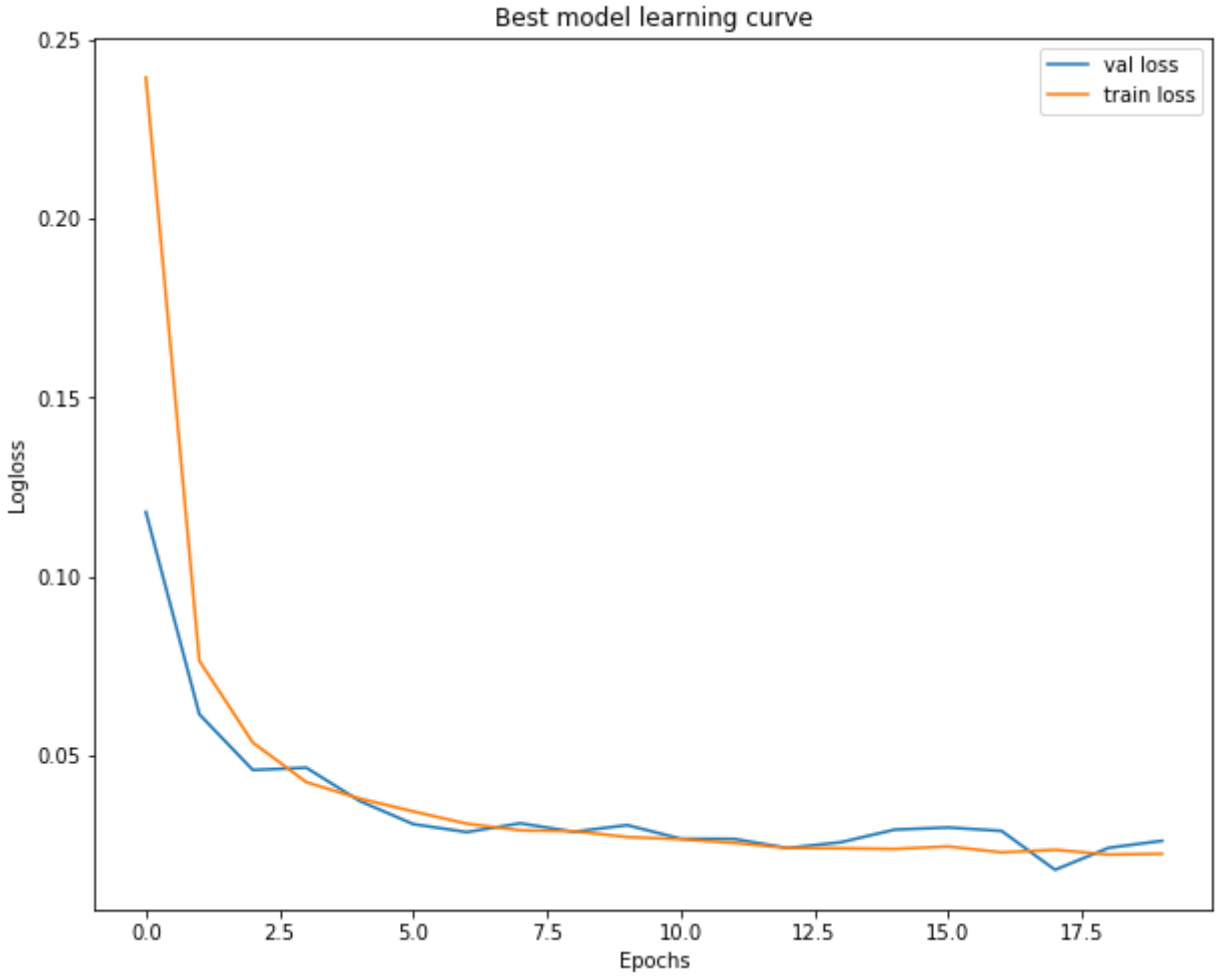


可以看到，不同参数下模型的表现整体上很接近，相比来说，验证集误差最低的是drop_out_rate=0.25, weight_deacy=0.0001的模型,也是最终选择的最优模型。未加正则化的模型表现介于中间水平，最后的val loss略逊于最优模型。

结果

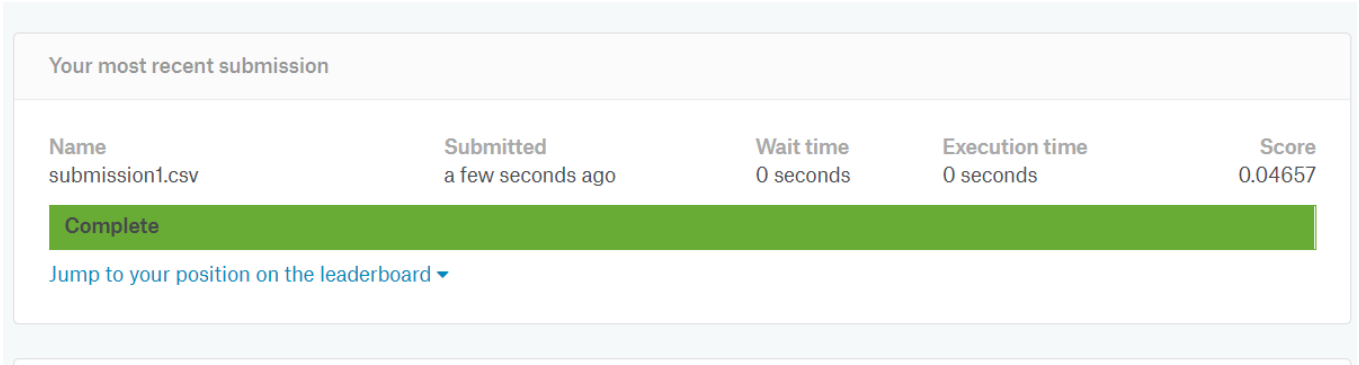
模型验证与可视化

下面是选择的最优模型的学习曲线

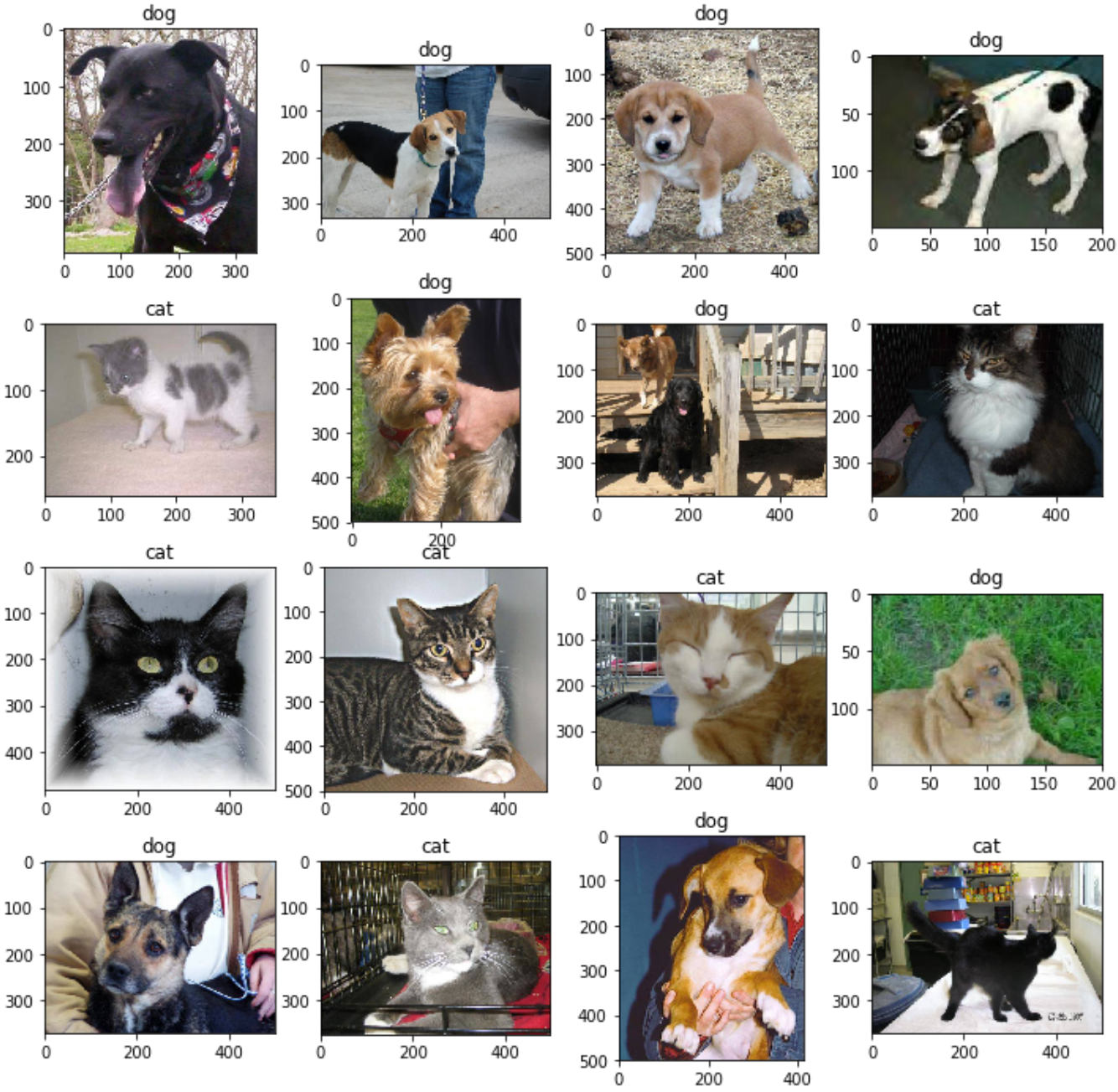


可以看出，随着训练的进行，模型在训练集和验证集的误差一直平稳下降，两者相差不大，没有出现严重的过拟合倾向，最后几轮迭代，训练集和验证集误差均没有大的变化，说明模型已经收敛。

让调参得到的最优模型在测试集上进行预测，得到的结果提交到kaggle平台上，最终结果Logloss=0.04657,排名第36名，进入前10%。



下面是模型对测试集图片做出的预测



可以看出，模型在绝大多数图片上都做出了正确的预测，确实具有很强的分类能力，鲁棒性很高

结论

对项目的思考

本项目是经典的用卷积神经网络实现的图片分类任务。从头开始寻找可行的方案并最终实现它是充满挑战的。项目最大的困难在于一开始深度神经网络的训练时间很长，显存需求很大，无法用个人笔记本运行。一开始AWS EC2上计算没有找到合适的fine-tune方法，尝试冻结各种层都导致严重的过拟合，做了很多无效的计算。最终发现只要重新训练分类层就能取得很好的效果。而且训练速度很快，可以方便的调参。最终的结果总体上符合期望。

需要作出的改进

项目可以提高的地方还很多，比如尝试与ResNet【4】, VGG【5】等模型联合起来提取特征送入分类器。采用数据增强扩大训练集。当训练集足够大时，模型的过拟合的风险就会显著降低，可以考虑使用拟合能力更强的模型，比如以InpcetionV3, ResNet50为backend做fine-tune。从比赛的角度，可以独立训练多个模型对结果进行融合，进一步提高在测试集上的表现。

参考文献

【1】卷积神经网络.维基百科

【2】Christian Szegedy, Vincent Vanhoucke, Sergey Ioffe, Jonathon Shlens and Zbigniew Wojna. Rethinking the Inception Architecture for Computer Vision. In arXiv,2015.

【3】Ian Goodfellow,Yoshua Bengio,Aaron Courvile. Deep learning

【4】Kaiming He, Xiangyu Zhang, Shaoqing Ren, Jian Sun. Deep Residual Learning for Image Recognition

【5】Karen Simonyan, Andrew Zisserman Very Deep Convolutional Networks for Large-Scale Image Recognition