Detalles sobre Deep Learning

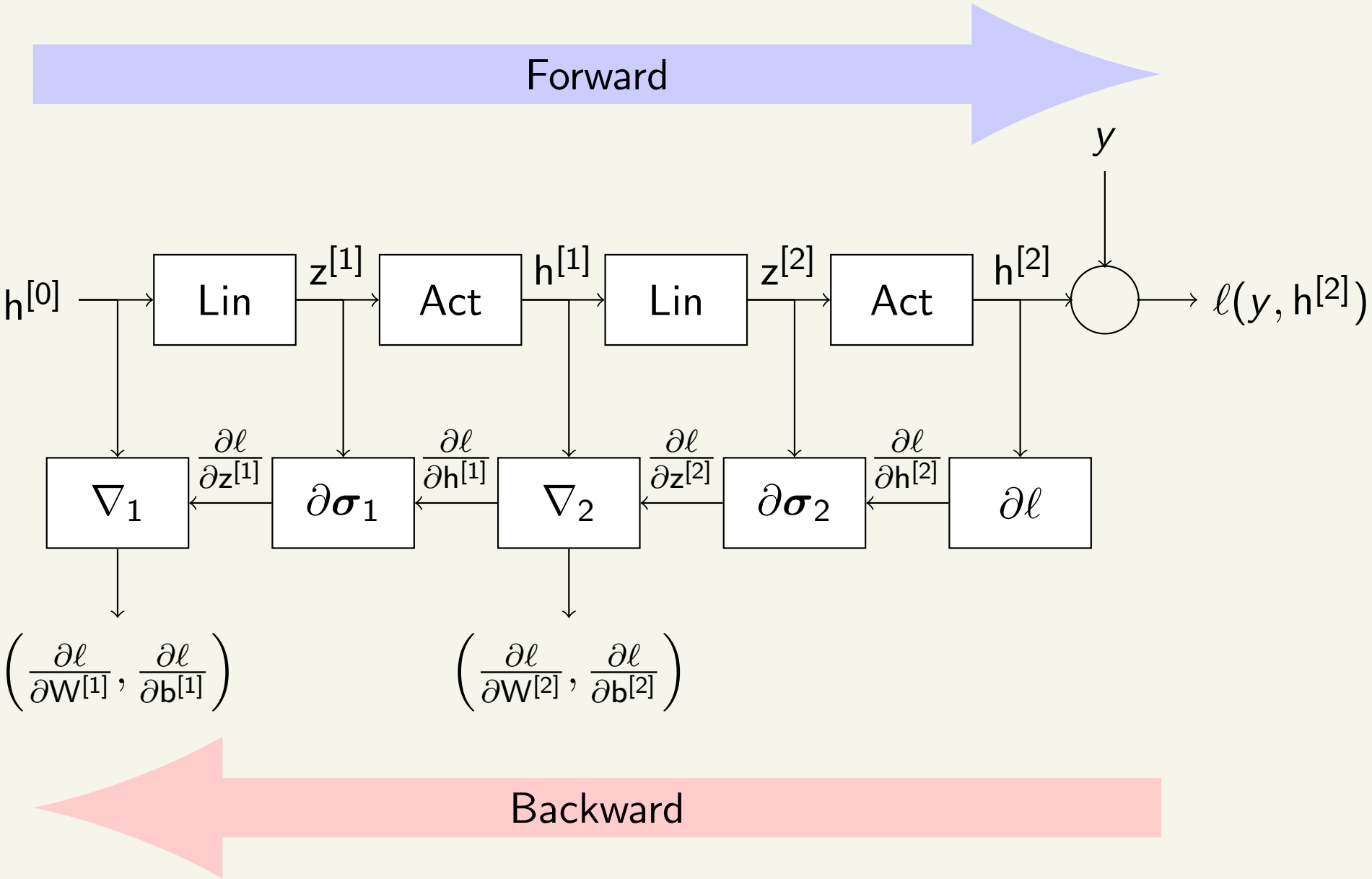
Matias Vera - Juan Zuloaga - Lautaro Estienne

Centro de Simulación Computacional para Aplicaciones Tecnológicas

Agenda

1. Vanishing/Exploting
2. Tuneo de hiperparámetros
3. Underfitting y Overfitting
4. Regularización
   - Weight-decay
   - Dropout
   - Data augmentation
   - Early stopping
   - Autoencoders como regularización

Forward-Backward Propagation



Vanishing/Exploting

Idea

Para redes muy profundas, la composición de layers puede generar magnitudes muy pequeñas o muy grandes que estropee la precisión numérica. Este efecto puede ocurrir tanto en las magnitudes (forward) o en sus gradientes (backward).

Comparación sigmoide vs ReLU

$\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$

- No explota $\sigma(z) < 1$
- No explota su gradiente $\sigma'(z) = \sigma(z)\left(1 - \sigma(z)\right) \leq \frac{1}{4}$
- Su gradiente se desvanece con mucha facilidad

$\sigma(z) = \max\{0, z\}$

- Su gradiente no desvancece ni explota $\sigma'(z) = \mathbb{1}\{z > 0\}$.
- Tiene tendencia a explotar $\sigma(z) \geq z$
- Es computacionalmente más simple de computar
- Puede matar neuronas: $\left(\mathrm{h}^{[l]}\right)_k = 0$ para todo $\mathrm{h}^{[l-1]}$ (cambiarla por Leaky-Relu)

¿Como evitar la explosión de la ReLU?

Una manera de atenuar una posible explosión es con una inicialización adecuada. Sea b $= 0$ y que $w_k \sim \mathcal{N}(0, v)$ i.i.d. Tomemos una neurona: $u = \sum_{k=1}^{d} w_k \sigma(z_k)$ y supongamos que todos los z_k son identicamente distribuidos con una densidad simétrica en el origen independiente de la inicialización $w_1, \cdots, w_d$.

¿Como evitar la explosión de la ReLU?

Una manera de atenuar una posible explosión es con una inicialización adecuada. Sea b $= 0$ y que $w_k \sim \mathcal{N}(0, v)$ i.i.d. Tomemos una neurona: $u = \sum_{k=1}^{d} w_k \sigma(z_k)$ y supongamos que todos los z_k son identicamente distribuidos con una densidad simétrica en el origen independiente de la inicialización $w_1, \cdots, w_d$.

$$
\begin{aligned}
\operatorname{var}(u) &= \mathbb{E}\left[u^2\right] \\
&= \sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{d} \mathbb{E}[w_i w_j] \mathbb{E}\left[\sigma(z_i)\, \sigma(z_j)\right] \\
&= \sum_{k=1}^{d} v \mathbb{E}\left[\sigma^2(z_k)\right] \\
&= dv \mathbb{E}\left[z_1^2 \mathbb{1}\{z_1 > 0\}\right] \\
&= \frac{dv}{2} \mathbb{E}\left[z_1^2\right]
\end{aligned}
$$

Inicialización de parámetros

$$\mathbb{E}\left[\left(z^{[l]}\right)^2\right] = \frac{d^{[l-1]}v}{2}\mathbb{E}\left[\left(z^{[l-1]}\right)^2\right]$$

Para mantener la variabilidad se propone $(\mathrm{w}^{[l]})_{i,j} \sim \mathcal{N}\left(0, \frac{2}{d^{[l-1]}}\right)$ para matrices que multiplican salidas de ReLU. (He Normal Initialization)
Otras inicializaciones:

- $(\mathrm{w}^{[l]})_{i,j} \sim \mathcal{N}\left(0, \frac{1}{d^{[l-1]}}\right)$ (Lecun Normal Initialization)
- $(\mathrm{w}^{[l]})_{i,j} \sim \mathcal{N}\left(0, \frac{2}{d^{[l-1]}+d^{[l]}}\right)$ (Glorot Normal Initialization)
- $(\mathrm{w}^{[l]})_{i,j} \sim \mathcal{U}\left(-\sqrt{\frac{6}{d^{[l-1]}+d^{[l]}}}, \sqrt{\frac{6}{n^{[l-1]}+n^{[l]}}}\right)$ (Glorot Uniform Initialization)
- Normales truncadas (si excede 2 desvíos va de nuevo)

He et al. 2015: "Delving Deep into Rectifiers: Surpassing Human-Level Performance on ImageNet Classification".

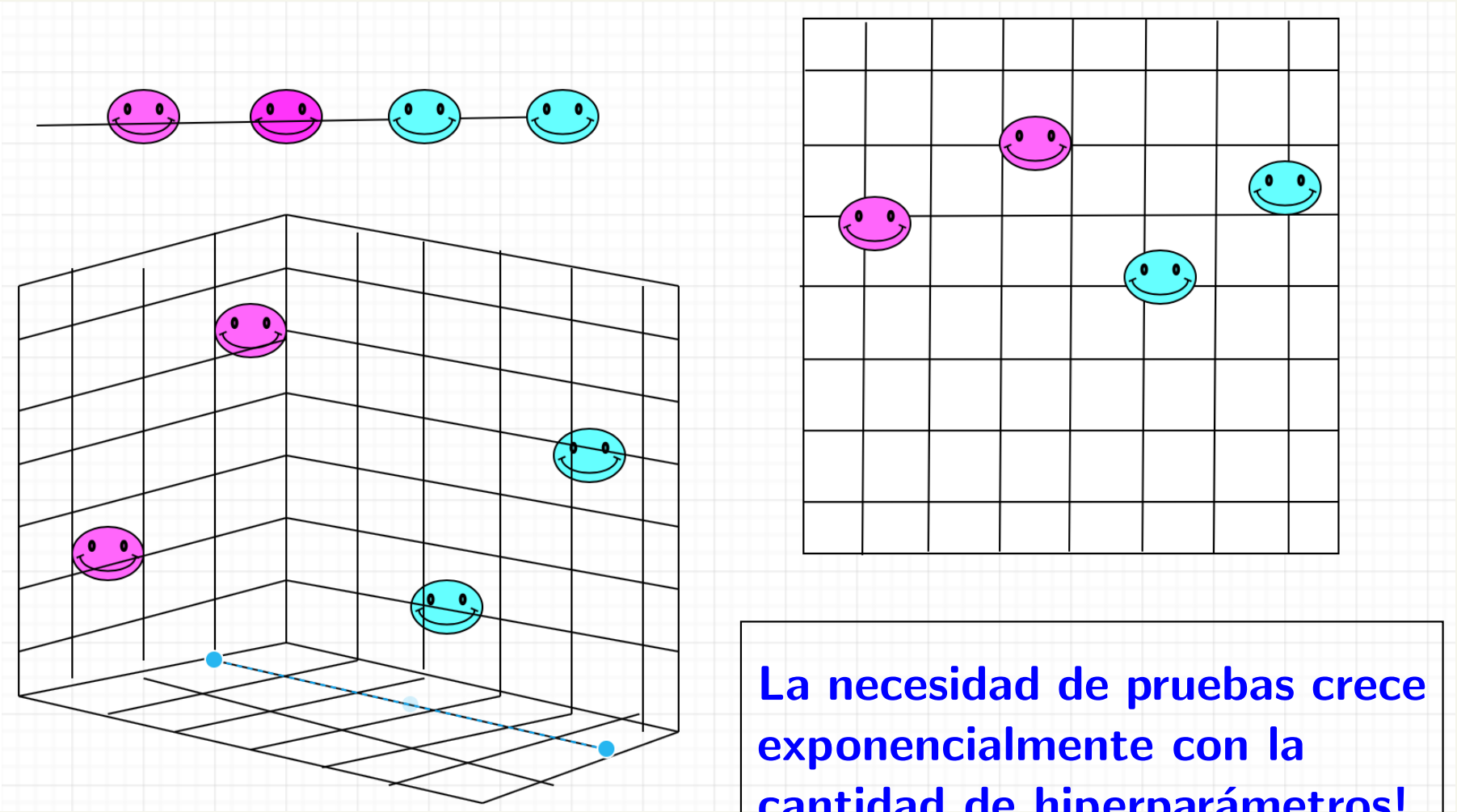
Glorot-Bengio 2010: "Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks"

Agenda

1. Vanishing/Exploting
2. Tuneo de hiperparámetros
3. Underfitting y Overfitting
4. Regularización
   - Weight-decay
   - Dropout
   - Data augmentation
   - Early stopping
   - Autoencoders como regularización

La maldición de la dimensionalidad

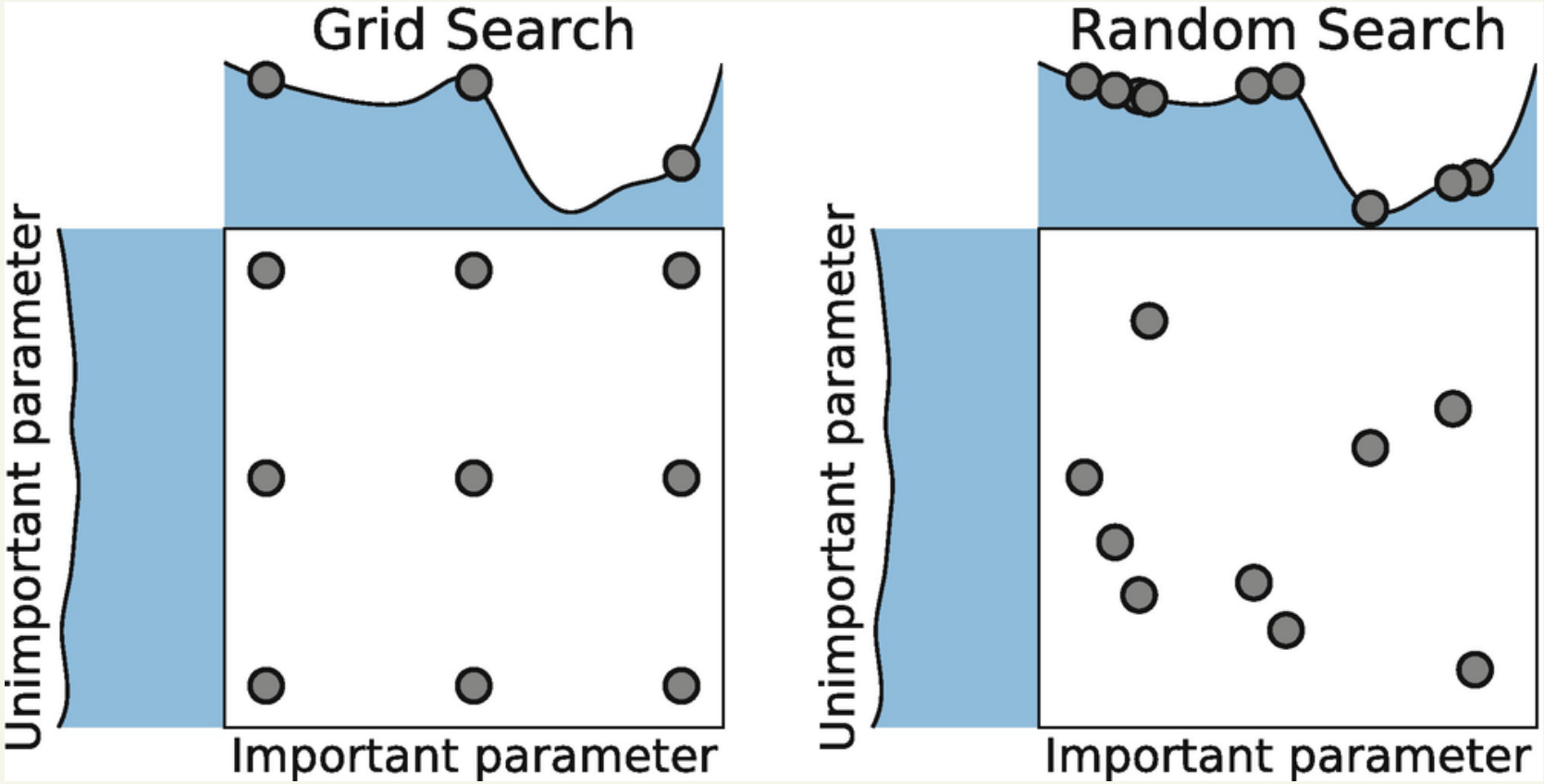
La maldición también aplica a los hiperparámetros



La necesidad de pruebas crece exponencialmente con la cantidad de hiperparámetros!

Búsqueda aleatoria

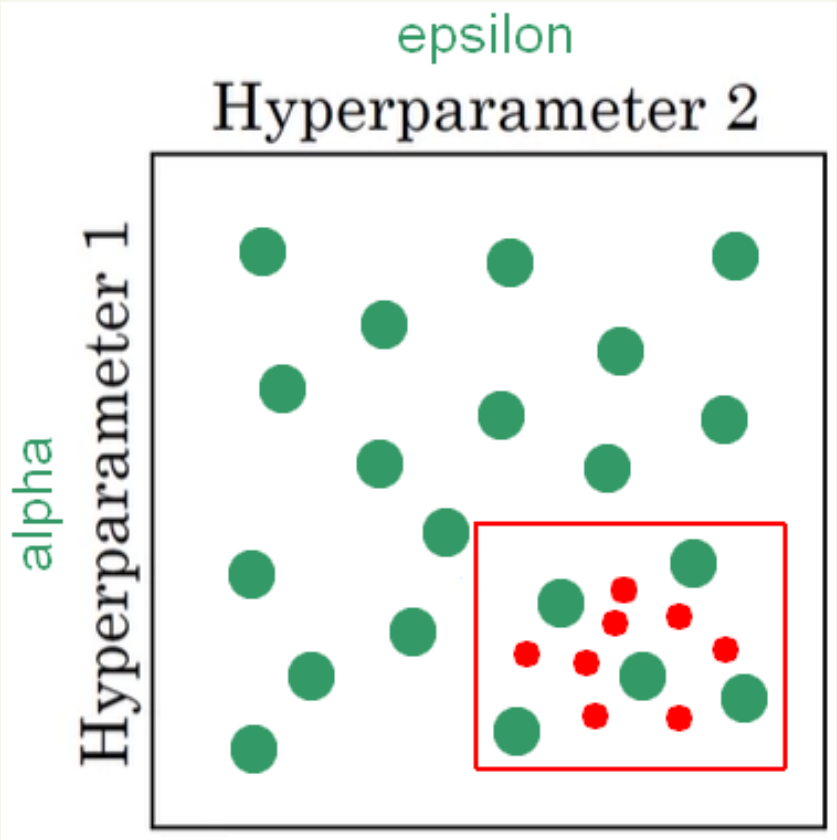
No todos los hiperparámetros son igual de importantes (ej. α y ϵ)



Random search nos permite variar muchas veces todos los parámetros.

Búsqueda aleatoria

Hacerlo por etapas permite aprovechar más las simulaciones.



Simulo unos pocos puntos, veo donde está andando mejor y vuelvo a simular dentro de ese entorno.

Sensibilidad

La sensibilidad de los parámetros no necesariamente es uniforme. Para la cantidad de layers o la cantidad de unidades ocultas parece razonable elegir al azar (equiprobable), pero para otros parámetros no es así.

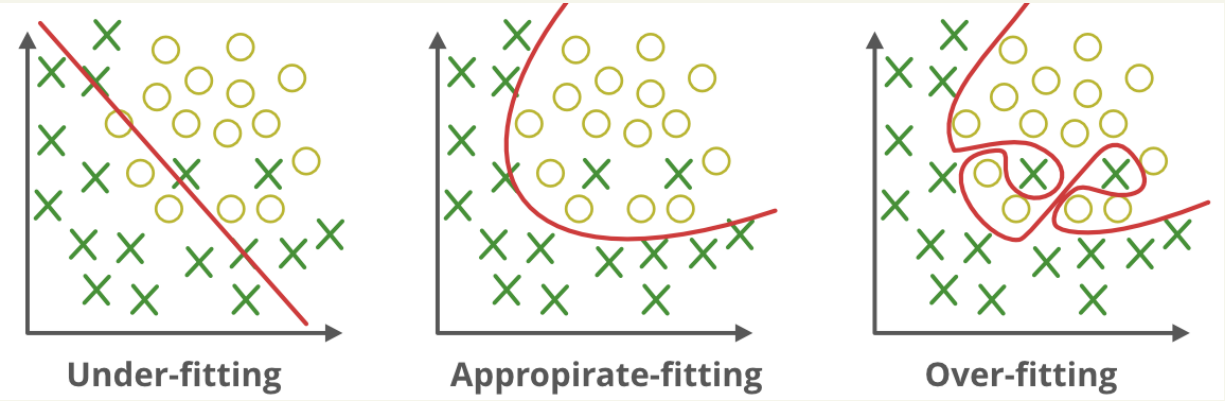
Algunos ejemplos:

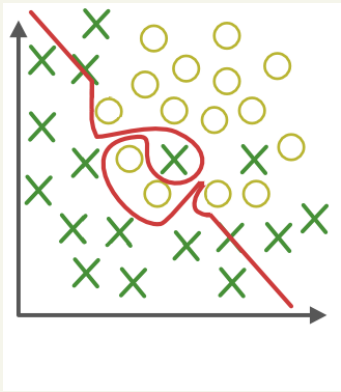
- Learning Rate α: Supongamos que decido que $\alpha \in [0.0001, 1]$. En este caso se suele simular $\alpha = 10^{-4U}$ con $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$.
- Weighted average rate β: Supongamos que decido que $\beta \in [0.9, 0.999]$. En este caso se suele simular $\beta = 1 - 10^{-4U+1}$ con $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$.

Agenda

1. Vanishing/Exploting
2. Tuneo de hiperparámetros
3. Underfitting y Overfitting
4. Regularización
   - Weight-decay
   - Dropout
   - Data augmentation
   - Early stopping
   - Autoencoders como regularización

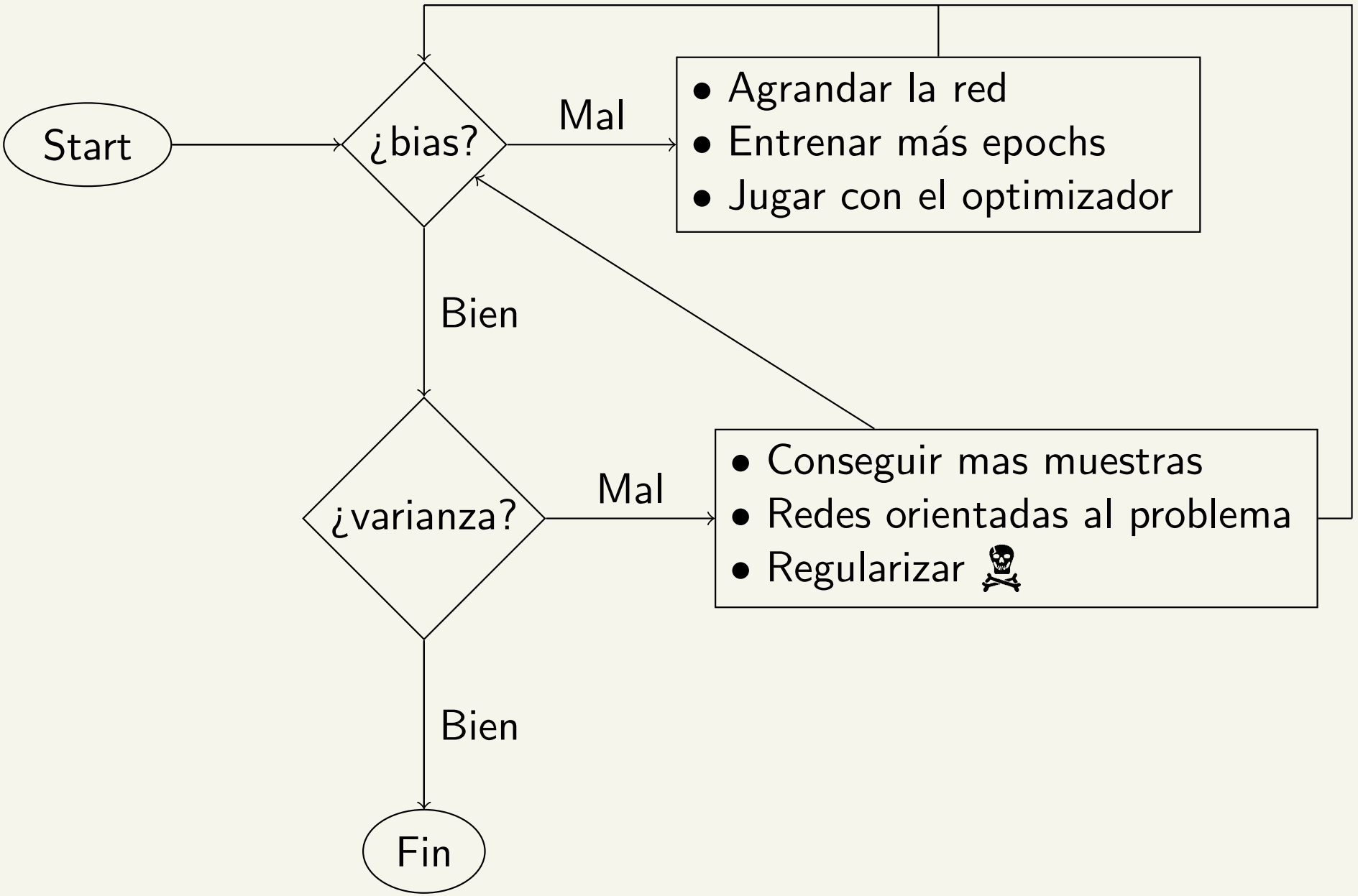
Underfitting y Overfitting





Train Error	1%	15%	15%	0.5%
Validation Error	11%	16%	30%	1%
Problema	Varianza	Sesgo (opt$\approx$ 0)	Ambos (opt$\approx$ 0)	✓

Propuesta de algortimo (primeras iteraciones)



Atacar el punto débil (refinamiento)

¿Que conviene corregir? ¿Sesgo o varianza?

- **Avoidable bias**: Error de train - Error bayesiano
- **Generalization Gap**: Error de validación - Error de train

Ambos problemas se atacan por separado!

Tipos de regularizaciones (algunos)

¿Cómo mejorar la capacidad de generalización del algoritmo?

- **Término de penalización (o regularizador)**: Incluir un término adicional en la función costo.
- **Inyección de ruido**: Incluir algún tipo de ruido en el proceso de aprendizaje.
- **Early stopping (parado temprano)**: Detener el proceso de aprendizaje tempranamente con algún criterio razonable.
- **Aumento de datos**: Generar nuevas muestras a partir de las muestras con las que contamos.
- **Auto-encoders**: Agregar una etapa no supervisada.

Tipos de regularizaciones (algunos)

¿Cómo mejorar la capacidad de generalización del algoritmo?

- **Término de penalización (o regularizador)**: Incluir un término adicional en la función costo.
- **Inyección de ruido**: Incluir algún tipo de ruido en el proceso de aprendizaje.
- **Early stopping (parado temprano)**: Detener el proceso de aprendizaje tempranamente con algún criterio razonable.
- **Aumento de datos**: Generar nuevas muestras a partir de las muestras con las que contamos.
- **Auto-encoders**: Agregar una etapa no supervisada.

Para la regularización es clave el conjunto de validación!

Penalización

Término de penalización que perturba la optimización de la función costo:

$$J(\theta) = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^{B} L_i(\theta) + \lambda R(\theta)$$

Penalización

Término de penalización que perturba la optimización de la función costo:

$$J(\theta) = \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{B} L_i(\theta) + \lambda R(\theta)$$

Motivación: Error de generalización

El regularizador trata ser representativo del error de generalización:

$$\mathbb{E}[L(\theta)] = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_i(\theta) + \left(\mathbb{E}[L(\theta)] - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_i(\theta)\right)$$

Penalización

Término de penalización que perturba la optimización de la función costo:

$$J(\theta) = \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{B} L_i(\theta) + \lambda R(\theta)$$

Motivación: Error de generalización

El regularizador trata ser representativo del error de generalización:

$$\mathbb{E}[L(\theta)] = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_i(\theta) + \left(\mathbb{E}[L(\theta)] - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_i(\theta)\right)$$

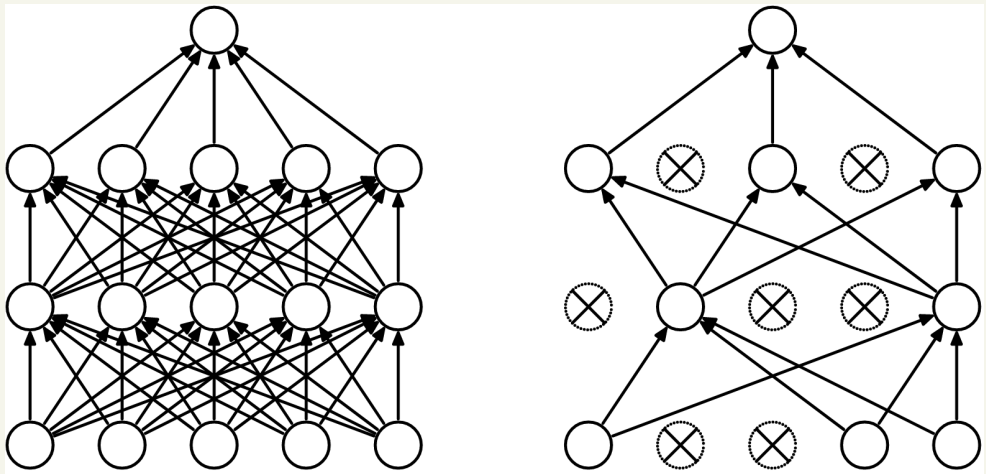
Weight decay or L2 regularization

$$J(\theta) = \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{B} L_i(\theta) + \sum_{l=1}^{L} \frac{\lambda_l}{2} \cdot \|\mathrm{W}^{[l]}\|_F^2 \rightarrow \frac{1}{2}\frac{\partial \|\mathrm{W}^{[l]}\|_F^2}{\partial \mathrm{W}^{[l]}} = \mathrm{W}^{[l]}$$

Penalización en deep Learning: Weight decay

Interpretación 1: Apagar neuronas

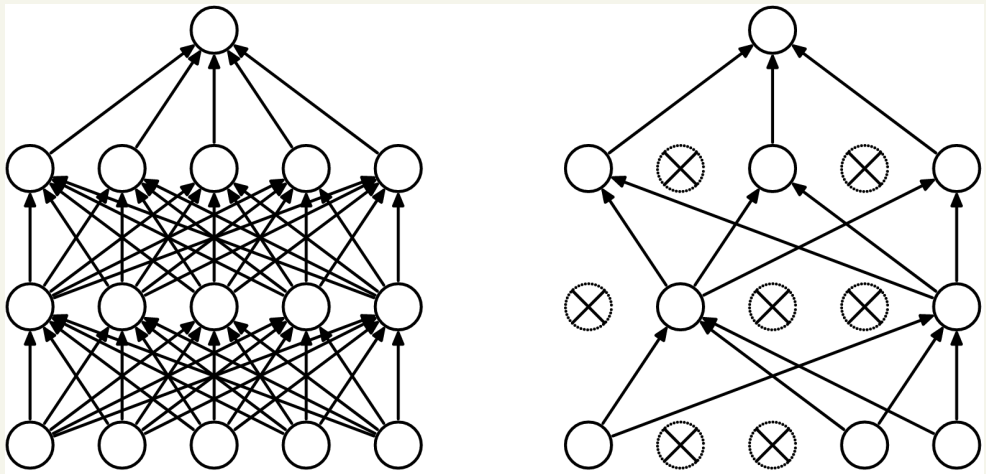
$w_{i,j}^{[l]} \approx 0$ simplifica la complejidad del modelo.



Penalización en deep Learning: Weight decay

Interpretación 1: Apagar neuronas

$w_{i,j}^{[l]} \approx 0$ simplifica la complejidad del modelo.



Interpretación 2: Disminuir el máximo valor de la función costo

$$\mathbb{E}[L(\theta)] - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_i(\theta) \leq \max_{\phi \in \Theta} L(\phi)$$

Evita explosiones!

Inyección de ruido

Se agrega ruido **ÚNICAMENTE** durante el entrenamiento.

Tipos de inyección de ruido

- En los parámetros (no tan habitual)
- En las entradas (relacionado con data-augmentation)
- **En las unidades ocultas**

Srivastava et al. 2014: "Dropout: A simple way to prevent neural networks from overfitting".

Inyección de ruido

Se agrega ruido **ÚNICAMENTE** durante el entrenamiento.

Tipos de inyección de ruido

- En los parámetros (no tan habitual)
- En las entradas (relacionado con data-augmentation)
- **En las unidades ocultas**

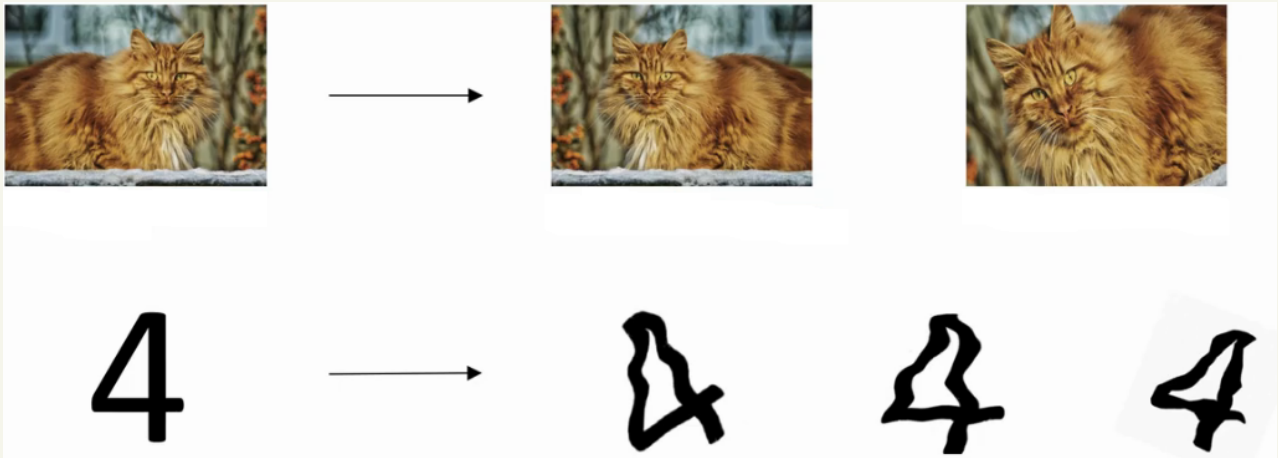
Dropout (inverted dropout technique)

$$z^{[l]} = W^{[l]} \left(h^{[l-1]} \odot \frac{1}{p_{\text{keep}}^{[l-1]}} \boldsymbol{\eta}^{[l-1]} \right) + b^{[l]}, \qquad \text{con } \boldsymbol{\eta}^{[l-1]} \sim \text{Ber}\left(p_{\text{keep}}^{[l-1]} \right)$$

Srivastava et al. 2014: "Dropout: A simple way to prevent neural networks from overfitting".

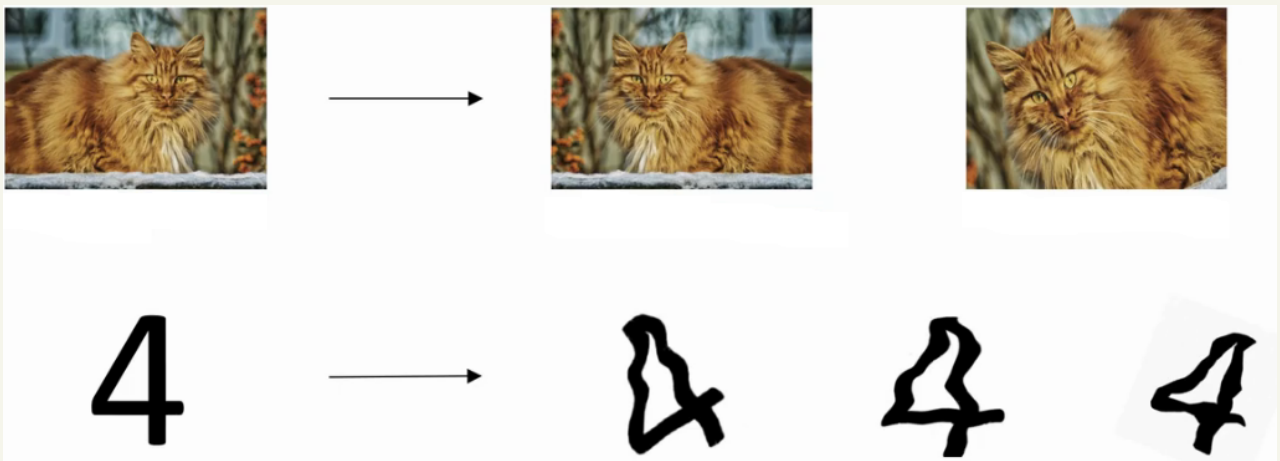
Data augmentation

Generar nuevas muestras inyectándole ruido a las que tenemos (noise inyection a la entrada). Normalmente se incrementa la cantidad de muestras (no se reemplazan unas por otras). Muy poderoso cuando se usa información adicional sobre como pueden variar las muestras.



Data augmentation

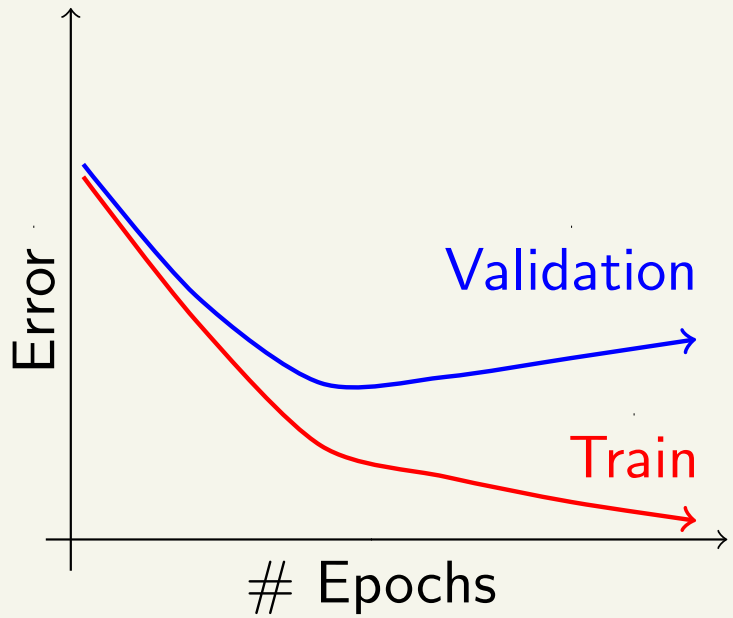
Generar nuevas muestras inyectándole ruido a las que tenemos (noise inyection a la entrada). Normalmente se incrementa la cantidad de muestras (no se reemplazan unas por otras). Muy poderoso cuando se usa información adicional sobre como pueden variar las muestras.



- Se incrementa la cantidad de muestras.
- Las nuevas muestras son más robustas a perturbaciones.
- Se pierde la independencia entre muestras.

Early stopping

Para de entrenar antes!



- PRO: Para en el punto óptimo para la validación.
- CONTRA: Impacta directamente en el bias.

Early stopping: Hiperparámetros más importantes

- **monitor**: Que métrica usamos para parar: “val_loss”, “val_accuracy”, “loss” o “accuracy”.
- **min_delta**: Mínima variación que se considera una mejora (por debajo de esta no se considera mejora).
- **patience**: Cantidad de epochs que es aceptable no ver mejoras.
- **restore_best_weights**: En lugar de quedarte con el último modelo se queda con el mejor.

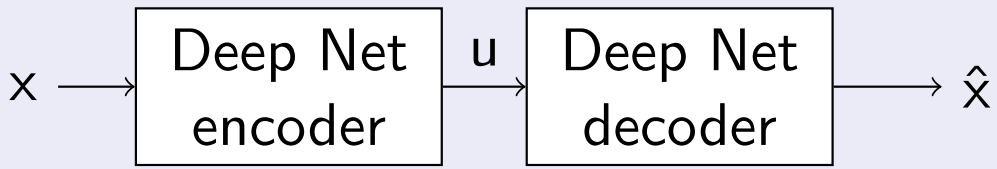
Configuración por default:

monitor=val_loss, min_delta=0, patience=0, restore_best_weights=False

Autoencoder

Método de aprendizaje no supervisado que busca generar reprsentaciones (típicamente de menor dimensión) al estilo PCA.

Diagrama en bloques

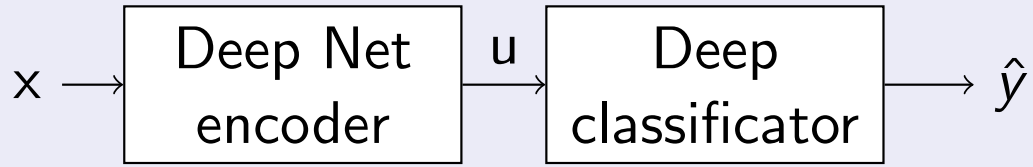


- La función costo más habitual es el error cuadrático medio $\mathbb{E}\left[\|X - \hat{X}\|_2^2\right]$.
- En un principio, las redes encoder y la decoder debían ser "espejadas", hoy por hoy esto no es obligatorio.

Autoencoder como regularización para la clasificación

Preprocesing: Opción 1

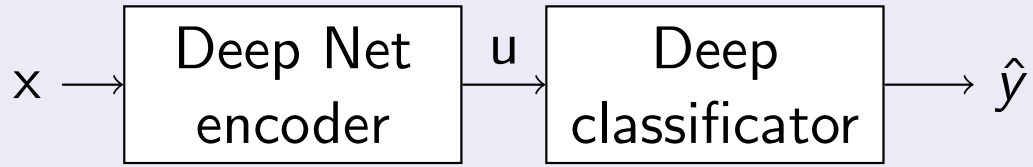
Entrenar el autoencoder y luego usar los u para entrenar el clasificador.



Autoencoder como regularización para la clasificación

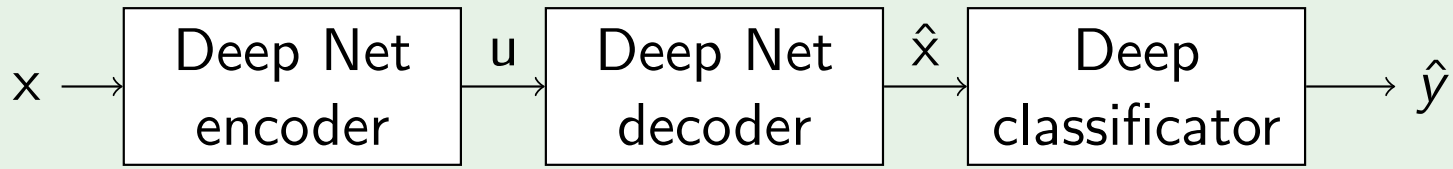
Preprocesing: Opción 1

Entrenar el autoencoder y luego usar los u para entrenar el clasificador.



Preprocesing: Opción 2

Entrenar el autoencoder y luego usar los $\hat{x}$ para entrenar el clasificador.

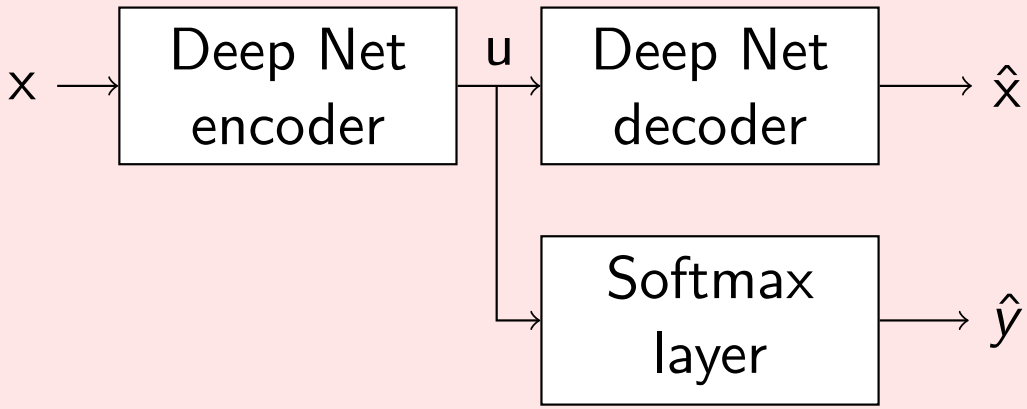


Autoencoder como regularización para la clasificación

Regularizador: Opción 3

Entrenar simultáneamente ponderando las funciones costo

$J(\theta) = \beta J_{\text{clas}}(\theta) + (1 - \beta) J_{\text{ae}}(\theta)$



A programar!