Санкт-Петербургский государственный университет
Кафедра информатики

Реализация и внедрение архитектуры Gated Recurrent Unit в пакет DEGANN

Мурадян Денис Степанович, группа 23.Б16-мм

Научный руководитель: доцент кафедры системного программирования, к.ф.-м.н., Гориховский В. И.
Консультант: Преподаватель СПбГУ, Алимов П. Г.

Санкт-Петербург
2025

Введение

- Дифференциальные уравнения широко применяются в науке и технике
- Традиционные численные методы сталкиваются с проблемами, связанными с длительным вычислением и недостаточной точностью
- Библиотека для нейросетевой аппроксимации дифференциальных уравнений
- Цель работы: интеграция архитектуры GRU в DEGANN

Архитектура RNN и GRU

- **RNN (Recurrent Neural Networks):**
  - Преимущества: используют скрытые состояния для учёта временных зависимостей.
  - Проблемы: затухание и взрыв градиентов, затрудняющие обучение на длинных последовательностях.
- **GRU (Gated Recurrent Unit):**
  - обновляющий (z_t) и сбрасывающий (r_t) гейты:

$$z_t = \sigma(W_z \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_z), \quad r_t = \sigma(W_r \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_r)$$

  - Новое состояние:

$$h_t = z_t \odot h_{t-1} + (1 - z_t) \odot \tilde{h}_t, \quad \tilde{h}_t = \tanh(W_h \cdot [r_t \odot h_{t-1}, x_t] + b_h)$$

- **Преимущества GRU:**
  - Сохраняет зависимость в последовательности данных
  - Частично решает затухание градиентов, учитывая долгосрочные зависимости.
  - Компактная структура.

Рекуррентные слои в TensorFlow

- **Использование TensorFlow:**
  - Для реализации GRU использовался встроенный слой `tf.keras.layers.GRU`.
  - Слой предоставляет механизмы управления потоками данных:
    - ⋆ Обновляющий и сбрасывающий гейты.
    - ⋆ Поддержка скрытых состояний.
  - Интеграция GRU с TensorFlow позволяет сосредоточиться на настройке модели и анализе её поведения, а так же настройке гиперпараметров.
- **Существующая проблема:**
  - Текущая версия DEGANN имеет только полносвязные сети, что ограничивает возможности аппроксимации сложных функций.
- **Выводы:**
  - GRU может помочь в аппроксимации для дифференциальных уравнений, где каждое значение функции связано с предыдущими.
  - Архитектура GRU решает проблему затухания градиентов, присущую классическим RNN.
  - TensorFlow предоставляет гибкие инструменты для разработки и ускоряет процесс интеграции.

Постановка задачи

Целью работы является реализация и внедрение рекуррентных нейронных сетей с архитектурой GRU в пакет DEGANN

Задачи:

- Общая архитектура решения
  1. Реализация модуля с топологией рекуррентной сети со слоями tensorflow для архитектуры GRU и внедрение его в пакет DEGANN.
  2. Создание модели с архитектурой GRU. Создание и интеграция callback-функции для расширения функциональности обучения и его трекинга.
- Валидация решения
  1. Создание датасета для корректной передачи данных в модель. Реализация сложно-аппроксимируемой функции для тестирования.
  2. Подбор метрики, настройка гиперпараметров.

Реализация модуля с топологией рекуррентной сети GRU

- **Класс TensorflowGRUNet:**
  - Наследуется от `tf.keras.Model`.
  - Реализует логику построения и инициализации GRU-слоёв.
  - Поддерживает настройку параметров, таких как `input_size`, `block_size`, `output_size`, `dropout_rate`.
- **Интеграция в DEGANN:**
  - Через параметр `net_type="GRUNet"` в `IModel`.
  - Единообразный интерфейс для различных типов сетей (DenseNet, GRUNet).
- **Принципы работы:**
  - Все слои GRU имеют одинаковое количество нейронов.
  - После каждого слоя применяется `Dropout` для предотвращения переобучения.
  - Функция `call` выполняет последовательный проход данных через GRU-слои и выходной слой.
- **Особенности:**
  - Совместимость с другими модулями DEGANN.
  - Экспорт параметров через метод `to_dict`.

Модель и callback-функции

- **Создание модели:**
  - Использована стандартная архитектура DEGANN на базе класса `IModel`.
  - При создании модели мы просто наследуемся от `IModel` и передаем нужные параметры сети.
- **Основные callback-функции:**
  - `EarlyStopping`: Раннее прекращение обучения при отсутствии улучшений.
  - `SaveBestModel`: Сохранение параметров модели с минимальной валидационной ошибкой.
  - `VisualizationTS`: Визуализация функции потерь и предсказаний модели. На графиках можно посмотреть на качество аппроксимации функции.
- **Цели callback-функций:**
  - Отслеживание метрик и динамики обучения. (используем записи history из Tensorflow)
  - Оптимизация процесса обучения и предотвращение переобучения.
  - Удобный анализ и визуализация результатов.

Датасет и сложно-аппроксимируемая функция

- **Генерация датасета:**
  - Использован инструмент DEGANN для генерации данных.
  - Выбрана сложно-аппроксимируемая функция `hardsin`:

$$f(x) = \sin\left(\ln(x^{\sin(10x)})\right)$$

  - График функции предоставлен на следующем слайде
- **Создание временных последовательностей:**
  - Преобразование данных в последовательности длиной `time_steps`.
  - Это позволяет GRU использовать контекст предыдущих шагов.
- **Добавление шума:**
  - Шум с нормальным (Гауссовским) распределением.
  - Повышает устойчивость модели и адаптацию к реальным данным.

Подбор метрики, настройка гиперпараметров

- **Функция потерь:**
  - Использована среднеквадратичная ошибка (MSE):

$$\text{MSE} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2$$

  - MSE минимизирует крупные отклонения и стабилизирует сходимость.
- **Гиперпараметры модели:**
  - **Количество слоёв**: 5, **нейронов в слое**: 30.
- **Оптимизатор:**
  - Выбран *Adam*, который стабилизирует градиентный спуск и адаптирует скорость обучения.
  - Эффективен для временных последовательностей и рекуррентных сетей.

Экспериментальное исследование

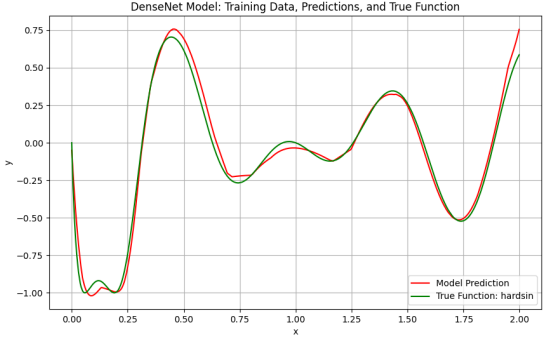
- **Цель эксперимента:**
  - Сравнить рекуррентные и полносвязные сети на задачах аппроксимации функций.
  - Оценить время обучения, значение функции потерь (лосс) и качество аппроксимации.
- **Условия эксперимента:**
  - Архитектура:
    - ★ Количество слоёв: 5.
    - ★ Количество нейронов в слое: 30.
  - Количество эпох: 100, 200, 500, 1000 (тестирование на разных значениях).
- **Набор данных:**
  - Использованы встроенные функции DEGANN и функция `hardsin`.
  - `hardsin` была выбрана из-за её сложной математической структуры, которая делает её трудной для аппроксимации.
  - Набор данных позволяет объективно оценить возможности архитектур для задач аппроксимации.

- **Исследовательские вопросы:**
  - RQ1: Способна ли рекуррентная сеть аппроксимировать встроенные функции DEGANN с меньшим значением функции потерь MSE по сравнению с полносвязной сетью?
  - RQ2: Насколько значительна разница в точности аппроксимации и скорости обучения?
- **Итоги:**
  - Эксперимент находится на стадии проведения.
  - Полные результаты анализа будут готовы на завершающем этапе работы.

Результаты аппроксимации функции hardsin

Training loss = 0.002620

Validation loss = 0.00145



Training loss = 0.004589

Validation loss = 0.003332

Результаты

- Разработан и реализован модуль с топологией рекуррентной сети для архитектуры GRU, интегрированный в библиотеку DEGANN.
- Создана модель с архитектурой GRU, включающая следующие callback-функции:
  - Раннее прекращение обучения.
  - Сохранение лучшей модели.
  - Визуализация результатов обучения.
- Подготовлены специальные датасеты для тестирования, включая сложно-аппроксимируемую функцию `hardsin`. Реализовано добавление шума для повышения устойчивости модели.
- Проведён подбор функции потерь (MSE) и настройка гиперпараметров, обеспечившая баланс между качеством аппроксимации и вычислительными затратами.

Дальнейшее развитие работы

Дальнейшее развитие работы и планы:

- Работа с экспериментами и более глубокий анализ результатов пока находятся на стадии тестирования.
- Планируется разработать кастомную реализацию слоёв GRU для расширения функционала DEGANN.
- Продолжить тестирование модели на дополнительных наборах данных.

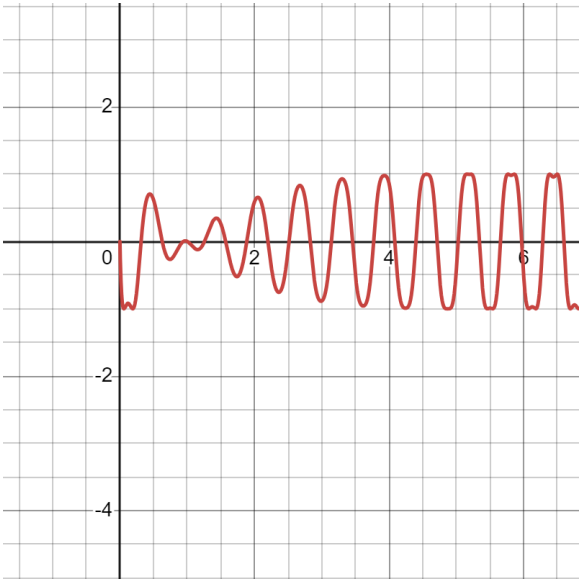
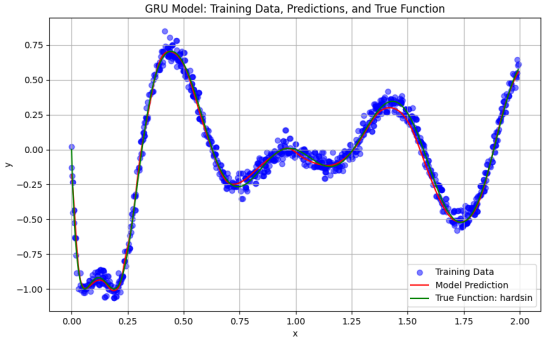
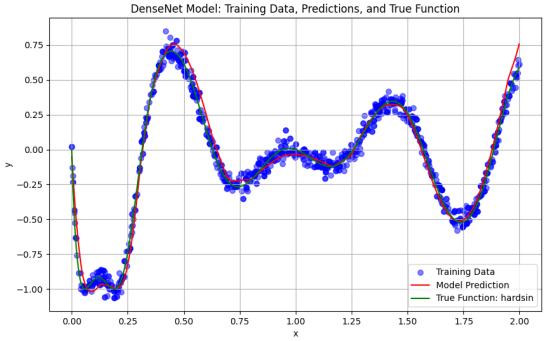


Рис.: График функции $f(x) = \sin\left(\ln(x^{\sin(10x)})\right)$

Приложения


GRU Model: Training Data, Predictions, and True Function
Training Data
Model Prediction
True Function: hardsin
x
y


DenseNet Model: Training Data, Predictions, and True Function
Training Data
Model Prediction
True Function: hardsin
x
y