# Глубокое обучение и вообще

Соловей Влад и Шигапова Фирюза

27 апреля 2021 г.

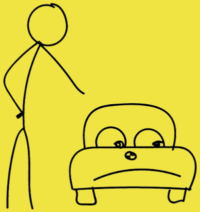
**Посиделка 4:** эвристики для обучения сеток

Risk modelling.research

# Agenda

- И еще раз об backprop
- Какими бывают функции активации
- Инициализация весов в нейросетках
- Нормализация по батчам
- Dropout
- Другие эвристики, используемые при обучении нейронных сетей

# Так как же обучить нейросетку?



Ты необучаем!

# Нейросеть — сложная функция

- Прямое распространение ошибки (forward propagation):

$$X \Rightarrow X \cdot W_1 \Rightarrow f(X \cdot W_1) \Rightarrow f(X \cdot W_1) \cdot W_2 \Rightarrow \ldots \Rightarrow \hat{y}$$

- Считаем потери:

$$Loss = \frac{1}{2}(y - \hat{y})^2$$

- Для обучения нужно использовать градиентный спуск

# Как обучить нейросеть?

$$L(W_1, W_2) = \frac{1}{2} \cdot (y - f(X \cdot W_1) \cdot W_2)^2$$

Секрет успеха в умении брать производную и градиентном спуске.

$$f(g(x))' = f'(g(x)) \cdot g'(x)$$

$$\frac{\partial L}{\partial W_2} = -(y - f(X \cdot W_1) \cdot W_2) \cdot f(X \cdot W_1)$$
$$\frac{\partial L}{\partial W_1} = -(y - f(X \cdot W_1) \cdot W_2) \cdot W_2 f'(X \cdot W_1) \cdot W_1$$

Risk
modelling.research

# Как обучить нейросеть?

$$L(W_1, W_2) = \frac{1}{2} \cdot (y - f(X \cdot W_1) \cdot W_2)^2$$

Секрет успеха в умении брать производную и градиентном спуске.

$$f(g(x))' = f'(g(x)) \cdot g'(x)$$

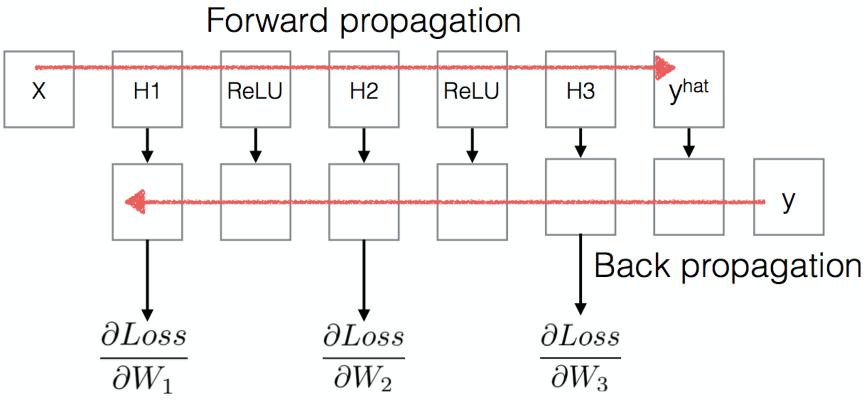
$$\frac{\partial L}{\partial W_2} = -(y - f(X \cdot W_1) \cdot W_2) \cdot f(X \cdot W_1)$$

$$\frac{\partial L}{\partial W_1} = -(y - f(X \cdot W_1) \cdot W_2) \cdot W_2 f'(X \cdot W_1) \cdot W_1$$

Дважды ищем одно и то же $\Rightarrow$ оптимизация поиска производных даст нам алгоритм обратного распространения ошибки (back-propagation)

Risk modelling.research

# Back-propagation

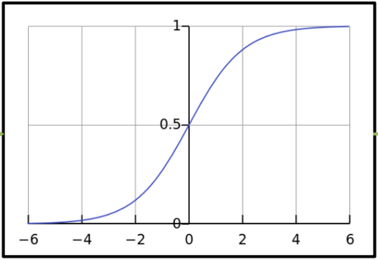


# Какими бывают функции активации и как через них пробросить градиент

Risk modelling.research

# Sigmoid activation

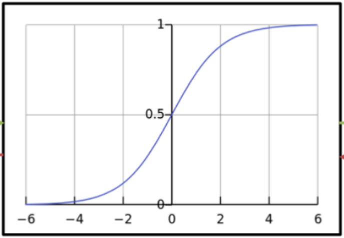
$x$




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

# Sigmoid activation

$x$




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

$$\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{\partial L}{\partial \sigma}\frac{\partial \sigma}{\partial x}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \sigma}$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x} = \sigma(x)(1 - \sigma(x))$$

Risk
modelling.research

# Паралич сети

- В случае сигмоиды $\sigma'(x) = \sigma(x) \cdot (1 - \sigma(x))$
- Сигмоида принимает значения на отрезке $[0; 1]$, значит максимальное значение её производной это $\frac{1}{4}$
- Если сеть очень глубокая, происходит затухание градиента
- Градиент затухает экспоненциально $\Rightarrow$ сходимость замедляется, более ранние веса обновляются дольше, более глубокие веса быстрее $\Rightarrow$ значение градиента становится ещё меньше $\Rightarrow$ наступает паралич сети
- В сетях с небольшим числом слоёв этот эффект незаметен

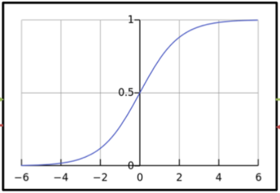
Risk
modelling.research

# Центрирование

- Сигмоида не центрирована относительно нуля
- Выход слоя мы обычно находим как $o_i = \sigma(h_i)$, он всегда положительный, значит градиент по весам, идущим на вход в текущий нейрон тоже положительные $\Rightarrow$ они обновляются в одинаковом направлении
- Сходимость идёт медленнее и зигзагообразно, но идёт

# Sigmoid activation

$x$




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

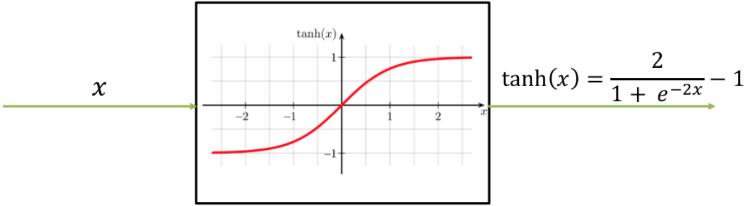
$$\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{\partial L}{\partial \sigma}\frac{\partial \sigma}{\partial x}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \sigma}$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x} = \sigma(x)(1 - \sigma(x))$$

- Способствует затуханию градиента
- Не центрирована относительно нуля
- Вычислять $e^x$ дорого

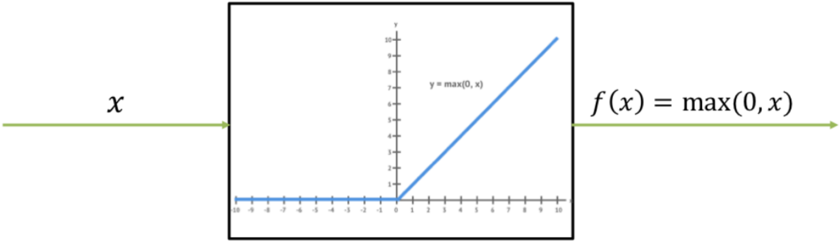
# Tanh activation




- Центрирован относительно нуля
- Всё ещё похож на сигмоиду
- $f'(x) = 1 - f(x)^2 \Rightarrow$ затухание градиента

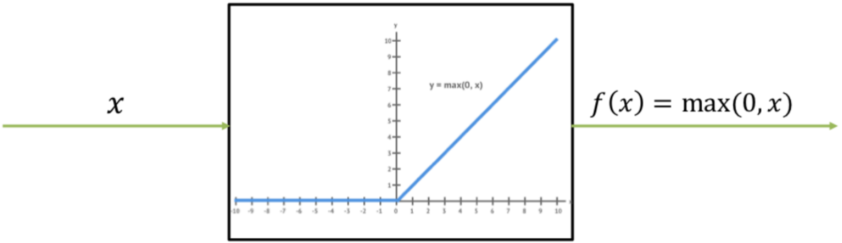
Risk modelling.research

# ReLU activation



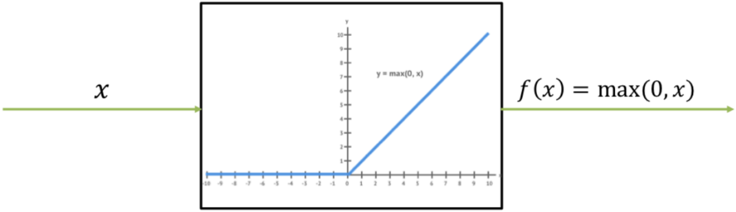

- Быстро вычисляется
- Градиент не затухает
- Сходимость сеток ускоряется

# ReLU activation



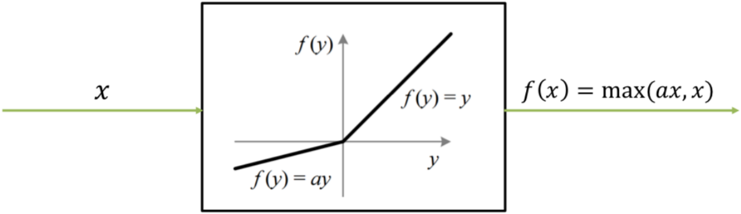

- Сетка может умереть, если активация занулится на всех нейронах
- Не центрирован относительно нуля

# Зануление ReLU




- $f(x) = \max(0, w_0 + w_1 \cdot h_1 + \ldots + w_k \cdot h_k)$
- Если $w_0$ инициализировано большим отрицательным числом, нейрон сразу умирает $\Rightarrow$ надо аккуратно инициализировать веса

# Leaky ReLU activation




- Как ReLU, но не умирает, всё ещё легко считается
- Производная может быть любого знака
- Важно, чтобы $a \neq 1$, иначе линейность

Risk modelling.research

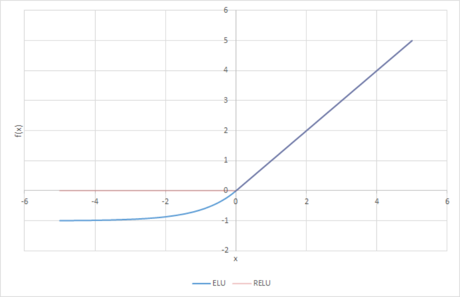
# Что же выбрать

- Обычно начинают с $ReLU$, если сетка умирает, берут $LeakyReLU$
- $ReLU$ — стандартный выбор для свёрточных сетей
- В рекурентных сетках чаще всего предпочитается $tanh$
- На самом деле это не очень важно, нужно держать в голове свойства функций, о которых выше шла речь и понимать, что от перебора функций обычно выигрыш в качестве довольно низкий
- Но есть и исключения ...

Краткий обзор функций активаций: https://arxiv.org/pdf/1804.02763.pdf

Risk modelling.research

# ELU activation




- ELU улучшает сходимость для глубоких сеток

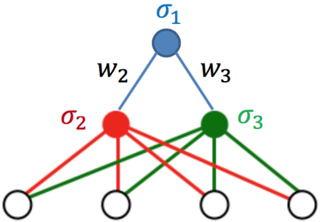
$$f(x) = \begin{cases} x, x \geq 0 \\ \alpha \cdot (e^x - 1), x < 0 \end{cases}$$

https://arxiv.org/pdf/1511.07289.pdf

Risk
modelling.research

# Инициализация весов

# Инициализация весов

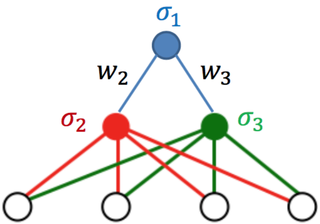



$$\frac{\partial L}{\partial w_2} = \frac{\partial L}{\partial \sigma_1}\sigma_1(1-\sigma_1)\sigma_2$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_3} = \frac{\partial L}{\partial \sigma_1}\sigma_1(1-\sigma_1)\sigma_3$$

- Что будет, если инициализировать веса нулями?

# Инициализация весов

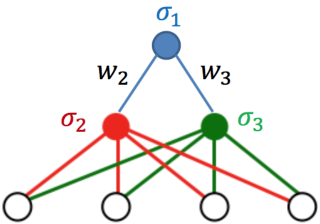



$$\frac{\partial L}{\partial w_2} = \frac{\partial L}{\partial \sigma_1}\sigma_1(1-\sigma_1)\sigma_2$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_3} = \frac{\partial L}{\partial \sigma_1}\sigma_1(1-\sigma_1)\sigma_3$$

- Что будет, если инициализировать веса нулями?
- $\sigma_2$ и $\sigma_3$ будут обновляться одинаково

# Инициализация весов



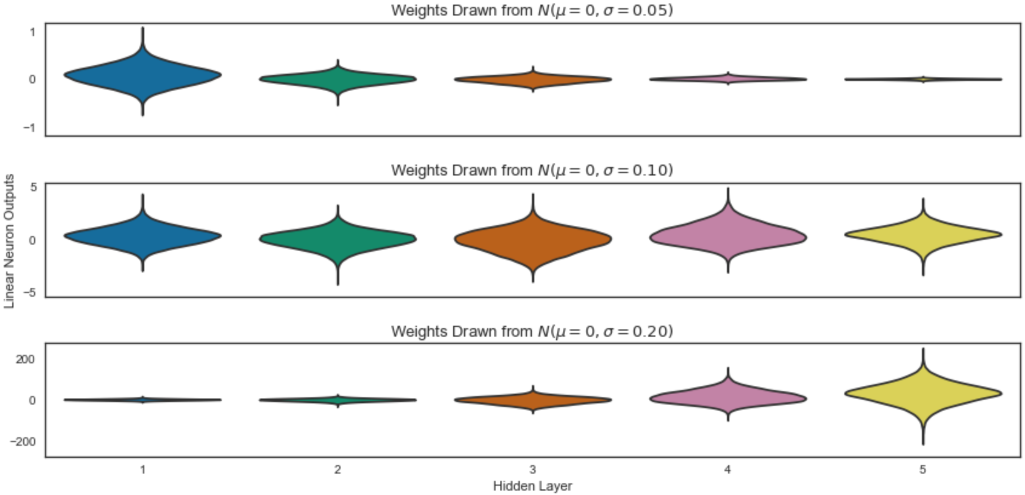

$$\frac{\partial L}{\partial w_2} = \frac{\partial L}{\partial \sigma_1}\sigma_1(1-\sigma_1)\sigma_2$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_3} = \frac{\partial L}{\partial \sigma_1}\sigma_1(1-\sigma_1)\sigma_3$$

- Хочется уничтожить симметрию
- Обычно инициализируют маленькими рандомными числами из какого-то распределения (нормальное, равномерное)

Risk modelling.research

# Симметричный случай




Risk modelling.research

# Инициализация весов

- Наши признаки $X$ пришли к нам из какого-то распределения
- Выход слоя $f(XW)$ будет принадлежать другому распределению
- Если инициализировать веса неправильно, дисперсия распределения може от слоя к слою затухать (сигнал будет теряться) либо наоброт, возрастать (сигнал будет рассеиваться)
- Эмпирически было выяснено, что это может портить сходимость для глубоких сеток
- Хочется контролировать дисперсию

Risk modelling.research

# Инициализация весов

- Посмотрим на выход нейрона перед активацией:

$$h_i = w_0 + \sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i$$

- Дисперсия $h_i$ выражается через дисперсии $x$ и $w$
- Она не зависит от константы $w_0$
- Будем считать, что веса $w_1, \dots, w_k \sim iid$, наблюдения $x_1, \dots, x_n \sim iid$, а ещё $x_i$ и $w_i$ независимы между собой

Risk modelling.research

# Инициализация весов (симметричный случай)

$$\mathrm{Var}(h_i) = \mathrm{Var}(\sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathrm{Var}(w_i x_i) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\mathbf{E}(x_i)]^2 \cdot \mathrm{Var}(w_i) + [\mathbf{E}(w_i)]^2 \cdot \mathrm{Var}(x_i) + \mathrm{Var}(x_i) \cdot \mathrm{Var}(w_i)] =$$

Risk
modelling.research

# Инициализация весов (симметричный случай)

$$\mathrm{Var}(h_i) = \mathrm{Var}(\sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathrm{Var}(w_i x_i) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\mathrm{E}(x_i)]^2 \cdot \mathrm{Var}(w_i) + [\mathrm{E}(w_i)]^2 \cdot \mathrm{Var}(x_i) + \mathrm{Var}(x_i) \cdot \mathrm{Var}(w_i)] =$$

- Если функция активации симметричная, тогда $E(x_i) = 0$. Будем инициализировать веса с нулевым средним, тогда $E(w_i) = 0$.

# Инициализация весов (симметричный случай)

$$\mathrm{Var}(h_i) = \mathrm{Var}(\sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathrm{Var}(w_i x_i) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\mathrm{E}(x_i)]^2 \cdot \mathrm{Var}(w_i) + [\mathrm{E}(w_i)]^2 \cdot \mathrm{Var}(x_i) + \mathrm{Var}(x_i) \cdot \mathrm{Var}(w_i)] =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathrm{Var}(x_i) \cdot \mathrm{Var}(w_i)$$

- Если функция активации симметричная, тогда $E(x_i) = 0$. Будем инициализировать веса с нулевым средним, тогда $E(w_i) = 0$.

Risk modelling.research

# Инициализация весов (симметричный случай)

$$\mathrm{Var}(h_i) = \mathrm{Var}(\sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathrm{Var}(w_i x_i) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\mathrm{E}(x_i)]^2 \cdot \mathrm{Var}(w_i) + [\mathrm{E}(w_i)]^2 \cdot \mathrm{Var}(x_i) + \mathrm{Var}(x_i) \cdot \mathrm{Var}(w_i)] =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathrm{Var}(x_i) \cdot \mathrm{Var}(w_i) = \mathrm{Var}(x) \cdot [n_{in} \cdot \mathrm{Var}(w)]$$

Risk modelling.research

# Инициализация весов (симметричный случай)

$$\mathrm{Var}(h_i) = \mathrm{Var}(\sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathrm{Var}(w_i x_i) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\mathrm{E}(x_i)]^2 \cdot \mathrm{Var}(w_i) + [\mathrm{E}(w_i)]^2 \cdot \mathrm{Var}(x_i) + \mathrm{Var}(x_i) \cdot \mathrm{Var}(w_i)] =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathrm{Var}(x_i) \cdot \mathrm{Var}(w_i) = \mathrm{Var}(x) \cdot \underbrace{[n_{in} \cdot \mathrm{Var}(w)]}_{=1}$$

Risk modelling.research

# Плохая инициализация весов

Пущай

$$w_i \sim U\left[-\frac{1}{\sqrt{n_{in}}}; \frac{1}{\sqrt{n_{in}}}\right],$$

тогда

$$\mathrm{Var}(w_i) = \frac{1}{12} \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{n_{in}}} + \frac{1}{\sqrt{n_{in}}}\right)^2 = \frac{1}{3n_{in}} \Rightarrow Var(h_i) = \frac{1}{3}$$

Получаем затухание!

# Немного лучше

Пущай

$$w_i \sim U\left[-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{n_{in}}}; \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{n_{in}}}\right],$$

тогда

$$\mathrm{Var}(w_i) = \frac{1}{12} \cdot \left(\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{n_{in}}} + \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{n_{in}}}\right)^2 = \frac{1}{n_{in}} \Rightarrow Var(h_i) = 1$$

# Немного лучше

Пущай

$$w_i \sim U\left[-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{n_{in}}}; \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{n_{in}}}\right],$$

тогда

$$\mathrm{Var}(w_i) = \frac{1}{12} \cdot \left(\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{n_{in}}} + \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{n_{in}}}\right)^2 = \frac{1}{n_{in}} \Rightarrow Var(h_i) = 1$$

При forward pass на вход идёт $n_{in}$ набобдений, при backward pass на вход идёт $n_{out}$ градиентов $\Rightarrow$ канал с дисперсией может быть непостоянным, если число весов от слоя к слою сильно колеблется

Risk modelling.research

# Инициализация Ксавье (Глорота)

Для неодинаковых размеров слоёв невозможно удовлетворить обоим условиям, поэтому обычно усредняют:

$$w_i \sim U\left[-\frac{\sqrt{6}}{\sqrt{n_{out}+n_{in}}};\frac{\sqrt{6}}{\sqrt{n_{out}+n_{in}}}\right],$$

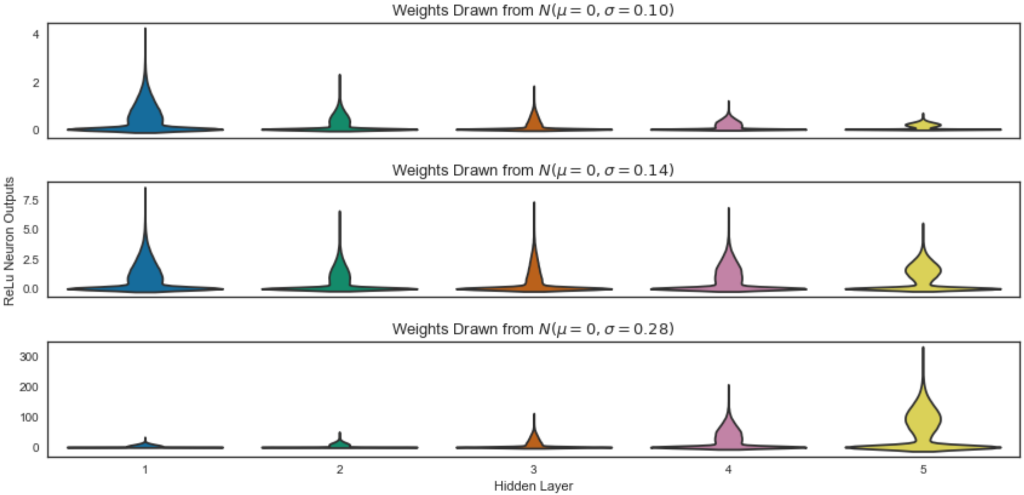
Такая инициализация называется инициализацией Ксавие (или Глоро)

По аналогии можно найти формулу для дисперсии нормального распределения, но это уже семинарская задачка :)

http://proceedings.mlr.press/v9/glorot10a/glorot10a.pdf

Risk
modelling.research

# Несимметричный случай




Risk
modelling.research

# Инициализация Хе

$$\mathrm{Var}(h_i) = \mathrm{Var}(\sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathrm{Var}(w_i x_i) =$$
$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\mathrm{E}(x_i)]^2 \cdot \mathrm{Var}(w_i) + [\mathrm{E}(w_i)]^2 \cdot \mathrm{Var}(x_i) + \mathrm{Var}(x_i) \cdot \mathrm{Var}(w_i)]$$

- Когда нет симметрии, можно занулить только второе слагаемое

Risk
modelling.research

# Инициализация Xe

$$\mathrm{Var}(h_i) = \mathrm{Var}(\sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathrm{Var}(w_i x_i) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\mathrm{E}(x_i)]^2 \cdot \mathrm{Var}(w_i) + [\mathrm{E}(w_i)]^2 \cdot \mathrm{Var}(x_i) + \mathrm{Var}(x_i) \cdot \mathrm{Var}(w_i)] =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\mathrm{E}(x_i)]^2 \cdot \mathrm{Var}(w_i) + \mathrm{Var}(x_i) \cdot \mathrm{Var}(w_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathrm{Var}(w_i) \cdot E(x_i^2)$$

- Когда нет симметрии, можно занулить только второе слагаемое

# Инициализация Xe

$$\text{Var}(h_i) = \text{Var}(\sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \text{Var}(w_i x_i) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\text{E}(x_i)]^2 \cdot \text{Var}(w_i) + [\text{E}(w_i)]^2 \cdot \text{Var}(x_i) + \text{Var}(x_i) \cdot \text{Var}(w_i)] =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\text{E}(x_i)]^2 \cdot \text{Var}(w_i) + \text{Var}(x_i) \cdot \text{Var}(w_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \text{Var}(w_i) \cdot E(x_i^2) =$$

$$= E(x^2) \cdot [n_{in} \cdot \text{Var}(w)]$$

Risk
modelling.research

# Инициализация Хе

$$\mathrm{Var}(h_i) = E(x_i^2) \cdot [n_{in} \cdot \mathrm{Var}(w)]$$
$$x_i = \max(0; h_{i-1})$$

Risk
modelling.research

# Инициализация Xe

$$\mathrm{Var}(h_i) = E(x_i^2) \cdot [n_{in} \cdot \mathrm{Var}(w)]$$
$$x_i = \max(0; h_{i-1})$$

Если $h_{i-1}$ симметрично распределён относительно нуля, тогда:

$$E(x_i^2) = \frac{1}{2} \cdot \mathrm{Var}(h_{i-1})$$

https://arxiv.org/pdf/1502.01852.pdf

Risk modelling.research

# Инициализация Хе

$$\text{Var}(h_i) = E(x_i^2) \cdot [n_{in} \cdot \text{Var}(w)]$$
$$x_i = \max(0; h_{i-1})$$

Если $h_{i-1}$ симметрично распределён относительно нуля, тогда:

$$E(x_i^2) = \frac{1}{2} \cdot \text{Var}(h_{i-1})$$
$$\text{Var}(h_i) = \frac{1}{2} \cdot \text{Var}(h_{i-1}) \cdot [n_{in} \cdot \text{Var}(w)]$$
$$\text{Var}(w_i) = \frac{2}{n_{in}}$$

https://arxiv.org/pdf/1502.01852.pdf

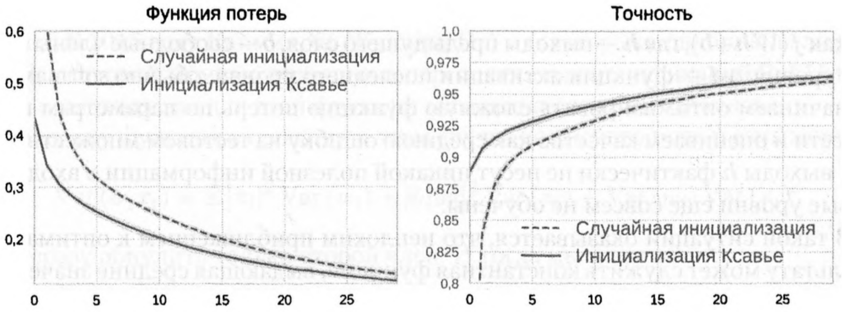
Risk modelling.research

# Кратикие итоги

- Для симметричных функций с нулевым средним используйте инициализацию Ксавье init="glorot_uniform" или
- Для ReLU и им подобным инициализацию Хе init="he_uniform" или init="he_nomal"
- Эти две инициализации корректируют параметры распределений в зависимости от входа и выхода слоя так, чтобы поддерживать дисперсию равной единице

Risk modelling.research

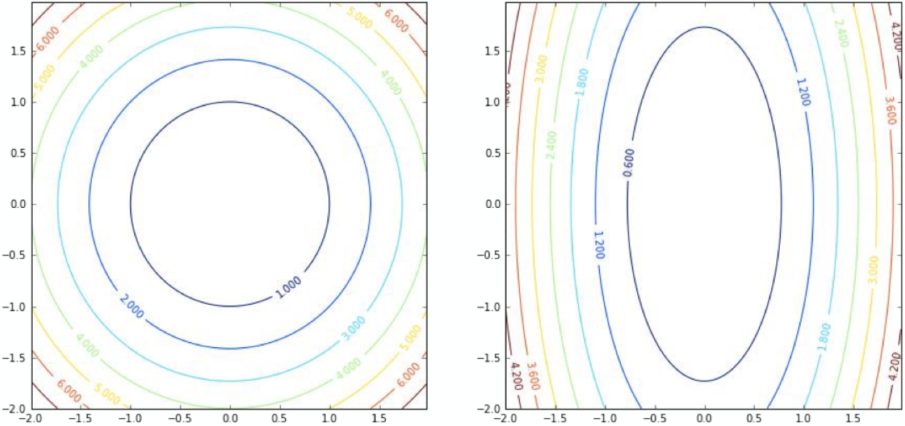
# Эксперимент с MNIST




Источник: Николенко, страница 149

# Батч-нормализация

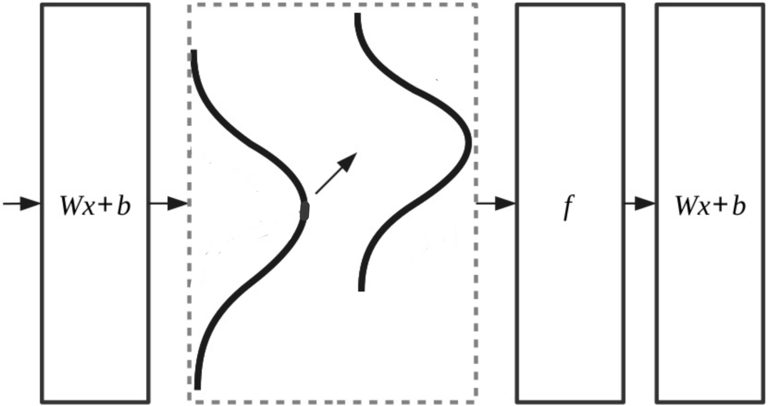
# Стандартизация



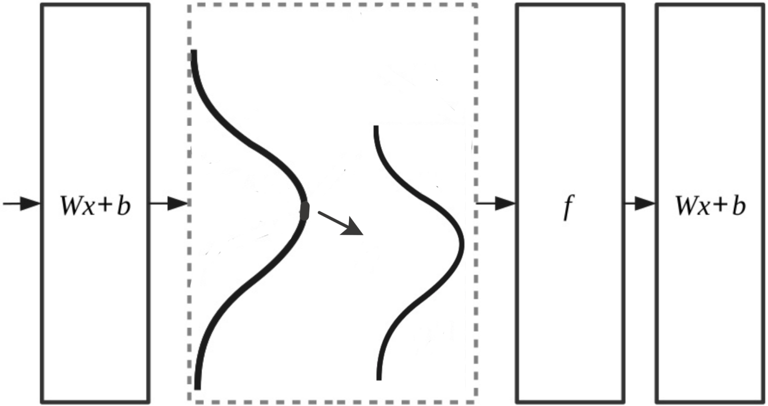

Какая из ситуаций лучше для SGD?

Risk
modelling.research

# А что внутри?



# А что внутри?



# Проблема

- Давайте вместо $X$ на входе использовать $\frac{X-\mu_X}{\sigma_X}$

- Даже если мы стандартизовали вход $X$, внутри сетки может произойти несчастье и скрытый слой окажется нестандартизован

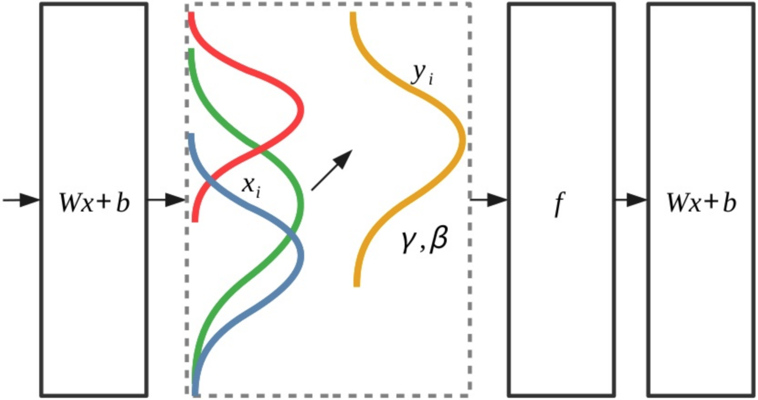
- Скрытые представления $h = f(XW)$ могут менять своё распределение в процессе обучения, это усложняет его

Risk
modelling.research

# Проблема

- Давайте вместо $X$ на входе использовать $\frac{X-\mu_X}{\sigma_X}$
- Даже если мы стандартизовали вход $X$, внутри сетки может произойти несчастье и скрытый слой окажется нестандартизован
- Скрытые представления $h = f(XW)$ могут менять своё распределение в процессе обучения, это усложняет его
- Давайте на каждом слое вместо $h$ использовать $\hat{h} = \frac{h-\mu_h}{\sigma_h}$
- На выход будем выдавать $\beta \cdot \hat{h} + \gamma$, для того, чтобы у нас было больше свободы, параметры $\beta$ и $\gamma$ тоже учим

# Batch norm (2015)



# Batch norm (2015)

- Откуда взять $\mu_h$ и $\sigma_h$?

- Оценить по текущему батчу!

$$
\begin{aligned}
\mu_h &= \alpha \cdot \bar{x}_{batch} + (1-\alpha) \cdot \mu_h \\
\sigma_h &= \alpha \cdot \hat{s}_{batch} + (1-\alpha) \cdot \sigma_h
\end{aligned}
$$

- Коэффициенты $\beta$ и $\gamma$ оцениваются в ходе обратного распространения ошибки

- Обучение довольно сильно ускоряется, сходимость улучшается

https://arxiv.org/pdf/1502.03167.pdf

# Forward pass

**Input:** Values of $x$ over a mini-batch: $\mathcal{B} = \{x_{1\ldots m}\}$;
Parameters to be learned: $\gamma, \beta$

**Output:** $\{y_i = \text{BN}_{\gamma,\beta}(x_i)\}$

$$\mu_{\mathcal{B}} \leftarrow \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x_i \qquad \text{// mini-batch mean}$$

$$\sigma_{\mathcal{B}}^2 \leftarrow \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} (x_i - \mu_{\mathcal{B}})^2 \qquad \text{// mini-batch variance}$$

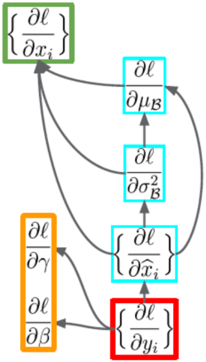
$$\widehat{x}_i \leftarrow \frac{x_i - \mu_{\mathcal{B}}}{\sqrt{\sigma_{\mathcal{B}}^2 + \epsilon}} \qquad \text{// normalize}$$

$$y_i \leftarrow \gamma \widehat{x}_i + \beta \equiv \text{BN}_{\gamma,\beta}(x_i) \qquad \text{// scale and shift}$$

https://arxiv.org/pdf/1502.03167.pdf

Risk
modelling.research

# Backward pass




$$\frac{\partial \ell}{\partial \widehat{x}_i} = \frac{\partial \ell}{\partial y_i} \cdot \gamma$$

$$\frac{\partial \ell}{\partial \sigma^2_{\mathcal{B}}} = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial \ell}{\partial \widehat{x}_i} \cdot (x_i - \mu_{\mathcal{B}}) \cdot \frac{-1}{2} (\sigma^2_{\mathcal{B}} + \epsilon)^{-3/2}$$

$$\frac{\partial \ell}{\partial \mu_{\mathcal{B}}} = \left( \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial \ell}{\partial \widehat{x}_i} \cdot \frac{-1}{\sqrt{\sigma^2_{\mathcal{B}} + \epsilon}} \right) + \frac{\partial \ell}{\partial \sigma^2_{\mathcal{B}}} \cdot \frac{\sum_{i=1}^{m} -2(x_i - \mu_{\mathcal{B}})}{m-1}$$

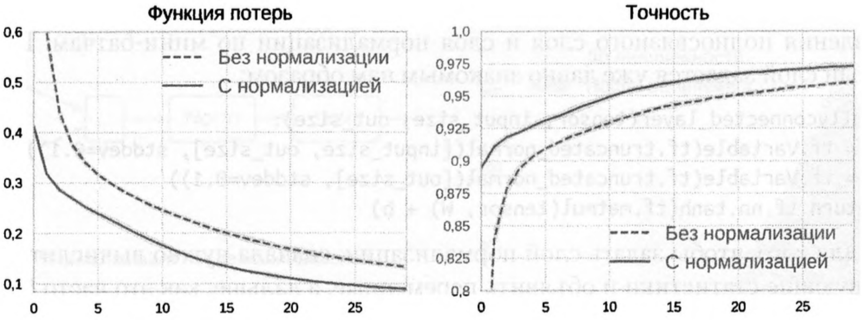
$$\frac{\partial \ell}{\partial x_i} = \frac{\partial \ell}{\partial \widehat{x}_i} \cdot \frac{1}{\sqrt{\sigma^2_{\mathcal{B}} + \epsilon}} + \frac{\partial \ell}{\partial \sigma^2_{\mathcal{B}}} \cdot \frac{2(x_i - \mu_{\mathcal{B}})}{m-1} + \frac{\partial \ell}{\partial \mu_{\mathcal{B}}} \cdot \frac{1}{m}$$

$$\frac{\partial \ell}{\partial \gamma} = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial \ell}{\partial y_i} \cdot \widehat{x}_i$$

$$\frac{\partial \ell}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial \ell}{\partial y_i}$$

https://arxiv.org/pdf/1502.03167.pdf

# Эксперимент с MNIST




Источник: Николенко, страница 160

Risk modelling.research

# Трюки

- С батч-нормализацией нужно уменьшить силу Dropout и регуляризацию

- Не забывайте перемешивать обучающую выборку перед каждой новой эпохой, чтобы батчи были разнообразными

http://openaccess.thecvf.com/content_CVPR_2019/papers/Li_Understanding_the_Disharmony_Between_Dropout_and_Batch_Normalization_by_Variance_CVPR_2019_paper.pdf

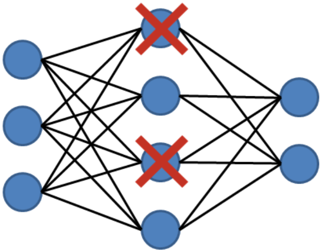
Risk
modelling.research

# Dropout


Overfitting ?!? ...
Too many neurons
Not enough DATA
BAD Network
Risk modelling.research

# Dropout

- С вероятностью $p$ отключаем нейрон
- Делает нейроны более устойчивыми к случайным возмущениям
- Борьба с ко-адоптацией, не все соседи похожи, не все дети похожи на родителей



http://www.cs.toronto.edu/~rsalakhu/papers/srivastava14a.pdf

Risk modelling.research

# Dropout в формулах

- forward pass:

$$o = f(X \cdot W + b)$$

# Dropout в формулах

- forward pass:

$$o = f(X \cdot W + b)$$

$$o = D \cdot f(X \cdot W + b), \quad D = (D_1, \dots, D_k) \sim iidBern(p)$$

# Dropout в формулах

- forward pass:

$$o = f(X \cdot W + b)$$
$$o = D \cdot f(X \cdot W + b), \quad D = (D_1, \ldots, D_k) \sim iidBern(p)$$

$$o_i = D_i \cdot f(wx_i^T + b) = \begin{cases} f(wx_i^T + b), p \\ 0, 1 - p \end{cases}$$

Дропаут — это просто небольшая модификация функции активации

Risk
modelling.research

# Dropout в формулах

- forward pass:

$$o = f(X \cdot W + b)$$

$$o = D \cdot f(X \cdot W + b), \quad D = (D_1, \dots, D_k) \sim iid Bern(p)$$

- backward pass:

$$d = f'(h) \cdot W \cdot d$$

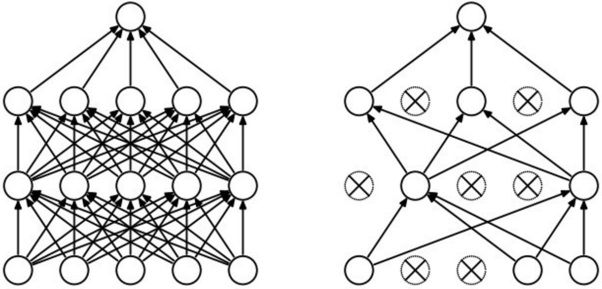
$$d = D \cdot f'(h) \cdot W \cdot d$$

Risk modelling.research

# Dropout

- При обучении мы домножаем часть выходов на $D_i$, тем самым мы изменяем только часть параметров и нейроны учатся более независимо

- Dropout эквивалентен обучению $2^n$ сетей



(a) Standard Neural Net (b) After applying dropout.

Risk modelling.research

# Dropout

- При обучении мы домножаем часть выходов на $D_i$, тем самым мы изменяем только часть параметров и нейроны учатся более независимо
- Dropout эквивалентен обучению $2^n$ сетей
- Что делать на стадии тестирования?

# Dropout

- При обучении мы домножаем часть выходов на $D_i$, тем самым мы изменяем только часть параметров и нейроны учатся более независимо
- Dropout эквивалентен обучению $2^n$ сетей
- Нам надо сымитировать работу такого ансамбля: можно отключать по очереди все возможные комбинации нейронов, получить $2^n$ прогнозов и усреднить их

# Dropout

- При обучении мы домножаем часть выходов на $D_i$, тем самым мы изменяем только часть параметров и нейроны учатся более независимо
- Dropout эквивалентен обучению $2^n$ сетей
- Нам надо сымитировать работу такого ансамбля: можно отключать по очереди все возможные комбинации нейронов, получить $2^n$ прогнозов и усреднить их
- Но лучше просто брать по дропауту математическое ожидание

$$o = p \cdot f(X \cdot W + b)$$

Risk
modelling.research

# Обратный Dropout

- На тесте ищем математическое ожидание:

$$o = p \cdot f(X \cdot W + b)$$

# Обратный Dropout

- На тесте ищем математическое ожидание:

$$o = p \cdot f(X \cdot W + b)$$

- Это неудобно! Надо переписывать функцию для прогнозов!

# Обратный Dropout

- На тесте ищем математическое ожидание:

$$o = p \cdot f(X \cdot W + b)$$

- Это неудобно! Надо переписывать функцию для прогнозов!

- Давайте лучше будем домножать на $\frac{1}{p}$ на этапе обучения:

$$\text{train: } o = \frac{1}{p} \cdot D \cdot f(X \cdot W + b)$$
$$\text{test: } o = f(X \cdot W + b)$$

# Другие эвристики для обучения сеток

# Предобучение

- Обучаем каждый нейрон на рандомной подвыборке, каждый нейрон впитает какие-то отдельные её особенности, после скрепляем все нейроны вместе и продолжаем обучение на всей выборке

- На будущее: обучаем на корпусе картинок автокодировщик, encoder благодаря этому учится выделять наиболее важные фичи, которые позволяют эффективно сжимать изображения. После срезаем decoder и на его месте достраиваем слои для решения нашей задаче, запускаем обычное дообучение.

Risk modelling.research

# Динамическое наращивание сети

- Обучение сети при заведомо недостаточном числе нейронов $H$

- После стабилизации функции потерь — добавление нового нейрона и его инициализация путём обучения
  - либо по случайной подвыборке
  - либо по объектам с наибольшими значениями потерь
  - либо по случайному подмножеству входов
  - либо из различных случайных начальных приближений

- Снова итерации BackProp

Эмпирический опыт: Общее время обучения обычно лишь в $1.5 - 2$ раза больше, чем если бы в сети сразу было итоговое число нейронов. Полезная информация, накопленная сетью не теряется при добавлении нейронов.

# Прореживание сети

- Начать с большого количество нейронов и удалять незначимые по какому-нибудь критерию
- Пример: обнуляем вес, смотрим как сильно упала ошибка, сортируем все связи по этому критерию, удаляем $N$ наименее значимых
- После прореживания снова запускаем backprop
- Если качество модели сильно упала, надо вернуть последние удалённые связи

Risk
modelling.research

# Другие хаки

Risk
modelling.research

# Уже обсуждали

- $l_1$ и $l_2$ регуляризация
- Ранняя остановка
- Различные новые градиентные спуски, ускоряющие процедуру сходимости

Risk modelling.research

# Early stopping


- Будем останавливать обучение, когда качество на валидации начинает падать

# Регуляризация

- $L_2$: приплюсовываем к функции потерь $\lambda \cdot \sum w_i^2$
- $L_1$: приплюсовываем к функции потерь $\lambda \cdot \sum |w_i|$
- Можно регуляризовать не всю сетку, а отдельный нейрон или слой
- Не даёт нейрону сфокусироваться на слишком выделяющемся входе

Risk
modelling.research

# Регуляризация

- В keras можно добавить для каждого слоя на три вида связей:
- **kernel_regulirizer** - на матрицу весов слоя;
- **bias_regulirizer** - на вектор свободных членов;
- **kernel_regulirizer** - на вектор выходов.
- **Делается примерно так:**

```
model.add(Dense(256, inpit_dim = 32,
    kernel_regulirizer = regulizers.l1(0.001),
    bias_regulirizer = regulizers.l2(0.1),
    activity_regulirizer = regulizers.l2(0.01)))
```

Risk modelling.research

# Взаимосвязи

- На практике обычно используют Dropout. Действия всех этих регуляризаторов оказывается схожим:

- Например, в [1] написано:

  «We show that the dropout regularizer is first-order equivalent to an L2 regularizer applied after scaling the features by an estimate of the inverse diagonal Fisher information matrix»

- У Гудфеллоу в Глубоком обучении на стр. 218 можно найти, что ранняя остановка для линейных моделей эквивалентна $l_2$ регуляризации с MSE, обучаемой SGD.

[1] https://arxiv.org/abs/1307.1493

Risk
modelling.research

# Ещё обсудим

- Скип-конекшены
- Аугментация данных
- Более забубуенистые архитектуры