Автоматическое построение нейросети оптимальной сложности.

Маркин В. О.[1]***, Забазнов А. Г.***[1]***, Горян Н. А.***[1]***, Губанов С. Е.***[1]***, Таранов С. К.***[1]***, Криницкий К. Д.***[1]***, Товкес А. А.***[1]***, Улитин А. Ю.***[1]
markin1198@mail.ru; antoniozabaznov@yandex.ru; goryan.na@phystech.edu;
sergey.gubanov@phystech.edu; taranov.sk@phystech.edu;
krinitskiy.kd@phystech.edu; tovkes.aa@phystech.edu; ulitin.ayu@phystech.edu
Московский физико-технический институт[1]

В работе рассматривается задача построения оптимальной структуры нейронной сети и исследуется вопрос устойчивости построенной модели. Для оптимизации структурных параметров используется переход от выбора конкретной архитектуры к выбору комбинации различных архитектур сети и вариационный подход. Также исследуется влияние изменения данных на структуру сети. Для оценки качества и устойчивости моделей, построенных при помощи данного метода, проводятся эксперименты на выборке CIFAR10. Проводится сравнение предложенного алгоритма с другими методами поиска оптимальных моделей нейронной сети.

Ключевые слова: *нейронные сети, автоматическое построение нейронных сетей, оптимальная структура нейронной сети*

Введение

При использовании нейросетевых моделей в анализе данных часто встает вопрос о выборе архитектуры модели. Нейронная сеть имеет большое число гиперпараметров. Например, нейронная сеть, построенная по восьмислойной архитектуре AlexNet, имеет около 60 миллионов параметров. Долгое время для поиска оптимальной структуры нейросети и настройки её параметров использовались перебор и различные эвристические соображения [1]. Такие подходы вычислительно неэффективны и не дают гарантий оптимальности полученной модели.

Под оптимальной моделью понимается структура обучаемой сети и совокупность её гиперпараметров, которая даёт приемлемое качество классификации или регрессии. В данной работе в качестве критерия выбора модели предлагается сложность модели, то есть величина, учитывающая сложность описания совокупности выборки и модели. Под описанием выборки понимается приближенная оценка сложности модели, основанная на связи с её правдоподобием[2]

Существует несколько подходов выбора модели оптимальной сложности. В работе [3] представлен метод выбора модели с использованием прореживания нейронной сети, который заключается в обучении максимально большой сети, при последующем удалении части связей. Другой подход заключается в предсказании структуры модели другой нейросетью [4].

В данной работе для выбора оптимального набора гиперпараметров проводится процедура релаксации [5] — переход от дискретного множества возможных значений гиперпараметров к непрерывному множетсву их комбинаций. Эта процедура позволяет параметризовать структуру модели некотором действительным вектором. Такой подход дает возможность применять методы непрерывной оптимизации для нахождения наилучшего набора гиперпараметров. В основе разработанного метода лежит алгоритм DARTS,

предложенный в работе[6]. Оптимизация гиперпараметров проводится градиентными методами [7, 8, 9] либо с использованием Гауссовских процессов и Байесовской оптимизации.

Проверка и анализ метода проводится на выборке CIFAR-10[10]. В ходе экспериментов оценивается не только качество, которое дает полученная модель но и её вычислительная сложность и устойчивость. Проводится сравнение представленного метода с эвристическими алгоритмами выбора модели, а также с алгоритмом DARTS.

Постановка задачи

Пусть заданы обучающая и вылидационная выборки:

$$\mathfrak{D}^{\text{train}} = \{\mathbf{x}_i, y_i\}, \quad i = 1, \ldots, m^{\text{train}},$$

$$\mathfrak{D}^{\text{valid}} = \{\mathbf{x}_i, y_i\}, \quad i = 1, \ldots, m^{\text{valid}},$$

состоящие из множеств пар объект-метка,

$$\mathbf{x}_i \in \mathbf{X} \subset \mathbb{R}^{\text{n}}, \quad y_i \in \mathbf{Y} \subset \mathbb{R}.$$

Метка y объекта $\mathbf{x}$ принадлежит множеству $y \in \mathbf{Y} = \{1, \ldots, Z\}$, где Z - количество классов.

Модель задаётся ориентированным графом $\mathbf{G} = (\mathbf{V}, \mathbf{E})$, где для каждого ребра (i, j) заданы базовые функции $\mathbf{g}^{i,j}, |\mathbf{g}^{i,j}| = K^{i,j}$ и их веса $\boldsymbol{\gamma}^{i,j}$. Требуется построить такую модель $\mathbf{f}$ с параметрами $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{\text{n}}$:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{W}) = \{\mathbf{f}_i(\mathbf{x}, \mathbf{w}_i)\}_{i=1}^{|\mathbf{V}|}$$

где $\mathbf{f_i}(\mathbf{x}, \mathbf{w_i})$ - подмодель с параметрами $\mathbf{w}_i$ задаётся как:

$$\mathbf{f}_i(\mathbf{x}, \mathbf{w}_i) \ = \sum_{j \in adj(i)} \left\langle \boldsymbol{\gamma}^{i,j}, \mathbf{g}^{i,j} \right\rangle \mathbf{f}_j(\mathbf{x}, \mathbf{w}_j)$$

.

Тогда параметры модели определяются как конкатенация всех параметров каждой подмодели: $\mathbf{W} = [\mathbf{w}_1, \ldots, \mathbf{w}_{|\mathbf{V}|}]$, а структура модели $\boldsymbol{\Gamma}$ задаётся вектором $\{\boldsymbol{\gamma}^{i,j}\}_{\mathbf{E}}$.

Функция потерь на обучении L и функция потерь на валидации Q задаются как:

$$L(\mathbf{W}, \mathbf{A}, \boldsymbol{\Gamma}) = \log p(\mathbf{Y}^{\text{train}} | \mathbf{X}^{\text{train}}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\Gamma}) + \boldsymbol{e}^{\mathbf{A}} ||\mathbf{W}||^2,$$

$$Q(\mathbf{W}, \boldsymbol{\Gamma}) = \log p(\mathbf{Y}^{\text{valid}} | \mathbf{X}^{\text{valid}}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\Gamma}) + \lambda p(\boldsymbol{\Gamma}),$$

где $\mathbf{A}$ и λ — регуляризационные слагаемые, $p(\boldsymbol{\Gamma})$ - произведение всех произведение вероятностей всех $\boldsymbol{\gamma}^{i,j} \in \boldsymbol{\Gamma}$. Перед подсчётом значения функции потерь на валидации делается априорное предположение о распределении j том, что вектор $\boldsymbol{\Gamma} = \{\boldsymbol{\gamma}^{i,j}\}$ имеет распределение Дирихле[11].

Вектор $\{\gamma^{i,j}\}$ имеет распределение Дирихле с параметром α, если:

$$f(\gamma) = f(\gamma_1, \ldots, \gamma_K) = \begin{cases} \frac{\boldsymbol{F}(K \times \alpha)}{\boldsymbol{F}(\alpha)^K} \prod_{i=1}^{K} \gamma_i, \gamma \in \boldsymbol{S} \\ 0, \gamma \notin \boldsymbol{S} \end{cases}$$

где $\boldsymbol{F}$ - гамма-функция, $\boldsymbol{S}$ - симплекс: $\{\gamma \in \mathbb{R}^K : \sum_{i=1}^K \gamma_i = 1, \gamma_i \geqslant 0\}$.

Требуется решить задачу двухуровневой оптимизации, оптимизируя параметры модели по обучающей выборке, а структуру модели по валидационной:

$$\mathbf{W}^*(\mathbf{\Gamma}) = \arg\min_{\mathbf{W}} L(\mathbf{W}, \mathbf{\Gamma})$$

$$\mathbf{\Gamma}^*, \mathbf{A}^* = \min_{\mathbf{\Gamma}, \mathbf{A}} Q(\mathbf{W}^*(\mathbf{\Gamma}), \mathbf{\Gamma})$$

Релаксация

Известно множество всех возможных операций $\mathbf{g}^{i,j} \in \mathbf{G}$. Для перехода к непрерывному пространству таких функций проводится релаксация каждой операции с использованием softmax:

$$\overline{\mathbf{g}}^{(i,j)}(x) = \sum_{\mathbf{g} \in \mathbb{K}} \frac{exp(\gamma_{\mathbf{g}}^{(i,j)})}{\sum\limits_{\overline{\mathbf{g}} \in \mathbb{K}} exp(\gamma_{\overline{\mathbf{g}}}^{(i,j)})} \mathbf{g}(x),$$

где $\gamma^{i,j}$ — вектор, параметризующий комбинацию базовых функций. Таким образом, путём подбора непрерывных параметров γ осуществляется переход к задаче поиска базовой функции. В конце поиска, каждая комбинация базовых функций $\overline{\mathbf{g}}^{(i,j)}(x)$ меняется на $\mathbf{g}^{(i,j)} = \arg\max\limits_{\mathbf{g} \in \mathbb{K}} \gamma_{\mathbf{g}}^{(i,j)}$.

Эксперимент

Для проверки влияния регуляризации структуры на итоговую модель был проведен вычислительный эксперимент. В качестве выборки использовалась выборка изображений CIFAR-10 [10]. Рассматривалась задача классификации. Основным критерием качества выступал

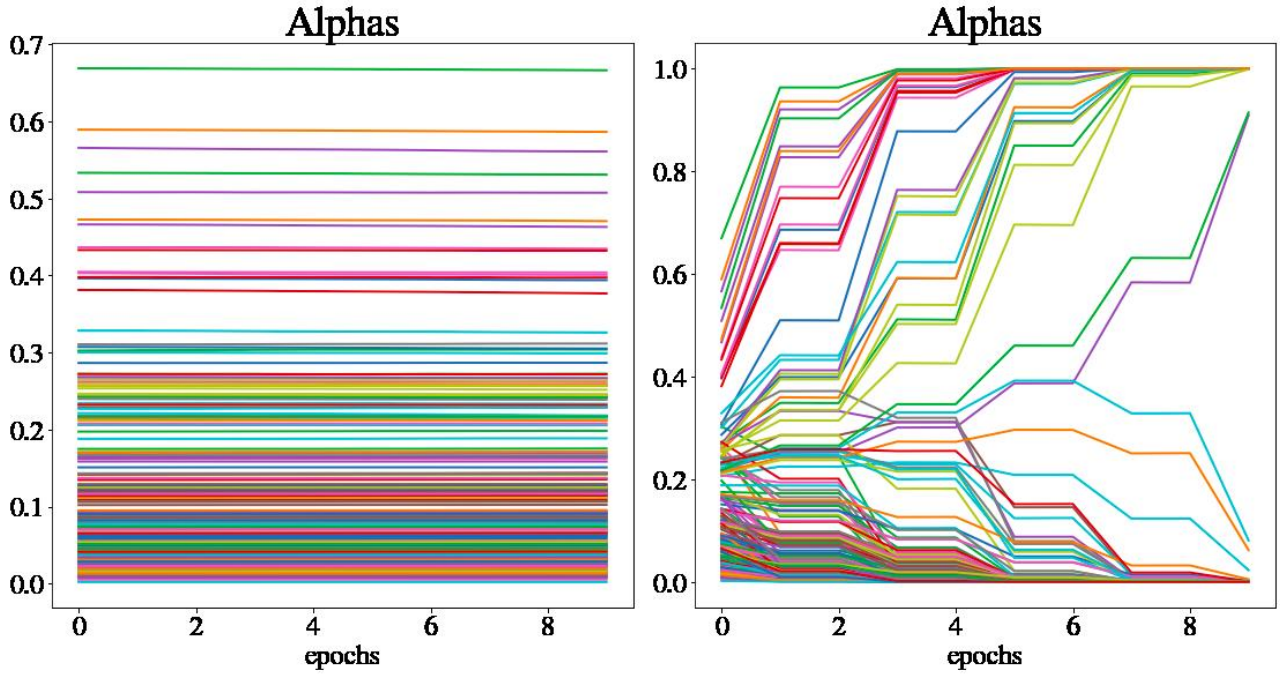
$$Accuracy = \frac{1}{m^{\text{valid}}} \sum_{\mathbf{x}, y \in \mathfrak{D}^{\text{valid}}} I(\mathbf{f}(\mathbf{x}), y)$$

Эксперимент проводился в следующих режимах:

1) Алгоритм выбора структуры со слабой регуляризацией.
В качестве регуляризации структуры выступало распределение Дирихле с параметром $\alpha = 1$.

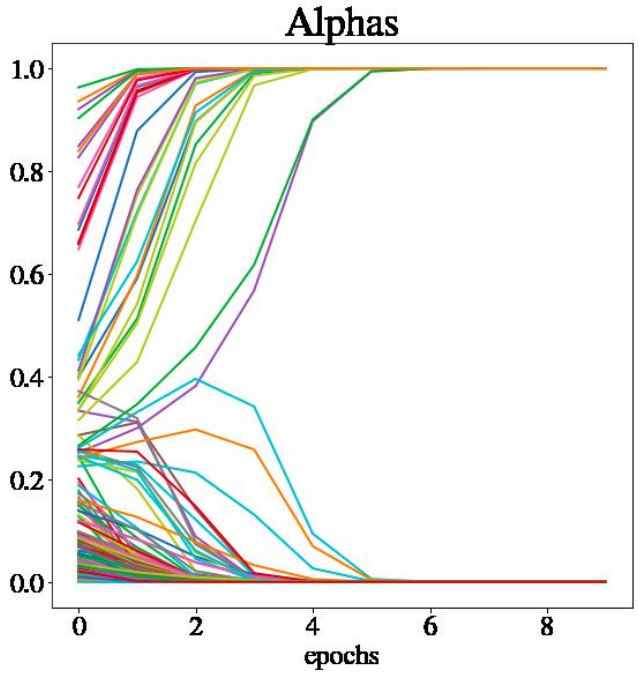
2) Алгоритм выбора структуры с меняющейся регуляризацией.
В качестве регуляризации структуры выступало распределение Дирихле с параметром α, меняющимся на каждой эпохи в интервале $(10^{-30}; 1)$.

3) Алгоритм выбора структуры с сильной регуляризацией.
В качестве регуляризации структуры выступало распределение Дирихле с параметром $\alpha = 10^{-30}$.



(a) 1 режим

(b) 2 режим



(c) 3 режим

Рис. 1.

На рис. 1 изображена общая динамика изменения структурных параметров в процессе обучения.

На рис. 2 для 3 запусков в каждом режиме соответствие между top-1 accuracy на тестовых данных и количеством параметров в сети, больших порога 0.1.

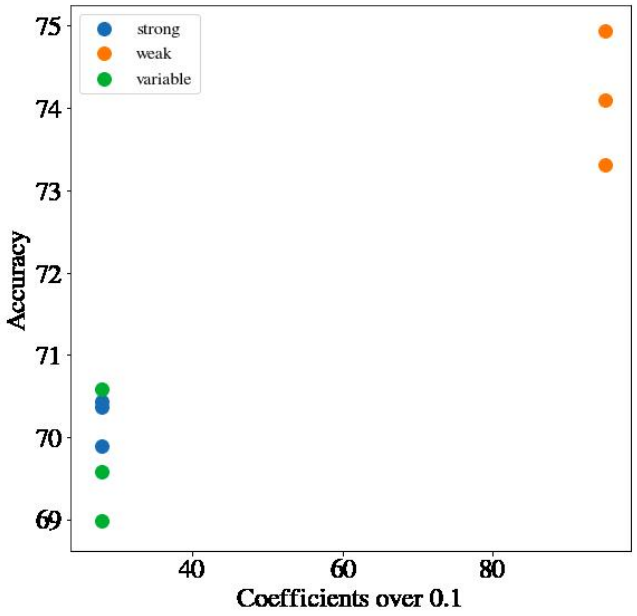


Рис. 2.

На рис. 3 показана таблица с усредненным по 3 запускам в каждом режиме top-1 и top-5 accuracy.

	experiment	top1 accuracy	top5 accuracy
0	strong	70.233330	98.109996
1	weak	74.113330	98.629997
2	variable	69.719999	97.986664

Рис. 3.

Рисунок 4 отражает поведение в сети в зависимости от присутствия в данных случайного шума, используется нормальное распределение с нулевым математическим ожиданием.

На рис. 5 также изображено поведение модели в условиях наложение случайного шума на параметры модели.

Литература

[1] Yoon Kim. Convolutional neural networks for sentence classification. In *Proceedings of the 2014 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing, EMNLP 2014, October 25-29, 2014, Doha, Qatar, A meeting of SIGDAT, a Special Interest Group of the ACL*, pages 1746–1751, 2014.

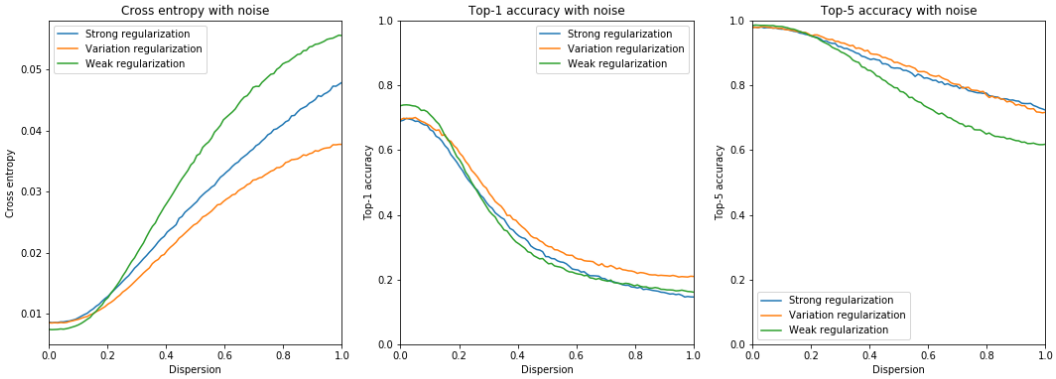

Cross entropy with noise
Top-1 accuracy with noise
Top-5 accuracy with noise
Strong regularization
Variation regularization
Weak regularization
Cross entropy
Top-1 accuracy
Top-5 accuracy
Dispersion

Рис. 4.

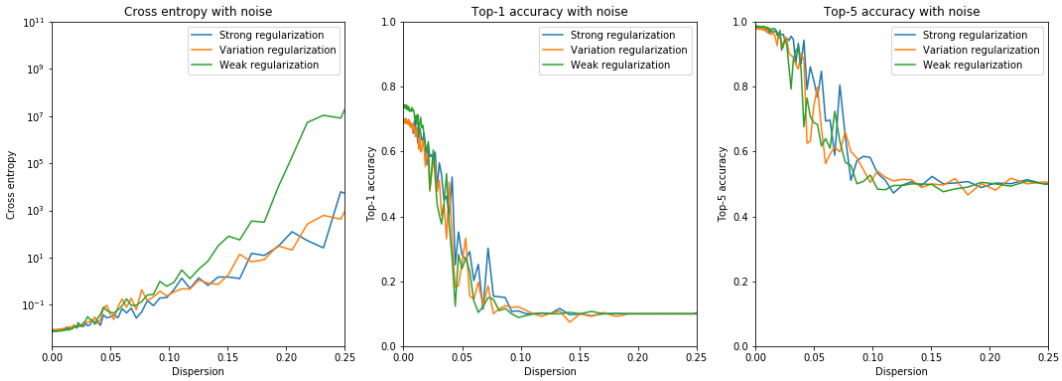

Cross entropy with noise
Top-1 accuracy with noise
Top-5 accuracy with noise
Strong regularization
Variation regularization
Weak regularization
Cross entropy
Top-1 accuracy
Top-5 accuracy
Dispersion

Рис. 5.

[2] Grunwald P. A tutorial introduction to the minimum description length principle. 2005.

[3] Yann Le Cun, John S. Denker, and Sara A. Solla. Advances in neural information processing systems 2. chapter Optimal Brain Damage, pages 598–605. Morgan Kaufmann Publishers Inc., San Francisco, CA, USA, 1990.

[4] Ilya Sutskever, Oriol Vinyals, and Quoc V. Le. Sequence to sequence learning with neural networks. In *Proceedings of the 27th International Conference on Neural Information Processing Systems - Volume 2*, NIPS'14, Cambridge, MA, USA, 2014. MIT Press.

[5] Hanxiao Liu, Karen Simonyan, and Yiming Yang. Darts: Differentiable architecture search. *CoRR*, abs/1806.09055, 2018.

[6] Yang .Y Hanxiao L., Simonyan K. Darts: Differentiable architecture search. 2018.

[7] Dougal Maclaurin, David Duvenaud, and Ryan Adams. Gradient-based hyperparameter optimization through reversible learning. In Francis Bach and David Blei, editors, *Proceedings of the 32nd International Conference on Machine Learning*, volume 37 of *Proceedings of Machine Learning Research*, pages 2113–2122, Lille, France, 07–09 Jul 2015. PMLR.

[8] Luca Franceschi, Michele Donini, Paolo Frasconi, and Massimiliano Pontil. Forward and reverse gradient-based hyperparameter optimization. In Doina Precup and Yee Whye Teh, editors, *Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning*, volume 70 of *Proceedings of Machine Learning Research*, pages 1165–1173, International Convention Centre, Sydney, Australia, 06–11 Aug 2017. PMLR.

[9] Fabian Pedregosa. Hyperparameter optimization with approximate gradient. pages 737–746, 2016.

[10] G. Hinton A. Krizhevsky, V. Nair. The cifar-10 dataset. 2009.

[11] Tommi S. Jaakkol Harald Steck. On the dirichlet prior and bayesian regularization.