Автоматическое построение нейросети оптимальной сложности

Горян¹ Н. А. Бахтеев¹ О. Ю. Стрижов² В. В.goryan.na@phystech.edu; bakhteev@phystech.edu; strijov@phystech.edu¹Московский физико-технический институт²Вычислительный центр им. А. А. Дородницына ФИЦ ИУ РАН

Работа посвящена выбору оптимальной модели нейронной сети. Нейронная сеть рассматривается как вычислительный граф, рёбра которого — примитивные функции, а вершины — промежуточные представления выборки. Предполагается, что структуру нейронной сети можно упростить без значимой потери качества классификации. Структура нейросети опеределяется вершинами симплекса. Для определения нужной структуры нейронной сети предлагается проводить оптимизацию гиперпараметров и структурных параметров. Для решения задачи оптимизации предлагается проводить релаксацию структуры. Для анализа качества представленного алгоритма проводятся эксперименты на выборках Boston, MNIST и CIFAR-10.

Ключевые слова: нейронные сети, оптимизация гиперпараметров, прореживание нейронной сети, оптимальная структура нейронной сети, вариационный вывод.

Введение

В данной работе рассматривается алгоритм построения оптимальной нейронной сети. Одной из основных областей применения являются мобильные устройства, которые в силу своих ограниченных вычислительных ресурсов не могут справляться с избыточно сложными неросетями [1]. Существует ряд способов построения нейронных сетей. Для того, чтобы подобрать нужную сеть требуется определить оптимальные значения структурных параметров [2]: количество слоёв, нейронов в каждом слое и функции активации каждого нейрона. Выбор этих гиперпараметров является вычислительно сложной задачей [3].

В работах [4, 5] используется алгоритм прореживания нейросети. Он заключается в построении заведомо переусложнённой модели, которая в последствии упрощается. Ещё одиним способом, предложенным в работе [6], является метаобучение, которое получая на вход некоторую выборку возвращает оптимальные гиперпараметры. В данной работе исследуется алгоритм, который оптимизирует параметры, гиперпараметры, структурные параметры нейросети в единой процедуре. В основе лежит алгоритм DARTS, предложенным в работе [7], в основе которого лежит процедура релаксации: переход от дискретного множества структурных параметров к непрерывному, что позволяет использовать методы градиентной оптимизации для нахождения лучших гиперпараметров. Входными данными алгоритма являются некоторый набор данных и заранее определённый набор функций активации. Как результат мы получаем оптимальную нейросеть.

Проверка и анализ метода проводится на выборке Boston Housing [8], MNIST [9], CIFAR-10 [10] и синтетических данных. Полученная модель сравнивается с моделями, полученными при помощи базовых алгоритмов.

Постановка задачи

Пусть заданы обучающая и валидационная выборки

$$\mathfrak{D}^{train} = \{\mathbf{x}_i, y_i\}, \ i = 1, ..., m^{train}, \tag{?}$$

$$\mathfrak{D}^{valid} = \{\mathbf{x}_i, y_i\}, \ i = 1, ..., m^{valid}, \tag{?}$$

где $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^n$ — объекты, а $y_i \in \{1, ..., Z\}$ — метки объектов \mathbf{x}_i , где Z — количество классов. Модель описывается ориентированным графом (V, E), для каждого ребра которого $(j, k) \in E$ определён вектор базовых функций $g_{j,k}$ мощностью $K_{j,k}$. Модель $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{W})$ задаётся параметрами подмоделей $\{f_v\}_{v=1}^{|V|}$ и структурными параметрами γ . Каждая подмодель f_v описывается через графовое представление модели:

$$f_v(\mathbf{x}) = \sum_{k \in Adj(v_i)} \langle \gamma_{j,k}, g_{j,k} \rangle f_k(\mathbf{x}, \mathbf{w}), \quad f_0(\mathbf{x}) = \mathbf{x}.$$

Параметры модели **W** — конкатенация параметров всех подмоделей $\{f_v\}_{v=1}^{|V|}$. Структура модели Γ — конкатенация структурных параметров γ .

Функции потерь на обучении L и валидации Q задаются:

$$L = loss(\mathfrak{D}^{train}, \mathbf{W}, \Gamma) + e^{A}||\mathbf{W}||,$$
$$Q = loss(\mathfrak{D}^{valid}, \mathbf{W}, \Gamma).$$

Таким образом, получили задачу двухуровневой оптимизации:

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

$$\Gamma = \arg\min_{\Gamma} Q(\mathfrak{D}^{train}, \mathbf{W}, \Gamma).$$

Литература

- [1] S Rallapalli, H Qiu, AJ Bency, S Karthikeyan, R Govindan, BS Manjunath, and R Urgaonkar. Are very deep neural networks feasible on mobile devices? 2016.
- [2] In Jae Myung and Mark A. Pitt. Applying occam's razor in modeling cognition: A bayesian approach. *Psychonomic Bulletin & Review*, 4(1):79–95, Mar 1997.
- [3] I. Sutskever, O. Vinyals, and Q. Le. Sequence to sequence learning with neural networks. In Advances in Neural Information Processing Systems 27, volume 2 of 28th Annual Conference on Neural Information Processing Systems, pages 3104–3112, Montreal, Quebec, Canada, 08–13 December 2014. Curran Associates, Inc.
- [4] Y. LeCun, J. Denker, and S. Solla. Optimal brain damage. In Advances in Neural Information Processing Systems 2, pages 598–605, Denver, Colorado, USA, 27–30 November 1989. Morgan-Kaufmann.
- [5] A. Graves. Practical variational inference for neural networks. In *Advances in Neural Information Processing Systems* 24, 25th Annual Conference on Neural Information Processing Systems, pages 2348–2356, Granada, Spain, 12–14 December 2011. Curran Associates, Inc.
- [6] Dougal Maclaurin, David Duvenaud, and Ryan P. Adams. Gradient-based hyperparameter optimization through reversible learning. In Proceedings of the 32Nd International Conference on International Conference on Machine Learning - Volume 37, ICML'15, pages 2113–2122. JMLR.org, 2015.
- [7] Hanxiao Liu, Karen Simonyan, and Yiming Yang. Darts: Differentiable architecture search, 2018. cite arxiv:1806.09055.
- [8] D. Harrison and D. Rubinfeld. Hedonic prices and the demand for clean air, 1978. https://www.cs.toronto.edu/~delve/data/boston/bostonDetail.html.

- [9] Y. LeCun, C. Cortes, and C. J.C. Burges. The mnist datadase of handwritten digits, 1998. http://yann.lecun.com/exdb/mnist/.
- [10] A. Krizhevsky, V. Nair, and G. Hinton. The cifar-10 dataset, 2009. http://www.cs.toronto.edu/~kriz/cifar.html.