

Автоматическое построение нейросети оптимальной сложности

Улитин А.Ю. , Бахтеев О.Ю. , Стрижов В.В.

ulitin.ayu@phystech.edu

Московский физико-технический институт

Работа посвящена поиску оптимальной модели нейросети. Нейросеть представляется как граф, где ребрам соответствуют нелинейные операции, а вершины - промежуточные представления. Параметры сети разделим на три типа: Параметры, отвечающие за итоговое качество классификации, гиперпараметры, отвечающие за процесс переобучения и предотвращение переобучения, а также структурные параметры, которые отвечают за структуру модели. Структура нейросети определяется вершинами симплекса. Будем проводить релаксацию структуры для решения задачи оптимизации.

Ключевые слова: *нейросети, оптимизация гиперпараметров, робастность модели.*

Введение

В данной работе рассматривается метод построения оптимальной нейронной сети. Под оптимальной сетью понимается модель, дающая приемлемое качество при небольшом количестве параметров. Под структурой понимается набор структурных параметров: количество слоев, нейронов в каждом слое, а также функции активации в каждом нейроне. В данной работе в качестве критерия выбора модели предлагается сложность модели, то есть величина, учитывающая сложность описания совокупности выборки и модели.

Существует несколько способов построения оптимальной нейронной сети. Один из основных - оптимальное прореживание [1]. Этот способ заключается в том, что из максимально сложной модели мы убираем связи и получаем упрощенную сеть. В работе [2] предложен байссовский метод оптимизации сети, а в работе [3] рассмотрен метод градиентного спуска. Кроме того в [4] используется метообучение, которое по некоторой входной выборке возвращает оптимальные гиперпараметры.

В виду того, что у моделей значительное количество параметров и гиперпараметров, процесс оптимизации может быть затратным. В данной работе используется эффективный по ресурсам метод, в основе которого лежит алгоритм DARTS [5], где на вход мы получаем некоторый набор входных данных, а также функции активации. Оптимизируя параметры и гиперпараметры параллельно, мы на выходе получим оптимальную нейронную сеть.

Проверка и анализ метода проводится на выборках [6, 7, 8] и синтетических данных. В эксперименте проводится сравнение полученного результата с моделями, полученными другими базовыми алгоритмами.

Постановка задачи

Пусть заданы обучающая и валидационная выборки:

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

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

состоящие из множеств пар объект-метка,

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

$\mathbf{Y} = \{1, \dots, Z\}$, где Z - количество классов.

Модель задаётся ориентированным графом $\mathbf{G} = (\mathbf{V}, \mathbf{E})$, где для каждого ребра (i, j) задан вектор базовых функций $\mathbf{g}^{i,j}$, с мощностью $|\mathbf{g}^{i,j}| = K^{i,j}$ и весами $\gamma^{i,j}$. Требуется построить такую модель \mathbf{f} с параметрами $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^n$:

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

где $\mathbf{f}_i(\mathbf{x}, \mathbf{w}_i)$ - подмодель с параметрами \mathbf{w}_i задаётся через графовое представление как:

$$\mathbf{f}_i(\mathbf{x}, \mathbf{w}_i) = \sum_{k \in \text{adj}(i)} \langle \gamma^{i,k}, \mathbf{g}^{i,k} \rangle \mathbf{f}_k(\mathbf{x}, \mathbf{w}_k)$$

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

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

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

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

В итоге получаем задачу двухуровневой оптимизации, оптимизируя параметры модели по обучающей выборке, а структуру модели по валидационной:

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

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

Литература

- [1] Yann Le Cun, John S. Denker and Sara A. Solla. Optimal Brain Damage. 1989.
- [2] A. Neal and M. Radfor Bayesian Learning for Neural Networks.. 1995.
- [3] J. Luketina, M. Berglund, T. Raiko, and K. Gref Scalable gradient-based tuning of continuous regularization hyperparameters. 2016.
- [4] D. Maclaurin and D. Duvenaud and R. Adams. Gradient-based Hyperparameter Optimization Through Reversible Learning 2015.
- [5] Hanxiao L., Simonyan K., Yang .Y DARTS: Differentiable Architecture Search. 2018. URL: <https://arxiv.org/abs/1806.09055>.
- [6] Harrison Jr. , Rubinfeld D., Daniel L. Hedonic housing prices and the demand for clean air. 1978. URL: <https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-datab...>
- [7] Yann LeCun, Corinna Cortes, Christopher J.C. Burges, The MNIST Database of Handwritten Digits 1998. URL: <http://yann.lecun.com/exdb/mnist/>
- [8] A. Krizhevsky, V. Nair, G. Hilton. The CIFAR-10 dataset 2009. URL: <http://www.cs.toronto.edu/kriz/cifar.html>