KU LEUVEN

Joppe De Jonghe, Juha Carlon

Begeleiders: prof. dr. ir. Giovanni Samaey
dr. ir. Bert Mortier

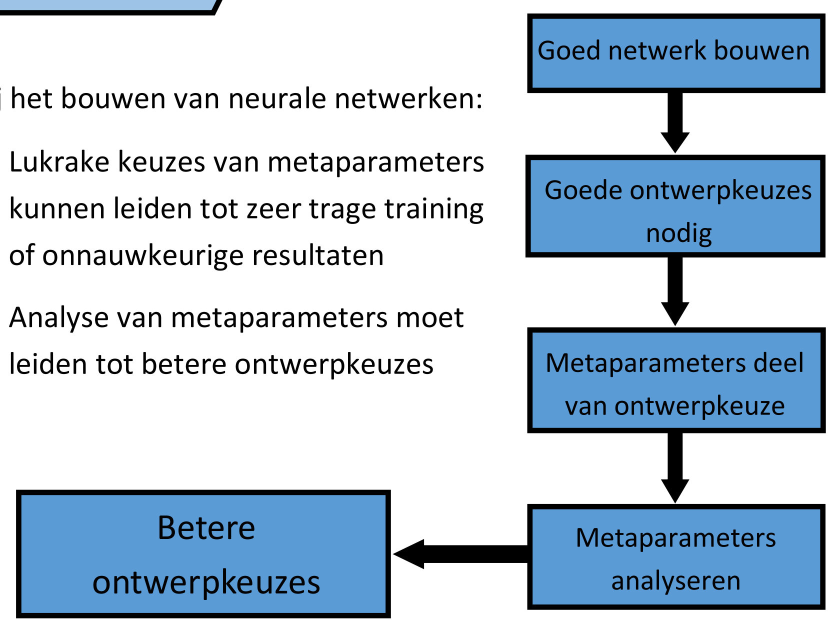
Academiejaar: 2020-2021

Analyseren van de invloed van metaparameters op neurale netwerken

Motivatie

Bij het bouwen van neurale netwerken:

- Lukrake keuzes van metaparameters kunnen leiden tot zeer trage training of onnauwkeurige resultaten
- Analyse van metaparameters moet leiden tot betere ontwerpkeuzes



Introductie

Neurale netwerken getraind met stochastic gradient descent.

$$Cost(p) = \underbrace{\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}\|\overbrace{y(x_i)}^{\text{Verwachte classificatie}} - \overbrace{a(x_i)}^{\text{Netwerk classificatie}}\|_2^2}_{\text{Netwerk fout}} + \underbrace{\frac{\lambda}{2m}\sum_{j=1}^{n} p_j^2}_{\text{Regularisatie}}$$

Verschillende waarden voor stap- en batch-grootte:

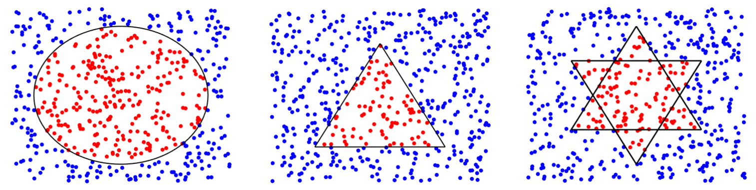
STAP-GROOTTE	BATCH-GROOTTE
0.05 0.15 0.25 0.35	1 10 100 500

Andere (meta)parameters constant houden.

Analyseren van metaparameters: *stap-grootte* en *batch-grootte*.

Invloed analyseren met:

- Eenvoudige netwerken
- Simpele vormen van data: cirkel, driehoek en ster

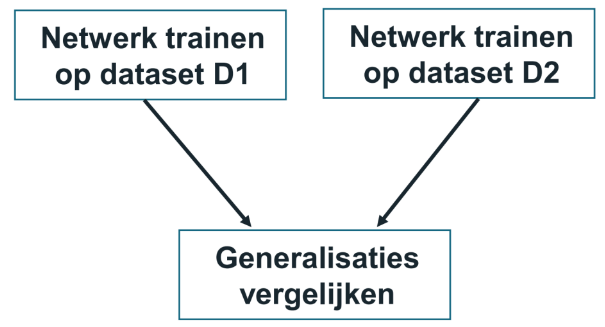


Classificatiefout analyseren aan de hand van:

- Compact datarooster
- Percentage correcte classificaties

Sensitiviteit analyseren aan de hand van:

- Dataset D1
- Een datapunt van D1 perturberen
- Resulteert in dataset D2



→ *Sensitiviteit draagt bij aan performantie analyse*

Referenties

- *Higham, Catherine F., and Desmond J. Higham. "Deep learning: An introduction for applied mathematicians." SIAM Review 61.4 (2019): 860-891.*
- *Hardt, Moritz, Ben Recht, and Yoram Singer. "Train faster, generalize better: Stability of stochastic gradient descent." International Conference on Machine Learning. PMLR, 2016.*
- *Jospin, Laurent Valentin, et al. "Hands-on Bayesian Neural Networks--a Tutorial for Deep Learning Users." arXiv preprint arXiv:2007.06823 (2020).*

Classificatiefout analyseren

Stap-grootte (enkel cirkel en ster):

Resultaten uit de grafieken roepen bepaalde bevindingen/vragen op:

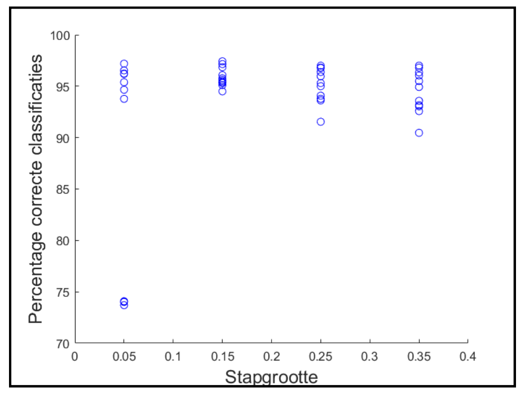
Cirkel:

- Stap van 0.05 minder betrouwbaar voor het halen van een hoog percentage correcte classificaties.
  → Mogelijk geen convergentie.
- Lijkt op een dalende trend bij hogere stap-grootte.
  → Gevoeliger om over minimale waarde van de kostfunctie te springen bij hogere stap-grootte?

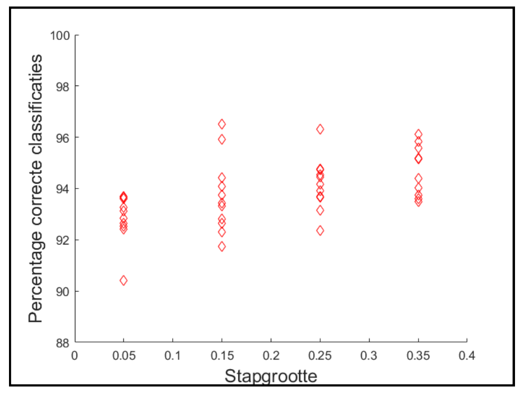
Ster:

- Groot percentage correcte classificaties voor iedere stap-grootte maar een stijgende trend.
  → Mogelijk geen convergentie. Grotere stap-grootte mogelijk?

Cirkel



Ster



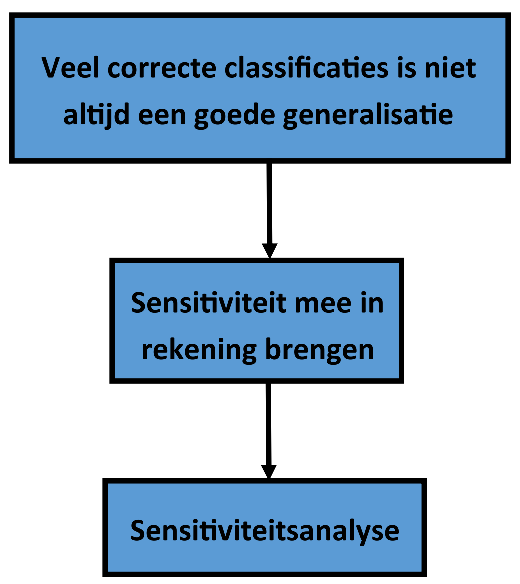
Batch-grootte:

Analyse van batch-grootte is idem aan deze van stap-grootte:

- Uitvoeren van testen
- Bevindingen afleiden uit resultaten
- Inzicht verkrijgen over de invloed van deze meta-parameter op het aantal correcte classificaties.

Generalisatie performantie:

Combinatie van percentage correcte classificaties en sensitiviteit van het resultaat.

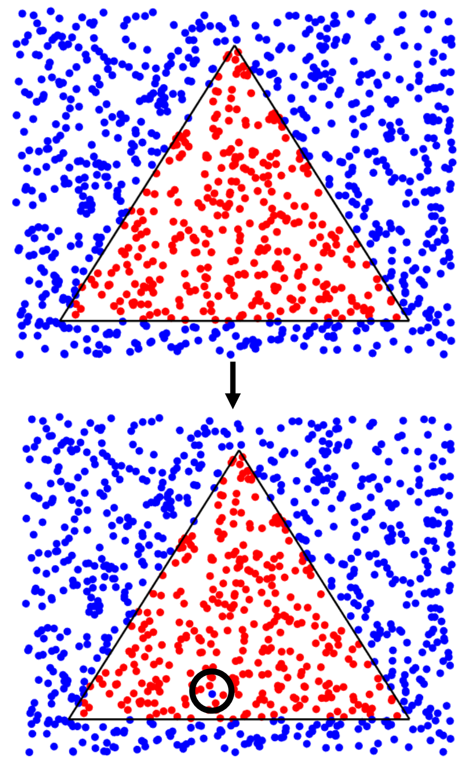


Sensitiviteit analyseren

Perturbatie van datapunt:

Niet alle perturbaties zijn even nuttig om generalisatie sensitiviteit te analyseren:

- Enkel punten gaan perturberen op een manier die een invloed kan uitoefenen op de generalisatie performantie.
- Classificatie van datapunten in de buurt van de rand van de data vorm omkeren.
- Creëeren van één 'ruis' punt.



Doel:

- Diepere analyse van netwerk + parameter combinaties die een hoog percentage correcte classificaties hebben.
- Indien het resultaat zeer sensitief is ten opzichte van de data kan dit op een slechte generalisatie duiden.

Testen:

n willekeurige verschillende perturbaties uitvoeren → steekproef:

- Gemiddelde absolute verschil berekenen tussen het percentage correcte classificaties met (= v_i) en zonder perturbatie (= u_i):
  $$\bar{X} = \frac{\sum_{i=1}^{n}|u_i - v_i|}{n}$$
- Gebruikmaken van t-test om te bepalen of er een significant verschil is van nul:
  $$T = \frac{\bar{X} - \mu_0}{S/n} \text{ met } S = \sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(|u_i - v_i| - \bar{X})^2}$$

Nulhypothese H_0: $\mu_0 = 0$ **Alternatieve hypothese H_1:** $\mu_0 > 0$

BAYESIAANS

Motivatie

In veel toepassingen moet een neuraal netwerk beslissingen nemen met een bepaalde zekerheid:

- Zelfrijdende auto's
- Autonome reactoren
- Robots

→ Bayesiaanse algoritmes

→ Bevatten ook metaparameters

→ Analyse van de invloed van metaparameters op onzekerheid mogelijk

Geanalyseerd algoritme

Metropolis-Hastings:

Draw $\boldsymbol{x}_0 \sim Initial$
while $n = 0$ **to** N **do**
 Draw $\boldsymbol{x}' \sim Q(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_n)$
 $p = min\left(1, \frac{Q(\boldsymbol{x}'|\boldsymbol{x}_n)}{Q(\boldsymbol{x}_n|\boldsymbol{x}')}\frac{f(\boldsymbol{x}')}{f(\boldsymbol{x}_n)}\right)$
 Draw $k \sim Bernoulli(p)$
 if k **then**
  $\boldsymbol{x}_{n+1} = \boldsymbol{x}'$
  $n = n + 1$
 end if
end while

Met: $Q(\boldsymbol{x}'|\boldsymbol{x}_n) = \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_n, \sigma^2)$

→ Q symmetrisch verdeeld

→ $p = min\left(1, \frac{f(\boldsymbol{x}')}{f(\boldsymbol{x}_n)}\right)$

Onzekerheid visualiseren

Trekken van *n* verschillende netwerken uit het resultaat van Metropolis-Hastings algoritme:

- Data door ieder netwerk sturen
- Twee mogelijkheden (A of B)

Voor ieder datapunt:

→ n_1 netwerken die punt als A classificeren

→ n_2 netwerken die punt als B classificeren

$$\frac{|n_1 - n_2|}{n} \approx 0 \text{ Zeer onzeker}$$

$$\frac{|n_1 - n_2|}{n} \approx 1 \text{ Zeer zeker}$$

Visualisatie data cirkel: