Нейронные сети
Продолжение

Обучение

Обозначим все параметры сети как θ.

Пусть $\mathscr{L}(\hat{y}_\theta,\ y)$ — **функция потерь** на объекте x.

Она сравнивает предсказания сети $\hat{y}_\theta$ с откликом y на объекте x.

Минимизируем **эмпирический риск** по обучающей выборке $x_1,\ldots,x_n$:

$$Q(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \mathscr{L}(\hat{y}_{\theta,\mathrm{i}},\ y_i) \ \to \min_\theta$$

Решаем с помощью **градиентного спуска**

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta \nabla Q(\theta_t), \quad \text{где } \eta \text{ — скорость обучения}$$

Инициализация

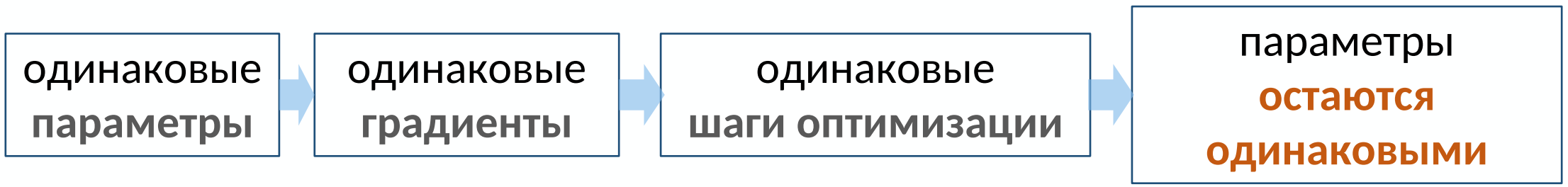
Инициализация

Решаем с помощью **градиентного спуска**

Необходимо **инициализировать параметры**.

Хорошо ли инициализировать все одной константой?

Плохо



Инициализация

Инициализировать **случайно** небольшими значениями
из нормального или равномерного распределений?

Инициализация

Инициализировать **случайно** небольшими значениями
из нормального или равномерного распределений?

Проблема *рассмотрим прямой проход*

$$u = \sum_{j=1}^{d} w_j x_j \qquad \mathbf{D}(u) = \mathbf{D}\left(\sum_{j=1}^{d} w_j x_j\right) = \sum_{j=1}^{d} \mathbf{D}(w_j) \cdot x_j^2$$

$\Rightarrow$ из-за суммирования дисперсия увеличивается в d раз.

- Большая дисперсия может привести к численным ошибкам
  или насыщению ф-й активации *tanh* и *sigmoida*.
- Маленькая — к околонулевым промежуточным представлениям.

Инициализировать случайно небольшими значениями
из нормального или равномерного распределений с дисперсией $1/d$.

Инициализация

Более сложные методы

Во время *прямого прохода* дисперсия выхода слоя увеличивается в d_{in} раз,
где d_{in} — размерность входа слоя.

Проблема *рассмотрим обратный проход*.
Дисперсия градиента увеличивается в d_{out} раз,
где d_{out} — размерность выхода слоя.

Инициализация Ксавьера (Xavier)
Инициализировать случайно небольшими значениями
из нормального или равномерного распределений с дисперсией $\frac{2}{d_{in} + d_{out}}$

статья

Инициализация

Более сложные методы

Мы ранее опирались на то, что функция активации будет tanh или sigmoid.
Проблема *рассмотрим функцию активации ReLU*.
Она имеет смещенную относительно нуля область значений.

Инициализация Каминга (Kaiming)
Инициализировать случайно небольшими значениями
из нормального или равномерного распределений с дисперсией $\frac{2}{d_{in}}$

статья

Методы оптимизации

Методы оптимизации

Задача

$$f(x) \to \min_x$$

Стохастический градиентный спуск

$$x_{t+1} = x_t - \eta \nabla f(x_t)$$

Приведем к записи вида

$$x_{t+1} = x_t + v_t,$$

где $v_t = -\eta \nabla f(\theta_t)$ — аналог скорости.

SGD не всегда оптимален.

Существуют более быстрые методы.

SGD + Momentum

Рассматривается смесь

- антиградиента
- шагов на предыдущих итерациях:

$$x_{t+1} = x_t + v_t$$

$$v_t = \mu v_{t-1} - \eta \nabla f(x_t),$$

где μ – скорость затухания.

Методы оптимизации

Проблема
Компоненты вектора градиента могут иметь **разные масштабы**.

Поэтому по некоторым координатам уже давно сошлись,

а по другим медленно двигаемся в сторону оптимума.

AdaGrad

Чтобы исправить это будем делать **нормировку**.

$$x_{t+1} = x_t - \frac{\eta}{\sqrt{g_t + \varepsilon}} \odot \nabla f(x_t)$$

$$g_t = g_{t-1} + \nabla f(x_t) \odot \nabla f(x_t)$$

где $\odot$ — поэлементное умножение,

ε — сглаживающий параметр, необходимый, чтобы избежать деления на 0.

Пояснение
В g хранится сумма квадратов частных производных.
При шаге делаем нормировку градиента на корень из этой суммы.

Преимущества

- У часто обновляющихся параметров знаменатель будет больше, а поэтому обновление будет не сильным.
- Слабо обновляющиеся параметры обновятся больше.
- Скорость обучения (learning rate) автоматически затухает при увеличении итерации.

Методы оптимизации

Проблема

В AdaGrad g может увеличиваться сколько угодно, что через некоторое время приводит к **слишком маленьким обновлениям весов** и параличу сети.

RMSProp

Будем использовать не сумму как в AdaGrad, а **экспоненциальное затухающее среднее**:

$$x_{t+1} = x_t - \frac{\eta}{\sqrt{g_t + \varepsilon}} \odot \nabla f(x_t)$$

$$g_t = \mu g_{t-1} + (1-\mu) \nabla f(x_t) \odot \nabla f(x_t)$$

v и g будут долго накапливаться вначале, для этого искусственно увеличиваем их на первых шагах

Adam

Комбинация RMSProp + Momentum

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{\frac{\sqrt{g_t + \varepsilon}}{1-\mu^t}} \odot \frac{v_{t+1}}{1-\beta^t}$$

$$v_t = \mu v_{t-1} - (1-\beta) \nabla f(x_t)$$

$$g_t = \mu g_{t-1} + (1-\mu) \nabla f(x_t) \odot \nabla f(x_t)$$

Adam – самый популярный оптимизатор

Методы оптимизации

Другие методы оптимизации

Кроме рассмотренных нами методов, существуют и другие методы оптимизации.

Например, Nesterov Momentum, AdaDelta, LBFGS и др.

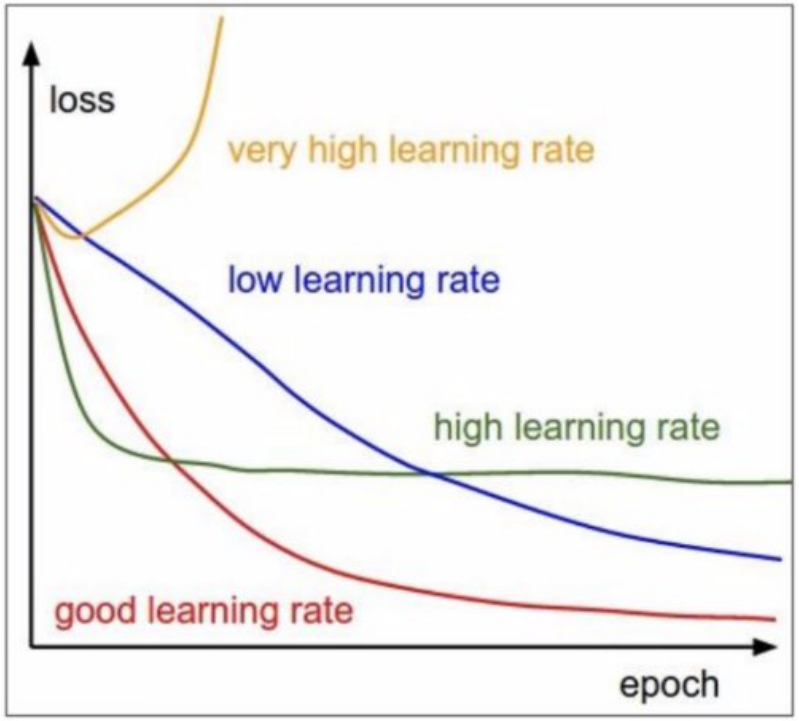
Почему мы рассматривали только методы первого порядка?

Потому что методы второго порядка гораздо более вычислительно затратны.

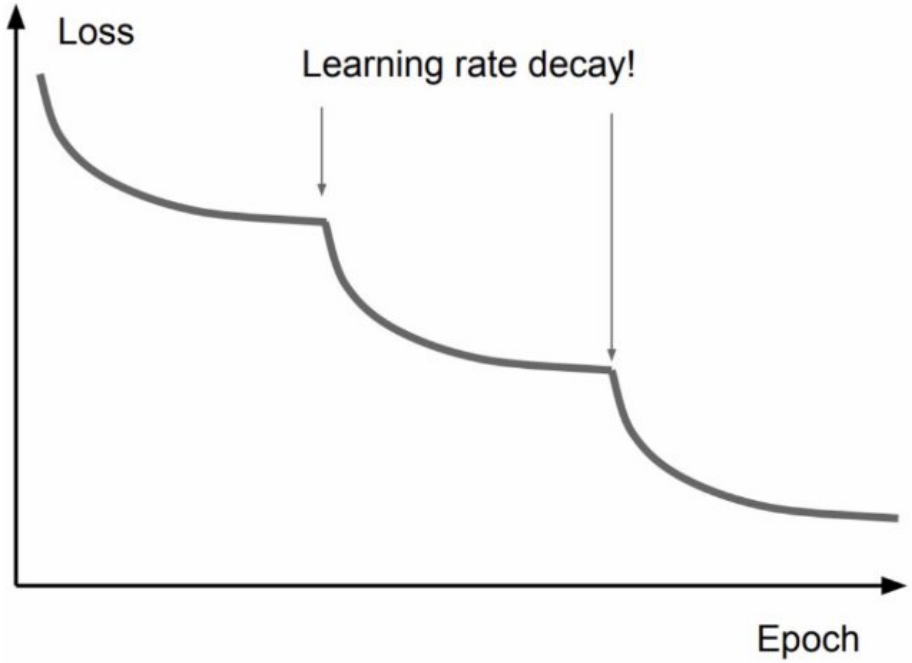
Методы оптимизации

Learning rate

- Нужно выбирать не слишком большим и не слишком маленьким.
- Стандартное значение – 0.001 для Adam.



Когда ошибка на валидации перестала уменьшаться на протяжении нескольких эпох можно уменьшить lr в несколько раз.
Это обычно дает небольшой прирост качества.



Методы оптимизации

Существует много способов изменения learning rate по ходу обучения:

- с разогревом (warmstart),
- ступенчатые,
- циклические и т.д.

Часть из них реализована в pytorch: обзор с визуализацией.

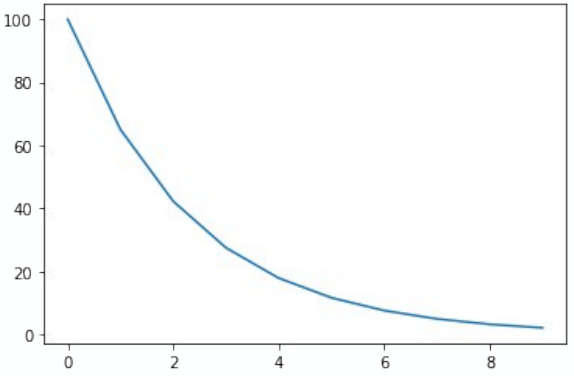
Для некоторых сложных архитектур изменение стратегии изменения learning rate очень важно.

Например, при обучении трансформеров.

Примеры

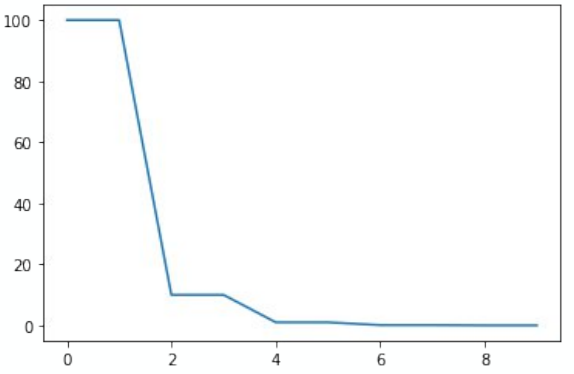
LAMBDA LR

$$\eta_t = \eta_0 \lambda_t$$



StepLR

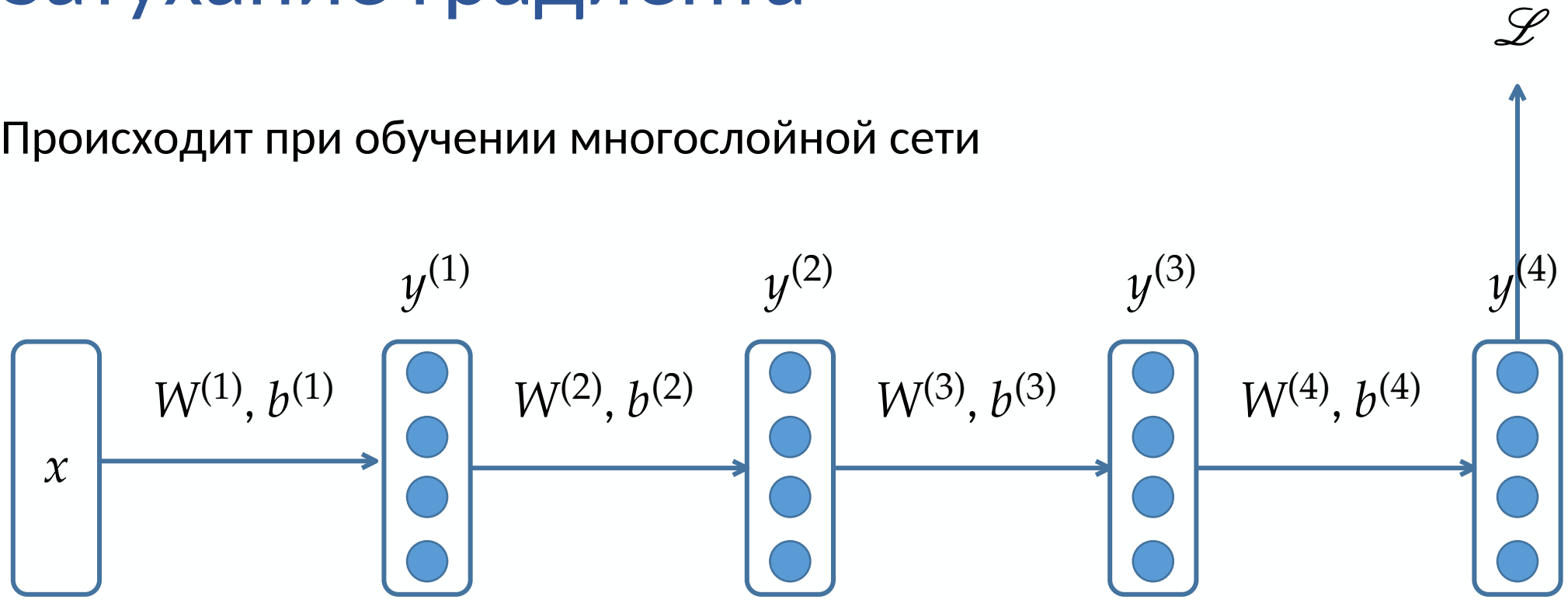
$$\eta_t = \begin{cases} \gamma \eta_{t-1}, \text{ если } t \,\%\, k = 0 \\ \eta_{t-1}, \text{ иначе} \end{cases}$$



Затухание и взрыв градиента

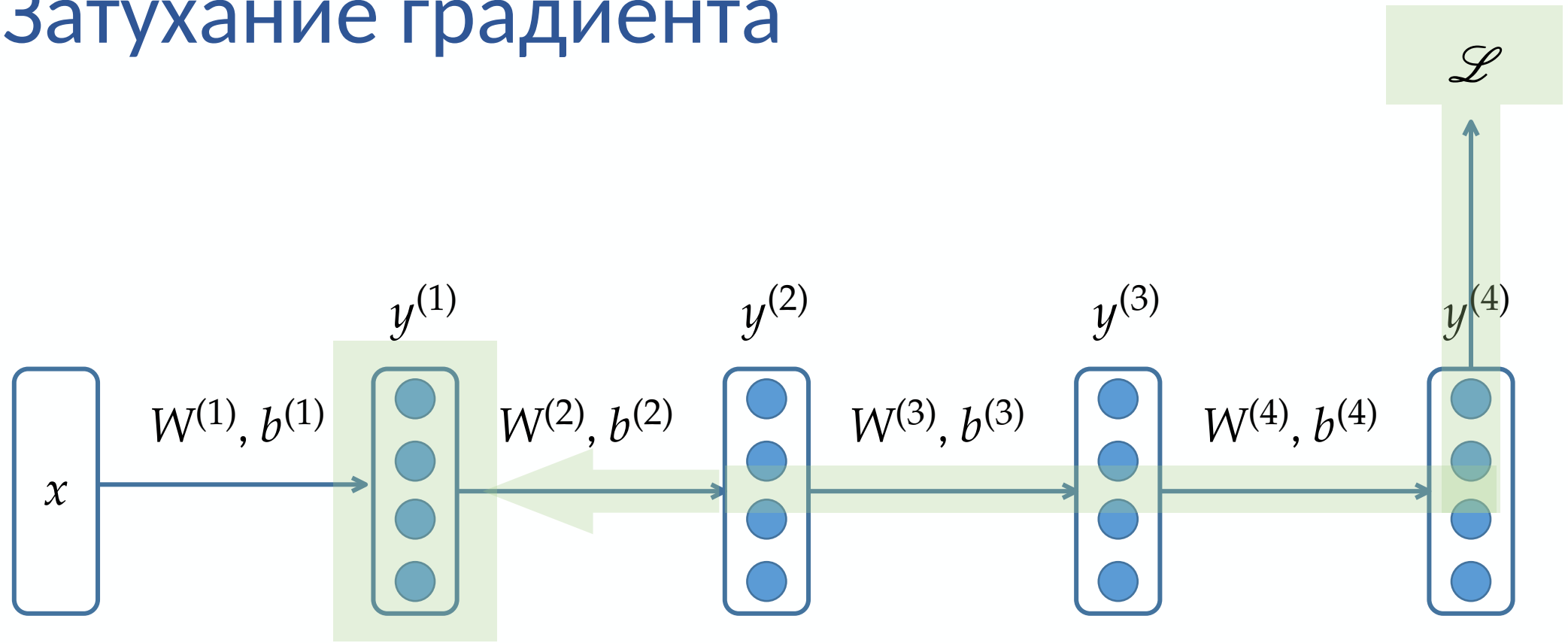
Затухание градиента

Происходит при обучении многослойной сети



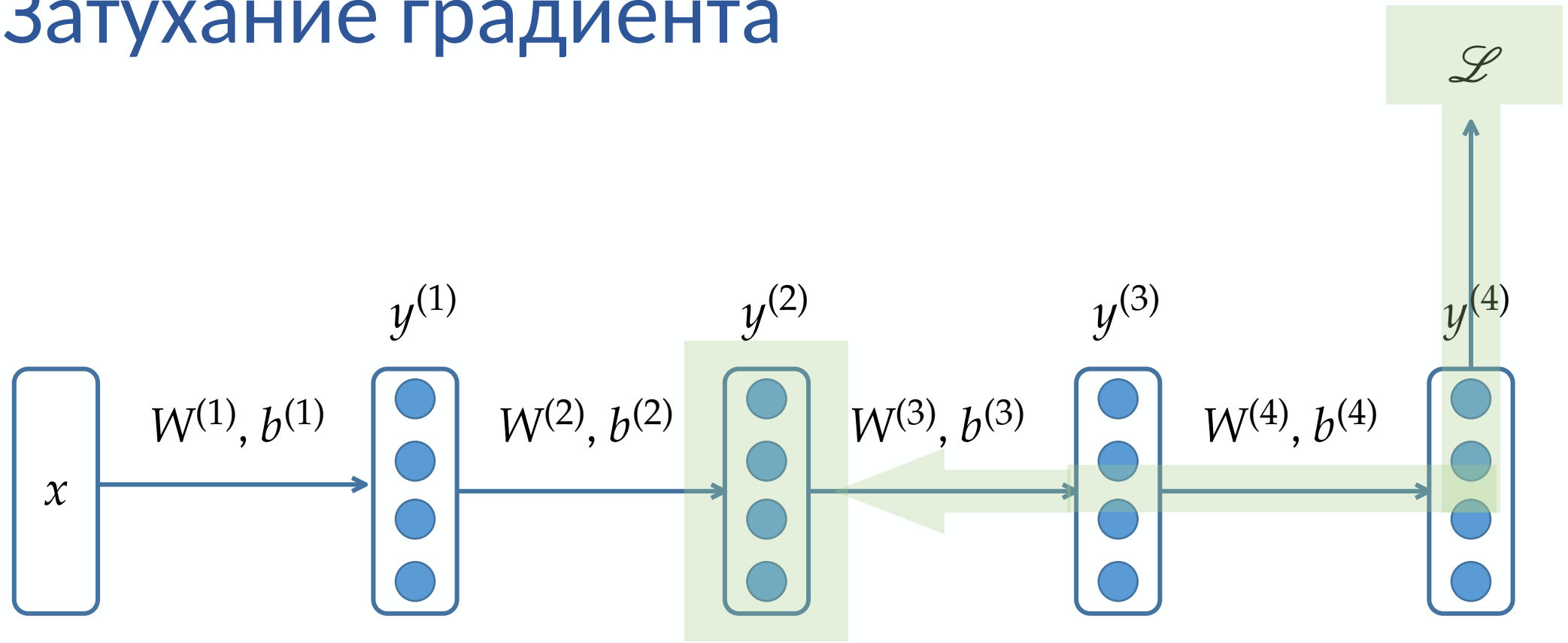
Сделали forward pass.
Теперь хотим обновить параметры.
Для этого делаем backward pass.
Посмотрим, как будут считаться градиенты для $y^{(1)}$.

Затухание градиента



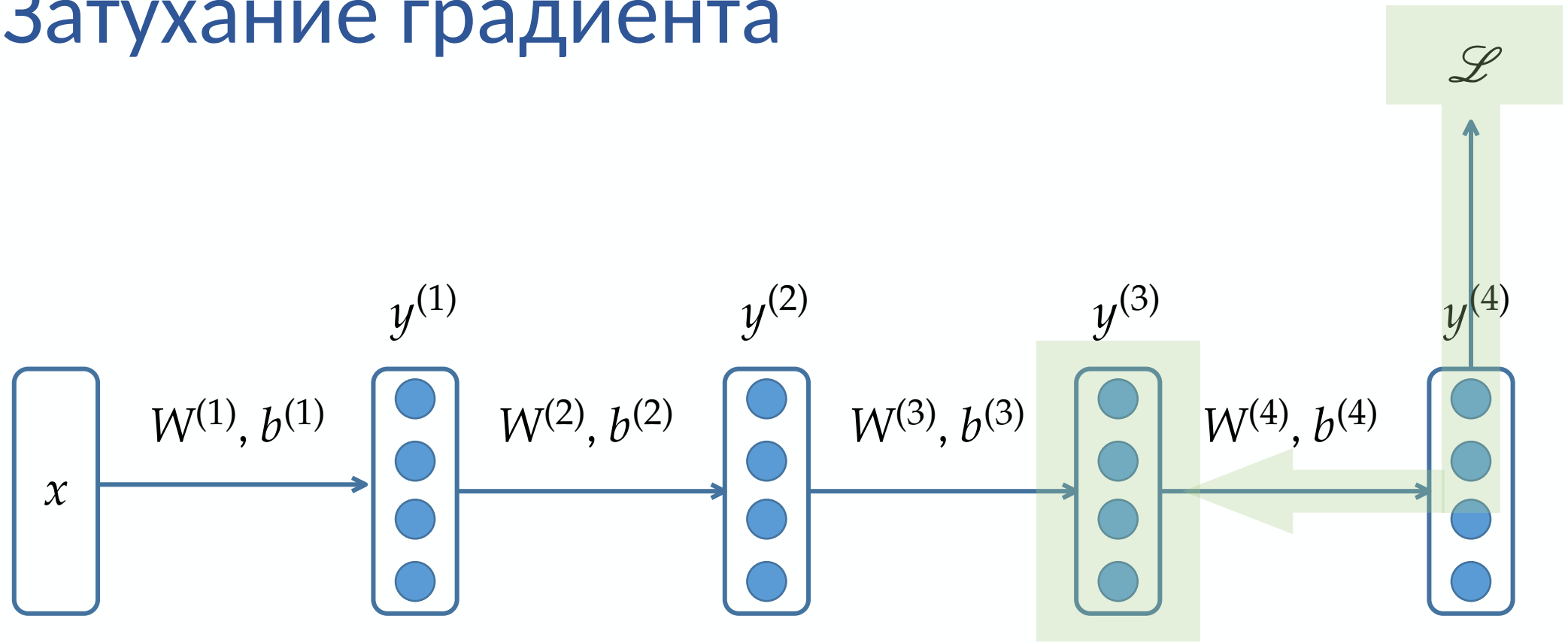
$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial y^{(1)}} =$$

Затухание градиента



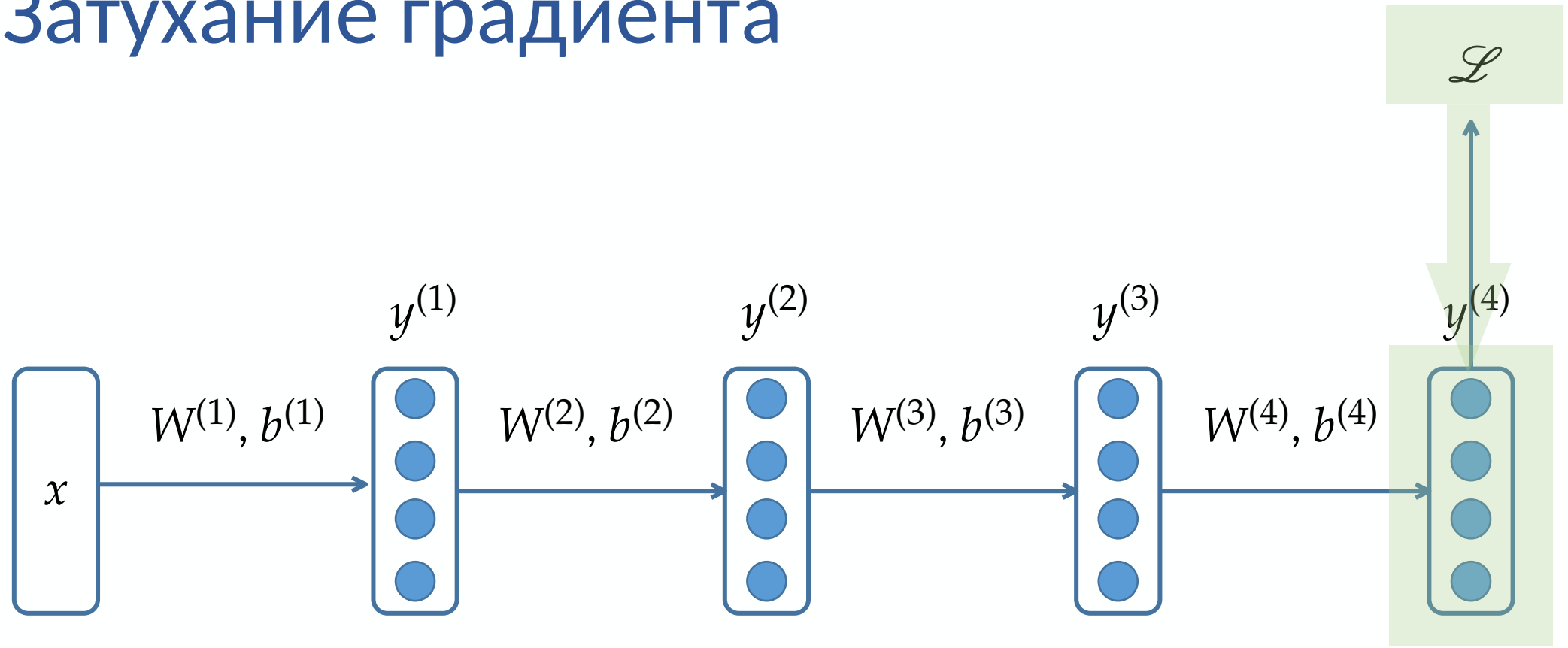
$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial y^{(1)}} = \frac{\partial y^{(2)}}{\partial y^{(1)}} \cdot \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial y^{(2)}} \cdot$$

Затухание градиента



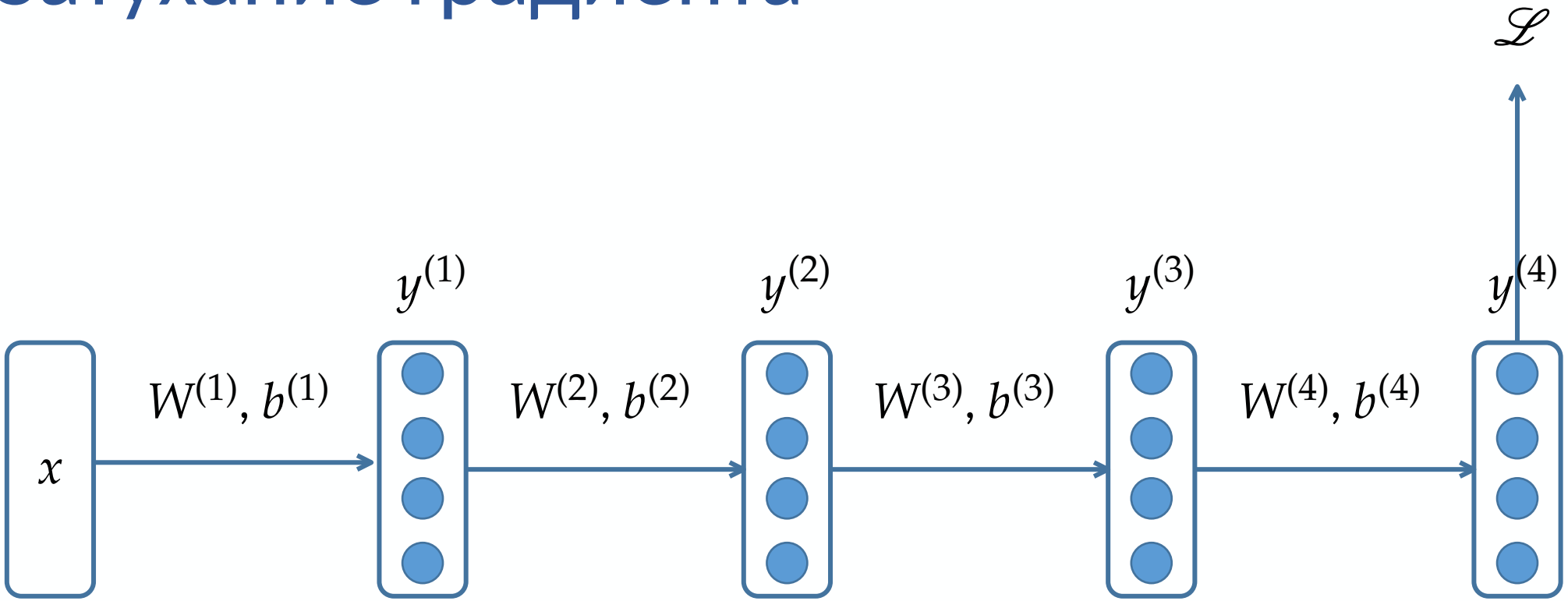
$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial y^{(1)}} = \frac{\partial y^{(2)}}{\partial y^{(1)}} \cdot \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial y^{(2)}} = \frac{\partial y^{(2)}}{\partial y^{(1)}} \cdot \frac{\partial y^{(3)}}{\partial y^{(2)}} \cdot \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial y^{(3)}}$$

Затухание градиента



$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial y^{(1)}} = \frac{\partial y^{(2)}}{\partial y^{(1)}} \cdot \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial y^{(2)}} = \frac{\partial y^{(2)}}{\partial y^{(1)}} \cdot \frac{\partial y^{(3)}}{\partial y^{(2)}} \cdot \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial y^{(3)}} = \frac{\partial y^{(2)}}{\partial y^{(1)}} \cdot \frac{\partial y^{(3)}}{\partial y^{(2)}} \cdot \frac{\partial y^{(4)}}{\partial y^{(3)}} \cdot \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial y^{(4)}}$$

Затухание градиента



$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial y^{(1)}} = \frac{\partial y^{(2)}}{\partial y^{(1)}} \cdot \frac{\partial y^{(3)}}{\partial y^{(2)}} \cdot \frac{\partial y^{(4)}}{\partial y^{(3)}} \cdot \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial y^{(4)}} \sim 0$$

Если градиенты очень маленькие, то из-за пределов вычислительной точности они превращаются в 0.

Затухание градиента

Причины, почему производная может быть близкой к 0

- Неудачная **функция активации**.

- При **приближении к локальному оптимуму**

в большинстве случаев функции меняются слабо.
Это приводит к небольшим изменениям градиентов.

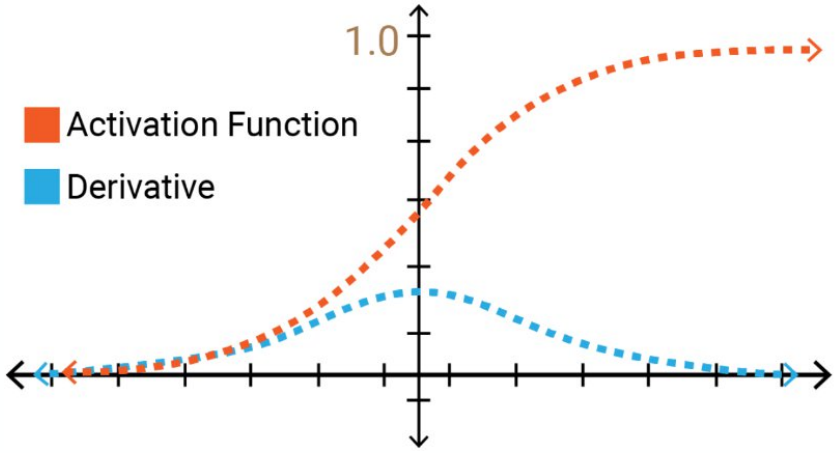
- Неудачная **начальная инициализация**.

Затухание градиента

Сигмоида

- Имеет горизонтальные асимптоты.
  Для больших значений аргумента
  производная имеет очень маленькие значения.
- Многие из производных выхода по входу $\frac{\partial a}{\partial u}$ могут иметь маленькие значения.
- При перемножении производных вида $\frac{\partial a}{\partial u}$ произведение может занулиться.
- Обновление весов практически не изменит веса. Наступит “паралич сети”.

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

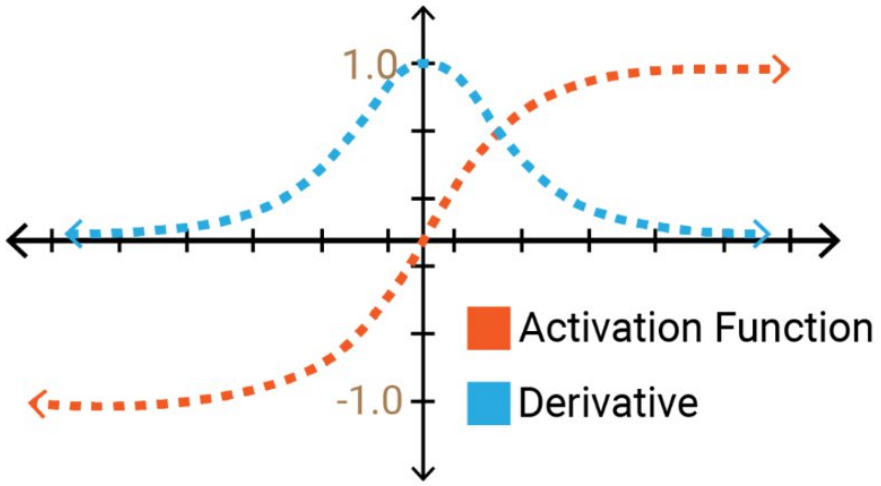


Затухание градиента

Гиперболический тангенс

Такая же ситуация, как и
с сигмоидальной функцией.

$$tanh(z) = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}} = 2\sigma(2z) - 1$$



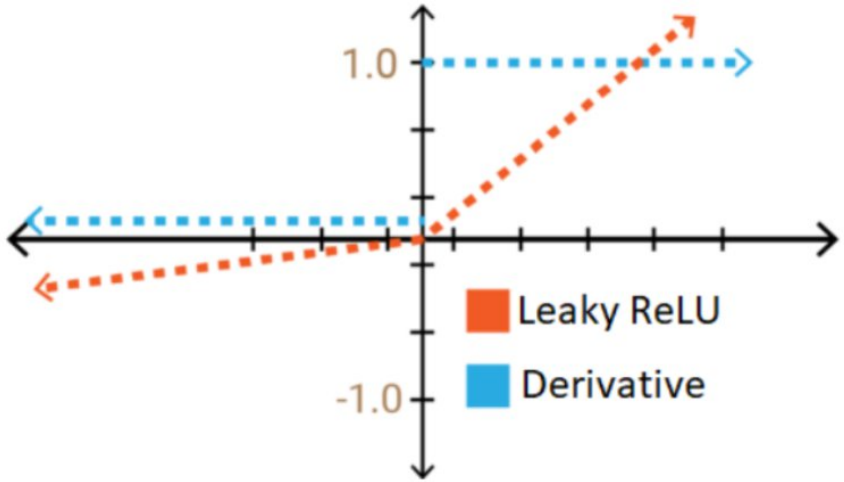
Затухание градиента

Leaky ReLU

$$lrelu(z) = z \cdot I\{z > 0\} + \alpha z \cdot I\{z \leq 0\}$$

- Производная либо равна 1, либо α.
- Матрица производных $\frac{\partial a}{\partial u}$ будет состоять только из чисел 1 и α.
- Паралич сети может возникнуть только в случае, если почти вся матрица $\frac{\partial a}{\partial u}$ состоит из α,

Это произойдет с очень маленькой вероятностью.
На практике встречается только
в очень глубоких сетях.



ReLU

То же что Leaky ReLU при $\alpha = 0$.

- Матрица производных $\frac{\partial a}{\partial u}$ будет состоять только из чисел 1 и 0.
- Паралич сети может возникнуть.

Затухание градиента

Решение проблемы затухания градиента

- Использование функций активаций без горизонтальных асимптот.

То есть не использовать sigmoid, tanh и прочие.

- Residual connections (shortcuts)

К выходу какого-то слоя прибавляем выход какого-то из предыдущих слоев.

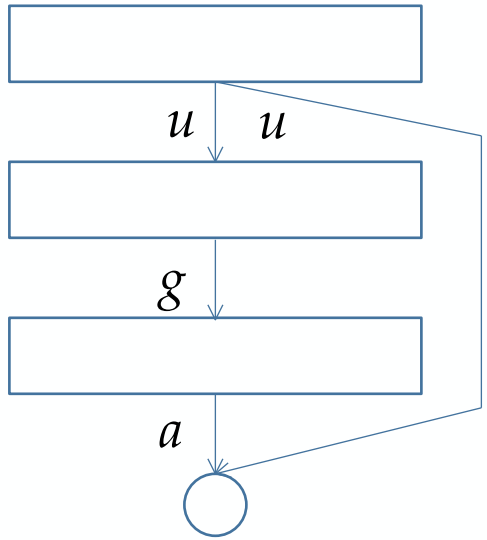
Пусть skip-connection делается через два слоя. Рассматриваем 3 слоя.

Пусть

- u - выход первого из них,
- g - выход среднего слоя,
- a - выход последнего слоя,
- a' - результат после прибавления u.

$\frac{\partial a'}{\partial g} \cdot \frac{\partial g}{\partial u}$ - произведение, присутствующее в BackProp.

$$\frac{\partial a'}{\partial g} \cdot \frac{\partial g}{\partial u} = \frac{\partial a'}{\partial u} = \frac{\partial a}{\partial u} + 1 = \frac{\partial a}{\partial g}\frac{\partial g}{\partial u} + 1 > 0 \text{ при } \frac{\partial a}{\partial g}\frac{\partial g}{\partial u} \sim 0 .$$



$$a' = a + u$$

Взрыв градиента

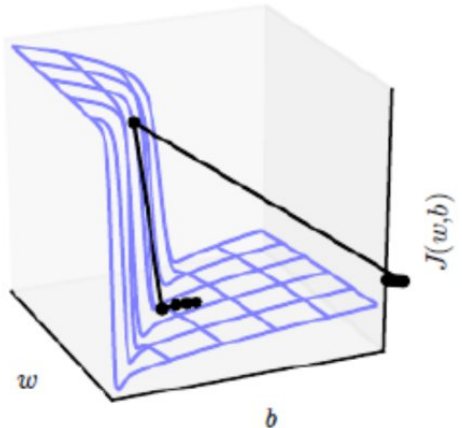
Проблемы

- При подсчете градиента друг на друга умножаются

градиенты выхода по входу $\frac{\partial a}{\partial u}$ от разных слоев.

- Если каждый градиент достаточно большой, то при вычислении умножения

может произойти переполнение.
Если даже переполнение не произошло, то при обновлении весов
веса сильно изменятся, что приводит к нестабильности сети.



Взрыв градиента

Решения

- **Добавление к функции потерь регуляризации весов (weight decay)**

Раньше веса обновлялись как $\theta_t = \theta_{t-1} - \eta \nabla Q(\theta_t)$.

Добавляем регулиризацию (напр. L2) к лоссу. $\tilde{Q} = Q + \frac{\lambda}{2}\theta^2$.

Теперь веса обновляются как $\theta_t = \theta_{t-1} - \eta \nabla Q(\theta_t) - \eta \lambda \theta_t$.

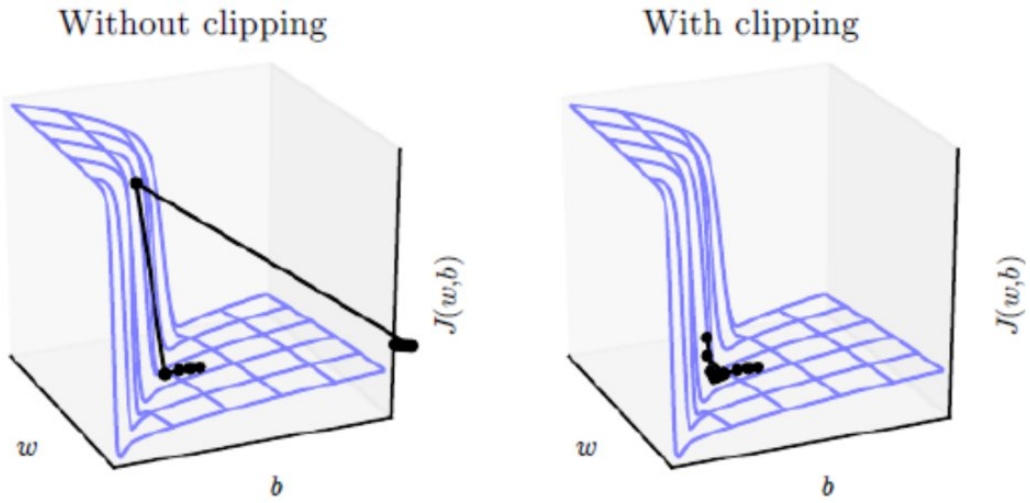
- **Gradient clipping**

Уставливается гиперпараметр threshold

и если норма градиента больше threshold,

то градиент масштабируется.

$$\| G \| > threshold \Rightarrow G = \frac{threshold \cdot G}{\| G \|}$$



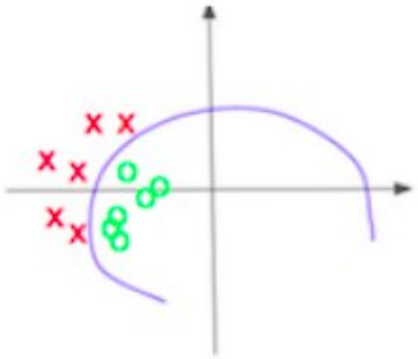
Пакетная нормализация / Batch Normalization

Статья на русском про Batch-нормализацию

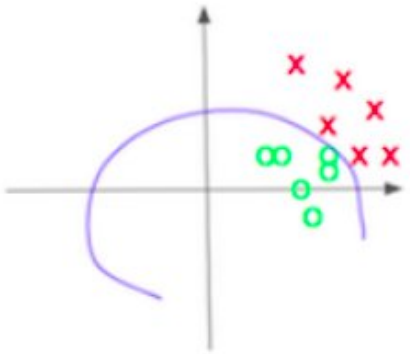
Ковариантный сдвиг

Ковариантный сдвиг —это ситуация, когда распределения значений **признаков** в обучающей и тестовой выборке имеют разные параметры (математическое ожидание, дисперсия и т.д.).

обучающая выборка

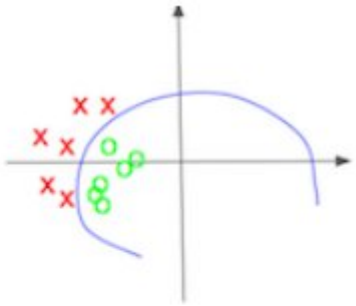


тестовая выборка

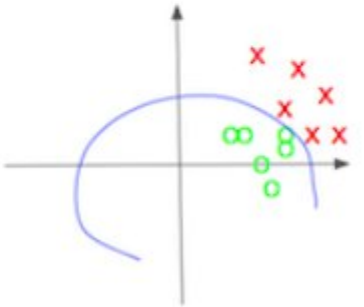


Ковариантный сдвиг

- В обучающей выборке только красные розы.



- В тестовой — розы разных цветов. Параметры распределения данных изменились.



Проблема :(

Ковариантный сдвиг

Ковариантный сдвиг будет незначительным,
если распределение признаков в обучающем и тестовом наборе данных
будет практически одинаковым.

Простое решение
Перемешаем данные случайным образом.
Тогда распределение везде будет примерно одинаковым.

Ковариантный сдвиг и нейронные сети

Самый распространенный способ обновления весов нейронной сети — **Mini-batch Gradient Descent.**

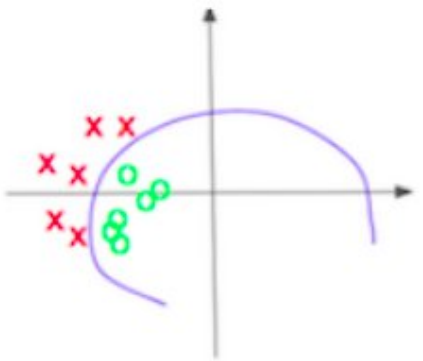
$$\theta_t = \theta_{t-1} - \eta\nabla\left(\frac{1}{b}\sum_{k=1}^{b}\mathscr{L}(\hat{y}_{\theta_{t-1},i_k},\ y_{i_k})\right)$$

Разбиваем данные на блоки (батчи). $(x_{i_1},\ldots,x_{i_b})$ — текущий батч.

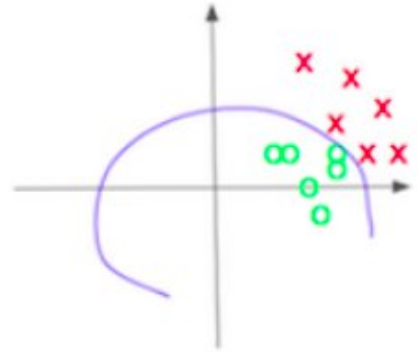
Для каждого блока считаем градиент и обновляем параметры.

Теперь **ковариантный сдвиг** может возникнуть между двумя **батчами**.

первый батч

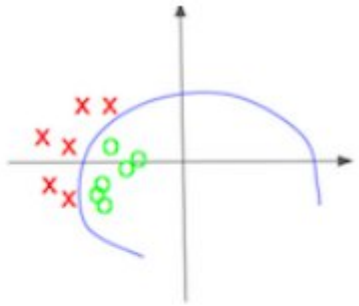


второй батч

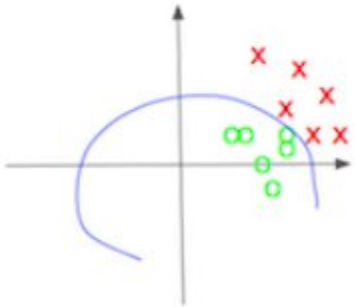


Ковариантный сдвиг и нейронные сети

- В первом батче
только красные розы.
Модель изменила параметры
под первый батч.



- Во втором —
розы разных цветов.
Параметры распределения
данных существенно изменились.
Модели теперь нужно
сильно изменять параметры под второй батч.
Она начнет «скакать» в пространстве параметров



Ковариантный сдвиг и нейронные сети

Простое решение
Перемешаем данные случайным образом.
Тогда распределение везде будет примерно одинаковым.
Но так мы изменим **только входные данные**.

Проблема ковариантного сдвига может наблюдаться
для входов каждого слоя нейронной сети!

Мы не можем воспользоваться простым решением,
т. к. распределение входных данных для каждого узла скрытых слоев
изменяется каждый раз, когда происходит обновление параметров в предыдущем слое.
Эта проблема называется **внутренним ковариантным сдвигом**.

Эту проблему можно решить понижением скорости обучения,
регуляризацией или **батч-нормализацией**.

Пакетная нормализация / Batch Normalization

Батч-нормализация представляется
в виде обучаемого слоя нейронной сети.

Вход: $(x_{i_1},...,x_{i_b})$ — текущий батч.

Обучаемые параметры: γ, β

Константа: ϵ

Выходы: $(y_{i_1}, ..., y_{i_b})$

- Даем возможность нейросети выучить нужный для нее масштаб и сдвиг.
- Возможно для разных слоев нужны разные сдвиги и масштабы.
- Можно подобрать такие γ и β, что нормализации не будет.

Модель сама определит, какие нужны параметры, чтобы не потерять в точности.

Алгоритм вычисления y_{i_k} при обучении

- $\mu_i = \frac{1}{b}\sum_{k=1}^{b} x_{i_k}$ — матем. ожидание по батчу
- $\sigma_i^2 = \frac{1}{b}\sum_{k=1}^{b}(x_{i_k} - \mu_i)^2$ — дисперсия по батчу
- $\hat{x}_{i_k} = \frac{x_{i_k} - \mu_i}{\sqrt[2]{\sigma_i^2 + \epsilon}}$ — нормализация
- $y_{i_k} = \gamma\hat{x}_{i_k} + \beta$ — масштабирование и сдвиг

Все операции дифференцируемы,
значит можем делать backprop.

Пакетная нормализация / Batch Normalization

Почему батч-нормализация

— это решение проблемы?

Батч-нормализация

нормирует данные внутри батча.

Благодаря чему сдвиг и дисперсия для

всех батчей становятся одинаковыми.

Алгоритм вычисления y_{i_k} при обучении

- $\mu_i = \frac{1}{b}\sum_{k=1}^{b} x_{i_k}$ — матем. ожидание по батчу
- $\sigma_i^2 = \frac{1}{b}\sum_{k=1}^{b}(x_{i_k} - \mu_i)^2$ — дисперсия по батчу
- $\hat{x}_{i_k} = \frac{x_{i_k} - \mu_i}{\sqrt[2]{\sigma_i^2 + \epsilon}}$ — нормализация
- $y_{i_k} = \gamma\hat{x}_{i_k} + \beta$ — масштабирование и сдвиг

Пакетная нормализация / Batch Normalization

Алгоритм вычисления y_{i_k} при обучении

- $\mu_i = \frac{1}{b}\sum_{k=1}^{b} x_{i_k}$ — матем. ожидание по батчу
- $\sigma_i^2 = \frac{1}{b}\sum_{k=1}^{b}(x_{i_k} - \mu_i)^2$ — дисперсия по батчу
- $\hat{x}_{i_k} = \frac{x_{i_k} - \mu_i}{\sqrt[2]{\sigma_i^2 + \epsilon}}$ — нормализация
- $y_{i_k} = \gamma\hat{x}_{i_k} + \beta$ — масштабирование и сдвиг

Тестирование

Можем ли мы при тестировании считать среднее и дисперсию по батчу?

Пакетная нормализация / Batch Normalization

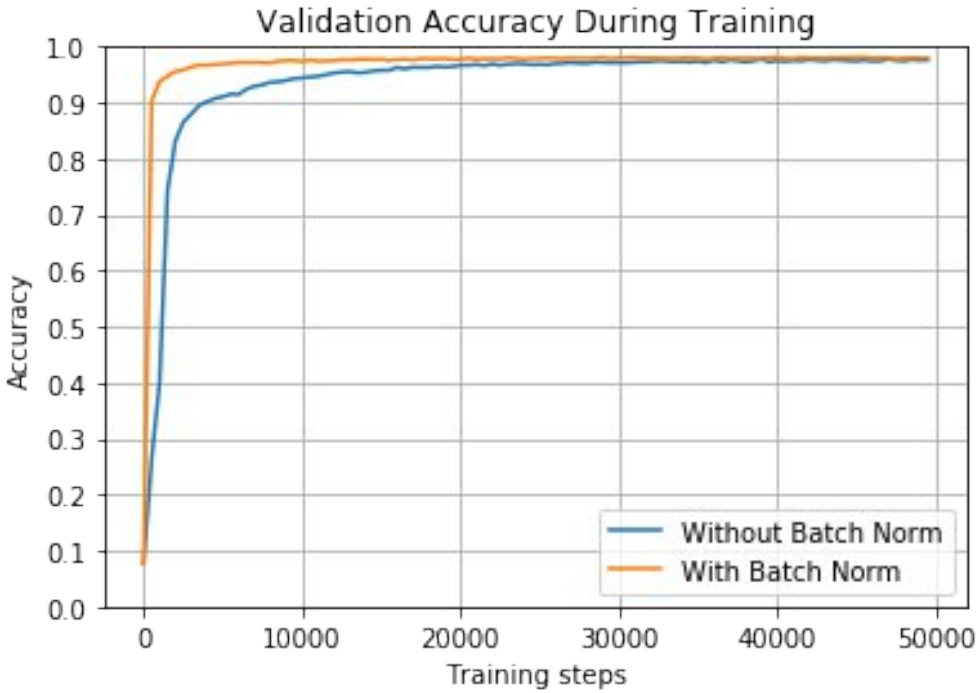
- Решается проблема **ковариационно сдвига**.
- Достигается более **быстрая сходимость** моделей,

несмотря на выполнение дополнительных вычислений.

- Можно ставить **большую скорость обучения**.
- Позволяет каждому слою сети обучаться

более независимо от других слоев,

т.к. слои теперь получают нормализованные данные.



Пример взят отсюда

Пакетная нормализация / Batch Normalization

Другое мнение

В статье критикуется идея,
что Batch Norm решает проблему ковариантного сдвига.

Полезность метода поясняется тем, благодаря нормализации выходов
градиенты более предсказуемо себя ведут,
что обеспечивает более быструю и эффективную оптимизацию.

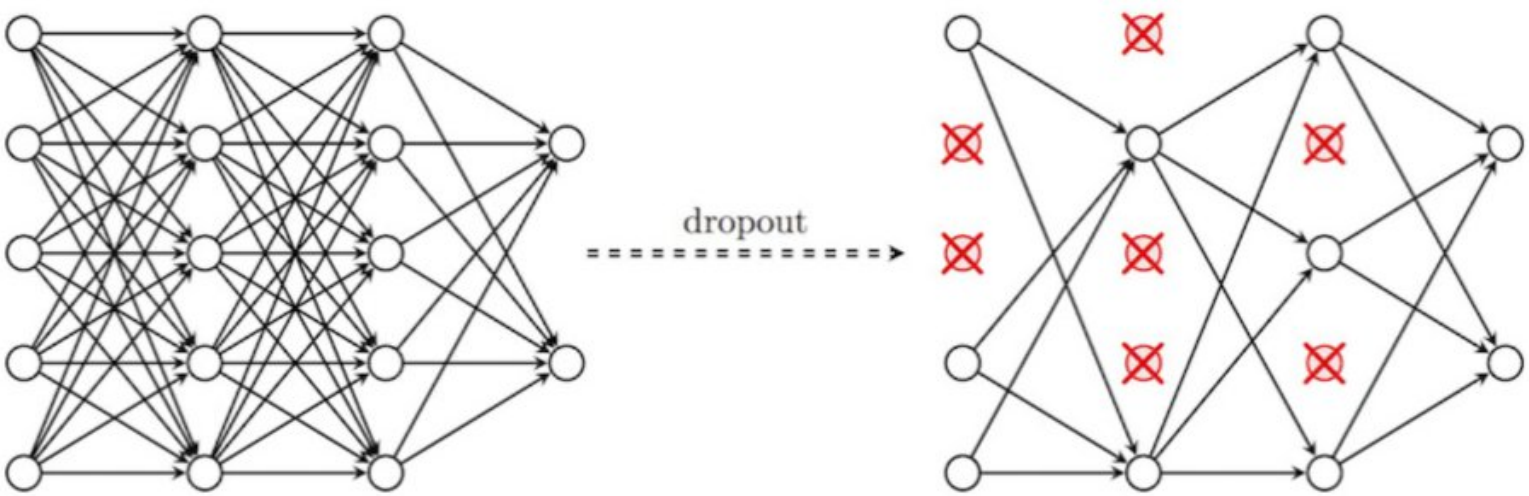
Dropout
Метод случайных отключений нейронов

Dropout

На этапе обучения на каждой итерации выключаем каждый нейрон случайно с вероятностью p.

Исключенные нейроны не вносят вклад ни на одном из этапов обучения, в том числе при backpropagation-е (производные по ним зануляются).

На этапе тестирования включаем все нейроны.



Dropout

Является одним из способов **борьбы с переобучением**.

1. Сеть работает с частично доступными данными
и поэтому становится более устойчивой к шуму.
2. В сети с большим кол-вом нейронов нейроны начинают адаптироваться друг под друга, коррелировать, что приводит к переобучению.
3. Dropout уменьшает совместную адаптацию и заставляет разные части сети
решать одну и ту же исходную задачу, а не подстраиваться под ошибки друг друга.

Dropout

Рассмотрим применение dropout к слою из H нейронов.
Обозначим выходы данного слоя (до отключения нейронов) как

$$\begin{pmatrix} u^1 \\ u^2 \\ \dots \\ u^h \\ \dots \\ u^H \end{pmatrix}$$

Пусть — индикатор того, что h-ый нейрон включен.
Нейроны отключаются с вероятностью p : $P(X_h = 0) = p$

Тогда dropout можно представить как новый слой,
выходы которого представляются в виде
обучение: $\hat{u}_h = X_h u_h$
тестирование: $\hat{u}_h = (1-p)u_h$.

При тестировании включаются все H нейронов, а при обучении было в среднем $(1-p)H$.
Все H нейронов пойдут на вход нейронам следующего слоя,
но во время обучения следующий слой видел значения в $(1-p)$ раз меньшие,
что приведет к некорректной работе. Поэтому нужно делать масштабирование.

Dropout

Dropout как обучение ансамбля сетей

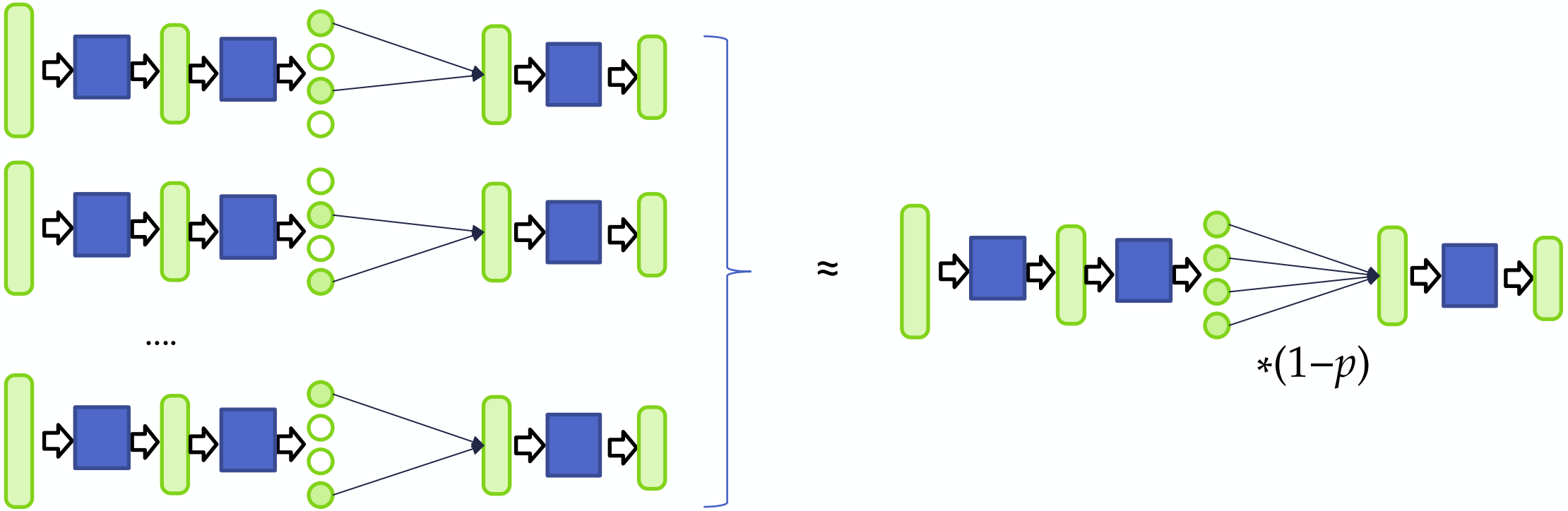
Пусть мы делаем dropout для слоя исходной сети, состоящего из H нейронов.

$1-p$ — вероятность того, что нейрон включен.

$(1-p)H$ — среднее количество включенных нейронов.

$C_H^{(1-p)H}$ — общее количество разных сетей, которое можем получить таким образом.

Очень похоже на то, что мы рассматриваем $C_H^{(1-p)H}$ новых сетей и потом усредняем результат. Поэтому также уменьшается переобучение.



Inverted Dropout

Делаем масштабирование не во время тестирования, а во время обучения.

Обучение: $\hat{u}_h = \frac{1}{1-p} X_h u_h$

Тестирование: $\hat{u}_h = u_h$

Во многих фреймворках реализован именно этот вид dropout-а.

- Позволяет не изменять код предсказания.
- Не требует дополнительных операций при тестировании,
  что делает предсказание более быстрым.

ВСЁ!