Глубокое обучение и вообще

Кирпа Вадим

26 октября 2022 г.

Посиделка 3: эвристики для обучения сеток

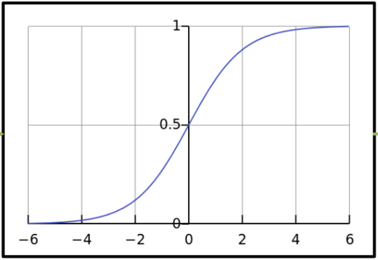
Agenda

- Какими бывают функции активации
- Инициализация весов в нейросетках
- Нормализация по батчам
- Dropout
- Другие эвристики, используемые при обучении нейронных сетей

Какими бывают функции активации и как через них пробросить градиент

Sigmoid activation

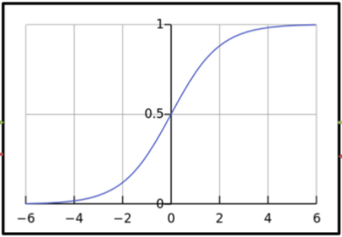
x



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

Sigmoid activation

x



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

$$\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{\partial L}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \sigma}$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x} = \sigma(x)(1 - \sigma(x))$$

Паралич сети

- В случае сигмоиды $\sigma'(x) = \sigma(x) \cdot (1 - \sigma(x))$
- Сигмоида принимает значения на отрезке $[0; 1]$, значит максимальное значение её производной это $\frac{1}{4}$
- Если сеть очень глубокая, происходит затухание градиента
- Градиент затухает экспоненциально $\Rightarrow$ сходимость замедляется, более ранние веса обновляются дольше, более глубокие веса быстрее $\Rightarrow$ значение градиента становится ещё меньше $\Rightarrow$ наступает паралич сети
- В сетях с небольшим числом слоёв этот эффект незаметен

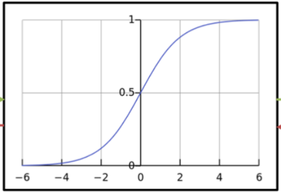
Центрирование

- Сигмоида не центрирована относительно нуля
- Выход слоя мы обычно находим как $o_i = \sigma(h_i)$, он всегда положительный, значит градиент по весам, идущим на вход в текущий нейрон тоже положительные $\Rightarrow$ они обновляются в одинаковом направлении
- Сходимость идёт медленнее и зигзагообразно, но идёт

Sigmoid activation

x

$$\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{\partial L}{\partial \sigma}\frac{\partial \sigma}{\partial x}$$



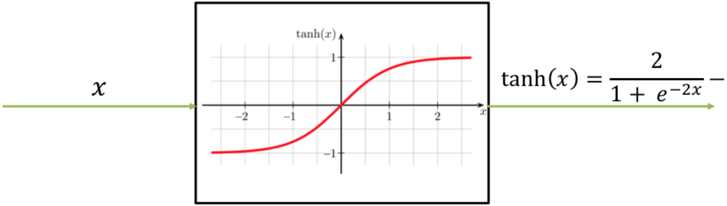
$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \sigma}$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x} = \sigma(x)(1 - \sigma(x))$$

- Способствует затуханию градиента
- Не центрирована относительно нуля
- Вычислять e^x дорого

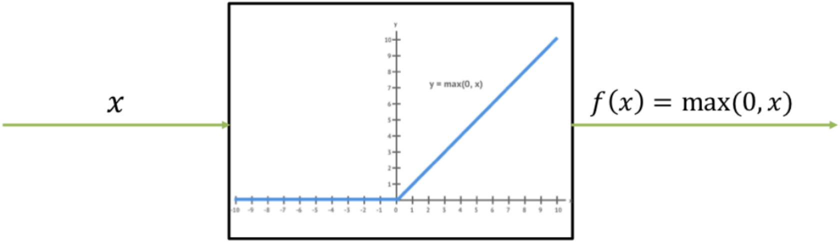
Tanh activation



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

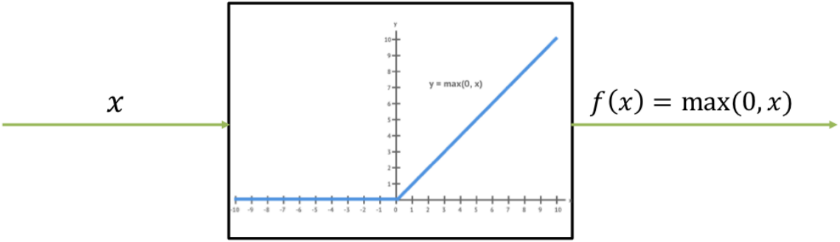
- Центрирован относительно нуля
- Всё ещё похож на сигмоиду
- $f'(x) = 1 - f(x)^2 \Rightarrow$ затухание градиента

ReLU activation



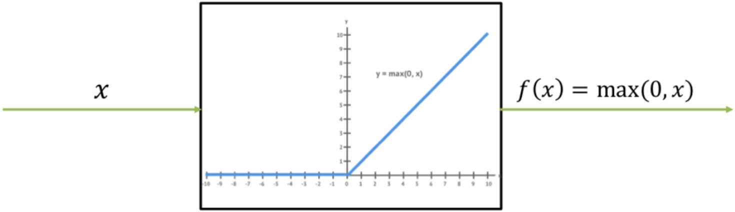
- Быстро вычисляется
- Градиент не затухает
- Сходимость сеток ускоряется

ReLU activation



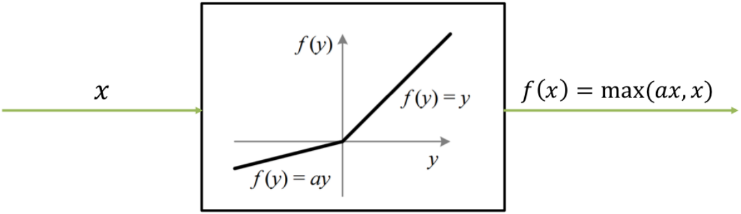
- Сетка может умереть, если активация занулится на всех нейронах
- Не центрирован относительно нуля

Зануление ReLU



- $f(x) = \text{max}(0, w_0 + w_1 \cdot h_1 + \ldots + w_k \cdot h_k)$
- Если w_0 инициализировано большим отрицательным числом, нейрон сразу умирает $\Rightarrow$ надо аккуратно инициализировать веса

Leaky ReLU activation



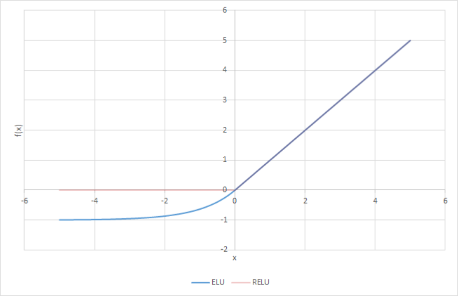
- Как ReLU, но не умирает, всё ещё легко считается
- Производная может быть любого знака
- Важно, чтобы $a \neq 1$, иначе линейность

Что же выбрать

- Обычно начинают с $ReLU$, если сетка умирает, берут $LeakyReLU$
- $ReLU$ — стандартный выбор для свёрточных сетей
- В рекурентных сетках чаще всего предпочитается $tanh$
- На самом деле это не очень важно, нужно держать в голове свойства функций, о которых выше шла речь и понимать, что от перебора функций обычно выигрыш в качестве довольно низкий
- Но есть и исключения ...

Краткий обзор функций активаций: https://arxiv.org/pdf/1804.02763.pdf

ELU activation



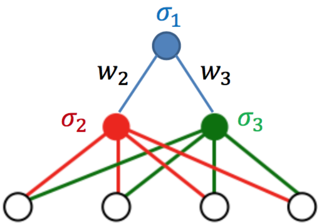
- ELU улучшает сходимость для глубоких сеток

$$f(x) = \begin{cases} x, x \geq 0 \\ \alpha \cdot (e^x - 1), x < 0 \end{cases}$$

https://arxiv.org/pdf/1511.07289.pdf

Инициализация весов

Инициализация весов

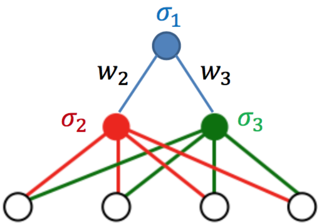


$$\frac{\partial L}{\partial w_2} = \frac{\partial L}{\partial \sigma_1}\sigma_1(1-\sigma_1)\sigma_2$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_3} = \frac{\partial L}{\partial \sigma_1}\sigma_1(1-\sigma_1)\sigma_3$$

- Что будет, если инициализировать веса нулями?

Инициализация весов



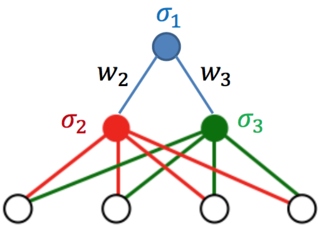
$$\frac{\partial L}{\partial w_2} = \frac{\partial L}{\partial \sigma_1}\sigma_1(1-\sigma_1)\sigma_2$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_3} = \frac{\partial L}{\partial \sigma_1}\sigma_1(1-\sigma_1)\sigma_3$$

- Что будет, если инициализировать веса нулями?

- σ_2 и σ_3 будут обновляться одинаково

Инициализация весов

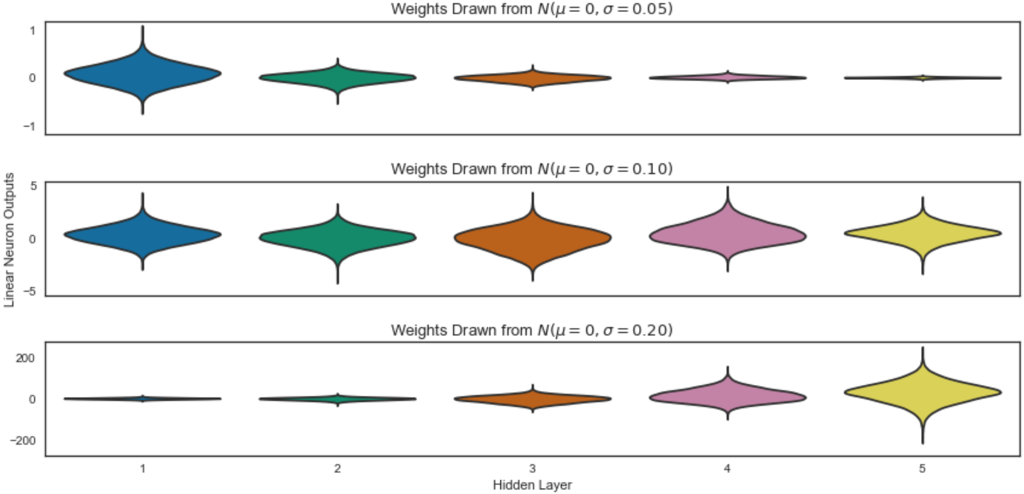


$$\frac{\partial L}{\partial w_2} = \frac{\partial L}{\partial \sigma_1}\sigma_1(1-\sigma_1)\sigma_2$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_3} = \frac{\partial L}{\partial \sigma_1}\sigma_1(1-\sigma_1)\sigma_3$$

- Хочется уничтожить симметрию
- Обычно инициализируют маленькими рандомными числами из какого-то распределения (нормальное, равномерное)

Симметричный случай



Инициализация весов

- Наши признаки X пришли к нам из какого-то распределения
- Выход слоя $f(XW)$ будет принадлежать другому распределению
- Если инициализировать веса неправильно, дисперсия распределения може от слоя к слою затухать (сигнал будет теряться) либо наоброт, возрастать (сигнал будет рассеиваться)
- Эмпирически было выяснено, что это может портить сходимость для глубоких сеток
- Хочется контролировать дисперсию

Инициализация весов

- Посмотрим на выход нейрона перед активацией:

$$h_i = w_0 + \sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i$$

- Дисперсия h_i выражается через дисперсии x и w
- Она не зависит от константы w_0
- Будем считать, что веса $w_1, \ldots, w_k \sim iid$, наблюдения $x_1, \ldots, x_n \sim iid$, а ещё x_i и w_i независимы между собой

Инициализация весов (симметричный случай)

$$\mathsf{Var}(h_i) = \mathsf{Var}(\sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathsf{Var}(w_i x_i) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\mathsf{E}(x_i)]^2 \cdot \mathsf{Var}(w_i) + [\mathsf{E}(w_i)]^2 \cdot \mathsf{Var}(x_i) + \mathsf{Var}(x_i) \cdot \mathsf{Var}(w_i)] =$$

Инициализация весов (симметричный случай)

$$\text{Var}(h_i) = \text{Var}(\sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \text{Var}(w_i x_i) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\text{E}(x_i)]^2 \cdot \text{Var}(w_i) + [\text{E}(w_i)]^2 \cdot \text{Var}(x_i) + \text{Var}(x_i) \cdot \text{Var}(w_i)] =$$

- Если функция активации симметричная, тогда $E(x_i) = 0$. Будем инициализировать веса с нулевым средним, тогда $E(w_i) = 0$.

Инициализация весов (симметричный случай)

$$\mathsf{Var}(h_i) = \mathsf{Var}(\sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathsf{Var}(w_i x_i) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\mathsf{E}(x_i)]^2 \cdot \mathsf{Var}(w_i) + [\mathsf{E}(w_i)]^2 \cdot \mathsf{Var}(x_i) + \mathsf{Var}(x_i) \cdot \mathsf{Var}(w_i)] =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathsf{Var}(x_i) \cdot \mathsf{Var}(w_i)$$

- Если функция активации симметричная, тогда $E(x_i) = 0$. Будем инициализировать веса с нулевым средним, тогда $E(w_i) = 0$.

Инициализация весов (симметричный случай)

$$\mathsf{Var}(h_i) = \mathsf{Var}(\sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathsf{Var}(w_i x_i) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\mathsf{E}(x_i)]^2 \cdot \mathsf{Var}(w_i) + [\mathsf{E}(w_i)]^2 \cdot \mathsf{Var}(x_i) + \mathsf{Var}(x_i) \cdot \mathsf{Var}(w_i)] =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathsf{Var}(x_i) \cdot \mathsf{Var}(w_i) = \mathsf{Var}(x) \cdot [n_{in} \cdot \mathsf{Var}(w)]$$

Инициализация весов (симметричный случай)

$$\mathsf{Var}(h_i) = \mathsf{Var}(\sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathsf{Var}(w_i x_i) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\mathsf{E}(x_i)]^2 \cdot \mathsf{Var}(w_i) + [\mathsf{E}(w_i)]^2 \cdot \mathsf{Var}(x_i) + \mathsf{Var}(x_i) \cdot \mathsf{Var}(w_i)] =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathsf{Var}(x_i) \cdot \mathsf{Var}(w_i) = \mathsf{Var}(x) \cdot \underbrace{[n_{in} \cdot \mathsf{Var}(w)]}_{=1}$$

Плохая инициализация весов

Пущай

$$w_i \sim U\left[-\frac{1}{\sqrt{n_{in}}}; \frac{1}{\sqrt{n_{in}}}\right],$$

тогда

$$\mathsf{Var}(w_i) = \frac{1}{12} \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{n_{in}}} + \frac{1}{\sqrt{n_{in}}}\right)^2 = \frac{1}{3n_{in}} \Rightarrow Var(h_i) = \frac{1}{3}$$

Получаем затухание!

Немного лучше

Пущай

$$w_i \sim U\left[-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{n_{in}}}; \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{n_{in}}}\right],$$

тогда

$$\mathsf{Var}(w_i) = \frac{1}{12} \cdot \left(\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{n_{in}}} + \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{n_{in}}}\right)^2 = \frac{1}{n_{in}} \Rightarrow Var(h_i) = 1$$

Немного лучше

Пущай

$$w_i \sim U\left[-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{n_{in}}}; \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{n_{in}}}\right],$$

тогда

$$\text{Var}(w_i) = \frac{1}{12} \cdot \left(\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{n_{in}}} + \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{n_{in}}}\right)^2 = \frac{1}{n_{in}} \Rightarrow Var(h_i) = 1$$

При forward pass на вход идёт n_{in} набобдений, при backward pass на вход идёт n_{out} градиентов $\Rightarrow$ канал с дисперсией может быть непостоянным, если число весов от слоя к слою сильно колеблется

Инициализация Ксавье (Глорота)

Для неодинаковых размеров слоёв невозможно удволетворить обоим условиям, поэтому обычно усредняют:

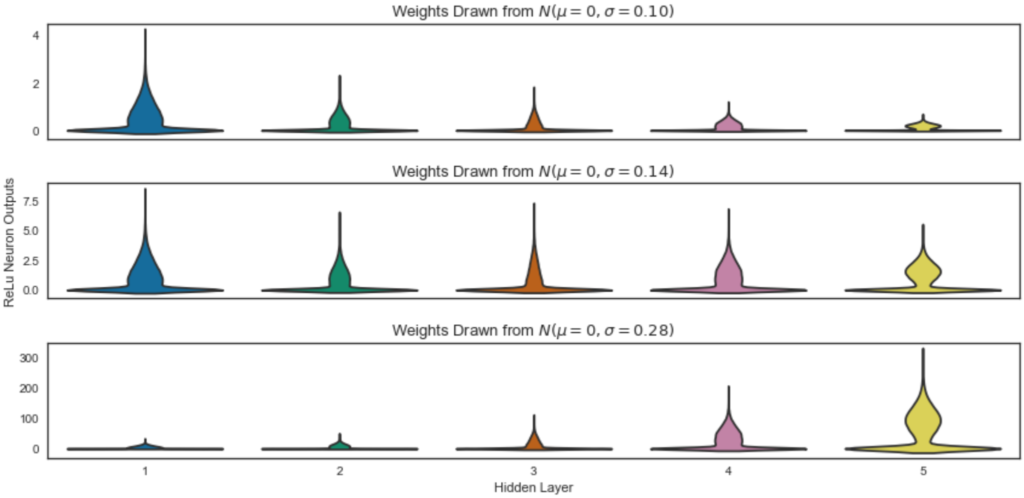
$$w_i \sim U\left[-\frac{\sqrt{6}}{\sqrt{n_{out}+n_{in}}}; \frac{\sqrt{6}}{\sqrt{n_{out}+n_{in}}}\right],$$

Такая инициализация называется инициализацией Ксавие (или Глоро)

По аналогии можно найти формулу для дисперсии нормального распределения, но это уже семинарская задачка :)

http://proceedings.mlr.press/v9/glorot10a/glorot10a.pdf

Несимметричный случай



Инициализация Хе

$$\text{Var}(h_i) = \text{Var}(\sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \text{Var}(w_i x_i) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\text{E}(x_i)]^2 \cdot \text{Var}(w_i) + [\text{E}(w_i)]^2 \cdot \text{Var}(x_i) + \text{Var}(x_i) \cdot \text{Var}(w_i)]$$

- Когда нет симметрии, можно занулить только второе слагаемое

Инициализация Хе

$$\mathsf{Var}(h_i) = \mathsf{Var}(\sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathsf{Var}(w_i x_i) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\mathsf{E}(x_i)]^2 \cdot \mathsf{Var}(w_i) + [\mathsf{E}(w_i)]^2 \cdot \mathsf{Var}(x_i) + \mathsf{Var}(x_i) \cdot \mathsf{Var}(w_i)] =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\mathsf{E}(x_i)]^2 \cdot \mathsf{Var}(w_i) + \mathsf{Var}(x_i) \cdot \mathsf{Var}(w_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \mathsf{Var}(w_i) \cdot E(x_i^2)$$

- Когда нет симметрии, можно занулить только второе слагаемое

Инициализация Xe

$$\text{Var}(h_i) = \text{Var}(\sum_{i=1}^{n_{in}} w_i x_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \text{Var}(w_i x_i) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\text{E}(x_i)]^2 \cdot \text{Var}(w_i) + [\text{E}(w_i)]^2 \cdot \text{Var}(x_i) + \text{Var}(x_i) \cdot \text{Var}(w_i)] =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{in}} [\text{E}(x_i)]^2 \cdot \text{Var}(w_i) + \text{Var}(x_i) \cdot \text{Var}(w_i) = \sum_{i=1}^{n_{in}} \text{Var}(w_i) \cdot E(x_i^2) =$$

$$= E(x^2) \cdot [n_{in} \cdot \text{Var}(w)]$$

Инициализация Хе

$$\mathsf{Var}(h_i) = E(x_i^2) \cdot [n_{in} \cdot \mathsf{Var}(w)]$$
$$x_i = \mathsf{max}(0; h_{i-1})$$

Инициализация Хе

$$\text{Var}(h_i) = E(x_i^2) \cdot [n_{in} \cdot \text{Var}(w)]$$
$$x_i = \max(0; h_{i-1})$$

Если h_{i-1} симметрично распределён относительно нуля, тогда:

$$E(x_i^2) = \frac{1}{2} \cdot \text{Var}(h_{i-1})$$

https://arxiv.org/pdf/1502.01852.pdf

Инициализация Хе

$$\text{Var}(h_i) = E(x_i^2) \cdot [n_{in} \cdot \text{Var}(w)]$$
$$x_i = \max(0; h_{i-1})$$

Если h_{i-1} симметрично распределён относительно нуля, тогда:

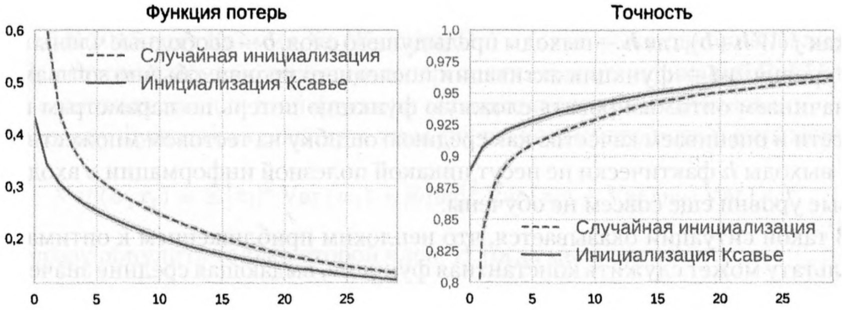
$$E(x_i^2) = \frac{1}{2} \cdot \text{Var}(h_{i-1})$$
$$\text{Var}(h_i) = \frac{1}{2} \cdot \text{Var}(h_{i-1}) \cdot [n_{in} \cdot \text{Var}(w)]$$
$$\text{Var}(w_i) = \frac{2}{n_{in}}$$

https://arxiv.org/pdf/1502.01852.pdf

Краткие итоги

- Для симметричных функций с нулевым средним используйте инициализацию Ксавье torch.nn.init.xavier_uniform или torch.nn.init.xavier_normal
- Для ReLU и им подобным инициализацию Хе torch.init.kaiming_uniform или torch.init.kaiming_normal
- Эти две инициализации корректируют параметры распределений в зависимости от входа и выхода слоя так, чтобы поддерживать дисперсию равной единице

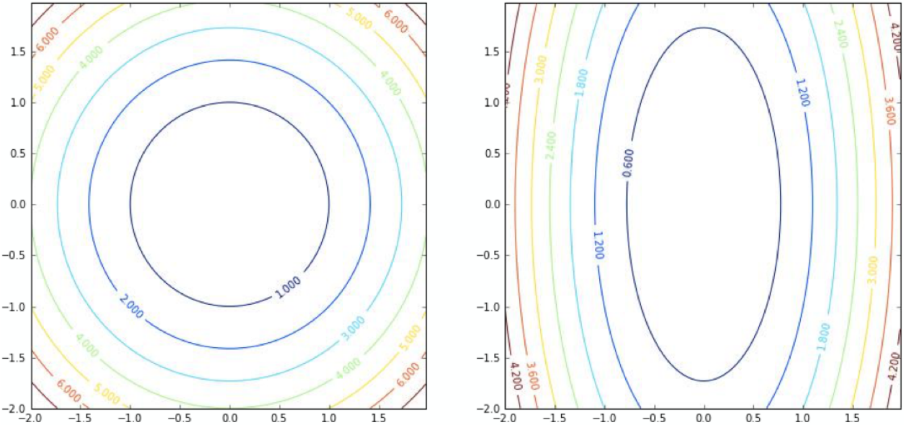
Эксперимент с MNIST



Источник: Николенко, страница 149

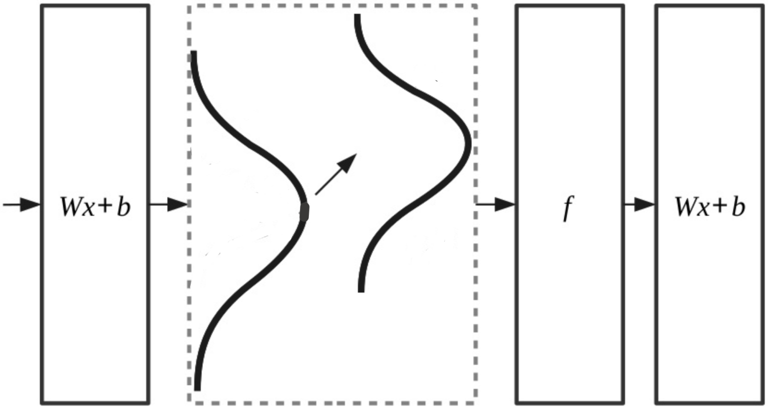
Батч-нормализация

Стандартизация

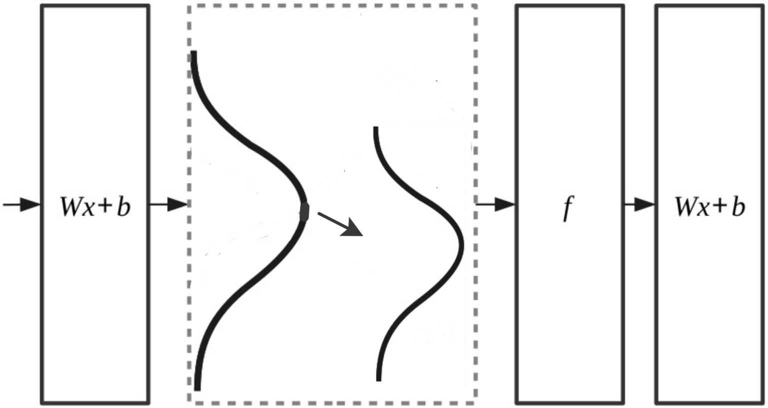


Какая из ситуаций лучше для SGD?

А что внутри?



А что внутри?



Проблема

- Давайте вместо X на входе использовать $\frac{X-\mu_X}{\sigma_X}$

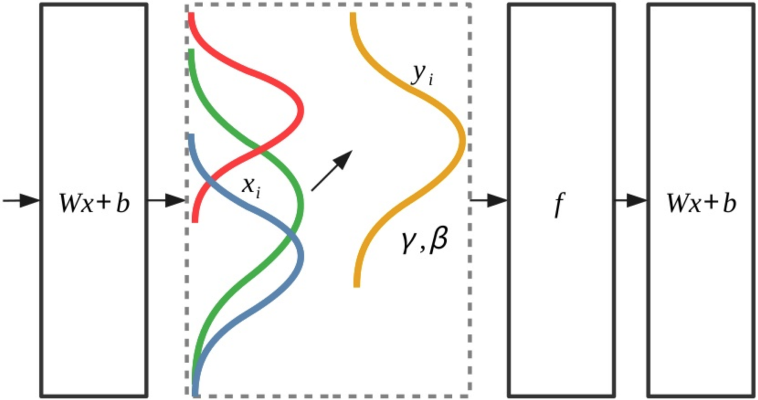
- Даже если мы стандартизовали вход X, внутри сетки может произойти несчастье и скрытый слой окажется нестандартизован

- Скрытые представления $h = f(XW)$ могут менять своё распределение в процессе обучения, это усложняет его

Проблема

- Давайте вместо X на входе использовать $\frac{X-\mu_X}{\sigma_X}$
- Даже если мы стандартизовали вход X, внутри сетки может произойти несчастье и скрытый слой окажется нестандартизован
- Скрытые представления $h = f(XW)$ могут менять своё распределение в процессе обучения, это усложняет его
- Давайте на каждом слое вместо h использовать $\hat{h} = \frac{h-\mu_h}{\sigma_h}$
- На выход будем выдавать $\beta \cdot \hat{h} + \gamma$, для того, чтобы у нас было больше свободы, параметры β и γ тоже учим

Batch norm (2015)



Batch norm (2015)

- Откуда взять μ_h и σ_h?

- Оценить по текущему батчу!

$$
\begin{aligned}
\mu_h &= \alpha \cdot \bar{x}_{batch} + (1-\alpha) \cdot \mu_h \\
\sigma_h &= \alpha \cdot \hat{s}_{batch} + (1-\alpha) \cdot \sigma_h
\end{aligned}
$$

- Коэффициенты β и γ оцениваются в ходе обратного распространения ошибки

- Обучение довольно сильно ускоряется, сходимость улучшается

https://arxiv.org/pdf/1502.03167.pdf

Forward pass

Input: Values of x over a mini-batch: $\mathcal{B} = \{x_{1...m}\}$;
Parameters to be learned: γ, β

Output: $\{y_i = \mathrm{BN}_{\gamma,\beta}(x_i)\}$

$$\mu_{\mathcal{B}} \leftarrow \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} x_i \qquad \text{// mini-batch mean}$$

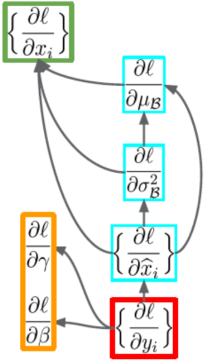
$$\sigma_{\mathcal{B}}^2 \leftarrow \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (x_i - \mu_{\mathcal{B}})^2 \qquad \text{// mini-batch variance}$$

$$\widehat{x}_i \leftarrow \frac{x_i - \mu_{\mathcal{B}}}{\sqrt{\sigma_{\mathcal{B}}^2 + \epsilon}} \qquad \text{// normalize}$$

$$y_i \leftarrow \gamma \widehat{x}_i + \beta \equiv \mathrm{BN}_{\gamma,\beta}(x_i) \qquad \text{// scale and shift}$$

https://arxiv.org/pdf/1502.03167.pdf

Backward pass



$$\frac{\partial \ell}{\partial \widehat{x}_i} = \frac{\partial \ell}{\partial y_i} \cdot \gamma$$

$$\frac{\partial \ell}{\partial \sigma_{\mathcal{B}}^2} = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial \ell}{\partial \widehat{x}_i} \cdot (x_i - \mu_{\mathcal{B}}) \cdot \frac{-1}{2}(\sigma_{\mathcal{B}}^2 + \epsilon)^{-3/2}$$

$$\frac{\partial \ell}{\partial \mu_{\mathcal{B}}} = \left(\sum_{i=1}^{m} \frac{\partial \ell}{\partial \widehat{x}_i} \cdot \frac{-1}{\sqrt{\sigma_{\mathcal{B}}^2 + \epsilon}} \right) + \frac{\partial \ell}{\partial \sigma_{\mathcal{B}}^2} \cdot \frac{\sum_{i=1}^{m} -2(x_i - \mu_{\mathcal{B}})}{m-1}$$

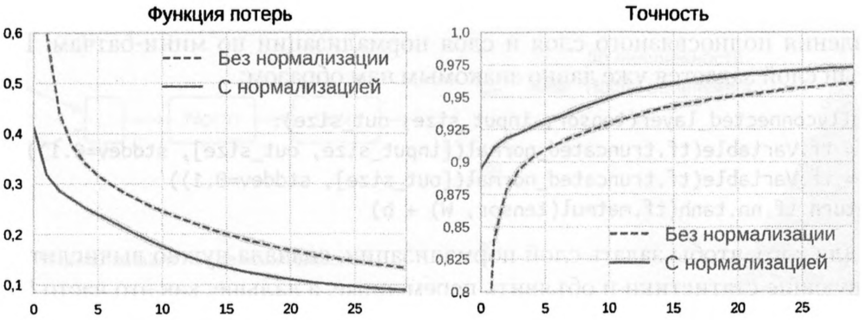
$$\frac{\partial \ell}{\partial x_i} = \frac{\partial \ell}{\partial \widehat{x}_i} \cdot \frac{1}{\sqrt{\sigma_{\mathcal{B}}^2 + \epsilon}} + \frac{\partial \ell}{\partial \sigma_{\mathcal{B}}^2} \cdot \frac{2(x_i - \mu_{\mathcal{B}})}{m-1} + \frac{\partial \ell}{\partial \mu_{\mathcal{B}}} \cdot \frac{1}{m}$$

$$\frac{\partial \ell}{\partial \gamma} = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial \ell}{\partial y_i} \cdot \widehat{x}_i$$

$$\frac{\partial \ell}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial \ell}{\partial y_i}$$

https://arxiv.org/pdf/1502.03167.pdf

Эксперимент с MNIST



Источник: Николенко, страница 160

Трюки

- С батч-нормализацией нужно уменьшить силу Dropout и регуляризацию

- Не забывайте перемешивать обучающую выборку перед каждой новой эпохой, чтобы батчи были разнообразными

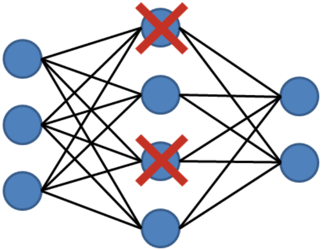
http:
//openaccess.thecvf.com/content_CVPR_2019/papers/Li_Understanding_the_Disharmony_Between_Dropout_and_Batch_Normalization_by_Variance_CVPR_2019_paper.pdf

Dropout


Overfitting
?!?
...
Too many neurons
Not enough DATA
BAD Network

Dropout

- С вероятностью p отключаем нейрон
- Делает нейроны более устойчивыми к случайным возмущениям
- Борьба с ко-адоптацией, не все соседи похожи, не все дети похожи на родителей



http://www.cs.toronto.edu/~rsalakhu/papers/srivastava14a.pdf

Dropout в формулах

- forward pass:

$$o = f(X \cdot W + b)$$

Dropout в формулах

- forward pass:

$$o = f(X \cdot W + b)$$

$$o = D \cdot f(X \cdot W + b), \quad D = (D_1, \dots, D_k) \sim iidBern(p)$$

Dropout в формулах

- forward pass:

$$o = f(X \cdot W + b)$$

$$o = D \cdot f(X \cdot W + b), \quad D = (D_1, \dots, D_k) \sim iidBern(p)$$

$$o_i = D_i \cdot f(wx_i^T + b) = \begin{cases} f(wx_i^T + b), p \\ 0, 1 - p \end{cases}$$

Дропаут — это просто небольшая модификация функции активации

Dropout в формулах

- forward pass:

$$o = f(X \cdot W + b)$$

$$o = D \cdot f(X \cdot W + b), \quad D = (D_1, \dots, D_k) \sim iidBern(p)$$

- backward pass:

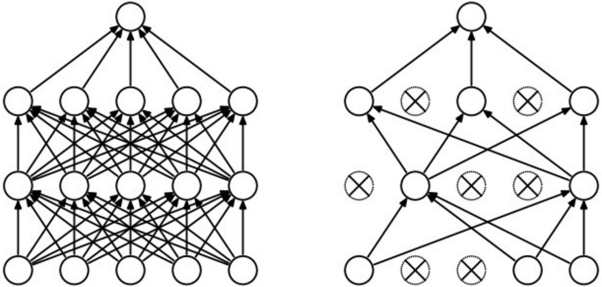
$$d = f'(h) \cdot W \cdot d$$

$$d = D \cdot f'(h) \cdot W \cdot d$$

Dropout

- При обучении мы домножаем часть выходов на D_i, тем самым мы изменяем только часть параметров и нейроны учатся более независимо

- Dropout эквивалентен обучению 2^n сетей



(a) Standard Neural Net (b) After applying dropout.

Dropout

- При обучении мы домножаем часть выходов на D_i, тем самым мы изменяем только часть параметров и нейроны учатся более независимо

- Dropout эквивалентен обучению 2^n сетей

- Что делать на стадии тестирования?

Dropout

- При обучении мы домножаем часть выходов на D_i, тем самым мы изменяем только часть параметров и нейроны учатся более независимо

- Dropout эквивалентен обучению 2^n сетей

- Нам надо сымитировать работу такого ансамбля: можно отключать по очереди все возможные комбинации нейронов, получить 2^n прогнозов и усреднить их

Dropout

- При обучении мы домножаем часть выходов на D_i, тем самым мы изменяем только часть параметров и нейроны учатся более независимо
- Dropout эквивалентен обучению 2^n сетей
- Нам надо сымитировать работу такого ансамбля: можно отключать по очереди все возможные комбинации нейронов, получить 2^n прогнозов и усреднить их
- Но лучше просто брать по дропауту математическое ожидание

$$o = p \cdot f(X \cdot W + b)$$

Обратный Dropout

- На тесте ищем математическое ожидание:

$$o = p \cdot f(X \cdot W + b)$$

Обратный Dropout

- На тесте ищем математическое ожидание:

$$o = p \cdot f(X \cdot W + b)$$

- Это неудобно! Надо переписывать функцию для прогнозов!

Обратный Dropout

- На тесте ищем математическое ожидание:

$$o = p \cdot f(X \cdot W + b)$$

- Это неудобно! Надо переписывать функцию для прогнозов!

- Давайте лучше будем домножать на $\frac{1}{p}$ на этапе обучения:

train: $o = \dfrac{1}{p} \cdot D \cdot f(X \cdot W + b)$

test: $o = f(X \cdot W + b)$

Другие эвристики для обучения сеток

Предобучение

- Обучаем каждый нейрон на рандомной подвыборке, каждый нейрон впитает какие-то отдельные её особенности, после скрепляем все нейроны вместе и продолжаем обучение на всей выборке

- На будущее: обучаем на корпусе картинок автокодировщик, encoder благодаря этому учится выделять наиболее важные фичи, которые позволяют эффективно сжимать изображения. После срезаем decoder и на его месте достраиваем слои для решения нашей задаче, запускаем обычное дообучение.

Динамическое наращивание сети

- Обучение сети при заведомо недостаточном числе нейронов H
- После стабилизации функции потерь — добавление нового нейрона и его инициализация путём обучения
  - либо по случайной подвыборке
  - либо по объектам с наибольшими значениями потерь
  - либо по случайному подмножеству входов
  - либо из различных случайных начальных приближений
- Снова итерации BackProp

Эмпирический опыт: Общее время обучения обычно лишь в $1.5 - 2$ раза больше, чем если бы в сети сразу было итоговое число нейронов. Полезная информация, накопленная сетью не теряется при добавлении нейронов.

Прореживание сети

- Начать с большого количество нейронов и удалять незначимые по какому-нибудь критерию

- Пример: обнуляем вес, смотрим как сильно упала ошибка, сортируем все связи по этому критерию, удаляем N наименее значимых

- После прореживания снова запускаем backprop

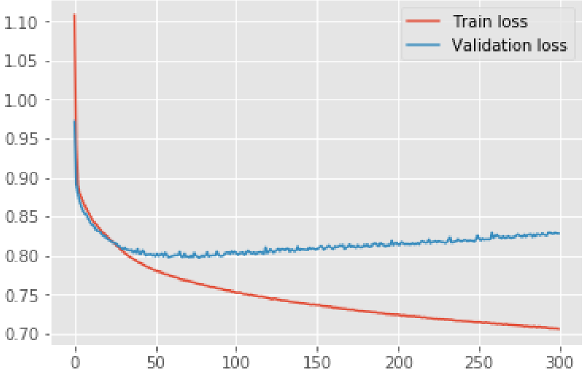
- Если качество модели сильно упала, надо вернуть последние удалённые связи

Другие хаки

Уже обсуждали

- l_1 и l_2 регуляризация
- Ранняя остановка
- Различные новые градиентные спуски, ускоряющие процедуру сходимости

Early stopping



- Будем останавливать обучение, когда качество на валидации начинает падать

Регуляризация

- L_2: приплюсовываем к функции потерь $\lambda \cdot \sum w_i^2$
- L_1: приплюсовываем к функции потерь $\lambda \cdot \sum |w_i|$
- Можно регуляризовать не всю сетку, а отдельный нейрон или слой
- Не даёт нейрону сфокусироваться на слишком выделяющемся входе

Регуляризация

- Добавить к Loss штраф за веса (l1/l2)
- параметр weight_decay у optimizer

Взаимосвязи

- На практике обычно используют Dropout. Действия всех этих регуляризаторов оказывается схожим:

- Например, в [1] написано:

  «We show that the dropout regularizer is first-order equivalent to an L2 regularizer applied after scaling the features by an estimate of the inverse diagonal Fisher information matrix»

- У Гудфеллоу в Глубоком обучении на стр. 218 можно найти, что рання остановка для линейных моделей эквивалентна l_2 регуляризации с MSE, обучаемой SGD.

[1] https://arxiv.org/abs/1307.1493

Ещё обсудим

- Скип-конекшены
- Аугментация данных
- Более забубуенистые архитектуры