Байесовский выбор наиболее правдоподобной структуры модели глубокого обучения

О. Ю. Бахтеев

Научный руководитель: д.ф.-м.н. В.В. Стрижов
Московский физико-технический институт (государственный университет)

Интеллектуализация обработки информации
ИОИ-2018
11.10.2018

Выбор структуры модели глубокого обучения

Цель работы:

Развитие теории байесовского выбора модели и исследование свойств методов выбора моделей глубокого обучения.

Задачи:

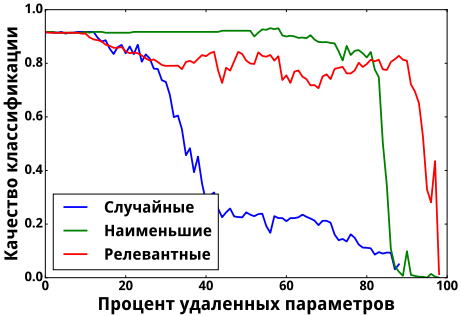
- Предложить алгоритм оптимизации параметров, гиперпараметров и структурных параметров моделей глубокого обучения.
- Предложить метод выбора модели наиболее правдоподобной структуры.
- Исследовать свойства оптимизационных алгоритмов выбора модели.

Основные проблемы

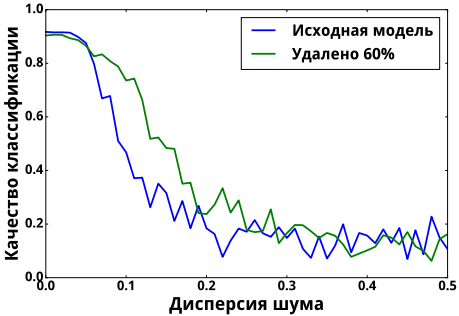
- Многоэкстремальность задачи оптимизации параметров модели.
- Вычислительная сложность оптимизации.
- Большое число параметров и гиперпараметров.

Проблемы оптимизации моделей глубокого обучения

Правдоподобие моделей с избыточным количеством параметров не меняется при удалении параметров.



Избыточность параметров модели



Неустойчивость модели

Глубокое обучение предполагает оптимизацию моделей с заведомо избыточной сложностью.

Задача выбора структуры модели

Однослойная нейросеть:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \operatorname{softmax}\left(\mathbf{W}_0^{\mathsf{T}}\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\right), \quad f(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^n \to [0,1]^{|\mathbb{Y}|}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n.$$

$$f_1(\mathbf{x}) = \gamma_{0,1}^1 \mathbf{g}_{0,1}^1(\mathbf{x}) + \cdots + \gamma_{0,1}^K \mathbf{g}_{0,1}^K(\mathbf{x}) = \gamma_{0,1}^1 \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{W}_1^{\mathsf{T}}\mathbf{x}) + \cdots + \gamma_{0,1}^K \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{W}_K^{\mathsf{T}}\mathbf{x}),$$

где $\mathbf{W} = [\mathbf{W}_0, \mathbf{W}_1, \ldots, \mathbf{W}_K]^{\mathsf{T}}$ — матрицы параметров, $\{\mathbf{g}_{0,1}^i\}_{i=1}^K$ — базовые функции скрытого слоя нейросети.

Структурные параметры: $\boldsymbol{\Gamma} = [\gamma_{0,1}]$.
Структура модели определяется вершиной K-мерного симплекса.

Задача выбора структуры модели: два скрытых слоя

Двухслойная нейросеть:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \text{softmax}\left(\mathbf{W}^{\mathsf{T}}\mathbf{f}_2(\mathbf{x})\right), \quad f(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^n \to [0,1]^{|\mathbb{Y}|}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n.$$

$$\mathbf{f}_2(\mathbf{x}) = \gamma^1_{1,2}\mathbf{g}^1_{1,2}(\mathbf{f}_1(\mathbf{x})) + \cdots + \gamma^K_{1,2}\mathbf{g}^K_{1,2}(\mathbf{f}_1(\mathbf{x})) = \gamma^1_{1,2}\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{W}^{\mathsf{T}}_{K+1}\mathbf{f}_1(\mathbf{x})) + \cdots + \gamma^K_{1,2}\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{W}^{\mathsf{T}}_{2K}\mathbf{f}_1(\mathbf{x})),$$

$$\mathbf{f}_1(\mathbf{x}) = \gamma^1_{0,1}\mathbf{g}^1_{0,1}(\mathbf{x}) + \cdots + \gamma^K_{0,1}\mathbf{g}^K_{0,1}(\mathbf{x}) = \gamma^1_{0,1}\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{W}^{\mathsf{T}}_1\mathbf{x}) + \cdots + \gamma^K_{0,1}\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{W}^{\mathsf{T}}_K\mathbf{x}),$$

где $\mathbf{W} = [\mathbf{W}_0, \mathbf{W}_1, \ldots, \mathbf{W}_{2K}]^{\mathsf{T}}$ — матрицы параметров, $\{\mathbf{g}^i_{0,1}, \mathbf{g}^i_{1,2}\}^K_{i=1}$ — базовые функции скрытых слоев нейросети.

Структурные параметры: $\boldsymbol{\Gamma} = [\gamma_{0,1}, \gamma_{1,2}]$.
Структура модели определяется вершинами двух K-мерных симплексов.

Картинка: связь параметров со структурой.

Исследование основывается на следующих работах

- Graves A. Practical variational inference for neural networks //Advances in Neural Information Processing Systems. – 2011
- Maclaurin D., Duvenaud D., Adams R. Gradient-based hyperparameter optimization through reversible learning //International Conference on Machine Learning. – 2015
- Jang E. et al., Categorical Reparameterization with Gumbel-Softmax //International Conference on Learning Representations 2017.
- Hanxiao L. et al., DARTS: Differentiable Architecture Search.
- О. Ю. Бахтеев, В. В. Стрижов. Выбор моделей глубокого обучения субоптимальной сложности //Автоматика и телемеханика, 2018.

Графовое представление модели глубокого обучения

Определение

Задан граф V, E.
Для каждого ребра $(j,k) \in E$ определен вектор **базовых функций** $\mathbf{g}_{j,k}$ мощностью $K_{j,k}$.
Граф V, E со множеством функций $\{\mathbf{g}_{j,k}\}_{(j,k)\in E}$ называется **семейством моделей**, если функция, задаваемая рекурсивно как

$$\mathbf{f}_j(\mathbf{x}) = \sum_{k\in \mathrm{Adj}(v_j)} \langle \boldsymbol{\gamma}_{j,k}, \mathbf{g}_{j,k}\rangle(\mathbf{f}_k(\mathbf{x})), \quad \mathbf{f}_0(\mathbf{x}) = \mathbf{x},$$

является непрерывной дифференцируемой по параметрам функцией из $\mathbb{R}^n$ во множество $\mathbb{Y}$ при любых значениях векторов $\boldsymbol{\gamma}$.

Модель задается параметрами подмоделей $\{\mathbf{f}_j\}_{j=1}^{|V|}$ и структурными параметрами $\boldsymbol{\gamma}$.

Параметры модели W — конкатенация параметров всех подмоделей $\{\mathbf{f}_j\}_{j=1}^{|V|}$.
Структура модели Г — конкатенация структурных параметров $\boldsymbol{\gamma}$.

Эксплуатационные критерии качества модели

Точность $S(\mathbf{W}, \boldsymbol{\Gamma})$ модели $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ — величина ошибки на контрольной выборке.

Устойчивость $\eta(\mathbf{W})$ модели $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ — число обусловленности матрицы $\mathbf{A}$:

$$\eta(\mathbf{W}) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \quad \text{при гипотезе } \mathbf{W} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{A}^{-1}),$$

$\lambda_{\max}$ — максимальное, а $\lambda_{\min}$ — минимальное собственные числа матрицы $\mathbf{A}$.

Статистические критерии качества модели

Параметрическая сложность — наименьшая дивергенция между априорным распределением параметров и апостериорным распределением параметров:

$$C_{\text{param}} = \min_{\mathbf{A},\mathbf{m}} \mathrm{D}_{\mathrm{KL}}(p(\mathbf{W},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y},\mathbf{X})||p(\mathbf{W},\boldsymbol{\Gamma}||\mathbf{A},\mathbf{m})).$$

где $\mathbf{m}$ — гиперпараметры априорного распределения структуры модели.

TODO: bits-back!

Структурная сложность модели — энтропия апостериорного распределения структуры модели:

$$C_{\text{struct}} = -\mathrm{E}_p \log\, p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y},\mathbf{X}).$$

В данной работе предлагается метод оптимизации модели, учитывающий все перечисленные критерии качества модели.

Правдоподобие как статистическая сложность

Статистическая сложность модели $\mathbf{f}$:

$$\mathrm{MDL}(\mathbf{y}, \mathbf{f}) = -\log\, p(\mathbf{f}) - \log\, \big(p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{f})\delta\mathfrak{D}\big),$$

где $\delta\mathfrak{D}$ — допустимая точность передачи информации о выборке $\mathfrak{D}$.

Правдоподобия модели:

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X}) = \int_{\mathbf{W},\boldsymbol{\Gamma}} p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\Gamma}) p(\mathbf{W}, \boldsymbol{\Gamma}) d\mathbf{W} d\boldsymbol{\Gamma}.$$

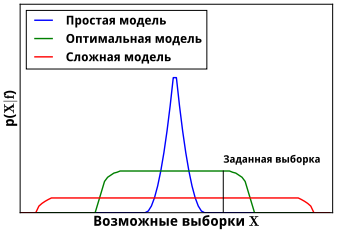
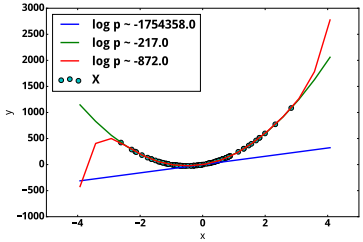


Схема выбора модели по правдоподобию



Пример: полиномы

Выбор оптимальной модели

Основные проблемы выбора оптимальной модели

- Интеграл правдоподобия $p(\mathrm{y}|\mathbf{X})$ невычислим аналитически.
- Задача его оптимизации многоэкстремальна и невыпукла.

Требуется

Предложить метод поиска субоптимального решения задачи оптимизации, обобщающего различные алгоритмы оптимизации:

- Оптимизация правдоподобия.
- Последовательное увеличение сложности модели.
- Последовательное снижение сложности модели.
- Полный перебор вариантов структуры модели.

Вариационная нижняя оценка правдоподобия

Интеграл правдоподобия невычислим аналитически.
Правдоподобие модели:

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X}) = \int_{\mathbf{W},\boldsymbol{\Gamma}} p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{W},\boldsymbol{\Gamma}) p(\mathbf{W},\boldsymbol{\Gamma}) d\mathbf{W} d\boldsymbol{\Gamma}.$$

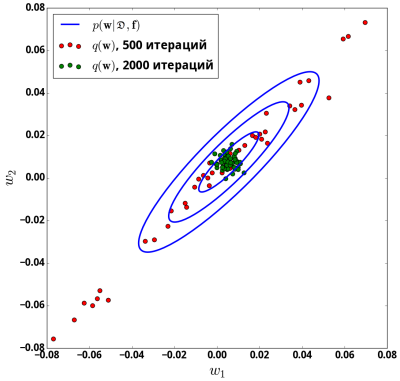
Получим нижнюю оценку интеграла правдоподобия.
Пусть $q(\mathbf{W},\boldsymbol{\Gamma}) = q_{\mathbf{W}}(\mathbf{W}) q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma})$ — непрерывное распределение, аппроксимирующее апостериорное распределение $p(\mathbf{W},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y},\mathbf{X})$.

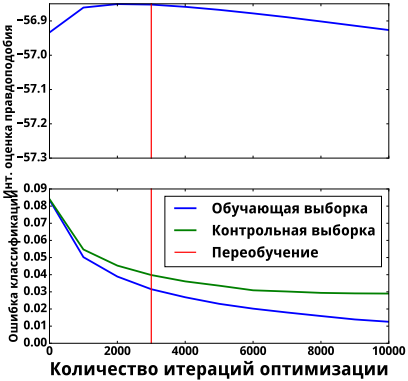
$$\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}) \geq \mathrm{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{W},\boldsymbol{\Gamma}) - \mathrm{D}_{KL}(p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma})||q(\mathbf{W},\boldsymbol{\Gamma})) = \log \hat{p}_{q_{\mathbf{W}} q_{\boldsymbol{\Gamma}}}(\mathbf{y}|\mathbf{X}).$$

Полученная оценка совпадает с интегралом правдоподобия при

$$D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{W},\boldsymbol{\Gamma})|(p(\mathbf{W},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y},\mathbf{X})) = 0.$$

Градиентный спуск как вариационная оценка правдоподобия модели





Выбор вариационного распределения q

Вариационное распределение параметров $q_{\mathbf{W}}$:

$$q_{\mathbf{W}} = \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_q, \mathbf{A}_q^{-1}).$$

Вариационное распределение структуры $q_{\boldsymbol{\Gamma}}$:

$$q_{\boldsymbol{\Gamma}} = \prod_{(j,k)\in E} q_{\gamma_{j,k}} \sim \mathcal{GS}(c_{\text{temp}}).$$

Свойства:

- $\lim_{c_{\text{temp}}\to\infty} \mathcal{GS}(c_{\text{temp}}) = \mathcal{U}$.
- При $c_{\text{temp}} \to 0$ распределение вырождается в дискретное распределение.
- Существует вычислительно устойчивый метод вычисления градиента по параметрам распределения от реализации случайной величины.

Оптимизация параметров вариационного распределения

Оптимизацию параметров вариационного распределения $q(\mathbf{W}, \mathbf{\Gamma}) = q_{\mathbf{W}}(\mathbf{W}) q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma})$ будем проводить по следующему функционалу:

$$L = \mathrm{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{W}, \mathbf{\Gamma}.\mathbf{A}^{-1}, c_{\text{temp}}) - c_{\text{reg}} \mathrm{D}_{KL}(p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{A}^{-1}, \mathbf{m}, c_{\text{temp}})||q(\mathbf{W}), q(\mathbf{\Gamma})) \to \max$$

Теорема

Пусть $c_{\text{reg}} > 0$. Тогда функция L сходится по вероятности к вариационной нижней оценке правдоподобия для подвыборки $\mathfrak{D}$ мощностью $c_{\text{reg}} m$:

$$L \to^p c_{\text{reg}} m \log \hat{p}_{q_{\mathbf{W}} q_{\mathbf{\Gamma}}}(\mathbf{y}|\mathbf{X}).$$

Теорема

Для любых значений $\mathbf{A}, \mathbf{m}$ и вариационных параметров $\boldsymbol{\mu}_q, \mathbf{A}_q$ существует такая точка $\mathbf{m}$ на вершинах симплексов структуры $\mathbf{\Gamma}$, определяющая распределение $q_{\mathbf{\Gamma}}$, что для любой точки $\mathbf{m}'$ внутри симплексов, определяющей распределение $q'_{\mathbf{\Gamma}}$ справедливо выражение:

$$\lim_{c_{\text{temp}} \to 0} \frac{\log \hat{p}_{q_{\mathbf{W}} q'_{\mathbf{\Gamma}}}(\mathbf{y}|\mathbf{X})}{\log \hat{p}_{q_{\mathbf{W}} q_{\mathbf{\Gamma}}}(\mathbf{y}|\mathbf{X})} = -\infty.$$

Оптимизация параметров априорного распределения

Оптимизацию параметров априорного распределения будем проводить по следующему функционалу:

$$Q = c_{\text{train}} \mathsf{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\Gamma}.\mathbf{A}^{-1}, c_{\text{prior}}) - c_{\text{prior}} \mathsf{D}_{KL}(p(\mathbf{W}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{A}^{-1}, \mathbf{m}, c_{\text{temp}}) || q(\mathbf{W}, \boldsymbol{\Gamma})) -$$

$$- c_{\text{comb}} \sum_{p' \in \mathbf{P}} \mathsf{D}_{KL}(\boldsymbol{\Gamma}|p') \to \max,$$

где $\mathbf{P}$ — множество (возможно пустое) распределений на структуре модели.

- c_{train} — коэффициент правдоподобия выборки;
- c_{prior} — коэффициент регуляризации модели;
- c_{comb} — коэффициент перебора структуры (?).

Общая задача оптимизации

Общая задача оптимизации — двухуровневая:

$$\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{m}} = \arg\max_{\mathbf{A},\mathbf{m}} Q =$$

$$= c_{\text{train}} \mathrm{E}_{\hat{q}} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{W}, \mathbf{\Gamma}.\mathbf{A}^{-1}, c_{\text{prior}}) - c_{\text{prior}} \mathrm{D}_{KL}(p(\mathbf{W}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{A}^{-1}, \mathbf{m}, c_{\text{temp}})||\hat{q}(\mathbf{W}, \mathbf{\Gamma})) -$$

$$- c_{\text{comb}} \sum_{p' \in \mathbf{P}} \mathrm{D}_{KL}(\mathbf{\Gamma}|p'),$$

где

$$\hat{q} = \arg\max_{q} L = \mathrm{E}_{q} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{W}, \mathbf{\Gamma}.\mathbf{A}^{-1}, c_{\text{temp}}) - c_{\text{reg}} \mathrm{D}_{KL}(p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{A}^{-1}, \mathbf{m}, c_{\text{temp}})||q(\mathbf{W}), q(\mathbf{\Gamma}))$$

Оператор оптимизации

Обозначим за $\mathbf{h}$ гиперпараметры $\mathbf{A}, \mathbf{m}$.
Обозначим за $\boldsymbol{\theta}$ параметры распределений $q_{\mathbf{W}}, q_{\boldsymbol{\Gamma}}$.

Определение

Оператором T назовем оператор стохастического градиентного спуска, производящий η шагов оптимизации:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = T \circ T \circ \cdots \circ T(\boldsymbol{\theta}_0, \mathbf{A}^{-1}) = T^{\eta}(\boldsymbol{\theta}_0, \mathbf{A}^{-1}), \quad \text{где} T(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{A}^{-1}) = \boldsymbol{\theta} - \beta \nabla L(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{A}^{-1})|_{\hat{\mathfrak{D}}},$$

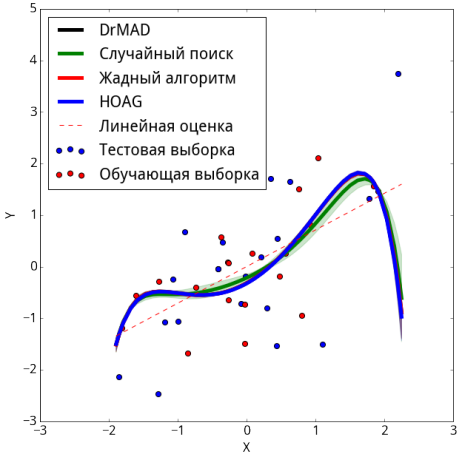
γ — длина шага градиентного спуска, $\boldsymbol{\theta}_0$ — начальное значение параметров $\boldsymbol{\theta}$, $\hat{\mathfrak{D}}$ — случайная подвыборка исходной выборки $\mathfrak{D}$.

Перепишем итоговую задачу оптимизации:

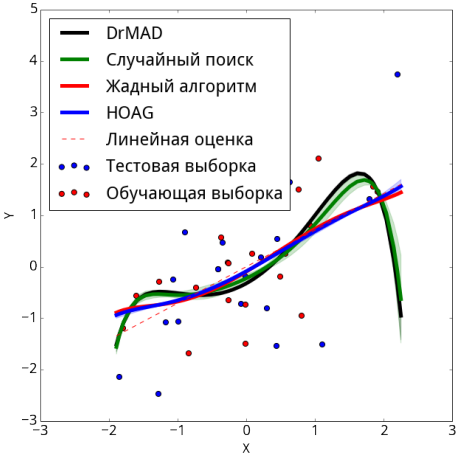
$$\hat{\mathbf{h}} = \arg\max_{\mathbf{h}} Q(T^{\eta}(\boldsymbol{\theta}_0, \mathbf{A}^{-1})),$$

где $\boldsymbol{\theta}_0$ — начальное значение $\boldsymbol{\theta}$.

Оптимизация гиперпараметров: пример



Кросс-Валидация



Вариационная оценка

Оптимизация правдоподобия модели

Теорема

Пусть существуют параметры распределения $q(\mathbf{W}, \mathbf{\Gamma})$, такие что $\mathrm{D}_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{W}, \mathbf{\Gamma}) | p(\mathbf{W}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{A}, \mathbf{m}, c_{\mathrm{temp}})) = 0$.
Тогда двухуровневая задача оптимизация эквивалентна задаче оптимизации правдоподобия модели:

$$\arg\max_{\mathbf{A},\mathbf{m}} p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{A}, \mathbf{m}, c_{\mathrm{temp}})$$

при $c_{\mathrm{reg}} = c_{\mathrm{prior}} = c_{\mathrm{train}} > 0, c_{\mathrm{comb}} = 0$.

Параметрическая сложность

Обозначим за $F(c_{\text{reg}}, c_{\text{train}}, c_{\text{prior}}, c_{\text{comb}}, \mathbf{P}, c_{\text{temp}})$ множество экстремумов функции L при решении задачи двухуровневой оптимизации.

Теорема

Пусть $\mathbf{f} \in F(1, 1, c_{\text{prior}}, 0, \{\}, c_{\text{temp}})$. При устремлении c_{prior} к бесконечности параметрическая сложность модели $\mathbf{f}$ устремляется к нулю.

$$\lim_{c_{\text{prior}} \to \infty} C_{\text{param}}(\mathbf{f}) = 0$$

Теорема

Пусть $\mathbf{f}_1 \in F(1, 1, c_{\text{prior}}, 0, \{\}, c_{\text{temp}}), \mathbf{f}_2 \in F(1, 1, c_{\text{prior}}, 0, \{\}, c'_{\text{temp}})$, $c_{\text{prior}} < c'_{\text{prior}}$.
Пусть вариационные параметры моделей $\mathbf{f}_1$ и $\mathbf{f}_2$ лежат в области U, в которой соответствующие функции L и Q являются локально-выпуклыми.
Тогда модель $\mathbf{f}_1$ имеет параметрическую сложность, не большую чем у $\mathbf{f}_2$.

$$C_{\text{param}}(\mathbf{f}_1) \leq C_{\text{param}}(\mathbf{f}_2).$$

Структурная сложность

Теорема

Пусть для каждого ребра (i,j) семейства моделей $\mathfrak{F}$ априорное распределение

$$p(\gamma_{i,j}) = \lim_{c_{\text{temp}} \to 0} \mathcal{GS}(c_{\text{temp}}).$$

Пусть $c_{\text{reg}} > 0, c_{\text{train}} > 0, c_{\text{prior}} > 0$. Пусть $\mathbf{f} \in F(c_{\text{reg}}, c_{\text{train}}, c_{\text{prior}}, 0, \{\}, c_{\text{temp}})$. Тогда структурная сложность модели $\mathbf{f}$ равняется нулю.

$$C_{\text{struct}}(\mathbf{f}) = 0$$

Теорема

Пусть $\mathbf{f}_1 \in F(c_{\text{reg}}, c_{\text{train}}, c_{\text{prior}}, 0, \{\}, c_{\text{temp}}), \mathbf{f}_2 = \in \lim_{c_{\text{temp}'} \to \infty} F(c_{\text{reg}}, c_{\text{train}}|, c_{\text{prior}}, 0, \{\}, c_{\text{temp}'})$. Пусть вариационные параметры моделей f_1 и f_2 лежат в области U, в которой соответствующие функции L и Q являются локально-выпуклыми. Тогда разница структурных сложностей моделей ограничена выражением:

$$C_{\text{struct}}(\mathbf{f}_1) - C_{\text{struct}}(\mathbf{f}_2) \leq \mathrm{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{W}, \mathbf{\Gamma}.\mathbf{A}^{-1}, c_{\text{temp}}) - \mathrm{E}'_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{W}, \mathbf{\Gamma}.\mathbf{A}^{-1}, c_{\text{temp}}).$$

Полный перебор

Пусть для каждого ребра (i, j) семейства моделей $\mathfrak{F}$ априорное распределение

$$p(\gamma_{i,j}) = lim_{c_{\text{temp}} \to 0} \mathcal{GS}(c_{\text{temp}}).$$

Рассмотрим последовательность $N = \prod_{(j,k) \in E} K_{j,k}$ моделей, полученных в ходе оптимизаций вида:

$$f_1 \in F(c_{\text{reg}}, 0, 0, \{\}, c_{\text{comb}}, c_{\text{temp}}),$$

$$f_2 \in F(c_{\text{reg}}, 0, 0, \{q_1(\mathbf{\Gamma})\}, c_{\text{comb}}, c_{\text{temp}}),$$

$$f_3 \in F(c_{\text{reg}}, 0, 0, \{q_1(\mathbf{\Gamma}), q_2(\mathbf{\Gamma})\}, c_{\text{comb}}, c_{\text{temp}}),$$

где $C_{\text{reg}} > 0, c_{\text{comb}} > 0$.

Теорема

Вариационные распределения структур $q_{\mathbf{\Gamma}}$ последовательности вырождаются в распределения вида $\delta(\hat{\Gamma})$, где $\hat{\Gamma}$ — точка на декартовом произведении вершин симплексов структуры модели. Вариационные распределения последовательности проходят все возможные комбинации структур модели.

Заключение

- Предложен алгоритм оптимизации параметров, гиперпараметров и структурных параметров моделей глубокого обучения.
- Предложен метод выбора модели наиболее правдоподобной структуры, обобщающий различные алгоритмы оптимизации:
  - оптимизация правдоподобия;
  - последовательное увеличение сложности модели;
  - последовательное снижение сложности модели;
  - полный перебор вариантов структуры модели.
- Проведено исследование свойства оптимизационных алгоритмов выбора модели.