

Ансамблирование нейронных сетей

Кириллов Дмитрий

Решаемые задачи

- Повышение точности
- Улучшить оценку неуверенности

Общая идея

1. Обучить несколько моделей
2. На этапе тестирования усреднить выходы моделей

Простор для действий

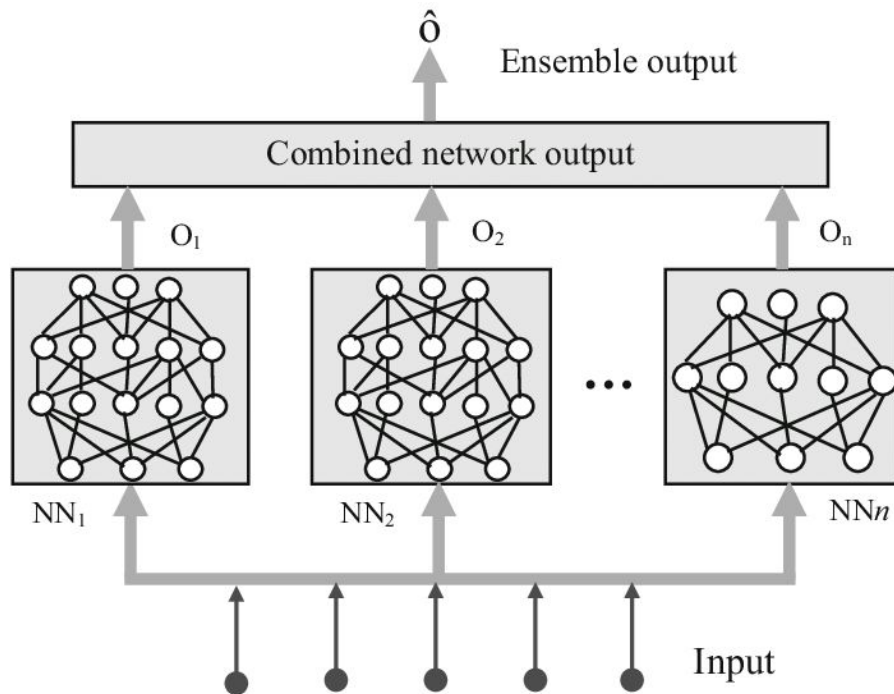
- **Бэггинг** — каждая модель обучается на случайной подвыборке
- **Бустинг** — модели строятся последовательно. Каждая следующая пытается улучшить предыдущую
- **Стекинг** — несколько моделей обученных на полной выборке из разных начальных приближений

Простор для действий

- **Бэггинг** — каждая модель обучается на случайной подвыборке
- **Бустинг** — модели строятся последовательно. Каждая следующая пытается улучшить предыдущую
- **Стекинг** — несколько моделей обученных на полной выборке из разных начальных приближений

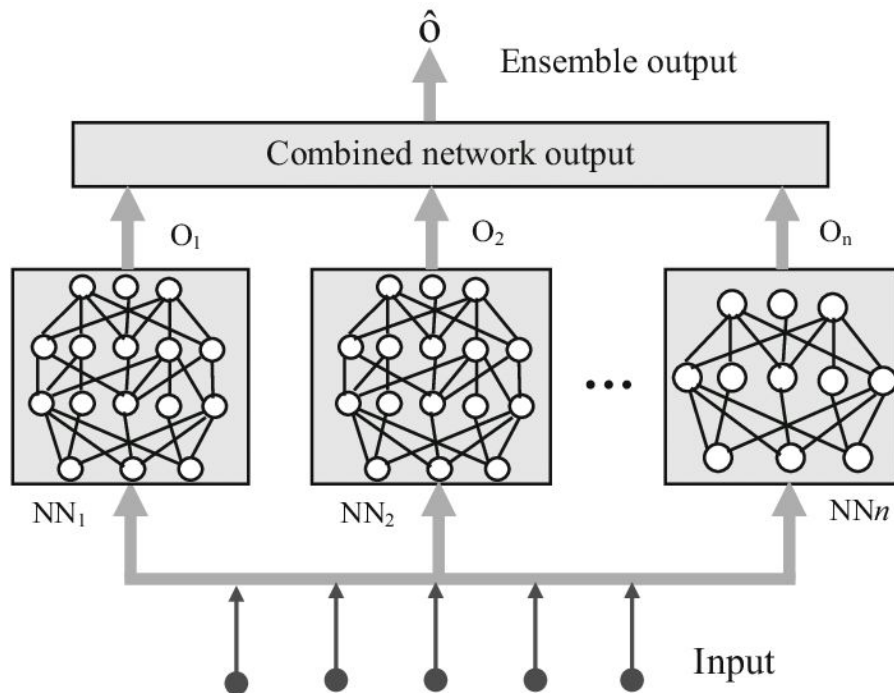
Характерен для нейросетей **Характерны для “классического” машинного обучения**

Deep Ensemble



1. Обучаем n независимых нейросетей на всех данных
2. На этапе тестирования усредняем ответы всех сетей

Deep Ensemble



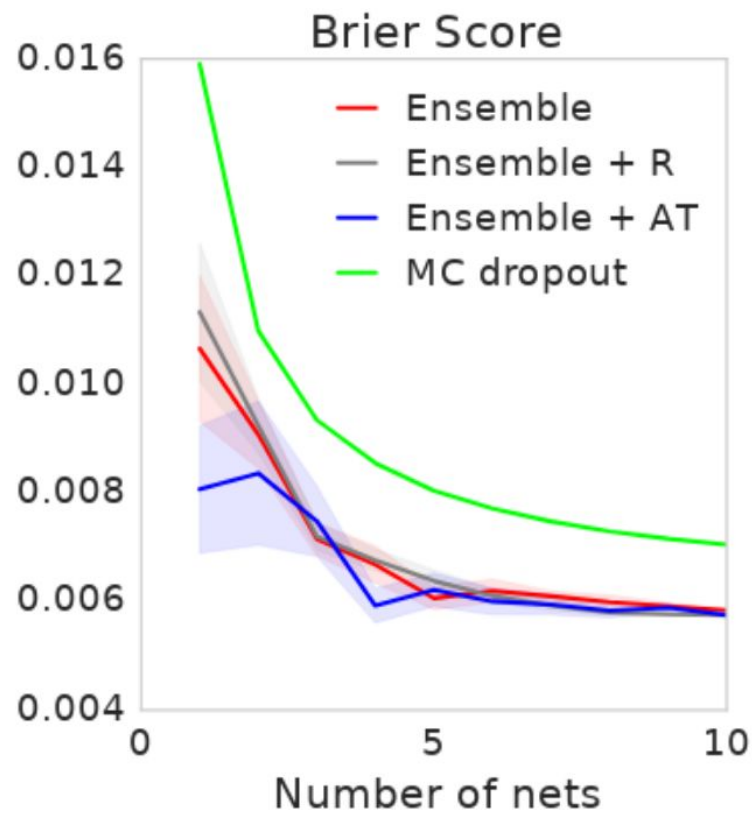
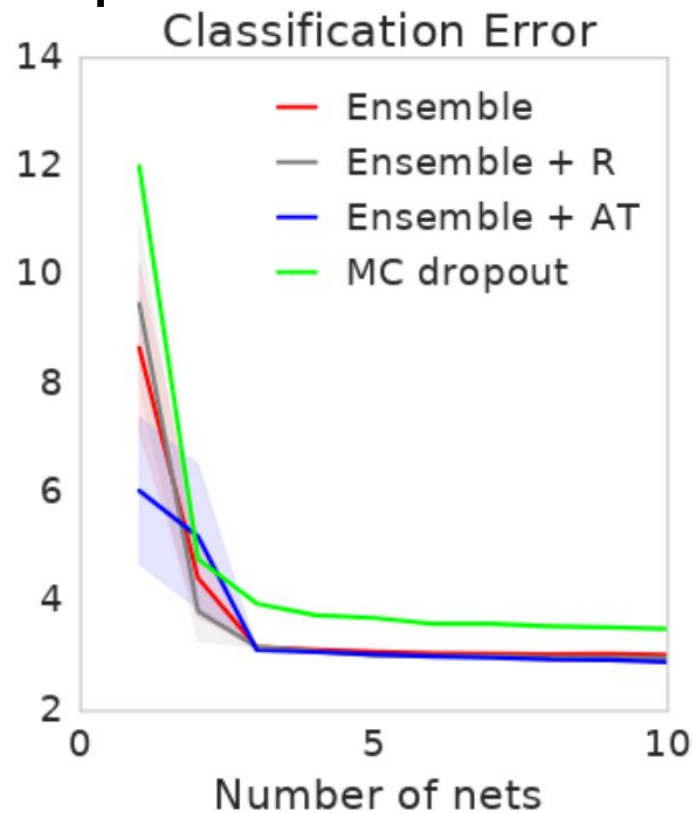
Обучение

$$p(Y|X, w_i) \rightarrow \max_{w_i}$$

Тестирование

$$p(y|x, w) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n p(y|x, w_i)$$

Deep Ensemble



Deep Ensemble

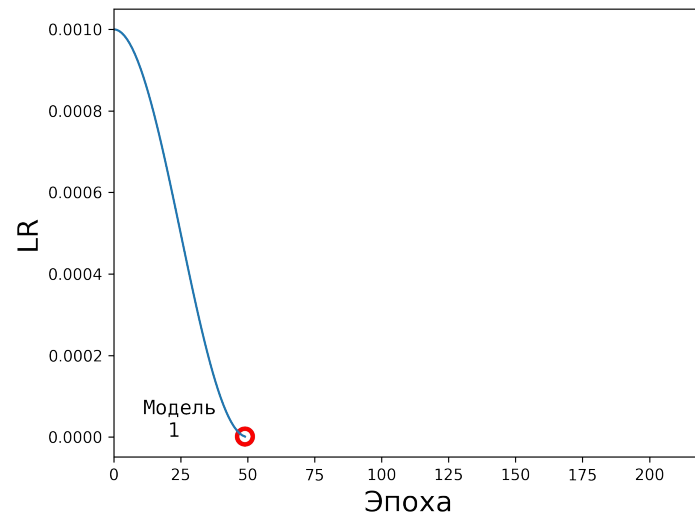
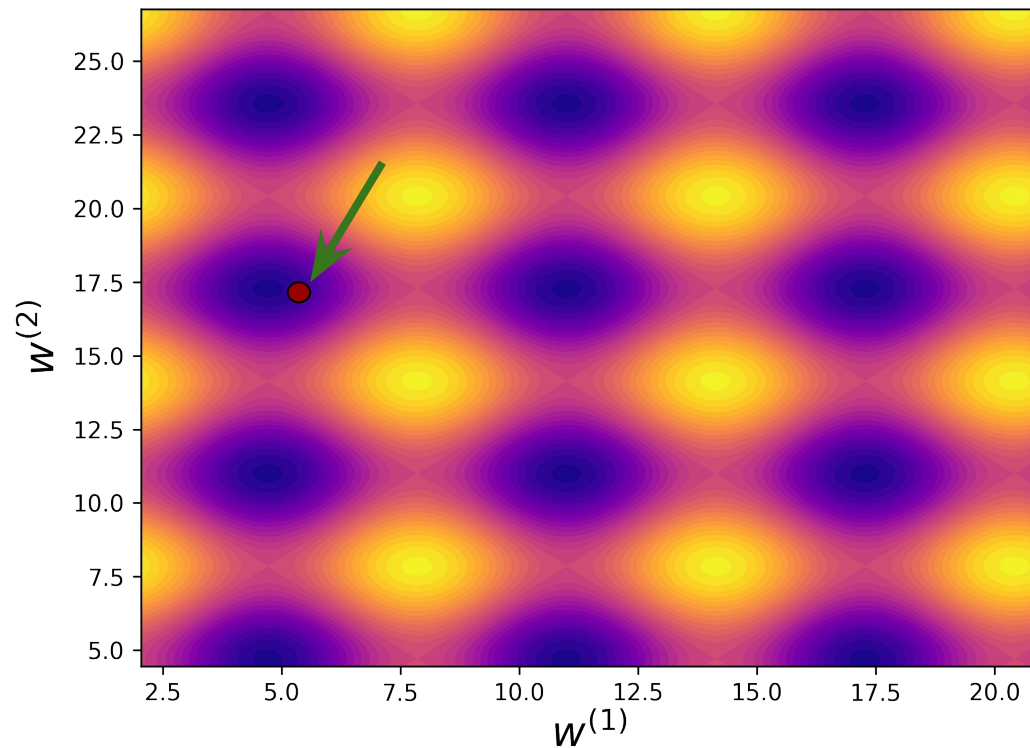
- Наиболее часто применяемый метод
- Достигает хороших результатов
- Нужно полностью обучить несколько нейросетей, что занимает много времени

Snapshot Ensemble (SSE)

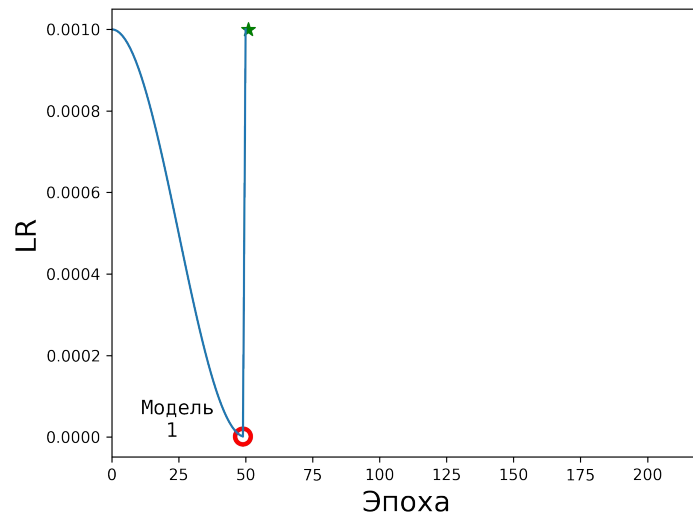
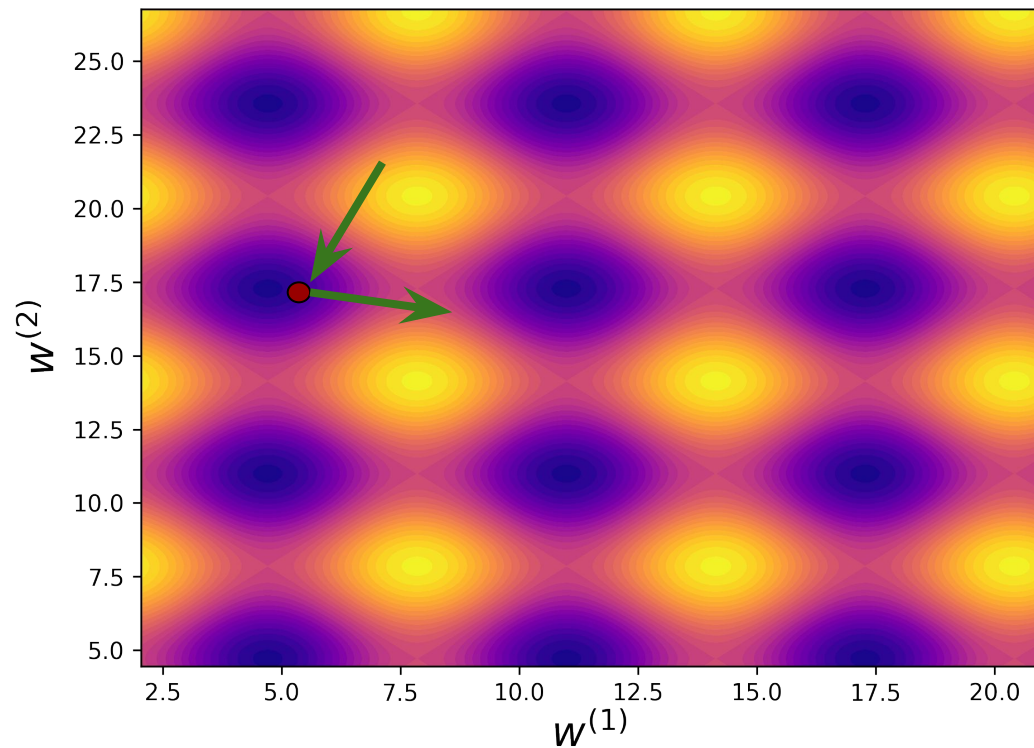
В процессе обучения одной нейросети получить несколько наборов весов

1. Меняем скорость обучения (learning rate) циклически
2. В конце каждого цикла, когда LR минимален, запоминаем значения параметров
3. Каждый набор интерпретируем как отдельную нейросеть

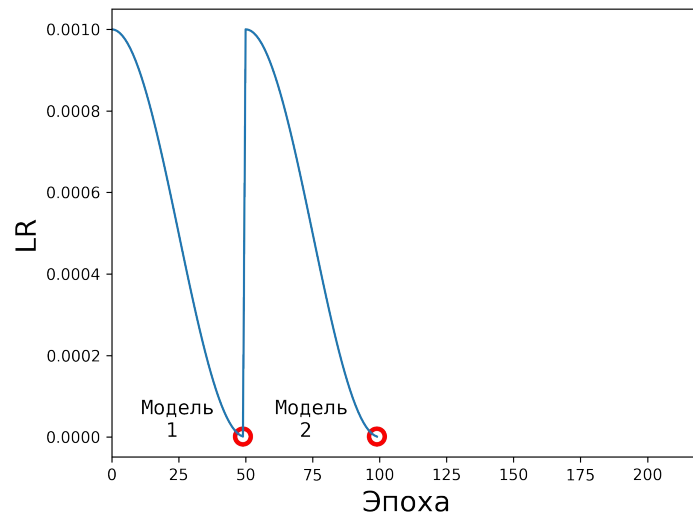
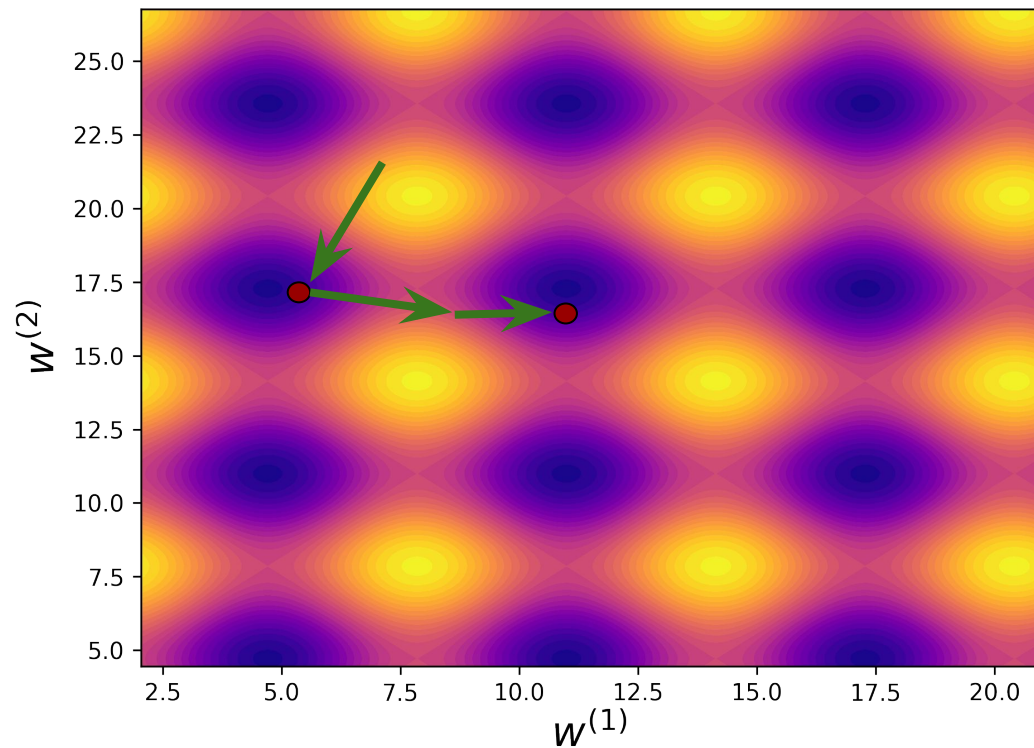
Snapshot Ensemble (SSE)



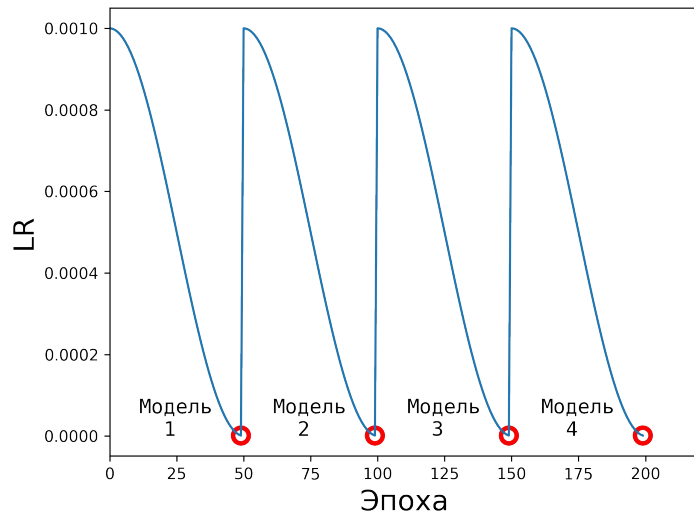
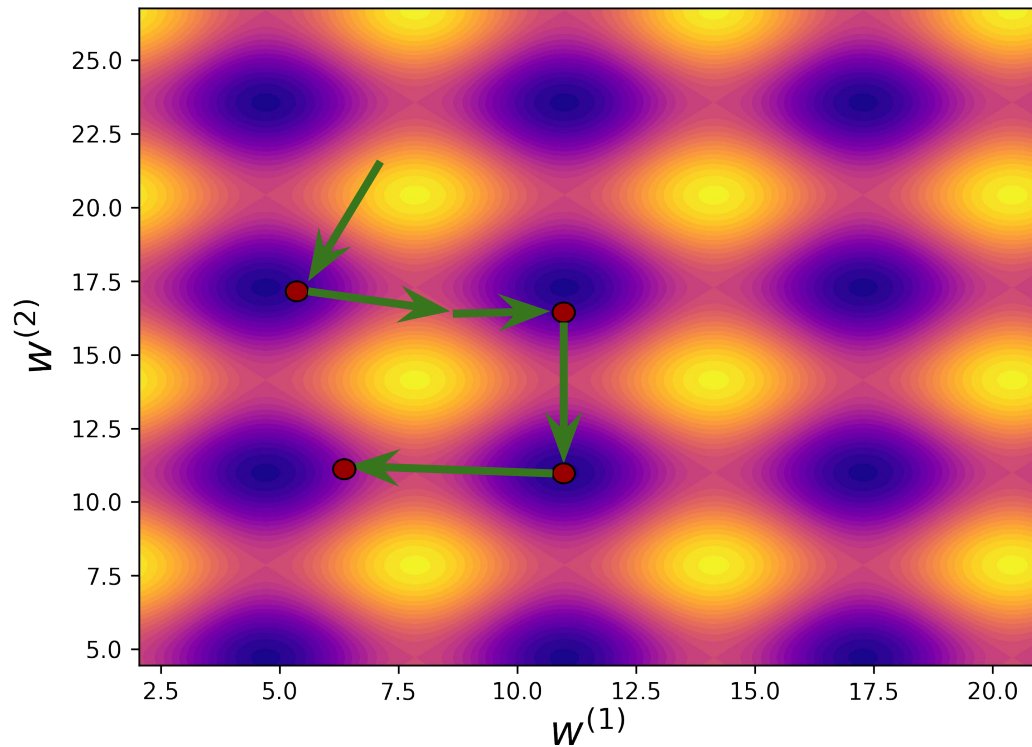
Snapshot Ensemble (SSE)



Snapshot Ensemble (SSE)



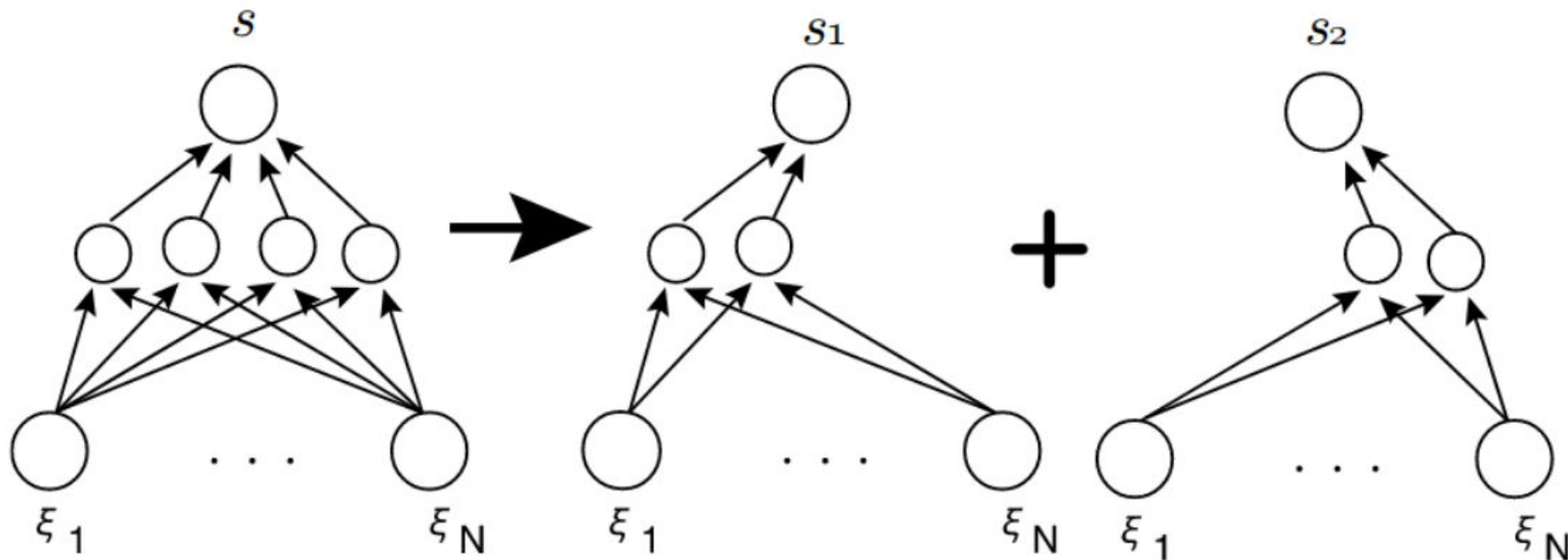
Snapshot Ensemble (SSE)



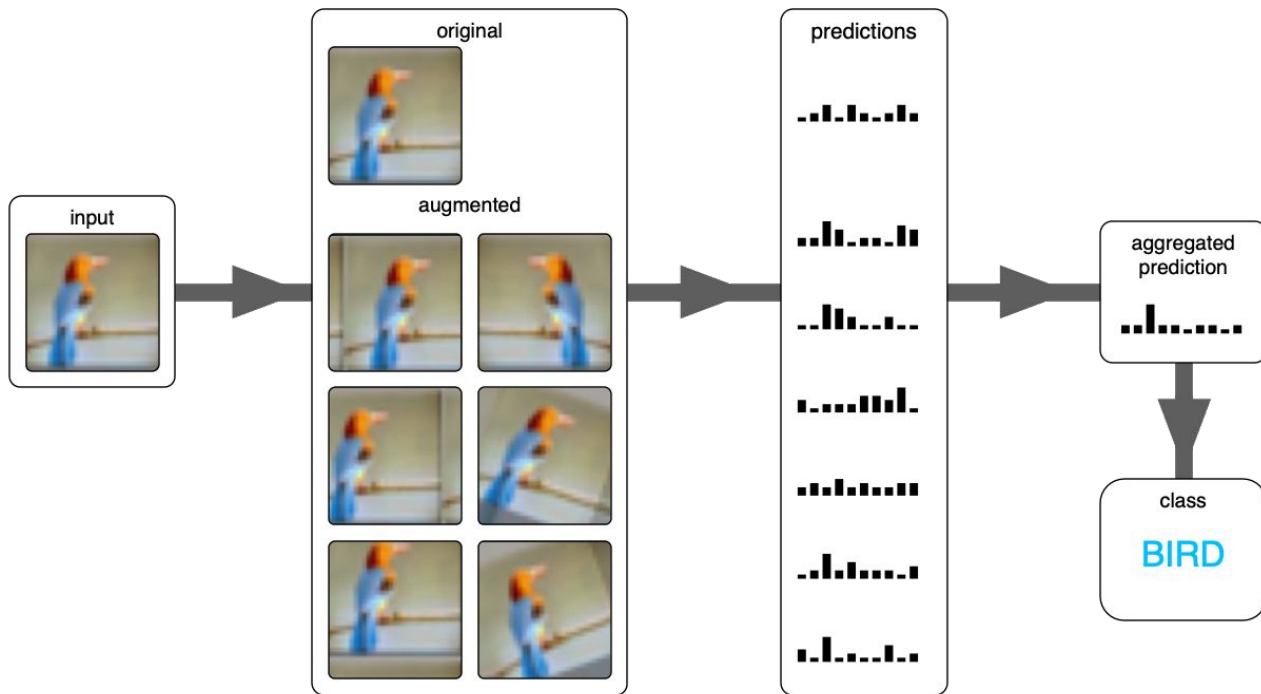
Стохастический граф вычислений

1. На этапе обучения вносим некоторый случайный шум
2. На этапе тестирования усредняются по зашумленным частям графа

Дропауты как ансамблирование



Аугментация во время тестирования

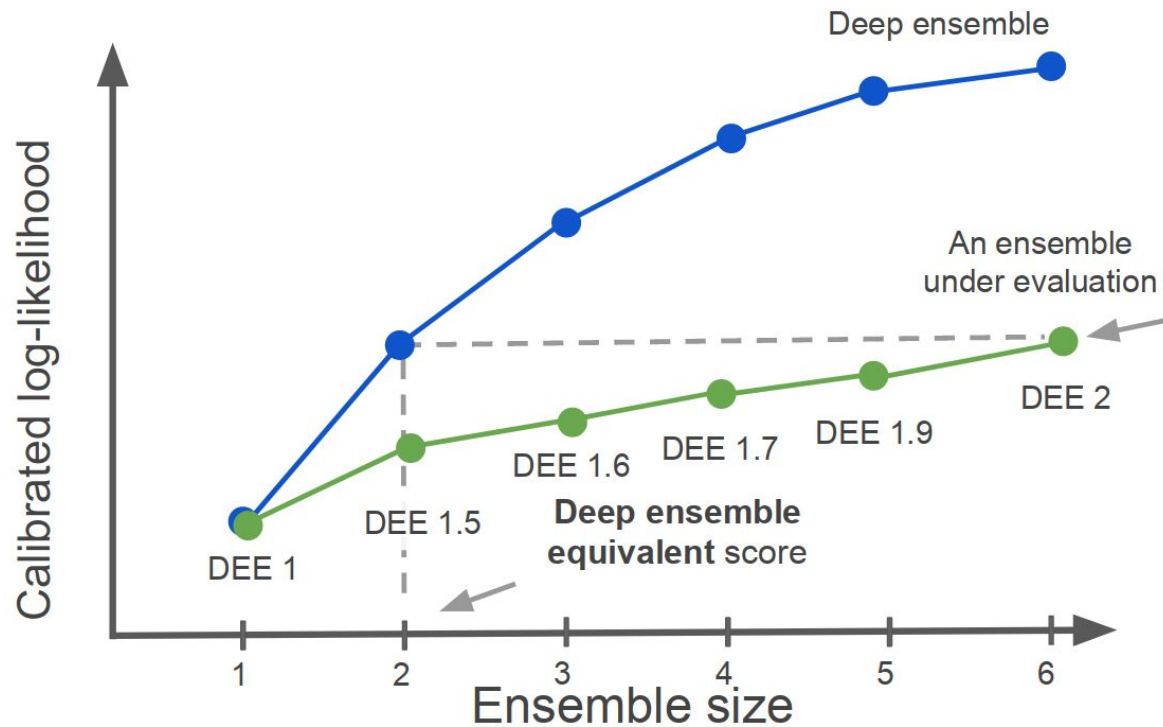


Метрика DEE

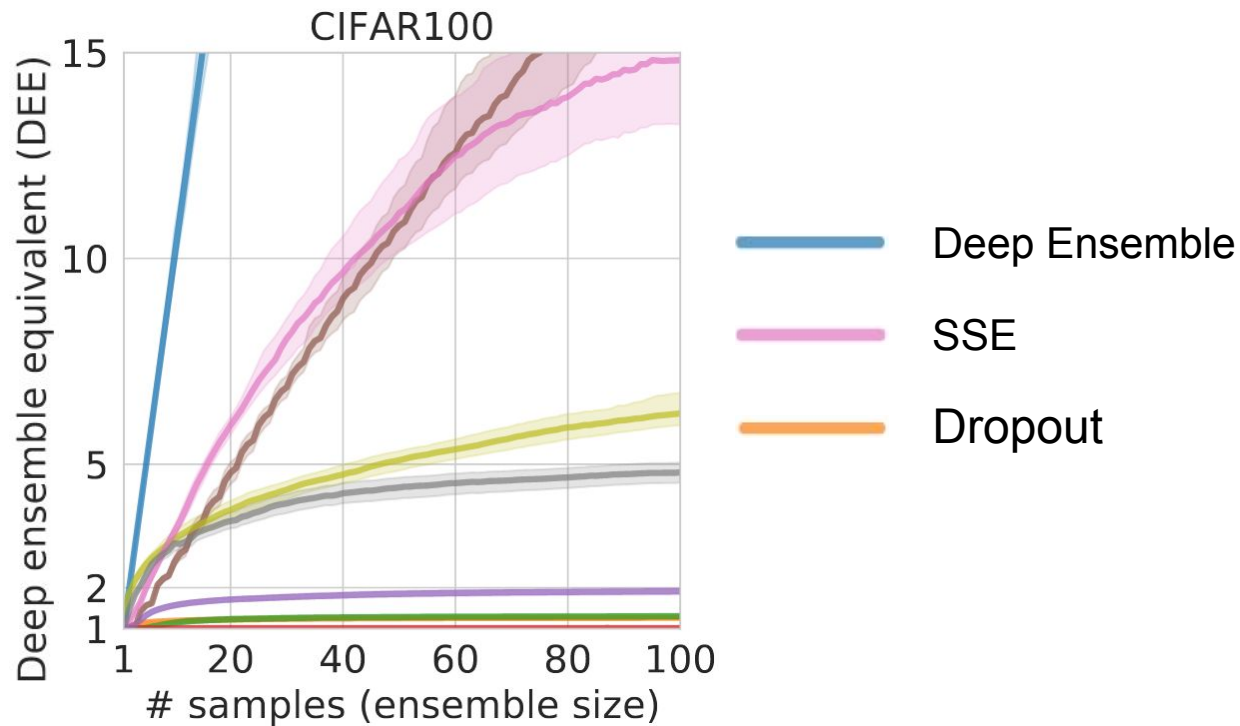
- Метрика DEE (Deep Ensemble Equivalent) позволяет сравнить метод ансамблирования с методом Deep Ensemble

Для ансамбля из n моделей метрика $DEE(n)$ будет равна минимальному размеру ансамбля, полученного методом Deep Ensemble, который достигает такого же качества

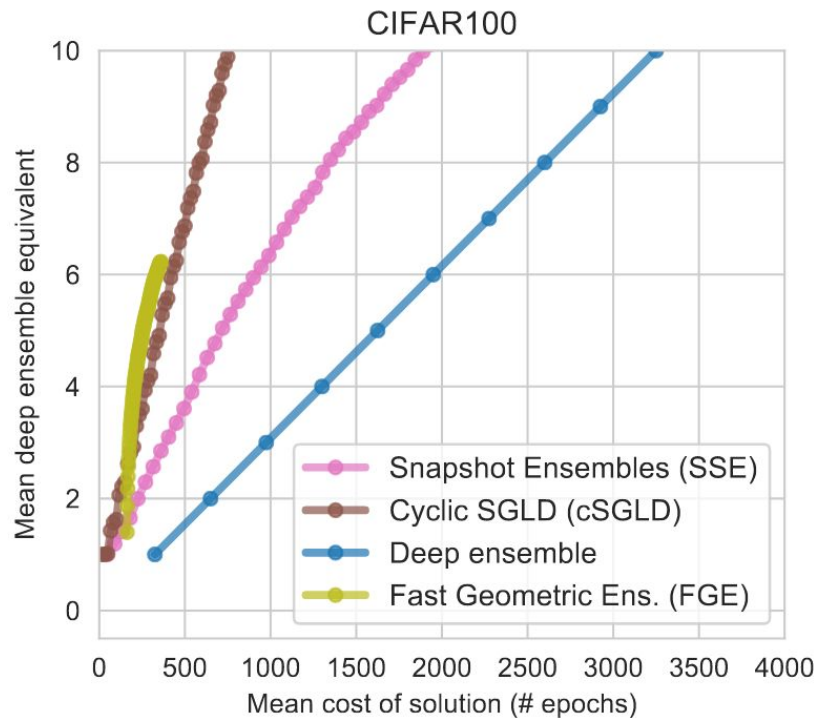
Метрика DEE



Сравнение методов



Сравнение методов



Ограничения

- Ансамбли требуют много ресурсов и при обучении, и при тестировании
- Вместо увеличения числа моделей в ансамбле, можно увеличивать размер каждой из моделей
- Нет однозначного ответа как небольшим ансамблем больших сетей и большим ансамблем маленьких сетей

<https://arxiv.org/abs/2007.08483>

<https://openreview.net/forum?id=z5Z023VBmDZ>

Выводы

- Ансамблирование позволяет увеличить точность и оценку неуверенности
- Построение и применение ансамблей ресурсоемкий процесс
- Snapshot Ensemble — хороший компромисс между качеством и временем обучения ансамбля
- Аугментация во время тестирования полезна!

Источники

- [Pitfalls of In-Domain Uncertainty Estimation and Ensembling in Deep Learning](#)
 - [Слайды](#)
- [Simple and Scalable Predictive Uncertainty Estimation using Deep Ensembles](#)
- [Snapshot Ensembles: Train 1, get M for free](#)