Problemy uczenia sieci neuronowych

dr inż. Sebastian Ernst

Przedmiot: Uczenie Maszynowe

Strojenie hiperparametrów modelu

Strojenie hiperparametrów

Nawet przy prostym modelu MLP mamy wiele decyzji do podjęcia:

- liczba warstw ukrytych,
- liczba neuronów w warstwach ukrytych,
- metoda inicjalizacji wag,
- krok algorytmu uczenia.

Jak rozwiązać ten problem? Metodą prób i błędów!

Wykorzystanie narzędzi scikit-learn

Z pomocą przychodzi scikit-learn i jego moduł `model_selection`:

- `GridSearchCV` przeszukuje *n*-wymiarową przestrzeń poprzez nałożenie siatki,
- `RandomizedSearchCV` prowadzi poszukiwania w sposób stochastyczny,
- obie metody posiadają warianty `Halving*`.

Modele Keras obudowujemy przy pomocy obiektów KerasRegressor i KerasClassifier biblioteki scikeras (dawniej wchodziły w skład modułu `tf.keras.wrappers.scikit_learn`).

Przykład: budowanie modelu

```
def build_model(n_hidden=1, n_neurons=30, learning_rate=3e-3,
                input_shape=[8]):
    model = keras.models.Sequential()
    model.add(keras.layers.InputLayer(input_shape=input_shape))
    for layer in range(n_hidden):
        model.add(keras.layers.Dense(n_neurons, activation="relu"))
    model.add(keras.layers.Dense(1))
    optimizer = keras.optimizers.SGD(learning_rate=learning_rate)
    model.compile(loss="mse", optimizer=optimizer)
    return model
```

Przykład: użycie scikeras

```
from scikeras.wrappers import KerasRegressor
keras_reg = KerasRegressor(build_model)

keras_reg.fit(X_train, y_train, epochs=100,
              validation_data=(X_valid, y_valid),
              callbacks=[keras.callbacks.EarlyStopping(patience=10)])

mse_test = keras_reg.score(X_test, y_test)
y_pred = keras_reg.predict(X_new)
```

Uwagi:

- dodatkowe argumenty `fit()` zostaną przekazane do modelu
- `score` jest odwrotnością MSE

Przykład: RandomizedSearchCV

```
from scipy.stats import reciprocal
from sklearn.model_selection import RandomizedSearchCV

param_distribs = {
    "model__n_hidden": [0, 1, 2, 3],
    "model__n_neurons": np.arange(1, 100),
    "model__learning_rate": reciprocal(3e-4, 3e-2)
}

rnd_search_cv = RandomizedSearchCV(keras_reg, param_distribs,
                                   n_iter=10, cv=3, verbose=2)
rnd_search_cv.fit(X_train, y_train, epochs=3,
                  validation_data=(X_valid, y_valid),
                  callbacks=[keras.callbacks.EarlyStopping(patience=10)])
```

Keras Tuner

- Moduł pozwalający na strojenie parametrów modelu:

```
import keras_tuner as kt
```

- Najprostsza forma użycia polega na zdefiniowaniu funkcji budującej model, która przyjmuje obiekt `HyperParameters` jako argument; składa się ona zazwyczaj z dwóch części:
  - część definiująca hiperparametry, ich dziedziny (*int*, *float*, *choice*, *boolean*, *fixed*) oraz zakresy,
  - część budująca model w oparciu o zdefiniowane hiperparametry.
- Funkcja ta wykorzystywana jest następnie przez wybraną klasę *tunera*: random search, grid search, optymalizacja bayesowska, hyperband oraz wrapper scikit-learn.

Przykład: Keras Tuner – budowanie modelu

```python
def build_model(hp):
    n_hidden = hp.Int("n_hidden", min_value=0, max_value=8, default=2)
    n_neurons = hp.Int("n_neurons", min_value=16, max_value=256)
    learning_rate = hp.Float("learning_rate", min_value=1e-4, max_value=1e-2,
                             sampling="log")
    optimizer = hp.Choice("optimizer", values=["sgd", "adam"])
    if optimizer == "sgd":
        optimizer = tf.keras.optimizers.SGD(learning_rate=learning_rate)
    else:
        optimizer = tf.keras.optimizers.Adam(learning_rate=learning_rate)

    model = tf.keras.Sequential()
    model.add(tf.keras.layers.Flatten())
    for _ in range(n_hidden):
        model.add(tf.keras.layers.Dense(n_neurons, activation="relu"))
    model.add(tf.keras.layers.Dense(10, activation="softmax"))
    model.compile(loss="sparse_categorical_crossentropy", optimizer=optimizer,
                  metrics=["accuracy"])
    return model
```

Przykład: Keras Tuner – *random search*

```
random_search_tuner = kt.RandomSearch(
    build_model, objective="val_accuracy", max_trials=5, overwrite=True,
    directory="my_fashion_mnist", project_name="my_rnd_search", seed=42)

random_search_tuner.search(X_train, y_train, epochs=10,
                           validation_data=(X_valid, y_valid))
```

Keras Tuner – sterowanie procesem uczenia

Aby sterować procesem uczenia, czyli mieć wpływ na funkcję `fit()`, możemy zdefiniować swój własny model oparty o klasę `HyperModel`:

```
class MyClassificationHyperModel(kt.HyperModel):
    def build(self, hp):
        return build_model(hp)

    def fit(self, hp, model, X, y, **kwargs):
        if hp.Boolean("normalize"):
            norm_layer = tf.keras.layers.Normalization()
            X = norm_layer(X)
        return model.fit(X, y, **kwargs)
```

Przykład: Keras Tuner – Hyperband

```
hyperband_tuner = kt.Hyperband(
    MyClassificationHyperModel(), objective="val_accuracy", seed=42,
    max_epochs=10, factor=3, hyperband_iterations=2,
    overwrite=True, directory="my_fashion_mnist", project_name="hyperband"
```

Przykład: Keras Tuner + Tensorboard

```
root_logdir = Path(hyperband_tuner.project_dir) / "tensorboard"
tensorboard_cb = tf.keras.callbacks.TensorBoard(root_logdir)
early_stopping_cb = tf.keras.callbacks.EarlyStopping(patience=2)
hyperband_tuner.search(X_train, y_train, epochs=10,
                       validation_data=(X_valid, y_valid),
                       callbacks=[early_stopping_cb, tensorboard_cb])
```

Inne narzędzia do optymalizacji hiperparametrów

- Hyperopt
- Hyperas
- scikit-optimize
- sklearn-deap

Omówienie wybranych hiperparametrów

Liczba warstw ukrytych

- Dla danego problemu, sieci głębokie potrzebują wykładniczo niższej liczby neuronów niż sieci płytkie:
  - warstwy niższe odpowiadają strukturom niskiego poziomu (np. liniom na obrazie).
  - warstwy pośrednie łączą te struktury w bardziej złożone (np. figury geometryczne).
  - najwyższe warstwy łączą je w struktury wysokiego poziomu (np. twarze).
- Typowe podejście: zwiększanie liczby warstw aż do przeuczenia sieci.
- Uczenie transferowe: wykorzystanie wag z części (najczęściej niższych) warstw istniejącego modelu zamiast ich losowej inicjalizacji.

Liczba neuronów na warstwę

- Klasyczne podejście: „piramida”
- Obecnie porzucone, gdyż sieci „prostokątne” radzą sobie równie dobrze, a mamy tylko jeden hiperparametr (zamiast tylu, ile jest warstw).
- Tu znów zwiększamy liczbę neuronów aż do wystąpienia przeuczenia.
- Ale można też zacząć z wartościami nadmiarowymi i wykorzystanie technik regularyzacji (np. *early stopping*) – tzw. „stretch pants approach”.

Inne hiperparametry

- Krok uczenia (*learning rate*)
- Algorytm optymalizacji
- Rozmiar wsadu
- Funkcja aktywacji
- Liczba epok

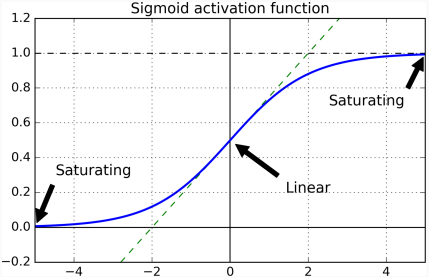
Problemy przy uczeniu sieci

Co może pójść źle?

- Zbyt szybko malejące lub rosnące gradienty podczas „powrotu” przez sieć – dolne warstwy się nie uczą
- Za mało danych etykietowanych, szczególnie przy dużych sieciach
- Bardzo wolne uczenie sieci
- Im więcej parametrów, tym większe ryzyko przeuczenia

Problem znikających/eksplodujących gradientów

- Algorytm propagacji wstecznej przenosi gradienty błędów idąc od warstwy wyjściowej do wejściowej (czyli wstecz)
- Często wartości gradientów spadają przy przechodzeniu do coraz niższych warstw – problem *znikajacych gradientów*
- Czasami jest wręcz przeciwnie – problem *eksplodujących gradientów*
- W 2010 Glorot i Bengio odkryli związek między niestabilnością gradientów a używaniem funkcji sigmoidalnej oraz popularnego wówczas sposobu inicjalizacji wag (rozkład normalny $\mu = 0$, $\sigma = 1$)



Inicjalizacja Glorota i He

- Teoretycznie: wariancja wejść każdej warstwy musi być równa wariancji jej wyjść
- W praktyce: wagi połączeń warstwy powinny być równe:
  - rozkładowi normalnemu o $\mu = 0$, $\sigma^2 = \frac{1}{fan_{\text{avg}}}$ lub
  - rozkładowi jednostajnemu pomiędzy $-r$ a $+r$ przy $r = \sqrt{\frac{3}{fan_{\text{avg}}}}$

Metoda	Funkcje aktywacji	σ^2
Glorot	brak, tanh, sigmoid, softmax	$1/fan_{\text{avg}}$
He	ReLU & co.	$2/fan_{\text{in}}$
LeCun	SELU	$1/fan_{\text{in}}$

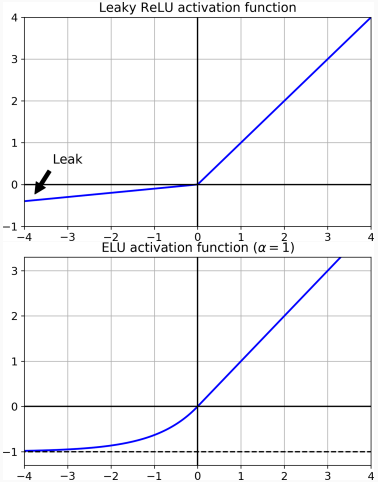
Nienasycające funkcje aktywacji

- Przy ReLU: problem „umierających” neuronów – suma ważona wejść zawsze ujemna
- Dwa rozwiązania:
  - leaky ReLU:

$$\text{LeakyReLU}_\alpha(z) = max(\alpha z, z)$$

  - Exponential Linear Unit:

$$ELU_\alpha(z) = \begin{cases} \alpha(e^z - 1) & \text{dla } z < 0 \\ z & \text{dla } z \geqslant 0 \end{cases}$$



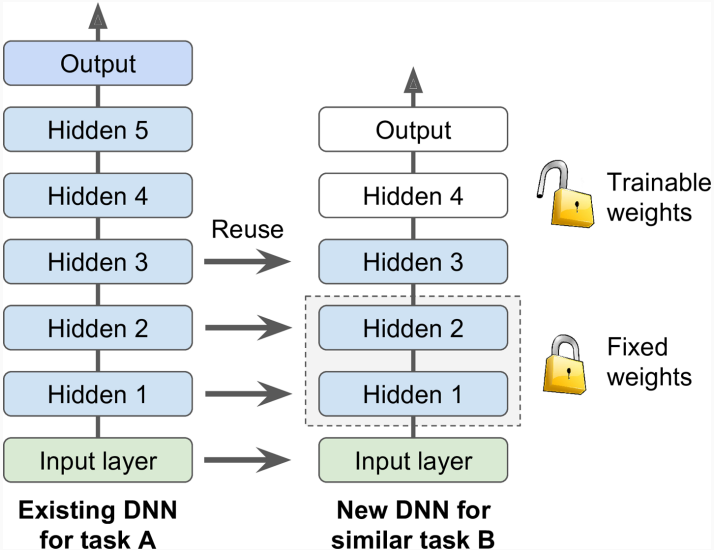
Normalizacja wsadów

- Stosowanie inicjalizacji He i ELU/ReLU & co. zmniejsza ryzyko niestabilności gradientów na początku uczenia, ale problem może pojawić się później.
- Technika *Batch Normalization* polega na dodaniu operacji tuż przed lub po funkcji aktywacji każdej warstwy ukrytej – wycentrowanie i normalizacja wejścia + skalowanie i przesunięcie wyniku.

```
model = keras.models.Sequential([
    keras.layers.Flatten(input_shape=[28, 28]),
    keras.layers.BatchNormalization(),
    keras.layers.Dense(300, activation="relu"),
    keras.layers.BatchNormalization(),
    keras.layers.Dense(100, activation="relu"),
    keras.layers.BatchNormalization(),
    keras.layers.Dense(10, activation="softmax")
])
```

Uczenie transferowe

Wykorzystanie wytrenowanych warstw



Uczenie transferowe w Keras

```
model_A = keras.models.load_model("my_model_A.h5")
model_B_on_A = keras.models.Sequential(model_A.layers[:-1])
model_B_on_A.add(keras.layers.Dense(1, activation="sigmoid"))
```

Uwaga: trening nowego modelu będzie modyfikował wagi warstw również w `model_A` – aby tego uniknąć, klonujemy model:

```
model_A_clone = keras.models.clone_model(model_A)
model_A_clone.set_weights(model_A.get_weights())
model_B_on_A = keras.models.Sequential(model_A_clone.layers[:-1])
model_B_on_A.add(keras.layers.Dense(1, activation="sigmoid"))
```

Wstępne przyuczanie warstwy wyjściowej

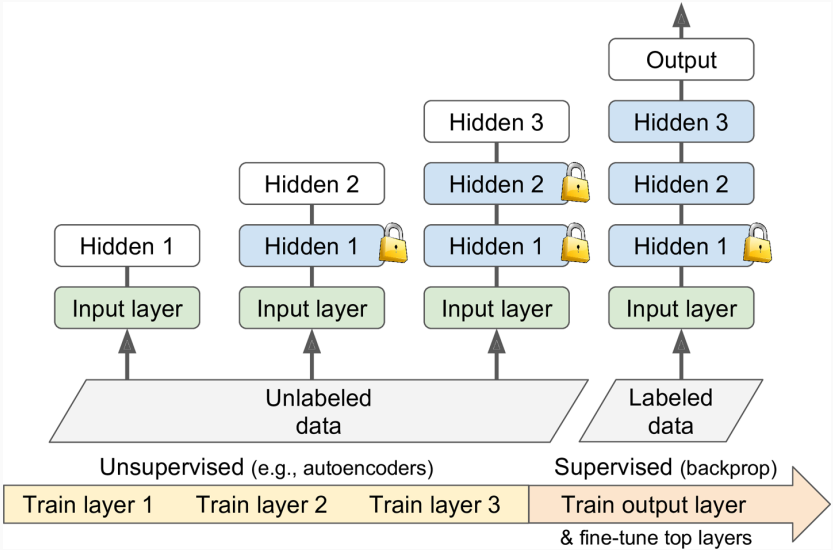
Początkowo, warstwa wyjściowa może zwracać wartości dalekie od ideału, a propagacja zmian może zniszczyć wagi przeniesione z pierwotnego modelu. W tym celu blokujemy możliwość modyfikacji wag przeniesionych warstw.

```
for layer in model_B_on_A.layers[:-1]:
    layer.trainable = False

model_B_on_A.compile(loss="binary_crossentropy",
                     optimizer=keras.optimizers.SGD(learning_rate=1e-3),
                     metrics=["accuracy"])

history = model_B_on_A.fit(X_train_B, y_train_B, epochs=4,
                           validation_data=(X_valid_B, y_valid_B))
```

Uczenie nowego modelu

```
for layer in model_B_on_A.layers[:-1]:
    layer.trainable = True

model_B_on_A.compile(loss="binary_crossentropy",
                     optimizer=keras.optimizers.SGD(learning_rate=1e-3),
                     metrics=["accuracy"])
history = model_B_on_A.fit(X_train_B, y_train_B, epochs=16,
                           validation_data=(X_valid_B, y_valid_B))
```

Nienadzorowane uczenie wstępne



Inne (szybsze) algorytmy optymalizacji

Przyspieszanie procesu uczenia

Dotychczas znamy **cztery sposoby** na przyspieszenie uczenia:

1. dobra strategia inicjalizacji wag połączeń
2. dobra funkcja aktywacji
3. korzystanie z normalizacji wsadów (BN)
4. wykorzystanie części wstępnie przyuczonej sieci

Piąty sposób: wykorzystanie algorytmu optymalizacji innego niż gradientowy (*gradient descent*).

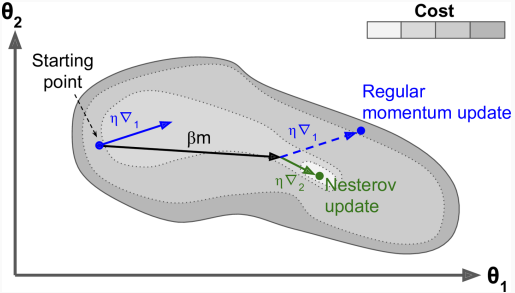
Algorytm gradientowy z pędem

- Klasyczny algorytm gradientowy nie uwzględnia wcześniejszych wartości gradientów – bierze pod uwagę tylko wartość chwilową.
- Algorytm z pędem dodaje *wektor pędu*, a więc wartość gradientu przekłada się na *przyspieszenie* a nie *prędkość*:
  1. $\mathbf{m} \leftarrow \beta\mathbf{m} - \eta\nabla_\Theta J(\Theta)$
  2. $\Theta \leftarrow \Theta + \mathbf{m}$
- Np. dla $\beta = 0.9$ prędkość może wzrosnąć 10x w stosunku do zwykłego algorytmu gradientowego.
- Przyspieszenie widoczne szczególnie przy różnych skalach wejść (efekt wydłużonej misy).
- W Keras wystarczy ustawić parametr `momentum`:

```
optimizer = keras.optimizers.SGD(lr=0.001, momentum=0.9)
```

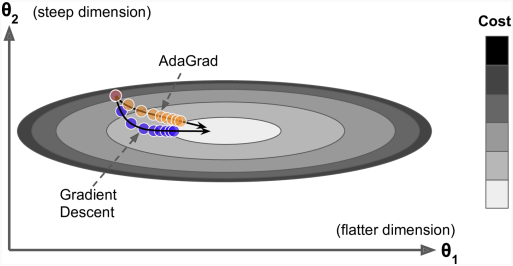
Nesterov Accelerated Gradient (NAG)

- Zaproponowany w 1983 przez Nesterowa, prawie zawsze szybszy niż „zwykły” gradient z pędem.
- Patrzy „z wyprzedzeniem”:
  1. $\mathbf{m} \leftarrow \beta\mathbf{m} - \eta\nabla_\Theta J(\Theta + \beta\mathbf{m})$
  2. $\Theta \leftarrow \Theta + \mathbf{m}$
- W Keras dodajemy argument `nesterov=True`.



AdaGrad

- Koryguje kierunek gradientu w stronę globalnego minimum, skalując wektor gradientów wedle „stromości”:
  1. $\mathbf{s} \leftarrow \mathbf{s} + \nabla_\Theta J(\Theta) \otimes \nabla_\Theta J(\Theta)$
  2. $\Theta \leftarrow \Theta - \eta \nabla_\Theta J(\Theta) \oslash \sqrt{\mathbf{S} + \varepsilon}$
- Problem przy sieciach głębokich: zatrzymuje się za wcześnie.



RMSProp

- Rozwinięcie AdaGrad – bierze pod uwagę tylko gradienty z ostatnich iteracji (a nie od początku uczenia)
- Patrzy „z wyprzedzeniem”:
  1. $\mathbf{s} \leftarrow \beta\mathbf{s} + (1-\beta)\nabla_\Theta J(\Theta) \otimes \nabla_\Theta J(\Theta)$
  2. $\Theta \leftarrow \Theta - \eta\nabla_\Theta J(\Theta) \oslash \sqrt{\mathbf{S} + \varepsilon}$
- Typowa wartość β: 0.9.
- W Keras:

```
keras.optimizers.RMSprop(lr=0.001, rho=0.9)
```

Adam

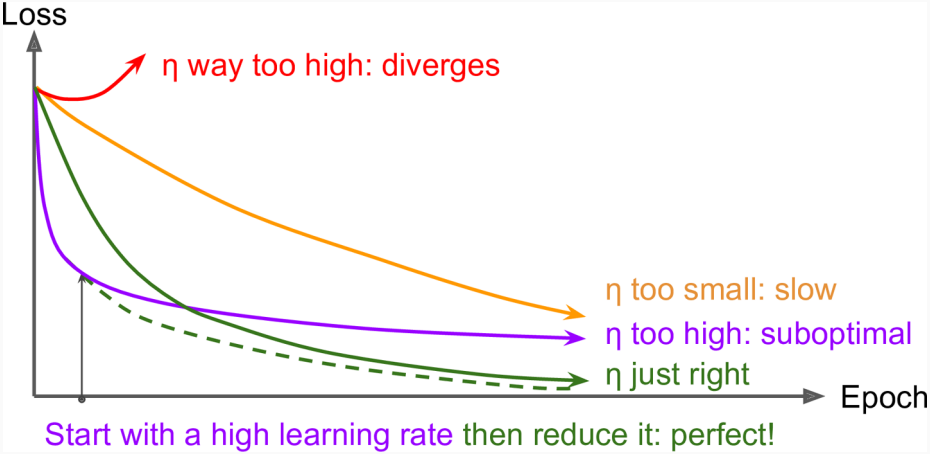
- Adam = *adaptive moment estimation*
- Łączy cechy gradientu z pędem oraz RMSProp:
  - tak jak gradient z pędem, pamięta wykładniczo zanikającą średnią poprzednich gradientów,
  - tak jak RMSProp, pamięta wykładniczo zanikającą średnią kwadratów poprzednich gradientów.

1. $\mathbf{m} \leftarrow \beta_1 \mathbf{m} - (1 - \beta_1) \nabla_\Theta J(\Theta)$
2. $\mathbf{s} \leftarrow \beta_2 \mathbf{s} + (1 - \beta_2) \nabla_\Theta J(\Theta) \otimes \nabla_\Theta J(\Theta)$
3. $\widehat{\mathbf{m}} \leftarrow \frac{\mathbf{m}}{1 - {\beta_1}^t}$
4. $\widehat{\mathbf{s}} \leftarrow \frac{\mathbf{s}}{1 - {\beta_2}^t}$
5. $\Theta \leftarrow \Theta + \eta \widehat{\mathbf{m}} \oslash \sqrt{\widehat{\mathbf{s}} + \varepsilon}$

```
keras.optimizers.Adam(lr=0.001
                      beta_1=0.9,
                      beta_2=0.999)
```

Harmonogramowanie kroku uczenia

Długość kroku a efekty uczenia



Harmonogramowanie z potęgowaniem (*power scheduling*)

- Krok w funkcji numeru iteracji t: $\eta(t) = \eta_0/(1 + t/s)^c$
- Hiperparametry:
  - η_0 – krok początkowy
  - c – wykładnik potęgi
  - s – liczba kroków
- Po wykonaniu s kroków, η spada do $\eta_0/2$, potem do $\eta_0/3$, $\eta_0/4$, itd.

Harmonogramowanie wykładnicze (*exponential scheduling*)

- $\eta(t) = \eta_0 \cdot 0.1^{t/s}$
- η maleje 10-krotnie co s kroków
- nie wyhamowuje tak jak harmonogramowanie z potęgowaniem

Harmonogramowanie ze stałymi wartościami (*piecewise constant scheduling*)

- Sekwencja par (długość kroku, liczba iteracji)
- Wymaga ręcznego strojenia całej sekwencji

Harmonogramowanie oparte o wydajność (*performance scheduling*)

- Zmierz błąd walidacyjny co N kroków (tak jak *early stopping*)
- Zmniejsz długość kroku o λ gdy nie ma poprawy

Harmonogramowanie *1cycle*

- Zaproponowane w 2018 przez Liesliego Smitha
- Zaczynamy od η_0, zwiększamy liniowo do η_1
- Potem obniżamy z powrotem do η_0 w kolejnej części procesu uczenia
- Pod koniec uczenia zmniejszamy krok, nadal liniowo, ale o kilku rzędów wielkości
- η_1 ustawiamy tak jak zwykle statyczny krok; $n_0 \approx \eta_1/10$
- Jeżeli korzystamy z pędu, zaczynamy od wysokiej wartości (np. 0.95) i w pierwszej fazie nieco ją obniżamy (np. 0.85), potem podnosimy

Harmonogramowanie w Keras

- Harmonogramowanie z potęgowaniem:

```
optimizer = keras.optimizers.SGD(lr=0.01, decay=1e-4)
```

- Harmonogramowanie wykładnicze i ze stałymi wartościami możemy uzyskać definiując funkcję zaniku i dołączając jako callback do procesu uczenia:

```
def exponential_decay_fn(epoch):
    return 0.01 * 0.1**(epoch / 20)

lr_scheduler =
  keras.callbacks.LearningRateScheduler(exponential_decay_fn)
history = model.fit(X_train_scaled, y_train, epochs=n_epochs,
                    validation_data=(X_valid_scaled, y_valid),
                    callbacks=[lr_scheduler])
```

Regularyzacja: unikanie przeuczenia

Regularyzacja: co już znamy

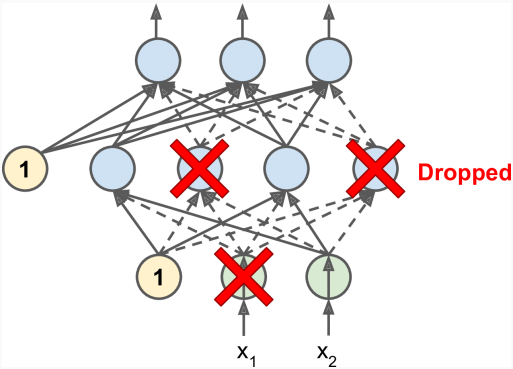
- *Early stopping* – przerywanie uczenia przy braku poprawy
- Normalizacja wsadów – ma takie działanie, mimo że powstała aby unikać niestabilności gradientów

Regularyzacja ℓ_1 i ℓ_2

- Regularyzacja ℓ_1 – model rzadki (wiele wag ustawionych na 0)
- Regularyzacja ℓ_2 – ograniczenie wag połączeń w sieci
- W Keras dodajemy do warstwy argument `kernel_regularizer`, przekazując jeden z obiektów:
  - `keras.regularizers.l1`
  - `keras.regularizers.l2`
  - `keras.regularizers.l1_l2`

Dropout

- Metoda zaproponowana i rozwinięta w 2012 i 2014 roku
- W każdym kroku, każdy neuron z prawdopodobieństwem p zostanie opuszczony (ang. *dropped out*)
- Opuszczony neuron jest ignorowany, ale tylko w bieżącym kroku uczenia
- Hiperparametr p (współczynnik opuszczenia – *dropout rate*) ustawiamy na 10–50% (zakres węższy w sieciach rekurencyjnych i konwolucyjnych)



Dropout w Keras

```
model = keras.models.Sequential([
    keras.layers.Flatten(input_shape=[28, 28]),
    keras.layers.Dropout(rate=0.2),
    keras.layers.Dense(300, activation="elu",
                       kernel_initializer="he_normal"),
    keras.layers.Dropout(rate=0.2),
    keras.layers.Dense(100, activation="elu",
                       kernel_initializer="he_normal"),
    keras.layers.Dropout(rate=0.2),
    keras.layers.Dense(10, activation="softmax")
])
```