

Deep Learning Basics

Deep Learning Basics

基本模型

- 经典回归模型[CS229]

- 损失函数(cost function)

- 深度神经网络

- 梯度计算

主要网络

优化方法

- 优化算法

 - 学习率调整（含梯度估计修正）

 - 批量大小

 - 参数初始化

 - 数据预处理[Book NNDL]

 - 超参数优化[JRYB2011]

- 网络正则化

 - L1/L2正则

 - 权重衰减

 - 丢弃法

库和框架

- 深度学习库对比

 - Keras

 - PyTorch

- 深度学习框架对比

参考

基本模型

在介绍所有的库支持，参考[Book PDSH]熟悉Python、Numpy、Pandas、Matplotlib以及sklearn库。

经典回归模型[CS229]

假设输入是符合特征为 $x \in R^d$ 的样本，偏差项为 b ， W 是权重（矩阵）参数， \hat{y} 是对 y 的预估，经典回归模型可以表达如下：

$$\hat{y} = Wx + b$$

有时候bias b 可以作为 W 的一列进行表示. 也被写作 θ , W 和 b 都是张量。

损失函数(cost function)

定义为：

$$Loss(W, b) = \|\hat{y} - y\|_p$$

p 一般取1、2或者 ∞ .

学习的目标:

$$W, b = \arg \min_{W, b} Loss(W, b)$$

深度神经网络

包含如下4个主要对象:

- 层, 各层链接形成model或者网络
- 输入输出和对应的目标
- 损失函数
- 优化器

基本原理:

1) 正向传播

$$\begin{aligned} z &= W^{(1)}x \\ h &= \phi(z) \\ o &= W^{(2)}h \\ L &= Loss(o, y) \\ s &= \frac{\lambda}{2}(\|W^{(1)}\|_F^2 + \|W^{(2)}\|_F^2) \\ J &= L + s \end{aligned}$$

目标函数 $J(W, b, \lambda)$ 为带正则项的损失函数,其中 $W^{(1)} \in R^{h \times d}$ 是隐藏层权重参数, $z \in R^h$ 是隐藏层变量, $o \in R^q$ 是输出层变量, $W^{(2)} \in R^{q \times h}$ 是输出层权重, 假设损失函数为Loss, 样本标签是y. 给定超参为 λ , 计算正则项 s ,

2) 反向传播

相对正向传播计算出代价函数, 反向传播目标是通过求梯度, 计算(W, b)。首先计算目标函数 J 有关损失项 L 和正则项 s . 需要借助链式法则。

推导过程如下:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial J}{\partial L} &= 1, \frac{\partial J}{\partial s} = 1 \\
\frac{\partial J}{\partial o} &= \frac{\partial J}{\partial L} \cdot \frac{\partial L}{\partial o} = \frac{\partial L}{\partial o} \\
\frac{\partial s}{\partial W^{(1)}} &= \lambda W^{(1)}, \frac{\partial s}{\partial W^{(2)}} = \lambda W^{(2)} \\
\frac{\partial J}{\partial W^{(2)}} &= \frac{\partial J}{\partial o} \cdot \frac{\partial o}{\partial W^{(2)}} + \frac{\partial J}{\partial s} \cdot \frac{\partial s}{\partial W^{(2)}} = \frac{\partial J}{\partial o} h^T + \lambda W^{(2)} \\
\frac{\partial J}{\partial h} &= \frac{\partial J}{\partial o} \cdot \frac{\partial o}{\partial h} = W^{(2)T} \frac{\partial J}{\partial o} \\
\frac{\partial J}{\partial z} &= \frac{\partial J}{\partial h} \cdot \frac{\partial h}{\partial z} = \frac{\partial h}{\partial z} \cdot \phi'(z) \\
\frac{\partial J}{\partial W^{(1)}} &= \frac{\partial J}{\partial o} \cdot \frac{\partial o}{\partial W^{(1)}} + \frac{\partial J}{\partial s} \cdot \frac{\partial s}{\partial W^{(1)}} = \frac{\partial J}{\partial z} x^T + \lambda W^{(1)}
\end{aligned}$$

其中注意 \cdot 表示向量的内积，可能需要对向量调整(专职或者互换输入位置等)。以上推导过程参考[Book DIDL].

基本过程如下：

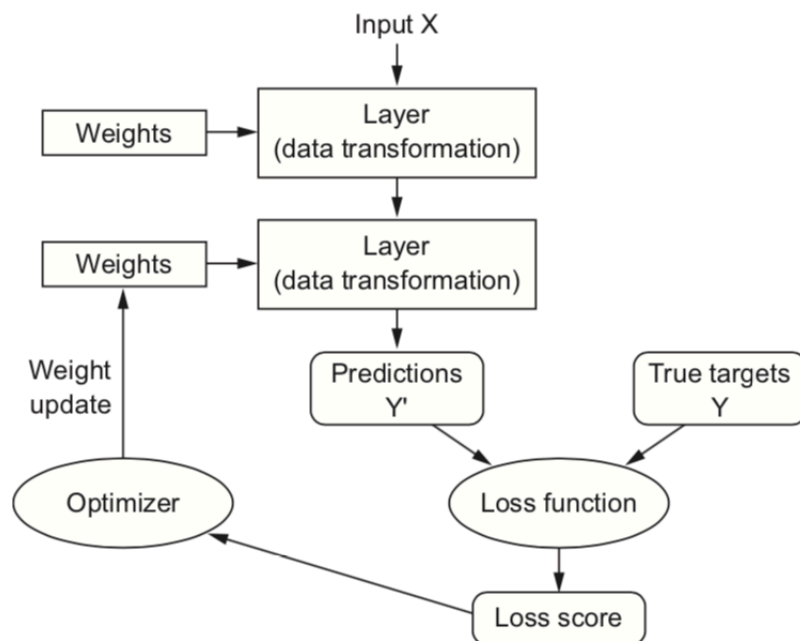


图1：深度学习计算过程，来自[Book DLP]

梯度计算

文章[COCG]给出了基于计算图进行后向传播计算的原因，主要原因是相对前向传播来说，便于一次性算出所有的目标梯度。MXNet提供了对任意函数求梯度的方法, 例子见[这里](#)。

主要网络

CNN在计算机视觉领域应用非常广。借助于卷积层、池化层，借助于填充、步幅以及通道等形式，参考[CNNs], [Book DIDL]给出了常见的卷积神经网络以及各自之间的关系。

RNN对具有序列特性(时间、逻辑等)的数据非常有效，它能挖掘数据中的时序信息以及语义信息，利用了RNN的这种能力，应用在解决语音识别、语言模型、机器翻译以及时序分析等NLP领域。[Book DIDL]有专门的章节介绍各种RNN网络。

相对于CNN每层神经元只能向上一层传播，样本的处理在不同时刻是独立的，RNN的输出可以在下一个时间戳上作用在自身上，也就是第k层神经元在t时刻，除了(k-1)层神经元在该时刻的输出外，还包括了其自身在(t-1)时刻的输出。图示如下：

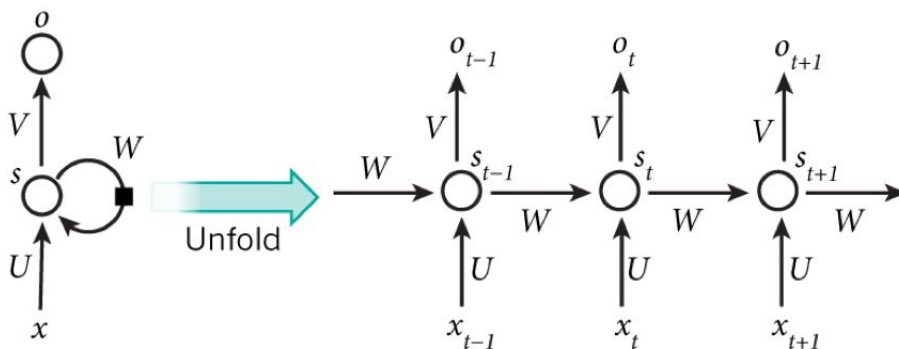


图2： RNN在时间维度上展开，图来自[CNN_RNN_DNN]

(t+1)时刻网络的最终结果 $O(t+1)$ 是该时刻输入和所有历史共同作用的结果, 实现某种记忆能力，达到对时间序列建模的目的。例如典型的n-gram语义理解等。

论文[ZLM]也对多层感知器、CNN、RNN之间做了分析和对比。

优化方法

优化难点：

- 非凸优化、平坦局部最小值以及鞍点
- 梯度消失和爆炸

由bp算法推动的最后2个步骤得知： $\phi(z)'$ 就是对激活函数求导，如果其求导结果大于1，经过多层计算之后， $\frac{\partial J}{\partial W^{(l)}}$ 就会以指数形式增加，出现梯度爆炸，否则以指数形式递减，形成梯度消失。

- 泛化问题(generalization error): 过拟合问题

优化算法

学习率调整（含梯度估计修正）

对于正常的梯度下降，设定学习率 $\eta > 0$, f 为连续可导函数，根据泰勒展开，权重矩阵的训练过程如下：

$$W = W - \eta \Delta f(x)$$

1. MBGD: 小批量梯度下降法(mini-batch gradient descent), 从大的训练集里面，分批并且取样进行训练，朝着当前所在位置的坡度最大的方向前进, 在时间步 t ,

$$g_t = \frac{1}{|B|} \sum_{i \in B_t} \Delta f(x)$$

$$W = W - \eta_t g_t$$

2. Momentum: 参照小球在碗中滚动的物理规则进行移动, $\alpha \in (0, 1)$, 借助指数加权移动平均使得自变量的更新方向更加一致, 从而 可以在开始选择较大的学习率, 加速收敛。

$$v_t = \alpha v_{t-1} + \eta_t g_t$$

$$W = W - v_t$$

3. AdaGrad: Ada来自英文单词Adaptive, 即“适当的”的意思; AdaGrad会为参数的每个元素适当地调整更新步伐(学习率), 即学习率衰减, 随着学习的进行, 使学习率逐渐减小, 一开始“多”学, 然后逐渐“少”学。 \cdot 表示内积。

$$h_t = h_{t-1} + g_t \cdot g_t$$

$$W = W - \frac{\eta}{\sqrt{h_t}} g_t$$

4. RMSProp: 在AdaGrad的基础上,应用指数加权平均.

$$s_t = \alpha s_{t-1} + (1 - \alpha) g_t \cdot g_t$$

$$W = W - \frac{\eta}{\sqrt{s_t}} g_t$$

批量大小

批大小会印象随机梯度的方差, 跟泛化能力也相关. 批量大小的选择不宜过大或过小, 需根据实际需求做出选择, 较大的批量可以更准确地估计梯度, 而较小的批量可以获得更快的收敛速度.

参数初始化

- 预训/随机/固定值 初始化
- 基于固定方差的初始化: 例如使用高斯分布 $N(0, \sigma^2)$.
- 基于方差缩放的参数初始化, 例如Xavier初始化
- 正交初始化: W 初始化为正交矩阵, 满足 $W^{(l)} (W^{(l)})^T = I$, 使得误差项 $\delta^{(l-1)} = ((W^{(l)})^T) \delta^{(l)}$ 满足范数保持性, 即 $\|\delta^{(l-1)}\|^2 = \|\delta^{(l)}\|^2 = \|((W^{(l)})^T) \delta^{(l)}\|^2$.

数据预处理[Book NNDL]

- 最小最大值归一化
- 标准化
- 合并

超参数优化[JRYB2011]

常见的超参数有:

1. 网络结构,包括神经元之间的连接关系、层数、每层的神经元数量、激活函数的类型.
2. 批量大小、学习率以及梯度评估方法等
3. 正则化系数等。

常使用随机搜索等方法进行最优组合寻找。

网络正则化

L1/L2正则

$$\theta^* = \arg \min_{\theta} \frac{1}{N} \sum_i Loss(y^{(n)}, f(x^{(n)}; \theta)) + \lambda l_p(\theta)$$

l_p 为范数。通过添加范数减少过拟合。

权重衰减

引入衰减系数 β , 在时间步骤t:

$$\theta_t = (1 - \beta)\theta_{t-1} - \alpha g_t$$

丢弃法

是指在训练一个深度神经网络时，我们可以随机丢弃一部分神经元来避免过拟合，每次选择丢弃的神经元是随机的。

库和框架

深度学习库对比

Keras

[Keras](#) 是提供了高度抽象的深度学习API，依赖于TensorFlow进行部署和分布式训练。提供了丰富的数据预处理和网络配置功能，支持多种框架上运行，实现端到端的深度学习。

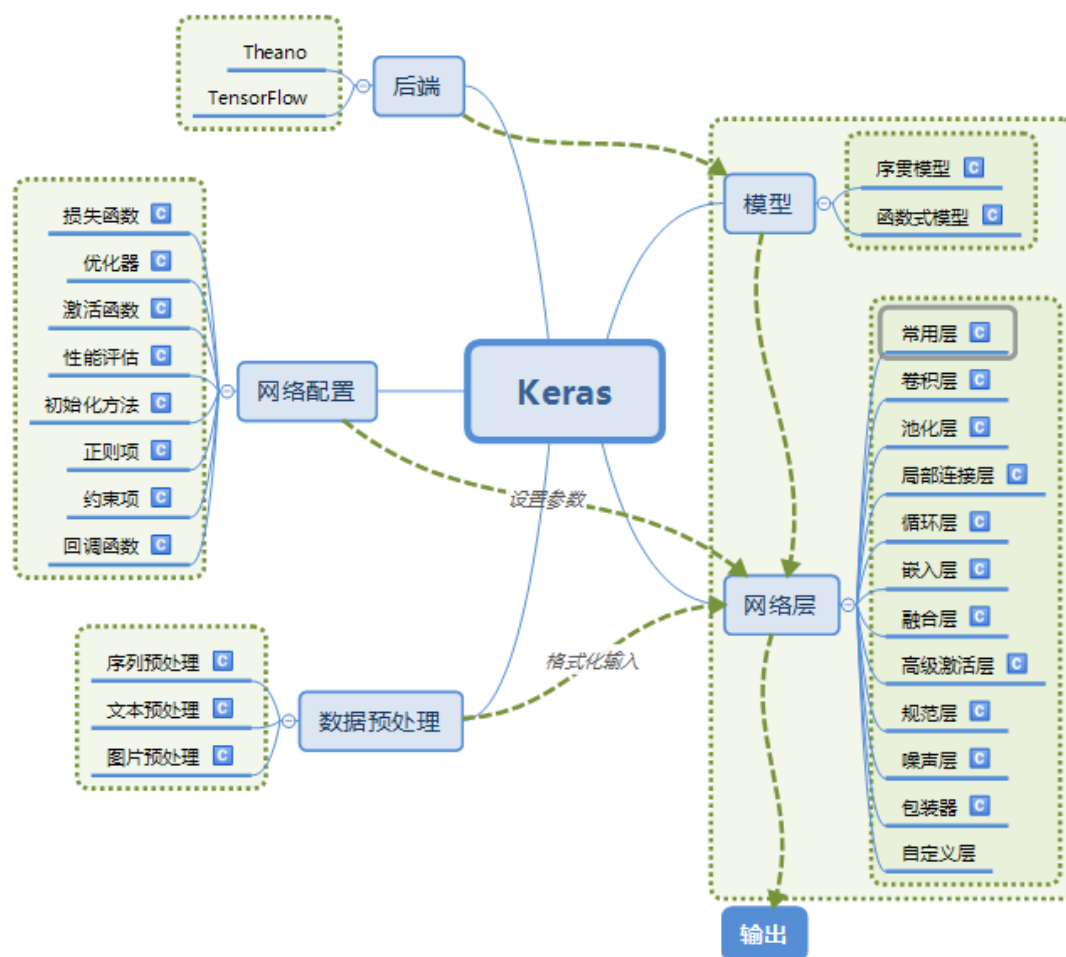


图2: Keras模块结构, 图来自[Keras_Intro]

layers的具体介绍参考[layers](#).

构建网络步骤:

1. 预处理: `TextVectorization|Normalization`, 调用adapt进行实际的预处理
2. 构建网络层:
 1. 支持的Model
 - Sequential: `keras.Sequential()`, a linear stock of layers;
 - Functional: `keras.Model(inputs=[input_], outputs=[output])`, a graph of layers as nodes.
 2. Layer: `Input|Dense|Conv2D|MaxPooling|Output|custom`
3. 编译: `compile(optimizer = SGD|RMSprop|Adam..., loss=MeanSquaredError|KLDivergence|CosineSimilarity..., metrics=[AUC...])`
4. 训练: `fit(x, y, batch_size, epochs, validation_data...)`
5. 预测: `predict(x)`

PyTorch

PyTorch本身算是一个深度学习框架，同时也提供了支持GPU的Tensor计算库和神经网络库，相对其他深度学习库，支持动态计算图。相对静态计算图(computational graph, 节点为张量，边为运算(Function, 卷积、基本运算等))，先搭建图然后运算，动态图是运算与搭建同时进行，更为灵活，但是效率相对较低。

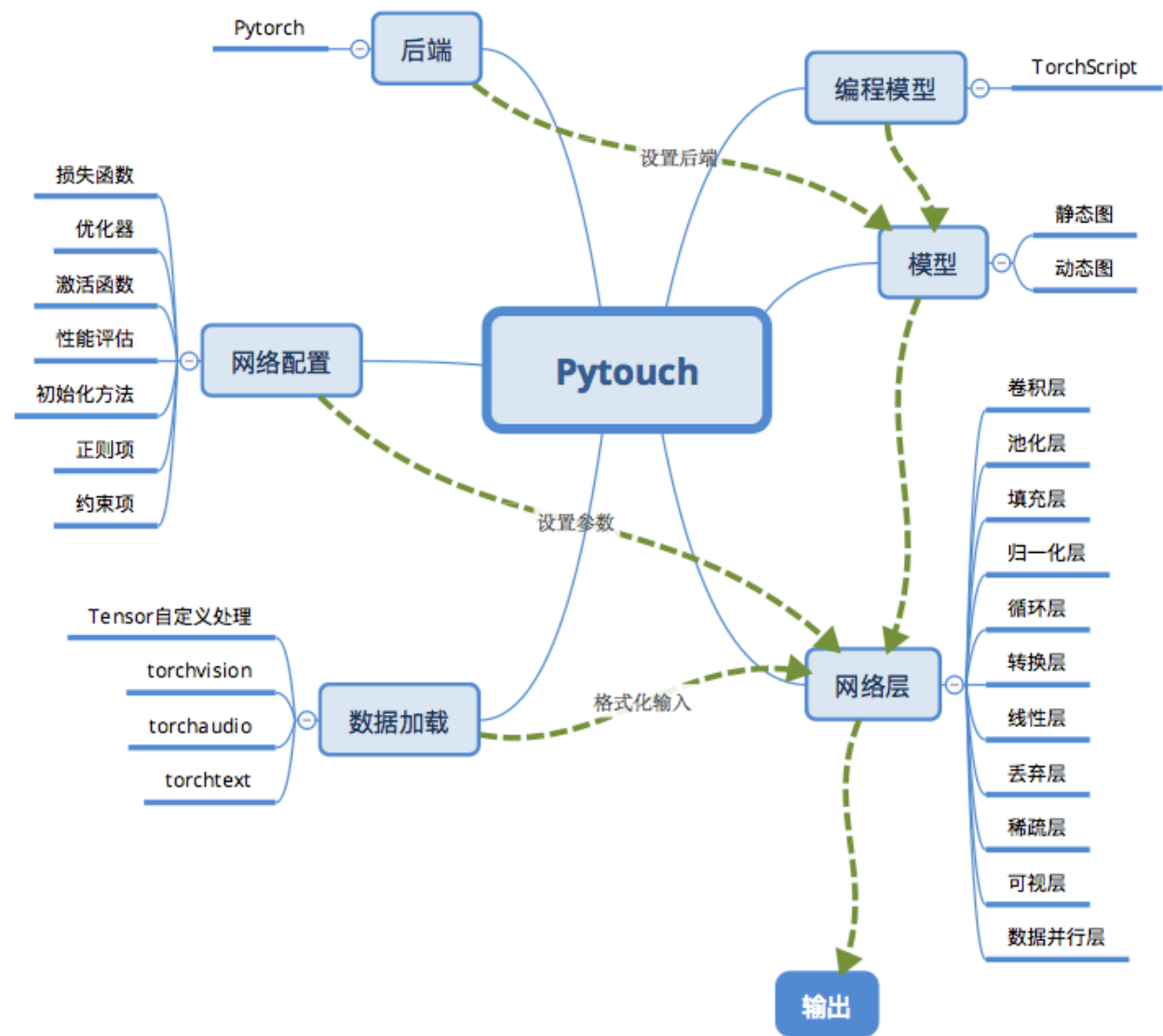


图3: Pytorch模块结构

构建网络步骤:

1. 通过torchvision等进行数据加载;
2. 构建网络, 继承nn.Module, 定义layers;
 1. Layer: `torch.Linear` | `Conv2D` | `custom`
 2. 在输入数据集上迭代 `torch.functional.forward`;
 3. 定义损失函数和优化器;
3. 训练:
 1. 通过网络处理输入,进行梯度反向传播:


```
net.zero_grad()
out.backward(torch.randn(1, 10))
```

2. 定义并且计算loss(输出和正确答案的距离) 例如选择 `MSELoss`, 然后调用 `loss.backward`;

```
output = net(input)
target = torch.randn(10)  # 本例子中使用模拟数据
target = target.view(1, -1)  # 使目标值与数据值尺寸一致
criterion = nn.MSELoss()

loss = criterion(output, target)

net.zero_grad()      # 清零所有参数(parameter) 的梯度缓存
loss.backward()
```

3. 将梯度反向传播给网络的参数,更新网络的权重:

```
# 创建优化器(optimizer)
optimizer = optim.SGD(net.parameters(), lr=0.01)

# 在训练的迭代中:
optimizer.zero_grad()  # 清零梯度缓存
output = net(input)
loss = criterion(output, target)
loss.backward()
optimizer.step()      # 更新参数
```

4. 预测: `net(test_x)`

简单总结: Keras和PyTorch的对比参考[Keras_vs_PyTorch]. PyTorch更加灵活, 可定制程度高, Debug能力强, 同时效率也较高, 社区更活跃, 适合research, Keras抽象程度高, 适合新手入门, 对小数据集和快速原型搭建非常适合。

深度学习框架对比

通过文献[GSMVAPL] 我们可以大概了解目前深度学习库和框架之间的大概关系:

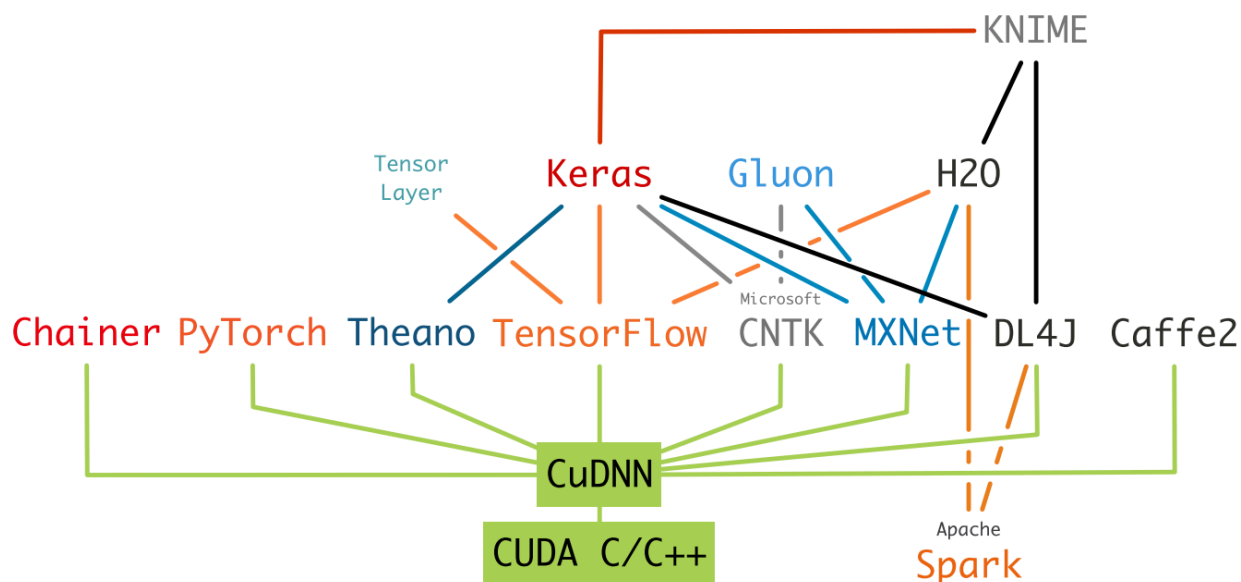


图4：流行深度学习框架和库的层次关系

这里我们只关注框架。

[GSMVAPL] P100-101对当前主要机器学习框架和库从licence、开发语言、计算图支持情况、API语言以及流行度、使用场景和项目发起者进行了分析，最流行的框架是TensorFlow，开发语言基本上是c++或者python，只有TensorFlow、PyTorch以及MXNet和Chainer支持动态图，同时基本所有框架都支持Python API. 最后可以看到大部分框架都是由大厂牵头研发的，人力和财力投入巨大。

从性能方面来看，没有一个框架在所有的场景和案例下面都绝对领先于其他框架。从文献[YCWSWQ]可以看到，不同的超参对性能和精确度都有非常大的影响。

参考

[Book PDSH] : Python Data Science Handbook

[CS229] : <https://see.stanford.edu/Course/CS229>

[JRYB2011] : [Algorithms for Hyper-Parameter Optimization](#)

[Book DLP] : Deep Learning with Python

[Book DIDL] : Diving Into Deep Learning

[Book NNDL] : <https://nndl.github.io/> , 总结: <https://zhuanlan.zhihu.com/p/162943650>

[Keras_Intro] : https://blog.csdn.net/zdy0_2004/article/details/74736656

[Keras_vs_PyTorch] : <https://deepsense.ai/keras-or-pytorch/>

[DL_framework] : <https://www.zhihu.com/question/46587833/answer/104288698>

[GSMVAPL] : [Machine Learning and Deep Learning frameworks and libraries for large-scale data mining: a survey](#), Artificial Intelligence Review(2019), 77-124

[YCWSWQ] : [A Comparative Measurement Study of Deep Learning as a Service Framework](#)

[CNNs] : <https://zhuanlan.zhihu.com/p/47391705>

[CNN_RNN_DNN] <https://www.zhihu.com/question/34681168/answer/84061846>

[ZLM]: 张荣. et.al 《深度学习研究综述》, 2018 《信息与控制》 385-397. <https://arxiv.org/pdf/1804.01653.pdf>

[COCG] <http://colah.github.io/posts/2015-08-Backprop/>