Отчёт по практической работе по курсу ГО
«Автоматическое дифференцирование для автокодировщика»

Аят Оспанов
617 гр., ММП, ВМК МГУ, Москва
12 октября 2017 г.

Содержание

1 Модель автокодировщика

Для задания модели автокодировщика рассмотрим сначала полносвязный слой нейронной сети, показанный на рис. 1, слева. Данный слой принимает на вход вектор $x \in \mathbb{R}^p$ размерности p и возвращает вектор $z \in \mathbb{R}^q$ размерности q. При этом каждый выходной элемент (нейрон) z_i вычисляется с помощью 1) линейной комбинации входящих в него элементов x_j с весами w_{ij} с добавлением сдвига b_i и 2) применения к результату линейной комбинации некоторой одномерной нелинейной функции активации g:

$$\boldsymbol{z} = g(W\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}) = g(\overline{W}\overline{\boldsymbol{x}}),$$

где $W \in \mathbb{R}^{q \times p}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^q$ и $\overline{W} = [W, \boldsymbol{b}]$, $\overline{\boldsymbol{x}} = [\boldsymbol{x}^T, 1]^T$ – расширенные матрица весов и вектор входа. В качестве операции g может использоваться как тождественное преобразование, так и простая нелинейная функция.

Модель автокодировщика состоит из нескольких полносвязных слоёв (см. рис. 1, справа). Входной и выходной слои состоят из D нейронов, симметричные скрытые слои имеют одинаковое число нейронов, а средний слой состоит из d нейронов. Обозначим через $\boldsymbol{z}^l$ выход l-го скрытого слоя, где $l = 0, 1, 2, \dots, L$, $\boldsymbol{z}^0 = \boldsymbol{x}$; $\boldsymbol{z}^L$ – выход последнего слоя. Обучение

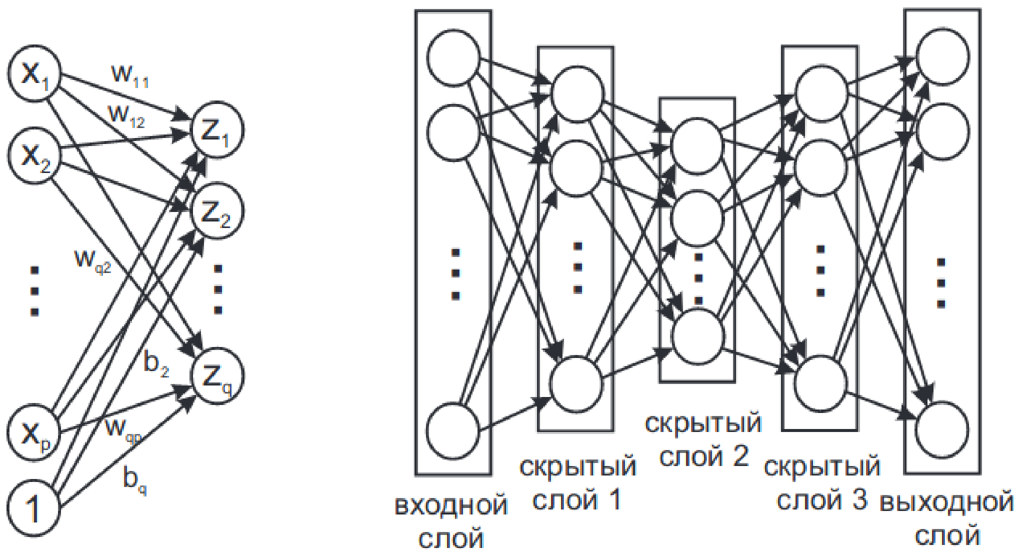


Рис. 1: Пример автокодировщика с тремя скрытыми слоями

автокодировщика осуществляется путём решения следующей задачи оптимизации:

$$F(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L(\boldsymbol{x}_i, z^L(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\theta})) \to \min_{\theta}$$

Здесь в качестве функции потерь выступает $L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{z}\|^2$, а через $\boldsymbol{\theta}$ обозначены параметры всех скрытых слоёв $\{W_l\}_{l=1}^{L}$

2 Вычисление произведения гессиана на вектор: R_p проход назад

Все величины для R_p прохода назад вычисляются применением оператора $R_p\{\cdot\}$ к каждой строчке алгортима прохода назад. В итоге получаем следующий алгоритм:

$$
\begin{aligned}
&R_p\{\nabla_{\boldsymbol{z}^L} L\} = R_p\{\boldsymbol{z}^L - x\} = R_p\{\boldsymbol{z}^L\}\\
&R_p\{\nabla_{\boldsymbol{u}^L} L\} = R_p\{\nabla_{\boldsymbol{z}^L} L\} \odot g'(\boldsymbol{u}^L) + \nabla_{\boldsymbol{z}^L} L \odot g''(\boldsymbol{u}^L) \odot R_p\{\boldsymbol{u}^L\}\\
&R_p\{\nabla_{\overline{W}^L} L\} = R_p\{\nabla_{\boldsymbol{u}^L} L\}(\overline{\boldsymbol{z}}^{L-1})^T + (\nabla_{\boldsymbol{u}^L} L) R_p\{\overline{\boldsymbol{z}}^{L-1}\}^T\\
&\textbf{для } l = L-1, L-2, \dots, 1:\\
&\quad R_p\{\nabla_{\boldsymbol{z}^l} L\} = (P^{l+1})^T \nabla_{\boldsymbol{u}^{l+1}} L + (W^{l+1})^T R_p\{\nabla_{\boldsymbol{u}^{l+1}} L\}\\
&\quad R_p\{\nabla_{\boldsymbol{u}^l} L\} = R_p\{\nabla_{\boldsymbol{z}^l} L\} \odot g'(\boldsymbol{u}^l) + \nabla_{\boldsymbol{z}^l} L \odot g''(\boldsymbol{u}^l) \odot R_p\{\boldsymbol{u}^l\}\\
&\quad R_p\{\nabla_{\overline{W}^l} L\} = R_p\{\nabla_{\boldsymbol{u}^l} L\}(\overline{\boldsymbol{z}}^{l-1})^T + (\nabla_{\boldsymbol{u}^l} L) R_p\{\overline{\boldsymbol{z}}^{l-1}\}^T
\end{aligned}
$$

3 Исследования

3.1 Вычисление $\nabla F(\boldsymbol{\theta})$ и $\nabla^2 F(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{p}$

В процессе исследований модели автокодировщика были проверены корректность вычислений градиента функции потерь, гессиана на вектор и Гаусс-Ньютоновской аппроксимации гессиана на вектор. Сравнение значений с помощью разностных аппроксимаций показывает следующие результаты:

- Градиент функции потерь считается с точностью до 10^{-14}: косинусное расстояние от численно высчитанного градиента до градиента, полученного автокодировщиком равняется 1

- Гессиан функции потерь умноженный на вектор считается с точностью до 10^{-14}: косинусное расстояние от численно высчитанного произведения до произведения, полученного автокодировщиком равняется 1

- Гаусс-Ньютоновская аппроксимация гессиана функции потерь умноженная на вектор считается не точно: косинусное расстояние от численно высчитанного произведения до произведения, полученного автокодировщиком равняется 0.6

3.2 Стохастические методы оптимизации

В качестве набора данных был взят MNIST. Данные были отнормированы на отрезок $[0, 1]$. Были исследованы три архитектуры автокодировщика:

- 3 слоя: вход - 2 нейрона - выход

- 5 слоев: вход - 200 - 2 - 200 - выход

- 7 слоев: вход - 400 - 200 - 2 - 200 - 400 - выход

Во всех архитектурах: центральный слой имеет линейную функцию активации, последний слой – сигмоиду, остальные – ReLU/LeakyReLU. Во всех слоях, кроме последнего используется сдвиг. Для каждого метода было сделано 33 итераций. В итоге получились следующие результаты:

Из графика 2 видно, что методы оптимизации ведут себя не стабильно. Это скорее всего связано с тем, что модель резко сжимает пространство (с 784 до 2), что приводит к неустойчивости.

В графике 3 видно, что в этой архитектуре методы оптимизации работают корректно. Также видно, что они работают примерно одинаково, но метод ADAM сходится быстрее.

В третьей архитектуре (Рис. 4) метод SGD повел себя странно. И начал существенно сходится только с 16 эпохи, но к концу теста все же сошелся к другим методам. В этом случае так же ADAM сходится быстрее и ведет себя устойчиво. Также была замечена тенденция, что при больших количествах слоев, метод SGD настраивается не сразу, а спустя несколько эпох.

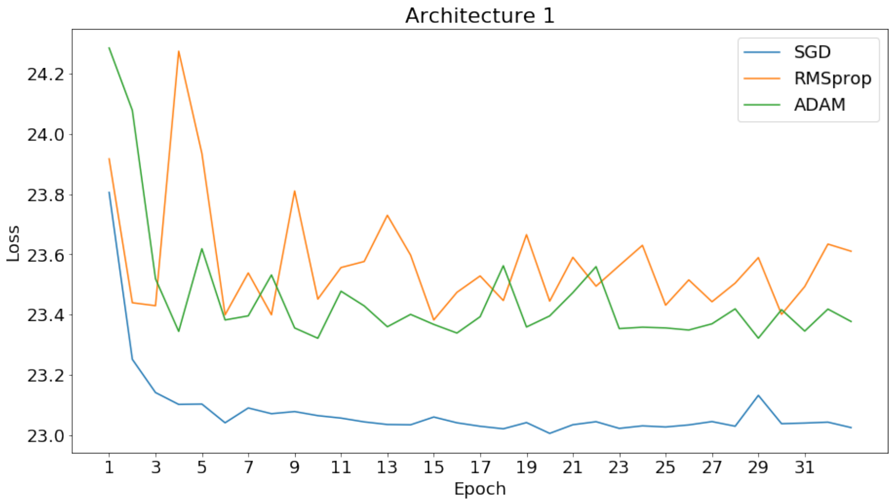


Рис. 2: График сходимости для первой архитектуры на тестовых данных

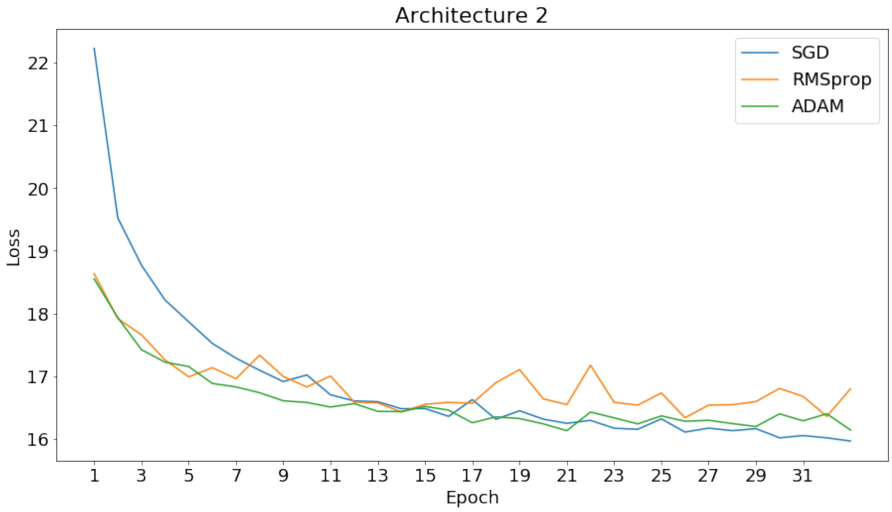


Рис. 3: График сходимости для второй архитектуры на тестовых данных

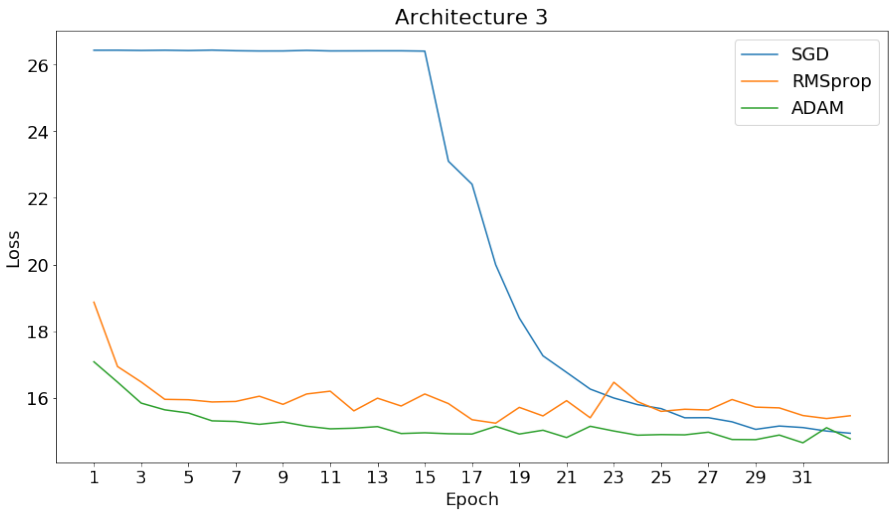
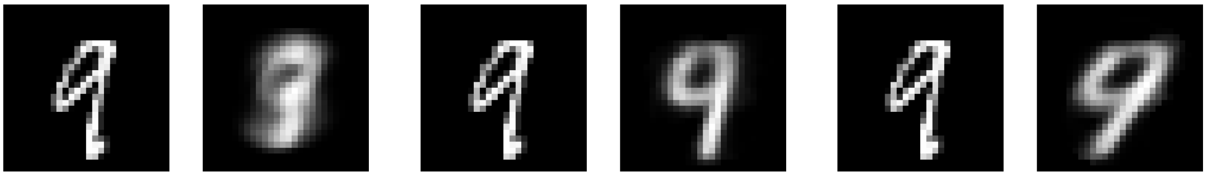


Рис. 4: График сходимости для третьей архитектуры на тестовых данных

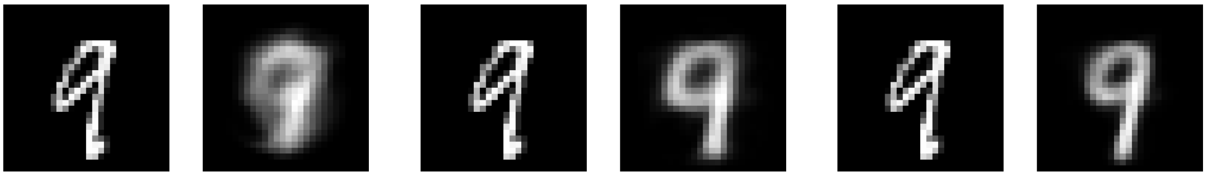
Таблица 1: Входы и выходы сетей

Архитектура 1 **Архитектура 2** **Архитектура 3**

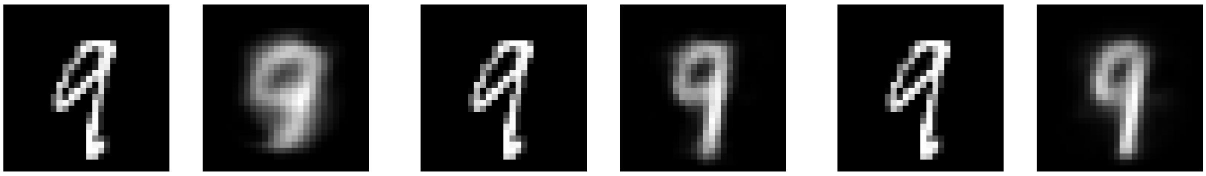
SGD



RMSprop



ADAM



В таблице 1 можно посмотреть как обучились автокодировщики. В случае с первой архитектурой выход является нечетким, т.к. методы не сошлись за отведенное количество итераций. Архитектуры 2 и 3 оптимизировались хорошо. Также видно, что методы SGD и ADAM сработали лучше для второй архитектуры, а ADAM и RMSprop – для третьей архитектуры. Учитывая все результаты, можно сделать вывод, что ADAM работает лучше других стохастических методов оптимизаций.

3.3 Подбор параметров

Подбор параметров велся обычной сеткой на 2ой архитектуре автокодировщика с использованием метода ADAM. Подбирались независимо длина шага и количество мини-батчей. В итоге получились следующие графики:

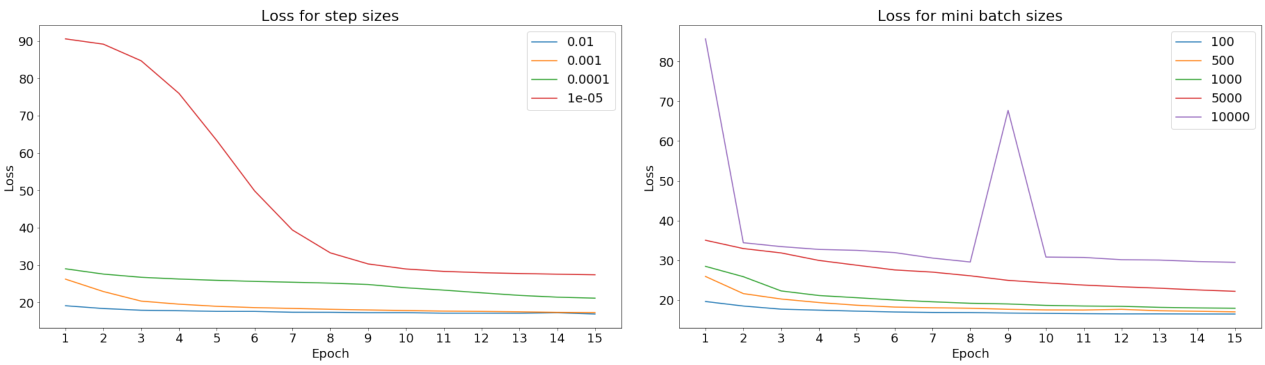


Рис. 5: График сходимости для разных длин шагов (слева) и для разных размеров мини-батчей (справа)

Из графиков можно понять, что длина шага 0.01 и размер батчей в 100 элементов являются оптимальными. Также видно, что чем больше количество батчей, тем медленнее сходитя метод. На 10000 батчей даже видно подскок в значении функции потерь. Похожая ситуация с шагом метода. Чем ближе шаг в 0.01, тем быстрее метод сходится. Более точный анализ значений не требуется, т.к. размер шага в маленькой окрестности 0.01 не особо повлияет на скорость сходимости, как и количество батчей.

3.4 Визуализация

Попробуем нарисовать выход среднего слоя в 2 нейрона и раскрасить их в цвета своих классов.

Рис. 6: Визуализация объектов MNIST

Четко видно, что объекты кластеризуются. Также можно заметить, что кластера 3 и 5 накладываются друг на друга. Это объяснятеся тем, что цифры похожи в написании. Большая часть остальных классов расположены отдельно, но где-то накладываются по той же причине.

4 Выводы

В итоге исследований были получены следующие результаты:

- Реализованы и опробованы разные архитектуры автокодировщиков

- Не стоит резко сжимать пространство
- Были реализованы три метода стохастической оптимизации: SGD, RMSprop, ADAM
- Метод ADAM работает в среднем лучше других опробованных методов
- Была получена проекция данных MNIST с 784-мерного пространства в двумерное.