**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**Московский авиационный институт  
(национальный исследовательский университет)**

Факультет прикладной математики и физики

Кафедра вычислительной математики и программирования

**МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ  
на тему:**

ОПТИМИЗАЦИЯ (РЕДУКЦИЯ) ПОЛНОСВЯЗНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

01.04.02 «Прикладная математика и информатика»

|  |
| --- |
| **Выполнил:**  магистрант  Рожлейс Иварс Андрисович |
|  |
| **Научный руководитель:**  ст. преп.  Аносова Наталья Павловна |
|  |
| **Рецензент:**  *звание, должность?*  *ФИО?* |

Москва, 2020

**Оглавление**

[Список условных обозначений 3](#_Toc39224659)

[Введение 4](#_Toc39224660)

[Часть 1. Долгая краткосрочная память. 8](#_Toc39224661)

[Часть 2. Сингулярное разложение. 14](#_Toc39224662)

[Часть 3. Обучение. 15](#_Toc39224663)

[Часть 4. Оптимизация. 20](#_Toc39224664)

[Список литературы 21](#_Toc39224665)

[Приложение 23](#_Toc39224666)

# Список условных обозначений

GRU – управляемый рекуррентный блок (англ. Gated Recurrent Unit, GRU)

LSTM – долгая краткосрочная память (англ. Long short-term memory, LSTM)

OBD – оптимальное повреждение мозга (англ. Optimal Brain Damage, OBS)

OBS – оптимальное прореживание мозга (англ. Optimal Brain Surgery, OBS)

ЯП – язык программирования

W – матрица весовых коэффициентов слоя

X – матрица входных значений

Y – матрица выходных значений

– состояние памяти ячейки

– скрытое состояние ячейки

# Введение

Процесс оптимизации заключается в последовательном улучшении какого-нибудь свойства объекта. Как правило в многопараметрических системах повышение качества одного параметра сопровождается понижением качества другого параметра. Оптимизация без потерь как правило редко достижима, поэтому часто приходится иметь дело с компромиссным решением – улучшая одно свойство неизбежно ухудшается другое.

Идея редукции или, иными словами, упрощения нейронной сети заключается в том, чтобы избавиться от нейронов, которые вносят минимальное воздействие на итоговый результат работы сети, и лишних связей между ними. Некоторые нейроны могут оказаться абсолютно бесполезными и не влиять на итоговый результат работы сети, некоторые могут оказывать лишь минимальное воздействие. [?] В соответствии с некоторым компромиссным соглашением между степенью упрощения и правдивостью результата работы сети можно отсечь те коэффициенты, которые вносят минимальный вклад в итоговый результат работы сети.

Процесс редукции нейронный сети можно описать как процесс оптимизации сети по критерию избыточности. Помимо процесса упрощения, который можно сказать работает по типу сверху-вниз, можно также отметить противоположный вариант оптимизации – наращивание сети, который работает по типу снизу-вверх. Нейроны и даже целые нейронные слои могут добавляться в сеть по мере требования. [?] В данной работе будет рассмотрен только процесс редукции нейронных сетей.

Нейроны в сети как правило группируются во взаимодействующие между собой нейронные слои, образуя таким образом различные топологии нейронных сетей. Так в зависимости от характера взаимодействия нейронов можно выделить полносвязные, свёрточные, рекуррентные и пр. сети. [?] В качестве математической модели взаимодействия между нейронами применяется матричная алгебра. Каждый нейрон имеет степень влияния или весовой коэффициент в пределах своего слоя. Весовые коэффициенты всех нейронов в пределах одного слоя образуют матрицу весовых коэффициентов этого слоя. Таким образом отсечение лишних нейронов происходит посредством преобразования матрицы весовых коэффициентов слоя.

Наивным алгоритмом редукции нейронной сети может считать алгоритм, при котором малые коэффициенты принимаются равными нулю тем самым исключая нейроны с малыми весами из обработки. С учётом возможной оптимизации алгоритмов работы с разреженными матрицами, такой метод вполне может повысить быстродействие сети. [?] Тем не менее как показывает практика кажущийся в первую очередь верным, такой способ может быть редко применён, так как малые весовые коэффициенты не всегда оказывают малое влияние на итоговый результат нейронной сети. [?]

Более верным методом можно считать метод оптимального прореживания нейронных сетей OBD (англ. Optimal Brain Damage) предложенный Яном ЛеКуном (Yann LeCun) в 1990 году. Данный метод использует лучший критерий чем абсолютные значения весовых коэффициентов, а именно учитывает чувствительность нейронов к вариациям весовых коэффициентов других нейронов. (1) Этот алгоритм говорит, что безопасно можно принять равными нулю весовые коэффициенты только тех нейронов чья чувствительность к вариациям остальных нейронов оказывается минимальной. Дальнейшее развитие этого метода получило название OBS (Optimal Brain Surgeon) и было предложено Бабаком Хассиби (Babak Hassibi) и Дэвидом Шторком (David G. Stork) в 1992 году. Этот алгоритм предполагает последовательное обновление значения одного из зафиксированных параметров в сторону минимизации функции потерь во время варьирования свободного параметра. (2)

Ещё одним методом оптимизации является метод упрощения сети с использованием штрафной функции. Идея метода заключается в том, чтобы организовать этап обучения сети таким образом, чтобы спровоцировать автоматическую минимизацию весовых коэффициентов маловажных нейронов тем самым по итогу обучения можно отбросить те нейроны чьё влияние на сеть минимальное. Иными словами, получаем автоматическое контрастирование сети ещё на этапе обучения. [?]

Выше представленные методы имеют ряд ограничений. Так, например, наивный метод является неточным и в ряде случаев приводит к ухудшению результатов работы нейронной сети. Метод OBS является довольно мощным инструментом для оптимизации нейронных связей, однако сложно применим в крупных системах в силу высоких требований к вычислительным мощностям машины. (3)

В последнее время всё чаще применяется метод сингулярного разложения (англ. Singular Value Decomposition, SVD) матриц весовых коэффициентов оптимизационное влияние которого в дальнейшем будет рассмотрено в данной работе.

Задача упрощения нейронных сетей имеет несколько важных следствий:

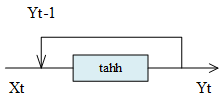
1. В силу того, что упрощённая сеть имеет меньше нейронов и меньше весовых коэффициентов, то, как следствие нужно производить меньше вычислений чтобы получить результат. Таким образом повышается быстродействие сети.
2. Слабые нейроны оказывают меньший эффект воздействия на итоговый результат сети, однако вносят определённый уровень шума. Процесс контрастирования сети позволяет в определённой степени снизить шумовое воздействие слабых нейронов на результат работы сети. Таким образом выход сети освобождается от шумового воздействия.
3. Процесс упрощения сети подразумевает собой избавление от некоторых нейронов без существенной потери качества сети, что аналогично процессу сжатия информации с потерей данных. Итоговый размер сети становится меньше. В определённых ситуациях уменьшение объёма данных необходимых для хранения матриц весовых коэффициентов может оказаться полезным если, к примеру сеть реализуется на машине с небольшим объёмом памяти.
4. Прореживание нейронной сети также благоприятно сказывается на её классифицирующую способность. [?]

В этой части были рассмотрены некоторые методы оптимизации весовых коэффициентов нейронных сетей. Были рассмотрены полезные следствия оптимизации весовых коэффициентов. В следующей части будут рассмотрены две архитектуры рекуррентных нейронных сетей LSTM и GRU.

# Часть 1. Долгая краткосрочная память.

Долгая краткосрочная память (англ. Long short-term memory, LSTM) это архитектурная разновидность рекуррентных нейронных сетей, которая была предложена Зеппом Хохрайтером и Юргеном Шмидхубером в 1997 году. (4) LSTM это архитектурное решение проектирования рекуррентных сетей, в состав которых входят несколько полносвязнных слоёв. Управляемый рекуррентный блок (англ. Gated Recurrent Network, GRU) ещё одна схожая архитектура рекуррентных сетей, предложенная Кёнхёном Тё в 2014 году. (5) По свойствам сеть GRU схожа с LSTM, однако имеет ряд допущений что в целом случаях позволяет ей быть более производительной взамен точности. Почему LSTM и GRU называют ячейками.

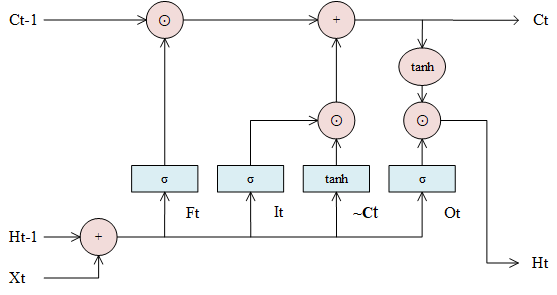
В основе работы рекуррентных нейронных сетей лежит принцип обратной связи, когда результат работы сети зависит от предыдущего результата. Ниже представлена схематическая диаграмма простой рекуррентной сети. Прямоугольником показан один слой с функцией гиперболического тангенса в качестве активационной функции. Стрелками показано направление потока данных.



Как видно из рисунка выходное значение Y на шаге t одновременно зависит как от входного значения X на этом же шаге t, так и от выходного значения Y посчитанного на предыдущем шаге t - 1. Обратная связь добавляет рекуррентным сетям временную зависимость и как следствие, если свёрточные сети хорошо обрабатывают информацию, распределённую в пространственной области, то рекуррентные сети в свою очередь хорошо справляются с информацией, распределённой во временной области.

Например, смысл абзаца складывается из отдельных предложений, смысл каждого из которых складывается из отдельных слов. Или для того, чтобы продолжить последовательность нужно помнить значения её предыдущих членов. Здесь имеется временная зависимость. Так нельзя определить смысл предложения, не прочитав последовательно и не запомнив все слова как нельзя предсказать следующий член последовательности, не предсказав и не запомнив все предыдущие её члены. В обоих задачах появляется необходимость наличия контекста. Иными словами говоря, сеть приобретает состояние, которое зависит от результатов работы на предыдущих шагах и динамически изменяется от шага к шагу. Подобные состояния имеют LSTM и GRU архитектуры.

Ниже представлена схематическая диаграмма классической LSTM архитектуры. (6) Прямоугольники по-прежнему представляют отдельные слои. Окружности представляют поэлементные операции. Символ ⊙ обозначает произведение Адамара (покомпонентное произведение).



Как видно исходя из этой диаграммы LSTM сеть имеет четыре полносвязных слоя, три из которых имеют сигмоидальную активационную функцию и один слой имеет активационную функцию гиперболического тангенса. Также на диаграмме виды два потока состояний: память блока и скрытое состояние .

Слои LSTM сети по сути являются фильтрами, так как в зависимости от весовых коэффициентов производят выборочное преобразование элементов. Каждый фильтр имеет своё предназначение и на диаграмме они обозначены буквами F, I, C и O. Первый фильтр забывания F (англ. forget) определяет какую информацию нужно забыть или удалить из памяти блока Ct. Пара фильтров входных данных I (англ. input) и кандидатов C (англ. candidate) наоборот определяют какую новую информацию нужно добавить в состояние памяти Ct. Наконец фильтр O (англ. output) участвует при формировании выходного значения. (6)

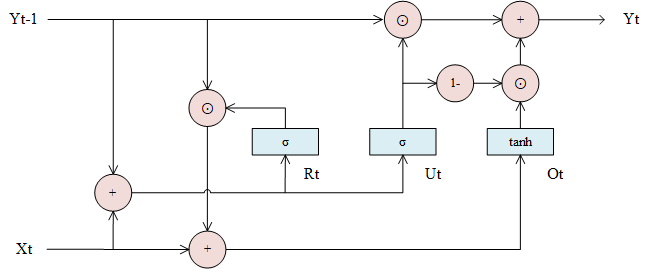
Эти процессы можно описать математически. Для фильтров эти выражения принимают следующий вид:

Для скрытых состояний и получаем выражения:

Можно рассмотреть предельный случай, когда и . В этом случае наблюдается режим устойчивого сохранения информации, который можно интерпретировать как «ничего не забывать» () и «новых данных не добавлять» (). (6)

Так как область значений сигмоиды и гиперболического тангенса лежат в интервалах и соответственно, то на выходе скрытого состояния сети добавляется ещё одна матрица с весовыми коэффициентами, обеспечивающая масштабирование результата. Активационная функция на данном этапе более не требуется:

В данной работе будет использоваться архитектура LSTM тем не менее также полезно рассмотреть архитектуру GRU. Как уже было сказано выше архитектура GRU схожа с архитектурным решением LSTM сети. Ниже представлена диаграмма архитектуры GRU. Все условные обозначения сохранены из предыдущих диаграмм.



В отличие от сетей LSTM сети GRU имеют всего три фильтра, а также только одно скрытое состояние . Вследствие таких упрощений сети GRU в целом работают быстрее чем LSTM, а также демонстрируют схожую эффективность. Тем не менее сети LSTM остаются более репрезентативными. (7)

Как и в предыдущем случае фильтры обозначаются буквами , и , и представляют собой фильтр сброса (англ. reset), фильтр обновления (англ. update) и фильтр кандидатов (англ. hidden candidate). Эти фильтры также можно описать математически:

Фильтр кандидатов имеет немного более сложную структуру из-за рекуррентной зависимости от фильтра :

В итоге уравнение для скрытого состояния выражается следующим образом:

В предельном случае, когда значение фильтра близко к 1 сеть сохраняет своё предыдущее состояние. Когда значение фильтра близко к 0 предыдущее состояние замещается новым. Здесь видна разница по сравнению с LSTM архитектурой, которой требуется два фильтра для управления скрытым состоянием.

Как и в случае с LSTM архитектурой, аналогичным способом вводится последний слой на выходе сети для обеспечения масштабирования результата:

Напиши в чём преимущество использовать одну архитектуру вместо другой (LSTM vs GRU). Напиши, что в этой работе исследуется именно LSTM архитектура. Причины выбора именно LSTM можно не указывать.

В конце думаю нужно добавить, что умеет LSTM ячейка. Например, предсказывать временные ряди и т.д.

В данной части были рассмотрены две архитектуры рекуррентных нейронных сетей LSTM и GRU, их различия и сходства. Было рассмотрено математическое описание происходящих процессов. В следующей части будет рассмотрено сингулярное разложение как инструмент редукции матриц весовых коэффициентов.

# Часть 2. Сингулярное разложение.

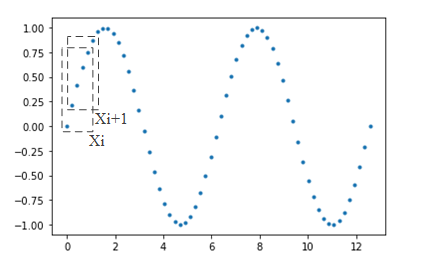
Сингулярное разложение (англ. Singular Value Decomposition, SVD) применяется…

Где ещё используется сингулярное разложение? В частности, используется при сжатии изображения.

# Часть 3. Обучение.

В качестве языка программирования был выбран язык программирования Python с библиотекой TensorFlow в качестве библиотеки машинного обучения. В данной работе используется Python версии 3.7.6 и библиотека TensorFlow версии 1.15.2. В работе была использована собственная реализация LSTM сети (6) без использования заранее разработанных шаблонов, которые предоставляет, например библиотека Keras. В качестве проверки, модель была обучена на нескольких синтезированных последовательностях.

Обучение предсказания последовательностей сводится к тренировке сети таким образом чтобы для каждой входной последовательности, состоящей из дискрет сеть, выдавала предсказанную выходную последовательность также состоящую из дискрет. Количество дискрет из которых состоит такая последовательность далее будем называть размером этой последовательности. На рисунке 3.1 представлен график с группами точек для тренировки сети на первом шаге, когда при :



**Рис. 3.1.** Выбор входных и выходных данных для тренировки сети.

На данном графике выбирается группа из дискрет. Эту группу определим как входное значение LSTM сети и назовём её . Смещённую ровно на одну дискрету группу будем считать выходным значением сети . Функцию потерь в свою очередь определим как , то есть минимизирующую разницу между входным и выходным значениями. При достижении необходимого значения функции потерь алгоритм обучения переходит к следующему набору дискрет на следующем шаге. Для простоты допустим, что все точки на графике являются тренировочными данными. Тогда алгоритм обучения продолжается до тех пор, пока не будет достигнут конец тренировочных данных.

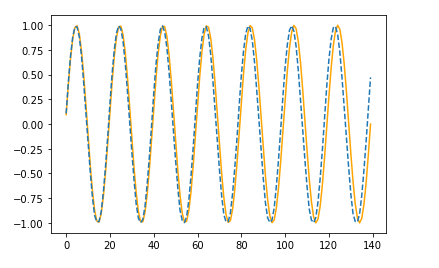
Процесс обучения организован таким образом что имеется два цикла: внешний и внутренний. Внешний цикл задаёт количество эпох и задаёт количество проходов по всему тренировочному набору данных. Внутренний цикл задаёт количество повторений обучения одной последовательности. Оба значения являются макропараметрами и могут быть использованы для тонкой настройки процесса обучения. Фрагмент алгоритма обучения, представлен ниже:

|  |
| --- |
| for e ← 0 to num\_epochs  ClearHiddenState()  for i ← 0 to num\_examples  for r ← 0 to num\_repeat  MinimizeLoss(x\_train[i], y\_train[i])  UpdateHiddenState() |

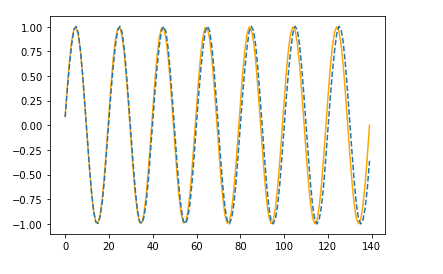
Первым тестом для проверки работоспособности модели было обучение сети предсказывать последовательность синусоиды. Т.е. уравнение вида:

Обучение сети производилось на 3 периодах синусоиды, а тестирование предсказания проводилось на 7 периодах синусоиды. Размер последовательности оставался неизменным и составил дискрет. Была проведена серия экспериментов с различным набором макропараметров. В качестве оптимизационного алгоритма были использован алгоритмы Adam и Adagrad которые предоставляются библиотекой Keras входящей в состав TensorFlow.

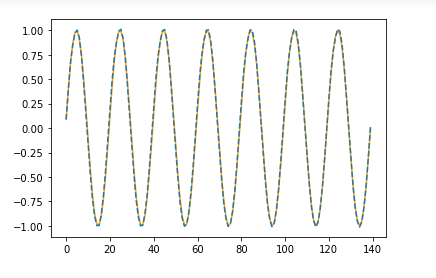
Так на рисунках 3.2, 3.3 и 3.4 представлены результаты предсказания сети после 80, 60 и 40 эпох обучения соответственно.



**Рис. 3.2.** Предсказание сети после 80 эпох обучения. MSE = ?



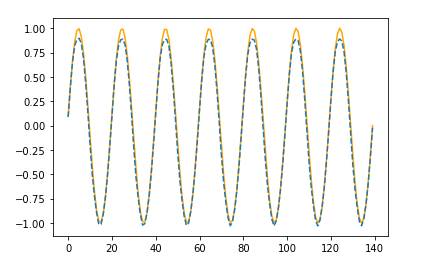
**Рис. 3.3.** Предсказание сети после 60 эпох обучения. MSE = ?



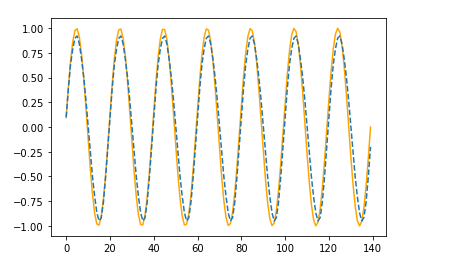
**Рис. 3.4.** Предсказание сети после 40 эпох обучения. MSE = 0,001.

Наилучший результат предсказания наблюдается после 40 эпох обучения. Вероятно, в следствие эффекта переобучения после 60 и 80 эпох обучения сеть не смогла выделить ключевые особенности последовательности и тем самым результат предсказания становится хуже.

На рисунках 3.5 и 3.6 в свою очередь представлены результаты предсказания недообученной сети, которые характеризуются довольно низкой точностью предсказания.



**Рис. 3.5.** Предсказание сети после 30 эпох обучения. MSE = ?



**Рис. 3.6.** Предсказание сети после 20 эпох обучения. MSE = ?

В приложении на таблице 3.7 представлена краткая статистика результатов обучения сети при различных значениях макропараметров. Также стоит отметить, что результаты обучения и качество предсказания могут сильно отличается при последующих запусках алгоритма обучения поэтому для достижения оптимального варианта часто приходится запускать алгоритм обучения повторно.

Следующим тестом является обучение сети предсказывать уравнение вида:

Расхождение в фазах между гребнями синусоид может быть связано с выбором недостаточно точного значения размера последовательности?

# Часть 4. Оптимизация.

А

# Список литературы

1. **Y., LeCun.** Optimal Brain Damage. *Yann LeCun's home page.* [В Интернете] 1990 г. http://yann.lecun.com/exdb/publis/pdf/lecun-90b.pdf.

2. *Second order derivatives for network pruning: Optimal Brain Surgeon.* **B., Hassibi и D., Stork.** Stanford : б.н., 1992 г.

3. *Optimal Brain Surgeon: Extensions and performance comparisons.* **B., Hassibi, и др.** Stanford : б.н., 1993 г.

4. *Long short-term memory.* **S., Hochreiter и J., Schmidhuber.** б.м. : Neural Computaion, 1997 г.

5. **K., Cho, и др.** Learning Phrase Representations using RNN Encoder-Decoder for Statistical Machine Translation. *arxiv.* [В Интернете] 2014 г. https://arxiv.org/abs/1406.1078.

6. **A., Zhang, и др.** *Dive into Deep Learning.* [В Интернете] https://d2l.ai/.

7. **G., Weiss, Y., Goldberg и E., Yahav.** On the Practical Computational Power of Finite Precision RNNs for Language Recognition. *arxiv.* [В Интернете] https://arxiv.org/abs/1805.04908.

8. **Ф., Уоссермен.** *Нейрокомпьютерная техника: Теория и практика.* 1992.

9. **N., Shukla.** *Machine Learning with TensorFlow.* б.м. : Manning, 2017.

10. **T., Hope, Y., Resheff и I., Lieder.** *Learning TensorFlow.* Sebastopol : O’Reilly, 2017. 978-1-491-97851-1.

11. **С., Николенко, А., Кадурин и Е., Архангельская.** *Глубокое обучение.* Санкт-Петербург : Питер, 2018. 978-5-496-02536-2.

12. **Р., Тарик.** *Создаём нейронную сеть.* Санкт-Петербург : Диалектика, 2017. 978-5-9909445-7-2.

13. **С., Хайкин.** *Нейронные сети. Полный курс.* Москва : Вильямс, 2006. 5-8459-0890-6.

14. **C., Zhang, и др.** Understanding Deep Learning Requires Rethinking. *arxiv.* [В Интернете] 2016 г. https://arxiv.org/abs/1611.03530.

15. **Дж., Райс.** *Матричные вычисления и математическое обеспечение.* Москва : Мир, 1984.

16. **Р., Хорн и Ч., Джонсон.** *Матричный анализ.* Москва : Мир, 1989. 5-03-001042-4.

17. **B., Hassibi, D., Stork и G., Wolff.** *Optimal Brain Surgeon and General Network Pruning.* б.м. : IEEE International Conference on Neural Networks, 1993. 0-7803-0999-5.

# Приложение

В таблице используются условные обозначения для сокращения названий методов минимизирующих ошибку. Так GD соответствует методу градиентного спуска (англ. Gradient Descent), AG соответствует методу Adagrad, AM соответствует методу Adam, AD соответствует методу Adadelta.

В таблице также представлены два типа ошибок: MSE и MAE. Среднеквадратическая ошибка MSE (англ. Mean Squared Error, MSE) рассчитывается по формуле:

Средняя абсолютная ошибка MAE (англ. Mean Absolute Error, MAE) рассчитывается по формуле:

Опиши почему MAE может быть лучше, чем MSE или наоборот, что они показывают?

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Эпох | Повторов |  |  | Optimizer | α | t, сек. | MAE | MSE |
| 1 | 40 | 20 | 7 | 7 | AM | 0.001 | 54.9 | 0.132 | 0.029 |
| 2 | 40 | 20 | 7 | 7 | AM | 0.001 | 52.7 | 0.116 | 0.019 |
| 3 | 40 | 20 | 7 | 7 | AG | 0.4 | 39.7 | 0.091 | 0.015 |
| 4 | 40 | 20 | 7 | 7 | AG | 0.4 | 35.3 | 0.199 | 0.063 |
| 5 | 40 | 20 | 5 | 5 | AG | 0.4 | 28.2 | 0.024 | 0.001 |
| 6 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 7 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 8 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 9 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 10 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 11 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 12 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |

В следующей таблице 3.2 представлены результаты обучения сети на данных по количеству пассажиров, совершающих авиаперелёты в течении месяца.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Эпох | Повторов |  |  | Optimizer | α | t, сек. | MAE | MSE |
| 1 | 800 | 1 | 12 | 15 | AG | 0.5 | 113.8 | 0.101 | 0.017 |
| 2 | 800 | 1 | 12 | 15 | AG | 0.5 | 163.7 | 0.079 | 0.011 |
| 3 | 500 | 2 | 10 | 15 | AG | 0.5 | 88.3 | 0.115 | 0.019 |
| 4 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 5 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 6 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 7 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 8 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 9 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 10 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 11 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 12 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |

Копия данной работы, а также все исходные материалы по данной работе могут быть загружены по адресу <https://github.com/sven4500/masters-diploma>.