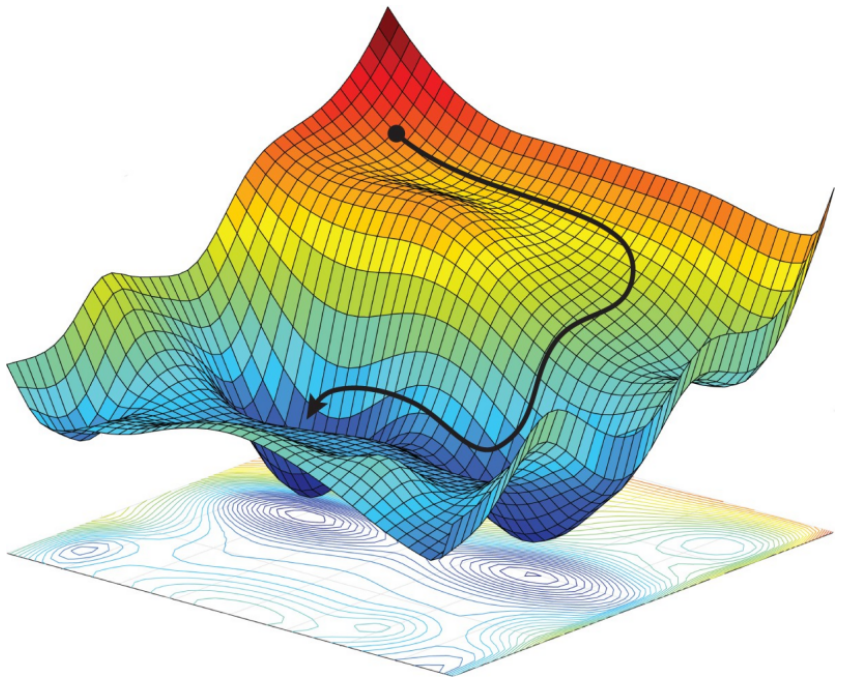
Особенности настройки глубоких нейросетей

Виктор Китов
victorkitov.github.io



Мотивация для глубокого обучения

- Машинное обучение опирается на хорошие признаки.
  - приходится подбирать вручную
- Глубокое обучение - использование нейросетей с большим числом слоев.
- Нейроны глубоких слоев могут сами выучивать сложные признаки.
  - важно для сложных областей, таких как изображения, видео, звук и т.д.
  - изображения: извлекаем границы, углы, простейшие фигуры, объекты (глаза, брови), определяем класс (например, человека)
  - работает лучше, чем вручную подобранные признаки
    - при достаточной обучающей выборке
- Общее число нейронов глубокой сети может быть меньше за счет переиспользования промежуточных нейронов (признаков)

Содержание

Расширение обучающей выборки

- Модели глубокого обучения имеют много параметров.
  - полносвязный слой $A \to B$ нейронов содержит AB связей!
- Методы борьбы с переобучением:
  - предобучить начальные слои по большим доступным выборкам схожей задачи
    - например, по ImageNet (>14 миллионов размеченных объектов) для изображений
    - domain adaptation: адаптация модели одной доменной области к другой
  - использовать расширение (augmentation) обучающей выборки: $(x, y) \to \{(\phi_1(x), y), (\phi_2(x), y), (\phi_3(x), y), ...\}$
    - $\phi_1, \phi_2, \phi_3, ...$ - инвариантные к отклику преобразования
    - например, изменения яркости/контрастности, поворот, обрезка.

Регуляризация

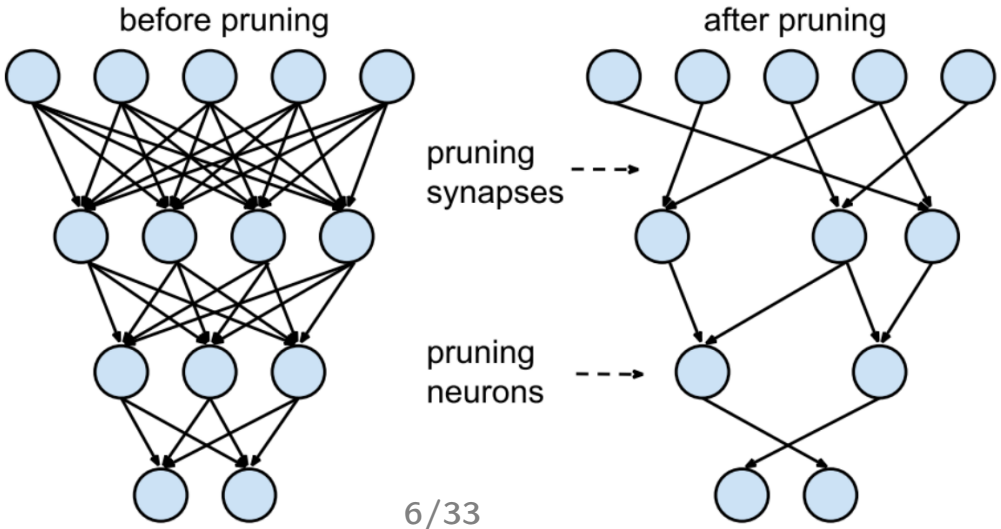
- Бороться с переобучением можно упрощая модель:
  - использовать меньше нейронов/связей
  - задавать ограничения на веса при настройке
    - пример: свертка, где веса общие и связи только для близких нейронов
  - использовать регуляризацию
    - L_1, L_2 (можно со своим весом на каждом слое)
    - ранняя остановка (early stopping)
    - DropOut

Уменьшение вычислительной сложности

Для уменьшения вычислительной сложности:

- можно обучить большую сеть, а потом ее прореживать:
  - отбросить связи с низким весом
  - отбросить связи, слабо влияющие на ф-цию потерь (optimal brain damage)
  - отбросить нейроны с низкими входными весами
  - отбросить нейроны со слабыми активациями

Прореживание связей и нейронов



Optimal brain damage: связи, слабо влияющие на $L(w)$

$$L(w) - L(w^*) = \nabla L(w^*)^T (w - w^*)$$
$$+\frac{1}{2}(w - w^*)^T \nabla^2 L(w^*)(w - w^*) + O\left(\|w - w^*\|^3\right)$$
$$\approx \frac{1}{2}(w - w^*)^T \nabla^2 L(w^*)(w - w^*) \approx \frac{1}{2}\sum_i \frac{\partial L(w^*)}{\partial w_i^2}(w_i - w_i^*)^2$$

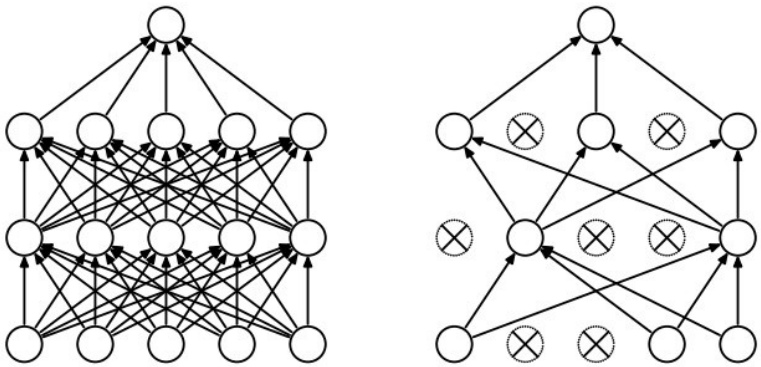
Приближения:

- $O\left(\|w - w^*\|^3\right) \approx 0$
- в оптимуме $\nabla L(w^*) = 0$
- $\nabla^2 L(w^*)$ диагональна-игнорируем смешанные производные

Алгоритм optimal brain damage:

- повторять нужно число раз
  - обучить нейросеть
  - отбросить связи с $\frac{\partial L(w^*)}{\partial w_i^2}(0 - w_i^*)^2 < threshold$

DropOut: обучение



(a) Standard Neural Net (b) After applying dropout.

- Для каждого минибатча каждый нейрон, кроме выходных и входных отбрасывается с вероятностью $(1-p)$ и оставляется с вероятностью p.
  - независимо для каждого нейрона
- Это уменьшает переобучение, препятствуя со-настройке нейронов
- По сути, мы учим ансамбль прореженных моделей.
- В среднем нейрон получает на вход $\sum_i (pw_i x_i + (1-p)w_i 0) = \sum_i pw_i x_i$.

DropOut: применение

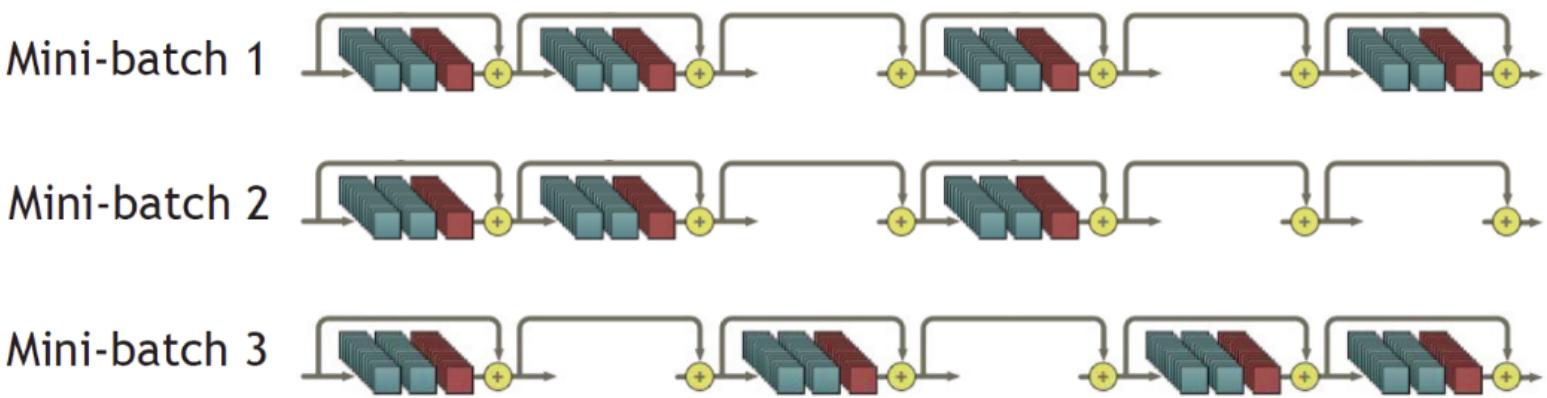
- Применение модели: оставляются все нейроны.
- Для компенсации изменений, выход каждого нейрона домножается на p.
  - для уменьшения вычислений можно:
    - обучение: выход x_i/p, когда x_i оставлен.
    - прогноз: выход x_i без изменений.

Стохастическая глубина в сетях[1]

Deep Networks with Stochastic Depth - используется случайное отбрасывание слоёв в классификации изображений.

Полная архитектура (используется на тесте):

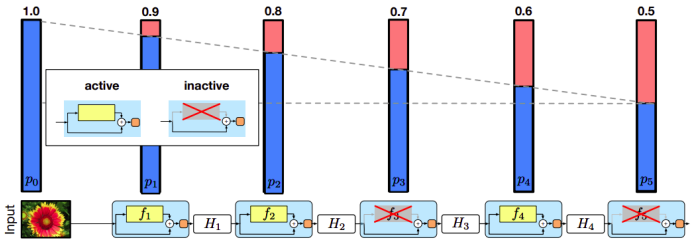
Обучение: отбрасывается преобразования блока l с вероятностью $1 - p_l$



[1] https://arxiv.org/abs/1603.09382

Stochastic Depth

Рекомендуемая зависимость вероятности оставления блока p_l от слоя l:



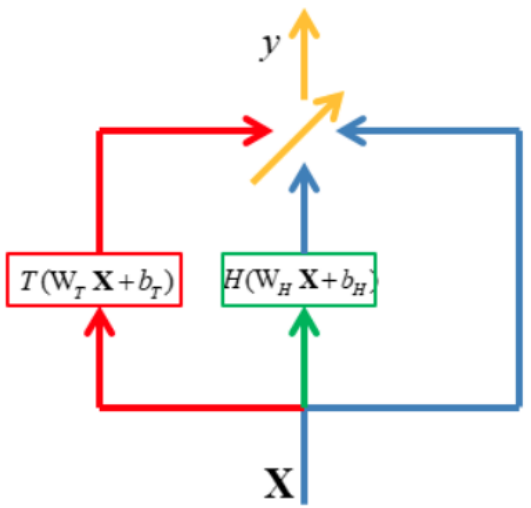
- Мотивация p_l: более ранние слои извлекают более базовые признаки, используемые всеми последующими слоями.
- Применение: используются сеть со всеми блоками, домноженными на p_l.
- Мотивация архитектуры:
  - быстрее обучение (менее глубокая сеть на каждом минибатче)
  - борьба с переобучением (когда всё зависит от взаимосвязей между отдельными блоками)
  - по сути обучается ансамбль моделей разной глубины.

Highway networks[2] - идея из LSTM

- Для эффективной настройки многослойных сетей в highway neworks предлагается использовать блоки:

$$y = H(x, W_H) \cdot T(x, W_T) + x \cdot (1 - T(x, W_T))$$

- Вариант transform gate: $T(x, W_T) = \sigma(W_T x + b_T)$.
  - обобщение: $(1 - T(x, W_T)) \longrightarrow$ carry gate $C(x, W_C)$.



[2] https://arxiv.org/pdf/1505.00387.pdf

Highway networks

- Инициализация: $b_T = -1, -2, -3$, чтобы на начальных итерациях $y \approx x$
  - слой $H(x, W_H)$ вводится постепенно, только если он действительно нужен
- Highway networks: быстрее настройка, лучше найденный оптимум.

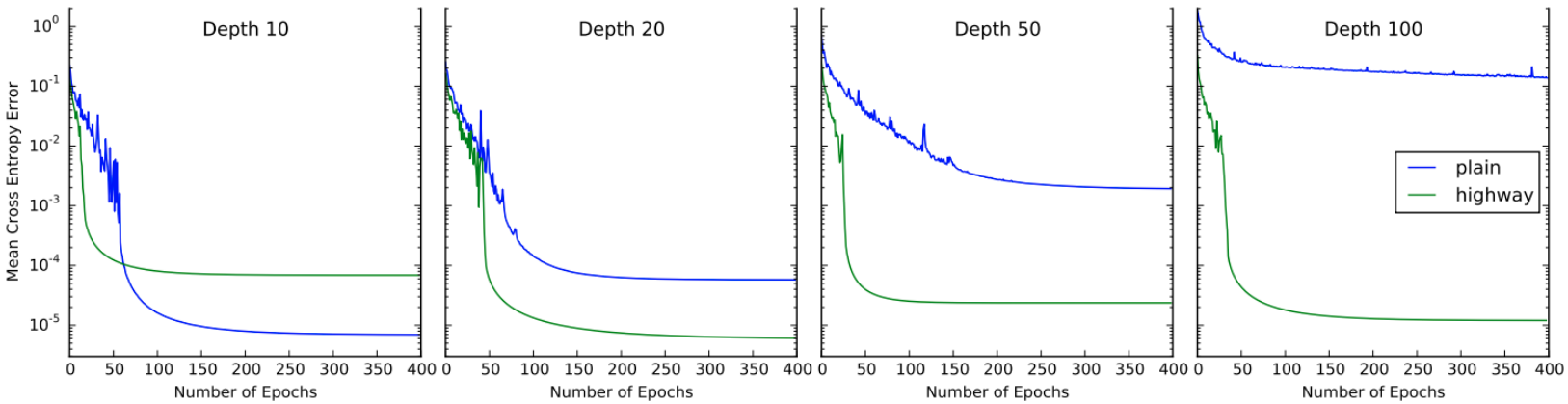


Figure 1. Comparison of optimization of plain networks and highway networks of various depths. All networks were optimized using SGD with momentum. The curves shown are for the best hyperparameter settings obtained for each configuration using a random search. Plain networks become much harder to optimize with increasing depth, while highway networks with up to 100 layers can still be optimized well.

Содержание

Особенности оптимизации нейросетей

- Зависимость $\widehat{y}(x)$ в общем случае невыпукла.
- $\mathcal{L}(\widehat{y}, y)$ - невыпукла $=>$ много локальных минимумов.
- На найденный минимум влияют:
  - начальное приближение
  - объекты минибатчей
  - метод обучения и динамика ε_t
- Можно настраивать разными способами, а потом
  - выбрать наилучшее решение по валидации
  - усреднить несколько решений (ансамбль)

Базовые градиентные методы

- Batch gradient descent: градиентный спуск по всем объектам выборки
  - не применим для динамических данных

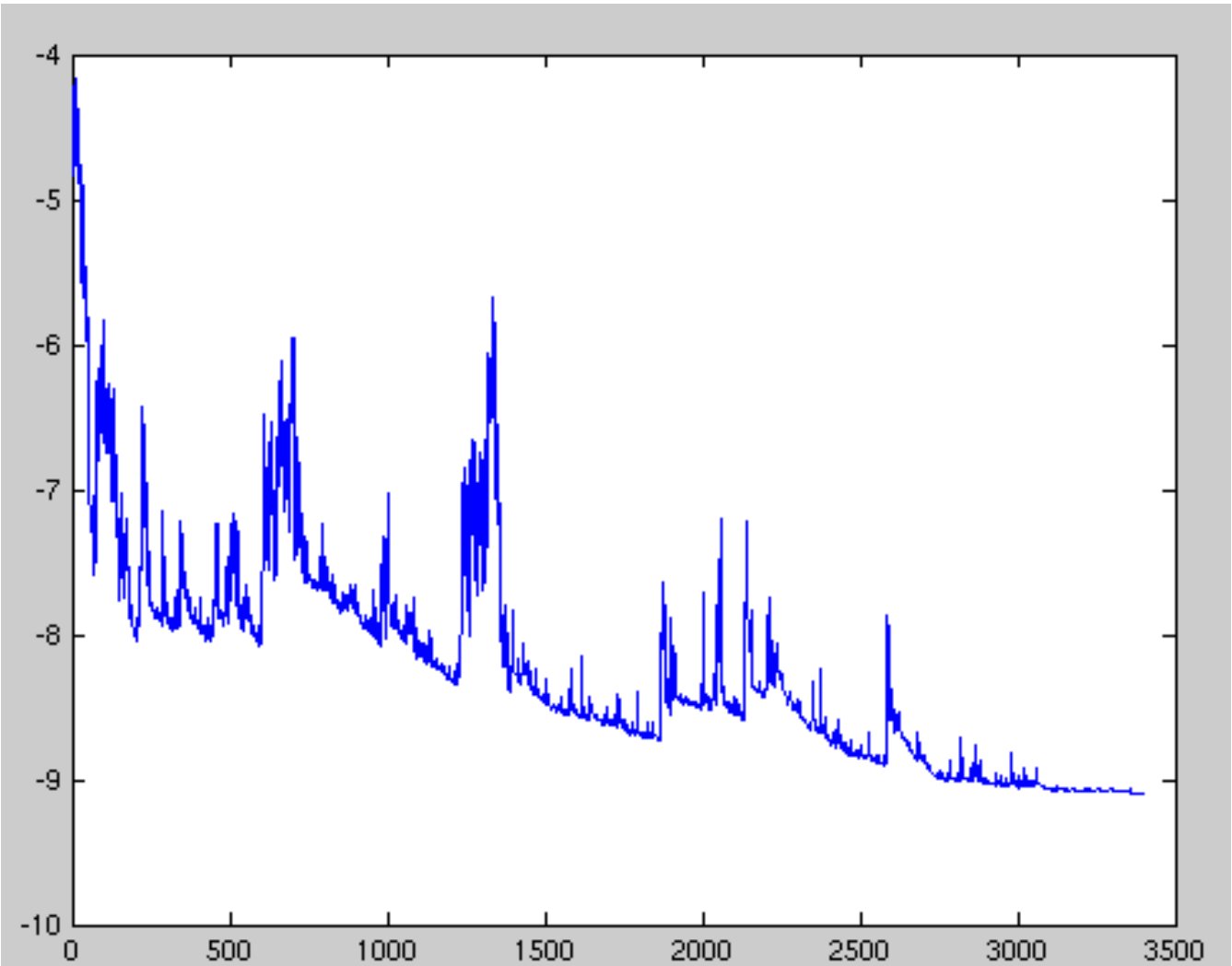
$$w_{t+1} := w_t - \eta \nabla_w L(w; X, Y)$$

- Stochastic gradient descent: стохастический спуск с сэмплированием по 1 объекту

$$w_{t+1} := w_t - \eta \nabla L_w(w; x_i, y_i)$$

  - не производит лишних вычислений по повторяющимся объектам
  - неустойчивая оценка градиента

Пример сходимости SGD



Базовые градиентные методы

- Minibatch gradient descent: стохастический спуск с сэмплированием по набору объектов

$$w_{t+1} := w_t - \eta \nabla_w L(w; x_{i+1:i+K}, y_{i+1:i+K})$$

- точнее оценки градиента
  - быстрее: параллелизация вычислений по минибатчу
- Сложности:
  - нужен выбор динамики убывания η
  - одинаковый шаг для разных весов
    - логичнее веса брать меньше, где ф-ция резко меняется и отвечающие редко встречающимся признакам.
  - застревание в локальных оптимумах и точках перегиба

Модификации инерции и Нестерова

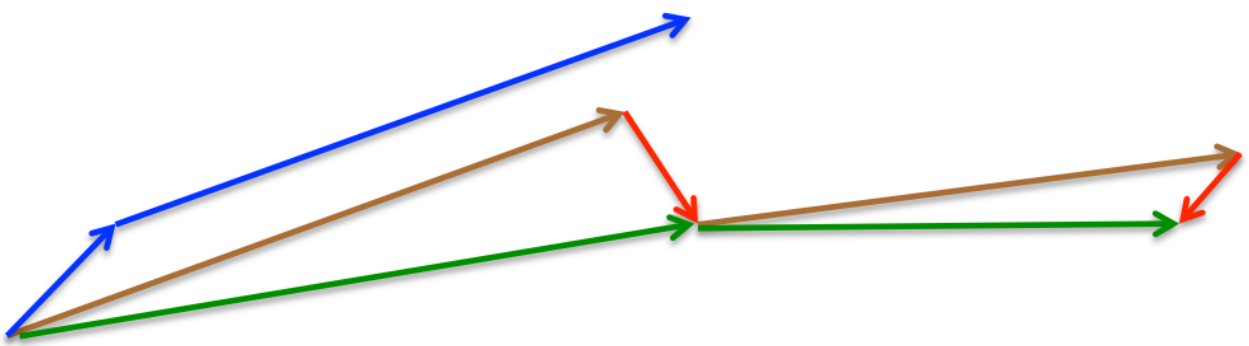
- Momentum

$$v_t := \gamma v_{t-1} + \eta \nabla_w L(w)$$
$$w_{t+1} := w_t - v_t$$

  - аналогия с мячом, скатывающимся с горы

- Nesterov Accelerated Gradient (Nesterov Momentum)

$$v_t := \gamma v_{t-1} + \eta \nabla_w L(w - \gamma v_{t-1})$$
$$w_{t+1} := w_t - v_t$$



Модификации SGD

- Обозначим $g_t = \nabla_w L(w_t)$; $w, g_t \in \mathbb{R}^K$. Операции над векторами поэлементные.
- AdaGrad ($\varepsilon = 10^{-6}$)

$$G_t := G_t + g_t^2$$
$$w_{t+1} := w_t - \frac{\eta}{\sqrt{G_t + \varepsilon}} \odot g_t$$

- RMSprop

$$E\left[g^2\right]_t := \gamma E\left[g^2\right]_{t-1} + (1-\gamma) g_t^2$$
$$w_{t+1} := w_t - \frac{\eta}{\sqrt{E\left[g^2\right]_t + \varepsilon}} \odot g_t$$

Модификации SGD

- Adam=RMSprop+инерция
  ($\beta_1 = 0.9,\ \beta_2 = 0.999,\ \varepsilon = 10^{-8}$):

$$m_t := \beta_1 m_{t-1} + (1-\beta_1)\, g_1$$
$$v_t := \beta_2 v_{t-1} + (1-\beta_2)\, g_1^2$$
$$\widehat{m}_t = \frac{m_t}{1-\beta_1^t}$$
$$\widehat{v}_t = \frac{v_t}{1-\beta_2^t}$$
$$w_{t+1} := w_t - \frac{\eta}{\sqrt{\widehat{v}_t} + \varepsilon} \odot \widehat{m}_t$$

- Nadam: Adam+Nesterov Accelerated Gradient.

Модификации SGD

- AMSGrad: позволяет помнить историю без экспоненциального забывания.
  - при этом перенормировка m_t, v_t не используется.

$$
\begin{aligned}
m_t &:= \beta_1 m_{t-1} + (1-\beta_1) g_1 \\
v_t &:= \beta_2 v_{t-1} + (1-\beta_2) g_1^2 \\
\widehat{v}_t &= \max(\widehat{v}_{t-1}, v_t) \\
w_{t+1} &:= w_t - \frac{\eta}{\sqrt{\widehat{v}_t} + \varepsilon} \odot \widehat{m}_t
\end{aligned}
$$

Дополнительные улучшения[3]

- Ранняя остановка (early stopping) - борьба с переобучением
- Добавление шума к градиенту - находим оптимум с большей окрестностью:

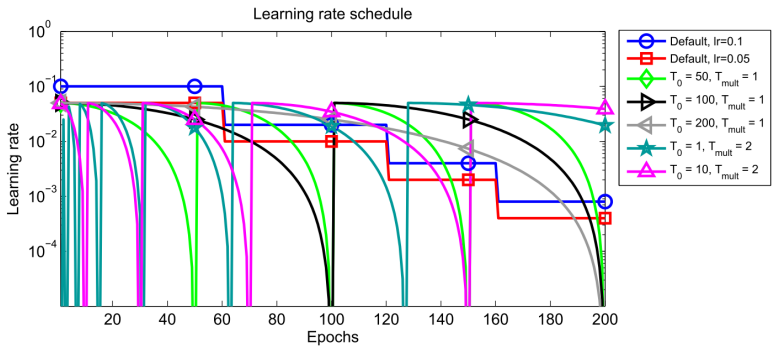
$$g_t := g_t + \mathcal{N}(0, \sigma_t^2)$$
$$\sigma_t^2 = \frac{\eta}{(1+t)^\gamma}$$

- Обучение по расписанию (curriculum learning)
  - сначала обучаемся на простых объектах, потом на сложных
- Параллелизация вычислений SGD.
- Ускорение обучения: batch normalization.

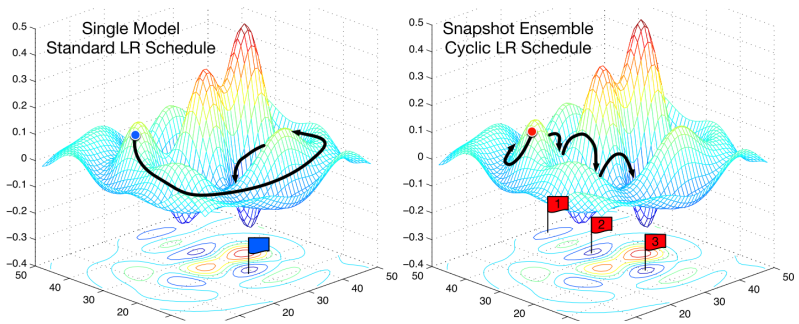
[3]Больше информации: https://ruder.io/deep-learning-optimization-2017/

Дополнительные улучшения

- LR schedule - закон изменения η. Подобный закон, приводит к к оптимуму с большей окрестностью:

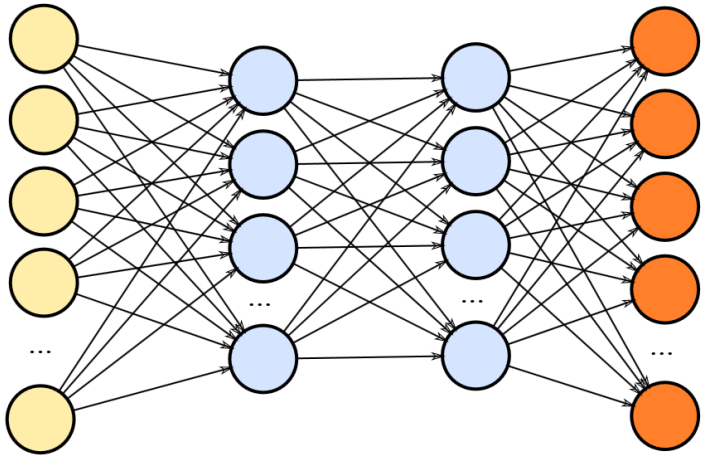


- Перед каждым увеличением η получили некоторую модель=>можем модели комбинировать в композицию:



Содержание

Перенормировка активаций: мотивация



- SGD $w := w - \varepsilon \nabla_w \mathcal{L}(x, y)$ обновляет все веса на всех слоях одновременно.
- Распределение выходов меняется, и поздние слои должны обучатся снова.
- Также вход может сдвинуться в область малых градиентов нелинейности.
- Перенормировка активаций (batch normalization) частично это решает.

BatchNorm: идея

- Нормализуем выходы на промежуточных слоях:

$$\tilde{x}_k = \frac{x_k - \mu_k}{\sigma_k}, \quad \mu_k = \mathbb{E}x_k, \sigma_k = \sqrt{Var(x_k)}$$

  - гарантируем $\mathbb{E}\tilde{x}_k = 0,\ \mathrm{Var}\,\tilde{x}_k = 1$ после обновления весов на предыдущих слоях.
    - обучение быстрее для поздних слоёв
- **Обучение:**
  - проблема: не знаем μ_k, σ_k
    - изменяются динамически с обновлением весов
  - решение: оценим по текущему минибатчу (должен быть достаточного размера)
- **Применение:**
  - распределение x_k фиксировано, так что можем оценить μ_k, σ_k по всей обучающей выборке.
  - более эффективно: оценки μ_k, σ_k с последовательности последних минибатчей.

BatchNorm: основной алгоритм

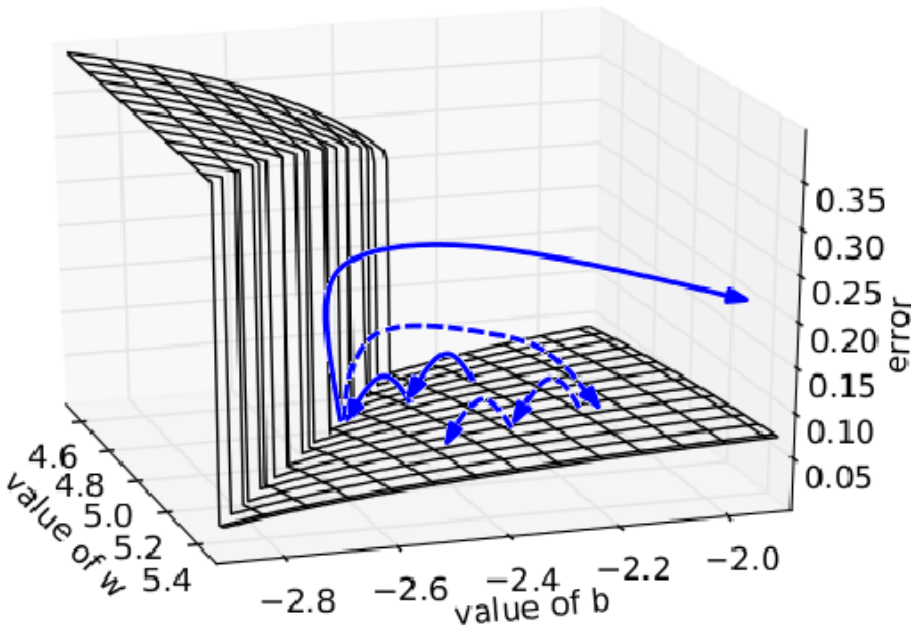
$$\tilde{x}_k = \alpha_k \frac{x_k - \mu_k}{\sqrt{\sigma_k^2 + \varepsilon}} + \beta_k, \quad \mu_k = \bar{x}_k,\ \sigma_k = \sqrt{Var(x_k)}.$$

- **Обучение:**
  - μ_k, σ_k по минибатчу
  - α_k, β_k выходное стд. отклонение и среднее.
    - обучаются в процессе настройки сети
  - мотивация:
    - можем отменить нормализацию (например в задаче предсказания времени суток по фото)
    - возможность лучше подстроиться под нелинейность (не обнулять вход в половине случаев для ReLU)
- **Применение:**
  - μ_k, σ_k оценены по широкому классу объектов.
  - α_k, β_k фиксированы.

Содержание

Проблема большого градиента

Нестабильный по величине градиент мешает сходимости.



Решения - ограничение градиента (gradient clipping) или адаптивное ограничение градиента (adaptive gradient clipping) во время обучения.

Ограничение градиента

Ограничение градиента по порогу (gradient clipping[4]): гарантия $|\Delta\theta| \leq \varepsilon\lambda$ (помогает в настройке рекуррентных нейросетей)

$$w \to \begin{cases} w - \varepsilon\nabla_w \mathcal{L}(\widehat{y}_i, y_i), & \text{если } \|\nabla_w \mathcal{L}(\widehat{y}_i, y_i)\| < \lambda \\ w - \varepsilon\lambda \frac{\nabla_w \mathcal{L}(\widehat{y}_i, y_i)}{\|\nabla_w \mathcal{L}(\widehat{y}_i, y_i)\|} & \text{если } \|\nabla_w \mathcal{L}(\widehat{y}_i, y_i)\| \geq \lambda \end{cases}$$

[4] https://arxiv.org/pdf/1211.5063.pdf

Адаптивное ограничение градиента

Адаптивное ограничение градиента по порогу (adaptive gradient clipping[5]): гарантия $\|\Delta\theta_i\| \leq \varepsilon\lambda \|\theta_i\|$

- помогло настроить SOTA модель классификации ImageNet без батч-нормализации
- Пусть w_i - отдельный параметр (др. вариант применения: w_i - все пар-ры i-го слоя, тогда $\|\cdot\|$-норма Фробениуса, $\|w_i\|^* = \max(\|w_i\|, \nu), \nu > 0$ - мало).

Для каждого i:

$$w_i \to \begin{cases} w_i - \varepsilon\nabla_{w_i}\mathcal{L}(\hat{y}_i, y_i), & \text{если } \|\nabla_{w_i}\mathcal{L}(\hat{y}_i, y_i)\| / \|w_i\|^* < \lambda \\ w_i - \varepsilon\lambda \|w_i\|^* \frac{\nabla_{w_i}\mathcal{L}(\hat{y}_i, y_i)}{\|\nabla_{w_i}\mathcal{L}(\hat{y}_i, y_i)\|}, & \text{если } \|\nabla_{w_i}\mathcal{L}(\hat{y}_i, y_i)\| / \|w_i\|^* \geq \lambda \end{cases}$$

[5] https://arxiv.org/pdf/2102.06171.pdf

Заключение

- Глубокие сети способны сами настраивать сложные признаки.
  - работают лучше, но нужны большие обучающие выборки
- Борьба с переобучением нейросетей:
  - расширение выборки (pretraining, data augmentation)
  - сокращение #нейронов/связей
  - ранняя остановка, L_1/L_2 регуляризация, DropOut.
- Функция потерь невыпукла, возможны локальные оптимумы.
- Идеи улучшений SGD: инерция, ускоренный градиент Нестерова, индивидуальные настраиваемые веса для каждого параметра.
- BatchNorm ускоряет и упрощает сходимость.