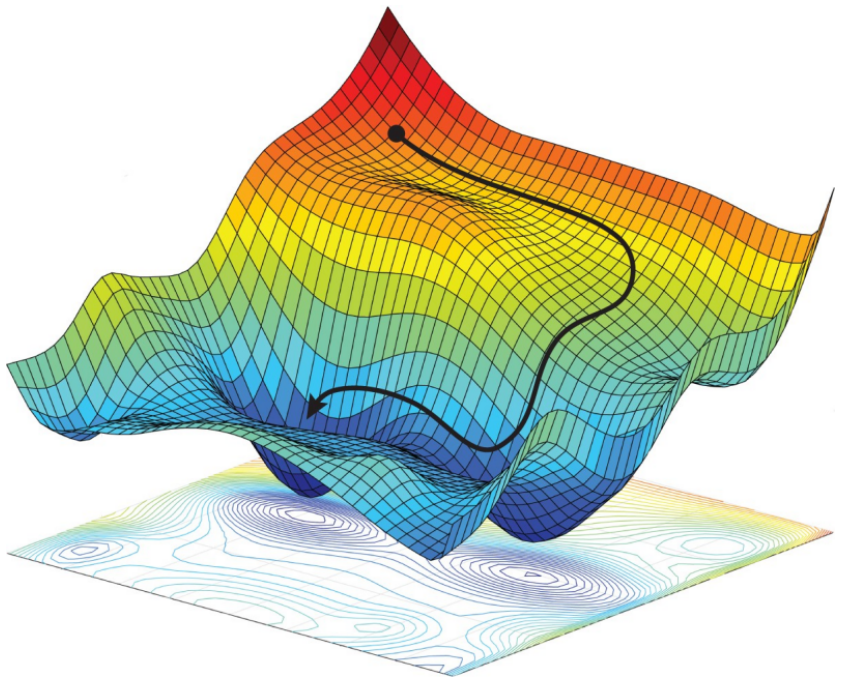
Особенности настройки глубоких нейросетей

Виктор Китов
victorkitov.github.io



Содержание

Расширение обучающей выборки

- Модели глубокого обучения имеют много параметров.
  - полносвязный слой $A \to B$ нейронов содержит $(A+1)B$ 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:

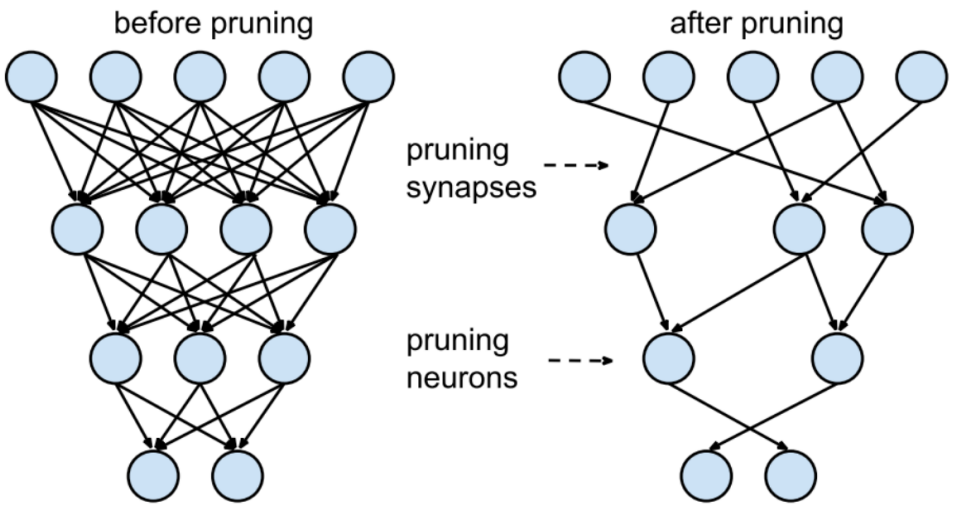
- использовать меньше нейронов/связей
- использовать регуляризацию
  - L_1, L_2 (можно со своим весом на каждом слое)
- ограничения на веса при настройке
  - $w_i = w_j$ либо регуляризация $+\lambda|w_i - w_j|^2$
- DropOut, DropConnect
- ранняя остановка (early stopping)
- обучение с зашумлёнными входами
- дистилляция знаний (2 сети: учитель, студент)

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 $L(w)$

$$L(w) - L(w^*) \approx \nabla L(w^*)^T (w - w^*)$$
$$+\frac{1}{2} (w - w^*)^T \nabla^2 L(w^*) (w - w^*)$$

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

$$L(w) - L(w^*) \approx \nabla L(w^*)^T (w - w^*)$$
$$+\frac{1}{2} (w - w^*)^T \nabla^2 L(w^*) (w - w^*)$$
$$\approx \frac{1}{2} (w - w^*)^T \nabla^2 L(w^*) (w - w^*) \approx \frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial L(w^*)}{\partial w_i^2} (w_i - w_i^*)^2$$

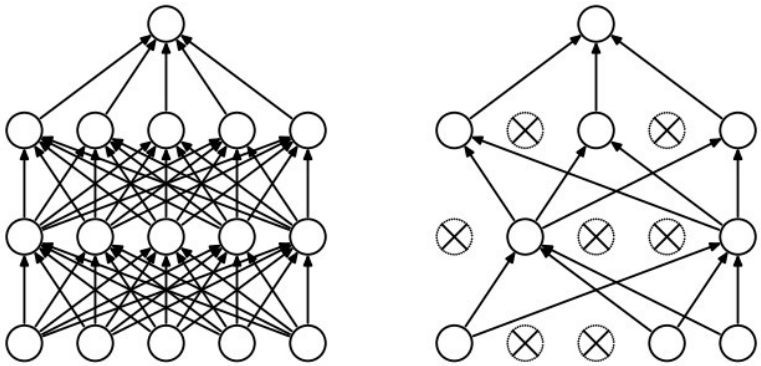
Приближения:

- $O\left(\|w - w^*\|^3\right) \approx 0$
- 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 $\frac{\partial L(w^*)}{\partial w_i^2}(0 - w_i^*)^2 < threshold$

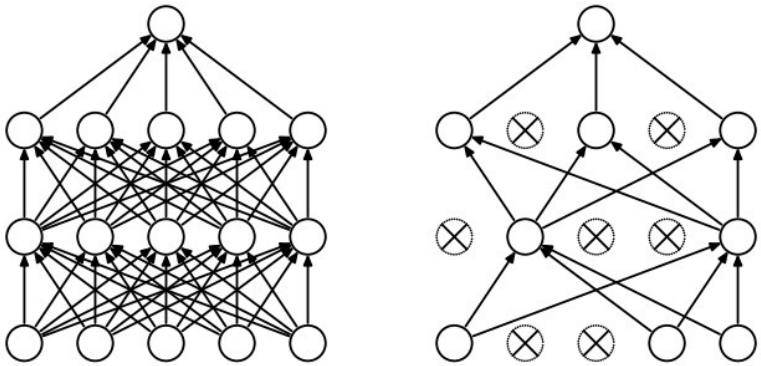
DropOut: обучение



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

- Для каждого минибатча каждый нейрон независимо, кроме выходных, отбрасывается с вероятностью $(1-p)$ и оставляется с вероятностью p.

DropOut: обучение



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

- Для каждого минибатча каждый нейрон независимо, кроме выходных, отбрасывается с вероятностью $(1-p)$ и оставляется с вероятностью p.
  - ускоряет обучение;
  - уменьшает переобучение, препятствуя со-настройке нейронов;
  - по сути, учим ансамбль прореженных моделей.

DropOut: применение

- При обучном обучении нейрон получает на вход:

$$\sum_i w_i a_i$$

DropOut: применение

- При обучном обучении нейрон получает на вход:

$$\sum_i w_i a_i$$

- При обучении с DropOut:

$$\sum_i (pw_i \cdot a_i + (1-p)w_i \cdot 0) = \sum_i pw_i a_i$$

DropOut: применение

- При обучном обучении нейрон получает на вход:

$$\sum_i w_i a_i$$

- При обучении с DropOut:

$$\sum_i (pw_i \cdot a_i + (1-p)w_i \cdot 0) = \sum_i pw_i a_i$$

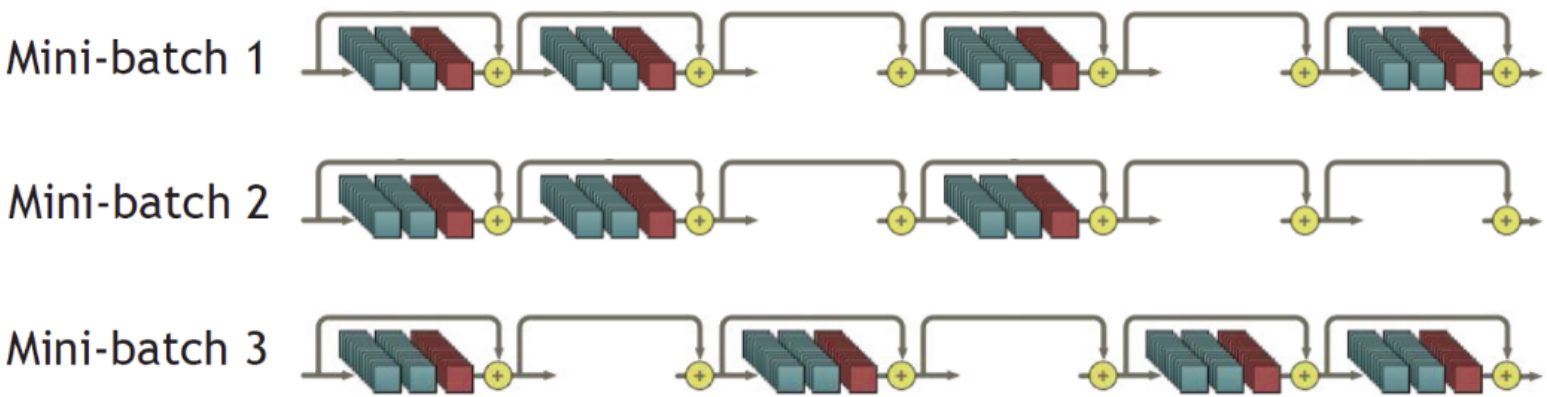
- Применение модели: оставляются все нейроны, но выход каждого нейрона домножается на p.
  - для уменьшения вычислений можно:
    - обучение: выход a_i/p, когда a_i оставлен.
    - прогноз: выход a_i без изменений.
- Рекомендация: более ранние слои слабее прореживать
  - прореживание 0-го слоя: м-д случайных подпространств

Стохастическая глубина в сетях[1]

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

Полная архитектура (используется на тесте):

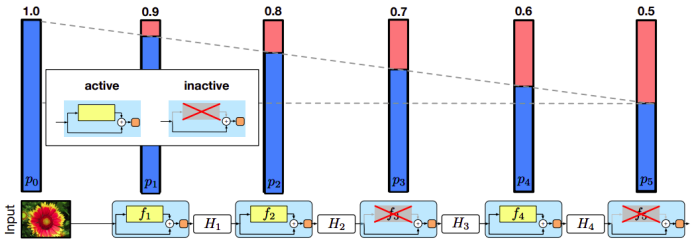
Обучение: отбрасывается преобразования блока l с вероятностью $1 - p_l$



[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.

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

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

Базовые градиентные методы

- Batch gradient descent: градиентный спуск по всем объектам выборки

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

  - медленно, не применим для динамических данных
- Stochastic gradient descent (SGD): стохастический спуск с сэмплированием по 1 объекту

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

  - берём последовательные объекты, но перемешиваем выборку перед каждой эпохой.

Базовые градиентные методы

- Batch gradient descent: градиентный спуск по всем объектам выборки

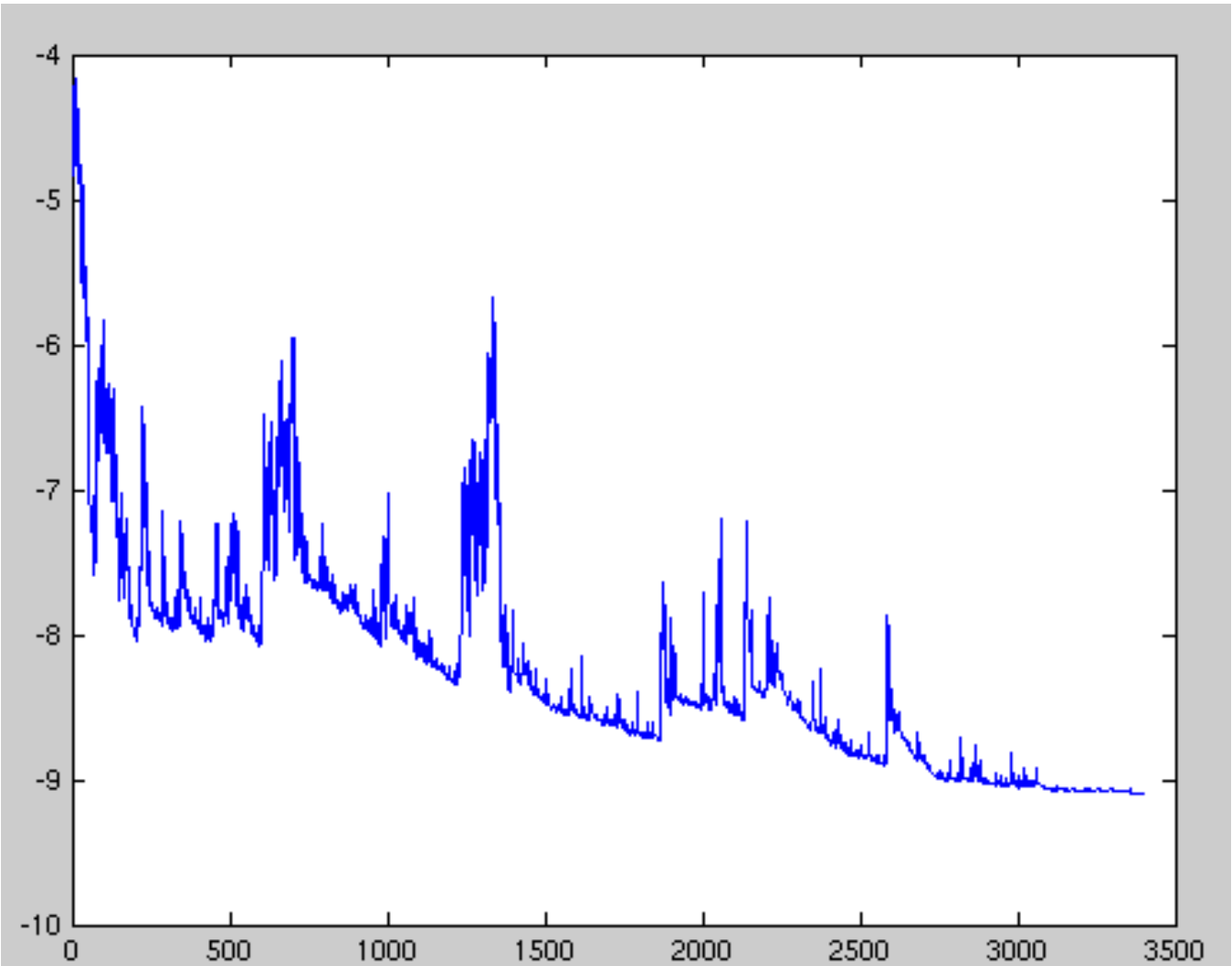
$$w_{t+1} := w_t - \eta \nabla_w L(w; X, Y)$$

  - медленно, не применим для динамических данных
- Stochastic gradient descent (SGD): стохастический спуск с сэмплированием по 1 объекту

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

  - берём последовательные объекты, но перемешиваем выборку перед каждой эпохой.
- SGD быстрее сходится, но
  - неустойчивая оценка градиента
  - слабое использование параллелизации

Пример сходимости SGD



Базовые градиентные методы

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

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

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
  - и быстрее: параллелизация вычислений по минибатчу

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
  - и 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

- SGD с инерцией (momentum), "мяч катится с горы":

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

Модификации инерции и Нестерова

- SGD с инерцией (momentum), "мяч катится с горы":

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

  - устойчивее градиент (усредняем по градиентам с прошлых итераций)
  - можем брать выше шаг обучения, ускорение

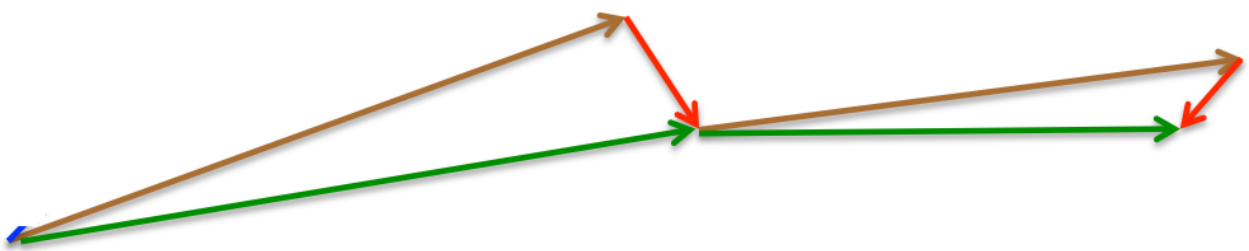
Модификации инерции и Нестерова

- SGD с инерцией (momentum), "мяч катится с горы":

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

  - устойчивее градиент (усредняем по градиентам с прошлых итераций)
  - можем брать выше шаг обучения, ускорение
- Nesterov Accelerated Gradient (Nesterov Momentum)

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



Модификации SGD

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

$$G_t := G_t + \nabla_w L(w_t)^2$$
$$w_{t+1} := w_t - \frac{\eta}{\sqrt{G_t + \varepsilon}} \cdot \nabla_w L(w_t)$$

- RMSprop

$$G_t := \gamma G_{t-1} + (1-\gamma) \nabla_w L(w_t)^2$$
$$w_{t+1} := w_t - \frac{\eta}{\sqrt{G_t + \varepsilon}} \cdot \nabla_w L(w_t)$$

Модификации SGD

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

$$m_t := \beta_1 m_{t-1} + (1-\beta_1)\nabla_w L(w_t)$$
$$G_t := \beta_2 G_{t-1} + (1-\beta_2)\nabla_w L(w_t)^2$$
$$\widehat{m}_t = \frac{m_t}{1-\beta_1^t}$$
$$\widehat{G}_t = \frac{G_t}{1-\beta_2^t}$$
$$w_{t+1} := w_t - \frac{\eta}{\sqrt{\widehat{G}_t + \varepsilon}} \cdot \widehat{m}_t$$

- Nadam: Adam+Nesterov Accelerated Gradient.

Модификации SGD

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

$$m_t := \beta_1 m_{t-1} + (1-\beta_1)\nabla_w L(w_t)$$
$$G_t := \beta_2 G_{t-1} + (1-\beta_2)\nabla_w L(w_t)^2$$
$$\widehat{G}_t = \max\left(\widehat{G}_{t-1}, G_t\right)$$
$$w_{t+1} := w_t - \frac{\eta}{\sqrt{\widehat{G}_t + \varepsilon}} \odot \widehat{m}_t$$

Дополнительные улучшения[2]

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

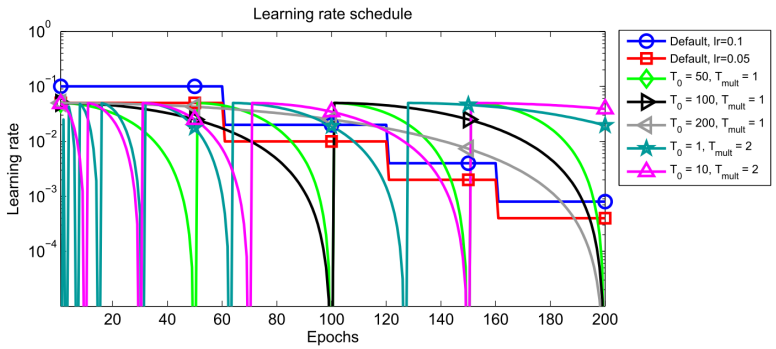
$$g_t := g_t + \mathcal{N}(0, \sigma_t^2)$$
$$\sigma_t^2 = \frac{\eta}{(1+t)^\gamma}$$

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

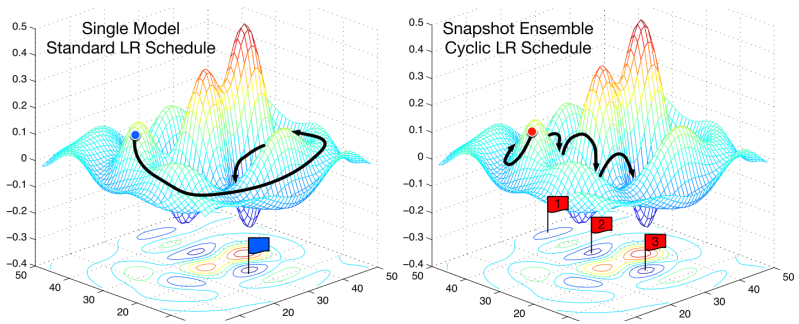
[2]Больше информации: https://ruder.io/deep-learning-optimization-2017/

Дополнительные улучшения

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

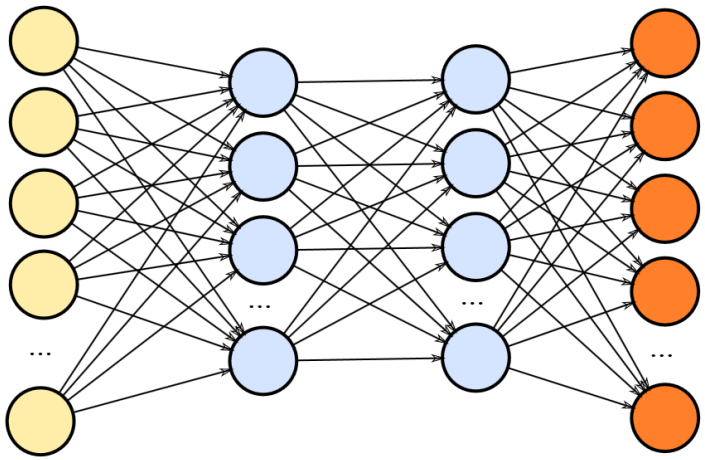


- Перед каждым увеличением η получили некоторую модель=>можем модели комбинировать в композицию:



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

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

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

BatchNorm: основной алгоритм

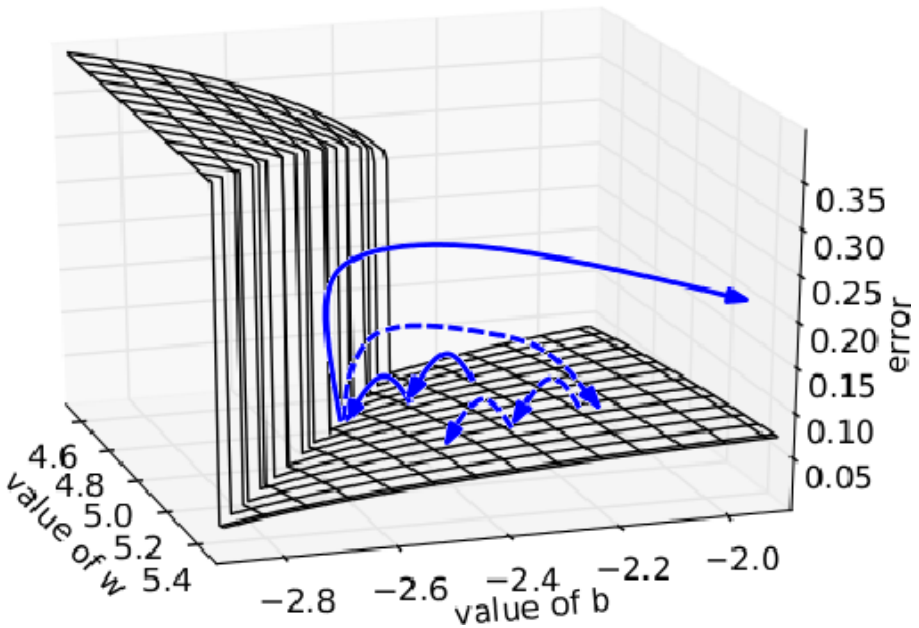
$$\tilde{x}_k = \alpha_k \frac{x_k - \mu_k}{\sqrt{\sigma_k^2 + \varepsilon}} + \beta_k, \quad \mu_k = \bar{x}_k,\ \sigma_k = \sqrt{Var(x_k)}$$

- **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[3]): гарантия $|\Delta\theta| \leq \varepsilon\lambda$ (помогает в настройке рекуррентных нейросетей)

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

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

Адаптивное ограничение градиента

Адаптивное ограничение градиента по порогу (adaptive gradient clipping[4]): 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:

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

[4] 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.

Содержание