

Bài 4: Huấn luyện mạng nơ-ron (Phần 1)

Nội dung



- 1. Hàm kích hoạt
- 2. Tiền xử lý dữ liệu
- 3. Khởi tạo trọng số
- 4. Các kỹ thuật chuẩn hóa



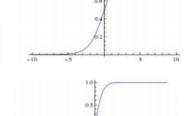


Activation Functions

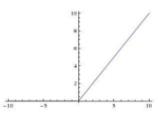
Sigmoid

$$\sigma(x)=1/(1+e^{-x})$$

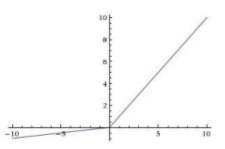
max(0,x)



tanh tanh(x)



Leaky ReLU max(0.1x, x)

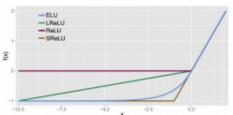


Maxout

 $\max(w_1^Tx+b_1,w_2^Tx+b_2)$

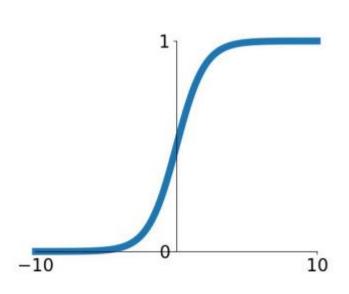
ELU

$$f(x) = \begin{cases} x & \text{if } x > 0\\ \alpha & (\exp(x) - 1) & \text{if } x \le 0 \end{cases}$$



ReLU



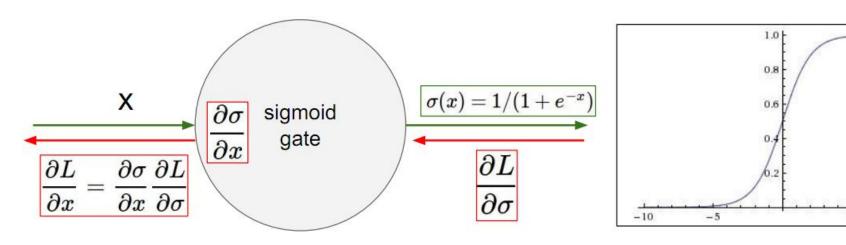


Sigmoid

$$\sigma(x) = 1/(1 + e^{-x})$$

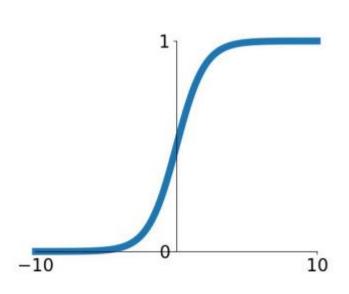
- Nhận giá trị trong khoảng [0,1]
- Được dùng phổ biến trong lịch sử mạng nơron do chúng mô phỏng tốt tỉ lệ bắn xung (firing rate) của nơ-ron
- Có 3 nhược điểm:
- Nơ-ron bão hòa triệt tiêu gradient





- Điều gì sẽ xảy ra khi x = -10?
- Điều gì sẽ xảy ra khi x = 0?
- Điều gì sẽ xảy ra khi x = 10?





Sigmoid

$$\sigma(x)=1/(1+e^{-x})$$

- Nhận giá trị trong khoảng [0,1]
- Được dùng phổ biến trong lịch sử mạng nơron do chúng mô phỏng tốt tỉ lệ bắn xung (firing rate) của nơ-ron
- Có 3 nhược điểm:
- Nơ-ron bão hòa triệt tiêu gradient
- Trung bình đầu ra khác 0

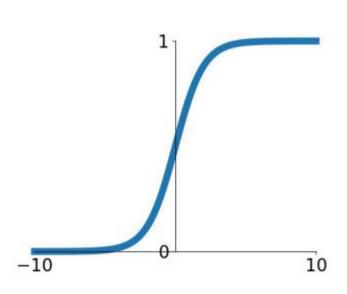


$$f\left(\sum_i w_i x_i + b
ight)$$

- Điều gì xảy ra nếu tất cả đầu vào x_i của nơ-ron đều dương?
- Khi đó gradient của hàm mục tiêu đối với w sẽ ra sao?
- Tất cả các phần tử của w đều cùng dấu với f'(w), tức là cùng âm hoặc cùng dương
- Khi đó gradient chỉ có thể hướng theo một số chiều nhất định trong không gian tìm kiếm

allowed gradient update directions zig zag path allowed gradient update directions hypothetical optimal w vector



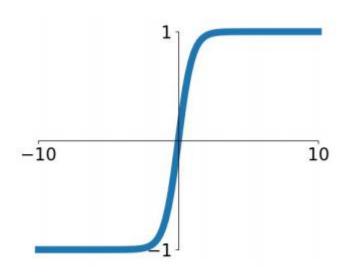


Sigmoid

$$\sigma(x) = 1/(1+e^{-x})$$

- Nhận giá trị trong khoảng [0,1]
- Được dùng phổ biến trong lịch sử mạng nơron do chúng mô phỏng tốt tỉ lệ bắn xung (firing rate) của nơ-ron
- Có 3 nhược điểm:
- Nơ-ron bão hòa triệt tiêu gradient
- Trung bình đầu ra khác 0
- Tính toán hàm mũ exp() tốn kém



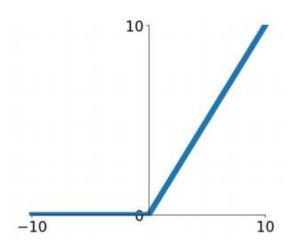


- Nhận giá trị trong khoảng [-1,1]
- Trung bình đầu ra bằng 0
- Vẫn bị hiện tượng bão hòa, triệt tiêu gradient

tanh(x)

$$\frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$



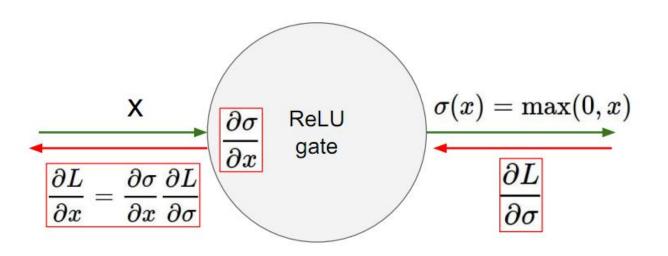


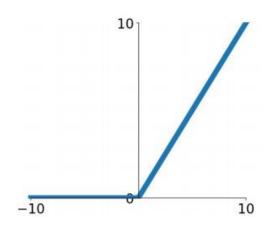
ReLU (Rectified Linear Unit)

$$f(x) = max(0,x)$$

- Không bị bão hòa trong vùng dương
- Tính toán hiệu quả
- Trong thực tế hội tụ nhanh hơn sigmoid/tanh (khoảng 6 lần)
- Đầu ra trung bình khác 0
- Và một vấn đề nữa...



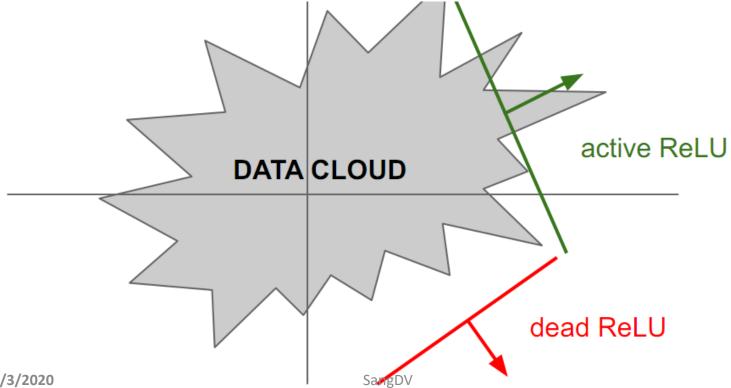




- Điều gì sẽ xảy ra khi x = -10?
- Điều gì sẽ xảy ra khi x = 0?
- Điều gì sẽ xảy ra khi x = 10?

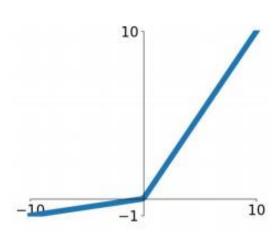


- ReLU bị "văng" ra khỏi tập dữ liệu dẫn tới đầu ra luôn âm và không bao giờ được cập nhật trọng số nữa
 - → ReLU chết
- Thường khởi tạo nơ-ron ReLU với bias dương bé (ví du 0.01)



23/3/2020



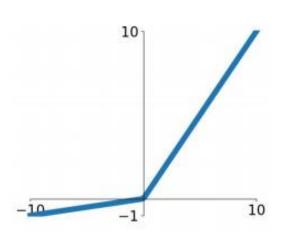


Leaky ReLU

$$f(x) = \max(0.01x, x)$$

- Không bị bão hòa trong vùng dương
- Tính toán hiệu quả
- Trong thực tế hội tụ nhanh hơn sigmoid/tanh (khoảng 6 lần)
- · Không bao giờ "chết"





Leaky ReLU

$$f(x) = \max(0.01x, x)$$

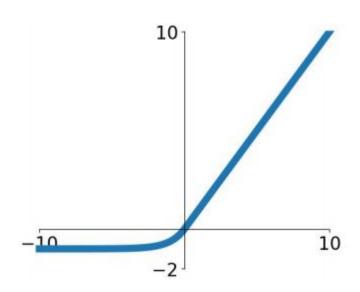
- Không bị bão hòa trong vùng dương
- Tính toán hiệu quả
- Trong thực tế hội tụ nhanh hơn sigmoid/tanh (khoảng 6 lần)
- Không bao giờ "chết"

Parametric Rectifier (PReLU)

$$f(x) = \max(\alpha x, x)$$

backprop into \alpha (parameter)





- Có tất cả ưu điểm của ReLU
- Trung bình đầu ra gần 0 hơn
- Không "chết"
- Tính toán lâu do có hàm exp()

$$f(x) = \begin{cases} x & \text{if } x > 0 \\ \alpha (\exp(x) - 1) & \text{if } x \le 0 \end{cases}$$

Hàm kích hoạt Maxout



$$\max(w_1^T x + b_1, w_2^T x + b_2)$$

- Tổng quát hóa của ReLU và Leaky ReLU
- Tính toán tuyến tính
- Không bão hòa
- Không chết
- Gấp đôi số tham số mỗi nơ-ron



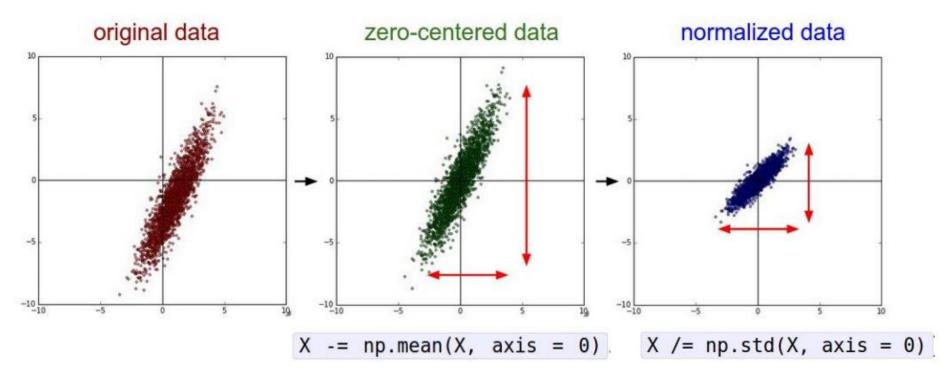
- Trong thực tế:
- Thường dùng ReLU. Cẩn thận với tốc độ học để tránh ReLU bị chết.
- Có thể thử Leaky ReLU / Maxout / ELU
- Có thể thử tanh nhưng không kỳ vọng nhiều
- Không dùng sigmoid
- Gần đây xuất hiện một số hàm kích hoạt mới:
- ReLU6 = min(6, ReLU(x))
- Swish
- Mish



Tiền xử lý dữ liệu



- Biến đổi phân phối dữ liệu về kỳ vọng bằng 0: trừ tất cả mẫu dữ liệu cho mẫu trung bình
- Biến đổi phân phối dữ liệu về độ lệch chuẩn đơn vị

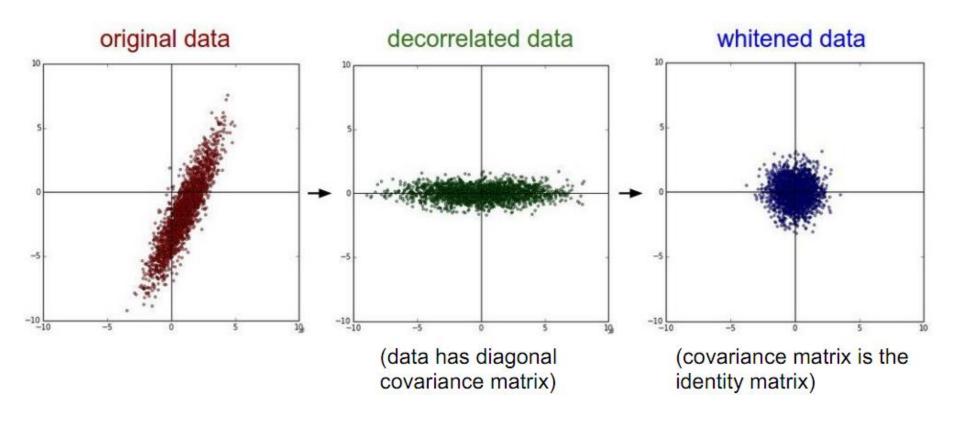


Giả sử X [NxD] là ma trận dữ liệu, mỗi mẫu dữ liệu là một dòng

Tiền xử lý dữ liệu



 Trong thực tế có thể sử dụng PCA hoặc Whitening dữ liệu



Tiền xử lý dữ liệu

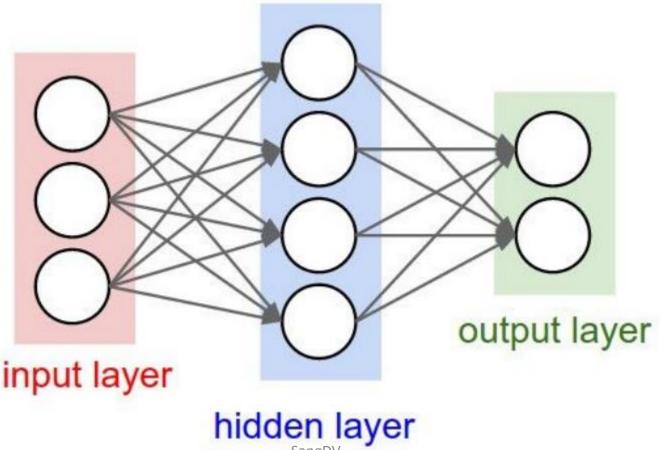


- Ví dụ với bộ CIFAR10 với các ảnh kích thước 32x32x3
- Subtract the mean image (e.g. AlexNet) (mean image = [32,32,3] array)
- Subtract per-channel mean (e.g. VGGNet)
 (mean along each channel = 3 numbers)
- Subtract per-channel mean and
 Divide by per-channel std (e.g. ResNet)
 (mean along each channel = 3 numbers)
- Thường ít sử dụng PCA hoặc whitening





- Điều gì xảy ra nếu khởi tạo tất cả các trọng số bằng 0?
- → Không có ý nghĩa do tất cả các nơ-ron đều học và xử lý giống hệt nhau





 Ý tưởng thứ nhất: Khởi tạo ngẫu nhiên các giá trị nhỏ (Ví dụ theo phân bố chuẩn với kỳ vọng 0, độ lệch chuẩn 0.01)

```
W = 0.01 * np.random.randn(Din, Dout)
```

Làm việc ổn với các mạng nơ-ron nhỏ, nhưng có vấn đề với các mạng nơ-ron sâu hơn.

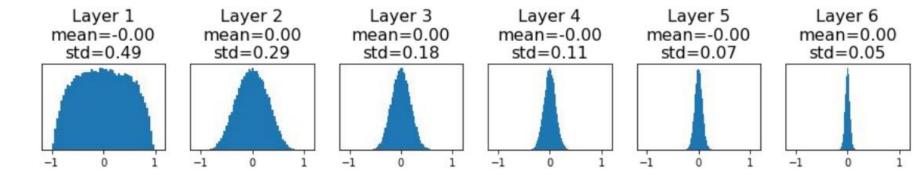


```
dims = [4096] * 7 Forward pass for a 6-layer
hs = [] net with hidden size 4096
x = np.random.randn(16, dims[0])
for Din, Dout in zip(dims[:-1], dims[1:]):
    W = 0.01 * np.random.randn(Din, Dout)
    x = np.tanh(x.dot(W))
    hs.append(x)
```

All activations tend to zero for deeper network layers

Q: What do the gradients dL/dW look like?

A: All zero, no learning =(



Gradient dL/dW = 0

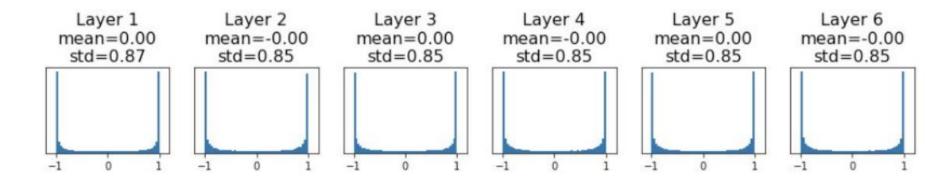
$$rac{\partial C}{\partial w_{jk}^l} = a_k^{l-1} \delta_j^l$$

$$\delta_{ ext{Sangd}}^l = ((w^{l+1})^T \delta^{l+1}) \odot \sigma'(z^l)$$
 ,



All activations saturate

Q: What do the gradients look like?



• Gradient dL/dW = 0

$$rac{\partial C}{\partial w_{jk}^l} = a_k^{l-1} \delta_j^l$$

$$\delta_{ ext{Sangd}}^l = ((w^{l+1})^T \delta^{l+1}) \odot \sigma'(z^l)$$

Khởi tạo trọng số: Khởi tạo Xavier



- Giả sử x và w là iid, độc lập nhau và trung bình bằng 0
- Tính toán theo chiều tiến forward:

```
 \text{var}(y) = \text{var}(w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_{\text{Nin}} x_{\text{Nin}} + b) 
 \text{var}(w_i x_i) = \mathbf{E}(\mathbf{x}_i)^2 \text{var}(\mathbf{w}_i) + \mathbf{E}(\mathbf{w}_i)^2 \text{var}(\mathbf{x}_i) + 
 \text{var}(\mathbf{w}_i) \text{var}(\mathbf{x}_i) 
 \text{var}(y) = \mathbf{N}_{\text{in}} * \text{var}(\mathbf{w}_i) * \text{var}(\mathbf{x}_i) 
 \mathbf{N}_{\text{in}} * \text{var}(\mathbf{w}_i) = 1 
 \text{var}(\mathbf{w}_i) = 1 / \mathbf{N}_{\text{in}}
```

Tương tự với luồng tín hiệu gradient backward:

$$var(w_i) = 1/N_{out}$$

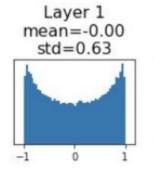
• Trung bình:

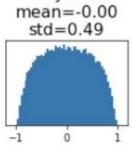
$$var(w_i) = 2/ (N_{in} + N_{out})$$



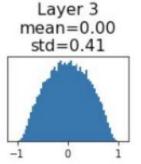
Khởi tạo Xavier

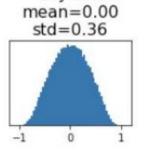
"Just right": Activations are nicely scaled for all layers!



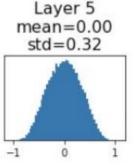


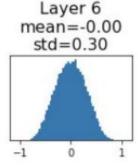
Layer 2





Layer 4

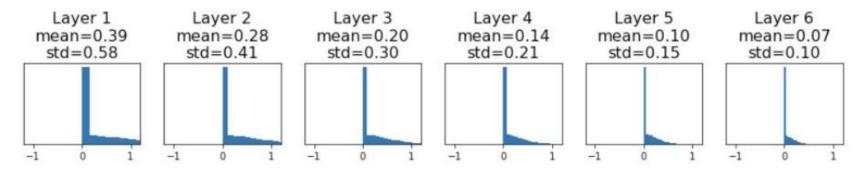






Xavier assumes zero centered activation function

Activations collapse to zero again, no learning =(



```
 \text{var}(y) = \text{var}(w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_{\text{Nin}} x_{\text{Nin}} + b)   \text{var}(y) = N_{\text{in}} / 2 * \text{var}(w_{\text{i}}) * \text{var}(x_{\text{i}})   N_{\text{in}} / 2 * \text{var}(w_{\text{i}}) = 1   \text{var}(w_{\text{i}}) = 2 / N_{\text{in}}
```



He / MSRA Initialization

```
dims = [4096] * 7
hs = []

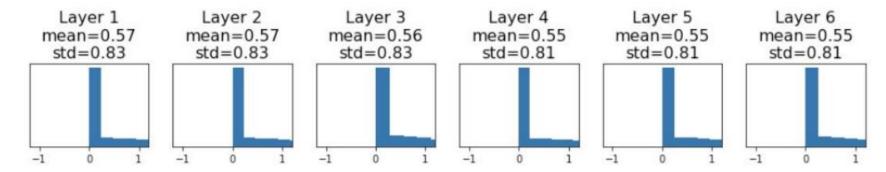
x = np.random.randn(16, dims[0])

for Din, Dout in zip(dims[:-1], dims[1:]):

W = np.random.randn(Din, Dout) * np.sqrt(2/Din)

x = np.maximum(0, x.dot(W))
hs.append(x)
```

"Just right": Activations are nicely scaled for all layers!



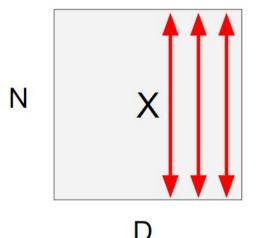




 Muốn hàm kích hoạt có phân bố đầu ra với trung bình bằng 0 và độ lệch chuẩn đơn vị? Hãy biến đổi theo ý tưởng đó!

$$\widehat{x}^{(k)} = \frac{x^{(k)} - E[x^{(k)}]}{\sqrt{\text{Var}[x^{(k)}]}}$$

Input:
$$x: N \times D$$



$$\mu_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{i,j} \quad \text{Per-channel mean,} \\ \text{shape is D}$$

$$\sigma_j^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_{i,j} - \mu_j)^2 \quad \begin{array}{l} \text{Per-channel var,} \\ \text{shape is D} \end{array}$$

$$\hat{x}_{i,j} = \frac{x_{i,j} - \mu_j}{\sqrt{\sigma_j^2 + \varepsilon}} \quad \begin{array}{l} \text{Normalized x,} \\ \text{Shape is N x D} \end{array}$$

$$\hat{x}_{i,j} = rac{x_{i,j} - \mu_j}{\sqrt{\sigma_j^2 + arepsilon}}$$
 Normalized x, Shape is N x E



- Ràng buộc kỳ vọng bằng 0 và độ lệch chuẩn đơn vị là quá chặt! Có thể khiến mô hình bị underfitting.
- → Nới lỏng cho mô hình, tạo lối thoát cho mô hình nếu nó không muốn bị ràng buộc.

Input: $x: N \times D$

Learnable scale and shift parameters:

$$\gamma, \beta: D$$

Learning $\gamma = \sigma$, $\beta = \mu$ will recover the identity function!

$$\mu_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{i,j}$$
 Per-channel mean, shape is D

$$\sigma_j^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_{i,j} - \mu_j)^2 \quad \text{Per-channel var,} \\ \text{shape is D}$$

$$\hat{x}_{i,j} = \frac{x_{i,j} - \mu_j}{\sqrt{\sigma_j^2 + \varepsilon}} \qquad \text{Normalized x,} \\ \text{Shape is N x D}$$

$$y_{i,j} = \gamma_j \hat{x}_{i,j} + \beta_j$$
 Output, Shape is N x D



 Không thể tính kỳ vọng và phương sai theo lô dữ liệu (batch) lúc suy diễn

Input: $x: N \times D$

Learnable scale and shift parameters:

$$\gamma, \beta: D$$

Learning $\gamma = \sigma$, $\beta = \mu$ will recover the identity function!

$$\mu_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{i,j} \quad \text{Per-channel mean,} \\ \text{shape is D}$$

$$\sigma_j^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_{i,j} - \mu_j)^2 \quad \text{Per-channel var,} \\ \text{shape is D}$$

$$\hat{x}_{i,j} = rac{\omega_{i,j}}{\sqrt{\sigma_j^2 + arepsilon}}$$
 Normalized x, Shape is N x D $y_{i,j} = \gamma_j \hat{x}_{i,j} + eta_j$ Output, Shape is N x D



• Lúc suy diễn, BN đơn giản là phép biến đổi tuyến tính. Có thể áp dụng phía sau lớp FC hoặc conv

Input: $x: N \times D$

$$\mu_j = \frac{\text{(Running) average of}}{\text{values seen during training}}$$

Per-channel mean. shape is D

Learnable scale and shift parameters:

$$\gamma, \beta: D$$

During testing batchnorm becomes a linear operator! Can be fused with the previous fully-connected or conv layer

$$\sigma_j^2 = {}^{ ext{(Running)}}$$
 average of values seen during training

Per-channel var, shape is D

$$\hat{x}_{i,j} = \frac{x_{i,j} - \mu_j}{\sqrt{\sigma_j^2 + \varepsilon}}$$
$$y_{i,j} = \gamma_j \hat{x}_{i,j} + \beta_j$$

$$y_{i,j} = \gamma_j \hat{x}_{i,j} + eta_j$$
 Out

Normalized
$$x$$
, Shape is $N \times D$



Batch Normalization for **fully-connected** networks

$$\mathbf{x} : \mathbf{N} \times \mathbf{D}$$
Normalize
$$\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{1} \times \mathbf{D}$$

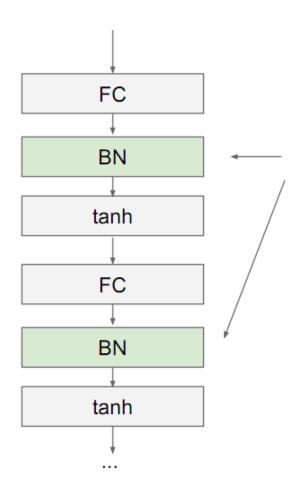
$$\mathbf{y}, \boldsymbol{\beta} : \mathbf{1} \times \mathbf{D}$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{y}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) / \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\beta}$$

Batch Normalization for **convolutional** networks (Spatial Batchnorm, BatchNorm2D)

Normalize
$$\mathbf{x}: \mathbf{N} \times \mathbf{C} \times \mathbf{H} \times \mathbf{W}$$
 $\mu, \sigma: \mathbf{1} \times \mathbf{C} \times \mathbf{1} \times \mathbf{1}$
 $\gamma, \beta: \mathbf{1} \times \mathbf{C} \times \mathbf{1} \times \mathbf{1}$
 $\gamma = \gamma(\mathbf{x} - \mu) / \sigma + \beta$





Usually inserted after Fully Connected or Convolutional layers, and before nonlinearity.

$$\widehat{x}^{(k)} = \frac{x^{(k)} - E[x^{(k)}]}{\sqrt{Var[x^{(k)}]}}$$

Ưu điểm của BN

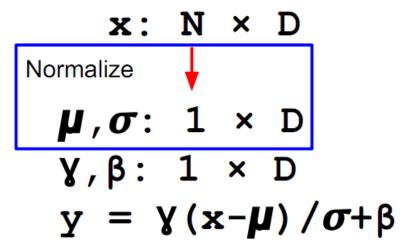


- Dễ dàng hơn khi huấn luyện các mạng sâu!
- Cải thiện luồng gradient
- Cho phép huấn luyện với tốc độ học cao hơn, hội tụ nhanh hơn
- Mạng ốn định hơn, đỡ phụ thuộc hơn với khởi tạo trọng số
- Một kiểu ràng buộc khi huấn luyện
- Khi suy diễn không cần tính toán thêm, đơn giản là biến đổi tuyến tính
- Khi huấn luyện và khi suy diễn làm việc khác nhau: đây là nguồn gốc gây ra nhiều lỗi!

Chuẩn hóa theo lớp



Batch Normalization for fully-connected networks



Layer Normalization for fully-connected networks
Same behavior at train and test!
Can be used in recurrent networks

$$\mathbf{x} : \mathbf{N} \times \mathbf{D}$$

Normalize
$$\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{N} \times \mathbf{1}$$

$$\mathbf{y}, \boldsymbol{\beta} : \mathbf{1} \times \mathbf{D}$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{y}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) / \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\beta}$$

Chuẩn hóa theo mẫu



Batch Normalization for convolutional networks

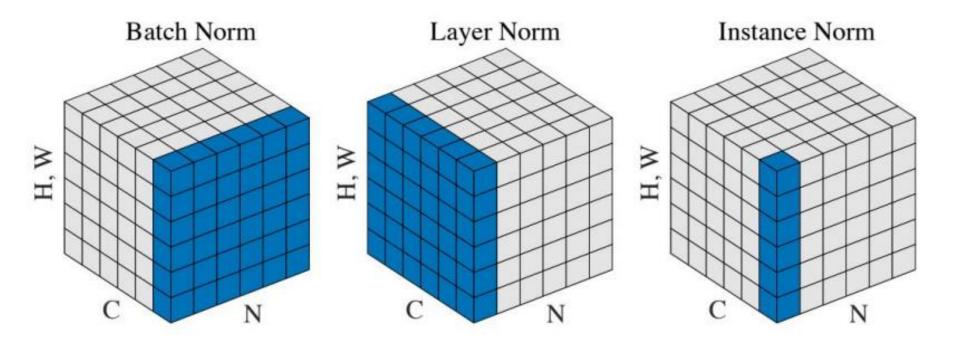
Normalize
$$\mathbf{x}: \mathbf{N} \times \mathbf{C} \times \mathbf{H} \times \mathbf{W}$$
 $\mu, \sigma: \mathbf{1} \times \mathbf{C} \times \mathbf{1} \times \mathbf{1}$
 $\mathbf{y}, \beta: \mathbf{1} \times \mathbf{C} \times \mathbf{1} \times \mathbf{1}$
 $\mathbf{y} = \mathbf{y}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) / \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\beta}$

Instance Normalization for convolutional networks
Same behavior at train / test!

$$x: N \times C \times H \times W$$
Normalize
 $\mu, \sigma: N \times C \times 1 \times 1$
 $y, \beta: 1 \times C \times 1 \times 1$
 $y = y(x-\mu)/\sigma + \beta$

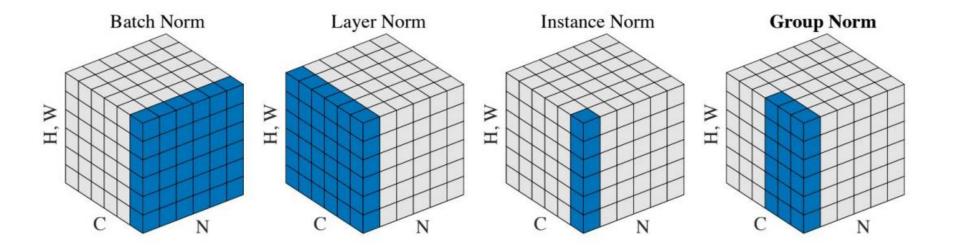
So sánh các phương pháp chuẩn hóa





Chuẩn hóa theo nhóm





Tài liệu tham khảo



1. Bài giảng biên soạn dựa trên khóa cs231n của Stanford, bài giảng số 7:

http://cs231n.stanford.edu

2. Khởi tạo Xavier:

https://prateekvjoshi.com/2016/03/29/understandingxavier-initialization-in-deep-neural-networks/