Нейронные сети и их практическое применение.

Лекция 6.
Практические рекомендации по использованию алгоритма обратного распространения ошибки.

Дмитрий Буряк
к.ф.-м.н
dyb04@yandex.ru

Формирование обучающей выборки

- Размер обучающей выборки
  - N=O(|W|), W – множество весов. «Чем больше, тем лучше»
- Состав
  - Репрезентативность
  - Согласованость с валидационной и тестовой выборками
  - Аугментация данных:
    - добавление шумов
    - искажение данных
    - модели для генерации синтетических данных

Формирование пакетов при обучении

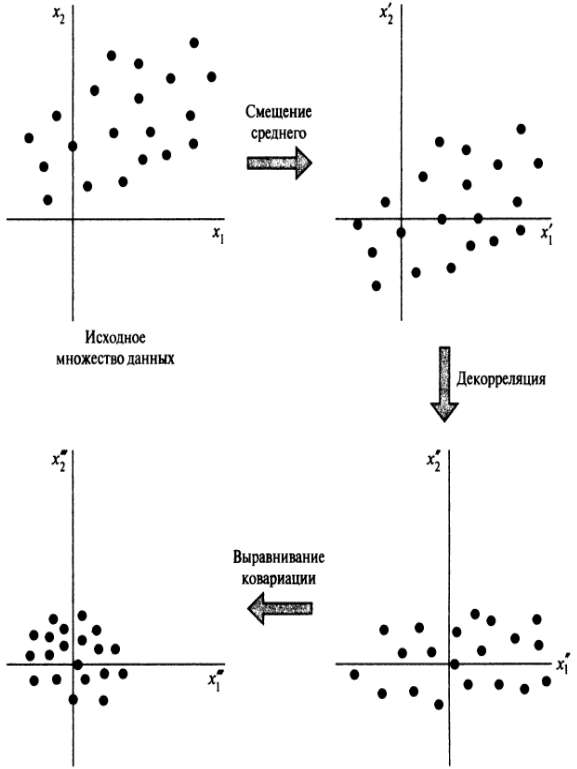
- Пакет – часть обучающей выборки, по которой вычисляется коррекция весов на текущем шаге.

- Принцип максимизации информативности
  - использование примеров, вызывающих наибольшие ошибки обучения
  - использование кардинально отличающихся примеров
- Случайный порядок следования примеров
- Схема акцентирования
- Коррекция распределения данных в обучающей выборке

Предобработка входных данных

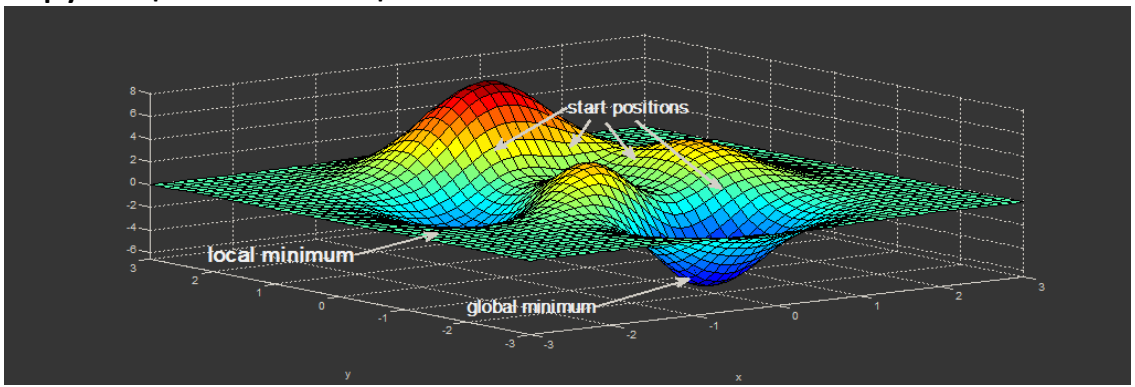
- Целевые значения должны находится в области значений функции активации

- Нормировка входов
  - нулевое среднее
  - отсутствие корреляции
  - одинаковая ковариация



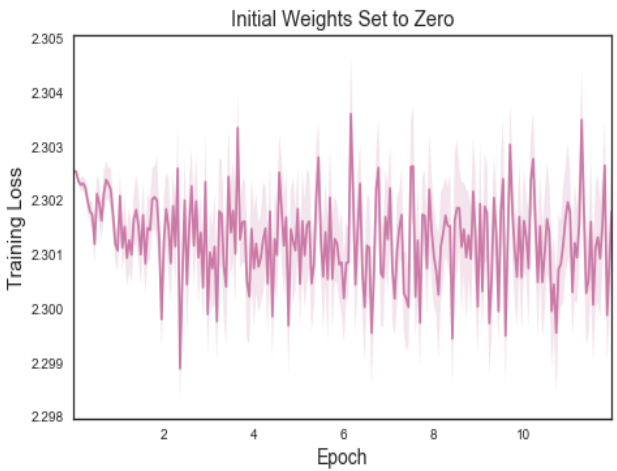
Инициализация весов

- Инициализация весов – определение начальной точки для процесса оптимизации функции ошибки .
- Основные методы основаны на эвристиках.
- Влияние на обобщающую способоность НС плохо изучена.
- Обеспечение ассиметричности выходов нейронов и «динамического» диапазона функции активации.

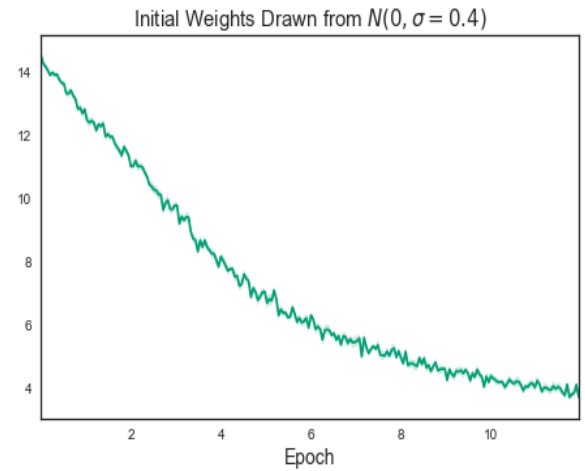


Влияние на эффективность обучения

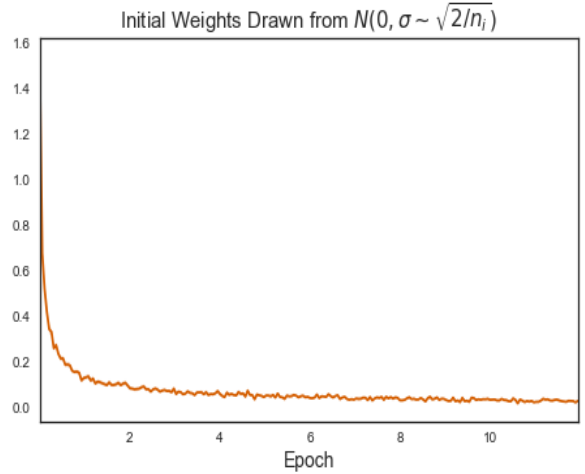
- Классификация изображений MNIST



Инициализация нулевыми значениями



Инициализация N(0,0.4)



Инициализация методом He

Источник: https://intoli.com/blog/neural-network-initialization/

Методы инициализации

- Инициализировать нулями нельзя.
- Небольшими случайными числами.
- $w \in N(0, \frac{1}{\sqrt{n}}) \Rightarrow u = \sum_{1}^{n} w_i x_i \in N(0,1)$;
- $w \in N(0, \frac{1}{\sqrt{n_{in} + n_{out}}})$ (Glorot et al., Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks);
- $w \in N(0, \sqrt{\frac{2}{n}})$ для ReLU (He et al., Delving Deep into Rectifiers: Surpassing Human-Level Performance on ImageNet Classification);
- Разреженная (sparse) инициализация ;
- Инициализация смещений – нулевые значения.

Инициализация весов. Обосновние

- Входы: нулевое среднее, единичная дисперсия, некоррелированы:

$$E[y_i y_k] = \begin{cases} 1 \text{ для } k = i \\ 0 \text{ для } k \neq i \end{cases}$$

- Начальные синаптические веса: равномерно распределены, нулевое среднее. Определить дисперсию.
- Среднее и дисперсия линейной комбинации нейронов

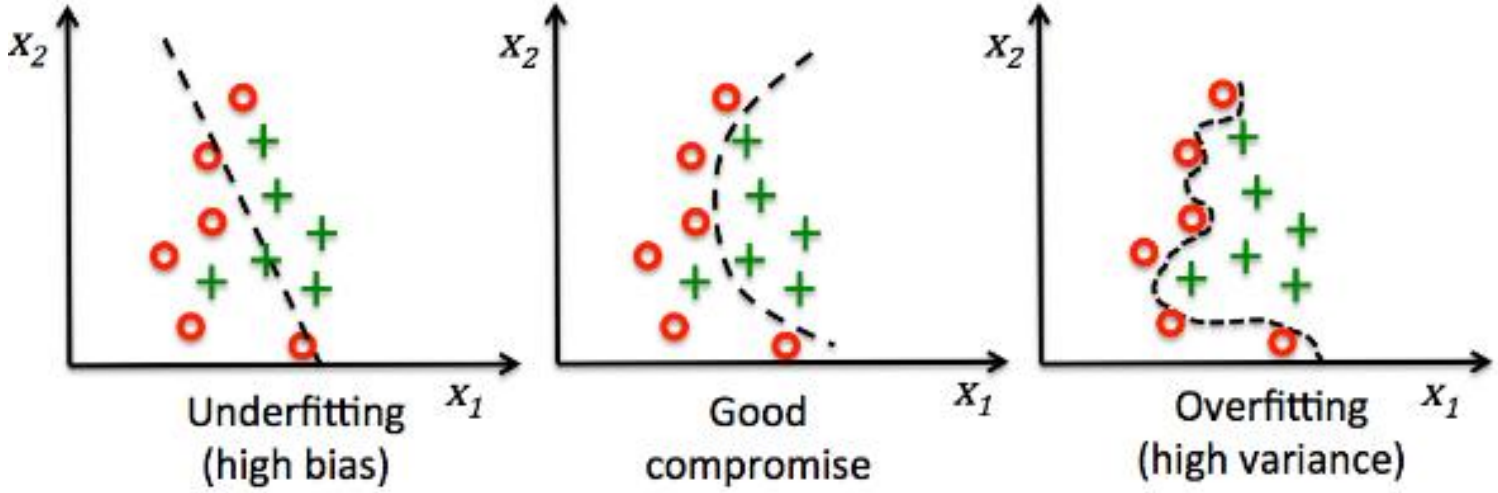
$$\mu_v = E[v_j] = E\left[\sum_{i=1}^{m} w_{ji} y_i\right] = \sum_{i=1}^{m} E[w_{ji}] E[y_i] = 0,$$

$$\sigma_v^2 = E[(v_j - \mu_v)^2] = E[v_j^2] = E\left[\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{m} w_{ji} w_{jk} y_i y_k\right] =$$

$$= \sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{m} E[w_{ji} w_{jk}] E[y_i y_k] = \sum_{i=1}^{m} E[w_{ji}^2] = m\sigma_w^2,$$

- Если $\sigma_w = m^{-1/2}$ то $\sigma_v = 1$

Проблема переобучения НС



Необходимо контролировать процесс обучения.

Обучающая и подтверждающая выборки

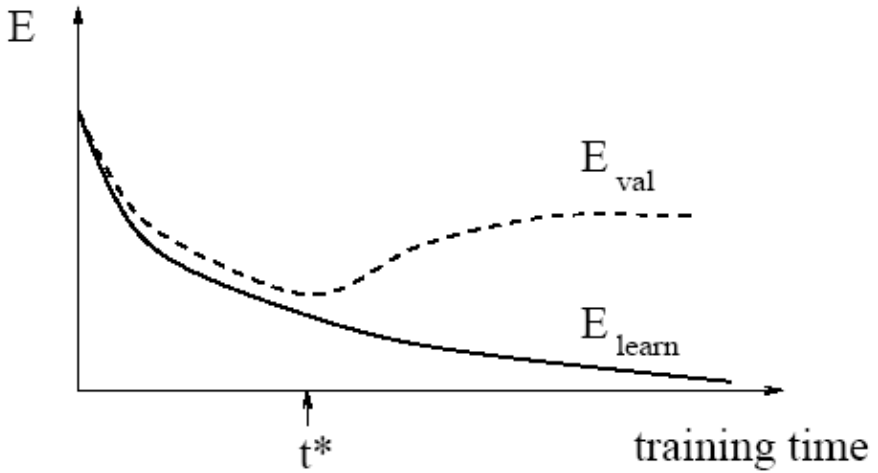
S_L – обучающая выборка;

E_{learn} – ошибка на обучающей выборке;

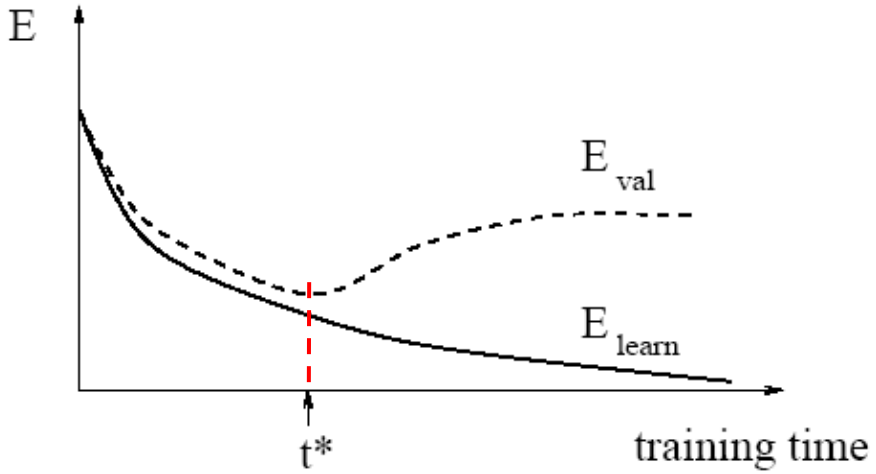
S_V – подтверждающая выборка;

E_{val} – ошибка на подтверждающей выборке;

Необходимо, чтобы E_{learn} и E_{val} в конце обучения достигли минимума



Переобучение. Обучение с ранним остановом



Точка раннего останова

❑ Если размер обучающей выборки много больше числа весов НС, эффективность применения обучения с ранним остановом падает.

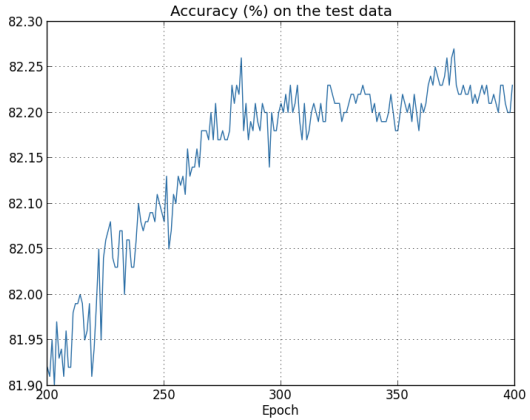
Переобучение. Регуляризация

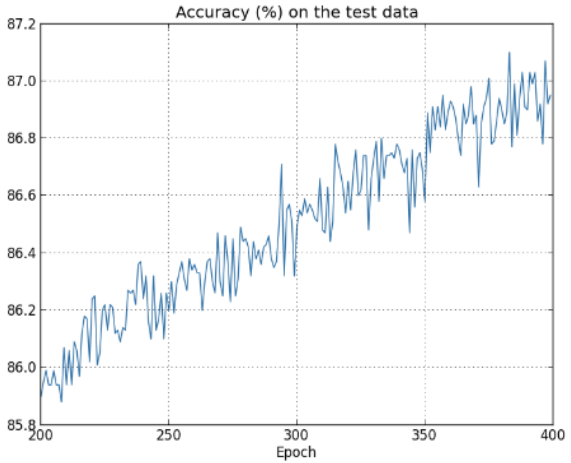
- Регуляризация - метод предотвращения переобучения НС.
- Введение штрафа для больших весов.
- λ - коэффициент регуляризации.
- Для смещений регуляризация также может быть применена

$$E = E_0 + \frac{\lambda}{2n}\sum_w w^2$$

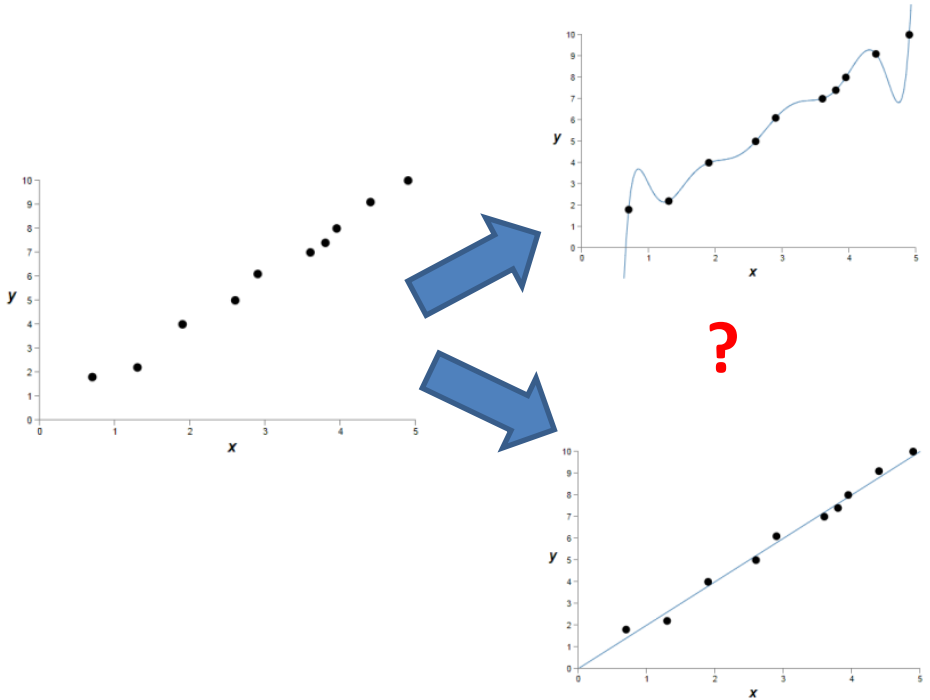
Регуляризация L2

- Классификация MNIST
- Сеть 784x30x10, 1000 обучающих примеров





Регуляризация → снижение переобучения



- Нет однозначного решения без дополнительной инфоормации.
- Большие значения параметров → увеличение чувствительности к шуму.

$$y = a_0 x^9 + a_1 x^8 + \dots$$

$$y = a_0 x + a_1$$

Перекрестная проверка

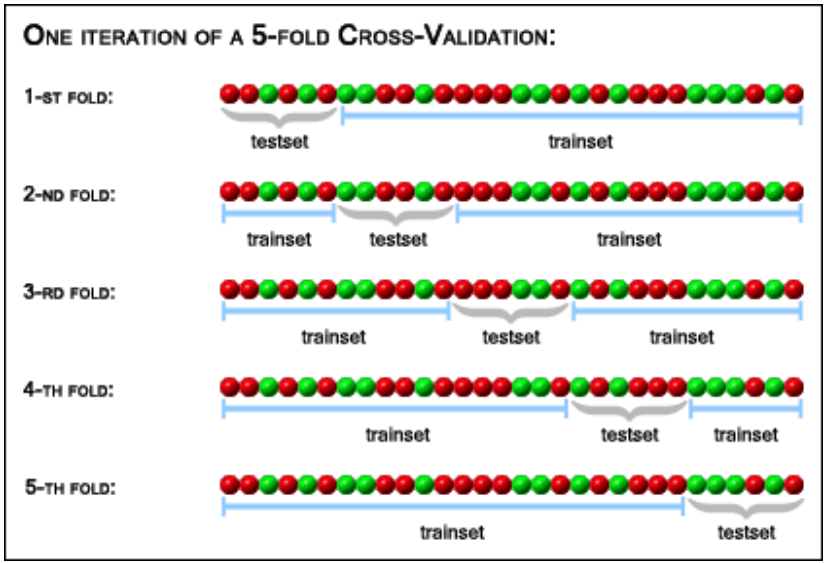
- Обучающее множество
  - обучающее подмножество
  - проверочное подмножество
- Тестовое множество

N – размер обучающего множества
*(1-r)*N* – размер обучающего подмножества
*r*N* – размер проверочного подмножества
Например: r=0.2

- Применение
  - Выбор оптимальной архитектуры
  - Обучение с ранним остановом
  - Многократная перекрестная проверка

Многократная перекрестная проверка

- Делим *N* примеров на *K* подмножеств
- Обучаем на *K-1* подмножестве, тестируем на оставшемся
- Повторяем *K* раз
- Вычисляем среднюю ошибку по всем циклам
- Если *N* мало, то *K=N*.



Основные причины низкой эффективности НС

- Низкая эффективность = большая ошибка на тестовых данных.
- Проблемы с данными;
- Несоответствие архитектуры НС сложности задачи;
- Неоптимальные значения гиперпараметров;
- Переобучение;
- Ошибки в реализации.

Обозначения

- S_{train} – обучающая выборка; S_{test} – тестовая выборка;
- E_{train} – ошибка на обучающей выборке, E_{test} – ошибка на тестовой выборке, E_{goal} – целевое значение ошибки.

- $E_{test} > E_{goal}$

Анализ ошибки на обучающей выборке

- $E_{train} > E_{goal}$

- Увеличить размер НС;
- Улучшить алгоритм обучения
- Оптимизировать значения гиперпараметров алгоритма обучения
- Анализ качества исходных данных
  - низкое значение сигнал-шум;
  - ошибки алгоритма предобработки;
  - недостоверные референсные значения;
  - несбалансированная выборка.

Анализ ошибки на тестовой выборке

- $E_{train} < E_{goal}$ и $E_{test} > E_{goal}$

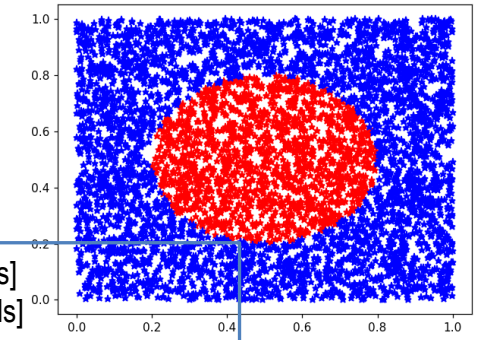
- Увеличить размер S_{train};
- Уменьшить размер НС;
- Оптимизировать значения гиперпараметров НС (регуляризация);
- Подбор алгоритма обучения;
- Несоответствие S_{train} и S_{test}.

Классификация данных при помощи MLP (1)

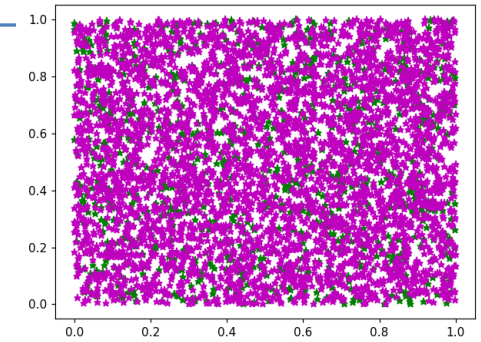
```
import torch
import torch.nn as nn
import torch.optim as optim
import torch.nn.functional as F
from torch.autograd import Variable
from matplotlib import pyplot as plt
import numpy as np
```

```
data_size = 5000
x = torch.rand(data_size)
y = torch.rand(data_size)
center = (0.5,0.5)
radius = 0.3
distance = torch.sqrt( (center[0]-x)**2+(center[1]-y)**2 )
pos_labels = distance <= radius
neg_labels = distance > radius
labels = torch.zeros(data_size).long()
labels[pos_labels] = 1
```

```
pos_data_x,pos_data_y = x[pos_labels],y[pos_labels]
neg_data_x,neg_data_y = x[neg_labels],y[neg_labels]
plt.figure("All data")
plt.plot(pos_data_x.numpy(),pos_data_y.numpy(),"r",marker="*",lw=0)
plt.plot(neg_data_x.numpy(),neg_data_y.numpy(),"b",marker="*",lw=0)
```




```
N_train = int(data_size *0.8)
train_data_x = x[:N_train]
train_data_y = y[:N_train]
train_labels = labels[:N_train]
test_data_x = x[N_train:]
test_data_y = y[N_train:]
test_labels = labels[N_train:]
plt.figure("Train and test data")
plt.plot(test_data_x.numpy(),test_data_y.numpy(),"g",marker="*",lw=0)
plt.plot(train_data_x.numpy(),train_data_y.numpy(),"m",marker="*",lw=0)
plt.show()
```



Классификация данных при помощи MLP (2)

```
class MLP(nn.Module):
    def __init__(self,size,out_size):
        super(MLP, self).__init__()
        self.mlp1 = nn.Linear(size, 15)
        self.mlp2 = nn.Linear(15,out_size)
        self.func = nn.ReLU()

    def forward(self, x):
        x = self.func(self.mlp1(x))
        return self.mlp2(x)

def output_to_label(output,softmax):
    with torch.no_grad():
        output2=softmax(output.detach())
        rez=torch.sort(output2.cpu(),1,True)
    ret_labels = []
    for i in range(rez[1].size(0)):
        ind=rez[1].data[i][0]
        lab=int(ind)
        ret_labels+=[lab]
    return ret_labels
```

```
train_data_all = torch.cat([train_data_x.unsqueeze(1),train_data_y.unsqueeze(1)],dim=1)
test_data_all = torch.cat([test_data_x.unsqueeze(1),test_data_y.unsqueeze(1)],dim=1)

model = MLP(2,2)

lr = 0.001
# Defines a optimizer to update the parameters
optimizer = optim.Adam(model.parameters(), lr=lr)
model_loss = nn.CrossEntropyLoss()
softmax = nn.Softmax(-1)

batch_size = 32
n_iterations = train_data_all.size(0) // batch_size
print("n iter:",n_iterations)
train_errors = []
test_errors = []
```

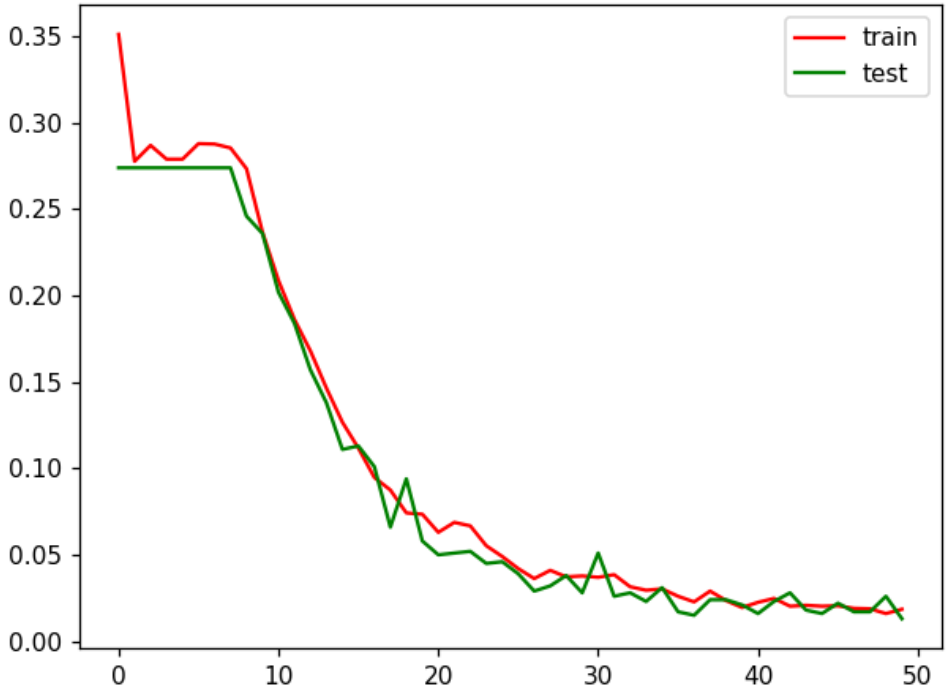
Классификация данных при помощи MLP (3)

```
for epoch in range(50):
    print("### epoch:",epoch)
    epoch_loss = 0
    error = 0
    for iter in range(n_iterations):
        batch_idx = (torch.rand(batch_size)*train_data_all.size(0)).long()
        batch = Variable(train_data_all[batch_idx].contiguous(),requires_grad = True)
        #batch.requires_grad = True
        ref = train_labels[batch_idx]

        out = model(batch)

        loss = model_loss(out,ref)
        loss.backward()
        optimizer.step()
        optimizer.zero_grad()

        lab = torch.Tensor(output_to_label(out,softmax)).long()
        error+= torch.sum(torch.abs(ref-lab))
        epoch_loss+=loss.item()
```

```
    # Continue for (epoch)
    train_errors+=[ [epoch,error.item()/(n_iterations*batch_size)] ]
    print('train error:',error,'of',(n_iterations*batch_size))
    #tests
    if (epoch%1 ==0):
        test_error = 0
        with torch.no_grad():
            batch = test_data_all
            out = model(batch)
            lab = torch.Tensor(output_to_label(out,softmax)).long()
            test_error= torch.sum(torch.abs(test_labels.long()-lab))
            test_errors+=[ [epoch,test_error.item()/test_labels.size(0)] ]
            print("test error:",test_error," of ",test_labels.size(0))
    print("epoch loss:",epoch_loss/n_iterations)

plt.figure("Errors")
train_errors = np.array(train_errors)
test_errors = np.array(test_errors)
plt.plot(train_errors[:,0],train_errors[:,1],"r-",label = "train")
plt.plot(test_errors[:,0],test_errors[:,1],"g-",label = "test")
plt.legend()
plt.show()
```

Классификация данных при помощи MLP (4)

```
…
### epoch: 46
train error: tensor(76) of 4000
test error: tensor(17) of 1000
epoch loss: 0.12735117292404174
### epoch: 47
train error: tensor(75) of 4000
test error: tensor(17) of 1000
epoch loss: 0.11666139790415764
### epoch: 48
train error: tensor(64) of 4000
test error: tensor(26) of 1000
 epoch loss: 0.11834380742907524
 ### epoch: 49
 train error: tensor(74) of 4000
 test error: tensor(13) of 1000
 epoch loss: 0.1205455330312252
```



Вопросы

1. Основные принципы формирования обучающей выборки.
2. Основные действия для предобработки данных
3. Для чего используют многократную перекрестную проверку?