Mély tanulás

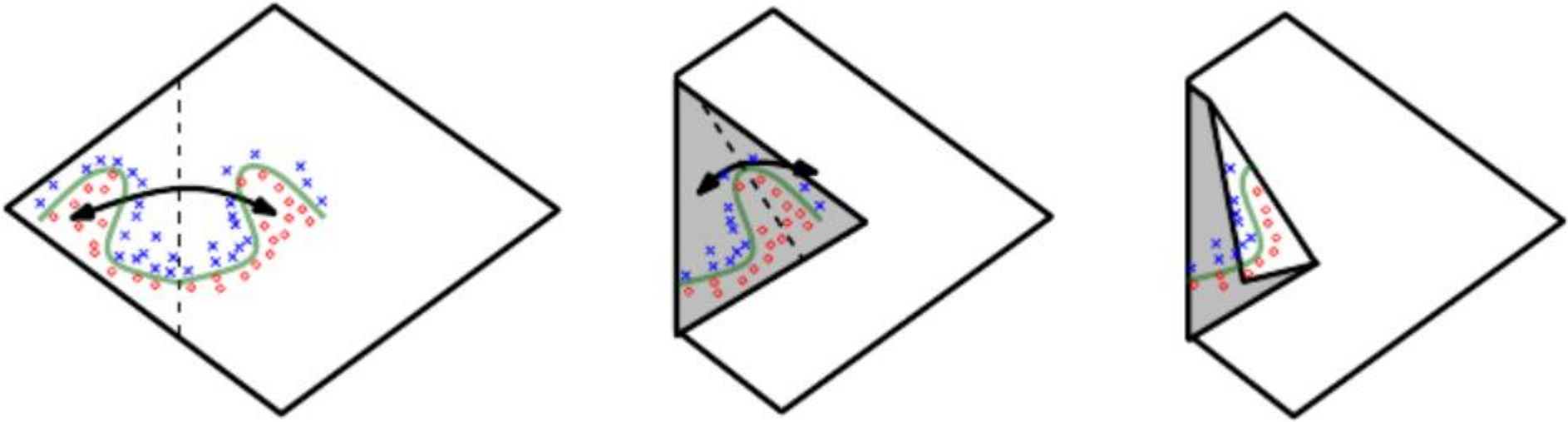
Hadházi Dániel

BME IE – 338

hadhazi@mit.bme.hu

Motivációk

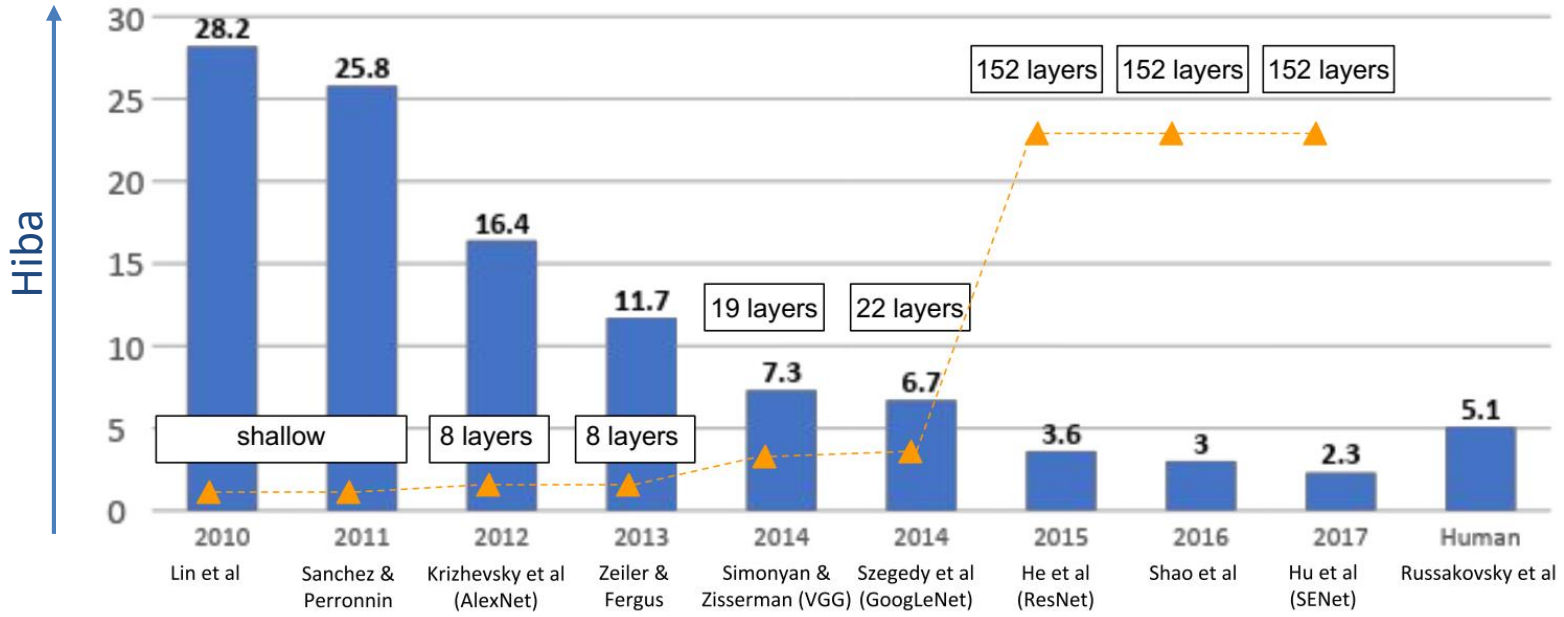
- Feladat dekomponálás elve:
  - Pl. Abs nemlinearitás alkalmazásának esetén:



  - Részproblémák megoldása egyszerűbb, ember is így működik (pl. arc felismerése)
  - Strukturális bias természetesebb, döntési felület szimmetriái, több reprezentáció transzformáció…

Motivációk

- Feladat dekomponálás elve:
  - A bemeneti domént a háló mélységének exponenciális számú részére partícionálja (tipikusan lin. leképzés)
  - Általánosan minél több réteg a preferált, **amíg az egyes rétegek értelmes feladatot képesek végezni**



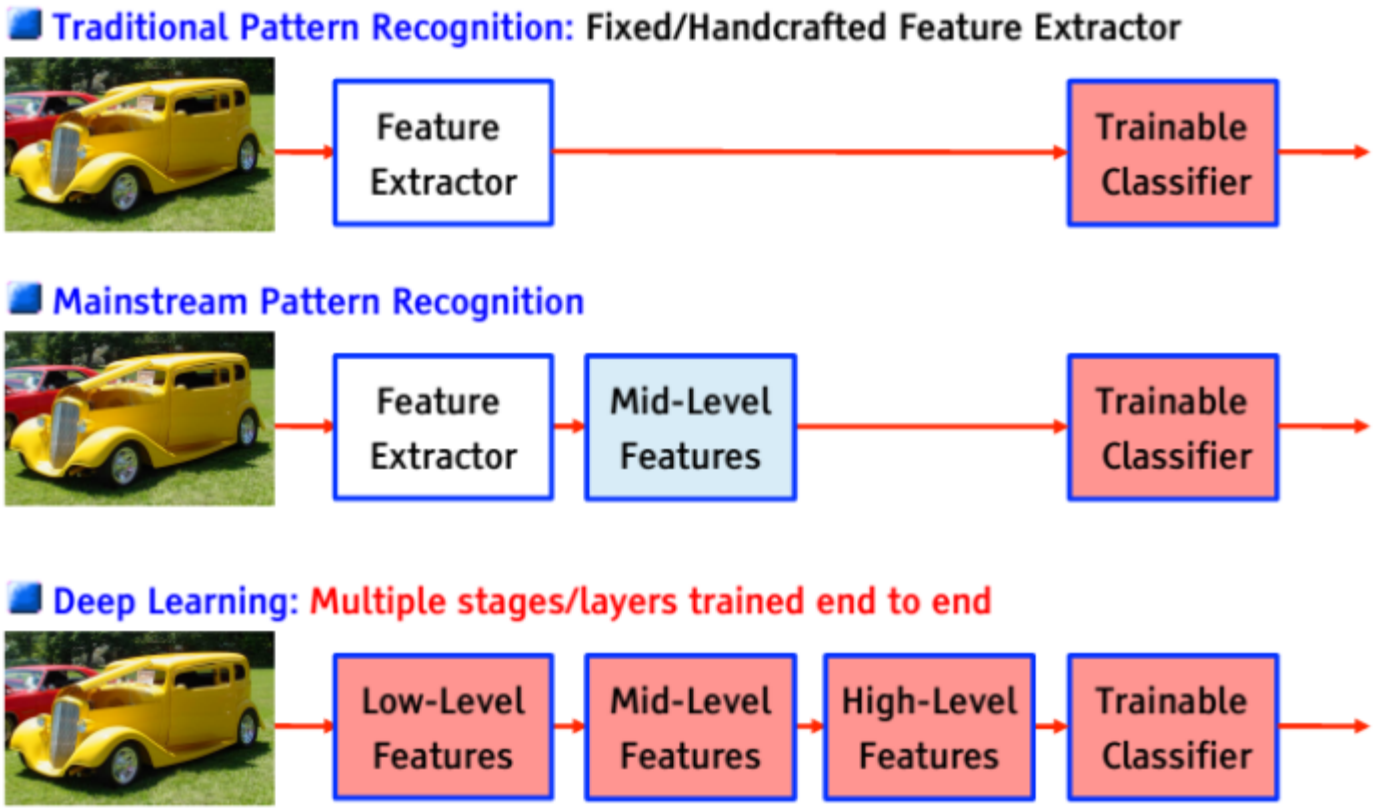
KONVOLÚCIÓS NEURÁLIS HÁLÓZAT (CNN)

Motiváció

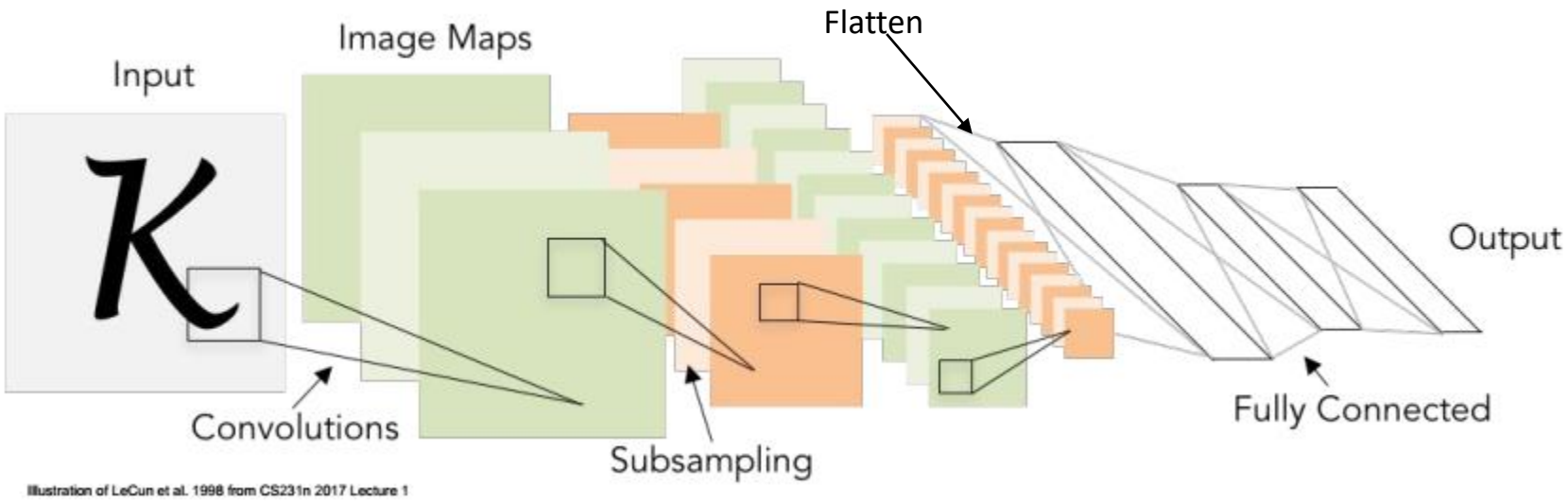
- Alkalmazási feladatai:
  - Pixel szintű szegmentáció
  - Kép osztályozása, rajta szereplő objektum lokalizációja
  - Objektumok detektálása
  - Objektumok pixel szintű szegmentálása
- Klasszikus megközelítés (CNN-ek előtt):
  - Hibrid intelligens, szakértői rendszerekkel
  - Diszkriminatív szűrések (ROI / osztályozáshoz szükséges jellemzők kiemeléséhez) tervezése nehéz, esetleges
- Jelentősen jobb pontosság, pár buktatóval

Motiváció

- Képi objektumdetektáló megközelítések:



Tipikus felépítés



Konvolúciós réteg

- Motiváció:
  - Klasszikus képfeldolgozásnál alapművelet a konvolúció:
    - Zajszűrésre
    - Alacsony képi jellemzők kiemelésére (pl. élek, sarokpontok)
    - Összetett objektumok kiemelése (pl. illesztett szűrés)
  - Konvolúció ≡ eltolás invariáns, lineáris művelet:
    - Egy objektum képi megjelenése független a helyzetétől
    - Ezért egy objektumot mindenhol u.ú. keresünk a képen
  - Teljesen összekötött hálókhoz képest jóval kevesebb szabad paraméter

Konvolúciós réteg

- Definíció:

$$o_{(z)}^{(l)}(x,y) = \sum_{c} \sum_{(a,b)} y'^{(l-1)}_{(c)}(x \cdot s - a, y \cdot s - b) \cdot w^{(l)}(a,b,c,z) + bias_{(z)}^{(l)}$$

  - $o_{(z)}^{(l)}$: *l*-edik réteg *z*-edik neuronjának súlyozott összegképe (rövidebben *l*-edik réteg *z*-edik csatornája), pixelenként erre hívódik majd meg a nemlinearitás
  - $y'^{(l-1)}_{(c)}$: *l-1.* réteg *c.* csatornájának paddelt változata (szokás aktivációs térképnek is hívni)
  - Tanult paraméterek:
    - $w^{(l)}(a,b,c,z)$: *l.* réteg súlya a *c.* és a *z.* csatorna között
    - $bias_{(z)}^{(l)}$: *l.* réteg *z.* csatornájának eltolása

Konvolúciós réteg

- Definíció:

$$o_{(z)}^{(l)}(x,y) = \sum_{c} \sum_{(a,b)} y'^{(l-1)}_{(c)}(x \cdot s - a, y \cdot s - b) \cdot w^{(l)}(a,b,c,z) + bias_{(z)}^{(l)}$$

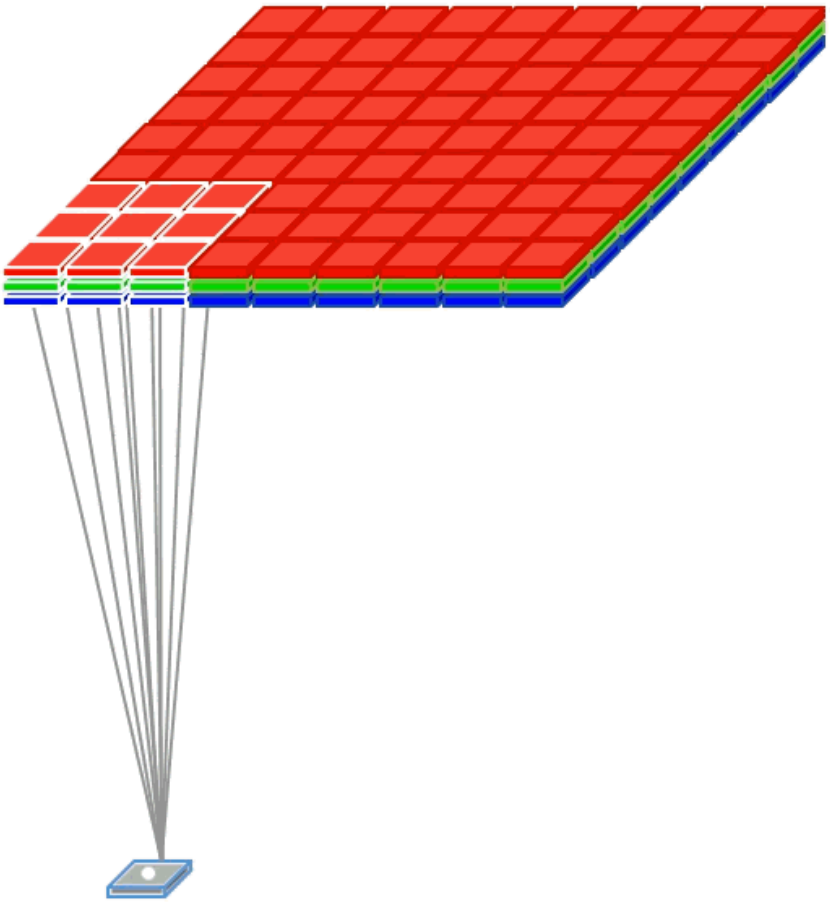
Helyett gyakorlatilag mindig korreláció történik:

$$o_{(z)}^{(l)}(x,y) = \sum_{c} \sum_{(a,b)} y'^{(l-1)}_{(c)}(x \cdot s + a, y \cdot s + b) \cdot w^{(l)}(a,b,c,z) + bias_{(z)}^{(l)}$$

- hibás elnevezés – képfeldolgozásban mindkét műveletet a szűrés névvel illetjük.
- Kedvez viszont a módosítás a művelet vizuális értelmezésének (csúszó ablakos skalárszorzat)

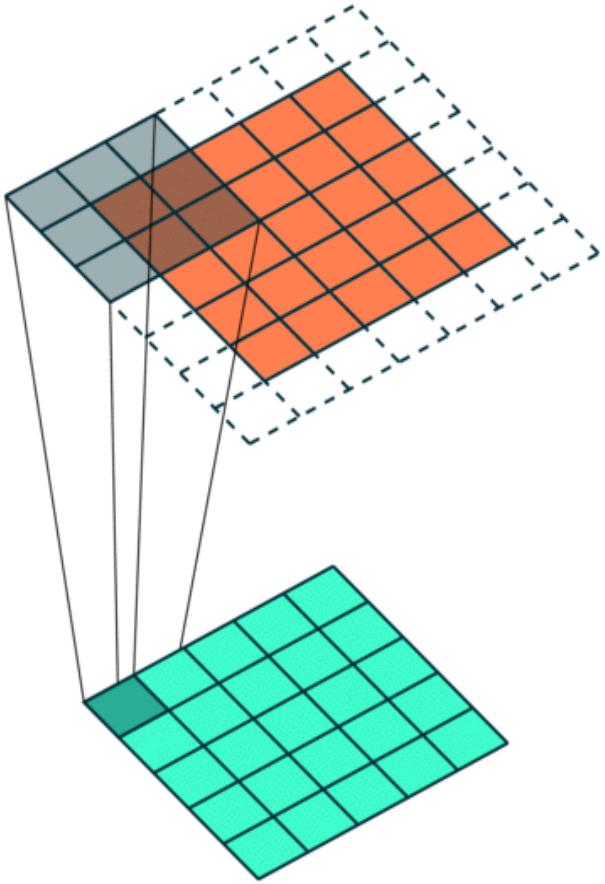
Konvolúciós réteg

- Szemléltetés:

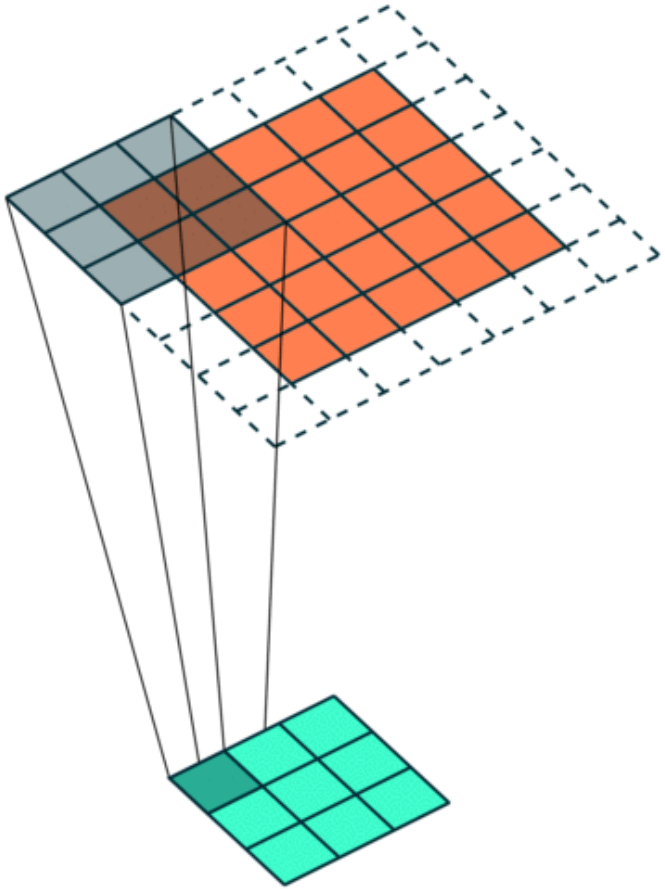


Konvolúciós réteg

- Lépésköz(stride) paraméter hatása:

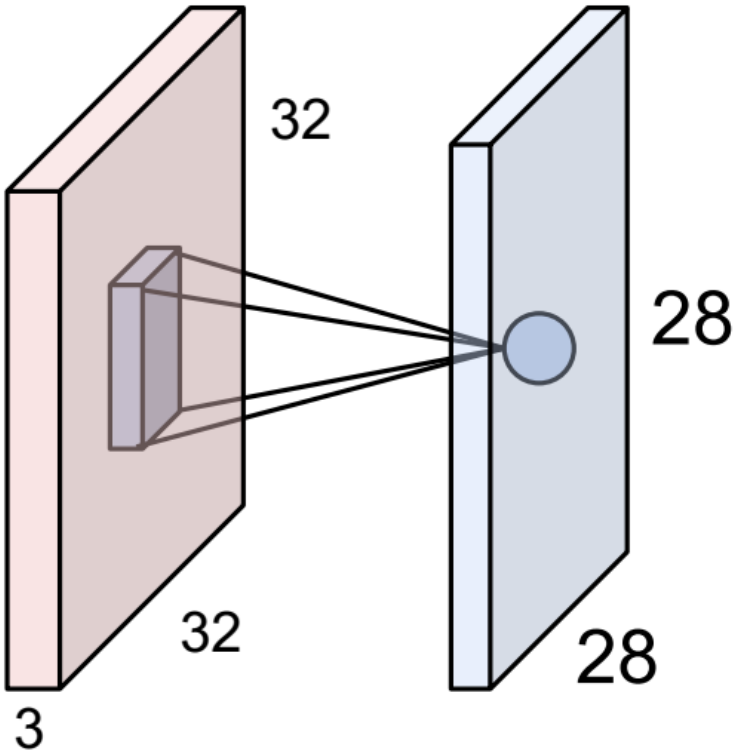


$s = 1$



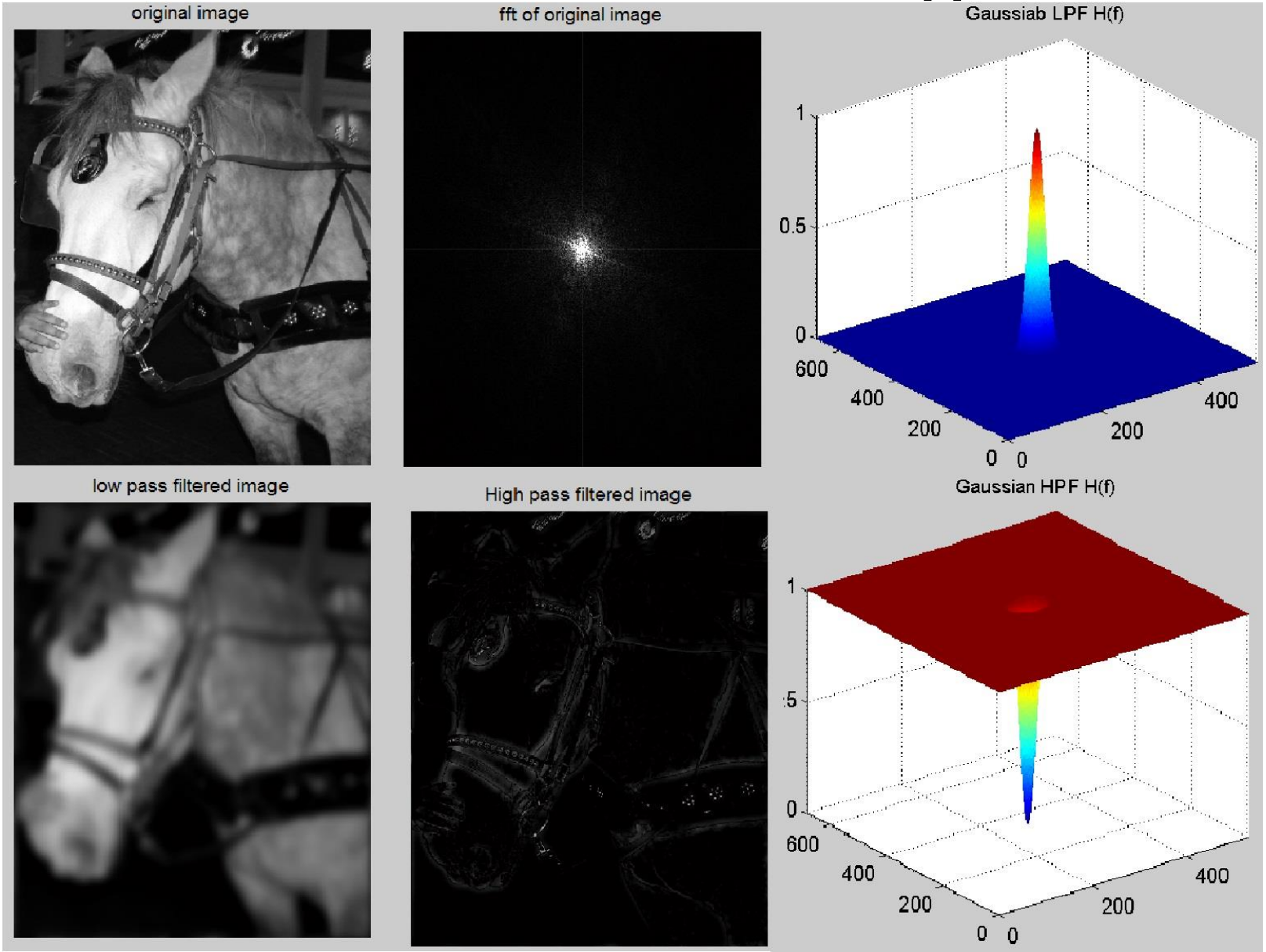
$s = 2$

Konvolúciós réteg



- Neuron érzékenységi mezője: a bemeneti kép azon része, melytől függ a kimeneti értéke
- A példában az aktivációs térkép minden pixele az adott pixel kp.-ú 5×5-ös képrészlettől függ

Konvolúciós réteg

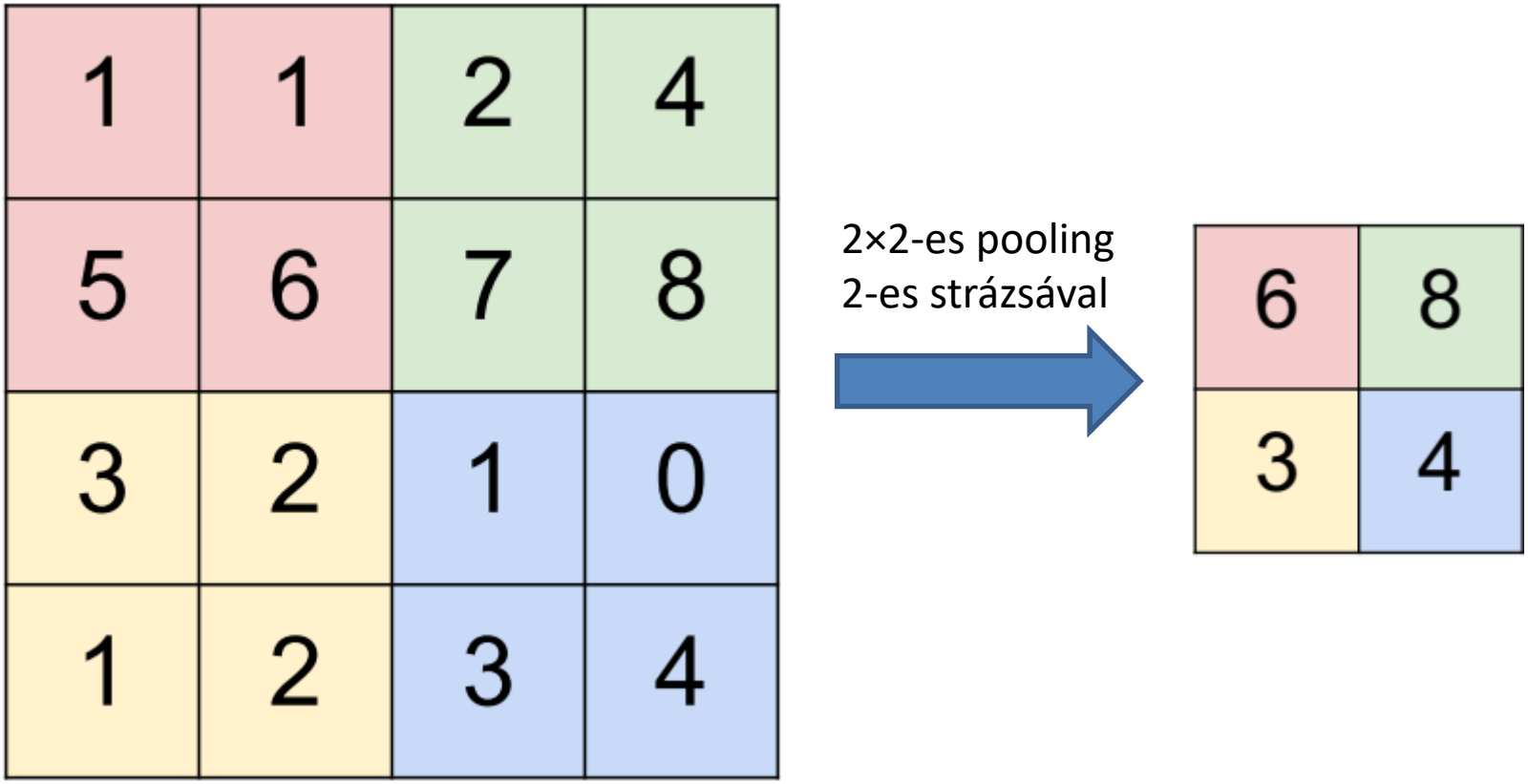


Pooling réteg

- Motiváció:
  - Csatornák felbontásának csökkentése
  - Utána következő réteg szűréseinek érzékenységi területének növelése („kisebb szűrők is eleget látnak”)
- Lényegében mintavételezi a képet:
  - *Avarage pooling*: lineáris interpolációval (textúra, stb. a régióra jellemző, gyakori minták kiemelését segíti elő).
  - *Max pooling*: olyan jellemzők kiemelését segíti, melyek csak kis számban fordulnak elő (pl. élek, sarokpontok, stb.)
- „Katasztrófa, hogy ilyen hatásosan működik”

Pooling réteg

- Max Pooling példa:

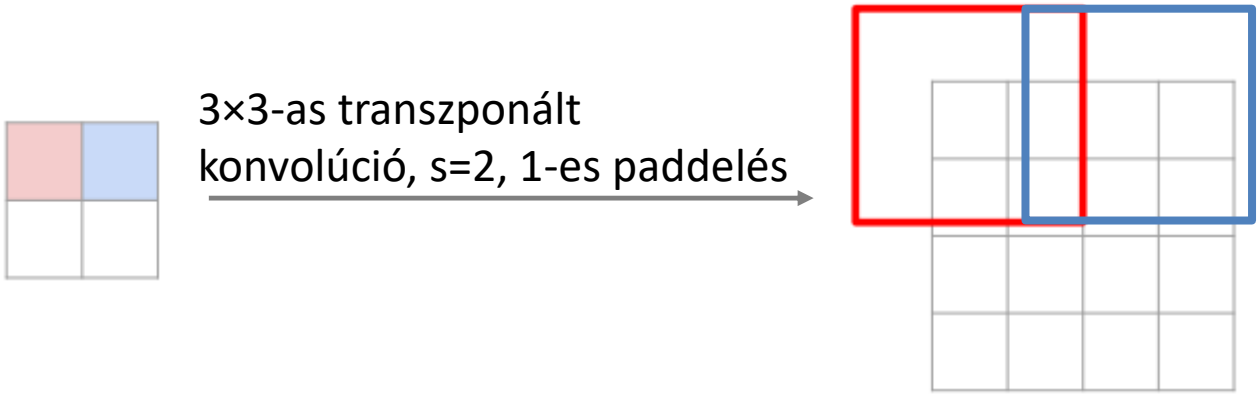


Transzponált konvolúciós réteg

- Transzponált konvolúció:
  - Konvolúció leírható Toeplitz blokkokból felépülő mátrixszal szorzásként
  - Transzp. konv.: Ezen mátrixok transzponáltjával való szorzás

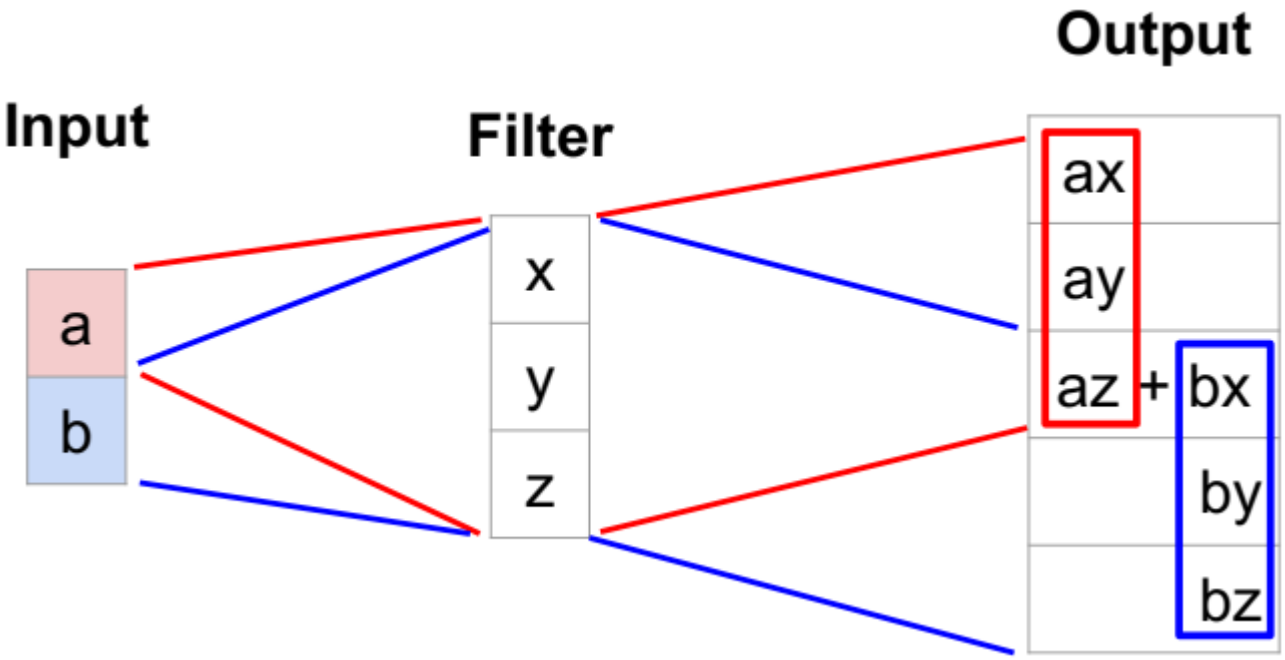
$$o_{(z)}^{(l)}(x,y) = \sum_{c} \sum_{(u,v)} y_{(c)}^{(l-1)}(u,v) \cdot w^{(l)}(\mathrm{x} - \mathrm{u} \cdot \mathrm{s}, y - u \cdot s, c, z) + bias_{(z)}^{(l)}$$

- Szemléltetése:



Transzponált konvolúció

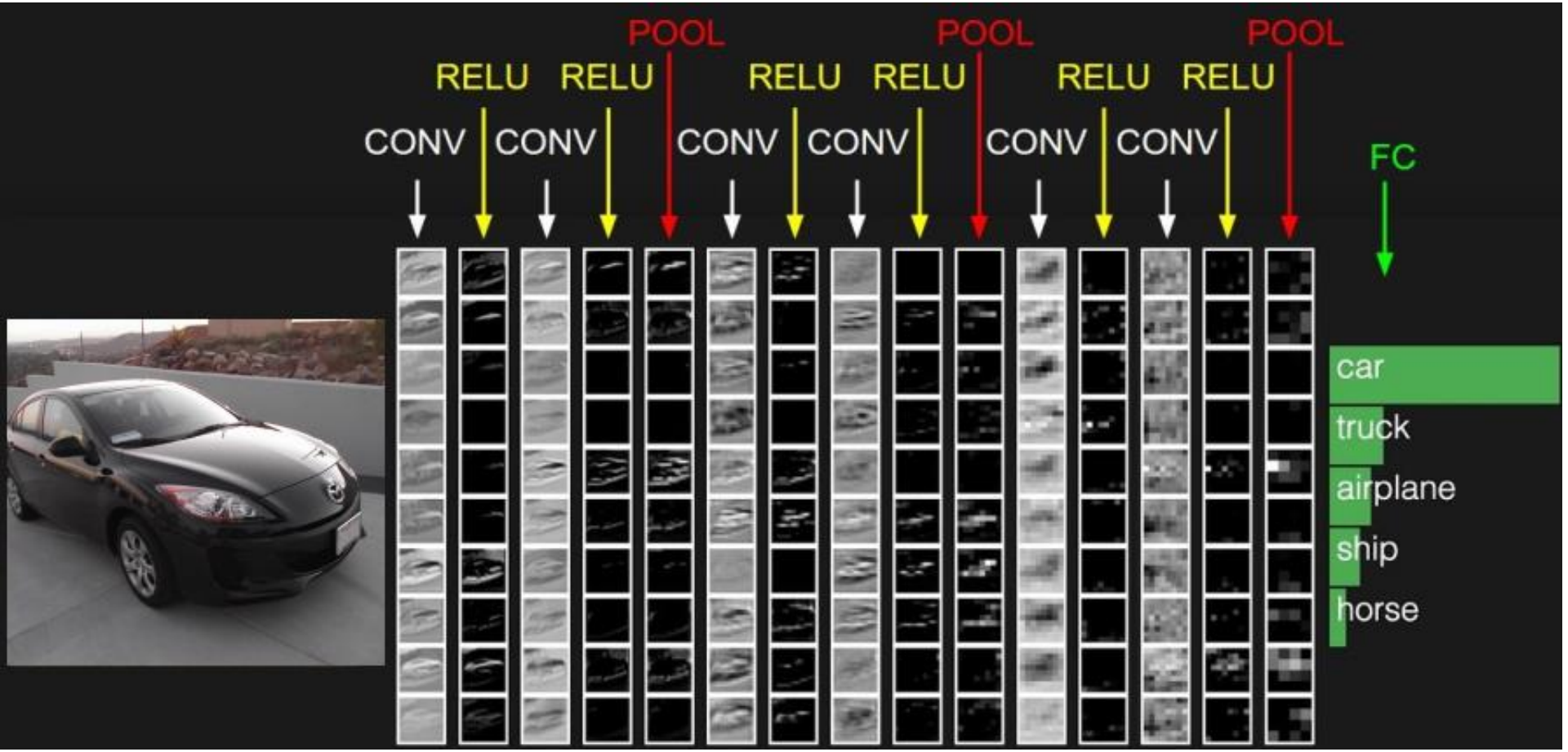
- 1D példa:



Sorosító réteg

- Angol elnevezése: Flatten
- Feladata többdimenziós jelek 1D-sé alakítása:
  - Fully Connected rétegek bemenetén szokták alkalmazni
- Nem tartalmaz tanítható paramétert
- Alkalmazása kimenet közelében indokolt:
  - Fully connected rétegekhez transzformáljak a konvolúciós rétegek csatornáit

Működés szemléltetése



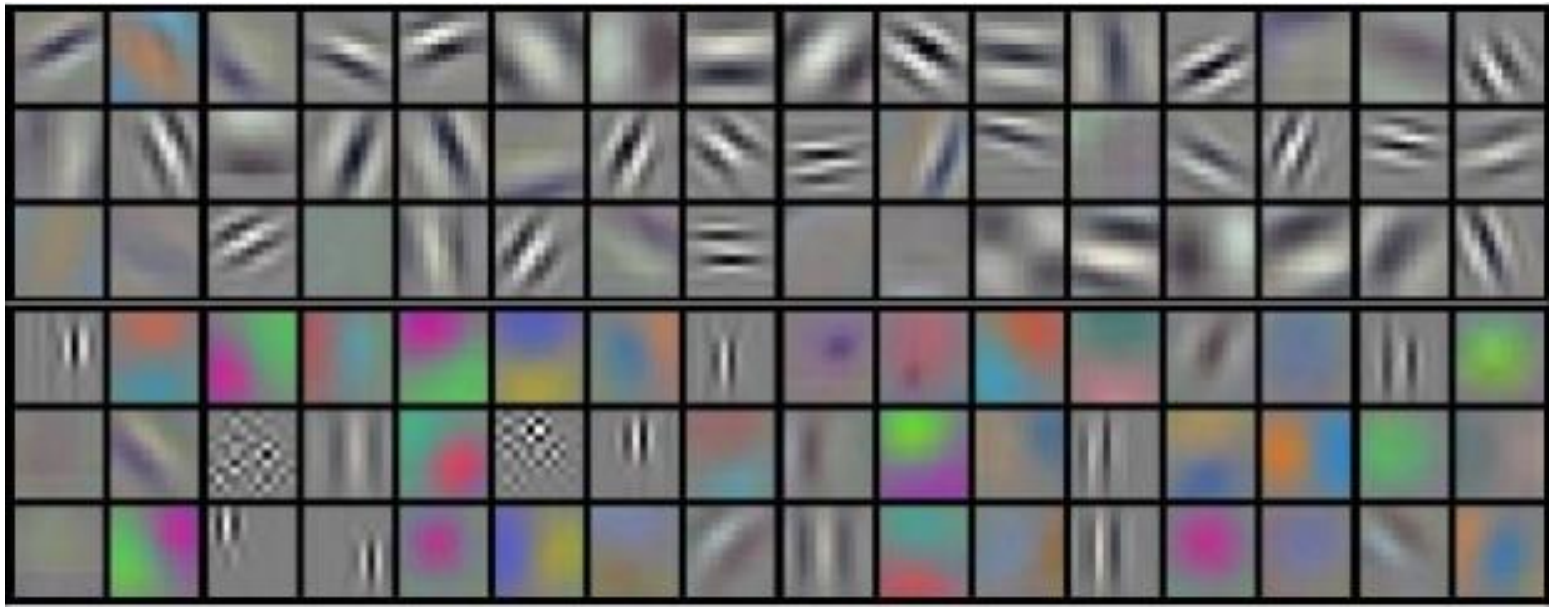
Működés értelmezése

- Sok réteg miatt nagyjából lehetetlen:
  - Pedig a konvolúciók kompozíciója is egy konvolúció
  - Nem linearitások, valamint a Maxpool-ok gyakorlatilag követhetetlenné teszik a hálók működését
- Interpretáció lehetőségei:
  - Bemenet utáni első konvolúciós szűrőinek vizualizációja
  - Olyan absztrakt részdomének keresése, melyen belül a háló válasza konstans
  - Aktivációk térképek vizsgálata

    (esetleg olyan bemenetek generálása, melyek egy ilyen térkép valamelyik normáját maximalizálják – Deep Dreaming)

Működés értelmezése

- Bemenethez közeli rétegek alacsony absztrakciós objektumokat keresnek (pl. AlexNet szűrői):



- Kimenethez közelebbi rétegek már összetett objektumokra érzékenyek

Tanítási módszerek

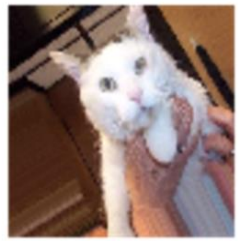
- Konvolúció ellenére is túl sok a paraméter:
  - Konkrét feladat esetén sosincs elég minta
  - Két új módszer: tudás transzfer, és minta generálás
- **Minták generálása – Data augmentation**:
  - Meglévő képekből *újakat generálunk* olyan *véletlenszerű torzítások alkalmazásával*, *melyekre invariáns viselkedést várunk el* a hálótól:
    - Pl. Eltolás, forgatás, tükrözés, nyírás, perspektív transzf.
    - Pl. megvilágítás változásának szimulálása
    - Pl. képzaj hozzáadása
  - Mivel a hálót invariáns viselkedésre tanítja, ezért *javul az általánosító képesség* is!

Minta generálás példa

- Bemenet: 













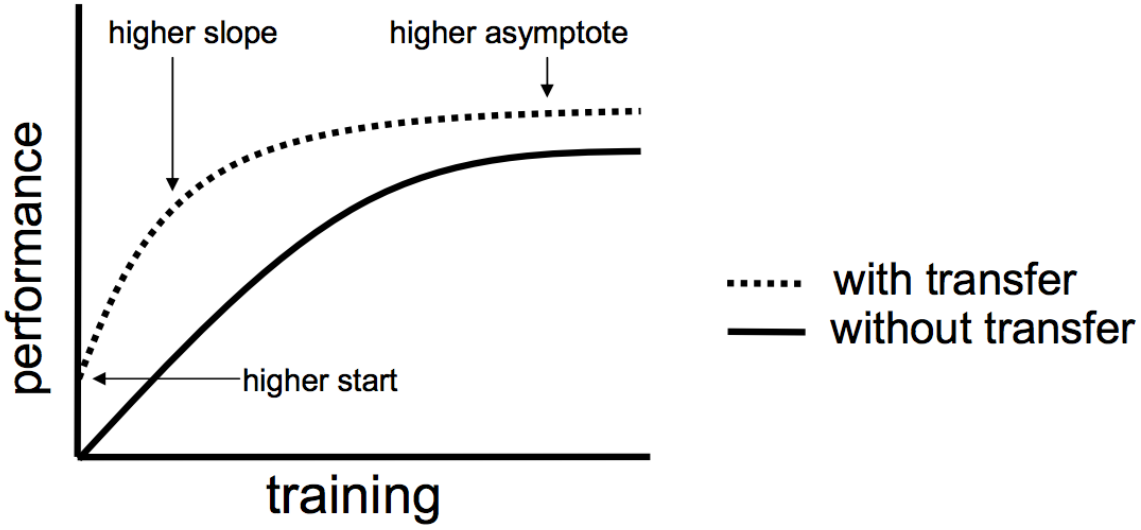


Tudás transzfer

- Konvolúciós hálók *bemenethez közel* olyan *jellemzőket* emelnek ki, melyek *nem feladat specifikus*ak:
  - Tipikusan élek, sarokpontok, általános textúra (pl. Gábor wavelet szűrések), magas frekvenciás kiemelés, stb.
- Csak a szükséges rétegeket tanítsuk újra:
  - *Transfer learning*: egy más (jóval nagyobb mintaszámú) példán betanított háló első N. rétegét befagyasztjuk, majd arra ültetett hálót tanítjuk csak
  - *Fine tuning*: iteratívan az alsóbb rétegek befagyasztásával növelve a kimenethez közeli, tanított rétegek számát tanítunk

Transfer Learning

- Előre tanított hálót jellemzők kiemelésére használjuk, majd annak a kimenetét kezeljük bemenetként:
  - Nagy hangsúly jut ezeknek, pár dia múlva nézünk párat
- Jelentősen jobb tanulás:
  - Főleg ha elegendően nagy a hálónk, és komplex a probléma



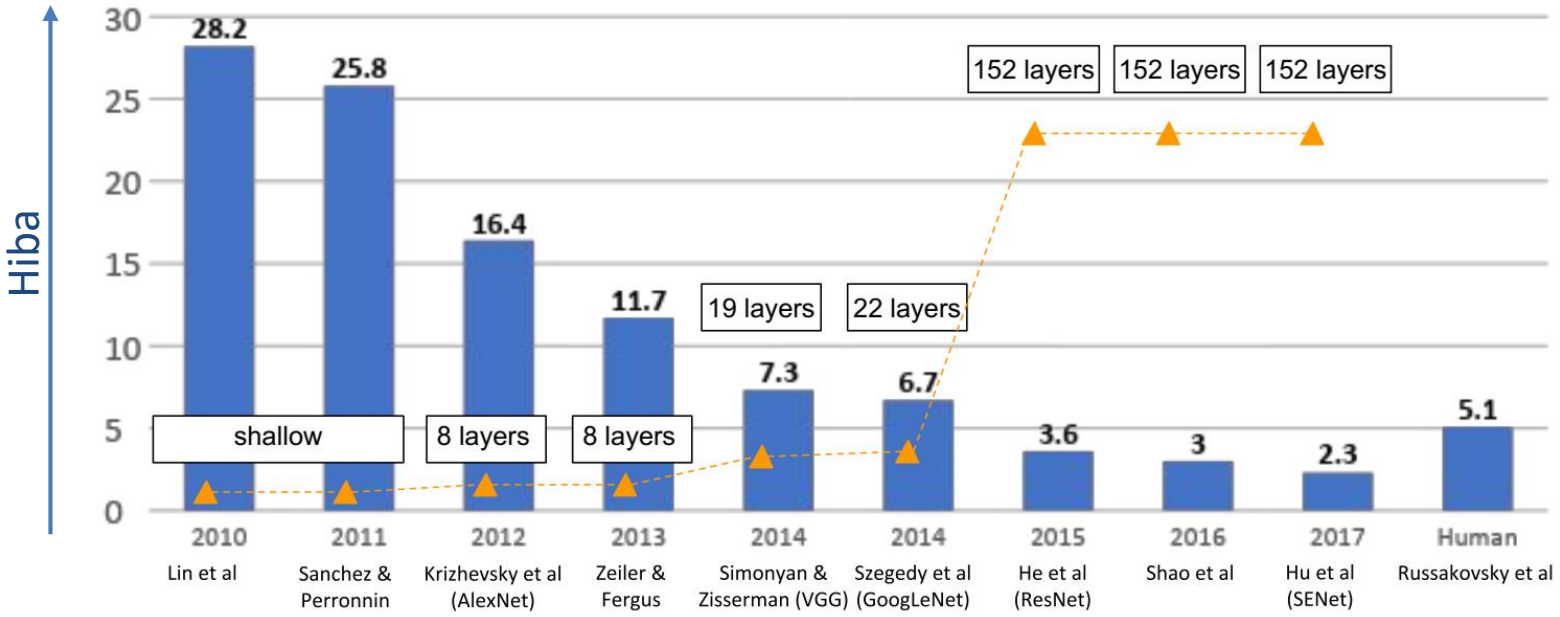
Transfer learning

- Általános ajánlás:

	Hasonló mintakészlet	Erősen eltérő minták
Kevés minta	*Transfer Learning*: kimenethez közeli aktivációk osztályozása	*Transfer Learning*: Bemenet közeli aktivációk osztályozása
Sok minta	*Fine tuning*: Elég csak a kimenet közeli rétegeket finomhangolni	*Fine tuning:* Finomhangolás a bemenet közelében is szükséges

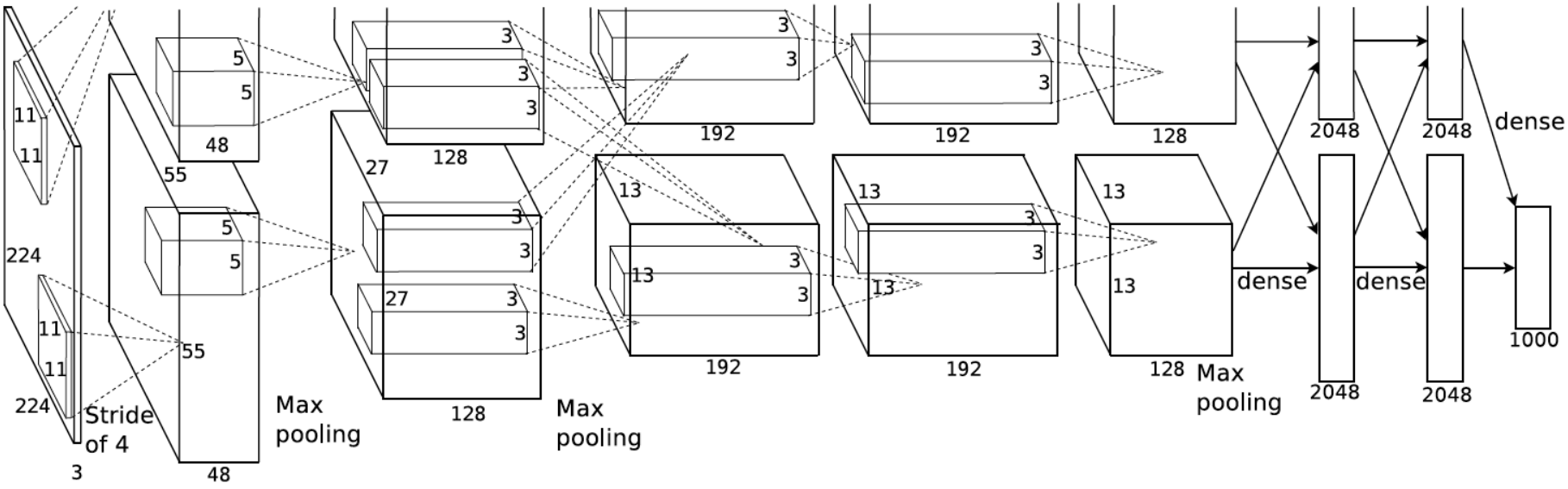
CNN architektúrák

- ImageNet Large Scale Visual Recognition Challange:



AlexNet (2012)

- Kevés réteg, ezért nagy kernelek (pl. 11 × 11)
- ~60 millió súly
- Sok augmentációs módszert alkalmazott
- Két GPU-s végrehajtásra bazírozott arch.

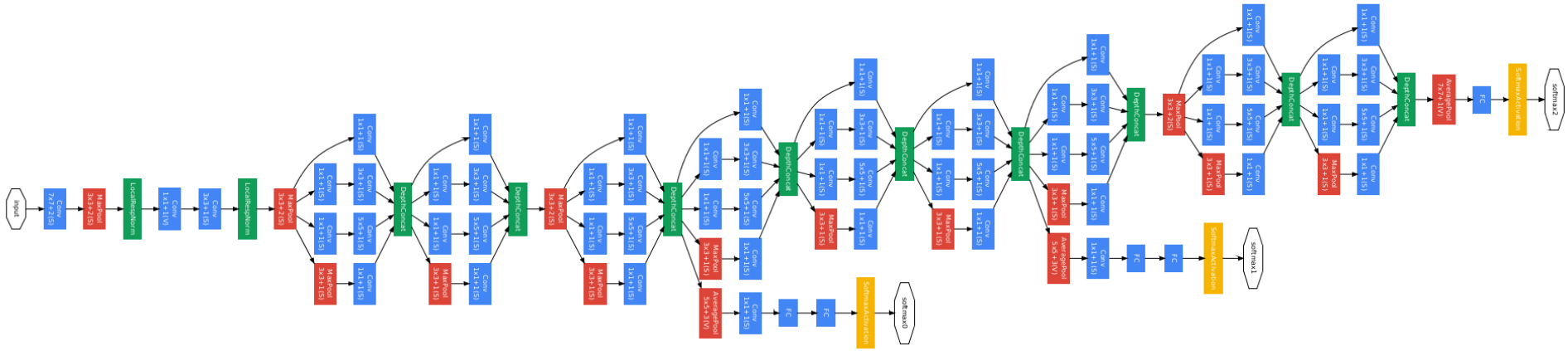


VGG (2014)

- 16-19 réteg, 3×3-as kernelek
- 2×2-es MaxPooling
- ~140 millió súly
- 256 × 256-os képekre 100 MB RAM
- Transfer learning: ált. utolsó előtti FC kimenetén

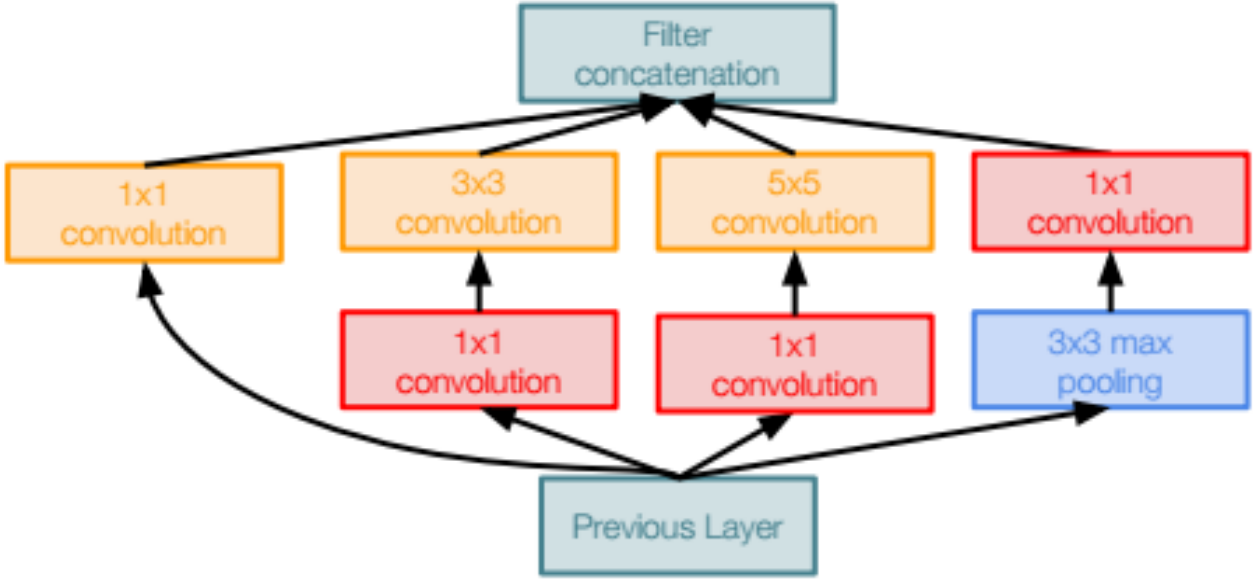
GoogleNet – Inception (2014)

- 22 réteg, de ~5 millió súly
- Kimenet több mélységből számítva, ezeken u.ú. képződik a hiba (cél a hiba visszaterj. rövidítése)
  - Éles használatban csak az utolsó kimenetet szokták figyelni (esetleg átlagolják a kimeneteket – Ensemble)
- Új strukturális elem – inception modul



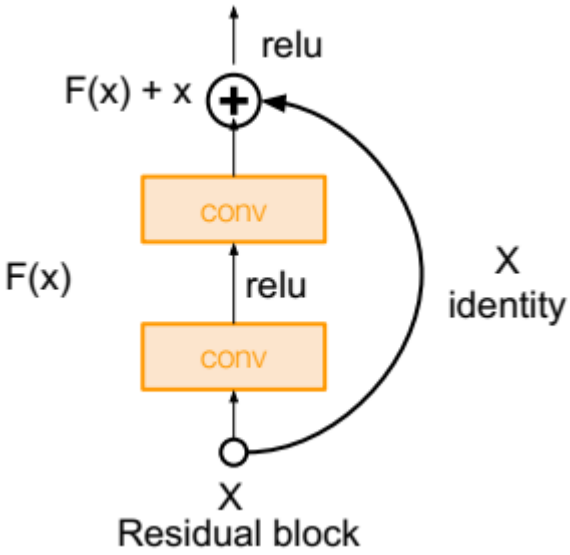
Googlenet – Inception modul

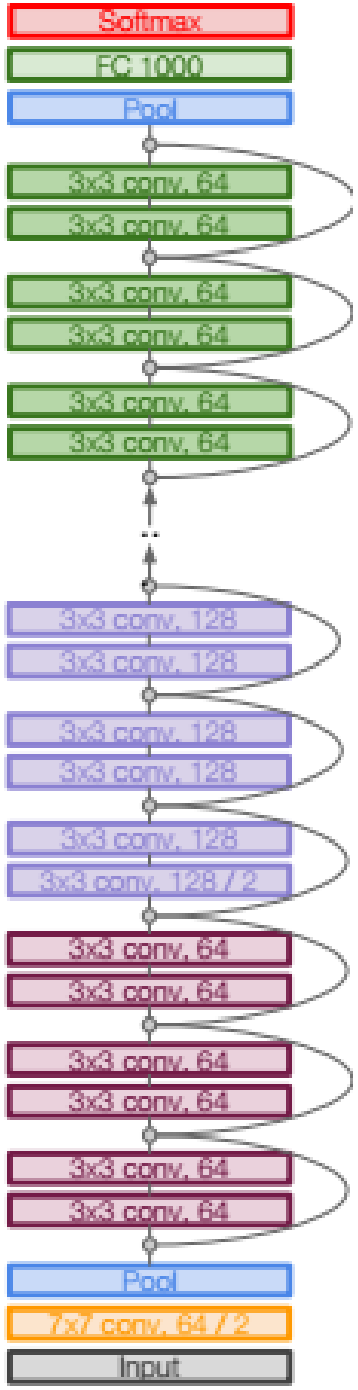
- Motiváció : előre nem tudjuk, hogy mekkora kernel lesz jó, ezért legyen egy szinten több, különböző méretű.
- 1 × 1-es konvolúciók célja a csatornák számának (így a RAM, PU igény) csökkentése (kivéve a narancssárga elemet)
- Konkatenáció, mint új elem



Resnet (2015)

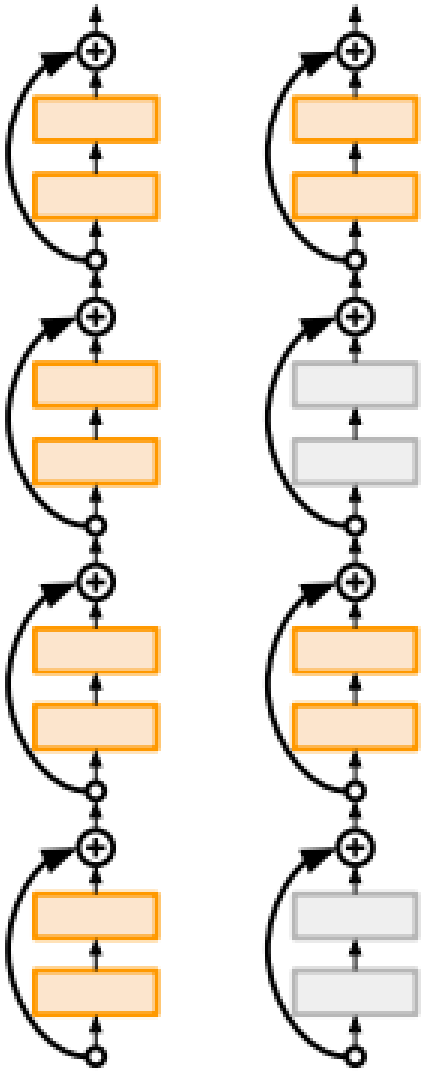
- 152 réteg, mindegyik konvolúció 3×3-as
- Skipp connection, mint új elem
  - Cél itt is az optimalizációs problémák megkerülése
  - Identikus leképzés + különbség dekompozíció
  - *Nem kell az identikus leképzést (ID) külön megtanulni !*
  - *Amúgy is minél több réteg van, az ID annál közelebb van az optimumhoz*





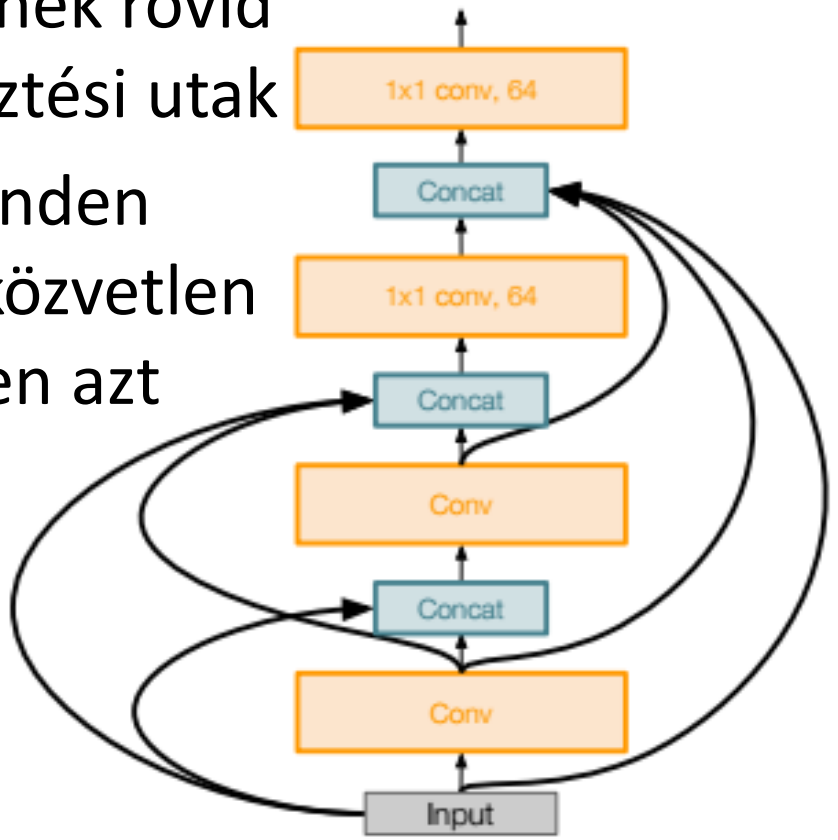
Stochastic Depth

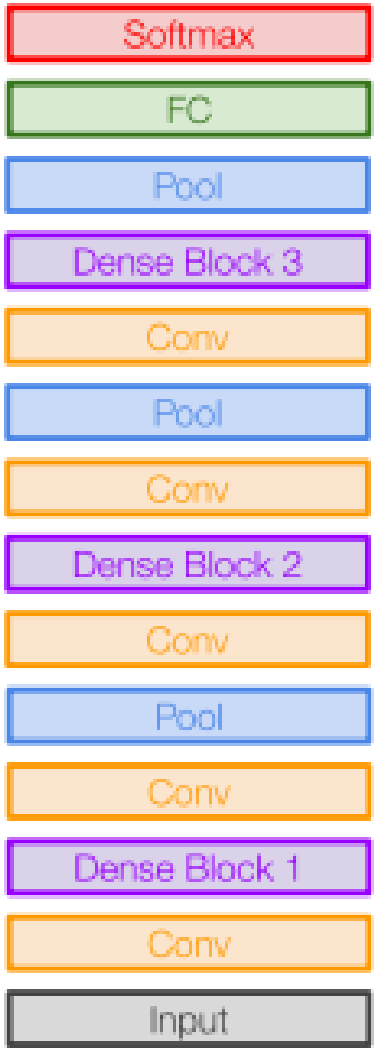
- Motiváció: egyszerűbb a hiba vissza-terjesztése, ha sekélyek a hálók
- *Dropout adaptálása*: tanítás során teljes blokkokat hagyigálunk ki:
  - Kidobott blokk helyett ID leképzés
  - Teszt időben teljes hálót nézzük / MC Dropout mintájára MC SD (bizonytalanság minősítés)



DenseNet (2017)

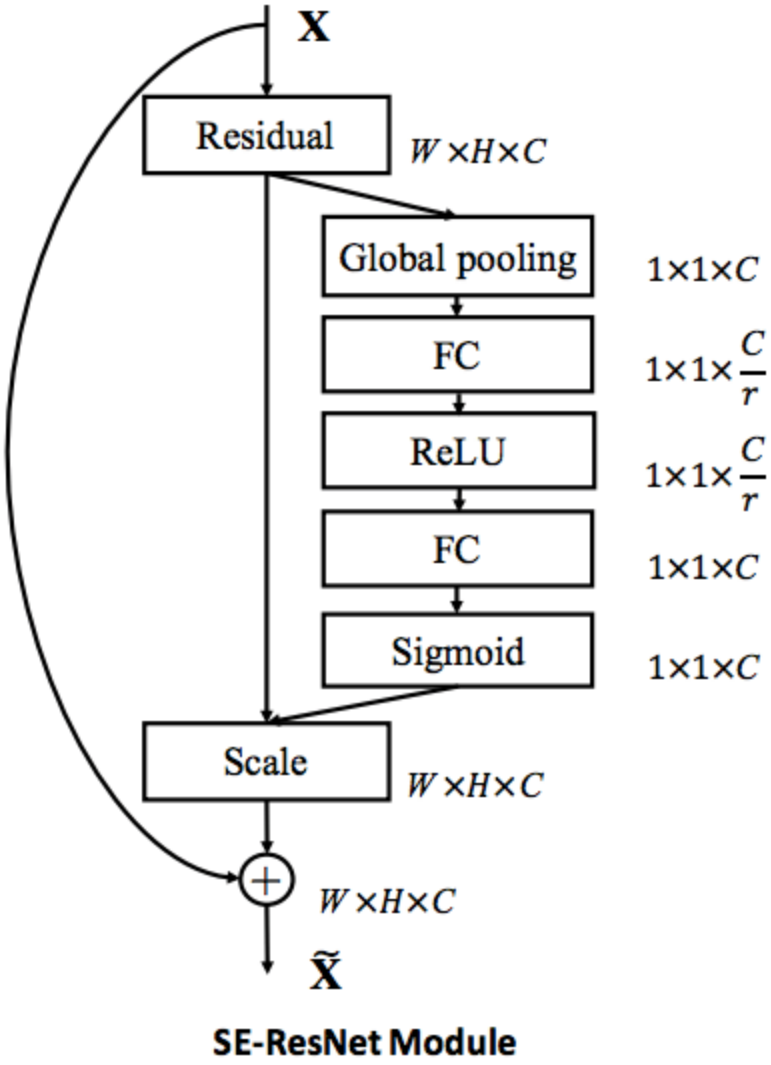
- Motiváció: legyenek rövid hiba-visszaterjesztési utak
- Blokkon belül minden réteg kimenete közvetlen bemenete minden azt követő rétegnek
- „Feature reuse”



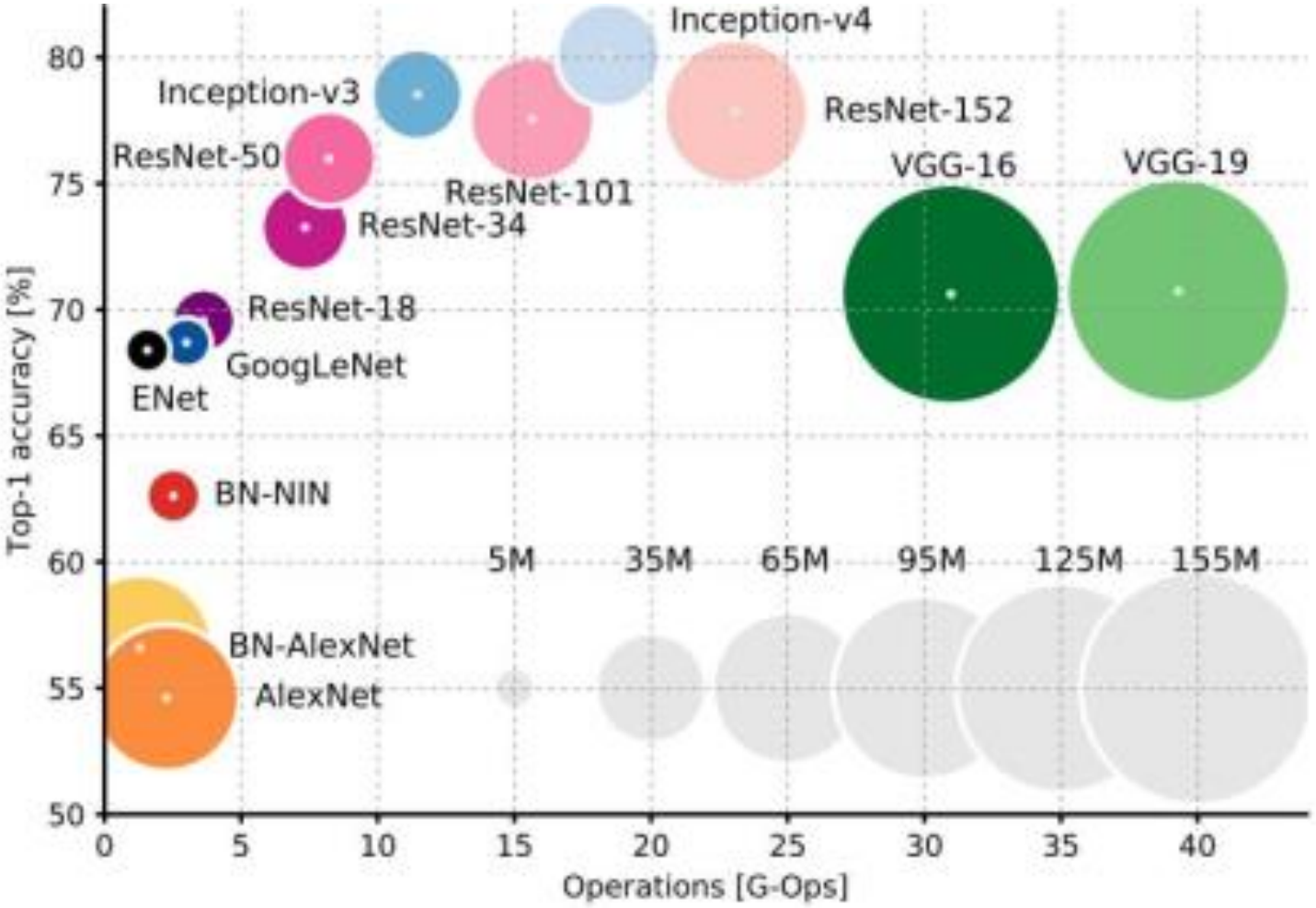


Squeeze and Excitation Networks (SENet) (2017) (*)

- Aktivációktól függően újrasúlyozza a konvolúciós csatornákat.
- Az újrasúlyozást egy két rétegű MLP végzi
- Látványos javulás: SEResNet-50 ≈ ResNet 152



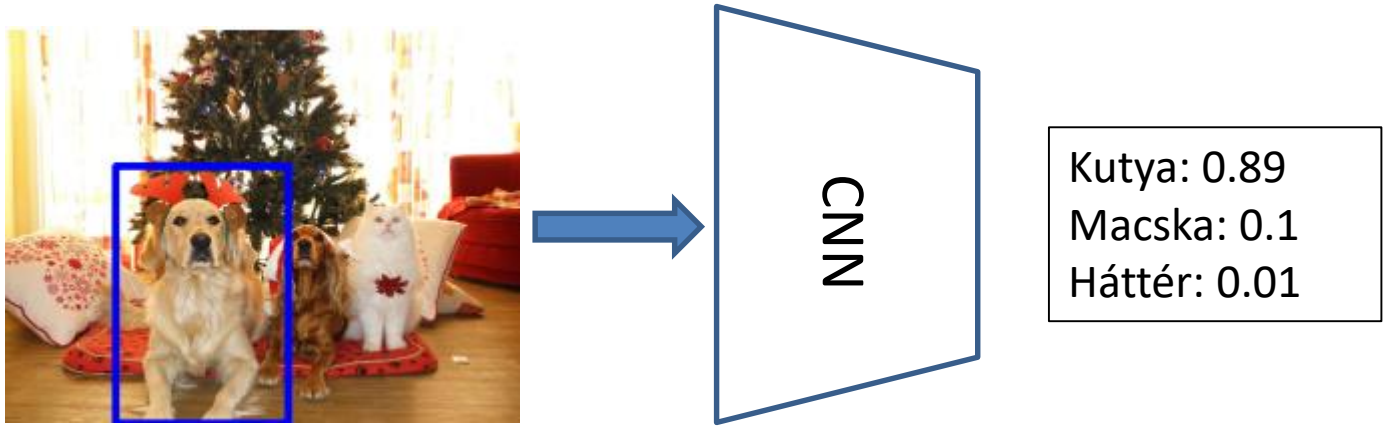
Hálók komplexitása és pontossága



OBJEKTUMOK KIEMELÉSE CNN-EL

Csúszó ablakos detektálás

- Obj. Detektálás direkt redukálása osztályozásra:
  - Különböző méretű (skálájú, alakú) téglalapokat tol végig a vizsgálandó képen, és az így kivágott részeket osztályozza
  - Osztályok: felismerendő obj. típusok + háttér
  - Előnye: kis munka, hátránya: nagyon lassú, vagy pontatlan

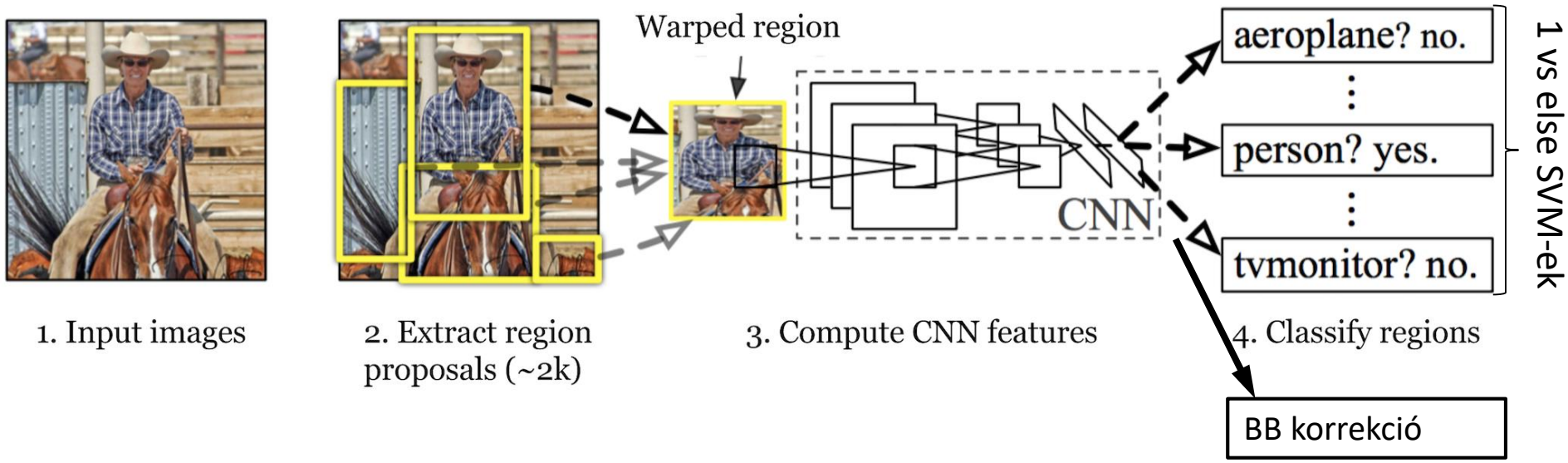


Régió alapú CNN-ek

- Klasszikus objektum detektálási séma:
  1. ROI-k kiemelése (olyan képrész, mely „fontos”)
  2. Kiemelt ROI-k taksálása
- Megvalósításai (meta architektúrák):
  - ROI detektálását kívülről váró eljárások:
    - R-CNN, Fast R-CNN
  - ROI detektálását is elvégző eljárások:
    - Faster R-CNN
    - Region based fully convolutional NN (R-FCN)
  - ROI-kat nem kereső (és bemenetén sem kérő) eljárások:
    - You Only Look Once (Yolo), Single Shot Detection (SSD), RetinaNet

R-CNN

- Bemenete: kivágott és átméretezett képrészlet
  - Szakértői rendszerrel végzendő, épp ezért sokszor nehéz feladat (pl. Selective Search – glob. szegm.)
- Kimenete: képrészlet osztályozása + pozíciójának korrekciója

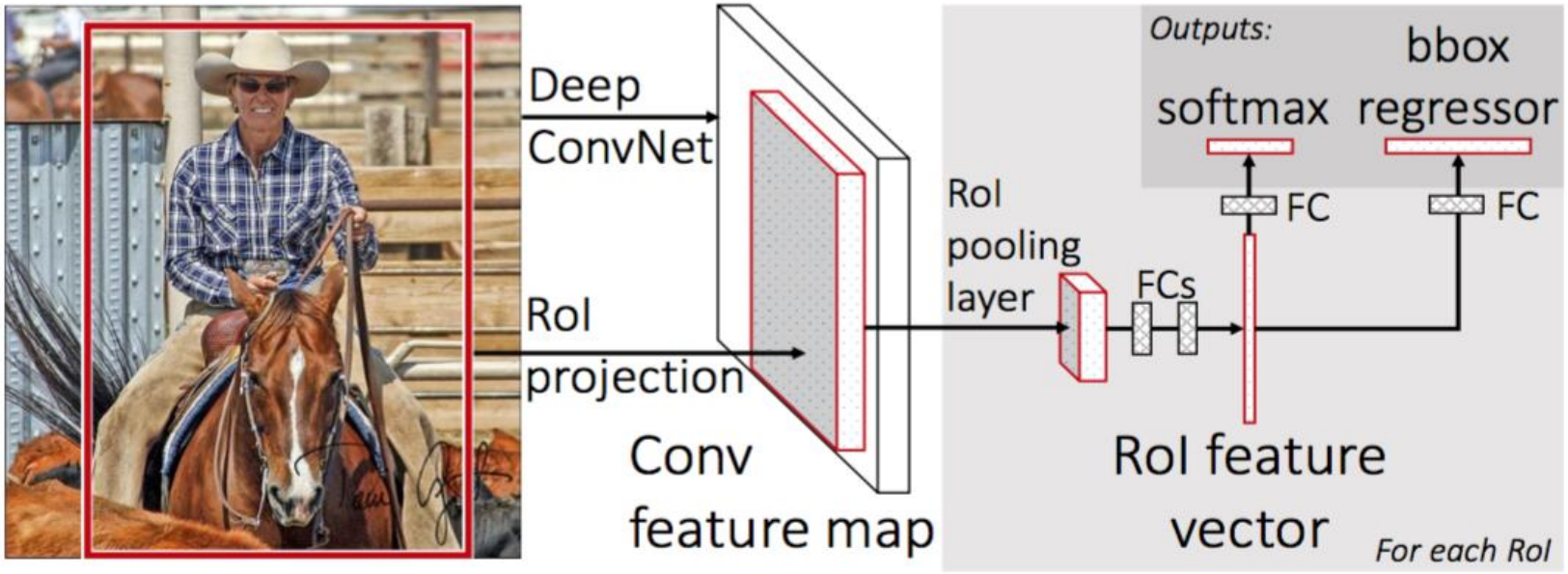


R-CNN

- Gyakorlati alkalmazást tekintve túl lassú:
  - Elegendően nagy pontossághoz sok ROI kell
  - Mindegyik ROI-t végig kell pofozni a teljes hálón
    - Miközben ezek gyakran átlapolódnak, ezért u.a. a képrészletetek alapján többször is számolni kényszerülünk
- Ötlet:
  - *A teljes képet együtt vizsgáljuk egy mély FC-CNN-el, és az abból kinyert jellemzőket vizsgáljuk egy sekélyebb NN-el*
  - Ez a Fast R-CNN alapelve

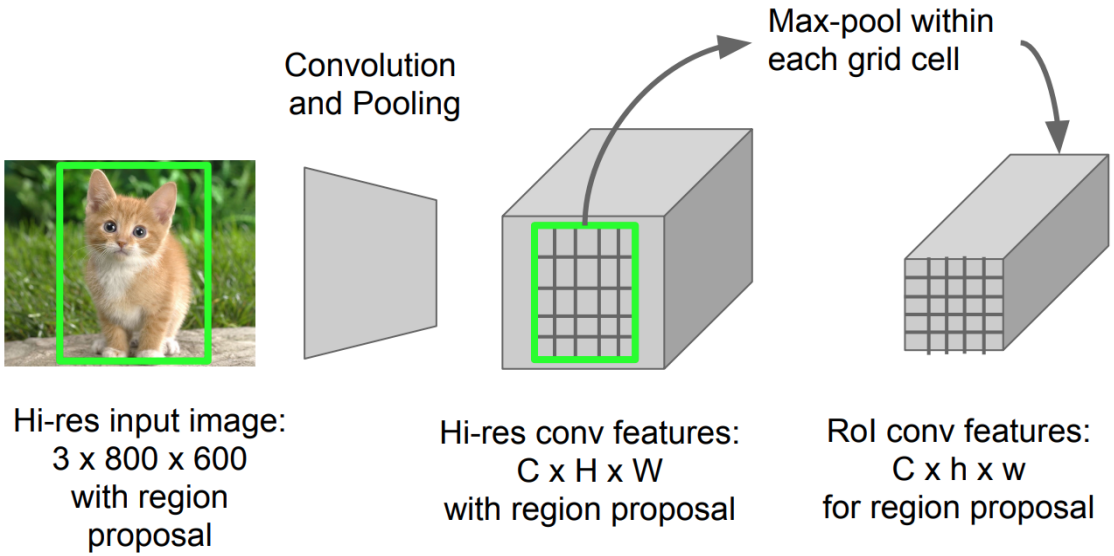
Fast R-CNN

- Új réteg: RoI Pooling:
  - Bemenetei aktivációs térképek, valamint a ROI koordinátái
  - Kimenet: az aktivációs térképek ROI-hoz tartozó részének 7×7 pixelesre átméretezett változata (Max-pool)



Fast R-CNN

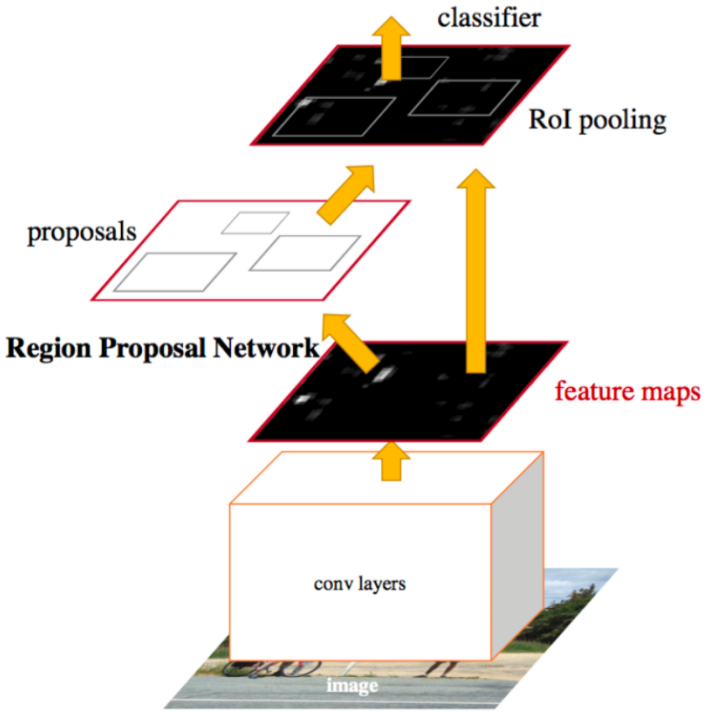
- ROI pooling háló:

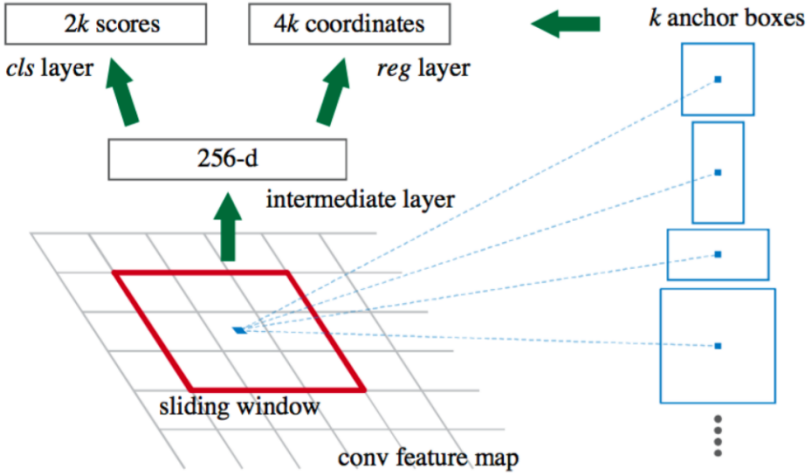


- Gyorsabb a számított jellemzők újra használása miatt
  - Vizsgált ROI-k számának korlátozásával munkapont jelölhető ki
- De még mindig kell bele szakértői ROI kiemelő
  - Ezt fogja átvállalni a Faster R-CNN

Faster R-CNN

- Új elem: Region Proposal network
  - Előre definiált régiókat minősít a szerint, hogy ROI-e
  - U.a. részháló válasz alapján dönt, mint a kimeneti osztályozó





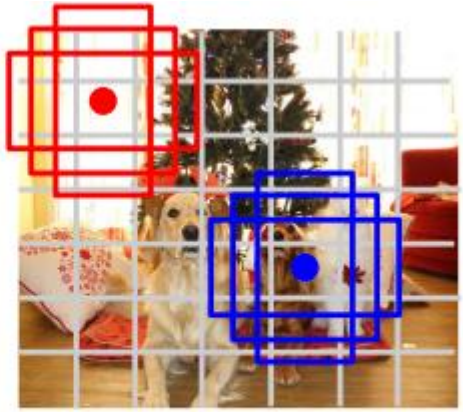
Faster R-CNN

- Tanítása:
  1. ROI-kat előállító hálón képezünk csak hibát
  2. ROI kiemelő kimenete alapján tanítjuk a ROI pooling utáni rétegeket
  3. Fine tuning a ROI kiemelő rétegekre (és az alatta lévő konvolúciós részhálóra)
  4. Fine tuning csak a Fast R-CNN rétegekre
  5. 3.-4. lépés ismétlése
- Legpontosabb meta architektúra volt sokáig:
  - Az eddigiek közül a leggyorsabb is

YOLOv2

- Eltűnik ROI pooling:
  - Képet nem átlapolódó régiókra osztja (7×7), melyekbe előre meghatározott boxokat illeszt
  - Nincs benne FC réteg (jóval kevesebb paraméter)

Input image
3 x H x W



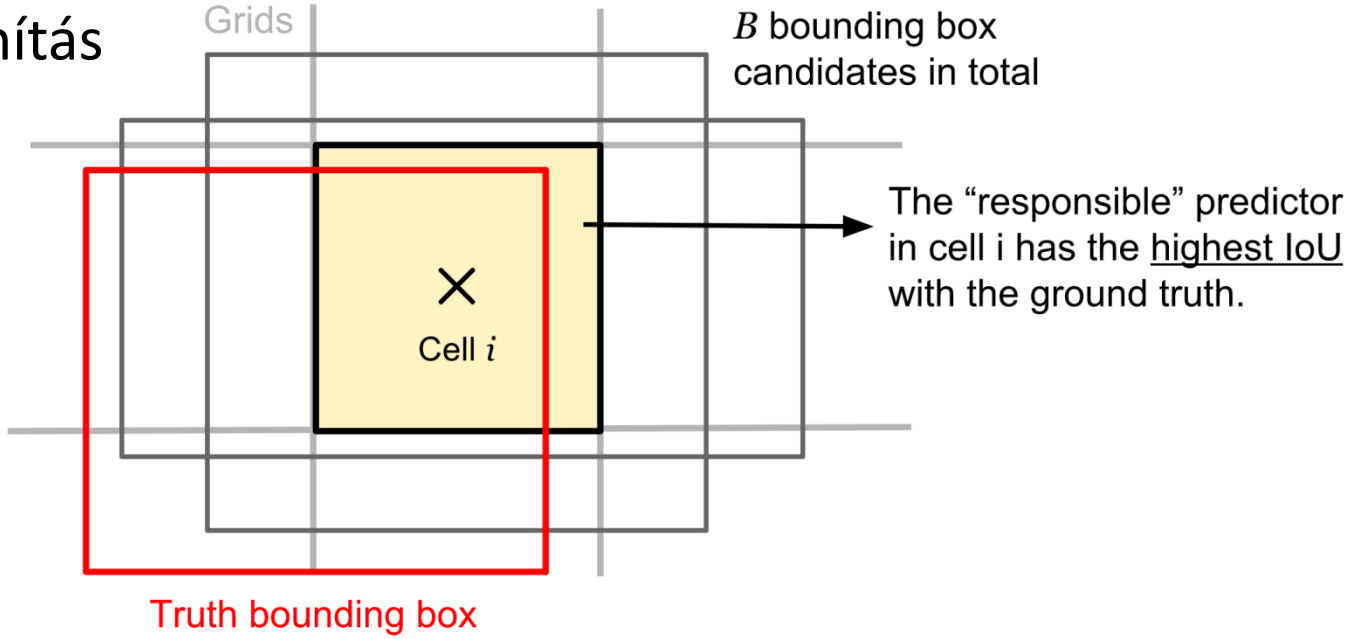
Divide image into grid
7 x 7

- Cellánként B box pozíciója: (dx, dy, dh, dw, obj. konfidencia)
- Cellánként egy osztályba sorolás (C-s softmax)

Kimenet: 7×7×(5B+C)

YOLOv2

- Tanítás:
  1. Boxok konfidenciájára hiba képzés, az alapján tanítás
  2. Objektumokat tartalmazó Boxok regressziós kimenetei (dx,dy,dh,dw) alapján történő tanítás
  3. Objektumokat tartalmazó cellákra a C kategória szerinti tanítás



YOLOv2

$$\lambda_{\text{coord}} \sum_{i=0}^{S^2} \sum_{j=0}^{B} \mathbb{1}_{ij}^{\text{obj}} \left[(x_i - \hat{x}_i)^2 + (y_i - \hat{y}_i)^2 \right]$$

$$+ \lambda_{\text{coord}} \sum_{i=0}^{S^2} \sum_{j=0}^{B} \mathbb{1}_{ij}^{\text{obj}} \left[\left(\sqrt{w_i} - \sqrt{\hat{w}_i} \right)^2 + \left(\sqrt{h_i} - \sqrt{\hat{h}_i} \right)^2 \right]$$

$$+ \sum_{i=0}^{S^2} \sum_{j=0}^{B} \mathbb{1}_{ij}^{\text{obj}} \left(C_i - \hat{C}_i \right)^2$$

$$+ \lambda_{\text{noobj}} \sum_{i=0}^{S^2} \sum_{j=0}^{B} \mathbb{1}_{ij}^{\text{noobj}} \left(C_i - \hat{C}_i \right)^2$$

$$+ \sum_{i=0}^{S^2} \mathbb{1}_{i}^{\text{obj}} \sum_{c \in \text{classes}} \left(p_i(c) - \hat{p}_i(c) \right)^2 \qquad (3)$$

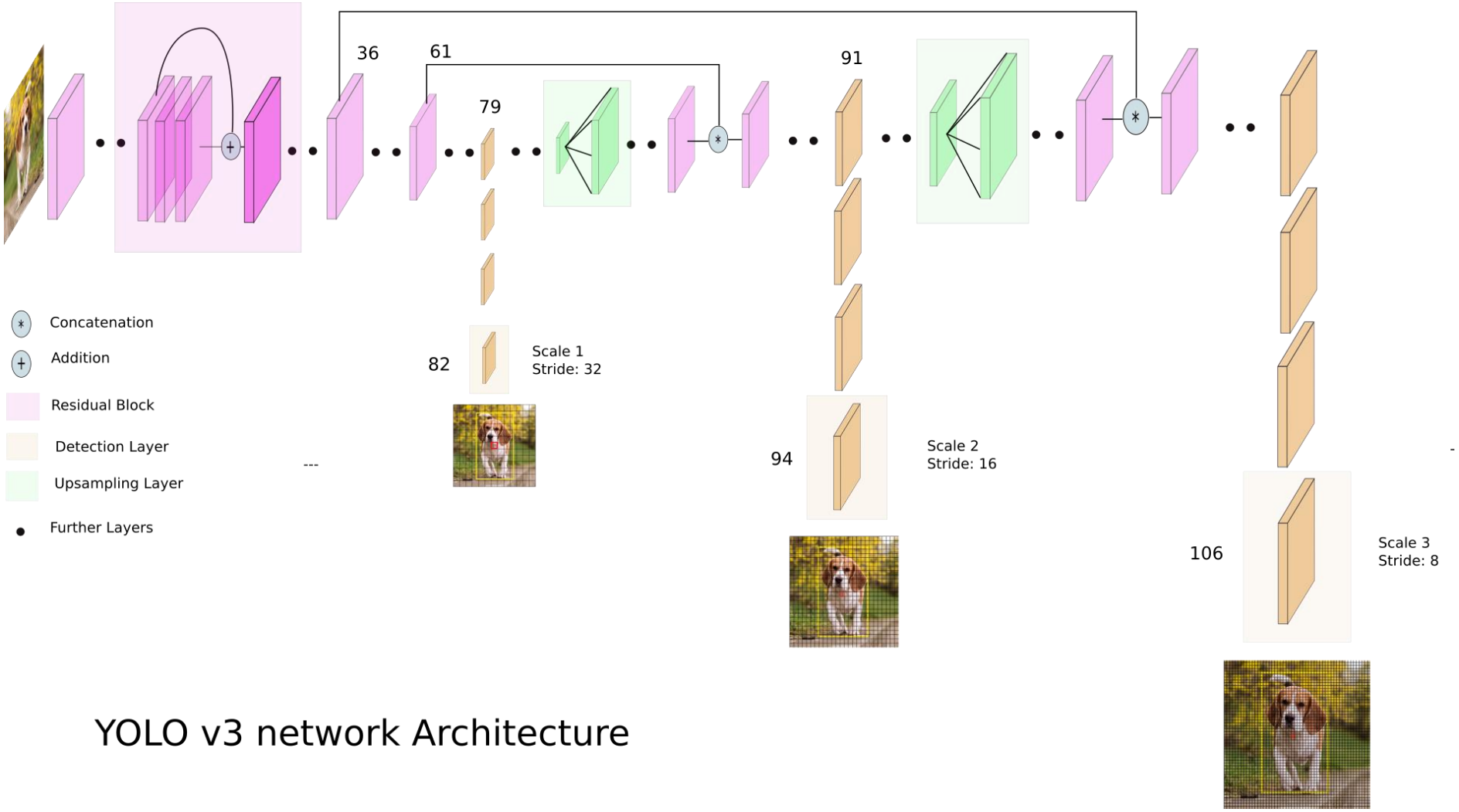
YOLOv2

- Zárt architektúra:
  - Sokáig csak a saját fejlesztő környezetében volt elérhető
- Gyors futás:
  - 300 × 300-as képekre ~45 fps
- Pontossága korlátozott:
  - Érzékeny az előre meghatározott ROI-kra (melyek száma viszonylag alacsony)
  - Skála és pozíció érzékeny (legalábbis a kelleténél jobban)
    - Kis objektumoknál csapnivaló eredmény
    - Bár ez szabályozható a boxok számának megválasztásával

YOLOv3

- 3 skálán keres objektumokat
  - Lassabb, mint elődjei, de kevésbé skála érzékeny
  - Mindegyiken 3-3 anchor, melyek meghatározására a tanító mintákon lévő objektumok bb-jének klaszterezését ajánlják
  - Lassabb lett: ~30 FPS
- Architektúrális módosítások
  - Res. blokk, skipp conn., lin. interpoláció, batch normalizáció
- Hibafüggvény módosítása
  - C_i és $p_i\left(c\right)$ tanítása bináris kereszt entrópiával
  - $p_i\left(c\right)$ logisztikus szigmoid aktiváció kimenete (nincs már rajta softmax, tehát több osztályba is tartozhat egy-egy anchor)

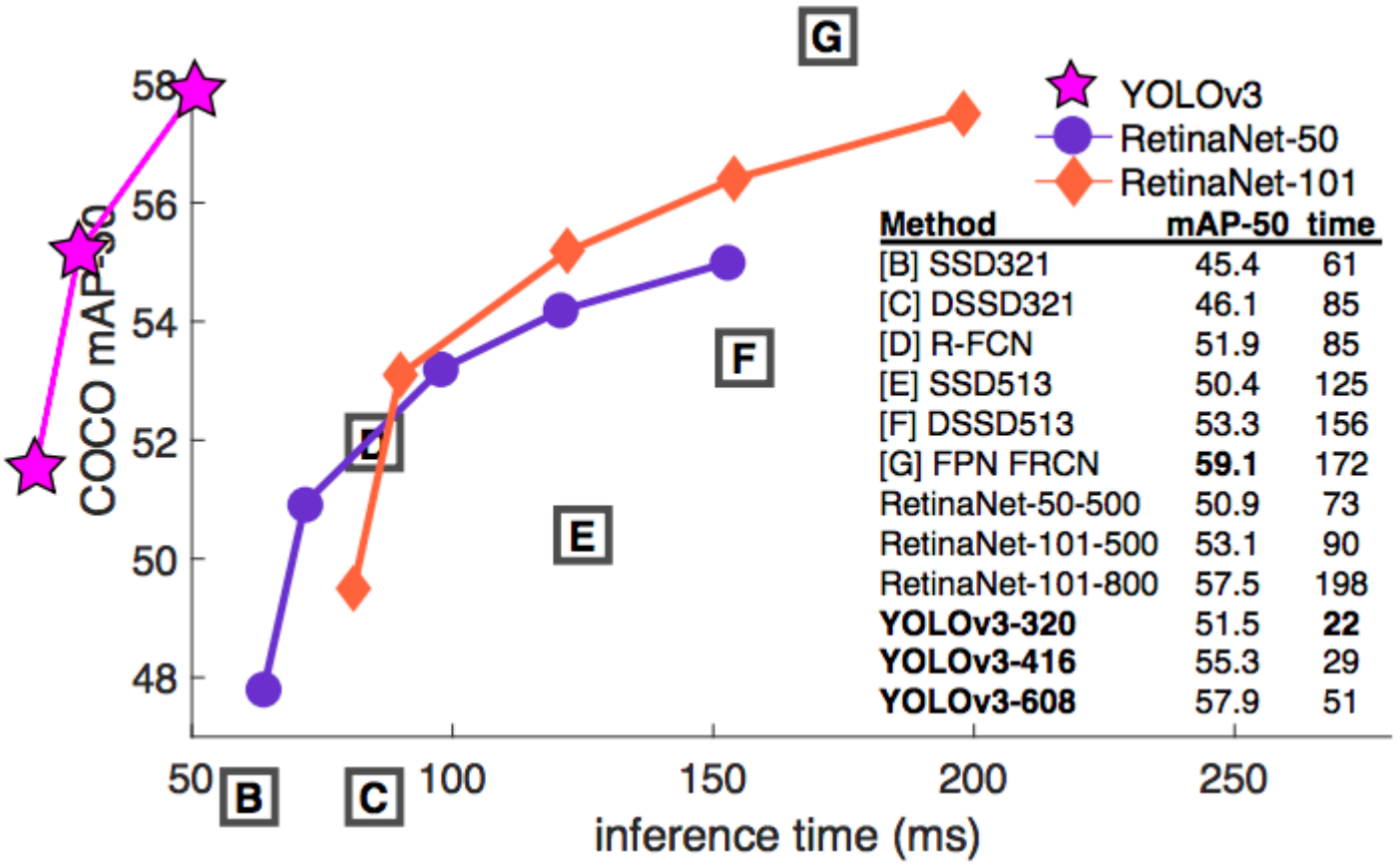
YOLOv3



YOLO v3 network Architecture

YOLOv3

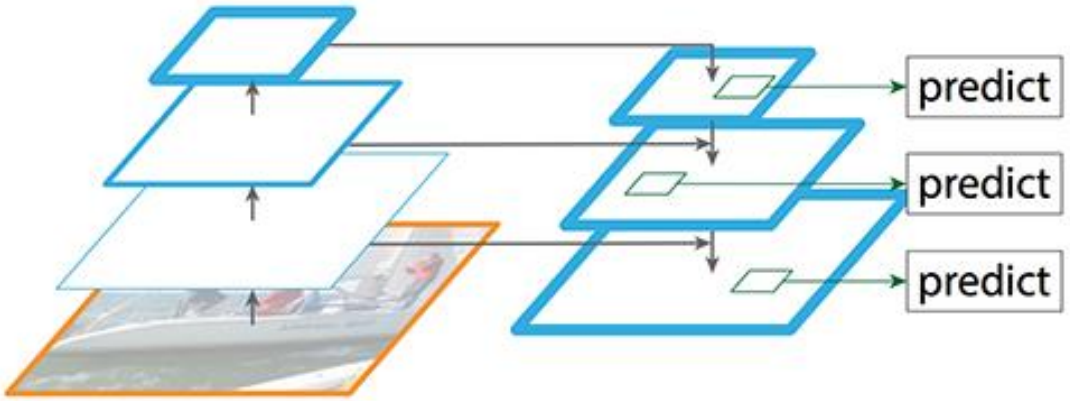
- Szórakozott teljesítménykiértékelés:



Method	mAP-50	time
[B] SSD321	45.4	61
[C] DSSD321	46.1	85
[D] R-FCN	51.9	85
[E] SSD513	50.4	125
[F] DSSD513	53.3	156
[G] FPN FRCN	**59.1**	172
RetinaNet-50-500	50.9	73
RetinaNet-101-500	53.1	90
RetinaNet-101-800	57.5	198
YOLOv3-320	51.5	**22**
YOLOv3-416	55.3	29
YOLOv3-608	57.9	51

RetinaNET

- Feature Pyramid Network:
  - Cél az RPN-t több skálára futtatni (ezáltal jobb pontosság)
  - A klasszikus CNN-ek nagyobb felbontású jellemző térképei erre alkalmatlanok (bementhez közeliek, ezért csak alacsony absztrakciójú objektumokat emelnek ki (pl. élek))
  - Ötlet: top-down irányba residual connection-ökkel állítsunk elő egy *jellemzőtérkép piramist* (más szinten más felbontás)



RetinaNET

- Focal Loss:
  - Sokkal több negatív anchor, mint pozitív, ami problémás
  - Viszont a nagy konfidenciával negatívnak taksált mintákat le lehetne súlyozni (ezáltal redukáljuk a minták nagymértékű kiegyensúlyozatlanságát)
  - Bináris keresztentrópia:

$$CE(pt) = -\log(pt) \;:\; pt = d \cdot p + (1-d)\cdot(1-p)$$

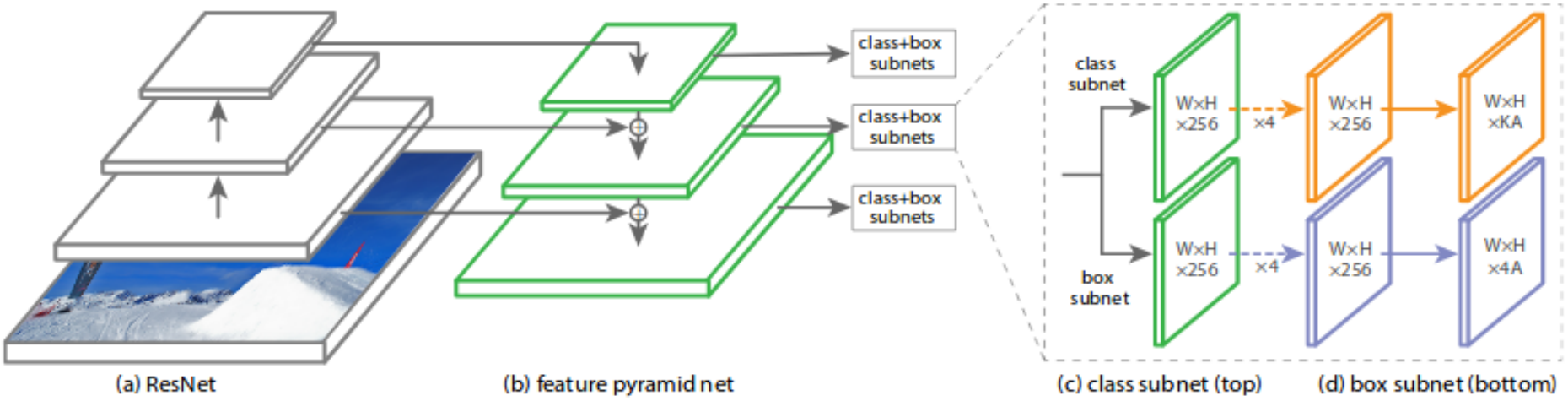
  - Új loss függvény (focal loss):

$$FL(pt) = -(1-pt)^{\gamma}\log(pt)$$

    - γ : hiperparaméter – konfidencia szerinti súlyozást definiálja

RetinaNET

- Teljesen konvolúciós háló
- Osztályozásnál Focal Loss-t alkalmaz
- Regressziónál Huber büntetőfüggvény
- Teszt időben non maxima supression-el fésüli össze a különböző szintek átlapolódó jelöltjeit (szintenként A db anchor)

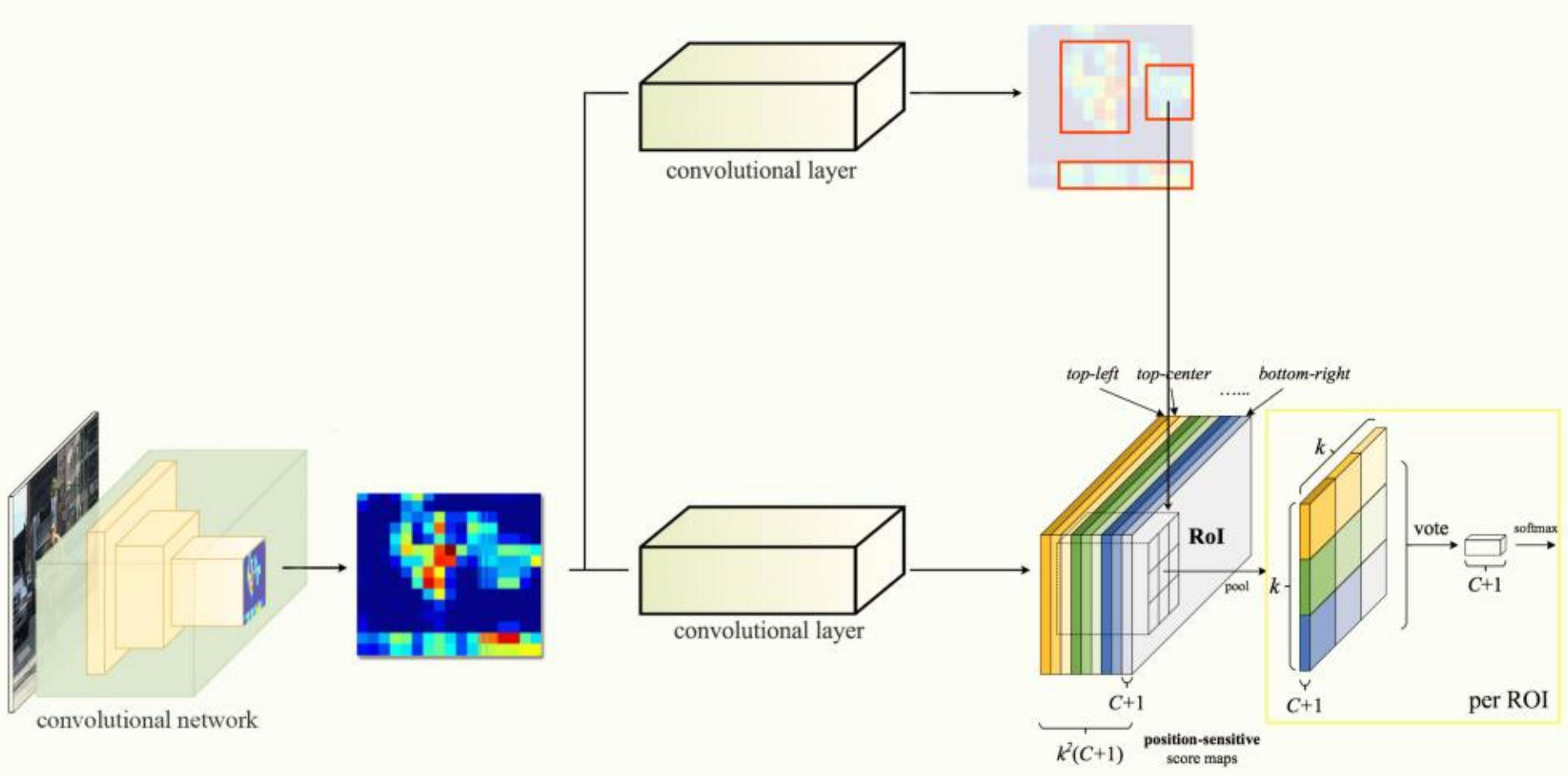


R-FCN (*)

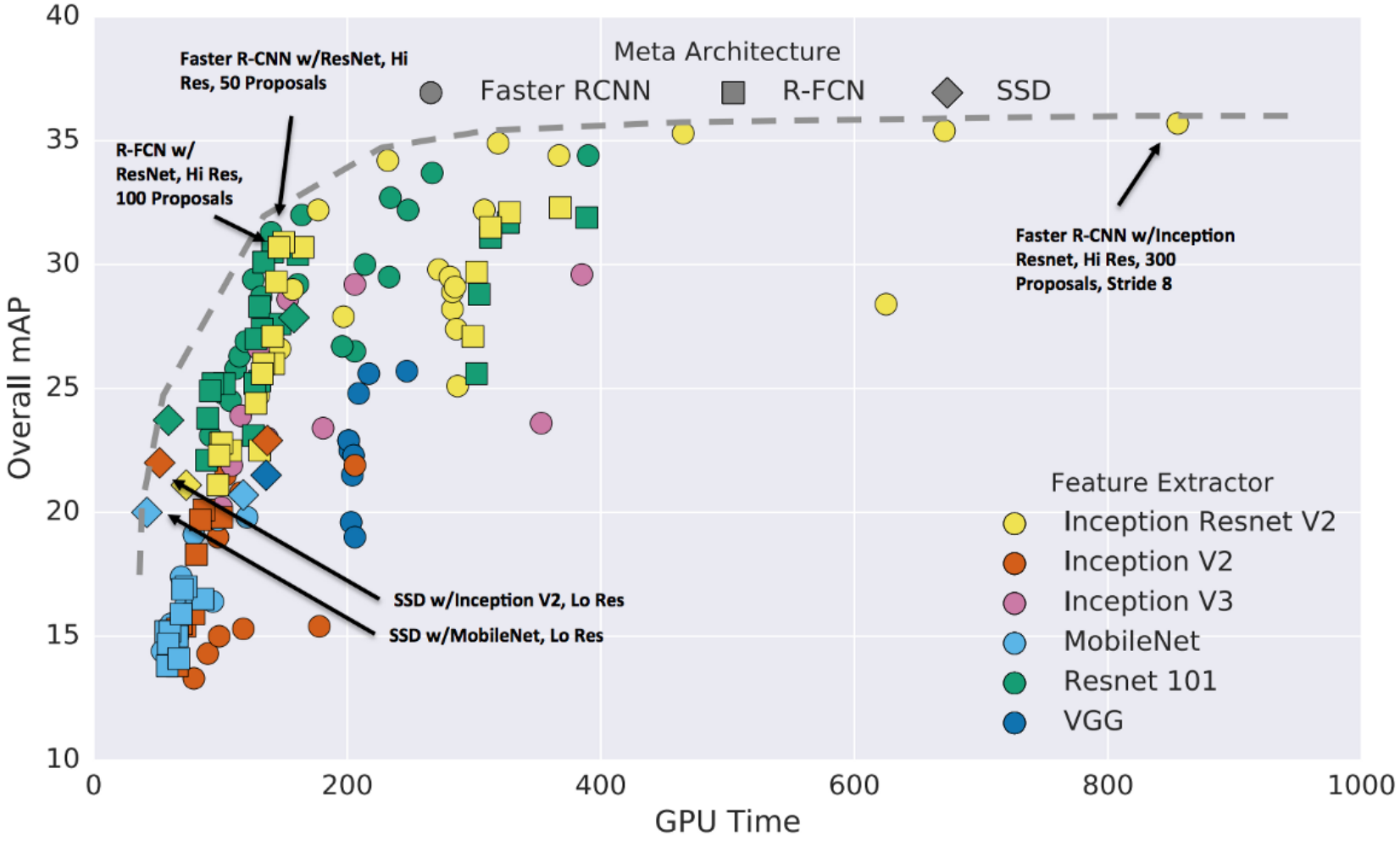
- Pozíció érzékeny ROI pooling:
  - ROI-kat egy Faster R-CNN alapú ROI jelölő háló állítja elő
  - $sc^{(r)}(c) = \sum_{k} \sum_{(x,y) \in R^{(r)}(k)} scm^{(c,k)}(x,y)$
  - Score-ok felett régiónként softmax…
  - Motiváció: így meg tudja tanulni a háló, hogy egy összetett objektum mely részén milyen jellemzőket kell keresnie (ezáltal jobb lok.)
- Ötvözi a régió alapú és FCN megközelítést
  - Gyorsabb a Faster R-CNN-nél ~10 FPS MS COCO-n
  - Pontosabb, mint a YOLO / SSD

R-FCN (*)

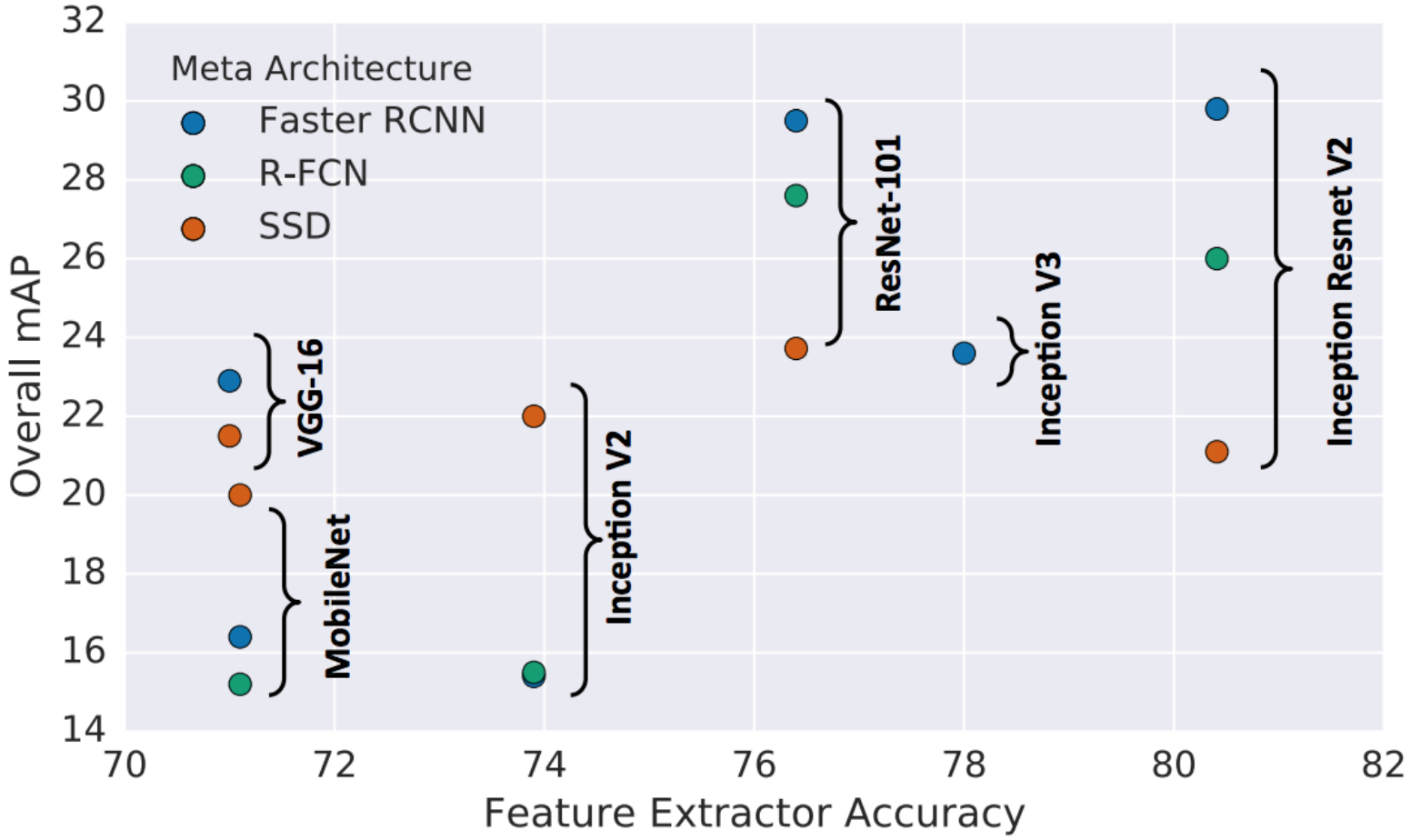
- Architektúra:



Meta architektúrák összehasonlítása



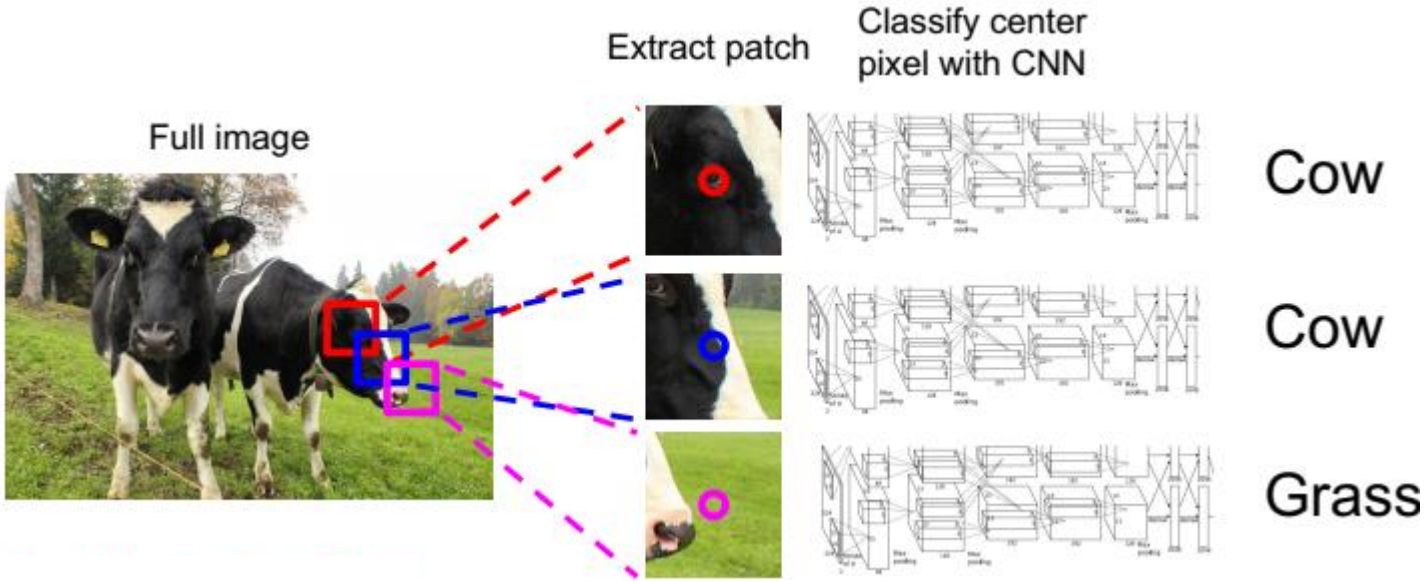
Meta architektúrák összehasonlítása



PIXEL SZINTŰ SZEGMENTÁLÁS CNN-EL

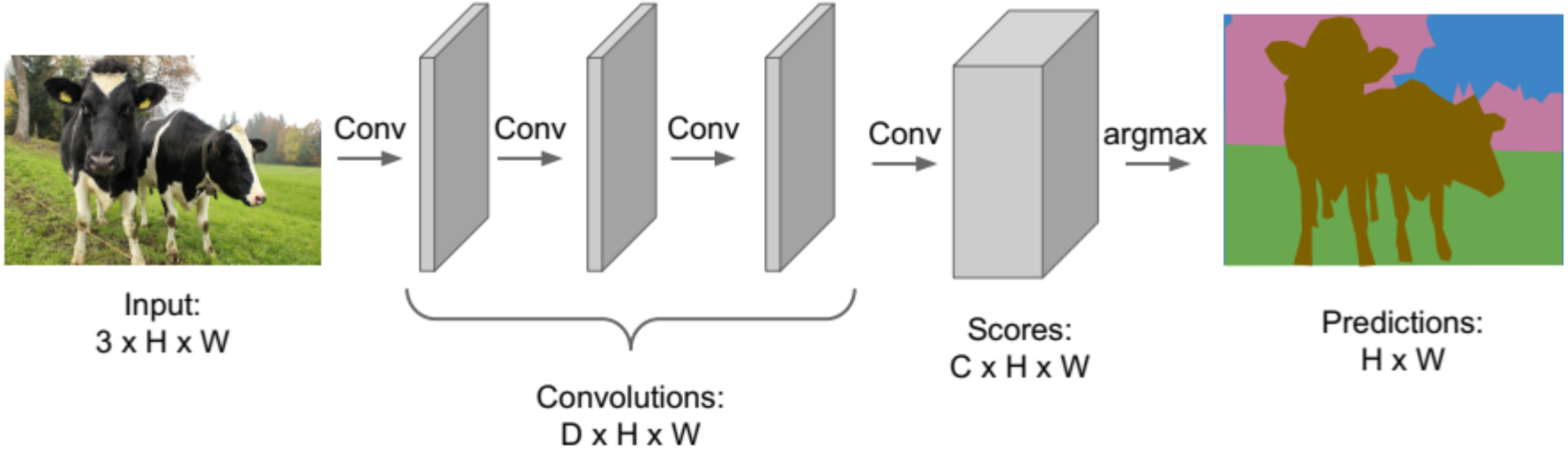
Csúszóablakos szegmentálás

- Szegmentálás direkt osztályozással
  - Kisméretű ablakkal kivágott kép alapján megítéli az adott pixel környezetének a típusát
  - Nagyon lassú, nehezen tanítható, pontatlan



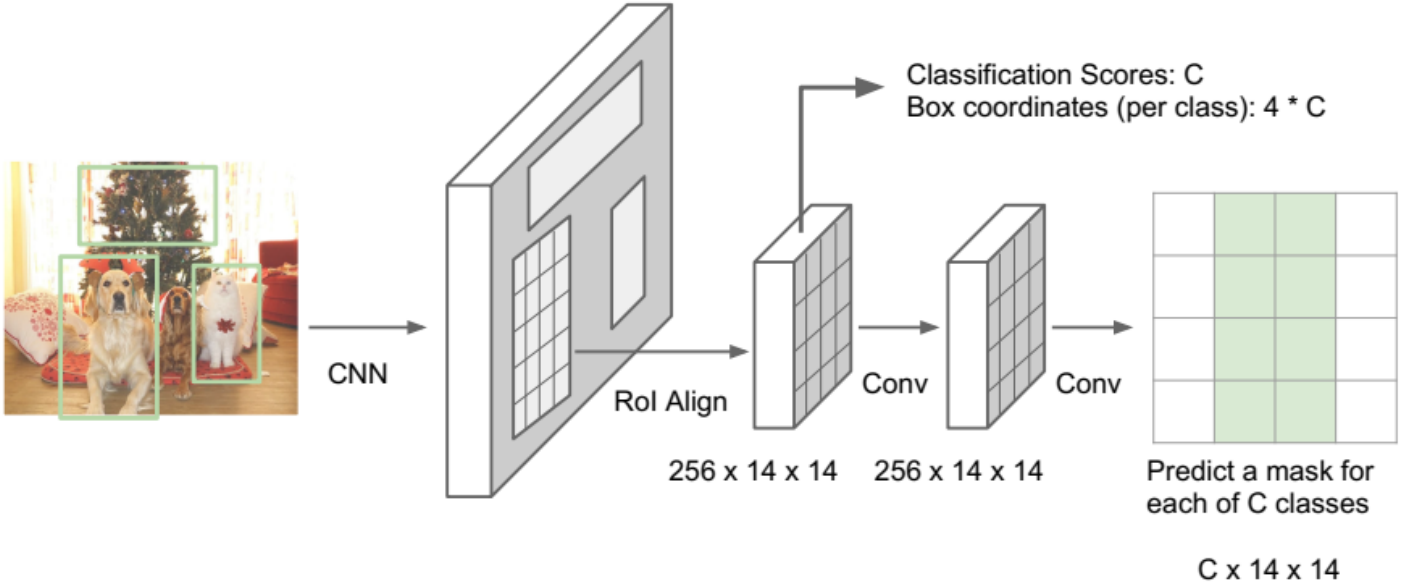
Teljesen konvolúciós hálóval

- Teljesen összekötött réteg nélküli hálóval:
  - Kimenete: minden képponthoz kategória számnyi konfidenciát rendel (softmax nemlin. után) / regresszió pixelenként
  - Általában az U-net-el valósítják meg:
    1. szakasz: felbontás csökkentése, csatornák számának növelésével
    2. szakasz: felbontás növelése transzponált konvolúciókkal, csatornák számának csökkentésével



Mask R-CNN (*)

- Faster R-CNN kimeneti régióin teljesen konvolúciós hálóval szegmentál:
  a) Régiókat uniform méretűvé mintavételezve, majd az eredményt vissza méretezve
  b) Régiókat invalid pixelekkel uniform méretűvé kiegészítve, majd az eredményt kivágva



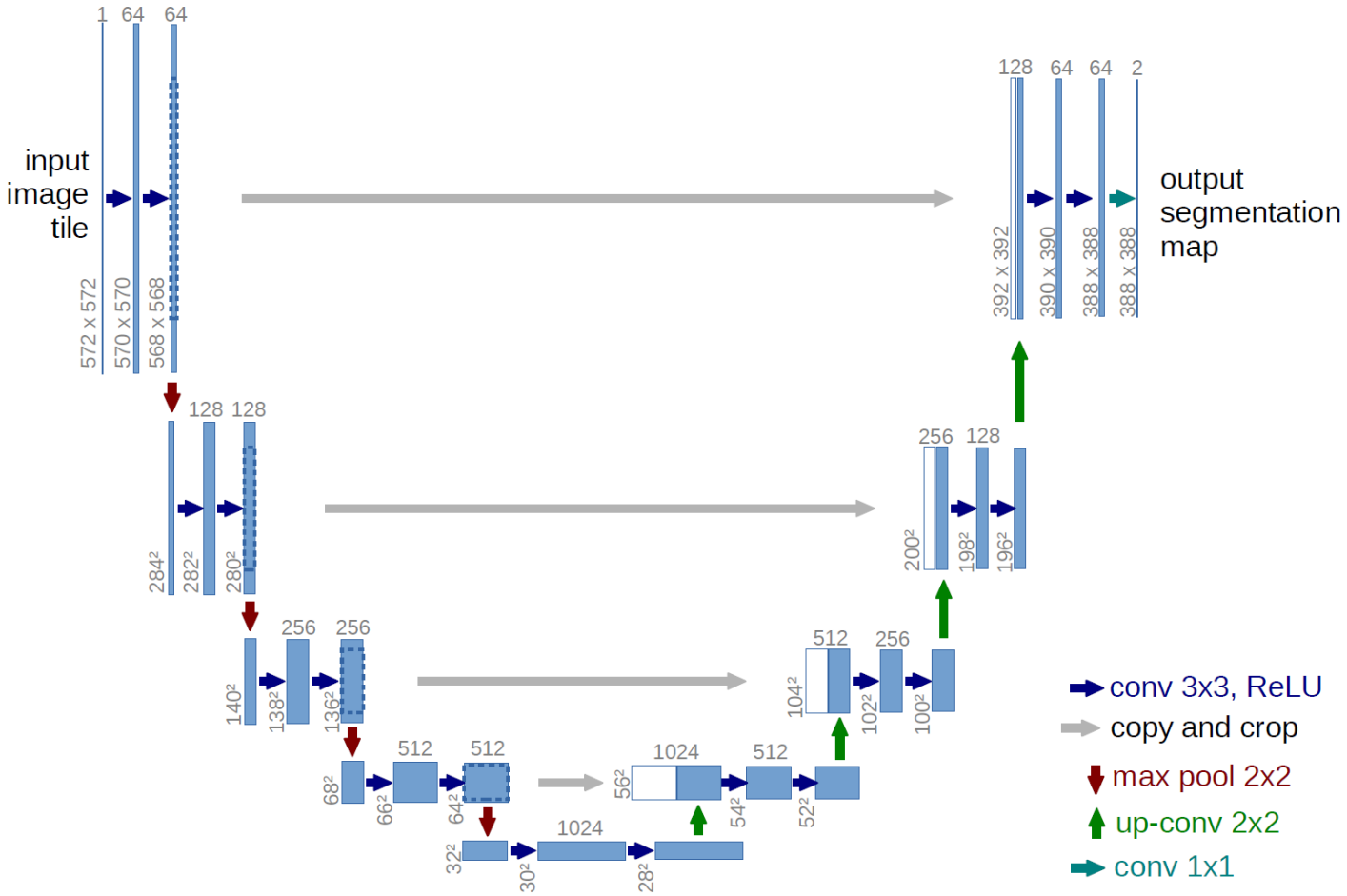
Mask R-CNN (*)

- Jó eredmények – pontos szegmentáció
- Nagy hatékonyság



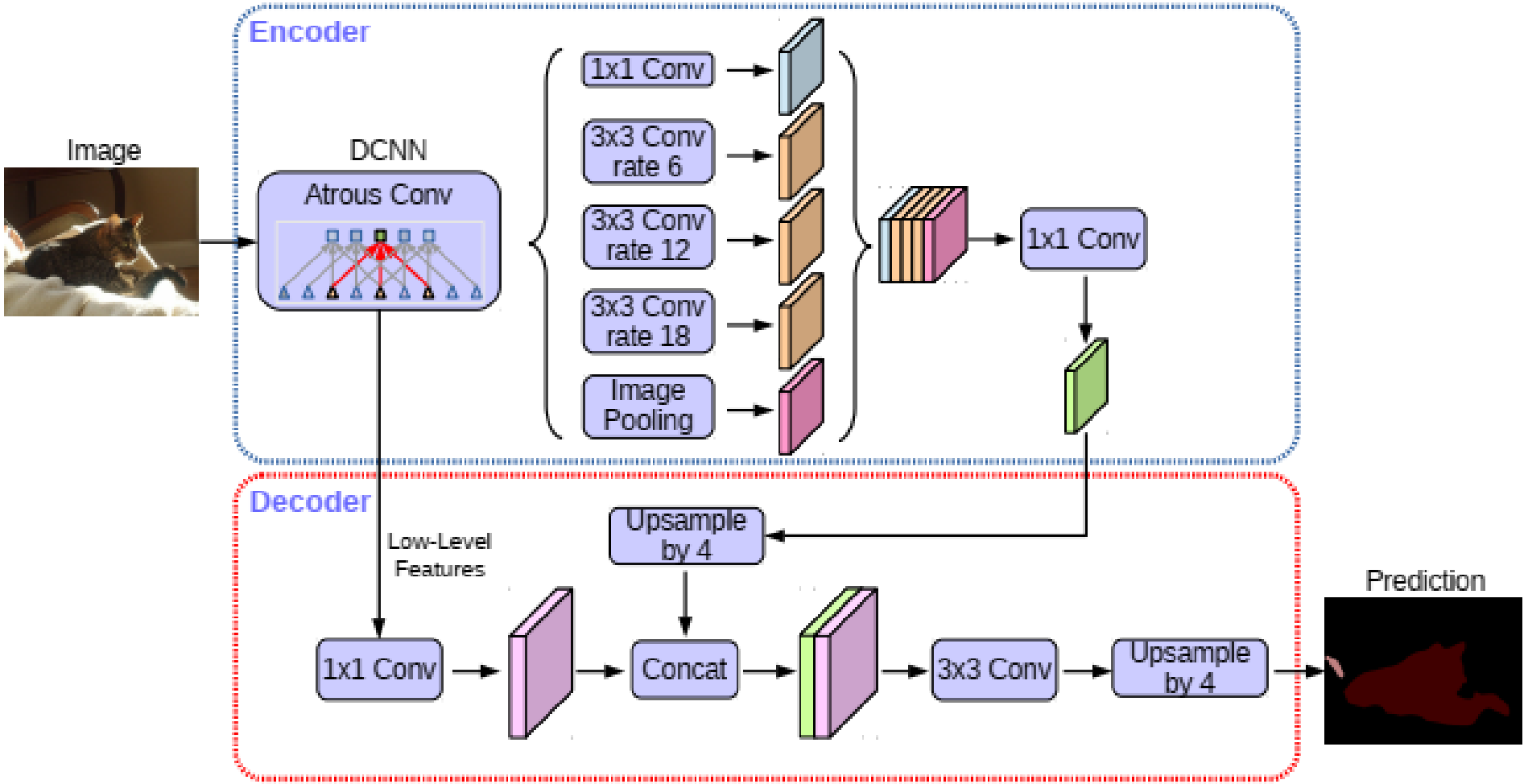
U-Net (2016)

- Teljesen konvolúciós (Fully Convolutional) háló



DeepLab –v3+ (2018) (*)

- Enkóder – Dekóder architektúrák továbbfejlesztése

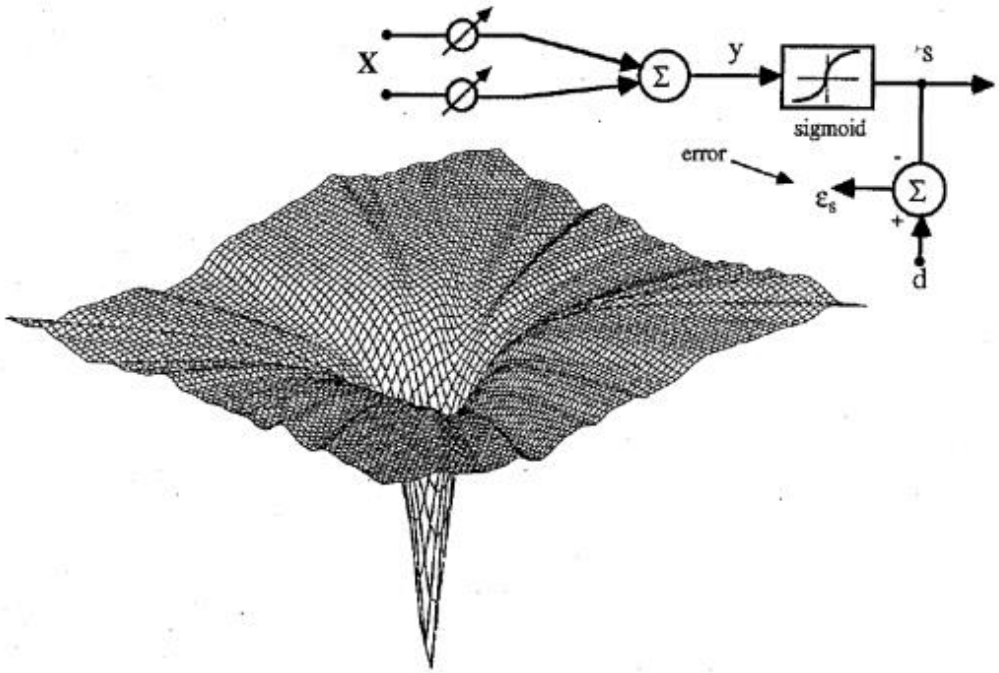


NEURÁLIS HÁLÓK TANÍTÁSA SORÁN ALKALMAZOTT OPTIMALIZÁCIÓ

Hibafelületek

- Hálók által megvalósított leképzés:
  - Bemenetet exponenciálisan sok partícióra bontja
  - Egy-egy ilyen területen lineárishoz közeli leképzés
- Hibafelületek általános jellemzője:
  - Sok szabad paraméter (1E9-es nagyságrend)
    - Ezek közül sok nem befolyásolja érdemben a kimenetet (pl. neuron ReLU-ja 0-ra vág)
  - Erősen nem konvex:
    - Hosszan elnyúló platók, hirtelen letörések
    - Tele van nyeregponttal, lokális optimumokkal

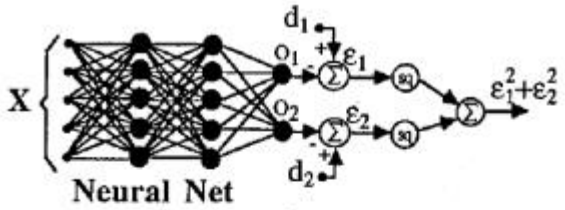
Hibafelületek - példák



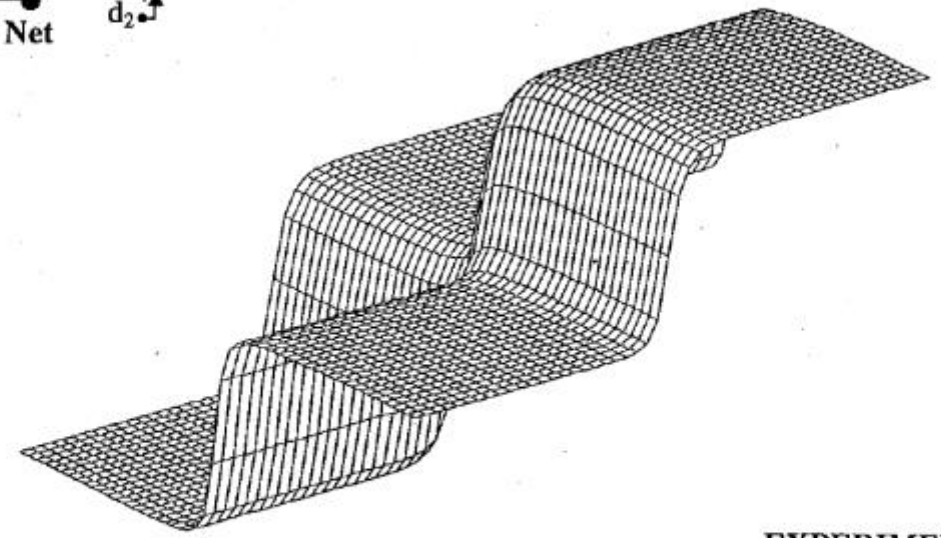
EXPERIMENT 2b
Same input as EXPT. 1b, but different desired response.

Mean Squared Error Surface (sigmoid)

Hibafelületek - példák



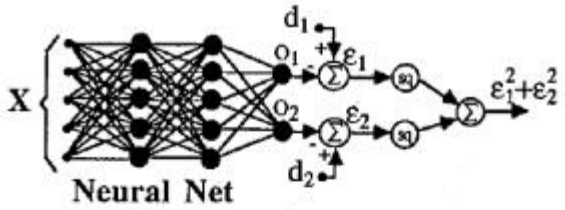
- 4 inputs
- 3-layer network: 5 feed 8 feed 2
- sigmoids



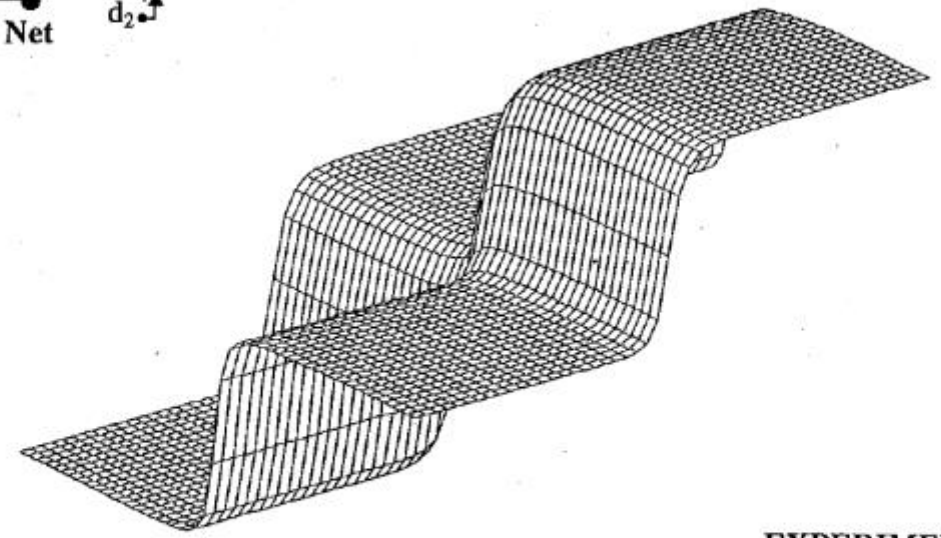
EXPERIMENT 3a,
Randomize weights,
then vary two
first-layer weights.

Mean Square Error Surface

Hibafelületek - példák



- 4 inputs
- 3-layer network: 5 feed 8 feed 2
- sigmoids

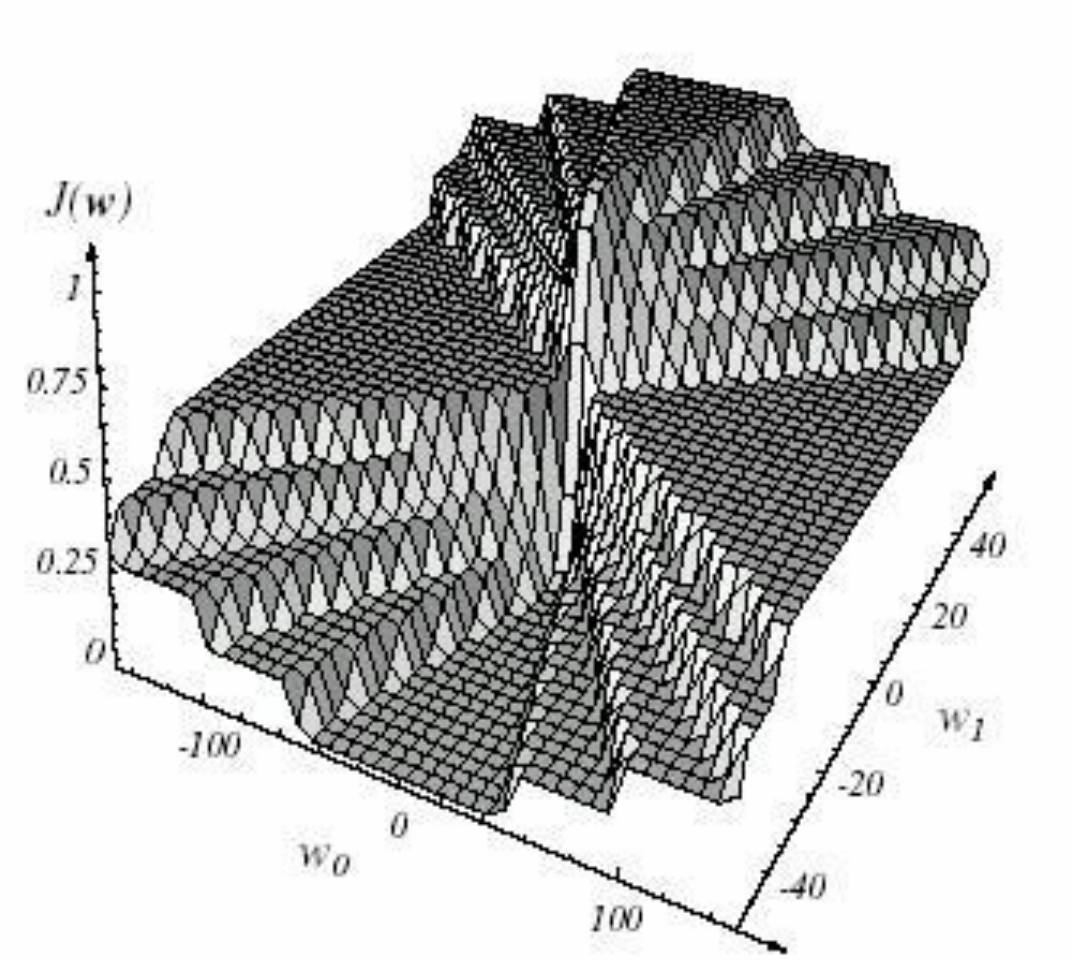


EXPERIMENT 3a,
Randomize weights,
then vary two
first-layer weights.

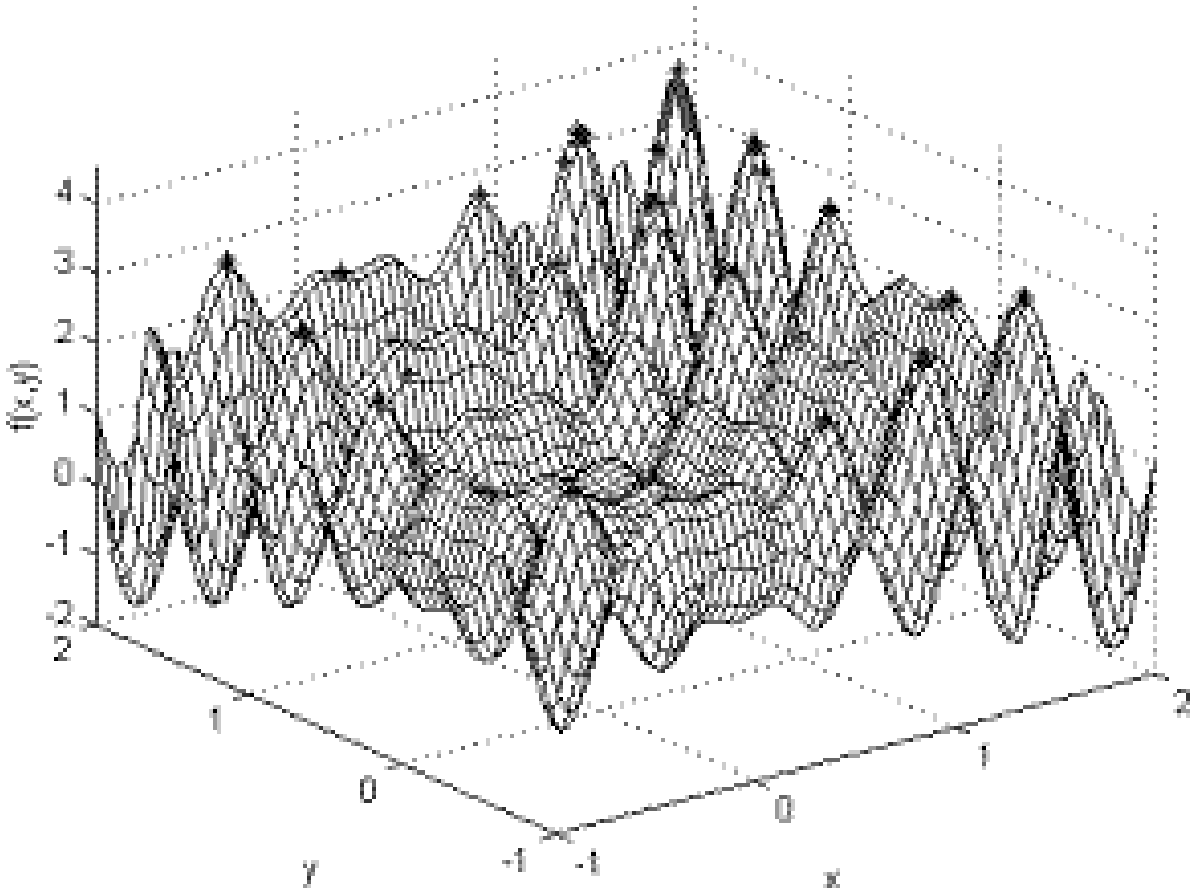
Mean Square Error Surface

Hibafelületek - példák

2 rejtett rétegű MLP



Hibafelületek - példák



Neurális hálók tanítása

- Erősen nem konvex hibafelületek:
  - Ezzel praktikusan nem foglalkozunk
- Numerikus optimalizáció módszerei:
  - Másodrendű eljárások:
    - hibafelület másodrendű közelítését minimalizálják
    - Newton iteráció, Levenberg Marquadt, BFGS, L-BFGS
  - Elsőrendű eljárások:
    - első fokú Taylor polinomot minimalizálják
    - SGD, Adaptív módszerek, Polyak GD, Nesterov GD

Newton módszer

- $C^{(2)}_{\boldsymbol{\theta}_0}\left\{\boldsymbol{\theta}+\boldsymbol{\theta}_0\right\} = C\left\{\boldsymbol{\theta}_0\right\} + \boldsymbol{\theta}^T \cdot \nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_0\right\} + \left(1/2\right)\cdot \boldsymbol{\theta}^T \cdot \mathbf{H}\left\{\boldsymbol{\theta}_0\right\}\cdot \boldsymbol{\theta}$
  - $\mathbf{H}\left\{\boldsymbol{\theta}_0\right\}_{(i,j)} = \dfrac{\partial^2 C\left\{\boldsymbol{\theta}_0\right\}}{\partial \boldsymbol{\theta}_{(i)} \partial \boldsymbol{\theta}_{(j)}}$ jelöli C Hesse-mátrixát
  - $\nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_0\right\}_{(i)} = \dfrac{\partial C\left\{\boldsymbol{\theta}_0\right\}}{\partial \boldsymbol{\theta}_{(i)}}$ jelöli a gradienst $\boldsymbol{\theta}_0$ -ban
  - Ha $\mathbf{H}\left\{\boldsymbol{\theta}_0\right\}$ pozitív definit, akkor

$$\boldsymbol{\theta}^* = \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} \left\{ C^{(2)}_{\boldsymbol{\theta}_0}\left\{\boldsymbol{\theta}\right\}\right\} \quad \Leftrightarrow \quad \nabla C^{(2)}_{\boldsymbol{\theta}_0}\left\{\boldsymbol{\theta}^*\right\} = \mathbf{0}$$

    - Tehát $\boldsymbol{\theta}^* = -\mathbf{H}\left\{\boldsymbol{\theta}_0\right\}^{-1} \cdot \nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_0\right\}$

Newton módszer

- $C^{(2)}_{\boldsymbol{\theta}_0}\{\boldsymbol{\theta}\}$ csak approximálja C-t:
  - Viszont C $\boldsymbol{\theta}_0$ pontbeli kvadratikus közelítésének t.f.h. a minimumhelye: $\boldsymbol{\theta}_0 + \boldsymbol{\theta}^*$
  - Tehát $\Delta\boldsymbol{\theta} = \alpha \cdot \boldsymbol{\theta}^*$
  - α meghatározása line-search algoritmusokkal. Az alábbi trade-off problémát oldják meg:
    - $\left| C^{(2)}_{\boldsymbol{\theta}_0}\{\boldsymbol{\theta}_0 + \alpha \cdot \Delta\boldsymbol{\theta}\} - C\{\boldsymbol{\theta}_0 + \alpha \cdot \Delta\boldsymbol{\theta}\} \right| < \varepsilon$
    - $C^{(2)}_{\boldsymbol{\theta}_0}\{\boldsymbol{\theta}_0\} - C^{(2)}_{\boldsymbol{\theta}_0}\{\boldsymbol{\theta}_0 + \alpha \cdot \Delta\boldsymbol{\theta}\} > \delta$

Newton módszer

- Interpretációja:
  1. Aktuális paramétervektor környezetében egy kvadratikus felülettel közelítjük $C\{\boldsymbol{\theta}\}$ -t.
  2. Megkeressük a közelítés minimumhelyét, majd annak irányába lépünk „elegendően” nagyot.
  3. Ha nem teljesül a leállási feltétel, akkor GOTO 1.
- Előnyei:
  - Pár 10 / 100 iteráció gyakorlatban elég
  - $C\{\boldsymbol{\theta}\}$ affin transzformációjára érzéketlen
  - Nyeregpontnál viszont gond van - instabil

Newton módszer

- Hátrányai:
  - Minden iterációban újra kell számolni, és invertálni a Hesse mtx.-ot (mely akár 10^8×10^8 méretű):
    - Kvázi Newton módszerek ezt próbálják kikerülni
  - Batch-elt tanításhoz illeszkedik jól – túl nagy lépéseket tesz ahhoz, hogy sztochasztikus (pl. mini batch) optimalizációra alkalmas legyen:
    - Így nem is lehet jól párhuzamosítani
- Klasszikus Neurális hálóknál alkalmazható inkább (lsd. Levenberg-Marquadt)

Kvázi Newton módszerek – BFGS

- A másodfokú közelítésben
- BFGS algoritmus ú.n. secant feltétele:
  - $\nabla C^{(2)}_{\boldsymbol{\theta}_k}\left\{\boldsymbol{\theta}_k\right\} = \nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_k\right\}$ és $\nabla C^{(2)}_{\boldsymbol{\theta}_k}\left\{\boldsymbol{\theta}_{k-1}\right\} = \nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_{k-1}\right\}$
  - Első feltétel $C^{(2)}_{\boldsymbol{\theta}_k}\left\{\cdot\right\}$ definíciója miatt teljesül
  - Második feltétel kifejtését követően:

$$\nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_{k-1}\right\} = \nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_k\right\} + \mathbf{H}\left\{\boldsymbol{\theta}_k\right\}\cdot\left(\boldsymbol{\theta}_{k-1} - \boldsymbol{\theta}_k\right)$$

  - Tehát a secant feltétel igaz, ha

$$\mathbf{H}\left\{\boldsymbol{\theta}_k\right\}^{-1}\cdot\left(\nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_{k-1}\right\} - \nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_k\right\}\right) = \left(\boldsymbol{\theta}_{k-1} - \boldsymbol{\theta}_k\right)$$

Kvázi Newton módszerek – BFGS

- Mit tudunk eddig $\mathbf{H}\left\{\boldsymbol{\theta}_k\right\}^{-1}$-ről:
  - PSD, hiszen egy Hesse mtx.-ról lenne szó
  - $\mathbf{H}\left\{\boldsymbol{\theta}_k\right\}^{-1} \cdot \left(\nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_{k-1}\right\} - \nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_k\right\}\right) = \left(\boldsymbol{\theta}_{k-1} - \boldsymbol{\theta}_k\right)$
  - De ilyenből végtelen van – „regularizáció” kell:
    - Éljünk a simasági feltételezéssel ($\mathbf{H}\left\{\cdot\right\}$ folytonos)
    - $\mathbf{H}\left\{\boldsymbol{\theta}_k\right\}^{-1} = \arg\min_{\mathbf{H}^{-1}} \left\{ \left\| \mathbf{H}^{-1} - \mathbf{H}\left\{\boldsymbol{\theta}_{k-1}\right\}^{-1} \right\|_F^2 \middle| \ldots \right\}$
- Szerencsére analitikusan megoldható

Kvázi Newton módszerek – BFGS

- BFGS frissítés tulajdonságai:
  - Ha $\mathbf{H}\left\{\boldsymbol{\theta}_0\right\}$ -t diagonálisnak választjuk, akkor $\Delta\boldsymbol{\theta}_k$ számítása $O\left(k \cdot size\left(\boldsymbol{\theta}\right)\right)$ komplexitású.
  - Ehhez viszont szükség van $\nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_k\right\}$-re és $\boldsymbol{\theta}_k$ -ra, minden $i = 0,\ldots,k$ esetén
    - Nagyméretű problémák esetén ez már problémát jelent (memória).
  - Memória használata túl nagy:
    - Pl. 1E5 iteráció, és 1E7 paraméter esetén ~1 TB

Kvázi Newton módszerek – L-BFGS

- Belátható, hogy konvergál az optimumhoz (konvex)
  - Feltétle: $\mathbf{H}\left\{\boldsymbol{\theta}_0\right\}$ approximációja pd.
  - BFGS: szuperlineáris, Newton: négyzetes
  - Skálázásra érzékeny (sok numerikus művelet)
- L(imitált memóriahasználatú)-BFGS:
  - Bár a közelített inverz Hesse kiszámításához szükség lenne az összes addigi gradiensre és paraméterre, ezt csak az utolsó *m* db alapján becsli.
  - Matematikai bizonyítása a konvergenciának nincs, de praktikusan konvergens (itt már jelentősen függ a szükséges iterációk száma a változók számától).
  - Mini Batch-es tanítást ez sem igazán kedveli

Kvázi Newton módszerek – Konjugált Gradiens módszer

- Lineáris egyenletek megoldására találták ki, most $\boldsymbol{\theta}^* = -\mathbf{H}^{-1} \cdot \nabla C\{\boldsymbol{\theta}_0\}$-t keressük iteratívan.
- Alapötlet – lineáris egyenlet megoldása:

$$-\alpha^* = \arg\min_{\alpha} \left\{ \left\| \mathbf{H} \cdot \left(\boldsymbol{\theta}_{k-1} + \alpha \cdot \Delta\boldsymbol{\theta}_{k-1} \right) - \nabla C\{\boldsymbol{\theta}_0\} \right\|_2 \right\}$$

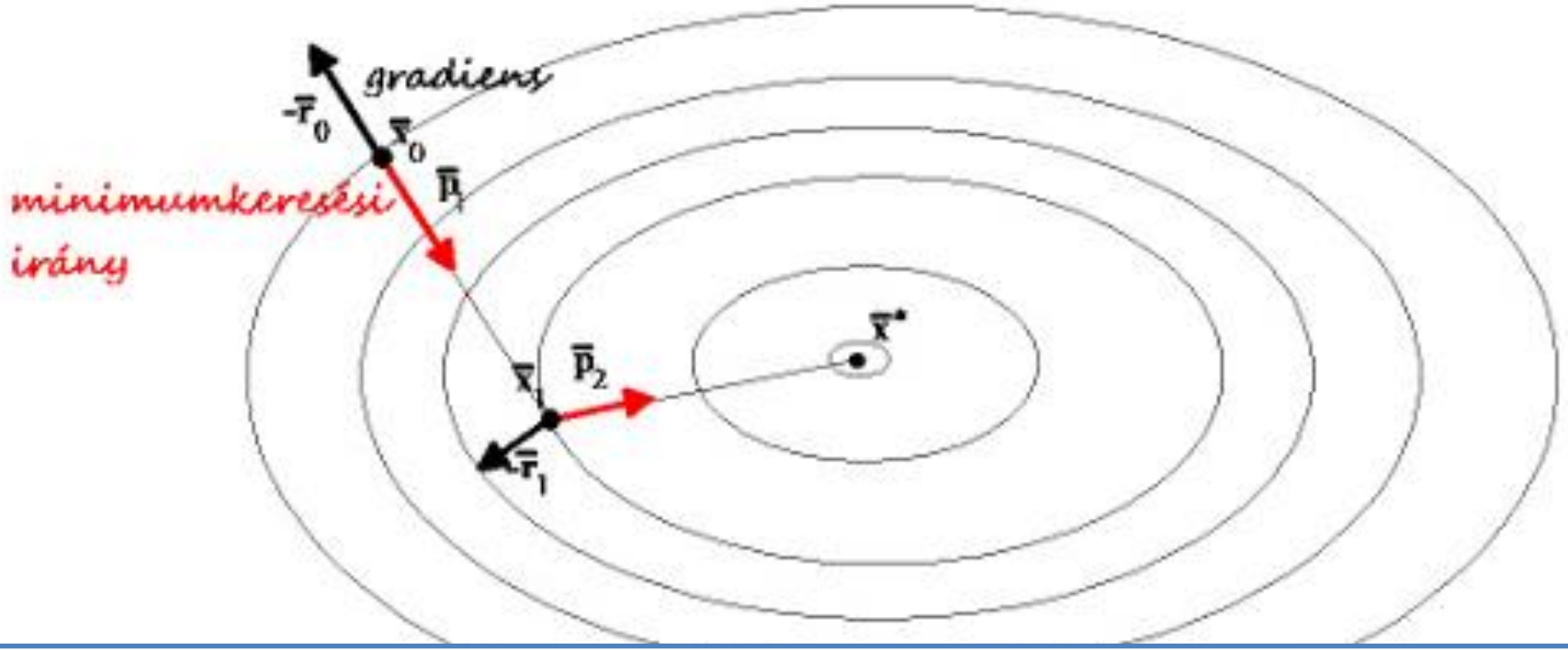
$$\Delta\boldsymbol{\theta}_{k-1}{}^T \cdot \left(\nabla C\{\boldsymbol{\theta}_0\} - \mathbf{H} \cdot \left(\boldsymbol{\theta}_{k-1} + \alpha^* \cdot \Delta\boldsymbol{\theta}_{k-1} \right) \right) =$$

$$= \Delta\boldsymbol{\theta}_{k-1}{}^T \cdot \mathbf{H} \cdot \left(\boldsymbol{\theta}^* - \boldsymbol{\theta}_k \right) = \mathbf{0}$$

Tehát az *k*-adik javítóirány $\mathbf{H}$ feletti konjugáltja a (*k-1*)-ediknek, azaz $\Delta\boldsymbol{\theta}_{k-1}{}^T \cdot \mathbf{H} \cdot \Delta\boldsymbol{\theta}_k = \mathbf{0}$

Kvázi Newton módszerek – Konjugált Gradiens módszer

- Mint lineáris egyenlet megoldó: $\mathbf{x}^* = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{b}$



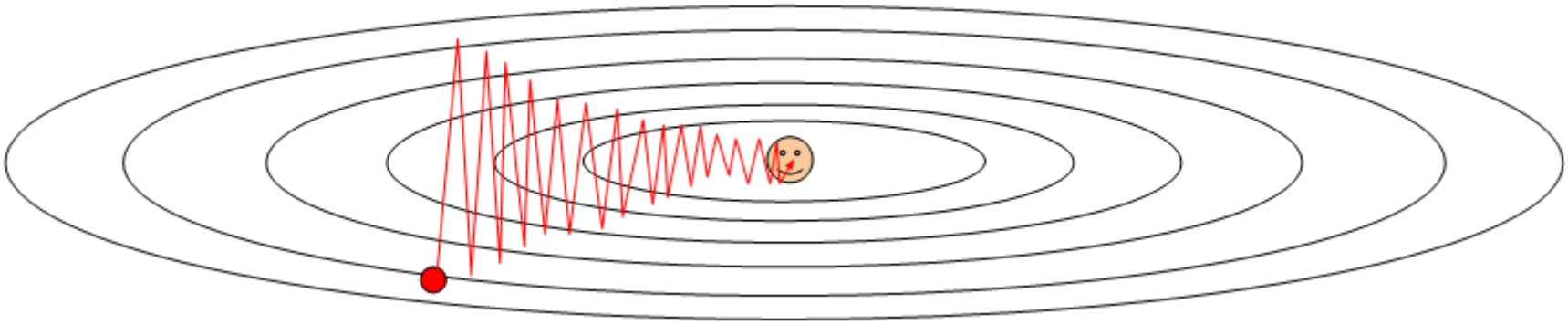
$\mathbf{p}_i$: i-edik keresési irány, $\mathbf{x}_i$: i-edik becslése $\mathbf{x}^*$-nak

Kvázi Newton módszerek – Konjugált Gradiens módszer

- Mint veszteségfüggvény minimalizáló eljárás:
  - Aktuális pontbeli gradiensből az előző javítóiránnyal párhuzamos komponenst levonva áll elő az új javítóirány: $\Delta\boldsymbol{\theta}_k = -\nabla C\left(\boldsymbol{\theta}_{k-1}\right) - \beta \cdot \Delta\boldsymbol{\theta}_{k-1}$
  - Javító lépés nagysága: $\arg\min_{\alpha}\left\{C\left(\boldsymbol{\theta}_{k-1} + \alpha \cdot \Delta\boldsymbol{\theta}_k\right)\right\}$
  - Nem igényli a Hesse mtx. kiszámítását
- Konvergencia:
  - Invertálandó mátrix sajátértékeinek sűrűsödési pontjainak a számától függ.

Mély hálók során alkalmazott optimalizáció

- Elsőrendű módszerek:
  - SGD (mini batch-es tanítás miatt)
  - Másodrendű módszerekkel sem nyernénk sokat (sok réteg miatt ennél magasabb fokú a hibafelület)
  - Rosszul kondícionált hibafelületeken viszont a Gradient Descent hajlamos a beragadásra, lassú mozgásra (vagy gyors divergálásra)



Adaptív módszerek

- Adaptív módszerek : közvetlenül megelőző iterációk lépéseiből becslik a hibafelület jellegét:
  - Ha egy adott súly keveset változik, akkor annak mentén elnyújtott a hibafelület => lehet bátrabban is lépni
  - Ha egy súly mentén oszcilláló mozgás van, akkor túl nagy a bátorsági tényező
- Momentum módszer:
  - Szemléletesen: GD által becsült javítóutak mozgó átlagával regularizálja azt
  - Nesterov momentum: bizonyítottan, asszimptotikusan optimális első rendű optimalizáció (négyzetes rátával)

Momentum módszerek

- Első interpretáció – alul-áteresszük $\boldsymbol{\theta}_k$-at:
  - Lényegében mozgó átlaggal
  - $\Delta\boldsymbol{\theta}_k{}' = \beta \cdot \Delta\boldsymbol{\theta}_{k-1}{}' + (1-\beta) \cdot \nabla C\{\boldsymbol{\theta}_{k-1}\} \quad \beta \in (0,1)$
  - $\boldsymbol{\theta}_k = \boldsymbol{\theta}_{k-1} - \alpha \cdot \Delta\boldsymbol{\theta}_k{}'$
- Másik interpretáció – fizikai modell:
  - $\mathbf{v}_k = \mu \cdot \mathbf{v}_{k-1} - \alpha \cdot \nabla C\{\boldsymbol{\theta}_{k-1}\} \quad \mu \in (0.5\,, 1)$

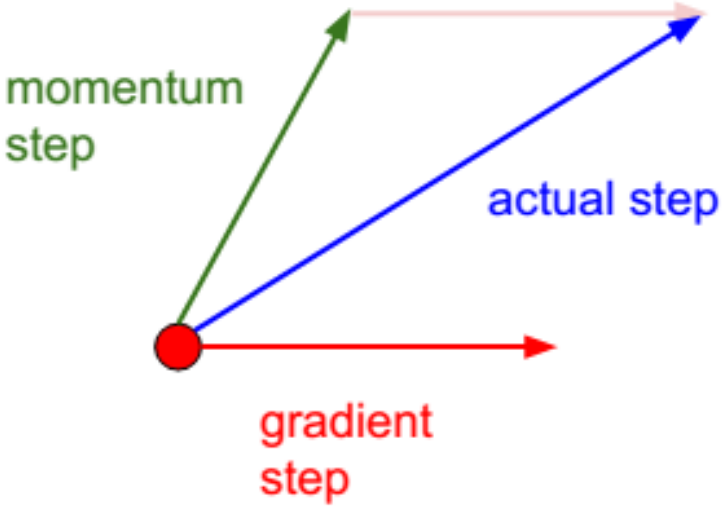
    Integráljuk a gyorsulást ($-\alpha \cdot \nabla C\{\boldsymbol{\theta}_{k-1}\}$), μ súrlódással
  - $\boldsymbol{\theta}_k = \boldsymbol{\theta}_{k-1} + \mathbf{v}_k$

    Integráljuk a sebességet

Nesterov Momentum

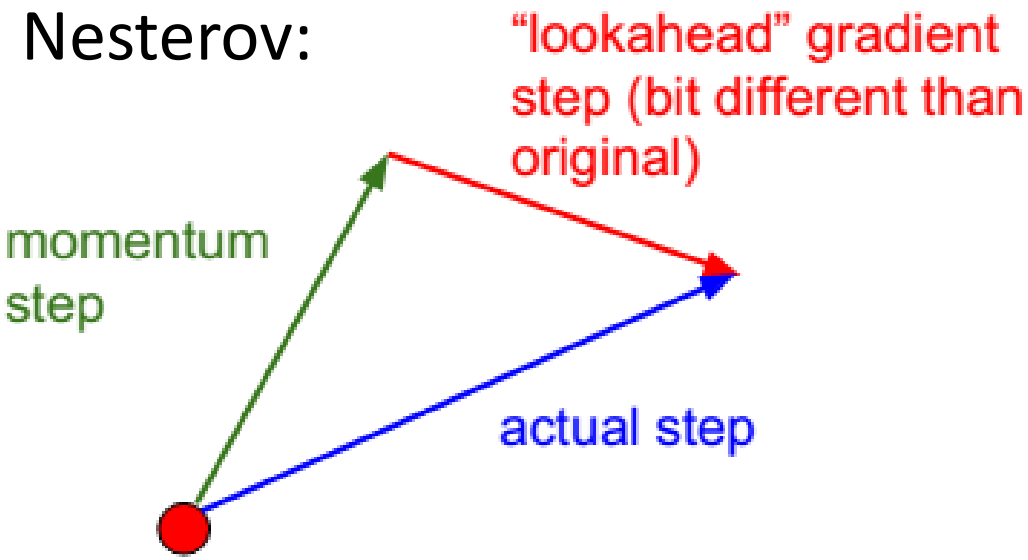
- Ötlet: Ha úgyis ellépünk $\mu \cdot \mathbf{v}_{k-1}$ irányba, akkor az ottani gradiens irányába lépjünk tovább (extrapoláció):

Egyszerű momentum:



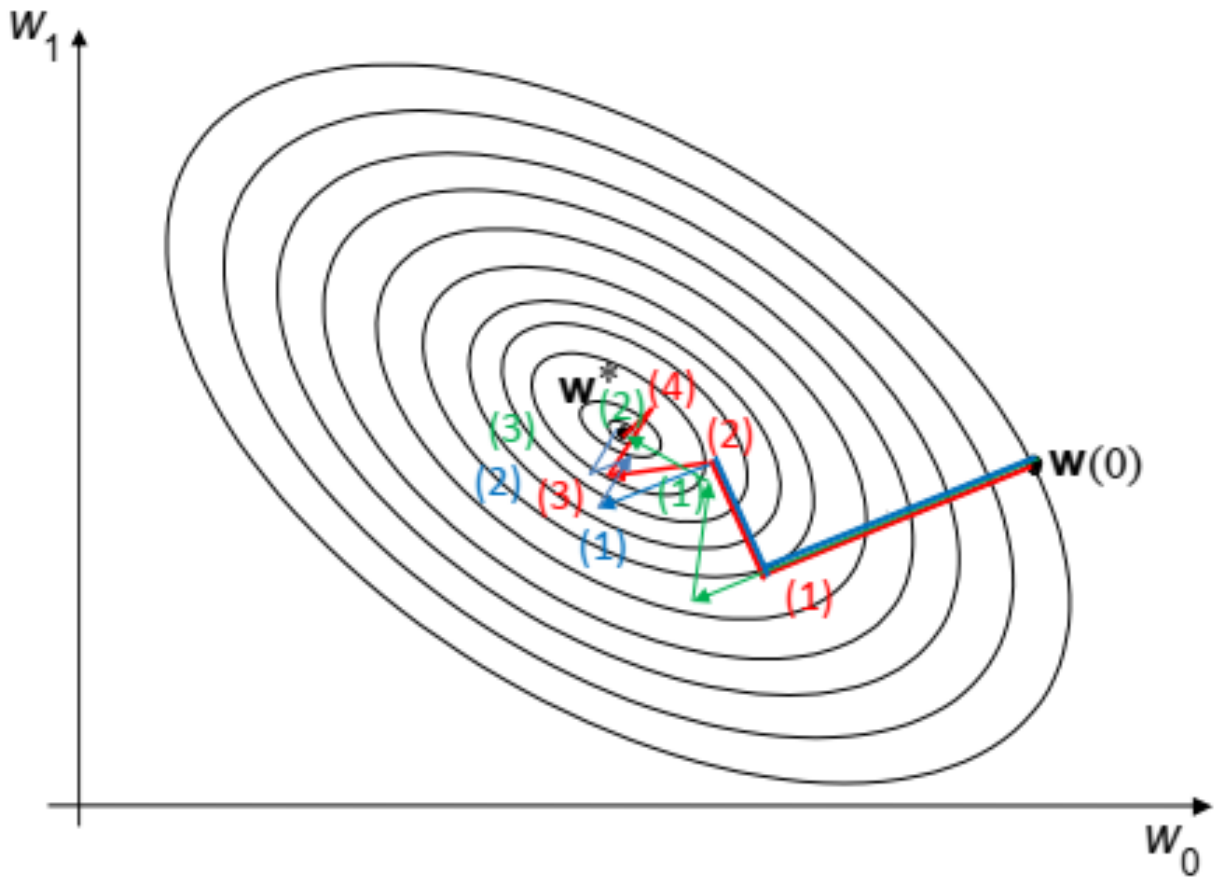
$$\mathbf{v}_k = \mu \cdot \mathbf{v}_{k-1} - \alpha \cdot \nabla C\{\boldsymbol{\theta}_{k-1}\}$$

Nesterov:



$$\mathbf{v}_k = \mu \cdot \mathbf{v}_{k-1} - \alpha \cdot \nabla C\{\boldsymbol{\theta}_{k-1} + \mu \cdot \mathbf{v}_{k-1}\}$$

Momentum módszerek



Gradiens (-1)-szerese irányában

Hagyományos momentum

Nyeszterov momentum

Adaptív gradiens (AdaGrad)

- Dimenziónként normalizálja a javító lépéseket végtelen memóriájú aggregációval:

$$\left(\boldsymbol{\tau}_k\right)_{(i)} = \sum_{j=1}^{k-1} \nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_j\right\}_{(i)}^2$$

$$\Delta\boldsymbol{\theta}_{k(i)} = -\mu \cdot \nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_{k-1}\right\}_{(i)} \Big/ \left(\sqrt{\left(\boldsymbol{\tau}_k\right)_{(i)}} + \varepsilon\right)$$

  - Probléma: hajlamos a leállásra a nem felejtő memória miatt ($\left(\boldsymbol{\tau}_k\right)_{(i)}$ k függvényében monotonan nő)
  - Összetett, sok részdoménre bontható, azokban jelentősen eltérő hibafelület miatt sem jó a túl hosszú emlékezet

RMSProp

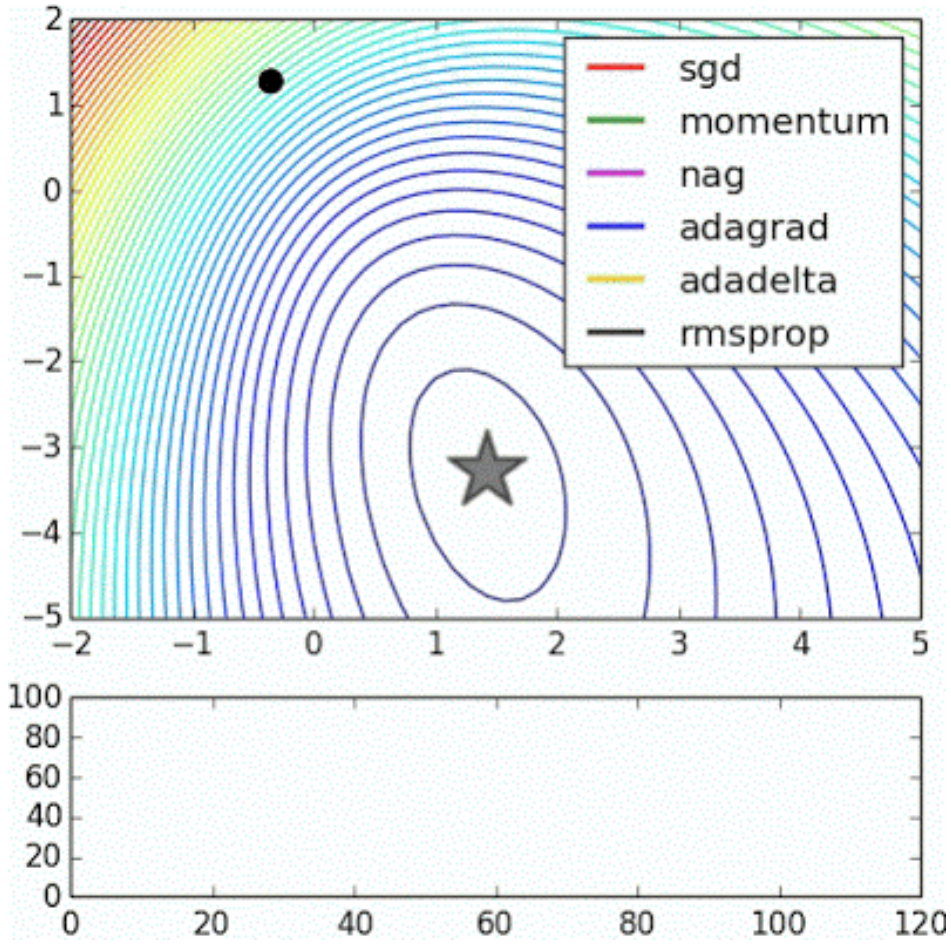
- Ötlet: végtelen összegzés helyett mozgó átlag alapján normáljunk
  - MS tag: $\left(\boldsymbol{\tau}_k\right)_{(i)} = \beta \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_{k-1}\right)_{(i)} + \left(1-\beta\right) \cdot \nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_k\right\}_{(i)}^{\ 2}$
  - Gradiens tag: $\left(\Delta\boldsymbol{\theta}_k\right)_{(i)} = -\mu \cdot \nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_{k-1}\right\}_{(i)} \Big/ \left(\sqrt{\left(\boldsymbol{\tau}_k\right)_{(i)}} + \varepsilon\right)$
  - Mozgó átlagolás miatt nem haragtartó (túl távoli dolgokra már nem emlékszik)
  - Nem nő minden iterációban az értéke

Adaptive Momentum (Adam)

- Kombináljuk az RMSProp-ot a Momentummal:
  1. $\mathbf{v}_k = \beta_1 \cdot \mathbf{v}_{k-1} + (1-\beta_1) \cdot \nabla C\{\boldsymbol{\theta}_k\} \quad \beta_1 \in (0,1)$
  2. $(\boldsymbol{\tau}_k)_{(i)} = \beta_2 \cdot (\boldsymbol{\tau}_{k-1})_{(i)} + (1-\beta_2) \cdot \nabla C\{\boldsymbol{\theta}_k\}_{(i)}^2 \quad \beta_2 \in (0,1)$
  3. $(\boldsymbol{\theta}_k)_{(i)} = (\boldsymbol{\theta}_{k-1})_{(i)} - \alpha \cdot (\mathbf{v}_k)_{(i)} \Big/ \left(\sqrt{(\boldsymbol{\tau}_k)_{(i)}} + \varepsilon \right) \quad \alpha \in \mathbf{R}_{++}$
- Ötvözi a két módszer előnyét:
  - Simítja a lépési irányt, mint a Momentum
  - Adaptálódik a hibafelülethez, mint az RMSprop
  - Mély hálók tanításának standard módszere

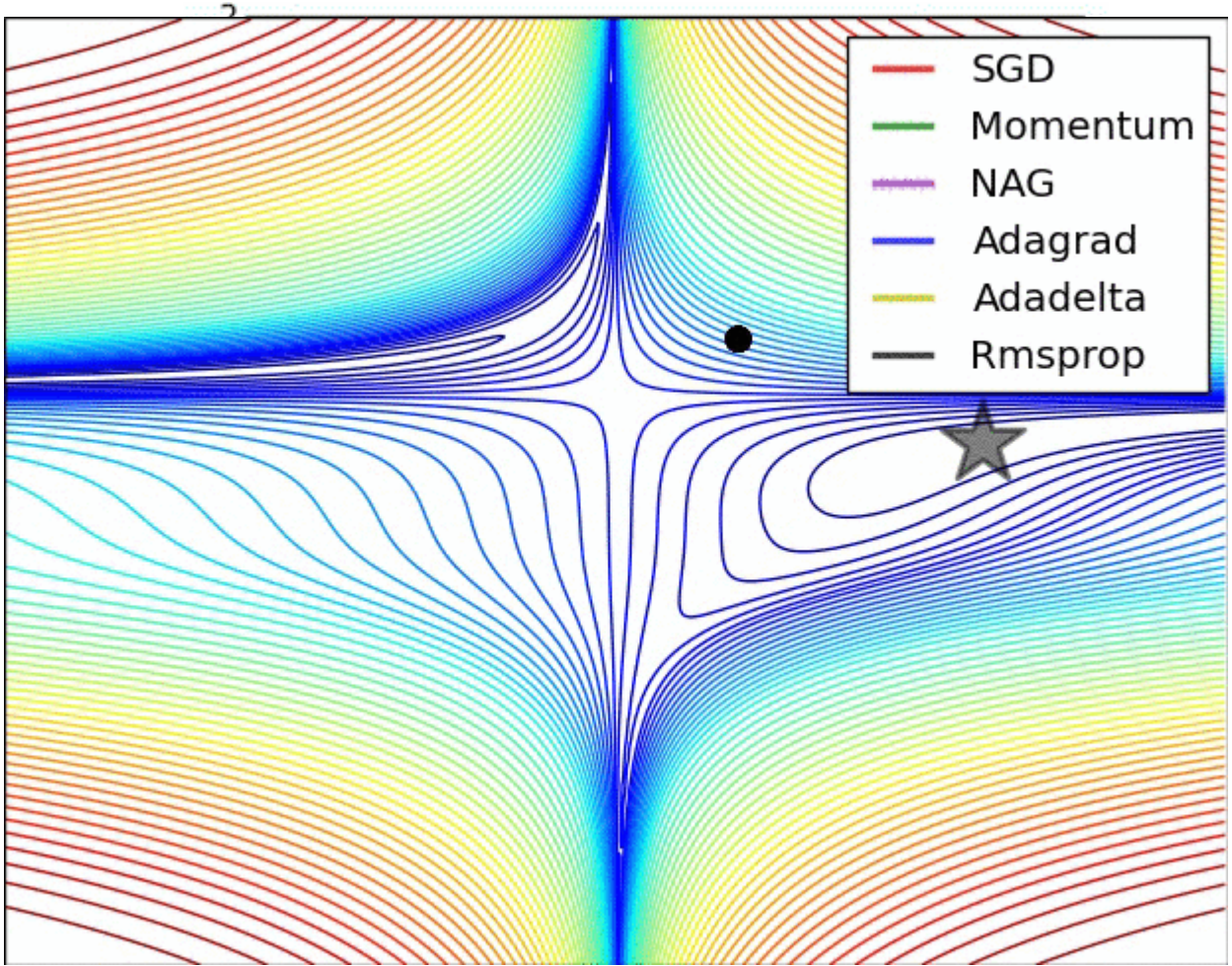
Elsőrendű optimalizációs példák

- Kvadratikus hibafelület:



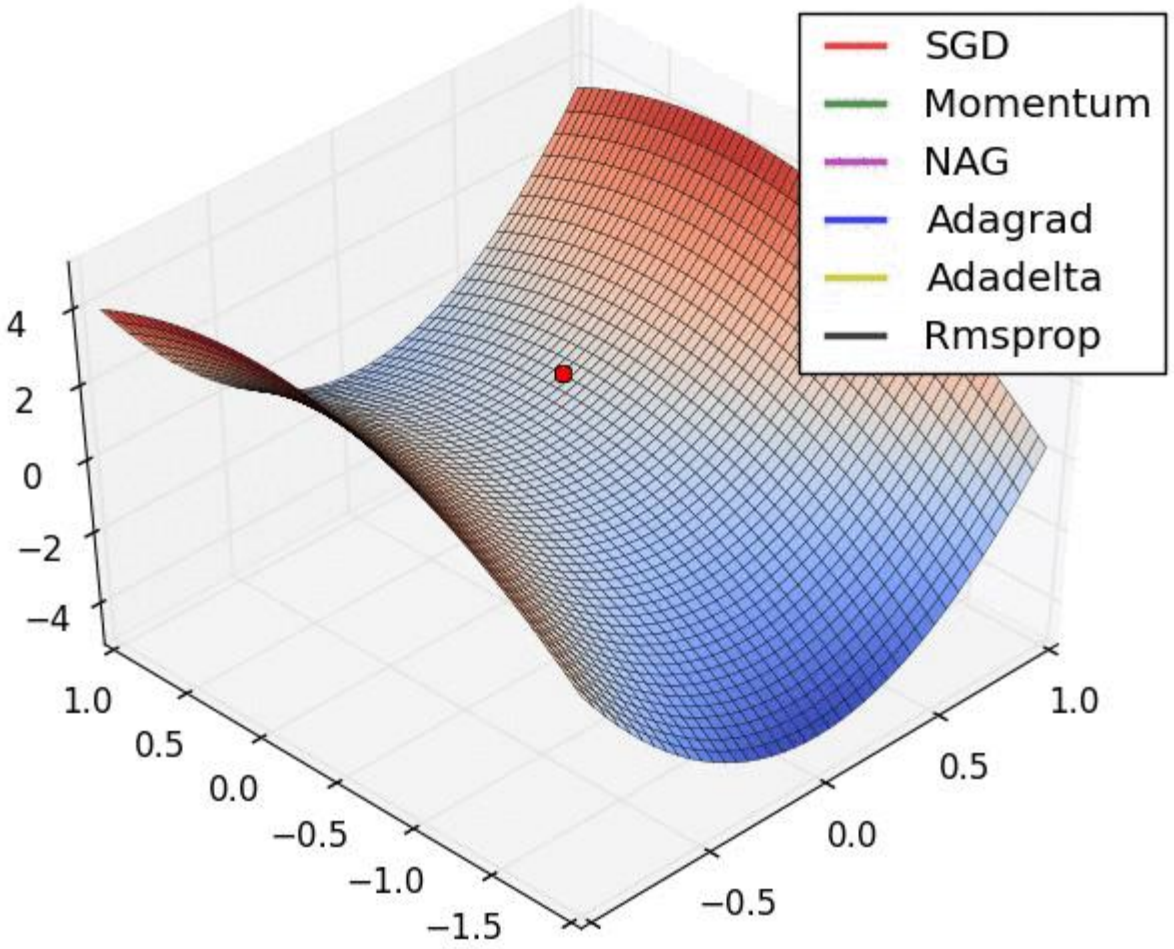
Elsőrendű optimalizációs példák

- Összetettebb hibafelület:



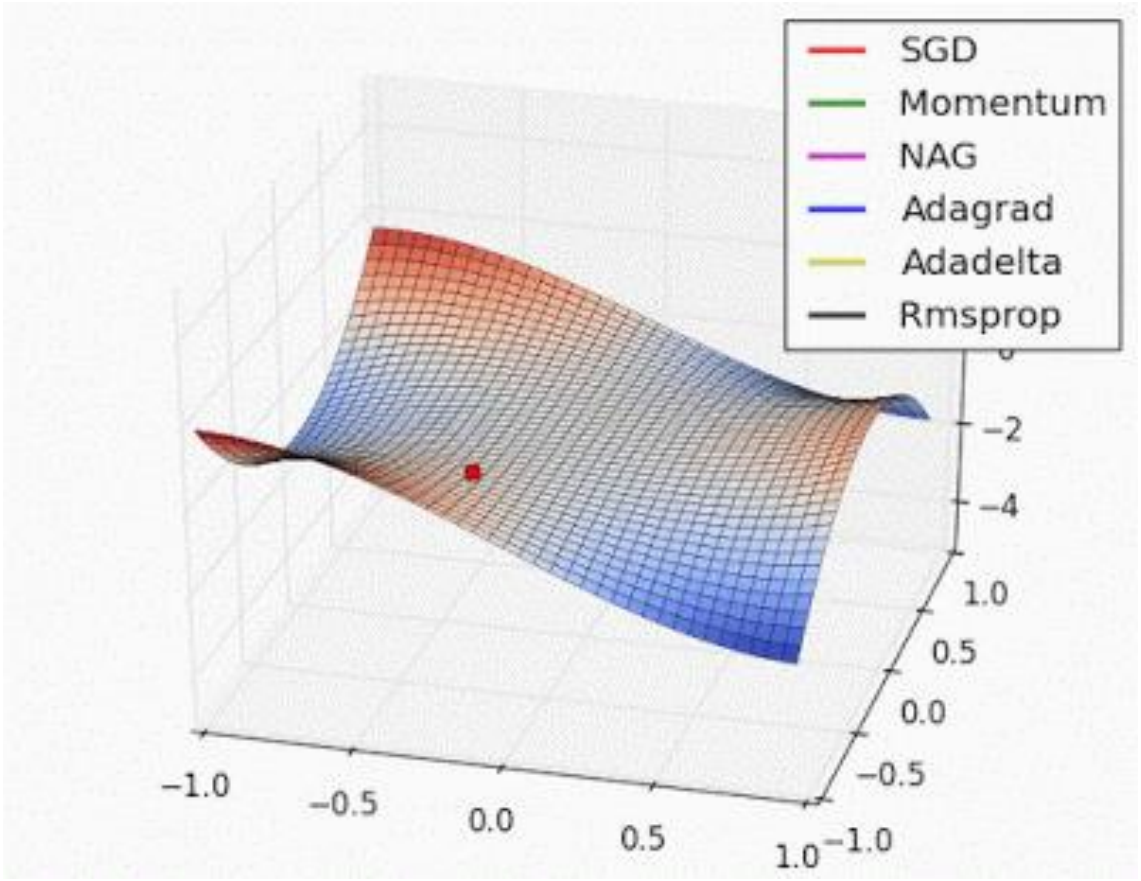
Elsőrendű optimalizációs példák

- Nyeregpont:



Elsőrendű optimalizációs példák

- Két irányból inflexiós pont:

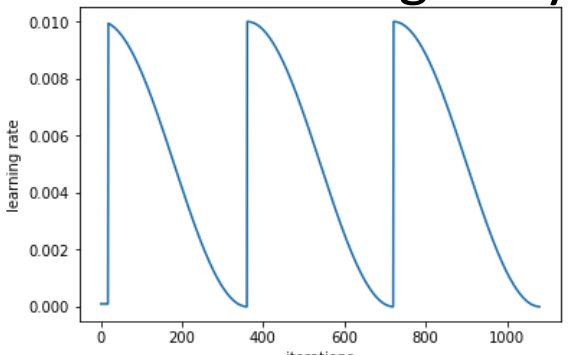


Adaptív módszerek értékelése

- Bazíroznak arra, hogy jelentősen eltérően fontosak az egyes paraméterek
  - Mély NH-knál ez tipikus, más területen viszont ritkán az
  - Láttunk már ilyen törekvéseket (SVM)
- Ha a koordináta tengellyel korrelálatlanok az autokorrelációs mtx. sajátértékei, akkor nem segítenek

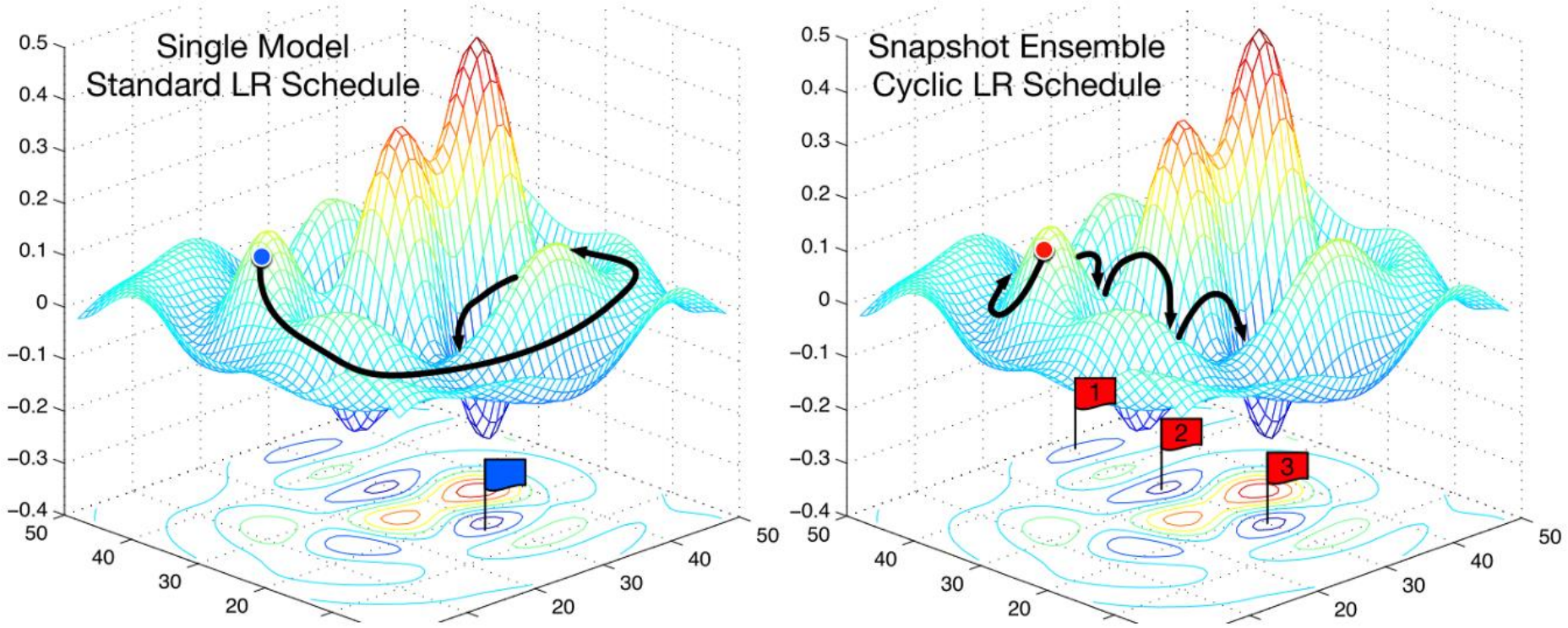
Optimalizáció hiper paraméterei

- Bátorsági tényező:
  - Konvergenciához szükséges értéke maximalizált
    - Négyzetes hibafüggvény esetén: $\mu \leq 1/\lambda_{\max}\{\mathbf{R}_{\mathbf{xx}}\}$
    - Általános esetben: $\mu_{\max} \approx 1/\mathrm{L}\{C(\cdot)\}$
  - Learning rate decay elve:
    - Kezdetben nagy bátorsági tényező (minél hamarabb opt. közelébe jussunk)
    - Majd ennek értékét redukáljuk (kicsiket lépünk, hogy be is találjunk)
  - Learning rate decay restarttal (Ciklikus bátorsági tényező):
    - Motiváció: rosszul általánosító optimumok elkerülése



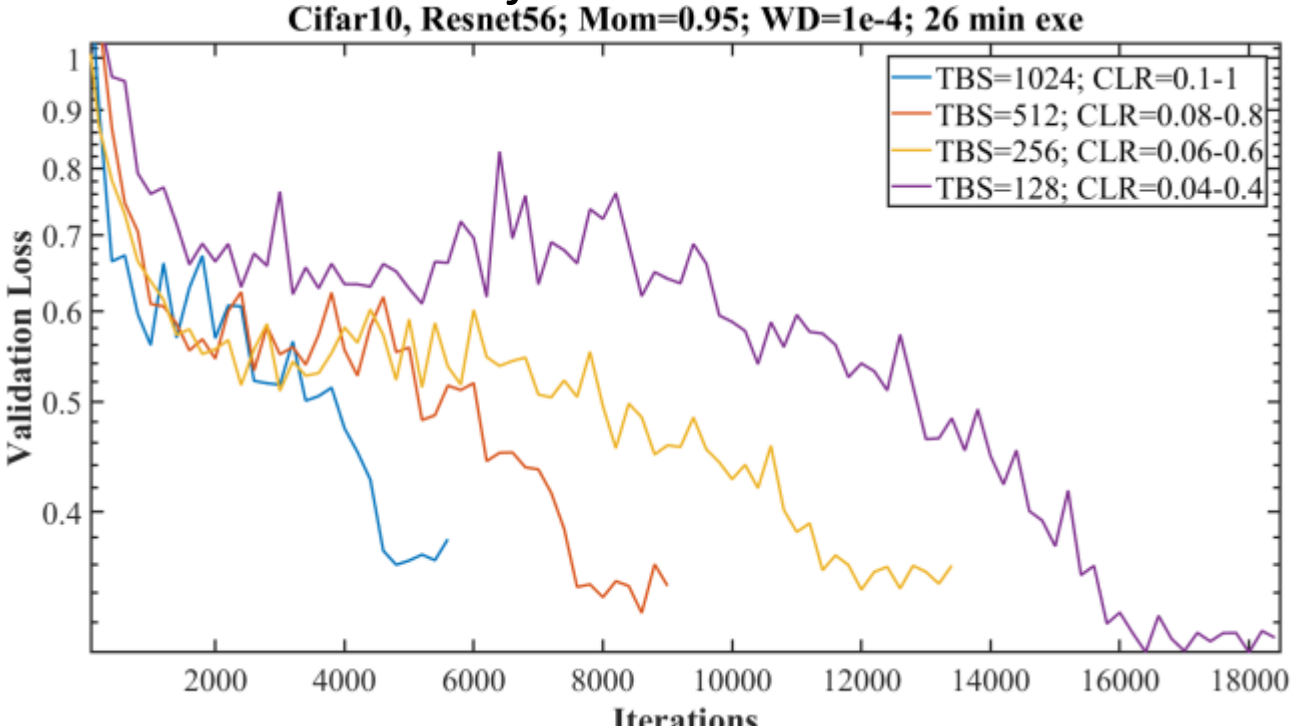
Optimalizáció hiper paraméterei (*)

- Ciklikus bátorsági tényezővel szakértő együttes:



Optimalizáció hiper paraméterei

- Batch mérete:
  - Hibafelület közelítésének zaját szabályozza
  - Kisebb batch esetén nagyobb zaj (regularizálunk)
  - Hardver sok esetben determinálja maximális értékét
    - GPU VRam

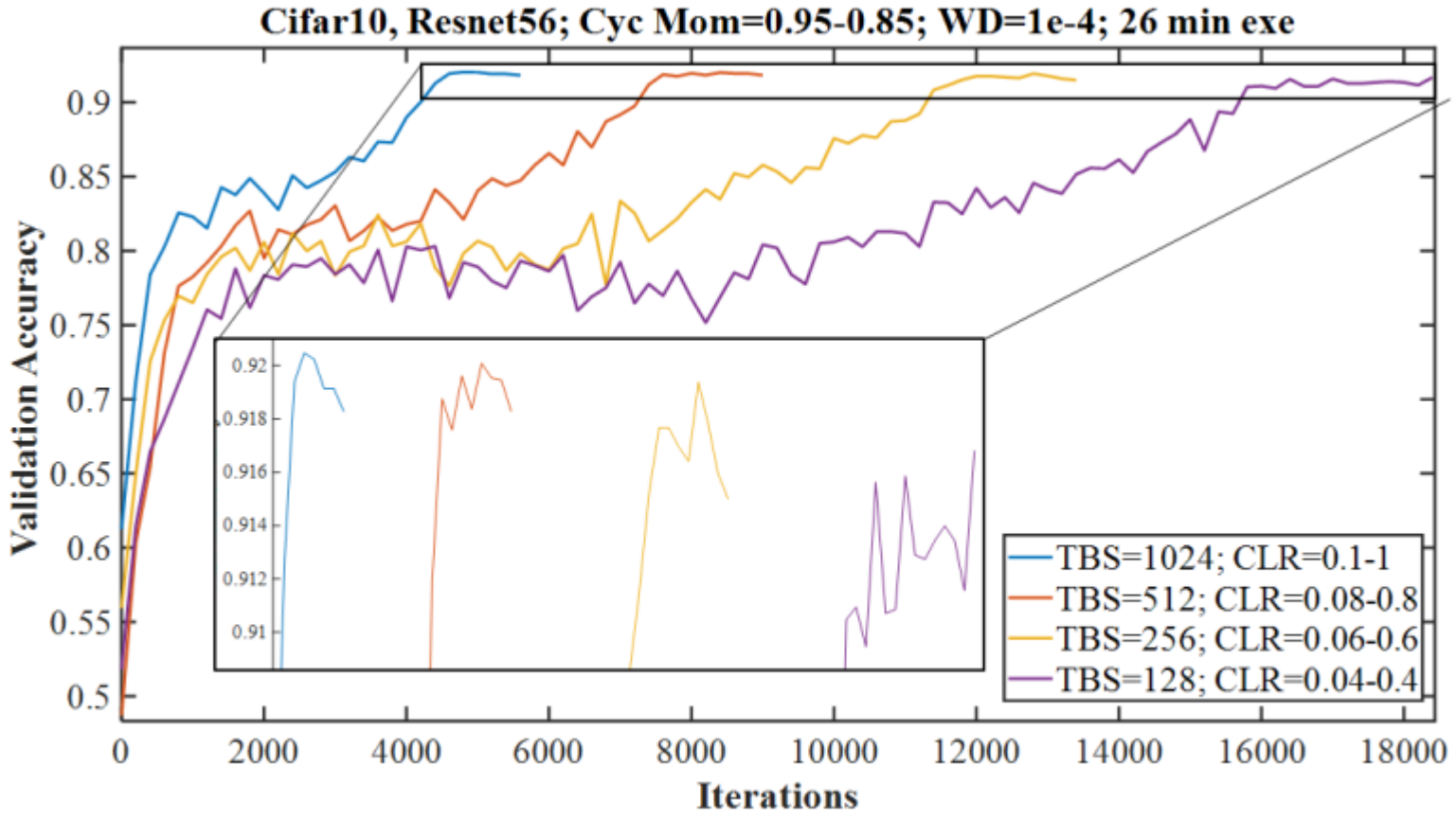


Optimalizáció hiper paraméterei

- Momentum:
  - $\boldsymbol{\theta}_k = \boldsymbol{\theta}_{k-1} + (\mathbf{v}_k = \beta \cdot \mathbf{v}_{k-1} - \mu \cdot \nabla C\left\{\boldsymbol{\theta}_{k-1}\right\})\ \ \beta \in (0.5, 1)$
  - látható, hogy a bátorsági tényező és a momentum tag „hasonlóan” növeli a lépés nagyságát
    - Túl nagy momentum viszont lomhává teszi a rendszert (kevésbé tud konvergálni szűkebb tartományokba)
    - Ellenben segít az inflexiós / nyeregpontokon átlendülésében
  - Elv: ellentétesen hangoljuk értékét a bátorsági tényezővel
    - Ciklikusan csökkenő bátorsági tényező
    - Ciklikusan növekvő momentum tag (u.a. ciklusidővel)

Optimalizáció hiper paraméterei (*)

- Hiper paraméterek együttes hangolása



Inicializáció

- Sekély hálóknál elég csak a szimmetria megtörése
- Mély hálóknál ez két lehetőséghez vezethet:
  - Aktivációk eltűnése a kimenet felé haladva (baj, mert a hiba visszaterjesztésnél 0-val szorzunk, nem tanul)
  - Aktivációk felrobbanása (végtelennel szorzunk, ez sem jó)
- Xavier Glorot inicializáció:
  - Az *alkalmazott nemlinearitás függvényében* úgy választjuk meg a kezdeti súlyokat, hogy *az aktivációk (várható) eloszlása* (a réteg sorszámától függetlenül) *egyenletes marad*jon.