Тверской
государственный
технический
университет

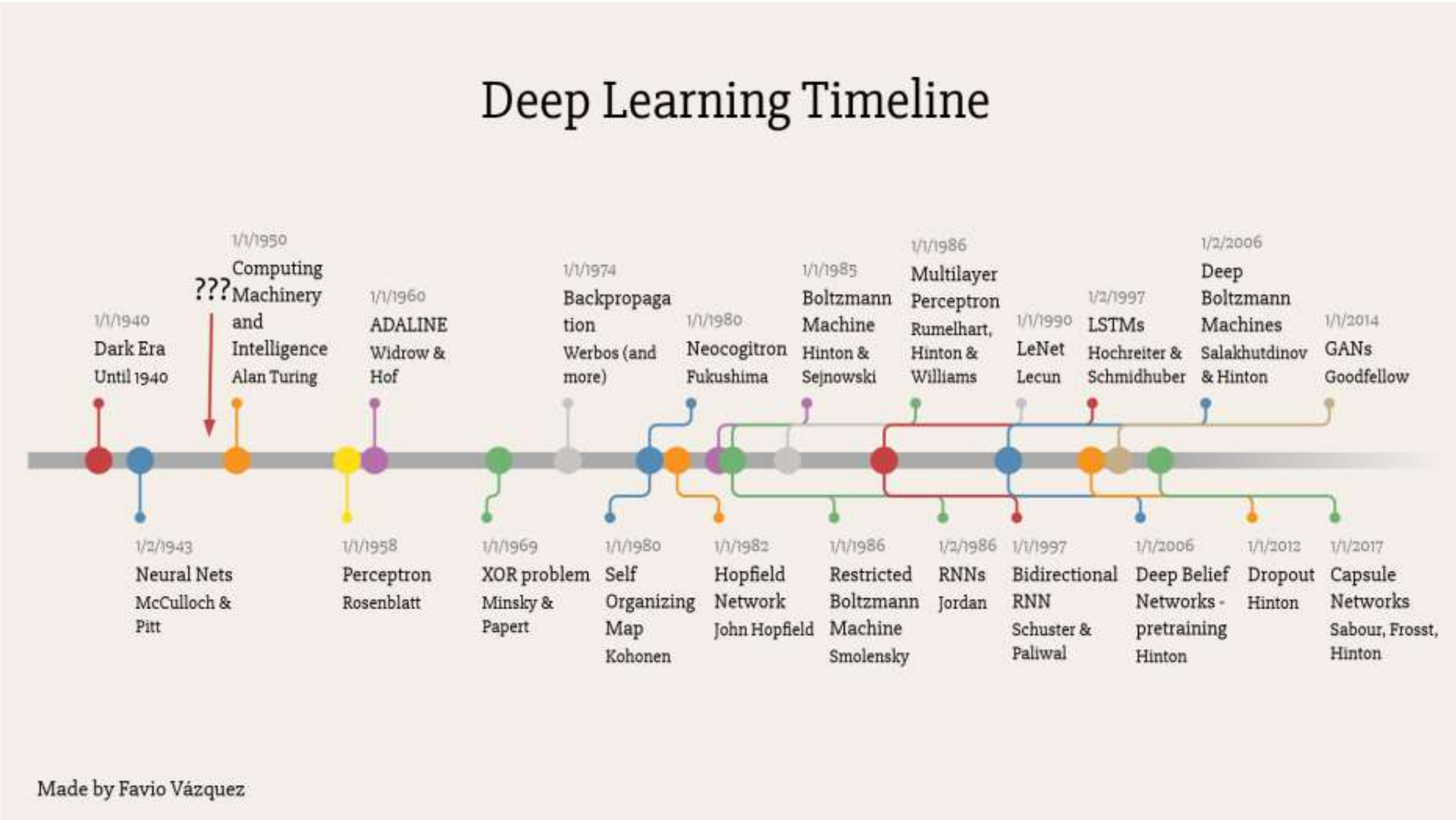
Интеллектуальные информационные системы

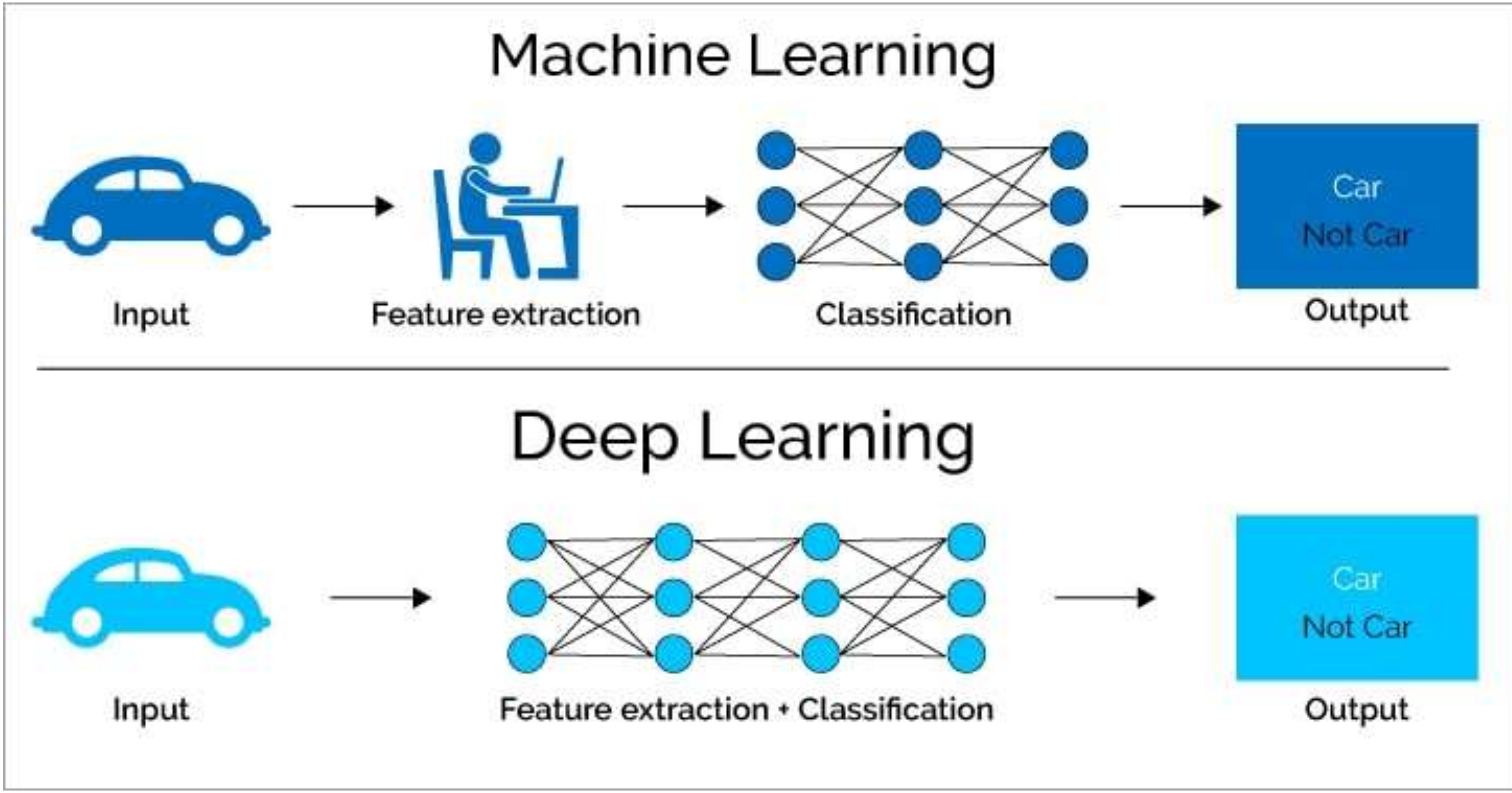
Искусственные нейронные сети
Deep Learning Intro

Материалы курса доступны по ссылке:
https://github.com/AndreyShpigar/ML-course

2024 г.

История развития нейронных сетей




Machine Learning
Input
Feature extraction
Classification
Car
Not Car
Output
Deep Learning
Input
Feature extraction + Classification
Car
Not Car
Output

McCulloch-Pitts Neuron

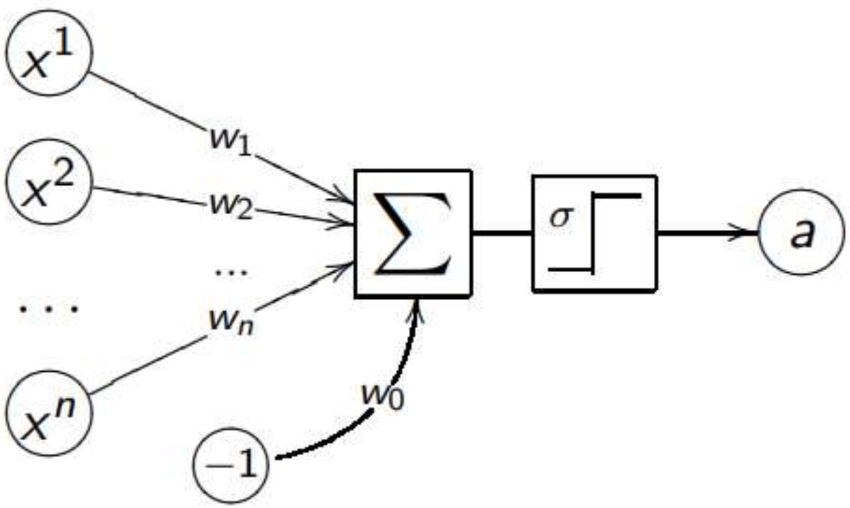
Линейная модель нейрона:

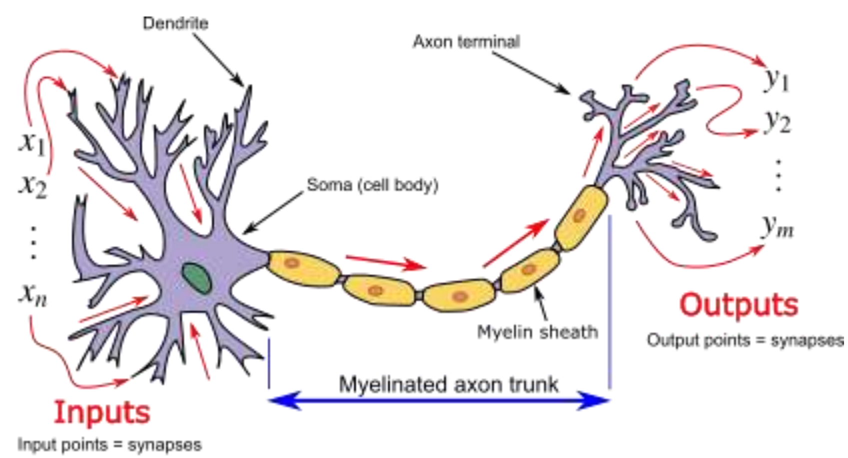
$$a(x, w) = \sigma(\langle w, x \rangle) = \sigma\left(\sum_{j=1}^{n} w_j f_j(x) - w_0\right)$$

$\sigma(z)$ – функция активации

w_j – весовые коэффициенты синаптических связей

w_0 – порог активации





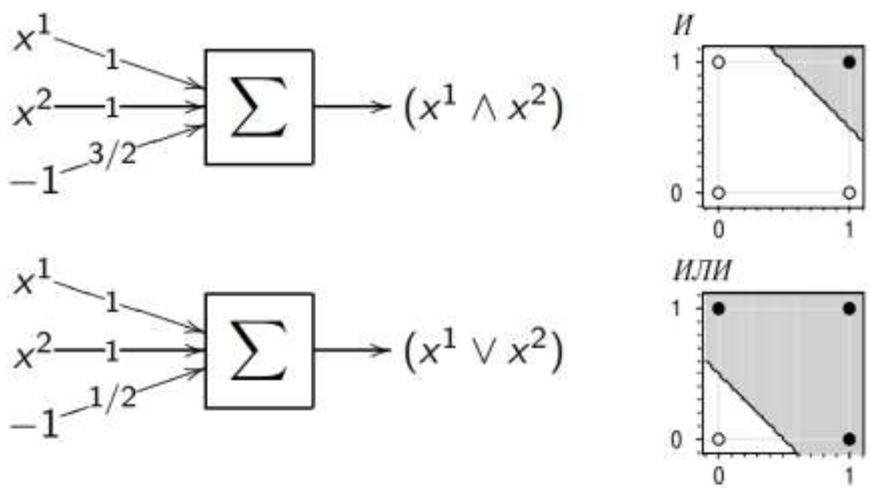
Нейронная сеть (ИНС, НС) – сложная дифференцируемая функция, задающая отображение из исходного признакового пространства в пространство ответов, все параметры которой могут настраиваться одновременно и взаимосвязано

Нейронная сеть – универсальный аппроксиматор функций

С помощью одного нейрона можно реализовать гиперплоскость

Функции И, ИЛИ, НЕ бинарных признаков x^1, x^2

$$x^1 \wedge x^2 = \left[x^1 + x^2 - \tfrac{3}{2} > 0\right];$$
$$x^1 \vee x^2 = \left[x^1 + x^2 - \tfrac{1}{2} > 0\right];$$
$$\neg x^1 = \left[-x^1 + \tfrac{1}{2} > 0\right];$$



Источник: http://www.machinelearning.ru/wiki/images/e/e1/Voron-ML-ANN-slides.pdf

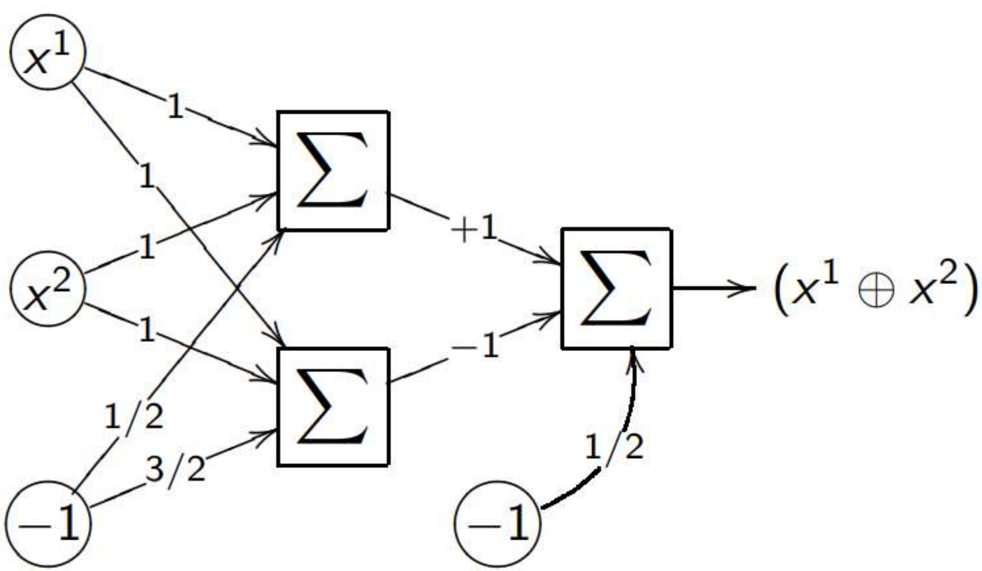
Например, функция XOR не реализуема одним нейроном, но может быть реализована двумя способами:

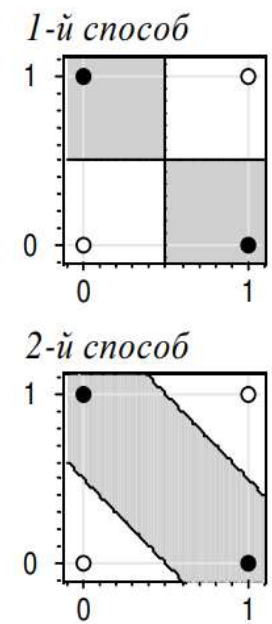
- Добавлением нелинейного признака:

$$x^1 \oplus x^2 = \left[x^1 + x^2 - 2x^1x^2 - \frac{1}{2} > 0\right]$$

- Построить нейронную сеть (многослойную суперпозицию) функций И, ИЛИ:

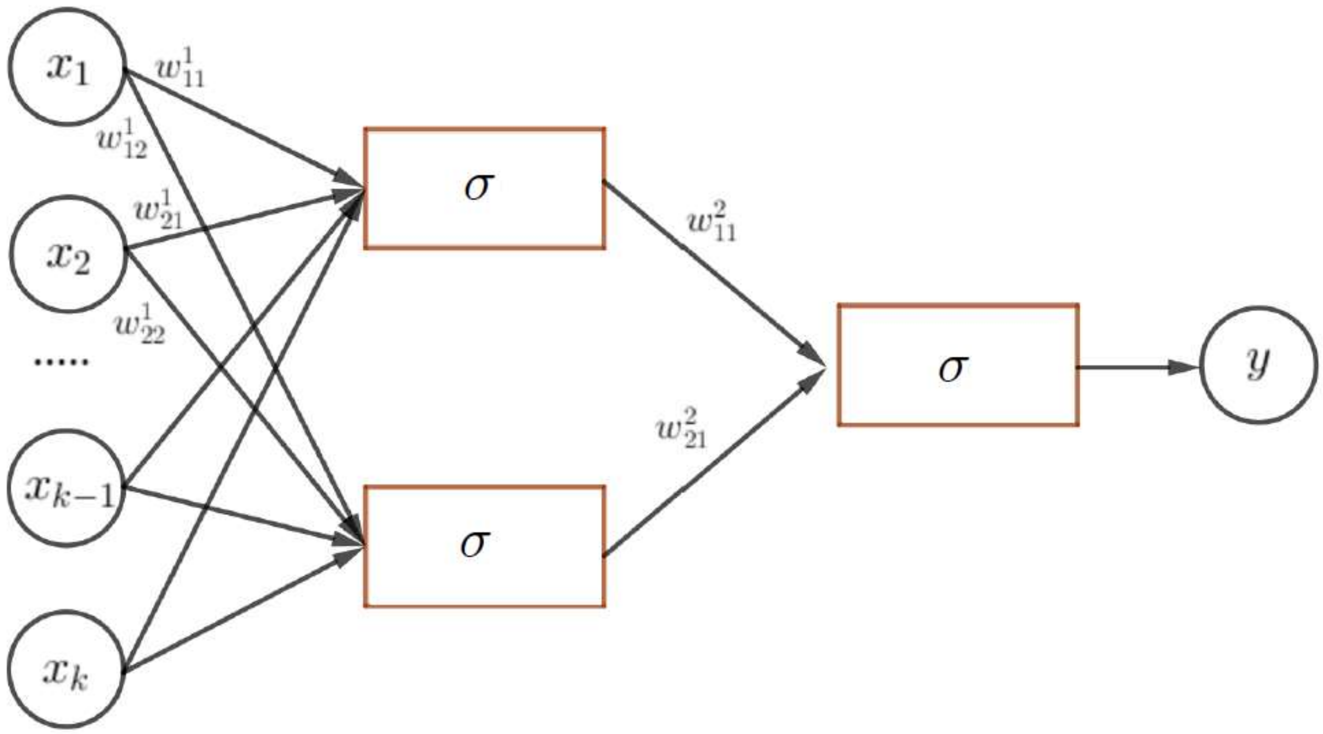
$$x^1 \oplus x^2 = \left[(x^1 \vee x^2) - (x^1 \wedge x^2) - \frac{1}{2} > 0\right]$$





Источник: http://www.machinelearning.ru/wiki/images/e/e1/Voron-ML-ANN-slides.pdf

MLP (multi-layer-perceptron)



$$h = \sigma(X \cdot W)$$
$$y = \sigma(h \cdot W)$$

Универсальная теорема аппроксимации

Если $\sigma(z)$ *- непрерывная сигмоида, то для любой непрерывной на [0,1]*^{n} *функции f(x) существуют такие значения параметров H,* $\alpha_h \in R, w_h \in R^n, w_0 \in R,$ *что двухслойная сеть*

$$a(x) = \sum_{h=1}^{H} \alpha_h \, \sigma(\langle x, w_h \rangle - w_0)$$

равномерно приближает f(x) с любой точностью ε:

$$|a(x) - f(x)| < \varepsilon, \text{для всех } x \in [0,1]^n$$

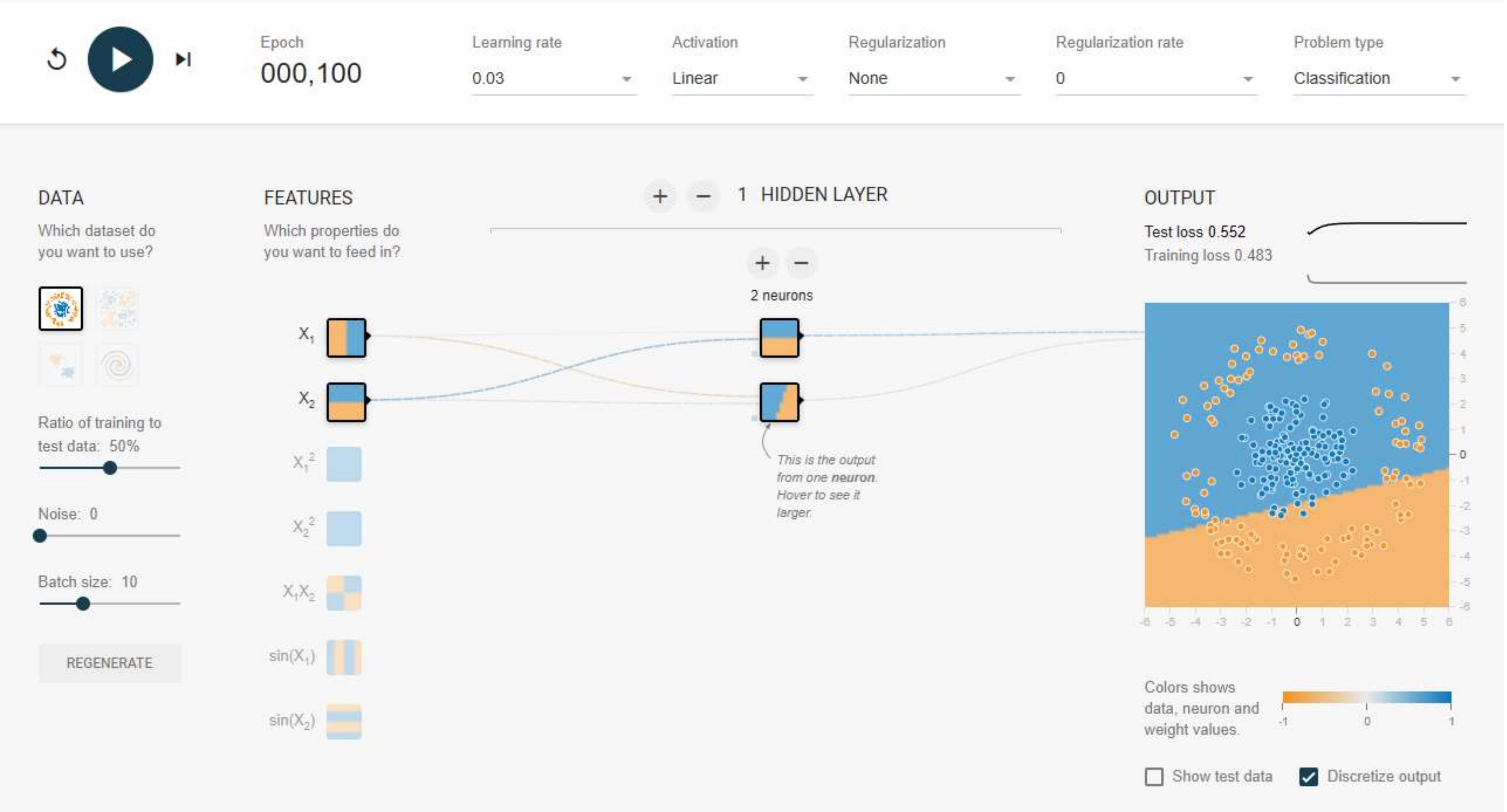
Искусственная нейронная сеть прямой связи с одним скрытым слоем может аппроксимировать любую непрерывную функцию многих переменных с любой точностью при условии достаточного количества нейронов и подбора оптимального вектора весов

George Cybenko. Approximation by Superpositions of a Sigmoidal function. Mathematicscs of Control, Signals, and Systems. 1989

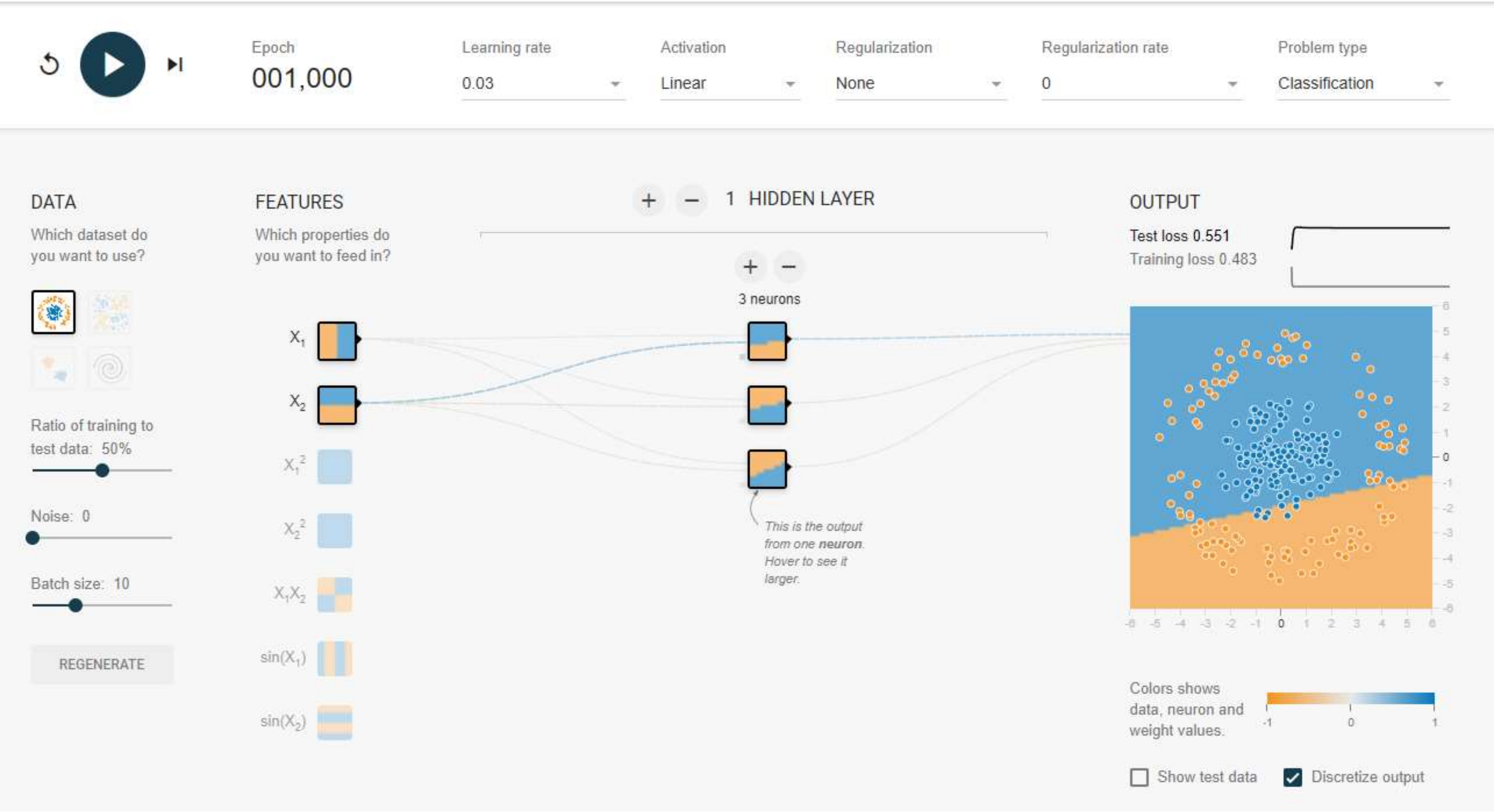
- Линейный слой (linear layer, dense layer) – линейное преобразование над входящими данными. Его обучаемые параметры – матрица весов W и вектор w_0. Слой преобразует d-мерные векторы в k-мерные:

$$x \to xW + w_0, W \in R^{d \times k}, x \in R^d, w_0 \in R^k$$

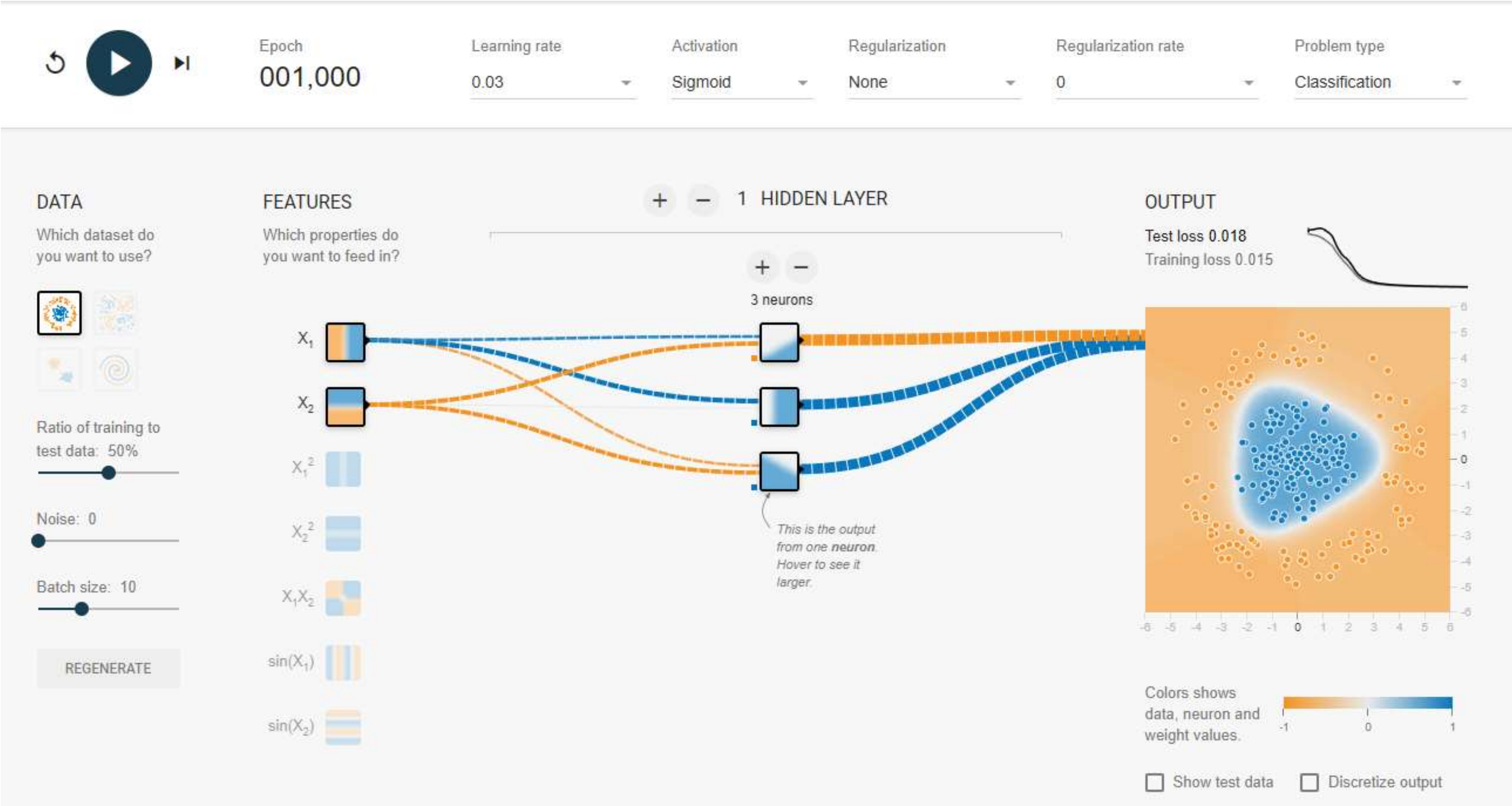
- Функция активации (activation function) – нелинейное преобразование, поэлементно применяющееся к пришедшим на вход данным. Благодаря функциям активации НС способны порождать более информативные признаковые описания, преобразуя данные нелинейным образом



Источник: https://playground.tensorflow.org/



Источник: https://playground.tensorflow.org/



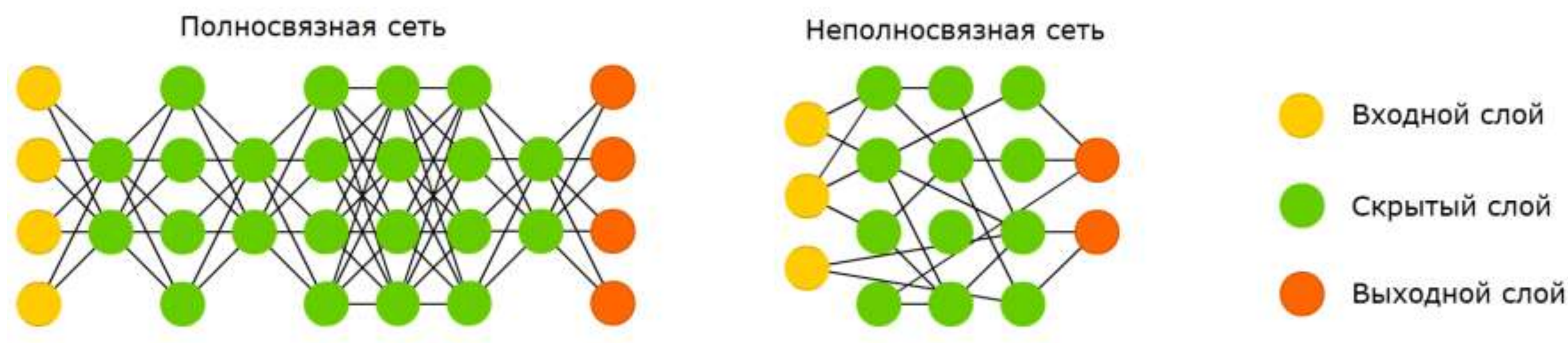
Источник: https://playground.tensorflow.org/

Входной слой (input layer) – вход нейросети, который получает исходные данные в виде матрицы «объекты-признаки»

Скрытый слой (hidden layer) – преобразовывают исходные данные в промежуточные (внутренние, скрытые) представления

Выходной слой (output layer) – финальное преобразование промежуточного представления в пространство ответов

Полносвязная НС (fully connected, multilayer perceptron, MLP с одним слоем) – нейросеть, в которой есть только линейные слои и различные функции активации.



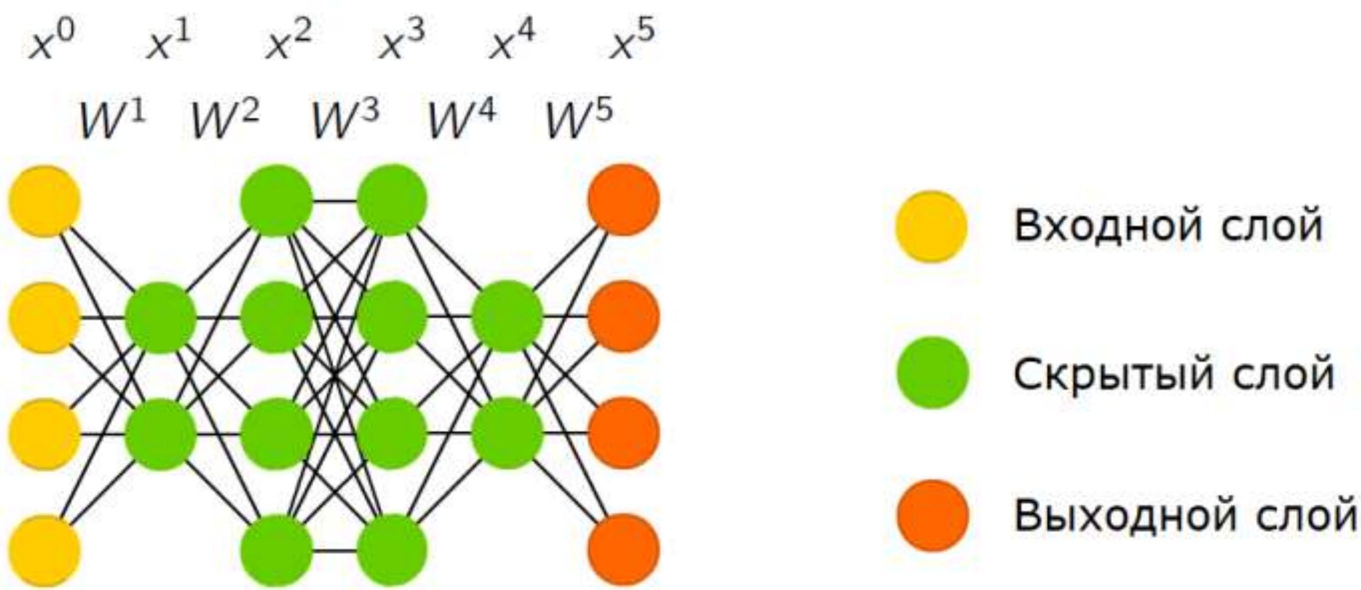
Архитектура сети: H_l — число нейронов в l-м слое, $l = 1, \dots, L$

$x^0 = x = \left(f_j(x)\right)_{j=0}^{n}$ — вектор признаков на входе сети, $H_0 = n$

$x^l = \left(x_h^l\right)_{h=0}^{H_l}$ — вектор признаков на выходе l-го слоя, $x_0^l = -1$

$x^L = a(x) = \left(a_m(x)\right)_{m=1}^{M}$ — выходной вектор сети, $H_L = M$

$W^l = (w_{kh}^l)$ — матрица весов l-го слоя, размера $(H_{l-1} + 1) \times H_l$

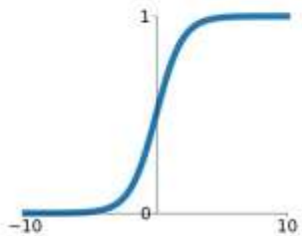


Источник: http://www.machinelearning.ru/wiki/images/e/e1/Voron-ML-ANN-slides.pdf

Наиболее популярные функции активации

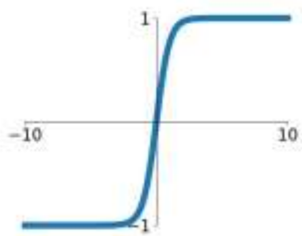
Sigmoid

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



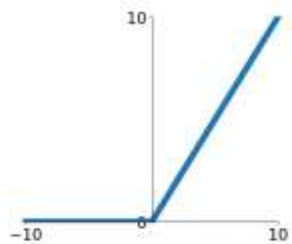
tanh

$\tanh(x)$



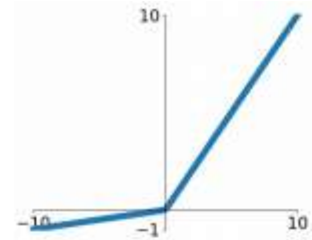
ReLU

$\max(0, x)$



Leaky ReLU

$\max(0.1x, x)$

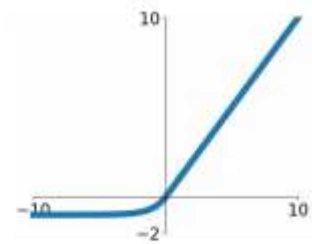


Maxout

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

ELU

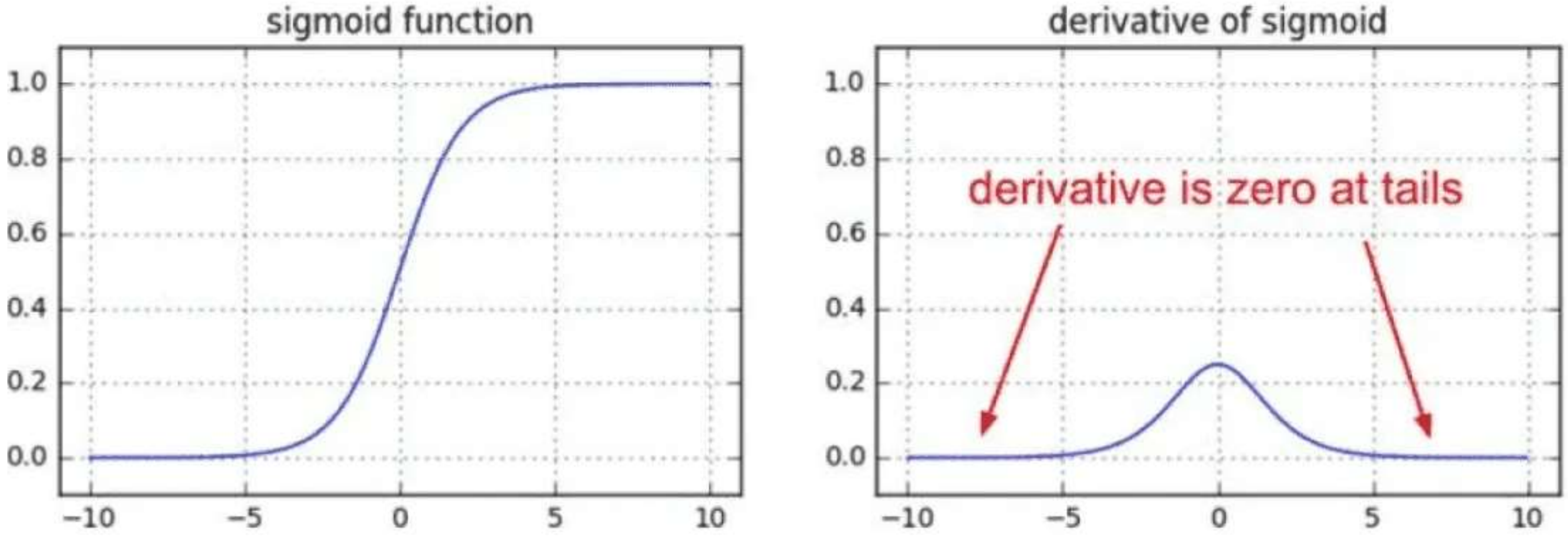
$$\begin{cases} x & x \geq 0 \\ \alpha(e^x - 1) & x < 0 \end{cases}$$



- Затухание градиента (vanishing gradient, паралич сети) – значение градиента настолько малое (приближается к нулю), что веса практически не изменяются и обучение НС фактически останавливается
- Признаки:

- точность модели растет медленно или вообще не растет

- веса модели экспоненциально уменьшаются во время обучения либо стремятся к нулю



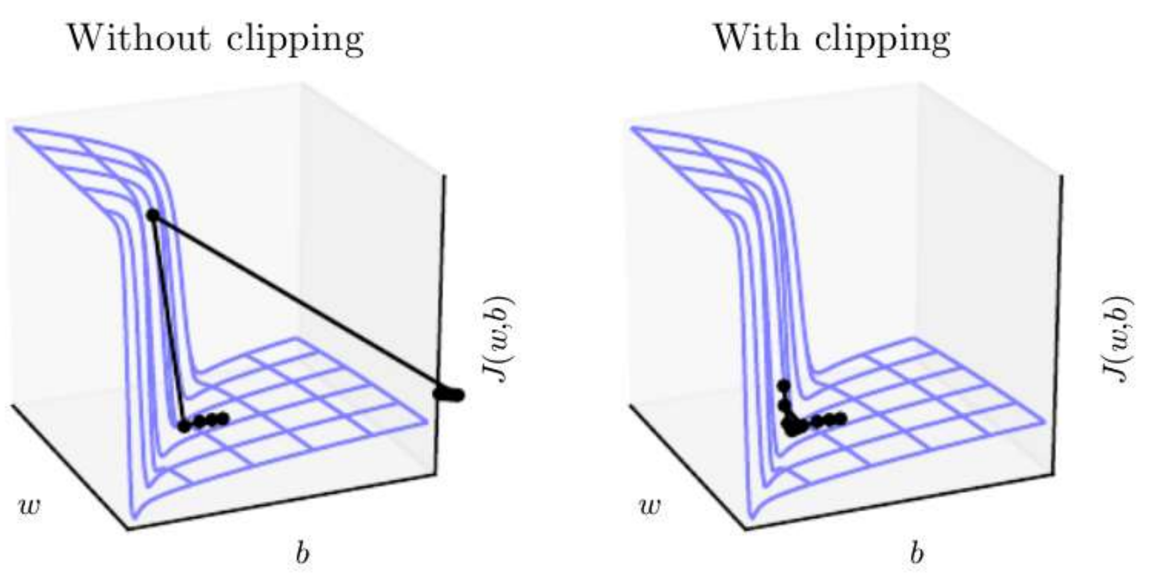
- Взрыв градиента (gradient exploding) – «взрывной рост» градиента
- Признаки:

\- модель плохо обучается на данных, функция потерь имеет высокие значения

\- функция потерь меняется скачкообразно

\- веса модели растут экспоненциально, принимают значение NaN

- Для решения проблемы можно применить эвристику Gradien Clipping: если $\|g\| > \theta$, то $g \coloneqq g\theta/\|g\|$



- Rectified linear unit (ReLU):

\+ простота вычисления активации и производной, достаточно сравнить значение производной с нулем, за счет этого быстрее, чем сигмоида

\- область значений является смещенной относительно нуля

\- для отрицательных значений производная равна нулю, что может привести к затуханию градиента

- Leaky ReLU и Parametric ReLU (PReLU) - позволяет получить более симметричную относительно нуля область значений за счет гиперпараметра α, обеспечивающего наклон слева от нуля
- Exponential ReLU (ELU) – гладкая аппроксимация ReLU, но так как надо считать экспоненту, редко используется на практике
- Sigmoid – исторически одна из первых функций активации, рассматривалась как гладкая аппроксимация пороговой функции, эмулирующая активацию естественного нейрона. На практике используется в задачах бинарной классификации

\- область значений смещена относительно нуля

\- на хвостах обладает практически нулевой производной, что может привести к затуханию градиента

\- максимальное значение производной составляет 0.25, что так же приводит к затуханию градиента

- Гиперболический тангенс, Tanh:

\+ имеет ограниченную область значений, как и сигмоида

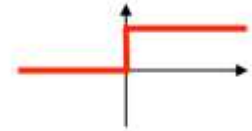
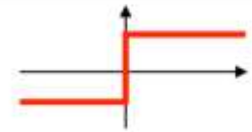
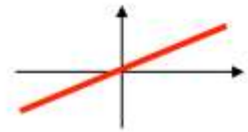
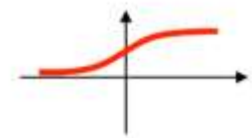
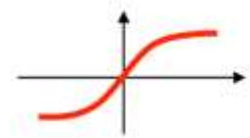
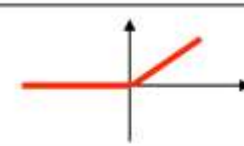
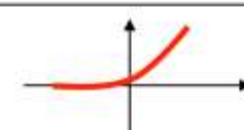
\+ эта область значений симметрична, в отличии от сигмоиды

\- требуется вычисление экспоненты, что является достаточно сложной вычислительной операцией

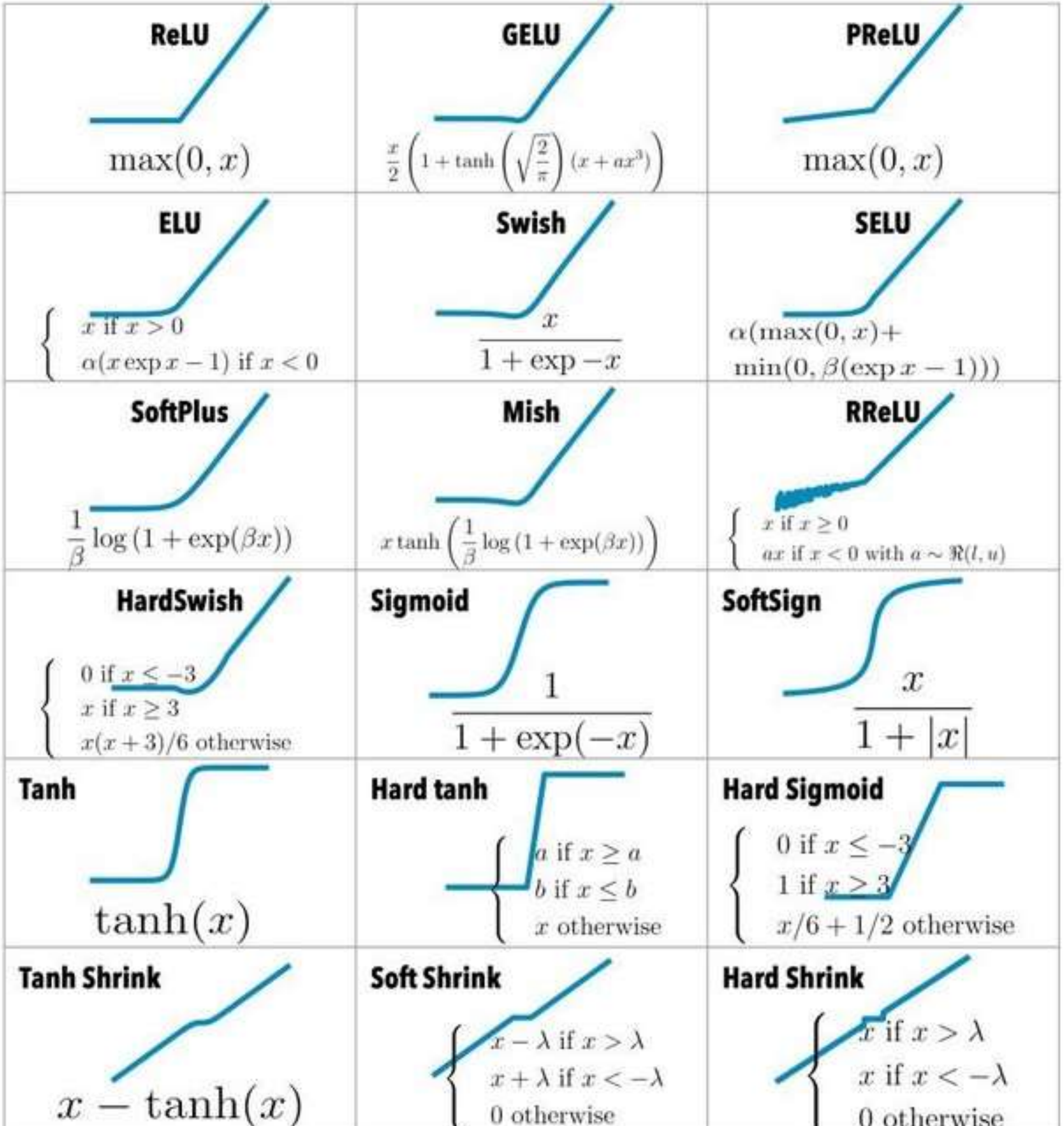
\- на хвостах производная близка к нулю, что может привести к затуханию градиента

Как выбрать функцию активации?

- Для задач классификации - Sigmoid (бинарная) или Softmax (многоклассовая), если хотим получить вероятности классов в качестве выходных данных
- Для задач регрессии - используйте ReLU или его модификации, такие как LeakyReLU или ELU. Эти функции обычно дают лучшую производительность в задачах регрессии
- Для моделей глубокого обучения, ReLU является общим выбором для скрытых слоев, так как она может ускорить обучение, но можно также использовать другие функции, например, PReLU
- Для рекуррентных нейронных сетей, обычно используются функции активации Tanh.
- Если не уверены, какую функцию активации использовать – начинаем с ReLU, так как она быстро считается, затем подбираем в процессе валидации. Не забываем оценивать значения градиента и отслеживать взрыв или затухание, а так же значение функции потерь

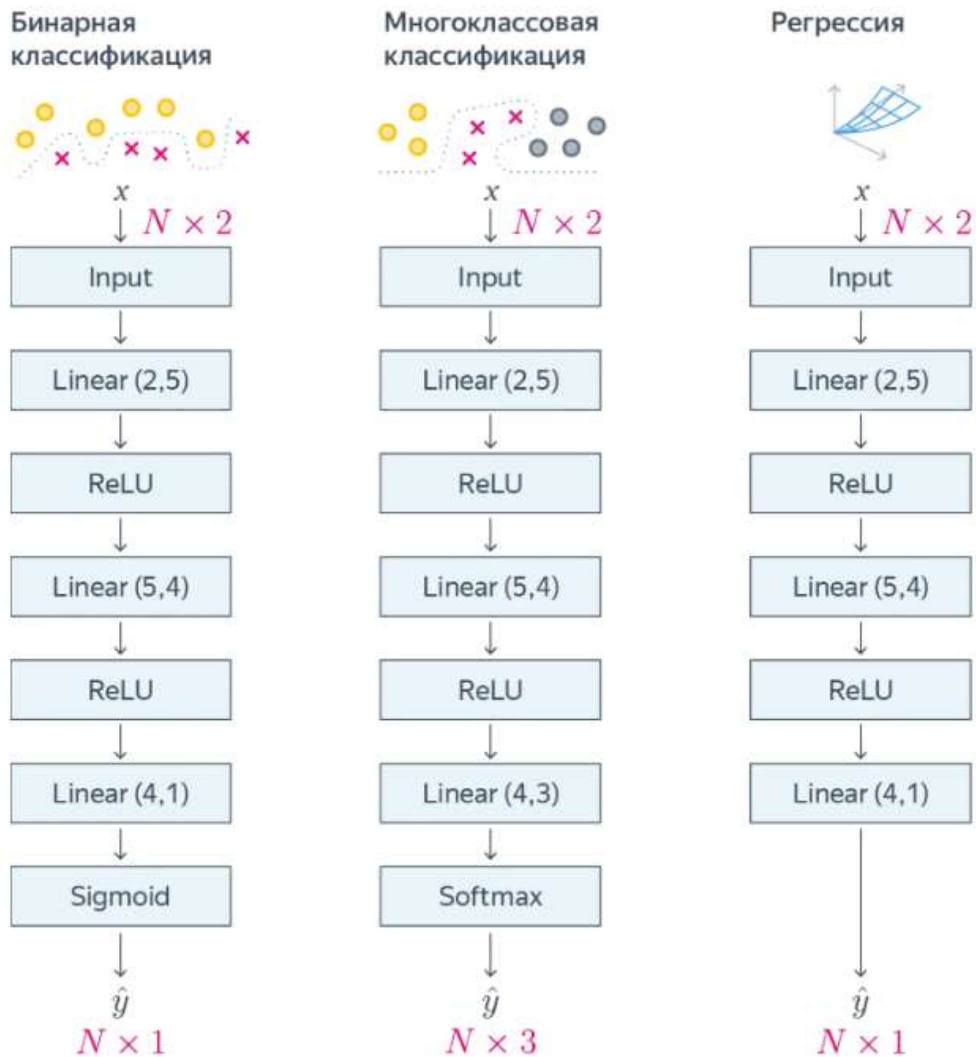
Activation function	Equation	Example	1D Graph
Unit step (Heaviside)	$\phi(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ 0.5, & z = 0, \\ 1, & z > 0, \end{cases}$	Perceptron variant	
Sign (Signum)	$\phi(z) = \begin{cases} -1, & z < 0, \\ 0, & z = 0, \\ 1, & z > 0, \end{cases}$	Perceptron variant	
Linear	$\phi(z) = z$	Adaline, linear regression	
Piece-wise linear	$\phi(z) = \begin{cases} 1, & z \geq \frac{1}{2}, \\ z + \frac{1}{2}, & -\frac{1}{2} < z < \frac{1}{2}, \\ 0, & z \leq -\frac{1}{2}, \end{cases}$	Support vector machine	
Logistic (sigmoid)	$\phi(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$	Logistic regression, Multi-layer NN	
Hyperbolic tangent	$\phi(z) = \frac{e^{z} - e^{-z}}{e^{z} + e^{-z}}$	Multi-layer Neural Networks	
Rectifier, ReLU (Rectified Linear Unit)	$\phi(z) = max(0, z)$	Multi-layer Neural Networks	
Rectifier, softplus	$\phi(z) = \ln(1 + e^{z})$	Multi-layer Neural Networks	

Neural Network Activation Functions: a small subset!



Почему Deep Learning?

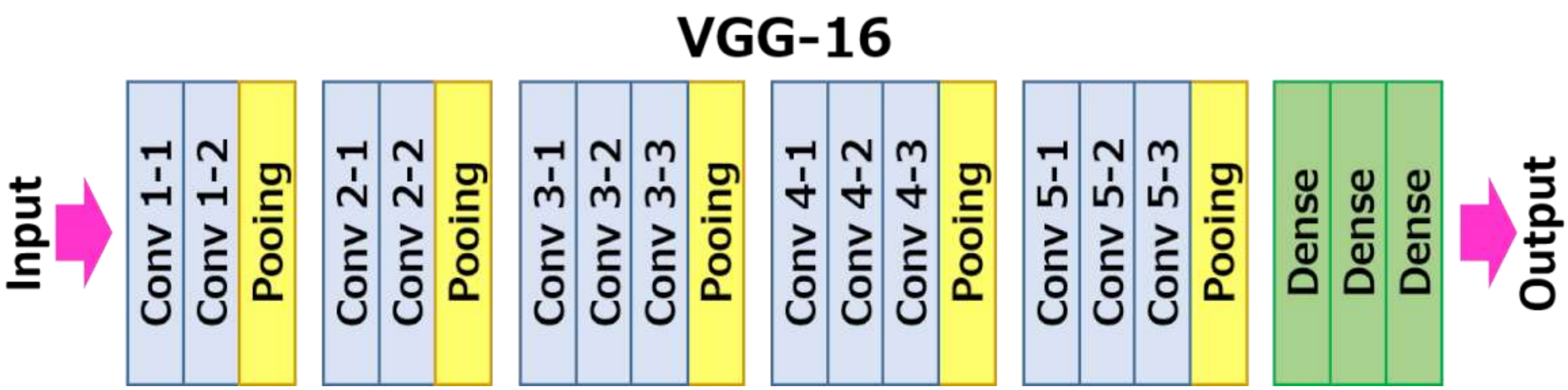
- Архитектура НС – структура слоев и связей между ними, позволяющая наделять сеть нужными свойствами



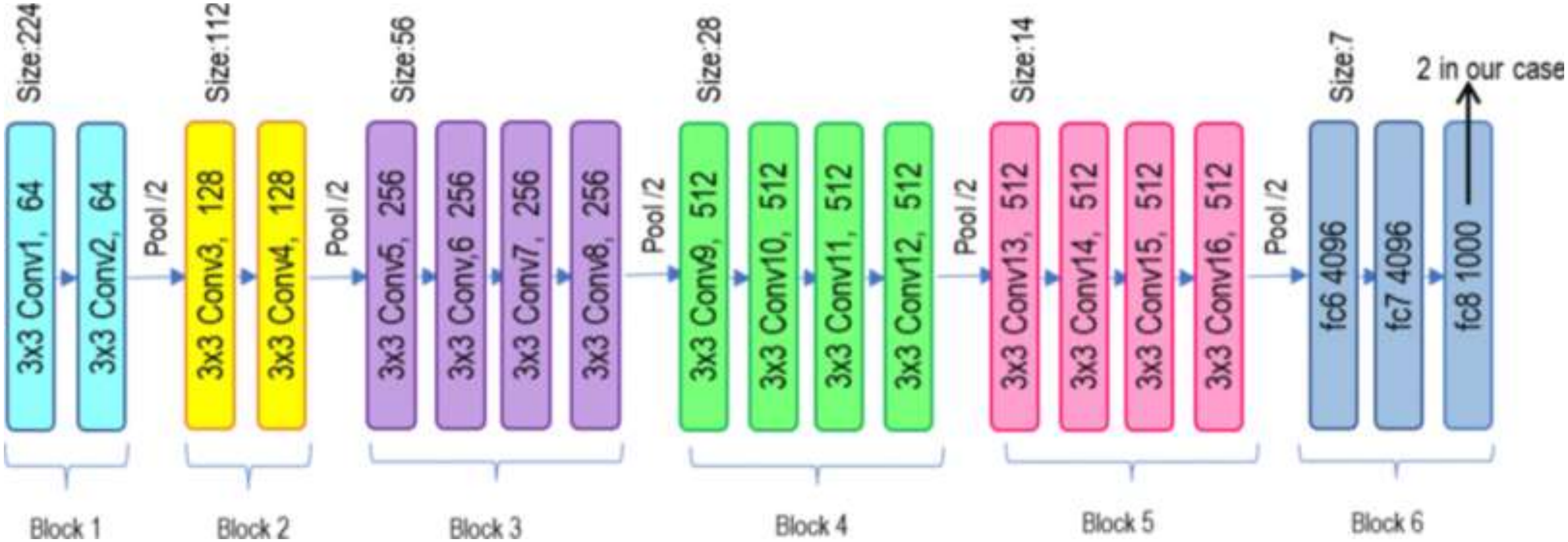
Источник: https://education.yandex.ru/handbook/ml/article/pervoe-znakomstvo-s-polnosvyaznymi-nejrosetyami

Почему Deep Learning?

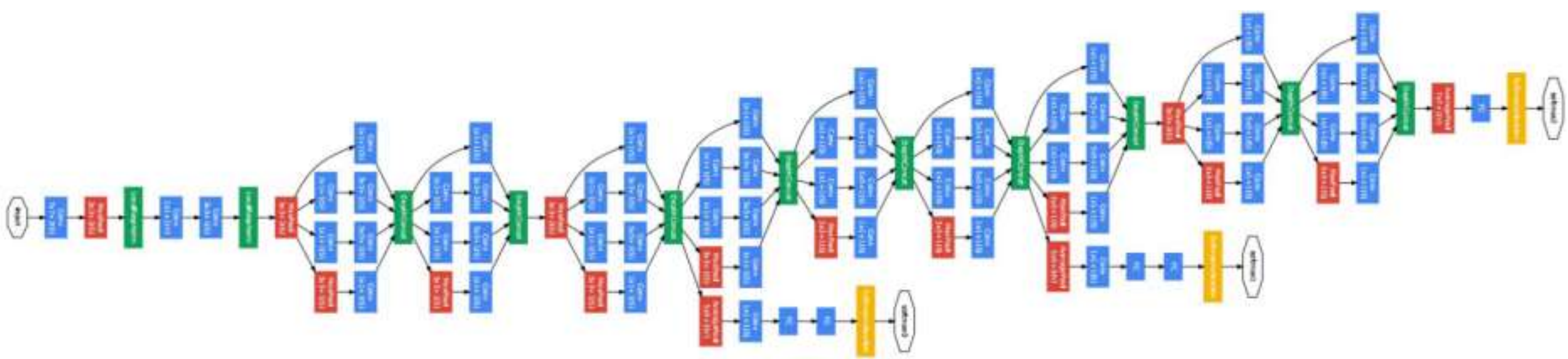
- Глубокие НС – это сети с несколькими слоями между входным и выходным слоем. Чем больше слоев, тем глубже сеть. Иногда говорят, что НС с более чем 3 скрытыми слоями уже может считаться глубокой, но общепринятого мнения нет
- Глубина (L слоев) важнее ширины (H нейронов в каждом слое)
- Глубокие НС позволяют принимать на входе и генерировать на выходе сложно структурированные данные
- Пример: VGG16 – одна из самых известных НС, топ-5 при тестировании на ImageNet (14 миллионов изображений из 1000 классов) с точностью 92.7% на соревновании ILSVRC-2014



- Пример: VGG19



- Пример: GoogLeNet (Inception-v1) – SotA на ILSVRC 2014



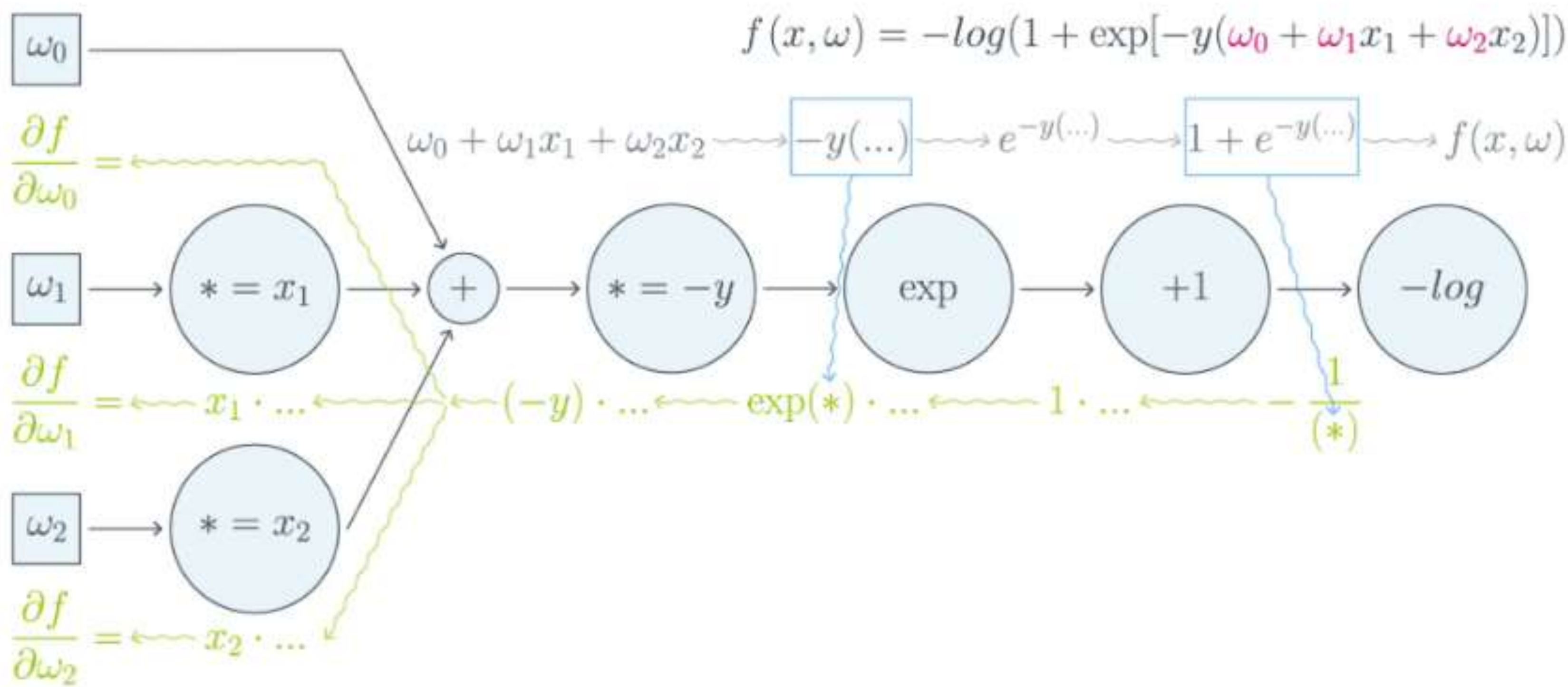
Обучение нейронной сети

- Метод обратного распространения ошибки (error backward propagation, BackProp) – метод вычисления градиента, который используется при обновлении весов НС.
- Был предложен в 1986 году Дэвидом Э. Руммельхартом, Джеффри Э. Хинтоном и Рональдом Дж. Вильямсом, а также независимо и одновременно красноярскими математиками С.И. Барцевым и В.А. Охониным
- Суть метода: исходя из формулы производного сложной функции (chain rule) градиенты можно вычислять последовательно в ходе обратного прохода, умножая каждый раз на частные производные предыдущего слоя

$$f(x) = g_m\left(g_{m-1}(\dots(g_1(x))\dots)\right)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial g_m}{\partial g_{m-1}} \frac{\partial g_m}{\partial g_{m-1}} \dots \frac{\partial g_2}{\partial g_1} \frac{\partial g_1}{\partial x}$$

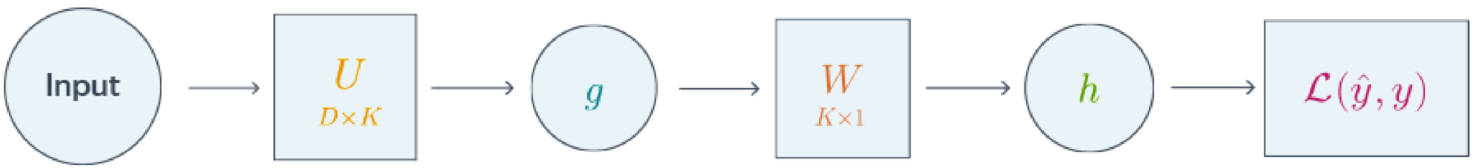
- BackProp в одномерном случае на примере функции потерь логистической регрессии на одном объекте:



- Сначала выполняем прямой проход (forward propagation) для вычисления всех промежуточных значений, которые необходимо хранить в памяти
- Затем выполняется backprop, на котором за один проход вычисляются все градиенты

Источник: https://education.yandex.ru/handbook/ml/article/metod-obratnogo-rasprostraneniya-oshibki

- BackProp в общем виде:
- Инициализируем значения весов W_0^i, выделяем X – мини-батч
- Сначала выполняем прямой проход (forward propagation) вычисляя и сохраняя все промежуточные представления $X = X^0, X^1, \dots X^m = \hat{y}$
- Вычисляем все градиенты с помощью backprop
- С помощью градиентов совершаем шаг SGD



Источник: https://education.yandex.ru/handbook/ml/article/metod-obratnogo-rasprostraneniya-oshibki

Вход: выборка $(x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$, архитектура $(H_l)_{l=1}^{L}$, параметры η, λ;
Выход: вектор весов всех слоёв $w = (W^1, \dots, W^L)$;
инициализировать веса w;
повторять

выбрать объект x_i из X^ℓ (например, случайно);
прямой ход: для всех $l = 1..L$, $h = 1..H_l$

$$S_{ih}^l := \sum_{k=0}^{H_{l-1}} w_{kh}^l x_{ik}^{l-1};\;\; x_{ih}^l := \sigma_h^l(S_{ih}^l);\;\; z_{ih}^l := (\sigma_h^l)'(S_{ih}^l);$$

$$\varepsilon_{hi}^L := \frac{\partial \mathscr{L}_i(w)}{\partial x_h^L},\;\; h = 1..H_L;$$

обратный ход: для всех $l = L..2$, $k = 0..H_{l-1}$

$$\varepsilon_{ik}^{l-1} = \sum_{h=0}^{H_l} \varepsilon_{ih}^l z_{ih}^l w_{kh}^l;$$

градиентный шаг: для всех $l = 1..L$, $k = 0..H_{l-1}$, $h = 1..H_l$

$$w_{kh}^l := w_{kh}^l - \eta\, \varepsilon_{ih}^l z_{ih}^l x_{ik}^{l-1};$$

пока значения Q и/или веса w не стабилизируются;

Автоматическое дифференцирования выражений (autograd) реализовано во всех основных библиотеках – PyTorch, TensorFlow и т.д.

Источник: http://www.machinelearning.ru/wiki/images/e/e1/Voron-ML-ANN-slides.pdf

- <u>Регуляризация нейронных сетей</u>
- Изменение функции потерь:
- Изменение структуры сети
- Изменение данных

- Регуляризация через изменение функции потерь:

Weight Decay – штраф за высокие значения весов НС с коэффициентом регуляризации λ:

$$L_{regularization} = L_{original} + \lambda \|W\|_2$$

Для задачи классификации можно использовать энтропия распределения предсказаний:

$$L_{regularization} = L_{original} - \lambda \sum_k \widehat{p_k} \, log \widehat{p_k}$$

$$\hat{p} - \text{предсказанные вероятности}$$

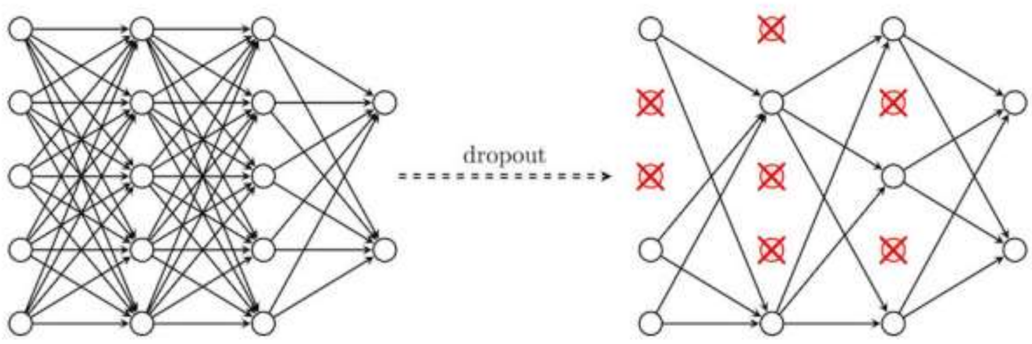
- Регуляризация через ограничение структуры модели:
- Dropout – случайным образом (с заданной вероятностью) «выключаем» доступ к некоторым координатам внутренних представлений на этапе обучения

Этап обучения: делая градиентный шаг $\mathscr{L}_i(w) \to \min\limits_w$, отключаем h-ый нейрон l-го слоя с вероятностью p_l:

$$x_{hi}^l = \xi_h^l \sigma_h^l \Big(\sum_k w_{kh}^l x_{ki}^{l-1}\Big), \qquad \mathsf{P}(\xi_h^l = 0) = p_l$$

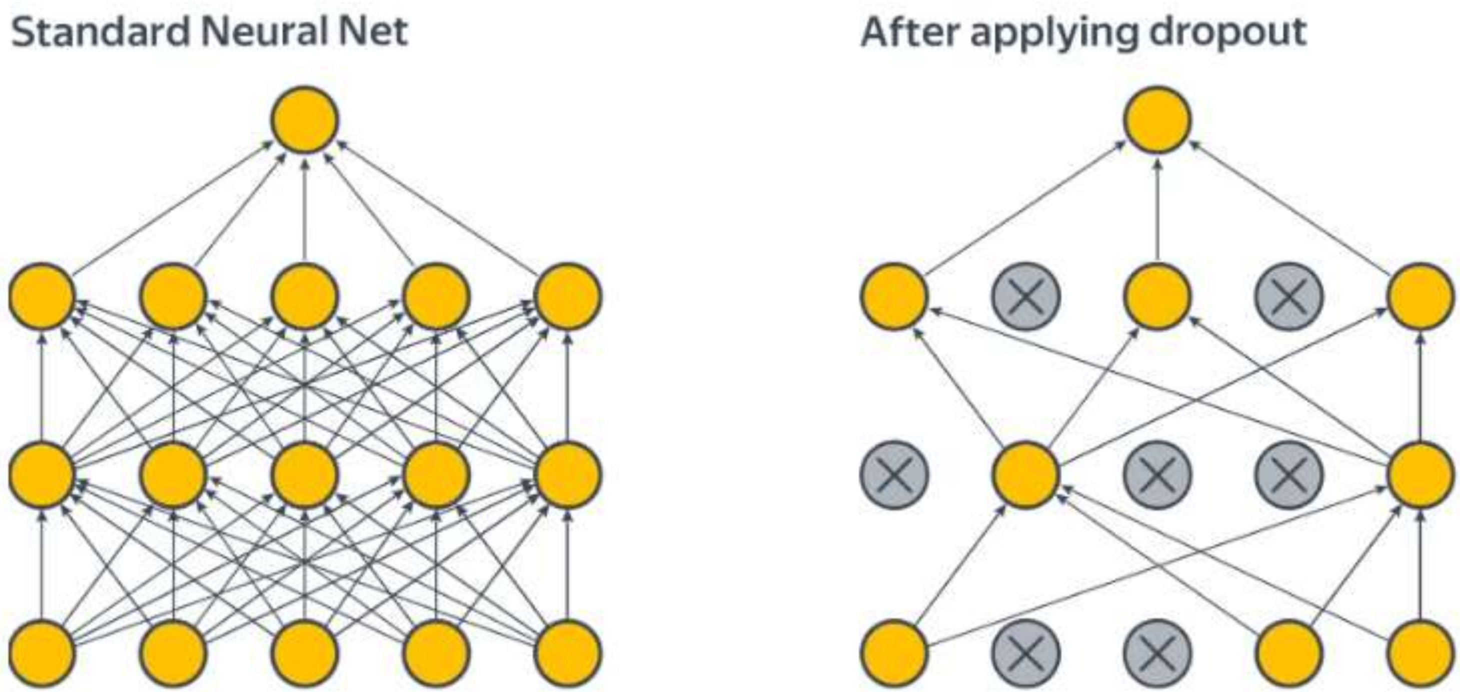
Этап применения: включаем все нейроны, но с поправкой:

$$x_{hi}^l = (1 - p_l) \sigma_h^l \Big(\sum_k w_{kh}^l x_{ki}^{l-1}\Big)$$



N.Srivastava, G.Hinton, A.Krizhevsky, I.Sutskever, R.Salakhutdinov.
Dropout: a simple way to prevent neural networks from overfitting. 2014.

- Dropout можно применять и к входным данным – первым ставим слой dropout, это равносильно отбору признаков. Например, если в данных множество мультиколлинеарных признаков, или данные сильно зашумлены, или сильно разрежены, применение dropout в качестве первого слоя может приводить к получении более качественных результатов



- Batch normalization (batchNorm) – добавления слоя batch normalization, на котором текущий батч приводится к нулевому среднему и единичной дисперсии:

$$X^{k+1} = \frac{X^k - \mu}{\sqrt{\sigma^2 + \epsilon}}$$

Input: Network N with trainable parameters Θ; subset of activations $\{x^{(k)}\}_{k=1}^{K}$

Output: Batch-normalized network for inference, $N_{\mathrm{BN}}^{\mathrm{inf}}$

$N_{\mathrm{BN}}^{\mathrm{tr}} \leftarrow N$ // Training BN network

for $k = 1 \ldots K$ **do**

Add transformation $y^{(k)} = \mathrm{BN}_{\gamma^{(k)},\beta^{(k)}}(x^{(k)})$ to $N_{\mathrm{BN}}^{\mathrm{tr}}$ (Alg. 1)

Modify each layer in $N_{\mathrm{BN}}^{\mathrm{tr}}$ with input $x^{(k)}$ to take $y^{(k)}$ instead

end for

Train $N_{\mathrm{BN}}^{\mathrm{tr}}$ to optimize the parameters $\Theta \cup \{\gamma^{(k)}, \beta^{(k)}\}_{k=1}^{K}$

$N_{\mathrm{BN}}^{\mathrm{inf}} \leftarrow N_{\mathrm{BN}}^{\mathrm{tr}}$ // Inference BN network with frozen // parameters

for $k = 1 \ldots K$ **do**

// For clarity, $x \equiv x^{(k)}, \gamma \equiv \gamma^{(k)}, \mu_{\mathcal{B}} \equiv \mu_{\mathcal{B}}^{(k)}$, etc.

Process multiple training mini-batches $\mathcal{B}$, each of size m, and average over them:

$$\mathrm{E}[x] \leftarrow \mathrm{E}_{\mathcal{B}}[\mu_{\mathcal{B}}]$$

$$\mathrm{Var}[x] \leftarrow \frac{m}{m-1}\mathrm{E}_{\mathcal{B}}[\sigma_{\mathcal{B}}^2]$$

In $N_{\mathrm{BN}}^{\mathrm{inf}}$, replace the transform $y = \mathrm{BN}_{\gamma,\beta}(x)$ with $y = \frac{\gamma}{\sqrt{\mathrm{Var}[x]+\epsilon}} \cdot x + \left(\beta - \frac{\gamma\,\mathrm{E}[x]}{\sqrt{\mathrm{Var}[x]+\epsilon}}\right)$

end for

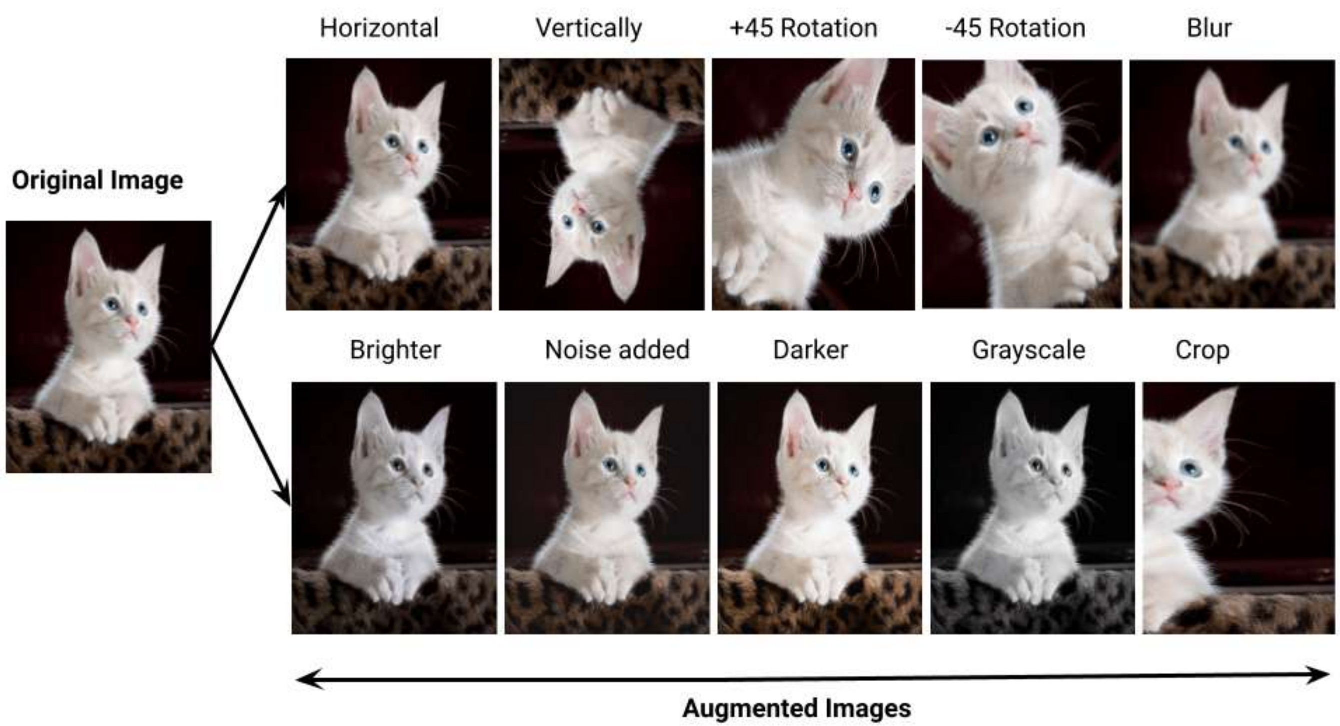
Algorithm 2: Training a Batch-Normalized Network

Источник: https://arxiv.org/abs/1502.03167

- Регуляризация через изменение данных

Внесение изменений в данные (аугментация данных) позволяет увеличить объем обучающей выборки и дают понять модели, какие преобразования являются допустимыми. На примере изображений:

- Поворот и отражения
- Изменение масштаба
- Изменение яркости, контраста и насыщенности
- Добавление шума, искажений
- Обрезка (crop)
- Размытие



Источник: https://github.com/albumentations-team/albumentations

PyTorch example

```
import torch
import torch.nn as nn
import torch.nn.functional as F


class Net(nn.Module):
    def __init__(self):
      super(Net, self).__init__()

      # First 2D convolutional layer, taking in 1 input channel (image),
      # outputting 32 convolutional features, with a square kernel size of 3
      self.conv1 = nn.Conv2d(1, 32, 3, 1)
      # Second 2D convolutional layer, taking in the 32 input layers,
      # outputting 64 convolutional features, with a square kernel size of 3
      self.conv2 = nn.Conv2d(32, 64, 3, 1)

      # Designed to ensure that adjacent pixels are either all 0s or all active
      # with an input probability
      self.dropout1 = nn.Dropout2d(0.25)
      self.dropout2 = nn.Dropout2d(0.5)

      # First fully connected layer
      self.fc1 = nn.Linear(9216, 128)
      # Second fully connected layer that outputs our 10 labels
      self.fc2 = nn.Linear(128, 10)

my_nn = Net()
print(my_nn)
```

```python
class Net(nn.Module):
    def __init__(self):
      super(Net, self).__init__()
      self.conv1 = nn.Conv2d(1, 32, 3, 1)
      self.conv2 = nn.Conv2d(32, 64, 3, 1)
      self.dropout1 = nn.Dropout2d(0.25)
      self.dropout2 = nn.Dropout2d(0.5)
      self.fc1 = nn.Linear(9216, 128)
      self.fc2 = nn.Linear(128, 10)

    # x represents our data
    def forward(self, x):
      # Pass data through conv1
      x = self.conv1(x)
      # Use the rectified-linear activation function over x
      x = F.relu(x)

      x = self.conv2(x)
      x = F.relu(x)

      # Run max pooling over x
      x = F.max_pool2d(x, 2)
      # Pass data through dropout1
      x = self.dropout1(x)
      # Flatten x with start_dim=1
      x = torch.flatten(x, 1)
      # Pass data through ``fc1``
      x = self.fc1(x)
      x = F.relu(x)
      x = self.dropout2(x)
      x = self.fc2(x)

      # Apply softmax to x
      output = F.log_softmax(x, dim=1)
      return output
```

Источник: https://pytorch.org/tutorials/recipes/recipes/defining_a_neural_network.html

```python
import numpy as np
import torch
import torch.nn as nn
import torch.optim as optim

# load the dataset, split into input (X) and output (y) variables
dataset = np.loadtxt('pima-indians-diabetes.csv', delimiter=',')
X = dataset[:,0:8]
y = dataset[:,8]

X = torch.tensor(X, dtype=torch.float32)
y = torch.tensor(y, dtype=torch.float32).reshape(-1, 1)

# define the model
model = nn.Sequential(
    nn.Linear(8, 12),
    nn.ReLU(),
    nn.Linear(12, 8),
    nn.ReLU(),
    nn.Linear(8, 1),
    nn.Sigmoid()
)
print(model)

# train the model
loss_fn   = nn.BCELoss()  # binary cross entropy
optimizer = optim.Adam(model.parameters(), lr=0.001)

n_epochs = 100
batch_size = 10

for epoch in range(n_epochs):
    for i in range(0, len(X), batch_size):
        Xbatch = X[i:i+batch_size]
        y_pred = model(Xbatch)
        ybatch = y[i:i+batch_size]
        loss = loss_fn(y_pred, ybatch)
        optimizer.zero_grad()
        loss.backward()
        optimizer.step()
    print(f'Finished epoch {epoch}, latest loss {loss}')

# compute accuracy (no_grad is optional)
with torch.no_grad():
    y_pred = model(X)
accuracy = (y_pred.round() == y).float().mean()
print(f"Accuracy {accuracy}")
```

Model definition

Train loop

Источник:https://machinelearningmastery.com/develop-your-first-neural-network-with-pytorch-step-by-step/

- Summary:

- Нейрон это линейная модель классификации или регресии
- Нейронная сеть это суперпозиция нейронов с нелинейной функцией активации
- Универсальная теорема аппроксимации – теоретически, двух-трех слоев достаточно для решения широкого класса задач
- Глубокие нейронные сети автоматизируют выделение признаков из сложно структурированных данных
- BackProp это быстрое дифференцирование суперпозиций (НС), метод позволяет обучать сети практически любой архитектуры
- Некоторые эвристики по улучшению сходимости: регуляризация, функции активации, модификации градиентного спуска