Лекция 3. Полносвязные нейронные сети

# О чём эта лекция

- Что такое полносвязные нейронные сети
- Как они выглядят
- Каковы их возможности
- Как их обучают

#### Линейные модели

$$\sum\limits_{j=1}^{n}x^{j}w_{j}+w_{0}$$
 -линейная регрессия

$$\sigma(\sum\limits_{j=1}^n x^j w_j + w_0)$$
 - логистическая регрессия,  $\sigma(z) = rac{1}{1 + e^{-z}}$ 

 $x^j$  - признаки,  $w_j$  - веса признаков.  $w_0$  - bias (может быть любым числом, часто 1 или -1).

# Что такое нейрон?

Нейрон - обобщение двух предыдущих моделей:

$$\sigma(\sum_{j=0}^n x^j w_j)$$

 $\sigma$  - функция активации нейрона Когда  $\sigma(z)=z$  - получаем линейную регрессию Когда  $\sigma(z)=\frac{1}{1+e^{-z}}$  - получаем логистическую регрессию

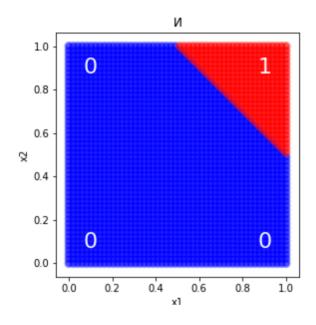
Нейрон = линейная регрессия + функция активации.

# Что может один нейрон?

Берем линейную регрессию и функцию акцивации sign. Теперь мы можем:

• Реализовать логическое "И":

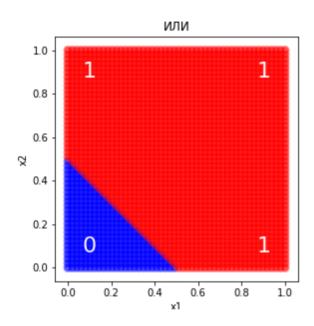
$$x^1 \wedge x^2 = x^1 + x^2 - 1.5 > 0$$



# Что может один нейрон?

• Реализовать логическое "ИЛИ":

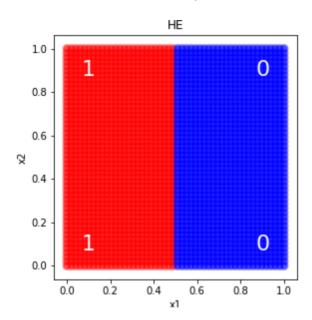
$$x^1 \lor x^2 = x^1 + x^2 - 0.5 > 0$$



# Что может один нейрон?

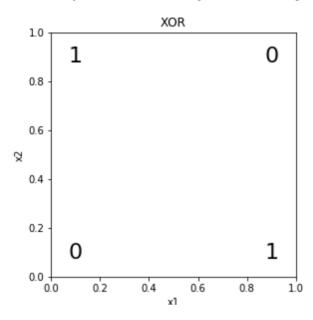
• Реализовать логическое "НЕ":

$$eg x^1 = -x^1 + 0.5 > 0$$



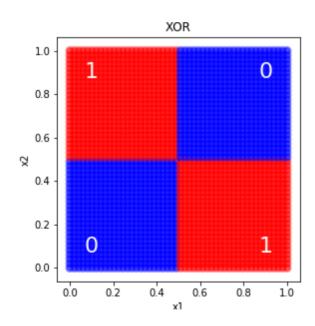
# Что не может один нейрон?

- Линейная модель строит линейную раздедяющую поверхность.
- Как тогда решить такую задачу?



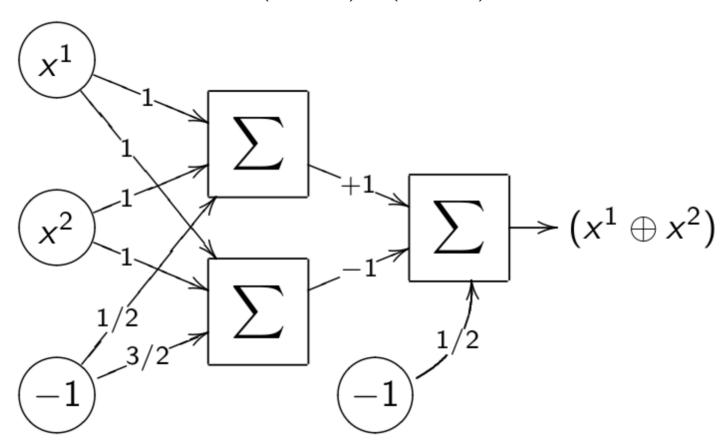
- Первый способ: добавить ещё один признак  $x^3 = x^1 x^2$ 
  - Тогда в пространстве из трёх признаков можно построить линейную разделяющую поверхность

$$x^1 \oplus x^2 = x^1 + x^2 - 2x^1x^2 - 0.5 > 0$$

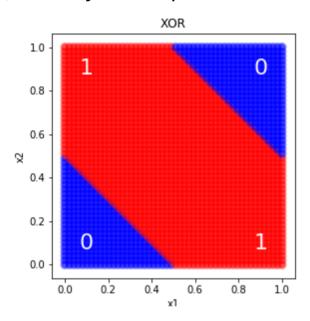


- Второй способ: построить нейронную сеть, использовать выходы одних нейронов как входы для других
- (соединение линейных регрессий с функциями активаций)

$$x^1 \oplus x^2 = (x^1 ee x^2) - (x^1 \wedge x^2) - 0.5 > 0$$

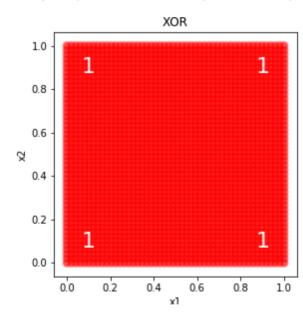


Нейронная сеть с предыдущего слайда строит нелинейную разделяющую поверхность:



**Важно** - мы использовали *нелинейную* функцию активации (sign) внутри сети.

- Вот как выглядит результат, если мы уберем sign везде кроме выхода (просто используем композицию линейных регрессий)
- В данном случае мы даже не получим разделяющей поверхности
- В общем случае модель останется линейной и мы получим лишь линейную разделяющую поверхность



#### Нейронные сети как граф вычислений

Известная из мат. логики формула

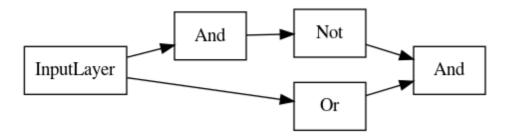
$$x^1 \oplus x^2 = (x^1 ee x^2) \wedge 
eg (x^1 \wedge x^2)$$

где  $\wedge, \vee, \neg$  - нейроны с предыдущих слайдов и функцией активации sign.

Результат - нейронная сеть, которую мы рассмотрели на предыдущих слайдах.

- Нейронная сеть граф вычислений (суперпозиция слоев функций) над признаками.
- Таким образом с ними работают в современных библиотеках (tensorflow, pytorch, keras...)
- Это язык описания архитектур нейронных сетей

Какие бывают архитектуры нейронных сетей?



# Виды нейронных сетей

Существуют разные типы слоев (операций) и типы архитектур нейронных сетей:

- полносвязные
- сверточные
- рекуррентные
- рекурсивные

# Виды нейронных сетей

При этом:

- В сверточных сетях используются полносвязные слои
- В рекуррентных сетях аналогично могут использоваться свертки
- и так далее

Почему?

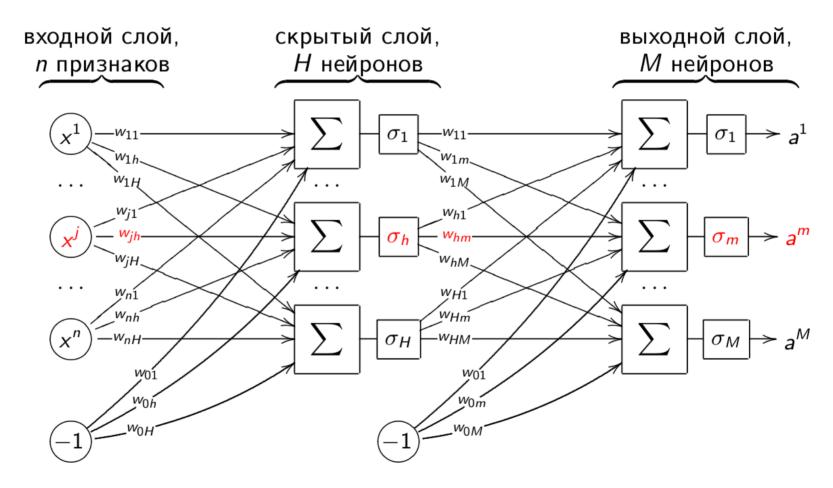
• Так происходит т.к. сеть - граф вычислений в котором могут встречаться разные операции

Далее рассмотрим самый простой тип - полносвязные нейронные сети.

# Пример полносвязной нейронной сети

У полносвязной нейронной сети каждый нейрон текущего слоя связан с каждым нейроном предыдущего.

Пример для двух слоев:



# Нейронные сети

Вопрос: Чем параметры модели отличаются от гиперпараметров?

#### Нейронные сети - параметры и гиперпараметры

Обучаемые параметры:

ullet Веса сети -  $w_{ij}$  - вес связи нейрона\признака i и нейрона j

Гиперпараметры:

- Архитектура сети
  - Количество слоев
  - Количество нейронов в слоях
  - Используемые функции активации
  - **...**

На практике встречаются исключения, например функции активации с обучаемыми параметрами

#### Нейронные сети - реальность

Что говорим:

• Нейроны, связи, веса, активации...

Что происходит на самом деле:

• Матрицы умножаются на вектора и от них вычисляются нелинейные функции

$$\sigma(\sum w_{ji}x_{kj}) = \sigma(W^Tx)$$

Это причина почему нейронные сети обучают на GPU:

- архитектура SIMD (single instruction multiple data)
- можно быстро умножать матрицы и применять функции на векторы

#### Выразительная способность нейронных сетей

- Нейронная сеть с одним скрытым слоем может отделить в  $\mathbb{R}^n$  любой многогранник
- Нейронная сеть с двумя скрытыми слоями может отделить в  $\mathbb{R}^n$  произвольную многогранную область
  - возможно не связную
  - возможно не выпуклую
- Нейронной сетью с одним скрытым слоем и нелинейной функцией активации (предыдущий слайд) можно приблизить любую непрерывную функцию с наперед заданной точностью

# Выразительная способность нейронных сетей

Таким образом нейронные сети являются универсальными аппроксиматорами.

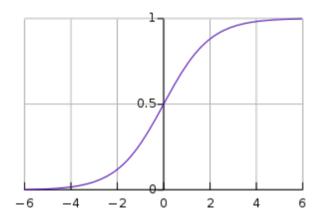
- Теоретически двух-трёх слоев достаточно
- На практике часто используют глубокие нейронные сети для встроенного обучения признаков

#### Функции активации

- На практике применяют разные функции активации
- Обычно стараются применять дифференциируемые почти везде (кроме конечного количества точек)

Очень часто используются:

•  $\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$  сигмоида, например, на выходе для задачи бинарной классификации

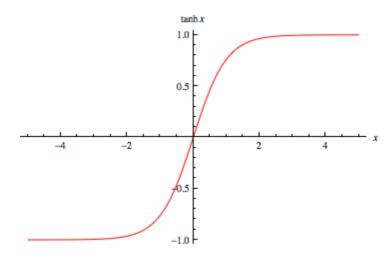


•  $softmax(x_j)=rac{e^{x_j}}{\sum_i e^{x_i}}$  - софтмакс, чаще всего на выходе для задачи с несколькими непересекающимися классами

#### Функции активации

tanh(x) - гиперболический тангенс, предлагался как альтернатива  $\sigma(x)$  на скрытых слоях сети

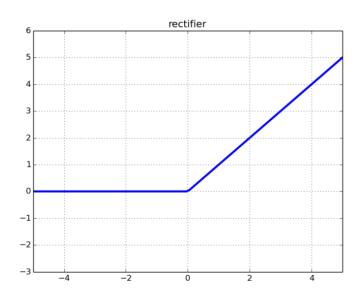
- ullet В отличии от  $\sigma(x)$  имеем tanh(0)=0
- Сети с использованием этой активации легче оптимизируются в сравнении с теми что используют сигмоиду



# Функции активации

ReLU(x)=max(x,0) - REctified Linear Unit, широко используется сейчас для скрытых слоёв сетей

- Хорошо показала себя на практике
  - Сети обычно быстрее сходятся в сравнении с sigmoid/tanh
- ullet Легче вычислить в отличие от  $\sigma(x)$  и tanh(x)
- Активации достаточно часто могут быть равны нулю
  - Есть модификации, например, LeakyReLU когда значение !=0 когда x<0



# Обучение нейронных сетей

- Как-правило для обучения сети требуется довольно большая выборка
- Функция потерь нейронной сети на практике не выпуклая

Поэтому для обучения нейронных сетей сейчас применяют вариации метода стохастического градиентного спуска (как правило с использованием mini-batch).

# Обучение нейронных сетей

Проблема:

На каждом шаге стохастического градиентного спуска нужно вычислить градиент ошибки. Как это сделать эффективно?

Решение:

Метод обратного распространения ошибки (Backprop)

Идея, производная сложной функции:

$$f(g(h(x))' = f'(g)g'(h)h'(x)$$

Наивный подход:

```
d_f_x = d(f, g) * d(g, h) * d(h, x)

d_f_h = d(f, g) * d(g, h)

d f g = d(f, g)
```

#### Обратное распространение ошибки:

```
acc = 1
derivatives = []
for deriv in [d(f, g), d(g, h), d(h, x)]:
    acc *= deriv
    derivatives.append(acc)
d_f_x, d_f_h, d_f_g = derivatives
```

На практике у каждой функции есть обучаемые параметры и наша задача посчитать производные по всем параметрам:

```
A = parameter()
B = parameter()
C = parameter()
x = input()
h = Func(C, x)
g = Func(B, h)
f = Func(A, g)
```

# Считаем прямой ход

```
output = f(A,g(B,h(C,x)) def forward(f, x):
    layers = f.layers() # возвращает [f, g, h]
    output = x
    for layer in layers[::-1]: # сначала h, потом g, потом f
        output = layer(output)
    return output

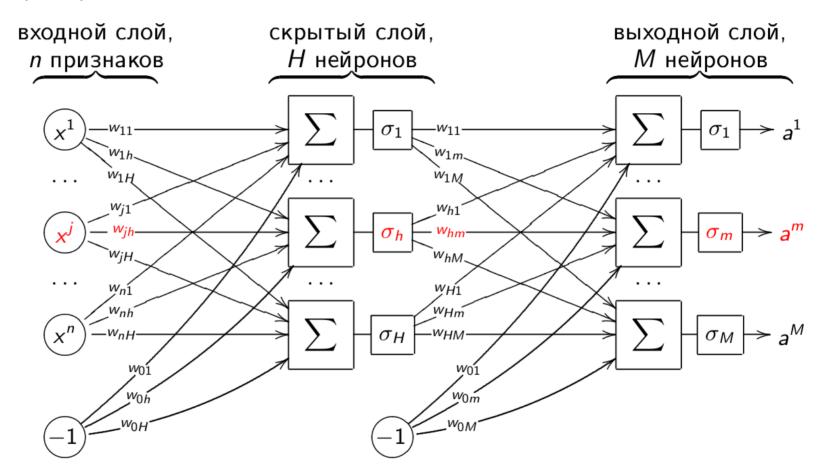
output = forward(network, x)
```

# Считаем обратный ход

$$\frac{\partial f}{\partial A}, \frac{\partial f}{\partial B}, \frac{\partial f}{\partial C}$$

```
def backprop(f):
    layers = f.layers()
    f.grad = 1
    for layer in network: # f, g, потом h
        for parameter in layer.parameters(): # [A, g] для f, [B, h] для g, [C] для
h
        parameter.grad = layer.grad * layer.derivative(parameter, layer.outpu
t)
return f['A'].grad, f['B'].grad, f['C'].grad # градиент
```

# Пример:



Пример:

• Скрытый слой

$$u_h(x) = \sigma_h(\sum_{j=0}^n w_{jh} x^j)$$

Здесь  $w_{jh}$  - вес связи признака  $x^j$  примера x и нейрона h скрытого слоя

• Выходной слой

$$a_m(x) = \sigma_m(\sum_{h=0}^H w_{hm}u_h(x))$$

Здесь  $w_{hm}$  - вес связи нейрона h скрытого слоя и нейрона m выходного слоя

• Среднеквадратичная функция потерь

$$SE(x,y) = rac{1}{2} \sum_{m=1}^{M} (a_m(x) - y_m)^2$$

Задача:

• Найти градиент - вектор производных по параметрам модели

Вопрос залу:

• Что за параметры?

Нужно найти 
$$\nabla SE(w)=(rac{\partial SE(w)}{dw_{ij}})$$
 как функции от весов сети. 
$$rac{\partial SE}{dw_{hm}}=??? \\ rac{\partial SE}{dw_{jh}}=???$$

Решение: применить правило дифф. сложной функции:

$$egin{aligned} rac{\partial SE}{dw_{hm}} &= rac{\partial SE}{da_m} rac{\partial a_m}{dw_{hm}} \ rac{\partial SE}{dw_{jh}} &= rac{\partial SE}{du_h} rac{\partial u_h}{dw_{jh}} \end{aligned}$$

Производная по весам выходного слоя:

$$egin{aligned} rac{\partial SE}{dw_{hm}} &= rac{\partial SE}{da_m} rac{\partial a_m}{dw_{hm}} \ & = rac{\partial \sigma_m (\sum\limits_{h=0}^H w_{hm} u_h(x))}{dw_{hm}} &= \end{aligned}$$

Правило дифф. сложной функции:

$$=\sigma_m'u_h(x)$$

Получаем:

$$rac{\partial SE}{dw_{hm}} = rac{\partial SE}{da_m} rac{\partial a_m}{dw_{hm}} = rac{\partial SE}{da_m} \sigma_m' u_h(x)$$

$$rac{\partial SE(w)}{da_m} = rac{\partial rac{1}{2} \sum \limits_{m=1}^{M} (a_m(w) - y_m)^2}{da_m} = a_m(w) - y_m = \epsilon_m$$

 $\epsilon_m$  - значение производной выше, ошибка модели на выходном слое.

Теперь можно посчитать ошибку по весам выходного слоя:

$$rac{\partial SE}{\partial w_{hm}} = rac{\partial SE}{\partial a_m} rac{\partial a_m}{\partial w_{hm}} = rac{\partial SE}{\partial a_m} \sigma_m' u_h(x) = \epsilon_m \sigma_m' u_h(x)$$

Посмотрим на ошибку модели на скрытом слое:

$$rac{\partial SE}{dw_{jh}} = rac{\partial SE}{du_h} rac{\partial u_h}{dw_{jh}}$$

• Правило дифф. сложной функции:

$$rac{\partial SE(w)}{du_h} = \sum_{m=1}^{M} rac{\partial SE}{da_m} rac{\partial a_m}{du_h} = 0$$

• Подстановка известного значения производной по  $a_m$ :

$$=\sum_{m=1}^M \epsilon_m rac{\partial a_m}{du_h}=0$$

• По определению  $a_m(x)$ :

$$=\sum_{m=1}^{M}\epsilon_{m}rac{\partial\sigma_{m}(\sum\limits_{h=0}^{H}w_{hm}u_{h}(x))}{du_{h}}=$$

Вопрос:

Что делаем дальше?

... продолжаем искать производную ошибки на скрытом слое:

• Правило дифф. сложной функции, второй раз:

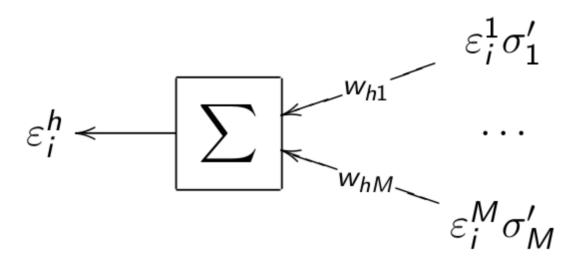
$$=\sum_{m=1}^{M}\epsilon_{m}\sigma_{m}^{\prime}rac{\partial\sum\limits_{h=0}^{H}w_{hm}u_{h}(x)}{du_{h}}=$$

• Результат:

$$=\sum_{m=1}^{M}\epsilon_{m}\sigma_{m}^{\prime}w_{hm}$$

• Теперь можно посчитать производные по весам скрытого слоя:

$$rac{\partial SE(w)}{du_h} = \sum_{m=1}^{M} \epsilon_m \sigma_m' w_{hm} = \epsilon_h \ rac{\partial SE}{dw_{jh}} = rac{\partial SE}{du_h} rac{\partial u_h}{dw_{jh}} = \epsilon_h rac{\partial u_h}{dw_{jh}} = \epsilon_h rac{\partial u_h}{dw_{jh}} = \epsilon_h \sigma_h' x^j$$



Наблюдения:

- значение производной можно получить запустив сеть "наоборот"
- вычисление производной суть последовательное применение правила дифф. сложной функции над компонентами сети:
  - СЛОЯМИ
  - функциями активаций

Окончательное решение:

$$egin{align} rac{\partial SE}{\partial w_{hm}} &= rac{\partial SE}{\partial a_m} rac{\partial a_m}{\partial w_{hm}} = \epsilon_m \sigma_m' u_h(x) \ &rac{\partial SE}{\partial w_{jh}} &= rac{\partial SE}{\partial u_h} rac{\partial u_h}{\partial w_{jh}} = \epsilon_h \sigma_h' x^j \end{aligned}$$

- Прямой ход:
  - Применить слой за слоем на данный пример, посчитать значение функции потерь от выходов
- Обратный ход:
  - Считать значения производных слой за слоем в обратном направлении от выходов к входам
    - Используя правило дифференцирования сложной функции
    - Считать сначала производные ошибки от выходов, затем производные ошибки от последнего скрытого слоя и т.д. пока не будут расчитаны производные по всем весам

Посчитаный градиент использовать для расчета шага в стохастическом градиентном спуске.

Рассмотрим общий случай:

- нейронная сеть это граф вычислений
- Вершины операции:
  - Умножение вектора на матрицу
  - Применение функции активации

## Вопрос:

Что нужно уметь считать для каждой вершины графа, чтобы реализовать алгоритм обратного распространения ошибки?

Алгоритм backprop применяют к нейронным сетям как к графу вычислений. Для каждой вершины нужно знать:

- как по входам вычислить её значение (прямой ход)
- как посчитать её производная от выходов (обратный ход)

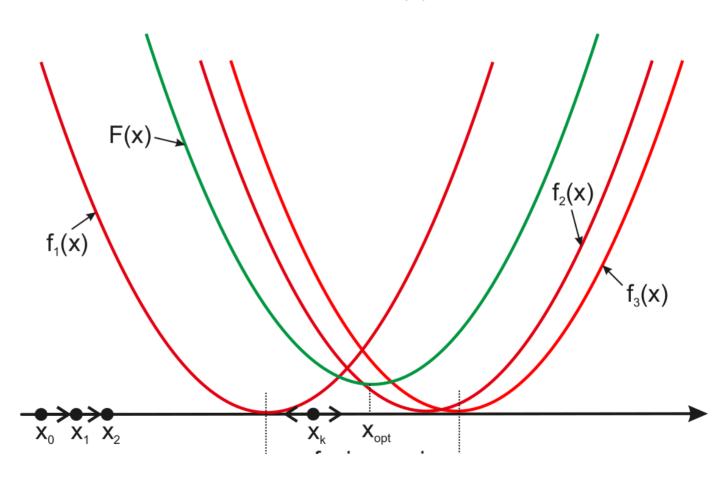
Таким образом построение нейронных сетей превращается из упражнений по дифференцированию и матричной алгебре в описание графов вычислений из заданных компонент (вершин). Обычно предоставляются:

- автоматическое дифференцирование графов алгоритм обратного распространения ошибки
- набор компонент для построения сетей (слои, функции активации...)
- набор оптимизаторов для обучения

Далее поговорим подробнее об обучении и борьбе с переобучением.

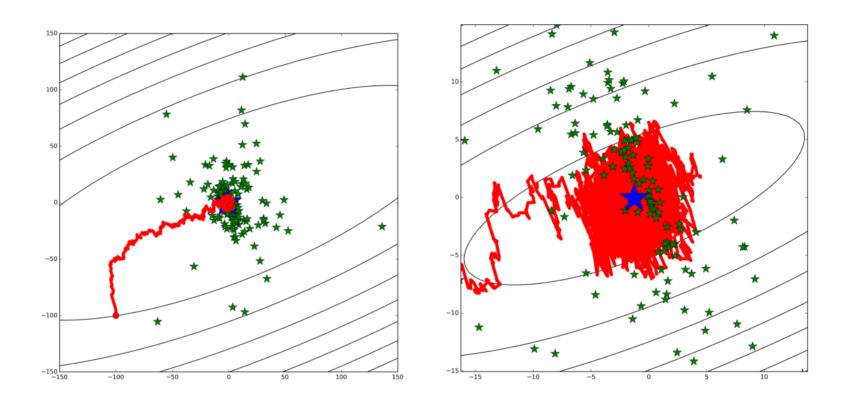
# Стохастический градиентный спуск

$$F(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \underbrace{\frac{1}{2} (b_i - a_i x)^2}_{f_i(x)} \to \min_{x \in \mathbb{R}}.$$



# Стохастический градиентный спуск

Быстрая сходимость к окрестности оптимума, не может сойтись к конкретной точке (без уменьшения скорости обучения)



#### **Momentum**

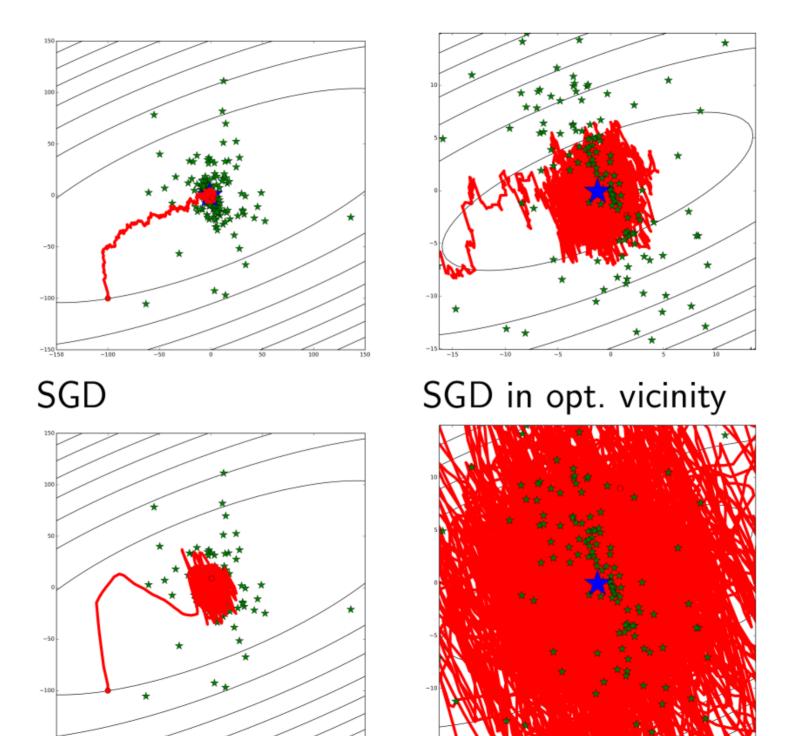
Существует приличное множество модификаций стохастического градиентного спуска, все из которых используются на практике при обучении сетей:

- ullet Обычный градиентный шаг  $\eta_t 
  abla_t$
- Momentum экспоненциальное скользящее среднее по  $pprox rac{1}{1-\gamma}$  итерациям спуска:

$$h_t = lpha h_{t-1} + \eta_t 
abla_t \ w_t = w_{t-1} - h_t$$

- На деле это напоминает среднее по N последним итерациям спуска
- Старается двигаться в том-же направлении что и на предыдущих итерациях
- $h_t$  растет в направлении где градиенты с разных шагов чаще положительны
- ullet Обычно lpha=0.9

# Momentum



#### **Nesterov Momentum**

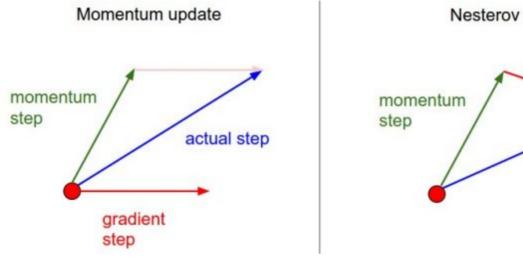
• Nesterov momentum:

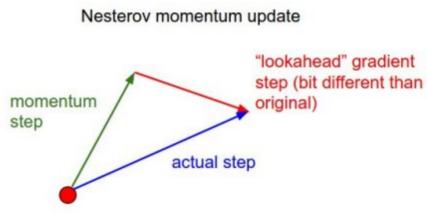
$$h_t = lpha h_{t-1} + \eta_t 
abla L(w_{t-1} - lpha h_{t-1}) \ w_t = w_{t-1} - h_t$$

• Тоже что и momentum, но градиентный шаг идет из предполагаемой точки где мы окажемся, а не из текущей

#### Momentum

• Физическая аналогия для этих эвристик - накопление импульса при спуске (шар с ненулевой массой)





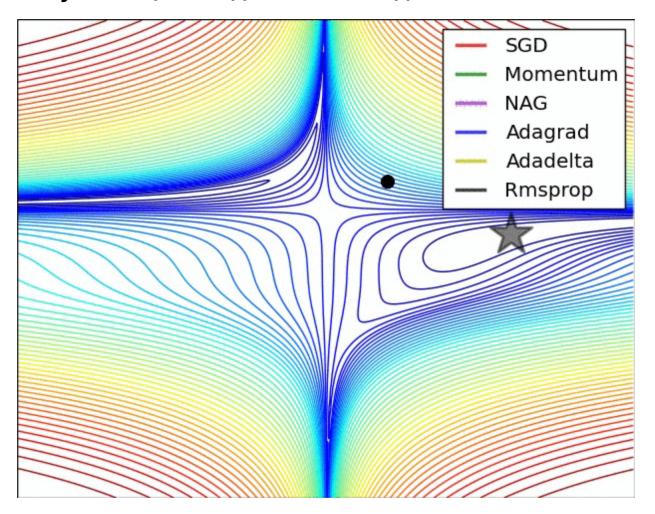
## Методы с адаптивной скоростью обучения

- Adagrad:
  - Скорость обучения своя под каждый параметр:
    - Большая производная от параметра скорость обучения падает
    - Маленькая производная скорость обучения растет
  - Подходит для разреженных данных
  - Имеет тенденцию к ранней остановке (до достижения локального минимума)
- RMSProp:
  - decay\_rate гиперпараметр с типичными значениями 0.9, 0.99, 0.999
  - В отличие от Adagrad обновления скорости обучения зависят от последних шагов нет проблемы ранней остановки

# Методы с адаптивной скоростью обучения

- Adam сейчас чаще всего используется на практике
  - Объединяет RMSProp и momentum
  - Рекомендуемые значения гиперпараметров eps = 1e-8, beta1 = 0.9, beta2 = 0.999

# Визуализация сходимости методов



# Визуализация сходимости методов

Наблюдение: Несмотря на то что это всего-лишь эвристики, они обладают большим влиянием на скорость сходимости спуска.

#### **Dropout**

#### Идея:

• Во время обучения (но не применения!) будем случайным образом "выключать" нейроны

#### Мотивы:

- ullet получаем приближение ансамбля из  $2^N$  сетей с общими весами, но разными связями между нейронами
- тренируем сеть наиболее устойчивую к утрате нейронов надеясь что она будет надежной
- заставляем разные части сети решать одну и ту-же задачу, а не компенсировать ошибки других частей

### Результат:

Отличный метод борбы с переобучением нейронных сетей

## Инициализация весов

Почему важно правильно инициализировать веса?

Стохастический градиентный спуск - ищет минимум в окрестности некоторой точки.

Правильная инициализация весов дает возможность найти лучший локальный минимум.

# Инициализация весов

Как **не надо** делать:

- инициализация одной константой
  - В этом случае все веса так и останутся одинаковыми во время обучения (т.к. получат одинаковые градиенты)

Для неглубоких сетей (2-5 слоев):

• инициализация небольшими случайными значениями около нуля

## Инициализация весов в глубоких сетях

Для глубоких сетей применяют спец. методы исходящие из статистических соображений.

- Для симметричных функций активации с нулевым средним (например tanh):
  - инициализация Ксавье

$$w_i \sim \mathcal{N}(0, \sqrt{rac{2}{N_{in} + N_{out}}})$$

где  $N_{in}, N_{out}$  - размеры входа и выхода слоя

- Для остальных (ReLU, sigmoid...):
  - Инициализация Хе

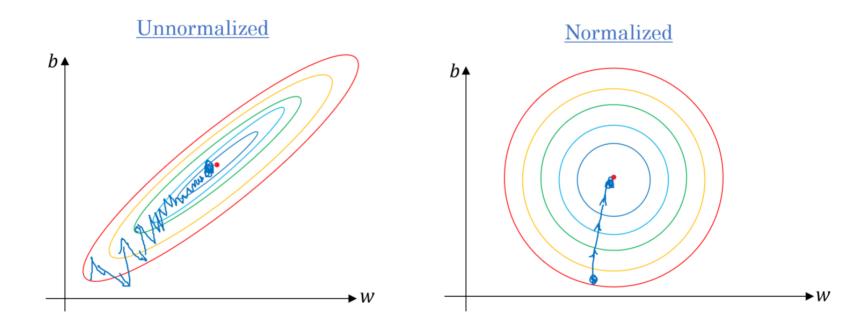
$$w_i \sim \mathcal{N}(0, \sqrt{rac{2}{N_{in}}})$$

• Часто вместо нормального берут равномерное распределение.

## Нормализация

Почему полезно?

- Ускоряет сходимость градиентного спуска
- Аналогия: что если сделать тоже самое не для входных данных, а внутри сети?



Идея: нормализовать выходы слоев нейронной сети

$$x_{norm} = rac{x - \mathbb{E}[x]}{Var(x)}$$

- упростит обучение следующего слоя (значения входов не будут сильно сдвигаться по модулю во время обучения)
- ullet решит проблему "насыщения" функций tanh, sigmoid когда большие по модулю значения дают маленькое изменение после активации

### Проблемы:

- Нормализация по всей обучающей выборке? Неприемлимо трудоемко!
- Как учесть нормализацию в алгоритме обратного распространения ошибки?

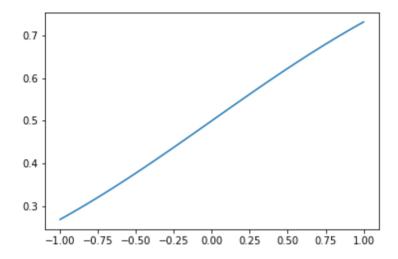
# Проблемы:

- Нормализация по всей обучающей выборке?
- Как учесть нормализацию в алгоритме обратного распространения ошибки?

#### Решение:

- Нормализуем не выход целиком, а каждую компоненту отдельно
- Считаем выборочное средние и стандартное отклонение не на всей выборке, а на текущем мини-батче
  - Теперь вычисление локально только для текущего минибатча
  - Вычисленные значения приближения таковых для всей выборки
  - Можно посчитать производные для всех весов учавствующих в нормализации т.е. шаг градиентного спуска будет учитывать нормализацию

Проблема: график сигмоиды в отрезке [-1, 1]:



• Наивная нормализация нейтрализует нелинейности функций sigmoid, tanh

Решение:

- Добавить два обучаемых параметра:  $\gamma$  масштаб,  $\beta$  сдвиг.
- В случае необходимости сеть может сама подвинуть нормализацию и восстановить нелинейность

Таким образом итоговая формула (для мини-батча размером m).

Выборочное среднее по мини-батчу:

$$\mu_{\mathcal{B}} = rac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_i$$

Выборочная дисперсия по мини-батчу:

$$\sigma_{\mathcal{B}}^2 = rac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i - \mu_{\mathcal{B}})^2.$$

Нормализованный выход слоя:

$$\hat{x_i} = rac{x_i - \mu_{\mathcal{B}}}{\sqrt{\sigma_{\mathcal{B}}^2 + \epsilon}}$$

Сдвинутый \масштабированный нормализованный выход слоя

$$y_i = \gamma \hat{x_i} + \beta$$

До или после активации?

- Авторы метода рекомендовали применять её до нелинейности (функции активации)
- Если применять её после, зачем тогда сдвиг и масштаб?

# Эффекты:

- Сильное ускорение сходимости глубоких сетей
- Регуляризация, часто применяется в глубоких сетях вместо dropout слоев

#### Заключение

- Нейронные сети универсальный аппроксиматор
- На практике сейчас их описывают на языке графов вычислений
- Нейронные сети обычно обучаются вариациями стохастического градиентного спуска
  - градиент вычисляют методом обратного распространения ошибки
- Существует очень большое количество эвристик связанных с обучением нейронных сетей
  - Много модификаций алгоритма стохастического градиентного спуска
  - Дополнительные методы регуляризации (dropout)
  - Специальные методы инициализации весов
  - Нормализация по мини-батчам