Глубокое обучение и вообще

Ульянкин Филипп

Посиделка 4: Алгоритм обратного распространения ошибки

Agenda

- Алгоритм обратного распространения ошибки



Ты необучаем!

Нейросеть — сложная функция

- Прямое распространение ошибки (forward propagation):

$$X \Rightarrow X \cdot W_1 \Rightarrow f(X \cdot W_1) \Rightarrow f(X \cdot W_1) \cdot W_2 \Rightarrow \ldots \Rightarrow \hat{y}$$

- Считаем потери:

$$Loss = \frac{1}{2}(y - \hat{y})^2$$

- Все слои обычно дифференцируемы, поэтому можно посчитать производные по всем параметрам
- Для обучения можно использовать градиентный спуск

$$L(W_1, W_2) = \frac{1}{2} \cdot (y - f(X \cdot W_1) \cdot W_2)^2$$

Секрет успеха в умении брать производную

$$L(W_1,W_2) = \frac{1}{2}\cdot(y-f(X\cdot W_1)\cdot W_2)^2$$

Секрет успеха в умении брать производную

$$f(g(x))' = f'(g(x)) \cdot g'(x)$$

$$L(W_1,W_2) = \frac{1}{2}\cdot(y-f(X\cdot W_1)\cdot W_2)^2$$

Секрет успеха в умении брать производную

$$\boxed{f(g(x))' = f'(g(x)) \cdot g'(x)}$$

$$\begin{split} \frac{\partial L}{\partial W_2} &= -(y - f(X \cdot W_1) \cdot W_2) \cdot f(X \cdot W_1) \\ \frac{\partial L}{\partial W_1} &= -(y - f(X \cdot W_1) \cdot W_2) \cdot W_2 \cdot f'(X \cdot W_1) \cdot X \end{split}$$

$$L(W_1,W_2) = \frac{1}{2}\cdot(y-f(X\cdot W_1)\cdot W_2)^2$$

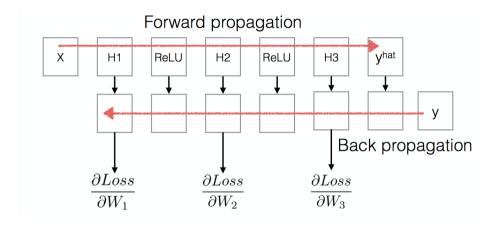
Секрет успеха в умении брать производную

$$f(g(x))' = f'(g(x)) \cdot g'(x)$$

$$\begin{split} \frac{\partial L}{\partial W_2} &= -(y - f(X \cdot W_1) \cdot W_2) \cdot f(X \cdot W_1) \\ \frac{\partial L}{\partial W_1} &= -(y - f(X \cdot W_1) \cdot W_2) \cdot W_2 \cdot f'(X \cdot W_1) \cdot X \end{split}$$

Дважды ищем одно и то же \Rightarrow оптимизация поиска производных даст нам алгоритм обратного распространения ошибки (back-propagation)

Back-propagation



Цепное правило

- Возьмём сложную функцию:

$$z_1 = z_1(x_1, x_2)$$

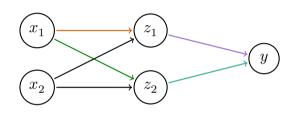
$$z_2 = z_2(x_1, x_2)$$

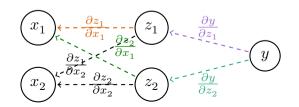
$$y = y(z_1, z_2)$$

- Производную такой функции можно найти по цепному правилу:

$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = \frac{\partial y}{\partial z_1} \cdot \frac{\partial z_1}{\partial x_1} + \frac{\partial y}{\partial z_2} \cdot \frac{\partial z_2}{\partial x_1}$$

Как считать производные?





Граф вычислений:

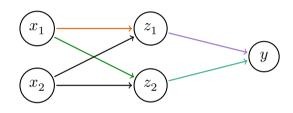
$$z_1 = z_1(x_1, x_2)$$

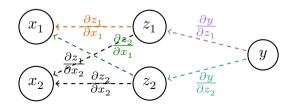
$$z_2 = z_2(x_1, x_2)$$

$$y = y(z_1, z_2)$$

Из него можно построить граф производных, каждому ребру будет приписана производная

Как считать производные?





Граф вычислений:

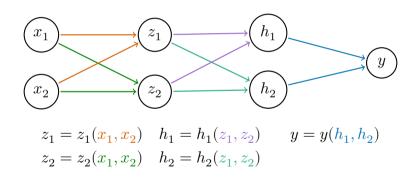
$$z_1 = z_1(x_1, x_2)$$

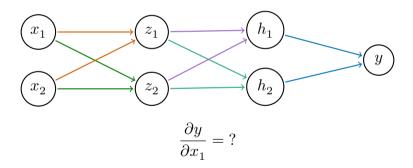
$$z_2 = z_2(x_1, x_2)$$

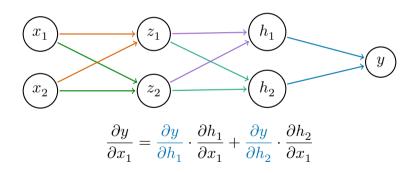
$$y = y(z_1, z_2)$$

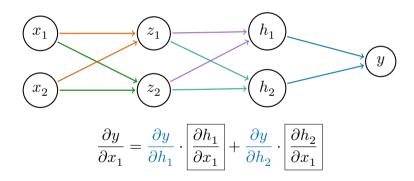
Можно догадаться как работает цепное правило:

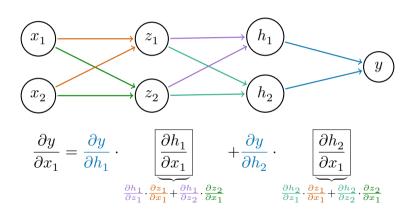
$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = \frac{\partial y}{\partial z_1} \cdot \frac{\partial z_1}{\partial x_1} + \frac{\partial y}{\partial z_2} \cdot \frac{\partial z_2}{\partial x_1}$$

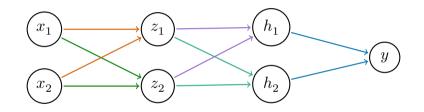




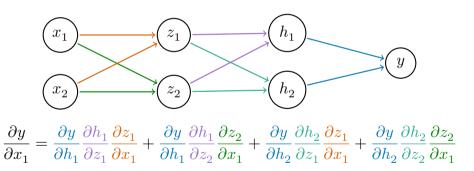


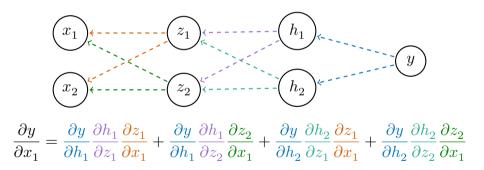


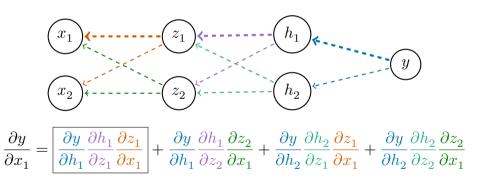


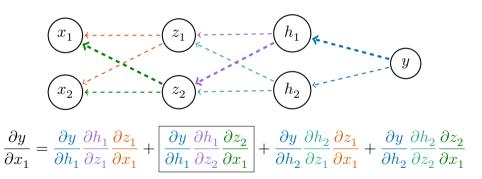


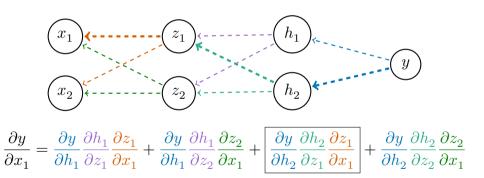
$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = \frac{\partial y}{\partial h_1} \cdot \left(\frac{\partial h_1}{\partial z_1} \cdot \frac{\partial z_1}{\partial x_1} + \frac{\partial h_1}{\partial z_2} \cdot \frac{\partial z_2}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial y}{\partial h_2} \cdot \left(\frac{\partial h_2}{\partial z_1} \cdot \frac{\partial z_1}{\partial x_1} + \frac{\partial h_2}{\partial z_2} \cdot \frac{\partial z_2}{\partial x_1} \right)$$

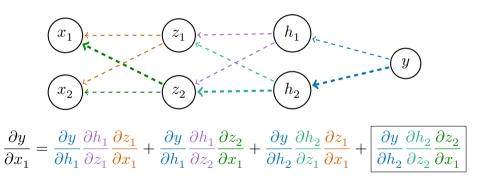






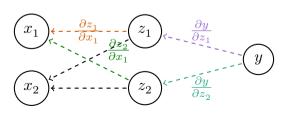






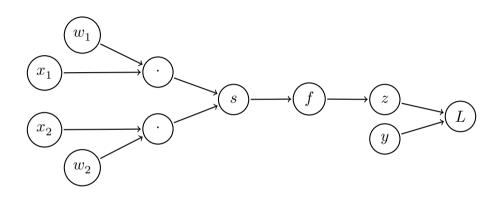
Алгоритм поиска производной в графе

- Как посчитать производную a по b?
- Находим непосещённый путь из a в b
- Перемножаем значения на рёбрах пути
- Добавляем в сумму



$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = \frac{\partial y}{\partial z_1} \cdot \frac{\partial z_1}{\partial x_1} + \frac{\partial y}{\partial z_2} \cdot \frac{\partial z_2}{\partial x_1}$$

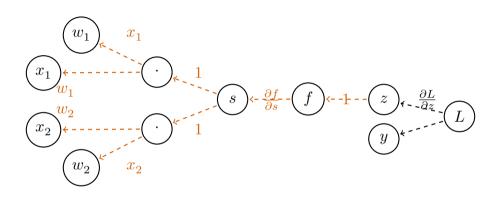
На примере одного нейрона



$$z = f(s) = f(w_1 \cdot x_1 + w_2 \cdot x_2)$$

Для SGD нам нужны $\frac{\partial L}{\partial w_1}$ и $\frac{\partial L}{\partial w_2}$

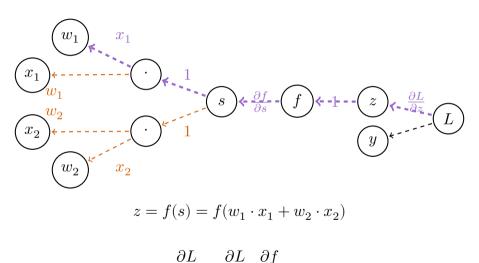
Граф производных



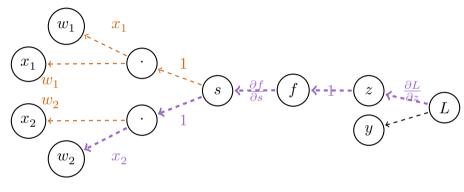
$$z=f(s)=f(w_1\cdot x_1+w_2\cdot x_2)$$

Для SGD нам нужны $\frac{\partial L}{\partial w_1}$ и $\frac{\partial L}{\partial w_2}$

Граф производных



Граф производных



$$z = f(s) = f(w_1 \cdot x_1 + w_2 \cdot x_2)$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_1} = \frac{\partial L}{\partial z} \cdot \frac{\partial f}{\partial s} \cdot x_1 \qquad \frac{\partial L}{\partial w_2} = \frac{\partial L}{\partial z} \cdot \frac{\partial f}{\partial s} \cdot x_1$$

Цепное правило и граф производных

- Теперь у нас есть алгоритм для подсчета производных для любых дифференцируемых графов вычислений
- Осталось делать вычисления быстро

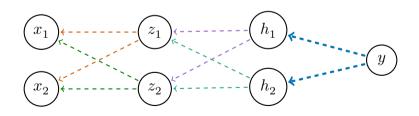
Мы хотим поменять параметры нейрона в рамках SGD

$$h_2 = f(w_0 + w_1 z_1 + w_2 z_2)$$

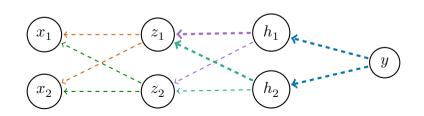
$$\frac{\partial L}{\partial w_1} = \frac{\partial L}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial w_1} = \frac{\partial L}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial h_2} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial w_1}$$

$$w_1^t = w_1^{t-1} - \gamma \cdot \frac{\partial L}{\partial w_1}(w_1^{t-1})$$

 $3: \quad \frac{\partial y}{\partial h_2} \qquad \frac{\partial y}{\partial h_1}$



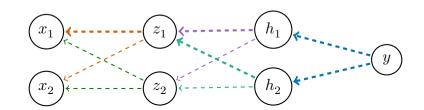
$$\begin{aligned} 3: \quad & \frac{\partial y}{\partial h_2} \qquad \frac{\partial y}{\partial h_1} \\ 2: \quad & \frac{\partial y}{\partial z_1} = \frac{\partial y}{\partial h_1} \cdot \frac{\partial h_1}{\partial z_1} + \frac{\partial y}{\partial h_2} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial z_1} \qquad \frac{\partial y}{\partial z_2} = \frac{\partial y}{\partial h_1} \cdot \frac{\partial h_1}{\partial z_2} + \frac{\partial y}{\partial h_2} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial z_2} \end{aligned}$$



$$3: \quad \frac{\partial y}{\partial h_2} \qquad \frac{\partial y}{\partial h_1}$$

$$2: \quad \frac{\partial y}{\partial z_1} = \frac{\partial y}{\partial h_1} \cdot \frac{\partial h_1}{\partial z_1} + \frac{\partial y}{\partial h_2} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial z_1} \qquad \frac{\partial y}{\partial z_2} = \frac{\partial y}{\partial h_1} \cdot \frac{\partial h_1}{\partial z_2} + \frac{\partial y}{\partial h_2} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial z_2}$$

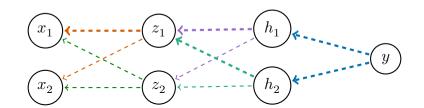
$$1: \quad \frac{\partial y}{\partial x_1} = \frac{\partial y}{\partial h_1} \frac{\partial h_1}{\partial z_1} \frac{\partial z_1}{\partial x_1} + \frac{\partial y}{\partial h_2} \frac{\partial h_2}{\partial z_1} \frac{\partial z_1}{\partial x_1} + \frac{\partial y}{\partial h_1} \frac{\partial h_1}{\partial z_2} \frac{\partial z_2}{\partial x_1} + \frac{\partial y}{\partial h_2} \frac{\partial h_2}{\partial z_2} \frac{\partial z_2}{\partial x_1}$$



$$3: \quad \frac{\partial y}{\partial h_2} \qquad \frac{\partial y}{\partial h_1}$$

$$2: \quad \frac{\partial y}{\partial z_1} = \frac{\partial y}{\partial h_1} \cdot \frac{\partial h_1}{\partial z_1} + \frac{\partial y}{\partial h_2} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial z_1} \qquad \frac{\partial y}{\partial z_2} = \frac{\partial y}{\partial h_1} \cdot \frac{\partial h_1}{\partial z_2} + \frac{\partial y}{\partial h_2} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial z_2}$$

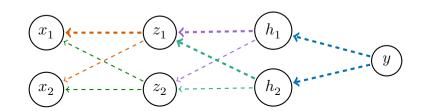
$$1: \quad \frac{\partial y}{\partial x_1} = \left(\frac{\partial y}{\partial h_1} \frac{\partial h_1}{\partial z_1} + \frac{\partial y}{\partial h_2} \frac{\partial h_2}{\partial z_1}\right) \cdot \frac{\partial z_1}{\partial x_1} + \left(\frac{\partial y}{\partial h_1} \frac{\partial h_1}{\partial z_2} + \frac{\partial y}{\partial h_2} \frac{\partial h_2}{\partial z_2}\right) \cdot \frac{\partial z_2}{\partial x_1}$$



$$3: \quad \frac{\partial y}{\partial h_2} \qquad \frac{\partial y}{\partial h_1}$$

$$2: \quad \frac{\partial y}{\partial z_1} = \frac{\partial y}{\partial h_1} \cdot \frac{\partial h_1}{\partial z_1} + \frac{\partial y}{\partial h_2} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial z_1} \qquad \frac{\partial y}{\partial z_2} = \frac{\partial y}{\partial h_1} \cdot \frac{\partial h_1}{\partial z_2} + \frac{\partial y}{\partial h_2} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial z_2}$$

$$1: \quad \frac{\partial y}{\partial z_1} = \frac{\partial y}{\partial z_2} \cdot \frac{\partial z_1}{\partial z_2} + \frac{\partial y}{\partial z_2} \cdot \frac{\partial z_2}{\partial z_2}$$

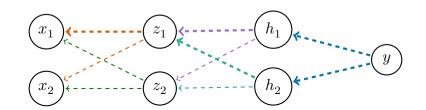


Обратное распространение ошибки

$$3: \quad \frac{\partial y}{\partial h_2} \qquad \frac{\partial y}{\partial h_1}$$

$$2: \quad \frac{\partial y}{\partial z_1} = \frac{\partial y}{\partial h_1} \cdot \frac{\partial h_1}{\partial z_1} + \frac{\partial y}{\partial h_2} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial z_1} \qquad \frac{\partial y}{\partial z_2} = \frac{\partial y}{\partial h_1} \cdot \frac{\partial h_1}{\partial z_2} + \frac{\partial y}{\partial h_2} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial z_2}$$

$$1: \quad \frac{\partial y}{\partial x_1} = \frac{\partial y}{\partial z_1} \cdot \frac{\partial z_1}{\partial x_1} + \frac{\partial y}{\partial z_2} \cdot \frac{\partial z_2}{\partial x_1} \qquad \frac{\partial y}{\partial x_2} = \frac{\partial y}{\partial z_1} \cdot \frac{\partial z_1}{\partial x_2} + \frac{\partial y}{\partial z_2} \cdot \frac{\partial z_2}{\partial x_2}$$

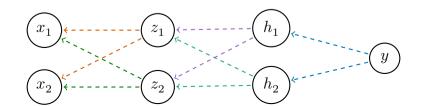


Обратное распространение ошибки

$$3: \quad \frac{\partial y}{\partial h_2} \qquad \left[\frac{\partial y}{\partial h_1} \right]$$

$$2: \quad \left[\frac{\partial y}{\partial z_1} \right] = \left[\frac{\partial y}{\partial h_1} \right] \cdot \frac{\partial h_1}{\partial z_1} + \frac{\partial y}{\partial h_2} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial z_2} \qquad \frac{\partial y}{\partial z_2} = \left[\frac{\partial y}{\partial h_1} \right] \cdot \frac{\partial h_1}{\partial z_2} + \frac{\partial y}{\partial h_2} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial z_2}$$

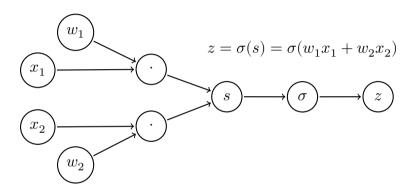
$$1: \quad \frac{\partial y}{\partial x_1} = \left[\frac{\partial y}{\partial z_1} \right] \cdot \frac{\partial z_1}{\partial x_1} + \frac{\partial y}{\partial z_2} \cdot \frac{\partial z_2}{\partial x_1} \qquad \frac{\partial y}{\partial x_2} = \left[\frac{\partial y}{\partial z_1} \right] \cdot \frac{\partial z_1}{\partial x_2} + \frac{\partial y}{\partial z_2} \cdot \frac{\partial z_2}{\partial x_2}$$



Обратное распространение ошибки

- Это называется reverse-mode дифференцирование, в теории нейросетей это называют back-propagation (обратное распространение ошибки)
- Работает быстро, потому что переиспользует вычисленные ранее значения
- На самом деле, по каждому ребру пройдемся всего раз, то есть сложность линейна по количеству ребер (т.е. параметров)

Back-propagation на одном нейроне



Данные текут сквозь нейрон:

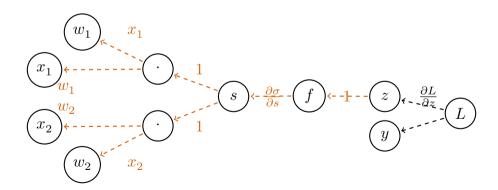
$$X \Rightarrow s = X \cdot W \Rightarrow z = \sigma(s) \Rightarrow L(z, y) = (y - z)^2$$

Back-propagation на одном нейроне

Forward pass:

$$\boxed{X} \Rightarrow \boxed{s = X \cdot W} \Rightarrow \boxed{z = \sigma(s)} \Rightarrow \boxed{L(z, y) = (y - z)^2}$$

Backward pass:

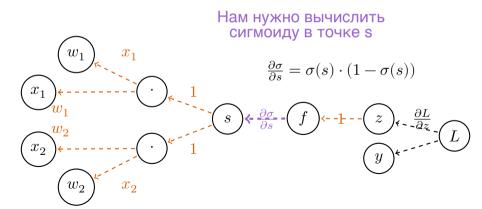


Back-propagation на одном нейроне

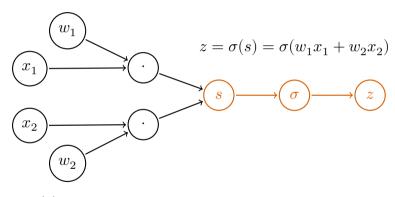
Forward pass:

$$X \Rightarrow s = X \cdot W \Rightarrow z = \sigma(s) \Rightarrow L(z, y) = (y - z)^2$$

Backward pass:

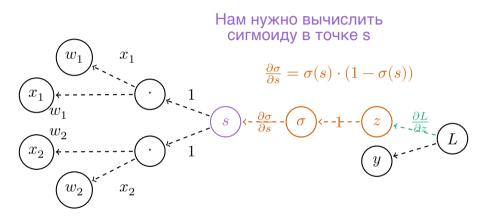


Сигмоида: прямой проход (forward pass)



def forward_pass(s):
 return 1/(1 + np.exp(-s))

Сигмоида: обратный проход (backward pass)



$$\frac{\partial L}{\partial s} = \frac{\frac{\partial \sigma}{\partial s}}{\frac{\partial s}{\partial \sigma}} \cdot \frac{\partial L}{\partial \sigma}$$

Полносвязный слой: прямой проход (forward pass)

- Два нейрона с тремя входами:

$$\begin{split} z_1 &= x_1 w_{11} + x_2 w_{21} + x_3 w_{31} \\ z_2 &= x_1 w_{12} + x_2 w_{22} + x_3 w_{32} \end{split}$$

- Матричная запись:

$$(z_1 \quad z_2) = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \\ w_{31} & w_{32} \end{pmatrix}$$

$$z = xW$$

Полносвязный слой: обратный проход (backward pass)

- Матричная запись:

$$(z_1 \quad z_2) = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \\ w_{31} & w_{32} \end{pmatrix}$$

$$Z = XW$$

- Для обратного прохода нам нужна $\frac{\partial L}{\partial W}$:

$$W_t = W_{t-1} - \eta_t \cdot \left. \frac{\partial L}{\partial W} \right|_{W_{t-1}}$$

Полносвязный слой в numpy

Прямой проход:

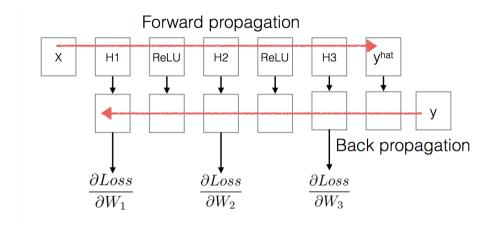
```
def forward_pass(X, W):
    return X.dot(W))
```

$$Z = XW$$

Обратный проход:

$$\frac{\partial L}{\partial X} = \frac{\partial L}{\partial Z} \cdot W^T$$
$$\frac{\partial L}{\partial W} = X^T \cdot \frac{\partial L}{\partial Z}$$

Эти формулы мы получим на семинаре



Forward pass:

$$X \xrightarrow{W_1} H_1 \xrightarrow{f} O_1 \xrightarrow{W_2} H_2 \xrightarrow{f} O_2 \xrightarrow{W_3} \hat{y} \longrightarrow MSE$$

Backward pass:

$$X \xleftarrow{\frac{\partial H_1}{\partial X}} \xrightarrow{\frac{\partial O_1}{\partial H_1}} \xrightarrow{\frac{\partial H_2}{\partial O_1}} \xrightarrow{\frac{\partial O_2}{\partial H_2}} \xrightarrow{\frac{\partial O_2}{\partial H_2}} \xrightarrow{\frac{\partial \hat{y}}{\partial O_2}} \xrightarrow{\frac{\partial MSE}{\partial \hat{y}}} \underbrace{\frac{\partial MSE}{\partial \hat{y}}} \xrightarrow{MSE}$$

$$\downarrow \frac{\partial H_1}{\partial W_1} = X^T \qquad \qquad \downarrow \frac{\partial H_2}{\partial W_2} = O_1^T \qquad \qquad \downarrow \frac{\partial \hat{y}}{\partial W_3} = O_2^T$$

Forward pass:

$$X \xrightarrow{W_1} H_1 \xrightarrow{\sigma} O_1 \xrightarrow{W_2} H_2 \xrightarrow{\sigma} O_2 \xrightarrow{W_3} \hat{y} \longrightarrow MSE$$

Backward pass:

$$X \xleftarrow{W_1^T} H_1 \xleftarrow{O_1(1-O_1)} O_1 \xleftarrow{W_2^T} H_2 \xleftarrow{O_2(1-O_2)} O_2 \xleftarrow{W_3^T} \hat{y} \xleftarrow{-2(\hat{y}-y)} MSE$$

$$X \xleftarrow{W_1^T} H_1 \xleftarrow{O_1(1-O_1)} O_1 \xleftarrow{W_2^T} H_2 \xleftarrow{O_2(1-O_2)} O_2 \xleftarrow{W_3^T} \hat{y} \xleftarrow{-2(\hat{y}-y)} MSE$$

Шаг 1:

$$\begin{aligned} d &= -2(\hat{y} - y) \\ \frac{\partial MSE}{\partial W_3} &= O_2^T \cdot d \end{aligned}$$

$$X \xleftarrow{W_1^T} H_1 \xleftarrow{O_1(1-O_1)} O_1 \xleftarrow{W_2^T} H_2 \xleftarrow{O_2(1-O_2)} O_2 \xleftarrow{W_3^T} \hat{y} \xleftarrow{-2(\hat{y}-y)} MSE$$

$$\begin{split} & \text{ } \coprod \text{ar 2:} \\ & d = -2(\hat{y} - y) \\ & \frac{\partial MSE}{\partial W_3} = O_2^T \cdot d \end{split} \qquad \begin{aligned} & d = d \cdot W_3^T * O_2 * (1 - O_2) \\ & \frac{\partial MSE}{\partial W_2} = O_1^T \cdot d \end{aligned}$$

$$\begin{array}{ll} \text{ War 1:} & \text{ War 2:} & \text{ War 3:} \\ d = -2(\hat{y} - y) & d = d \cdot W_3^T * O_2 * (1 - O_2) & d = d \cdot W_2^T * O_1 * (1 - O_1) \\ \frac{\partial MSE}{\partial W_3} = O_2^T \cdot d & \frac{\partial MSE}{\partial W_2} = O_1^T \cdot d & \frac{\partial MSE}{\partial W_1} = X^T \cdot d \end{array}$$

$$X \xleftarrow{W_1^T} H_1 \xleftarrow{O_1(1-O_1)} O_1 \xleftarrow{W_2^T} H_2 \xleftarrow{O_2(1-O_2)} O_2 \xleftarrow{W_3^T} \hat{y} \xleftarrow{-2(\hat{y}-y)} MSE$$

$$d = -2(\hat{y} - y)$$

$$\partial MSE$$

$$\frac{\partial MSE}{\partial W} = O_1^T \cdot d$$

$$\begin{aligned} d &= -2(\hat{y} - y) & d &= d \cdot W_3^T * O_2 * (1 - O_2) & d &= d \cdot W_2^T * O_1 * (1 - O_1) \\ \frac{\partial MSE}{\partial W_3} &= O_2^T \cdot d & \frac{\partial MSE}{\partial W_2} &= O_1^T \cdot d & \frac{\partial MSE}{\partial W_1} &= X^T \cdot d \end{aligned}$$

Шаг SGD:

$$\partial M^{t}$$

$$W_3^t = W_3^{t-1} - \eta \cdot \frac{\partial MSE}{\partial W_2} \qquad W_2^t = W_2^{t-1} - \eta \cdot \frac{\partial MSE}{\partial W_2}$$

$$W_1^t = W_1^{t-1} - \eta \cdot \frac{\partial MSE}{\partial W_1}$$

Численная оценка производной

- Способа считать производную быстрее нет!
- Можно попробовать посчитать численную оценку

$$\frac{f(x, w + \varepsilon) - f(x, w)}{\varepsilon}$$

- При больших ε результат будет очень неточным, при малых ε начнутся численные приколы с точностью вычислений
- На практике лучше работает формула

$$\frac{f(x, w + \varepsilon) - f(x, w - + \varepsilon)}{2 \cdot \varepsilon}$$

Что такое слой в нейронной сети?

- Любой слой это какая-то абстракция, которая умеет делать прямой шаг и обратный шаг
- Для всех слоёв, которые мы дальше будем изучать, мы всегда будем смотреть на то как выглядят эти два шага

А мне точно надо понимать backprop?

- Да, точно!
- "Backprop leaky abstraction!"
- Почему сеть не обучается?
- Почему сеть обучается слишком медленно?
- Какие проблемы могут возникать в обучении из-за плохой архитектуры?