

План

Простейшая нейросеть – 1 нейрон Функции активации

(линейная, пороговая, сигмоида, гиперболический тангенс, softmax, LeakyReLU, ELU, Maxout, Exponential Linear Unit, Maxout, Gaussian Error Linear Unit)

Функциональная выразимость нейрона Теорема об универсальной аппроксимации Сеть прямого распространения Необходимость глубоких сетей Обучение

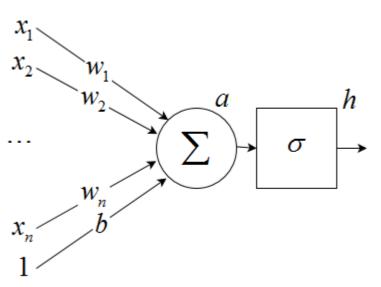
Обратное распространение градиента (Backpropagation)

Функции ошибки

Нейросеть – вычислительный граф Вычисление градиента на графе Производные на компьютере

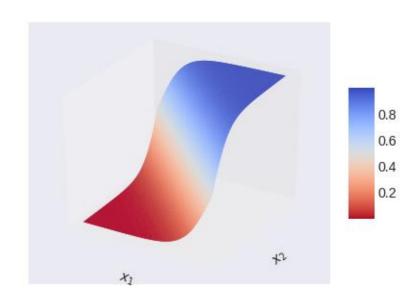
Проблема затухания градиента

Простейшая нейросеть – 1 нейрон

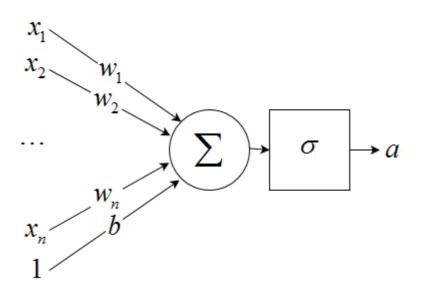


Разделяющая поверхность – линейная

$$a(x) = b + w_1 x_1 + \ldots + w_n x_n = \sum_{t=0}^n w_t x_t$$
 $h(x) = \sigma(a(x))$ b – смещение σ – функция активации w_t – веса связей



Линейные модели – нейросети!



Линейная регрессия

$$a(x) = b + w_1 x_1 + \ldots + w_n x_n$$

Линейный классификатор

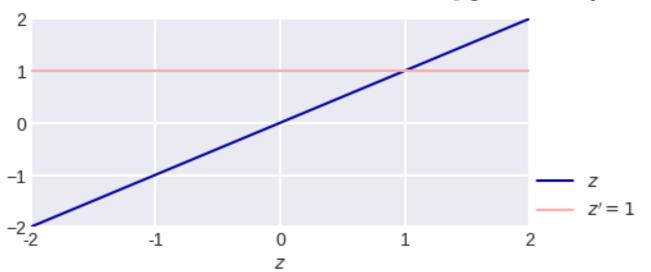
$$a(x) = \text{th}(b + w_1 x_1 + ... + w_n x_n)$$

Логистическая регрессия

$$a(x) = \sigma(b + w_1 x_1 + \ldots + w_n x_n)$$

Функции активации

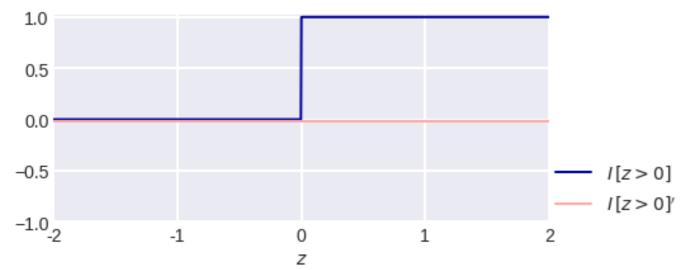
Тождественная функция (линейная / linear activation function)



$$f(z) = z$$

$$f(z) = z$$
$$\frac{\partial f(z)}{\partial z} = 1$$

Пороговая функция (threshold function)

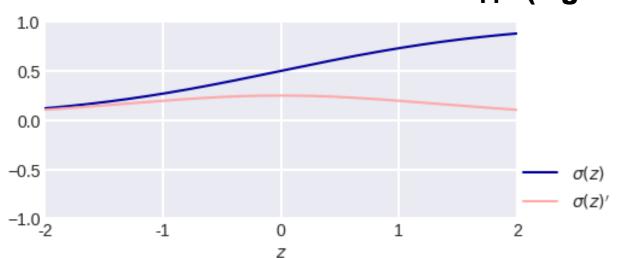


$$th(z) = I[z > 0]$$

$$\frac{\partial \operatorname{th}(z) - I[z > 0]}{\partial z} = 0$$

Функции активации

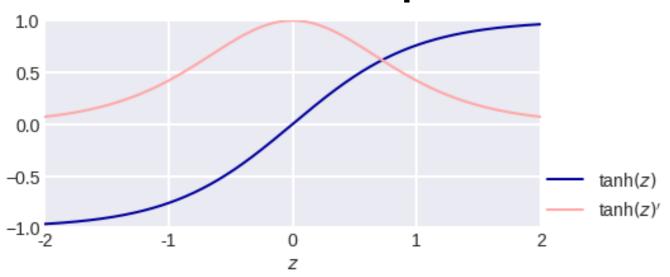
Сигмоида (sigmoid activation function)



$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}} \in (0, 1)$$

$$\frac{\sigma(z)}{\partial z} = \sigma(z)(1 - \sigma(z)) > 0$$

Гиперболический тангенс (hyperbolic tangent)



$$\tanh(z) = \frac{2}{1 + e^{-2z}} - 1 = \frac{e^{+z} - e^{-z}}{e^{+z} + e^{-z}} = \frac{e^{+2z} - 1}{e^{+2z} + 1}$$
$$\frac{\partial \tanh(z)}{\partial z} = 1 - \tanh^2(z)$$

Функции активации в задачах классификации

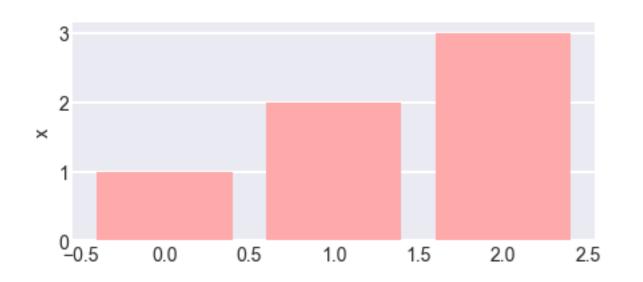
softmax
$$(z_1,...,z_k) = \frac{1}{\sum_{t=1}^{k} \exp(z_t)} (\exp(z_1),...,\exp(z_k))^{\mathrm{T}}$$

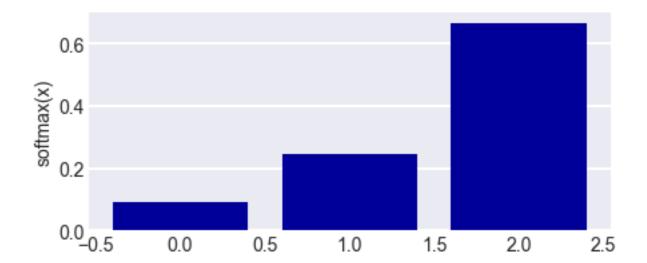
сумма выходов = 1 выходы интерпретируются как вероятности

$$[0.5, 0.5, 0.1, 0.7] \rightarrow [0.257, 0.257, 0.172, 0.314]$$

 $[-1.0, 0, 1.0, 0, -1.0] \rightarrow [0.07, 0.18, 0.5, 0.18, 0.07]$
 $[1.0, 1.0, 1.0, 2.0, 1.0] \rightarrow [0.15, 0.15, 0.15, 0.4, 0.15]$

Минутка кода





```
from torch.nn.functional import softmax
x = torch.tensor([1, 2, 3], dtype=float)
y = softmax(x)
```

He всегда softmax нужен в явном виде (например, при NLLLoss)

Минутка кода

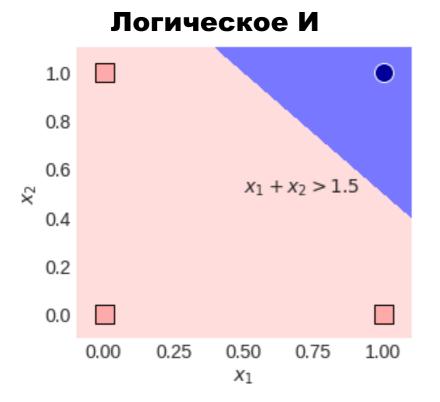
```
from torch.nn import Sigmoid
from torch.nn.functional import sigmoid
x = torch.tensor([1, 2, 3], dtype=float)
s = Sigmoid() # создаёт nn.Module
s(x), sigmoid(x) # один результат
```

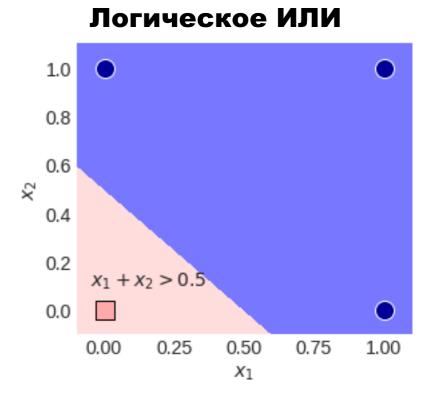
все нужные функции активации есть... https://pytorch.org/docs/1.9.0/nn.functional.html

Non-linear activation functions

threshold	Thresholds each element of the input Tensor.
threshold_	In-place version of threshold().
relu	Applies the rectified linear unit function element-wise.
relu_	In-place version of relu().
hazdtanh	Applies the HardTanh function element-wise.

Что может один нейрон

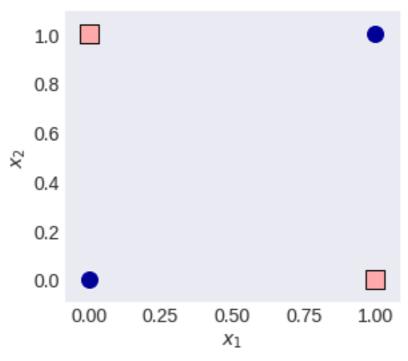




Для простоты – пороговая функция активации

Что НЕ может один нейрон

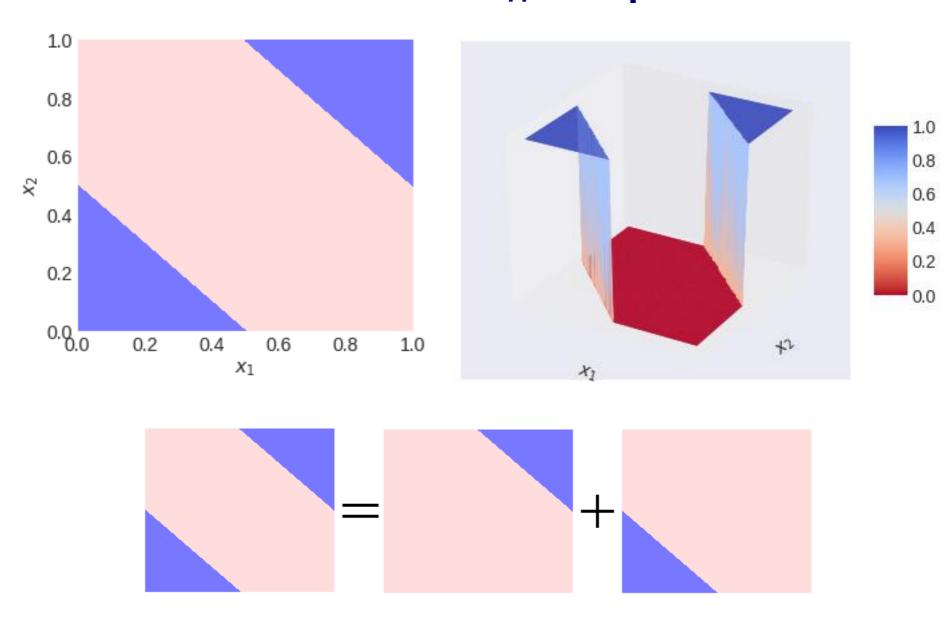
Исключающее ИЛИ / эквивалентность



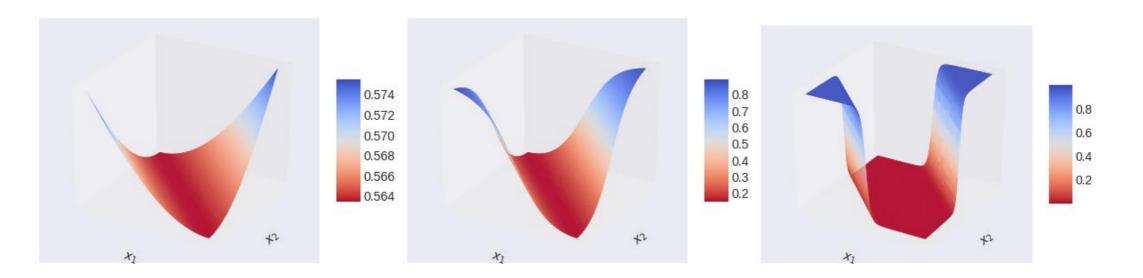
th(th(
$$x_1 + x_2 - 1.5$$
) + th($-x_1 - x_2 + 0.5$) - 0.5)

$$th(th(0+0-1.5)+th(-0-0+0.5)-0.5)=th(0+1-0.5)=1\\ th(th(0+1-1.5)+th(-0-1+0.5)-0.5)=th(0+0-0.5)=0\\ th(th(1+0-1.5)+th(-1-0+0.5)-0.5)=th(0-0-0.5)=0\\ th(th(1+1-1.5)+th(-1-1+0.5)-0.5)=th(1+0-0.5)=1$$

Что НЕ может один нейрон



Сигмоида стремится к пороговой функции



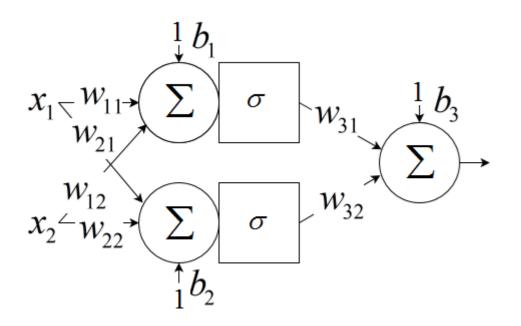
$$\sigma_c(\sigma_c(x_1 + x_2 - 1.5) + \sigma_c(-x_1 - x_2 + 0.5) - 0.5)$$

$$\sigma_c(z) = \frac{1}{1 + e^{-cz}}$$

- Сигмоиду проще обучать дифференцируемая
 - Есть возможность получать «вероятности»

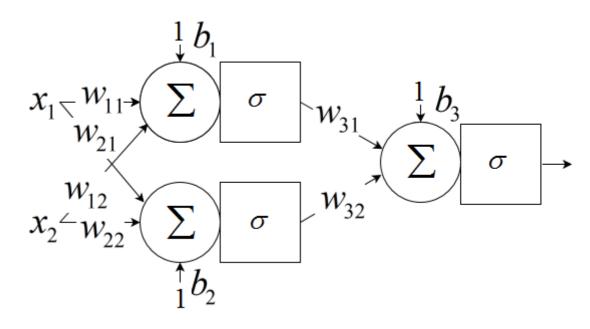
Двуслойная нейронная сеть

Регрессия



$$a = b_3 + w_{31}\sigma(b_1 + w_{11}x_1 + w_{12}x_2) + + w_{32}\sigma(b_2 + w_{21}x_1 + w_{22}x_2)$$

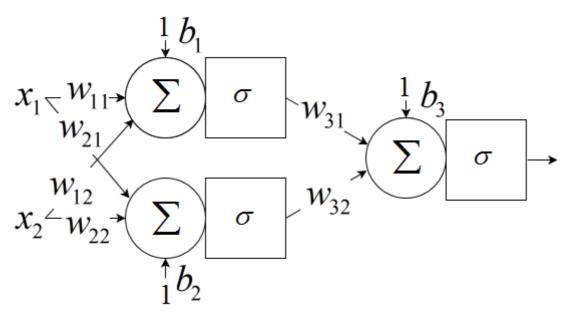
Классификация



$$a = \sigma(b_3 + w_{31}\sigma(b_1 + w_{11}x_1 + w_{12}x_2) + w_{32}\sigma(b_2 + w_{21}x_1 + w_{22}x_2))$$

Такой нейронной сети хватит... (в первом слое м.б. больше нейронов)

Двуслойная нейронная сеть



$$\sigma \begin{bmatrix} w_{31} & w_{32} & b_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & b_1 \\ w_{21} & w_{22} & b_2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ 1 \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

Теорема об универсальной аппроксимации [Hornik, 1991]

Любую непрерывную функцию можно с любой точностью приблизить нейросетью глубины 2 с сигмоидной функцией активации на скрытом слое и линейной функции на выходном слое

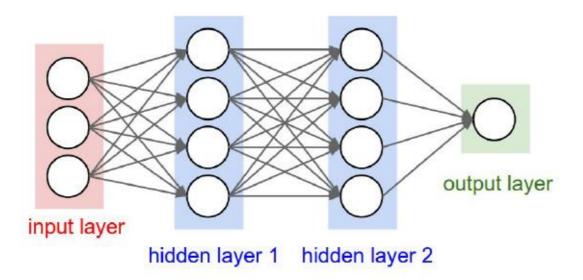
Нейросеть глубины два с фиксированной функцией активации в первом слое и линейной функцией активации во втором может равномерно аппроксимировать (м.б. при увеличении числа нейронов в первом слое) любую непрерывную функцию на компактном множестве тогда и только тогда, когда функция активации неполиномиальная.

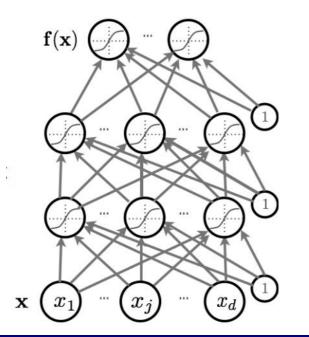
http://www2.math.technion.ac.il/~pinkus/papers/neural.pdf

Более того, функция активации м.б. любая (неполиномиальная)! Но...

- много нейронов (неизвестно сколько)
 - экспоненциальные веса
 - сложность обучения

Многослойная нейронная сеть – пример нелинейной модели





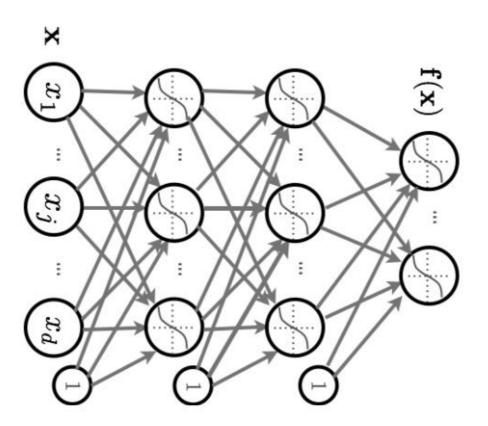
Ориентированный граф вычислений

Вершины – переменные или нейроны Рёбра – зависимости

Сеть прямого распространения – Feedforward Neural Network

(т.е. нет циклов)

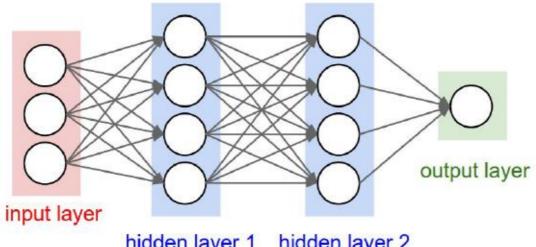
все нейроны предыдущего слоя связаны с нейронами следующего



входной слой один или несколько скрытых слоёв выходной слой

Важная аналогия

Глубокая НС – последовательное преобразование признакового пространства



hidden layer 1 hidden layer 2

$$\varphi_k(W_k \cdot \ldots \cdot \varphi_2(W_2 \cdot \varphi_1(W_1 \cdot x)))$$

иногда чуть другая запись!

Сейчас наука DL, в основном, как правильно представлять (преобразовывать) признаковые пространства

увидим потом и в таких моделях, как кодировщик нельзя просто преобразовывать... надо что-то ещё требовать

Минутка кода

```
class Feedforward(torch.nn.Module):
        def init (self, input size, hidden size):
            super(Feedforward, self). init ()
            self.input size, self.hidden size = input_size, hidden_size
            self.fc1 = torch.nn.Linear(self.input_size, self.hidden_size, bias=True)
            self.relu = torch.nn.ReLU()
            self.fc2 = torch.nn.Linear(self.hidden size, 1, bias=False)
            self.sigmoid = torch.nn.Sigmoid()
        def forward(self, x):
            hidden = self.fcl(x)
            relu = self.relu(hidden)
            output = self.fc2(relu)
            output = self.sigmoid(output)
            return output
net = Feedforward(3, 5)
x = torch.tensor([1., 2., 3.])
net(x)
```

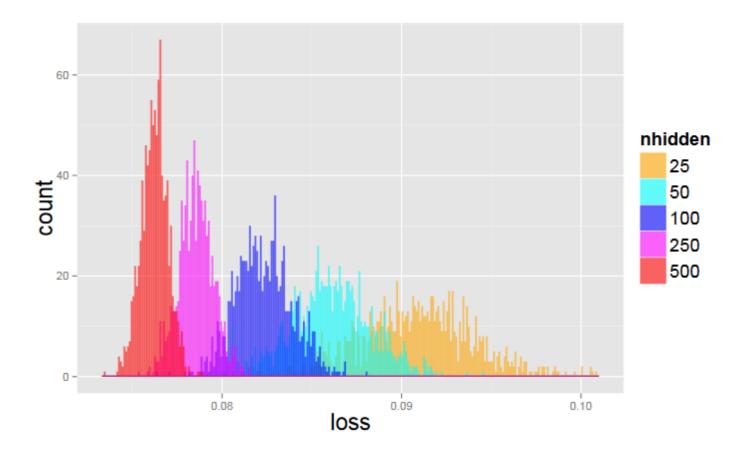
tensor([0.5376], grad_fn=<SigmoidBackward>)

Минутка кода

```
net
Feedforward(
  (fc1): Linear(in features=3, out features=5, bias=True)
  (relu): ReLU()
  (fc2): Linear(in features=5, out features=1, bias=False)
  (sigmoid): Sigmoid()
net.fc1.weight.data, net.fc1.bias.data, net.fc2.weight.data # net.fc2.bias.data
(tensor([-0.5727, 0.1885, -0.4232],
        [-0.1383, -0.2233, -0.5384],
         [-0.3583, 0.1175, -0.5696],
         [-0.4284, 0.1711, 0.0918],
         [-0.5539, -0.2273, 0.4973]]),
 tensor([0.5525, -0.4201, -0.5736, 0.0464, -0.02971),
 tensor([[-0.1064, -0.3029, 0.4057, 0.0953, 0.2823]]))
                                           или
from torch import nn
net = nn.Sequential(nn.Linear(3, 5), nn.ReLU(), nn.Linear(5, 1), nn.Sigmoid())
net(x)
```

как реализовать Feedforward([3, 4, 5, 3, 1])?

Зачем нужны глубокие нейронные сети

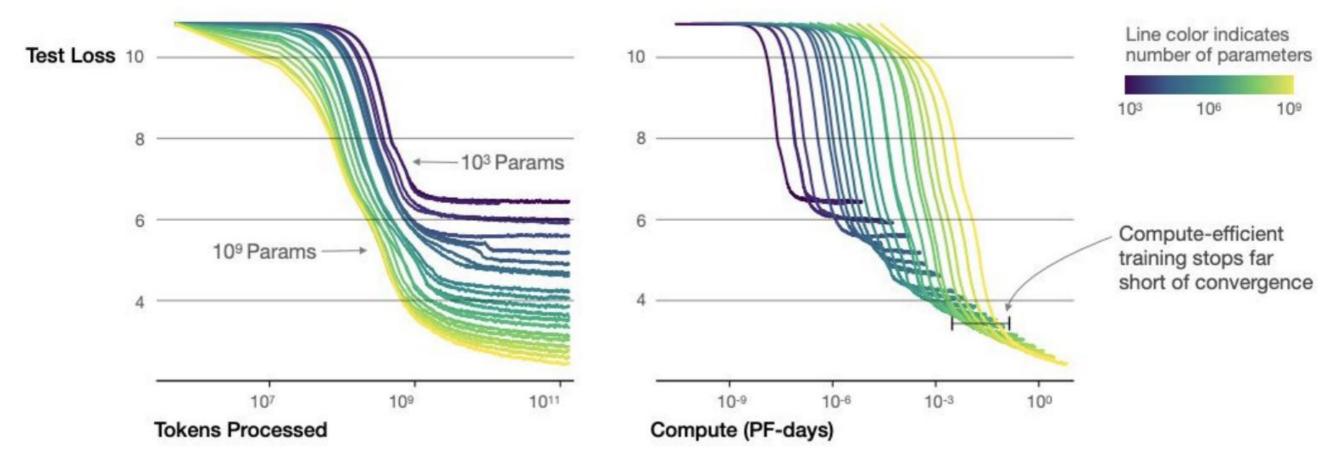


Anna Choromanska, Mikael Henaff, Michael Mathieu, Gérard Ben Arous, Yann LeCun «The Loss Surfaces of Multilayer Networks» 2015, https://arxiv.org/abs/1412.0233

Зачем нужны глубокие нейронные сети

Larger models require **fewer samples** to reach the same performance

The optimal model size grows smoothly with the loss target and compute budget



Большие модели требуют меньше данных!

stateofai 2020

Глубокие нейронные сети

Много слоёв Много данных Достаточно вычислительных мощностей

Обучение

Как принято... минимизация регуляризованного эмпирического риска

$$\frac{1}{m} \sum_{t=1}^{m} L(a(x_i \mid w), y_i) + \lambda R(w) \to \min_{w}$$

Задача оптимизации невыпуклая!

«Настройка» нейронной сети – получение весов ${\mathcal W}$

Метод стохастического градиента (SGD)

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta \nabla [L(a(x_i \mid w^{(t)}), y_i) + \lambda R(w^{(t)})]$$

т.к. очень много слагаемых... и так быстрее;)

где здесь неточность?

Метод стохастического градиента

- **1.** Случайная инициализация весов $w^{(0)} \sim \text{norm}(0, \sigma^2)$
- 2. Цикл по t до сходимости
- 2.1. Выбираем случайный объект X_i
- **2.2.** Вычисляем градиент $\nabla [L(a(x_i \mid w^{(t)}), y_i) + \lambda R(w^{(t)})]$
- **2.3.** Адаптация весов $w^{(t+1)} = w^{(t)} \eta \nabla [L(a(x_i \mid w^{(t)}), y_i) + \lambda R(w^{(t)})]$

почему такая инициализация?

Функции ошибки

Классификация – logloss (CrossEntropyLoss)

$$L((a_1,...,a_l),y) = -\log \frac{\exp(a_y)}{\sum_{j=1}^{l} \exp(a_j)} = -a_y + \log \sum_{j=1}^{l} \exp(a_j)$$

такая реализация не очень «устойчива»

(сумма больших экспонент, разница близких чисел)

- Часто при реализации делают так:

$$-a_y + \max\{a_j\} + \log\left(\sum_{j=1}^l \exp(a_j - \max\{a_j\})\right)$$

Минутка кода

перечисляются номера классов

Обратное распространение градиента (Backpropagation)

Идея: вычисление производной сложной функции

$$\nabla f(w, g(w), h(w)) = \frac{\partial f}{\partial w} + \frac{\partial f}{\partial g} \nabla g(w) + \frac{\partial f}{\partial h} \nabla h(w)$$

Автоматическое дифференцирование

Прямое распространение

$$x, w \rightarrow f(x, w, g(x, w), h(x, w))$$

вычисление ответов, функции ошибки

Обратное распространение

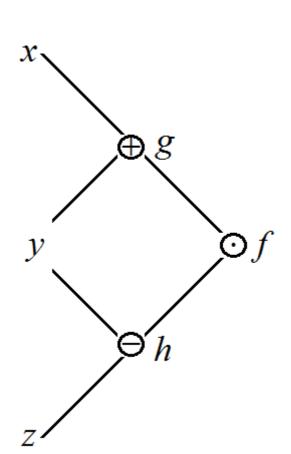
$$x, w, \nabla g, \nabla h \rightarrow \nabla f$$

вычисление градиентов

Нейросеть - вычислительный граф

Другой взгляд на НС вершины – переменные (входные, внутренние, выходные) рёбра – зависимости (+ веса) слой – операция

тут м.б. более широкое понятие слоя: линейная комбинация, нелинейность,

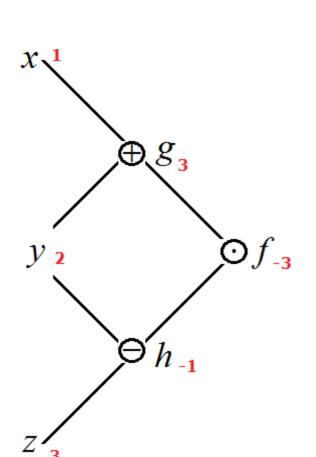


$$f = (x+y) \cdot (y-z)$$

$$f(x,y,z) = \underbrace{(x+y) \cdot (y-z)}_{g(x,y)} \cdot \underbrace{(y-z)}_{h(y,z)}$$

Как проводится вычисление функции?

$$x, y, z = 1, 2, 3$$



$$f = (x + y) \cdot (y - z)$$

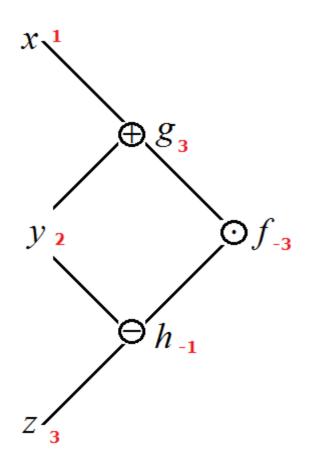
$$f(x, y, z) = \underbrace{(x+y) \cdot (y-z)}_{g(x,y)} \cdot \underbrace{(y-z)}_{h(y,z)}$$

Как проводится вычисление функции?

$$x, y, z = 1, 2, 3$$

«Прямой ход»

$$f = (x + y) \cdot (y - z)$$



$$f(x, y, z) = \underbrace{(x+y) \cdot (y-z)}_{g(x,y)} \cdot \underbrace{(y-z)}_{h(y,z)}$$

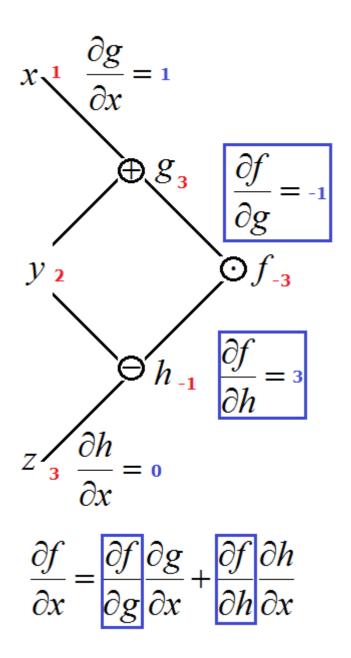
Как проводится вычисление производных?

$$\frac{\partial f}{\partial g} = h, \frac{\partial f}{\partial h} = g$$

$$\frac{\partial g}{\partial x} = 1, \frac{\partial h}{\partial x} = 0$$

$$f \quad \partial f \quad \partial g \quad \partial f \quad \partial g$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial g} \frac{\partial g}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial x}$$



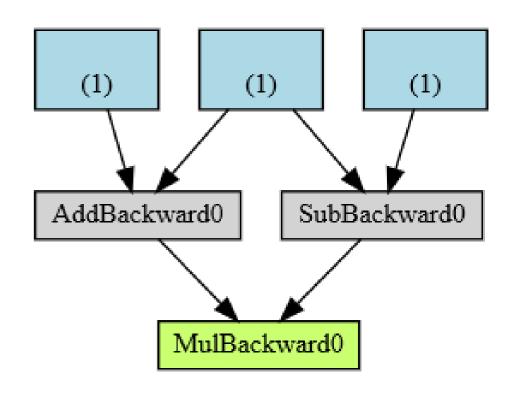
$$f(x, y, z) = \underbrace{(x+y)}_{g(x,y)} \cdot \underbrace{(y-z)}_{h(y,z)}$$

Как проводится вычисление производных?

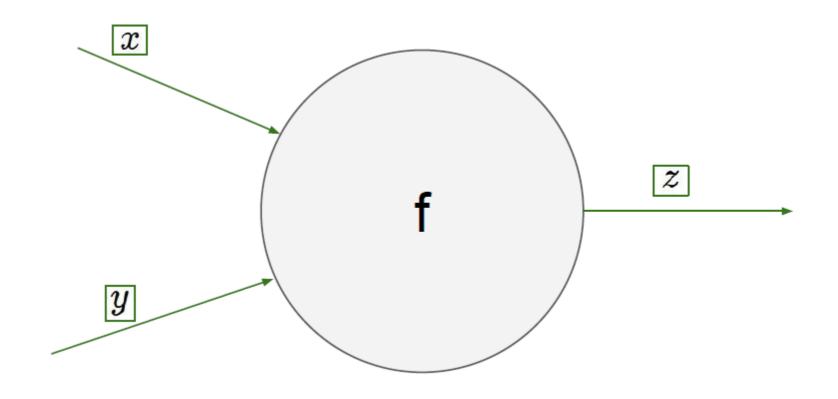
«Обратный ход»

Минутка кода: PyTorch

```
import torch
from torch.autograd import Variable
# переменные
x = Variable(torch.Tensor([1]), requires grad=True)
y = Variable(torch.Tensor([2]), requires grad=True)
z = Variable(torch.Tensor([3]), requires grad=True)
f = (x + y) * (y - z) # прямой проход - вычисление
f.backward() # обратный проход - выч. производных
x.grad, y.grad, z.grad # производные
(tensor([-1.]), tensor([2.]), tensor([-3.]))
from torchviz import make dot
make dot(f)
```

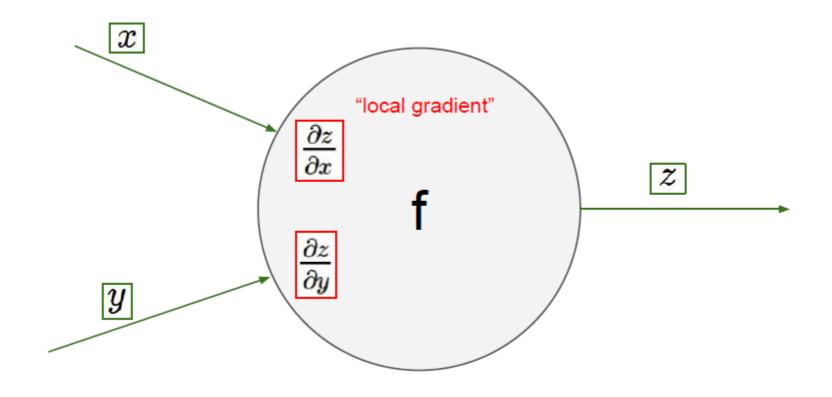


Обратное распространение градиента (Backpropagation)

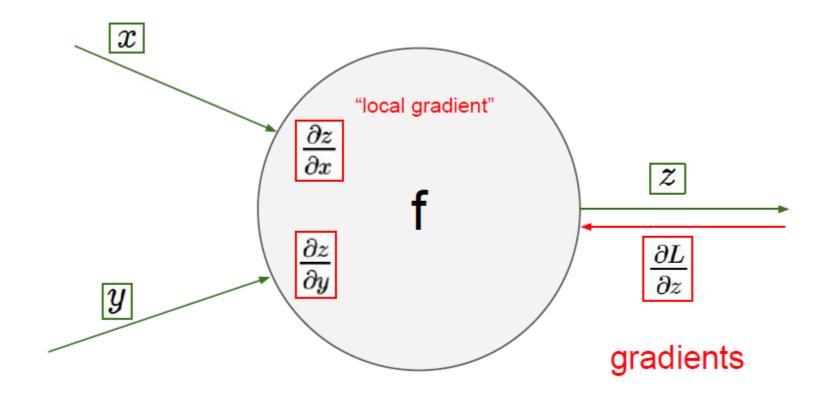


http://cs231n.stanford.edu/2017/index.html

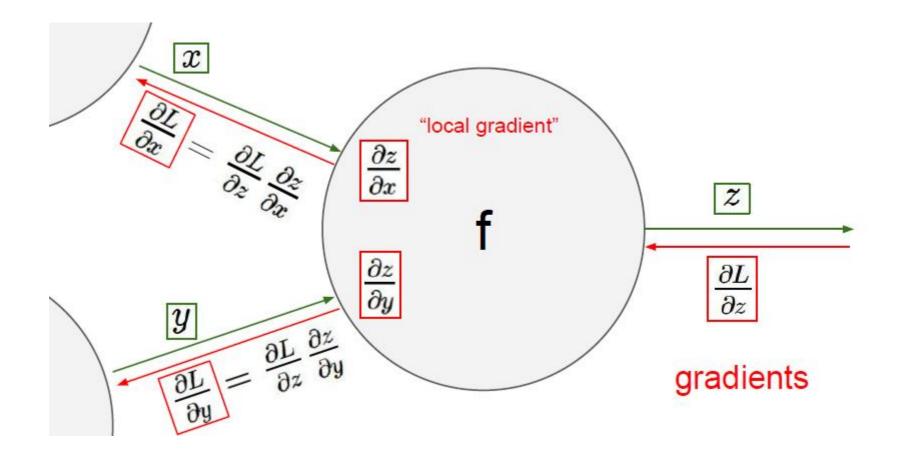
Обратное распространение = SGD + дифференцирование сложных функций



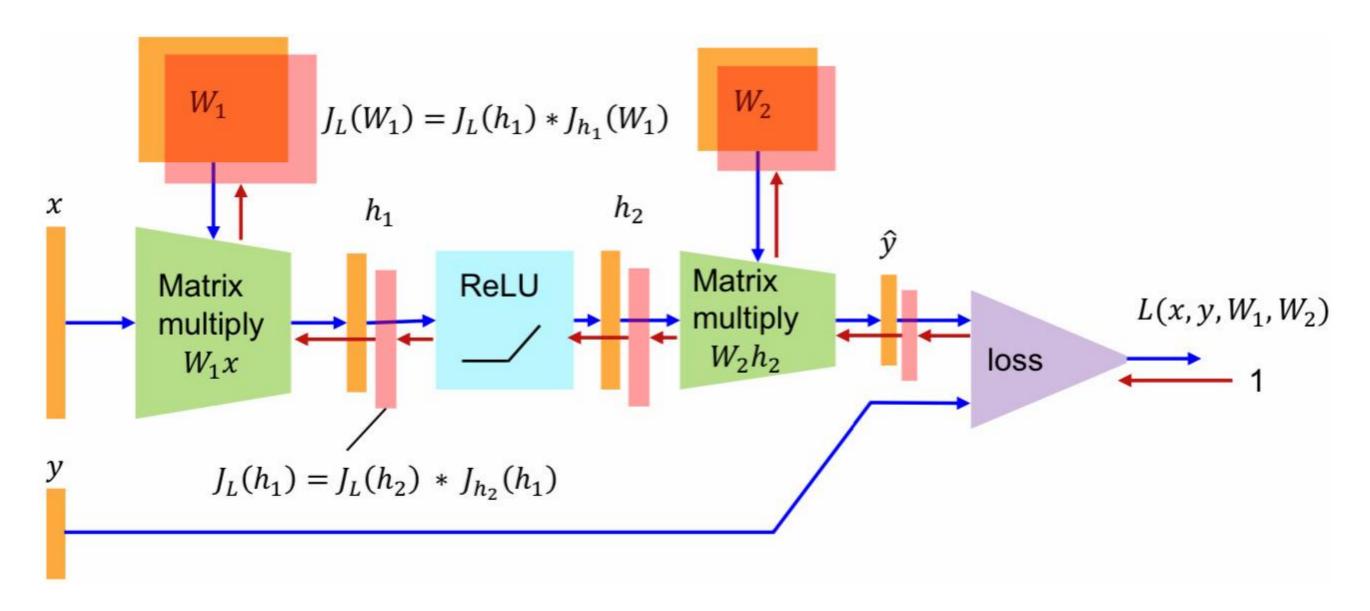
http://cs231n.stanford.edu/2017/index.html



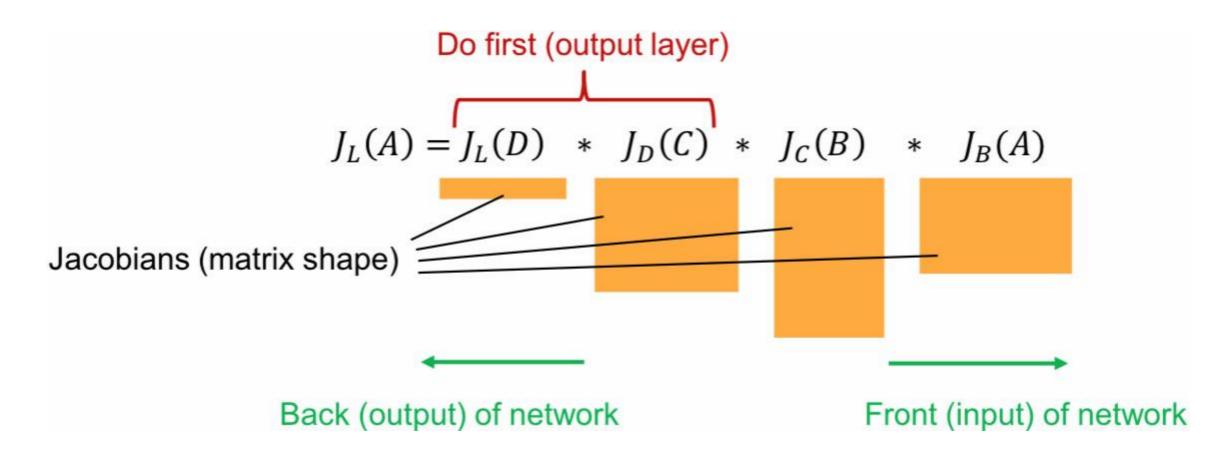
http://cs231n.stanford.edu/2017/index.html



http://cs231n.stanford.edu/2017/index.html



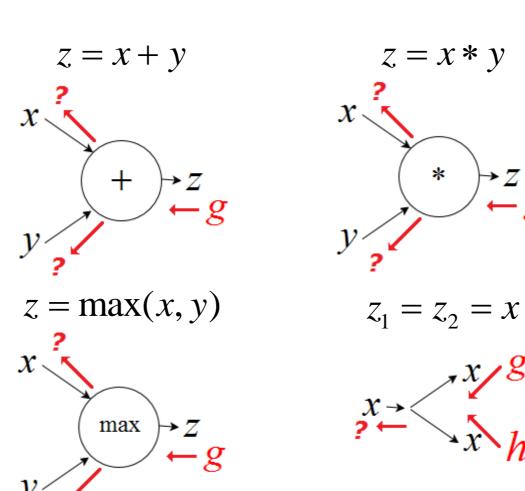
https://bcourses.berkeley.edu/courses/1487769/pages/cs-l-w-182-slash-282a-designing-visualizing-and-understanding-deep-neural-networks-spring-2020



слева – строка, т.к. ошибка – скаляр

Прохождение градиента через гейты

Как здесь проходит градиент?



Прохождение градиента через гейты

Как здесь проходит градиент?

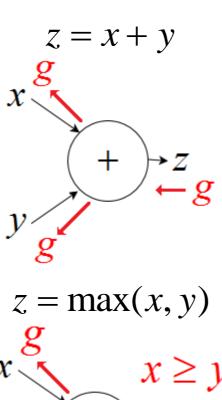
$$\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{\partial L}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial x} =$$

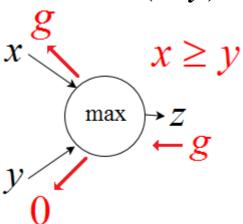
$$= g \frac{\partial (x + y)}{\partial x} = g$$

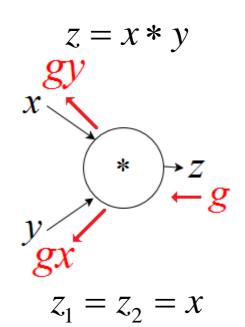
$$\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{\partial L}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial x} =$$

$$= g \frac{\partial \max(x, y)}{\partial x} = \begin{cases} g, & x > y \\ 0, & y \ge x \end{cases}$$

А что при х=у?!







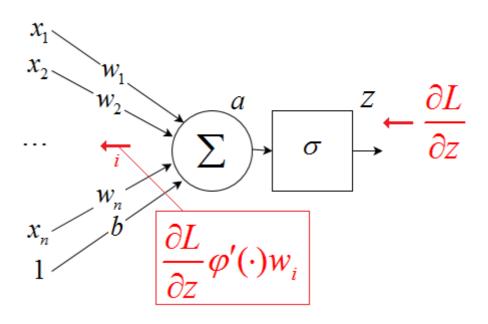
$$g + h$$
 $x \rightarrow x$

$$\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{\partial L}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial x} =$$

$$= g \frac{\partial (xy)}{\partial x} = gy$$

Подумать, почему так? Потом станет яснее...

Прохождение градиента через нейрон



$$z = \varphi(w_0 + w_1 x_1 + \dots w_n x_n)$$

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = \frac{\partial L}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial x_i} = \frac{\partial L}{\partial z} \varphi'(\cdot) w_i$$

при прохождении градиента через нейрон происходит умножение на производную функции активации

Проблема затухания градиента

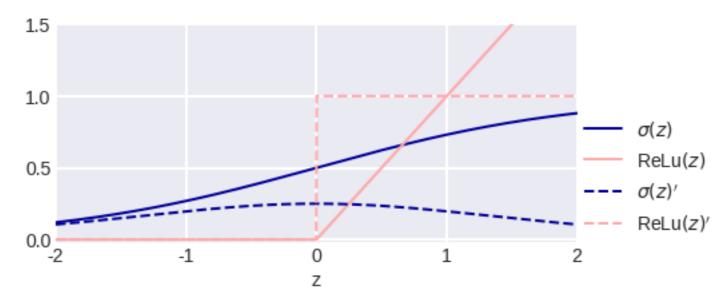
Производная сигмоиды при «насыщенном сигнале» близка к нулю

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

$$ReLU(z) = max(0, z)$$

$$\frac{\partial \sigma(z)}{\partial z} = \sigma(z)(1 - \sigma(z))$$

$$\frac{\partial \operatorname{ReLU}(z)}{\partial z} = I[z > 0]$$



ReLU = Rectified Linear Unit

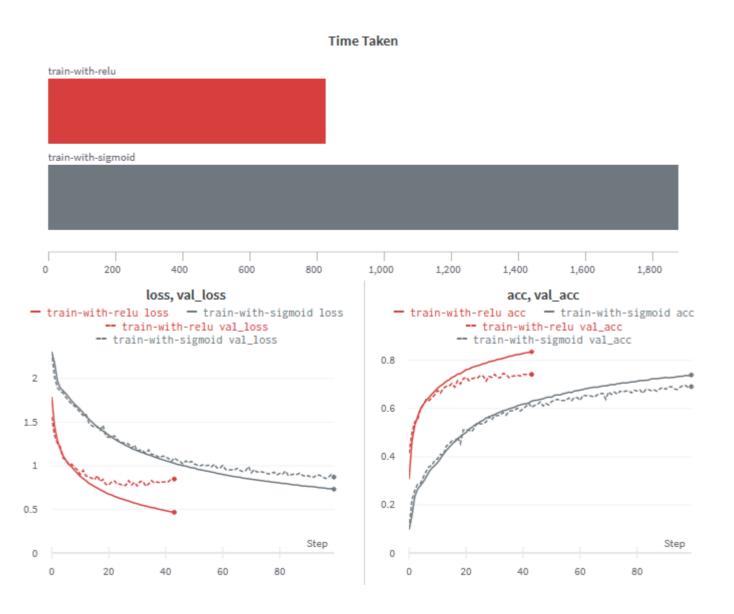
Что плохого в сигмоиде

- «убивает» градиенты
- выходы не отцентрированы (легко устранить o tanh)
 - вычисление экспоненты всё-таки дорого...

Что хорошего в ReLU

- быстро вычисляется
- есть теоретические / биологические обоснования
- зоны константного градиента и обнуления (разреженное решение)

Sigmoid vs ReLU



https://wandb.ai/ayush-thakur/dl-question-bank/reports/ReLU-vs-Sigmoid-Function-in-Deep-Neural-Networks-Why-ReLU-is-so-Prevalent--VmlldzoyMDk0Mzl

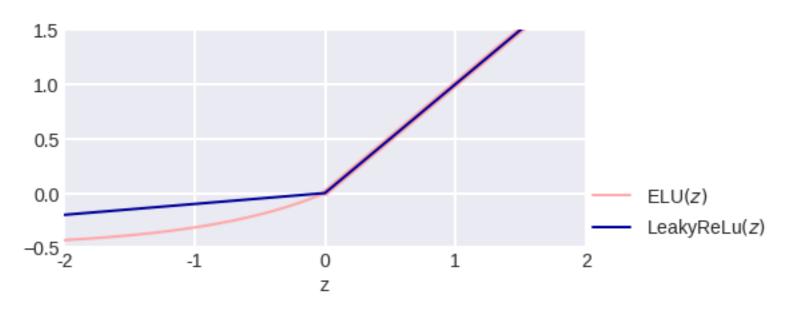
LeakyReLU(
$$z$$
) = max(0.1 z , z)

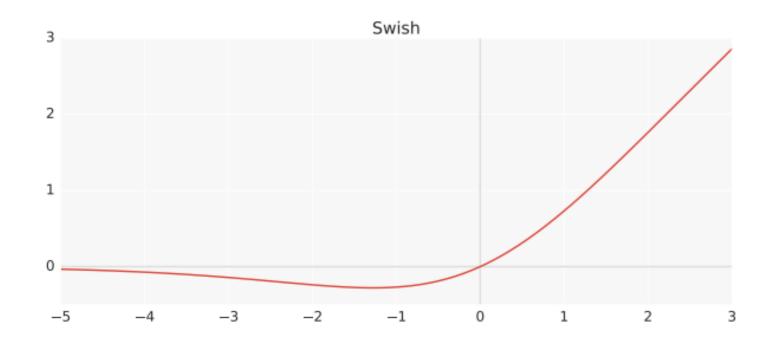
Exponential Linear Unit

$$ELU(z) = \begin{cases} z, & z \ge 0, \\ \alpha(e^z - 1), & z < 0. \end{cases}$$

Scaled Exponential Linear Unit

$$SELU(z) = \lambda ELU(z)$$

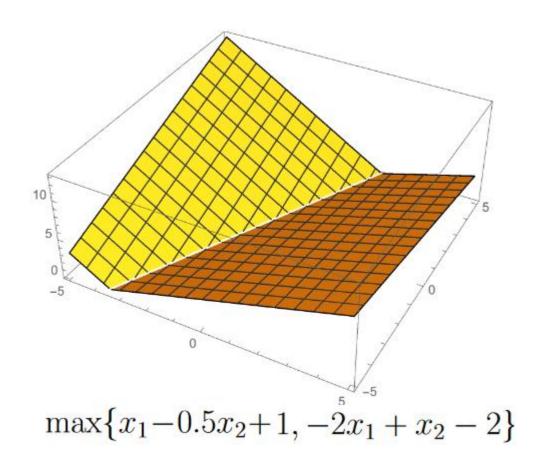




Swish

$$swish(z) = x \cdot \sigma(\alpha x)$$

При замене ReLu на swish в глубоких сетях немного (<1%) улучшается качество



Maxout

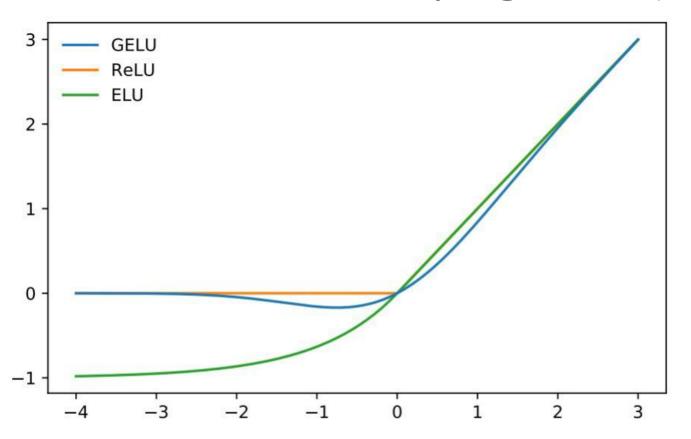
$$Maxout(z) = max(w^{T}z + w_{0}, v^{T}z + v_{0})$$

не совсем функция активации, т.к. есть параметры

https://raw.githubusercontent.com/epfml/ML_course/master/lectures/08/lecture08d_neural_nets.pdf

Gaussian Error Linear Unit

(Google's BERT, OpenAl's GPT-2)

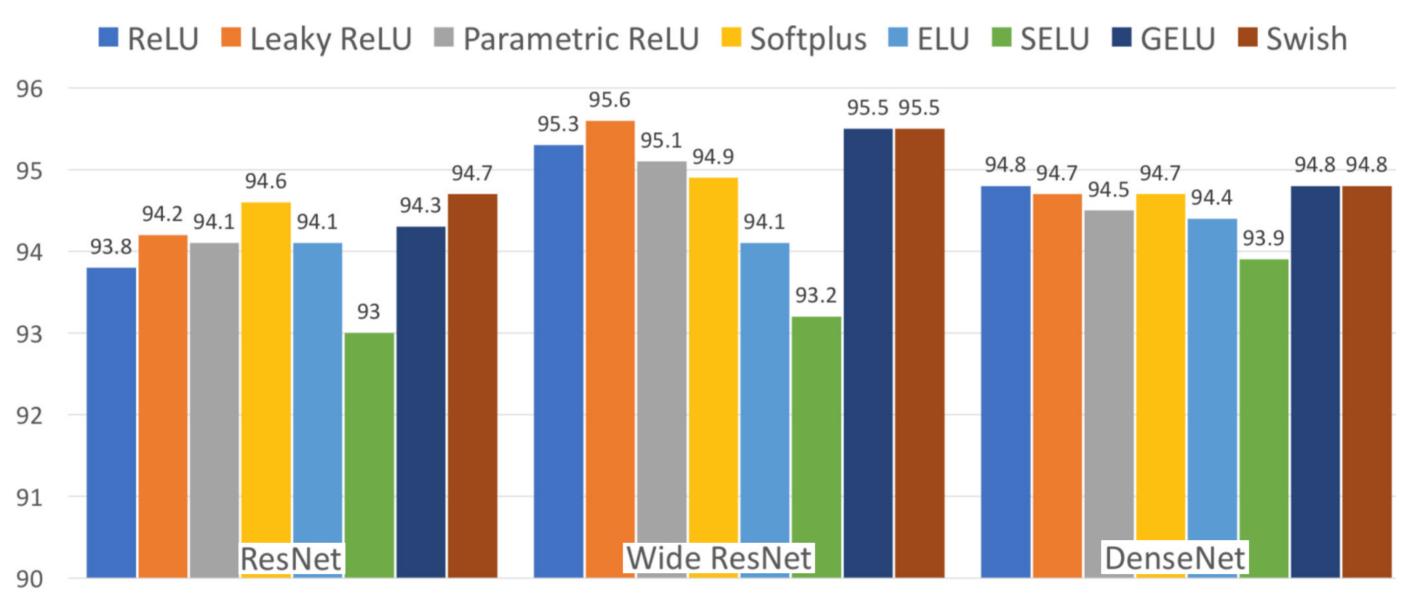


GELU(z) =
$$\frac{z}{2} \left(1 + \tanh \left(\sqrt{\frac{2}{\pi}} (z + \alpha z^3) \right) \right)$$

 $\alpha = 0.044715$

Figure 1: The GELU ($\mu = 0, \sigma = 1$), ReLU, and ELU ($\alpha = 1$).

Сравнение на CIFAR10



[Juhstin Johnson] / https://arxiv.org/pdf/1710.05941.pdf

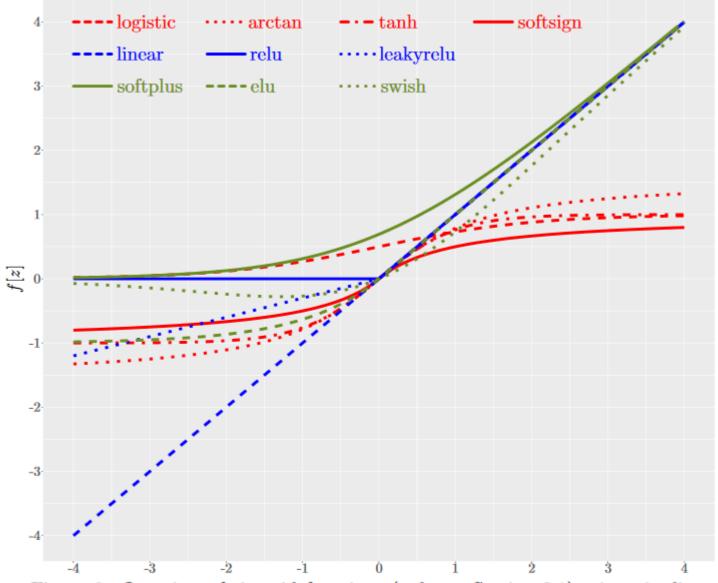
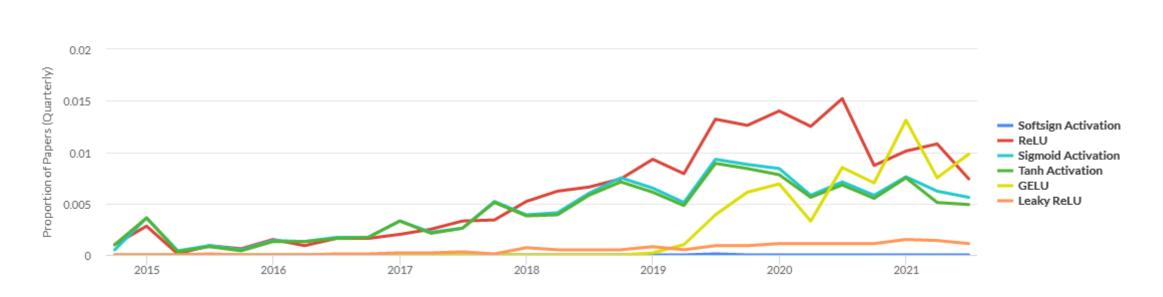


Figure 8: Overview of sigmoid functions (red, see Section 2.1), piecewise-linear functions (blue, see Section 2.2), and other functions (green, see Section 2.3). (Best seen in color.)

https://arxiv.org/pdf/2101.09957v1.pdf

«Популярность» функций активации

Usage Over Time



https://paperswithcode.com/method/softsign-activation

Проблемы НС

Большая сложность модели → **переобучение**

следующая лекция

Нестабильность обучения

по всему курсу

Большое время обучение, много данных

GPU, TPU и т.д.

собирание данных, аугментации и т.п. эффективные современные алгоритмы настройки

Итог

НС – нелинейное обобщение линейных алгоритмов

- последовательное преобразование признакового пространства
 - ансамбль алгоритмов
 - суперпозиция «логистических регрессий»
 - граф вычислений

высокая функциональная выразимость обучение градиентными методами

Дальше: как делать эффективное обучение?

Литература

Производные на компьютере

Atilim Gunes Baydin, Barak A. Pearlmutter, Alexey Andreyevich Radul, Jeffrey Mark Siskind «Automatic differentiation in machine learning: a survey» 2015-2018

https://arxiv.org/abs/1502.05767

лучшая книга по DL

Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, Aaron Courville «Deep Learning» http://www.deeplearningbook.org/

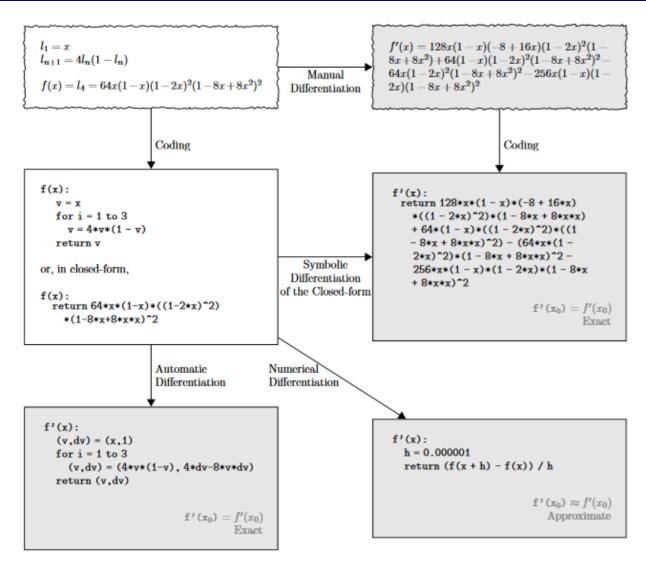


Figure 2: The range of approaches for differentiating mathematical expressions and computer code, looking at the example of a truncated logistic map (upper left). Symbolic differentiation (center right) gives exact results but requires closed-form input and suffers from expression swell; numerical differentiation (lower right) has problems of accuracy due to round-off and truncation errors; automatic differentiation (lower left) is as accurate as symbolic differentiation with only a constant factor of overhead and support for control flow.

Производные на компьютере:

Аналитическая формула
Численный градиент
Символьное дифференцирование
Алгоритмическое дифференцирование