Лекция 6
Временные ряды и рекуррентные нейронные сети

Проектирование интеллектуальных систем

Терехов Валерий Игоревич

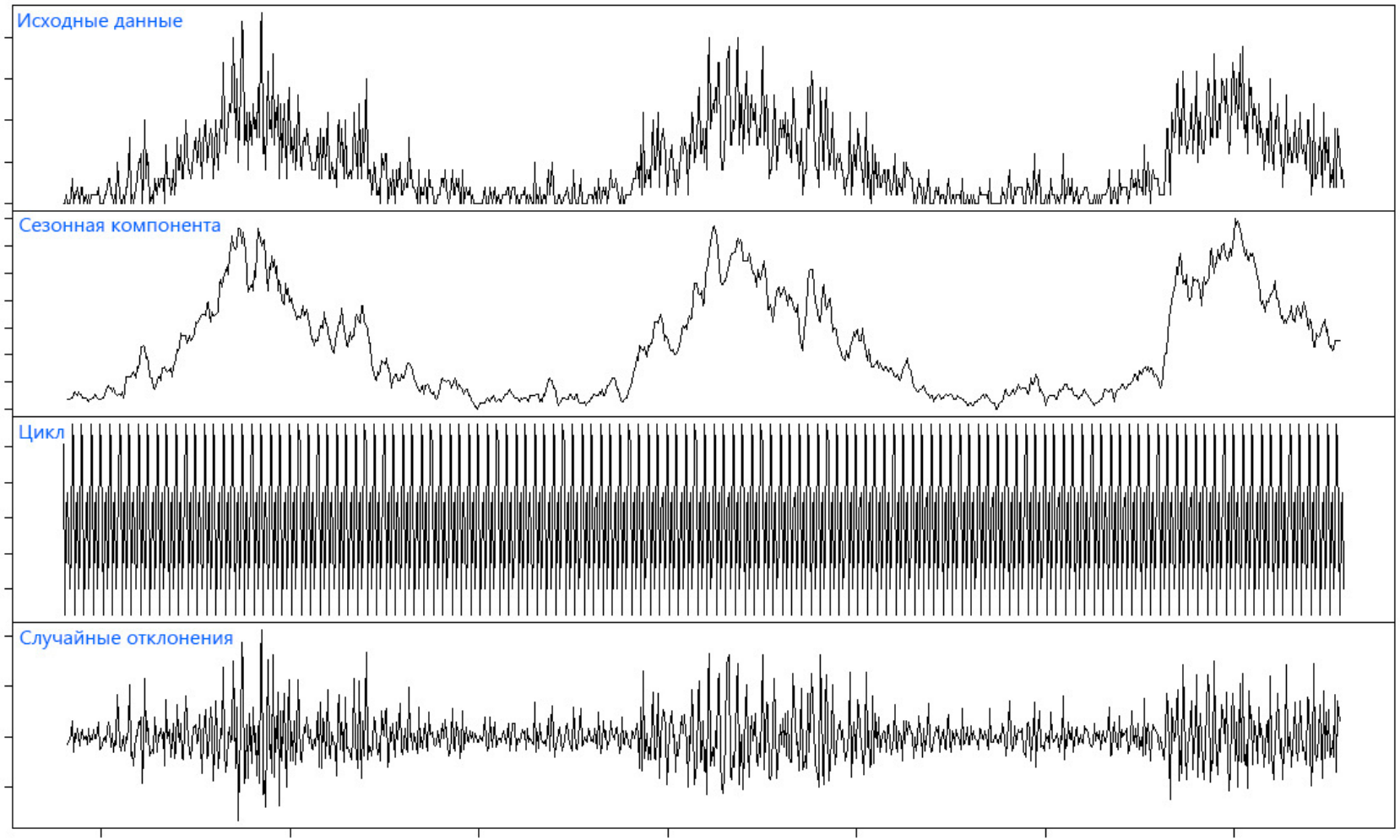
Канев Антон Игоревич

Временной ряд

- **Временной ряд** — собранный в разные моменты времени статистический материал о значении каких-либо параметров.
- Временной ряд существенно отличается от простой выборки данных, так как при анализе учитывается взаимосвязь измерений со временем, а не только статистическое разнообразие и статистические характеристики выборки.
- Стационарный временной ряд – ряд, у которого не меняются математическое ожидание и дисперсия со временем.

Стационарный временной ряд

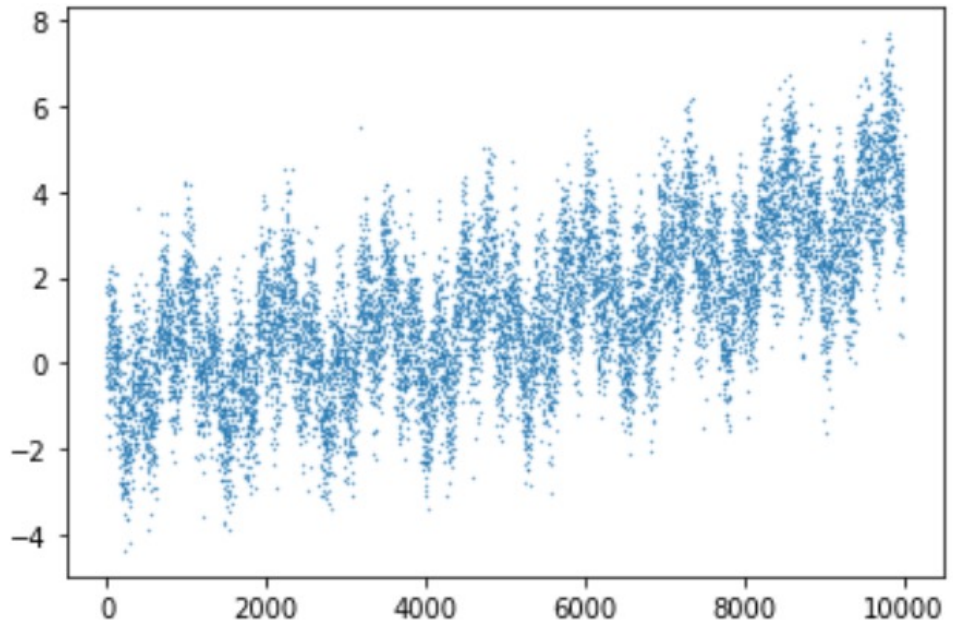
Преобразование временных рядов



Синтетические данные

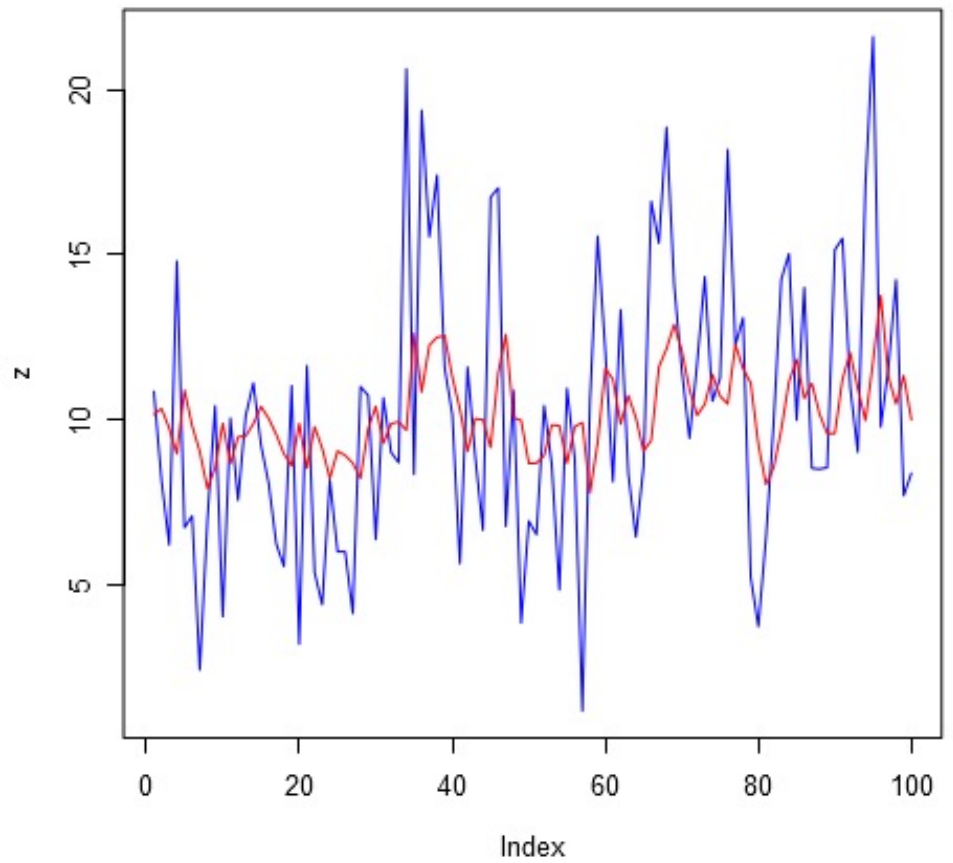
```
X = np.arange(10000)
y = np.sin(X/50)-np.sin(X/200)+(2*X/X.size)**2
y += np.random.normal(scale=1.0, size=y.size)
plt.scatter(X, y[:10000], s=0.1)

df = pd.Series(y)
df = df.diff().dropna()
```



Модель авторегрессии

$$X_t = c + \sum_{i=1}^{p} a_i X_{t-i} + \varepsilon_t$$

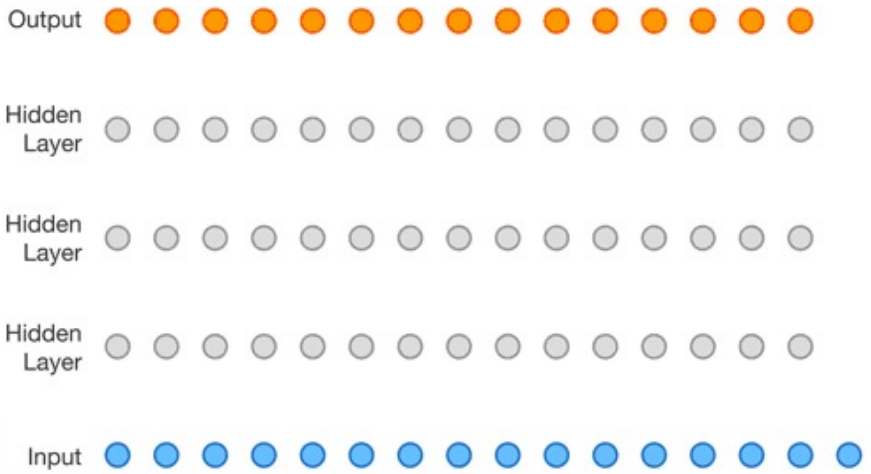


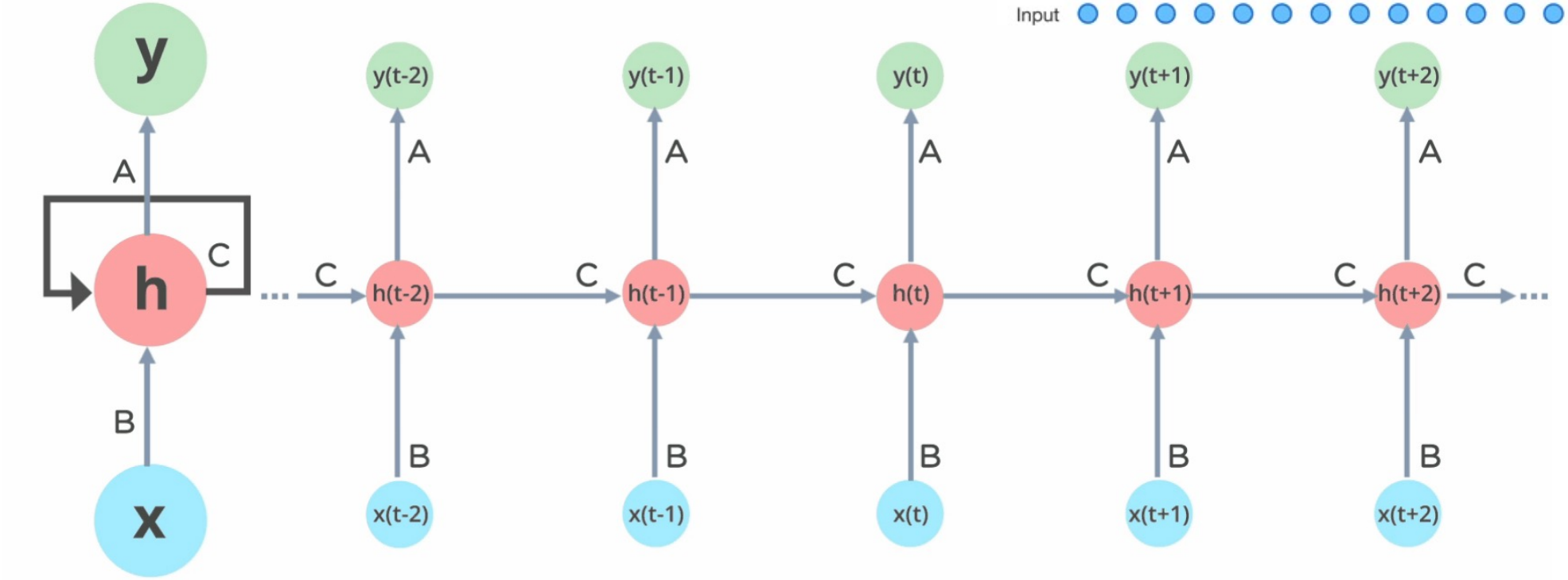
Рекуррентная нейронная сеть

- **Рекуррентные нейронные сети** (*Recurrent neural network*; *RNN*) — вид нейронных сетей, где связи между элементами образуют направленную последовательность.
- Благодаря этому появляется возможность обрабатывать серии событий во времени или последовательные пространственные цепочки.
- В отличие от многослойных перцептронов, рекуррентные сети могут использовать свою внутреннюю память для обработки последовательностей произвольной длины.

Рекуррентная нейросеть

- Рекуррентная нейросеть позволяет реализовать память
- GRU, LSTM





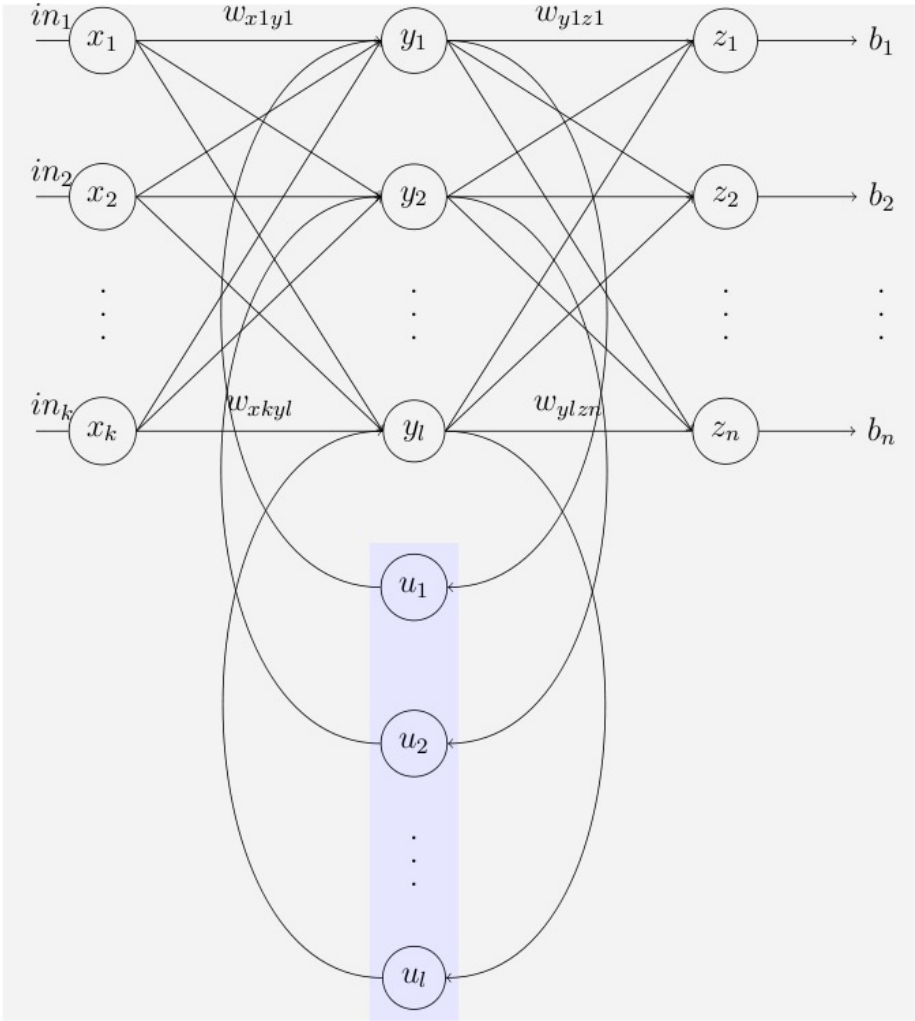
Рекуррентная нейронная сеть

- Сеть Элмана

$$h_t = \sigma_h(W_h x_t + U_h h_{t-1} + b_h)$$
$$y_t = \sigma_y(W_y h_t + b_y)$$

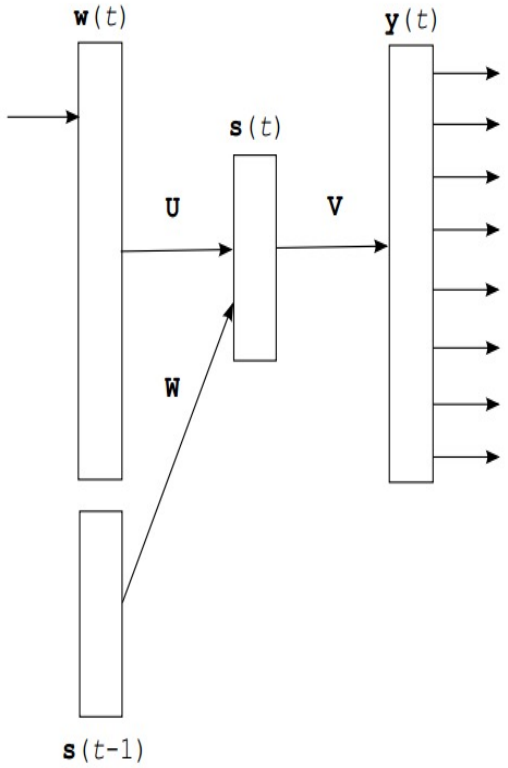
- Сеть Джордана

$$h_t = \sigma_h(W_h x_t + U_h y_{t-1} + b_h)$$
$$y_t = \sigma_y(W_y h_t + b_y)$$



Архитектура: простая RNN

- Входной слой, скрытый слой с реккурентными соединениями и выходной слой
- В теории скрытый слой может обладать неограниченной памятью
- Также называется сетью Элмана (*Finding structure in time*, Elman 1990)



Архитектура: простая RNN

$\mathbf{s}(t) = f(\mathbf{U}\mathbf{w}(t) + \mathbf{W}\mathbf{s}(t-1))$

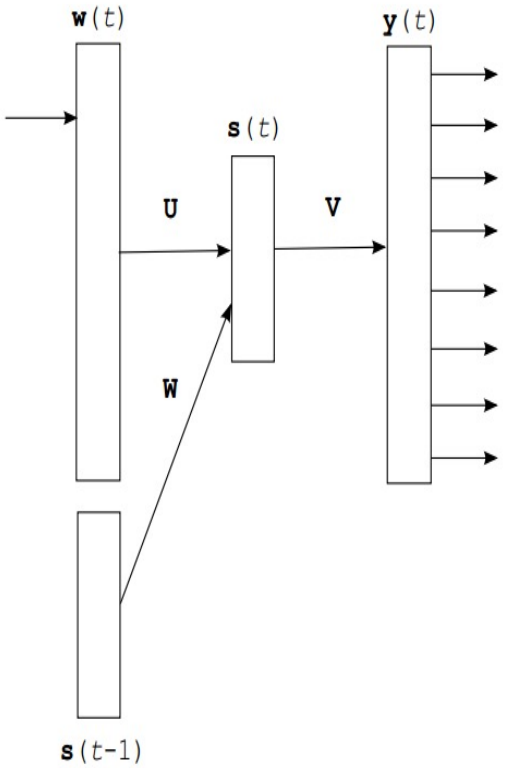
$\mathbf{y}(t) = g(\mathbf{V}\mathbf{s}(t))$

f() чаще всего сигмоидальная активационная функция:

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

g() чаще всего softmax:

$$g(z_m) = \frac{e^{z_m}}{\sum_k e^{z_k}}$$



Обучение: обратное распространение по времени (Backpropagation through time, BPTT)

– Как обучать рекуррентные сети?

– Выходное значение зависит от состояния скрытого слоя, который зависит от всех предыдущих состояний скрытого слоя (и, следовательно, всех предыдущих входов)

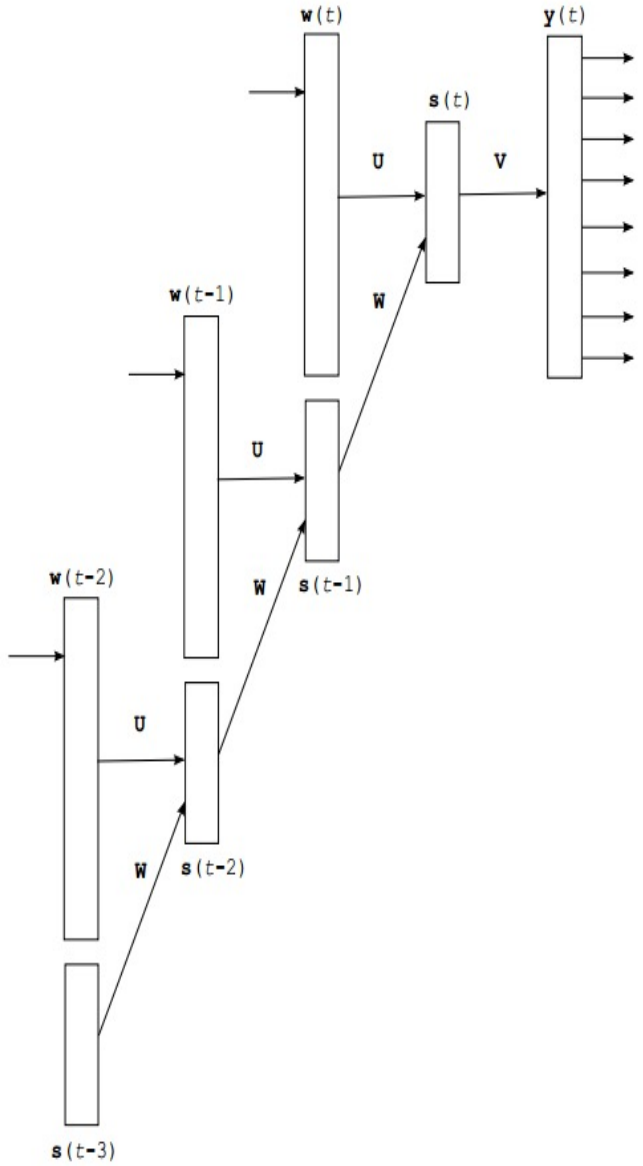
– Рекуррентная сеть может рассматриваться как (очень глубокая) сеть прямого распространения с общими весами

Обратное распространение по времени

– Идея заключается в том, что РНС разворачивается во времени

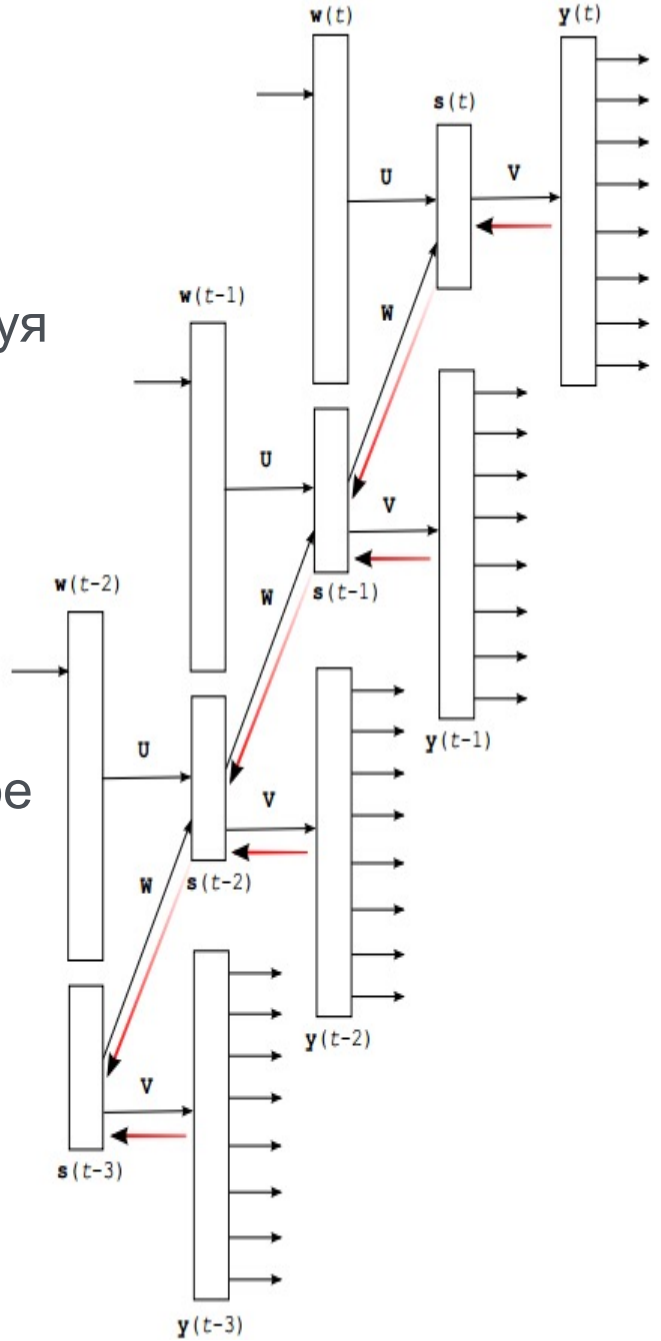
– Мы получаем глубокую нейронную сеть с общими весами **U** и **W**

– Часто бывает достаточно развернуть на несколько шагов (называется *укороченным BPTT*)



Обратное распространение по времени

- Мы тренируем развернутый РНС, используя обычное обр. распр-е + СГС
- На практике ограничивают количество шагов разворачивания до 5 – 10
- Эффективнее вычислить градиент после нескольких обучающих примеров (пакетное обучение)



Исчезающие градиенты

- Когда мы распространяем градиенты назад во времени, обычно их величина быстро уменьшается: это называется «проблемой исчезающего градиента»

- На практике это означает, что изучение долгосрочных зависимостей в данных затруднительно для простой RNN архитектуры

- Специальные архитектуры RNN решают эту проблему:
  - Экспоненциальная память трассировки (Jordan 1987, Mozer 1989)
  - Долгая краткосрочная память (Hochreiter & Schmidhuber, 1997))
  - будут обсуждены во второй части этой лекции

Обучение: Исчезающие градиенты

- Множество научных теорий
  - лучше инициализировать рекуррентную матрицу и использовать импульс во время обучения
- Sutskever et.al.,: On The Importance of Initialization and Momentum in Deep Learning
  - изменять архитектуру

Взрывающиеся градиенты

– Иногда градиенты начинают экспоненциально возрастать во время обратного распространения через рекуррентные веса

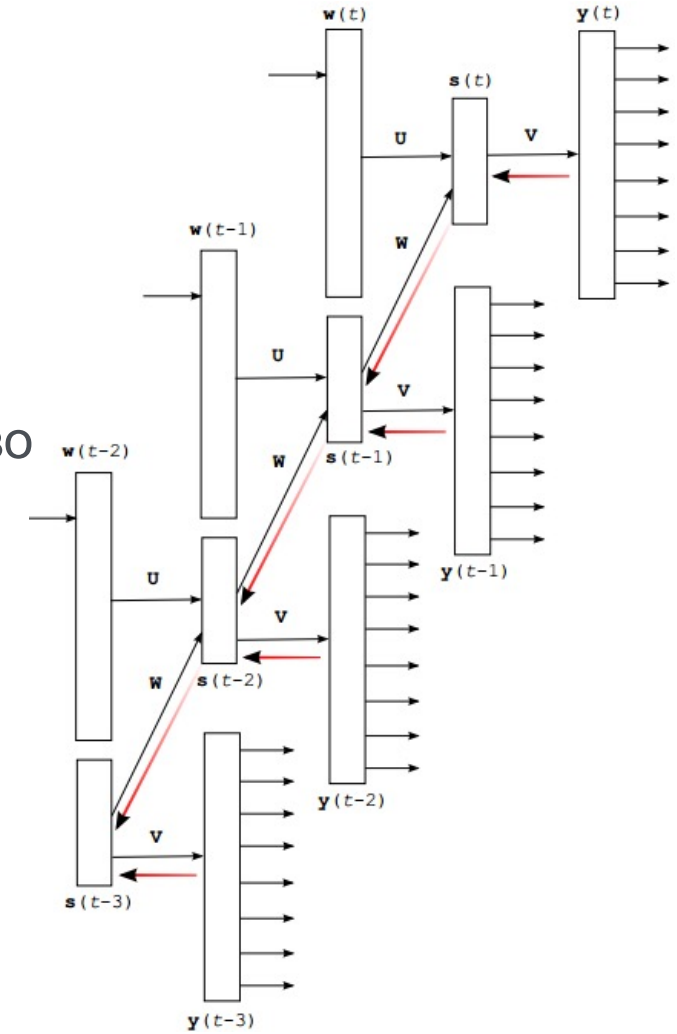
– Бывает редко, но эффект может быть катастрофическим: огромные градиенты приведут к большому изменению весов и, таким образом, разрушат то, что было изучено до сих пор

– Одна из основных причин, по которым RNN должны были быть нестабильными

– Простое решение (впервые опубликован в RNNLM toolkit в 2010): обрезать или нормализовать значения градиентов, чтобы избежать огромных изменений весов

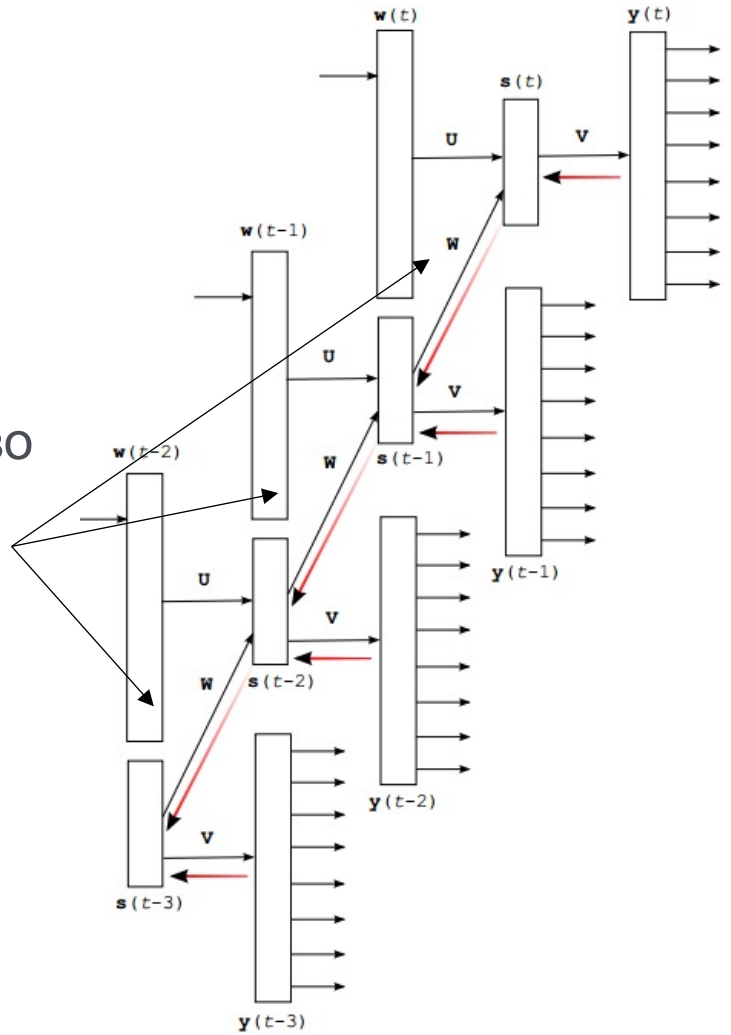
Обучение: Взрывающиеся градиенты

– Обрезка градиента во время обратного распространения по времени



Обучение: Взрывающиеся градиенты

– Обрезка градиента во время обратного распространения по времени



Долгая краткосрочная память (LSTM)

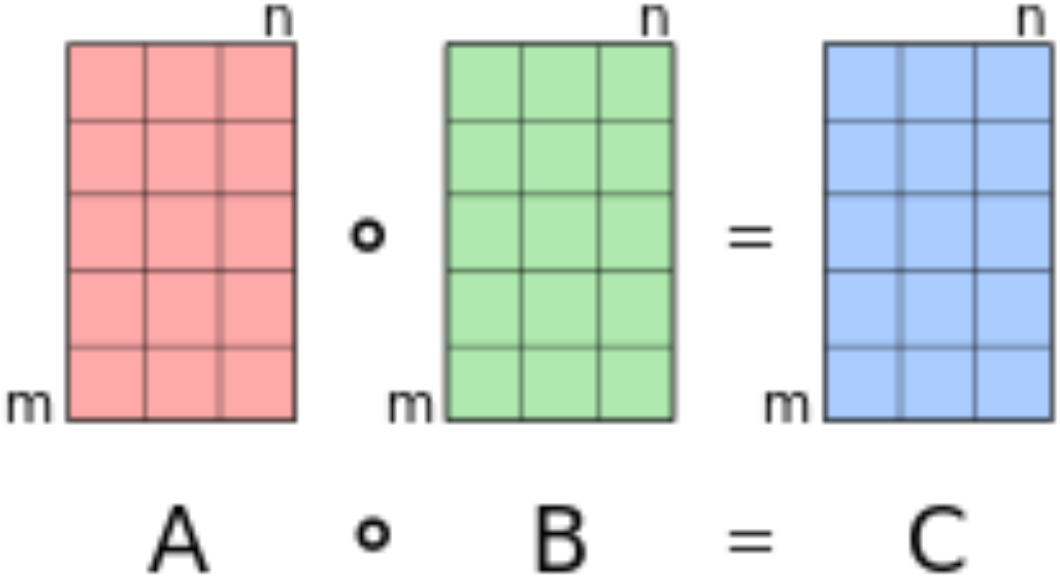
- Недавно приобрела большую популярность
- Имейте явные «ячейки» памяти для хранения кратковременных активаций, наличие дополнительных вентилей частично устраняет проблему исчезающего градиента
- Многослойные версии показали, что они хорошо работают над задачами, которые имеют среднесрочные зависимости

Hochreiter et.al.,1997: Long Short-Term Memory

Произведение Адамара

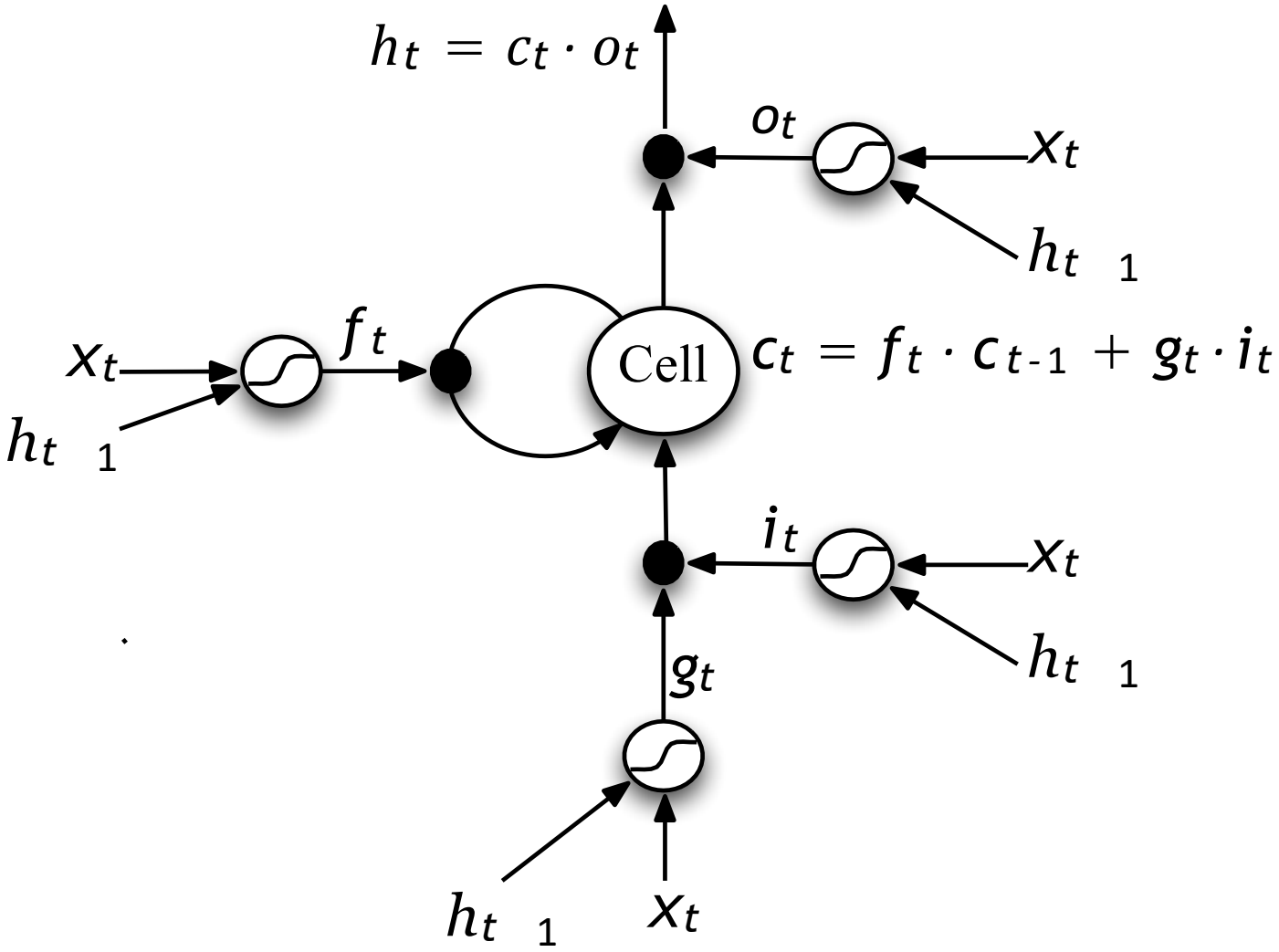
- Произведение Адамара оперирует двумя матрицами одинаковой размерности и создаёт новую матрицу идентичной размерности.

$$(A \circ B)_{i,j} = (A)_{i,j} \cdot (B)_{i,j}$$



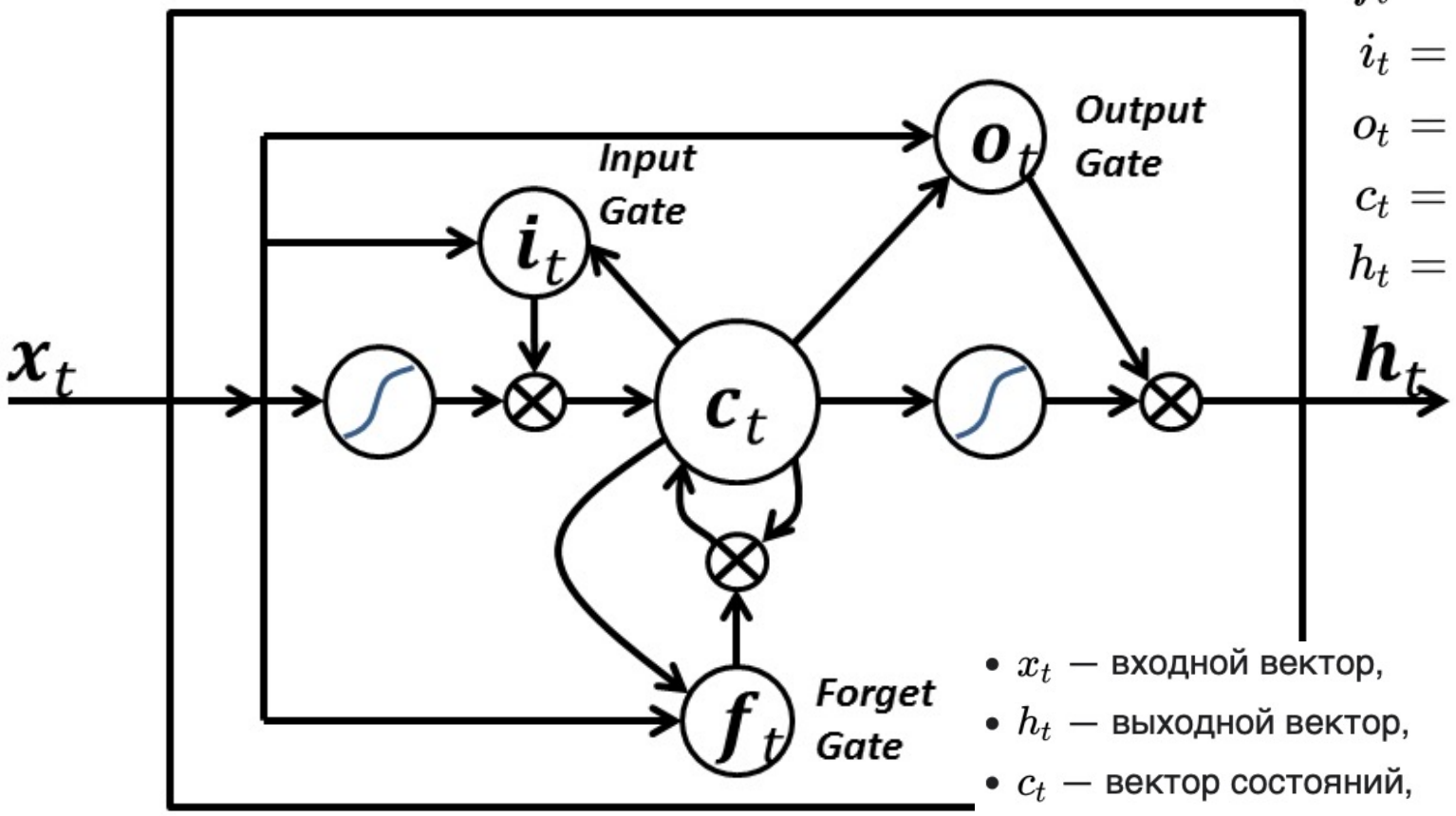
$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \circ \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}\, b_{11} & a_{12}\, b_{12} & a_{13}\, b_{13} \\ a_{21}\, b_{21} & a_{22}\, b_{22} & a_{23}\, b_{23} \\ a_{31}\, b_{31} & a_{32}\, b_{32} & a_{33}\, b_{33} \end{bmatrix}$$

Долгая краткосрочная память (LSTM)



Hochreiter et.al.,1997: Long Short-Term Memory

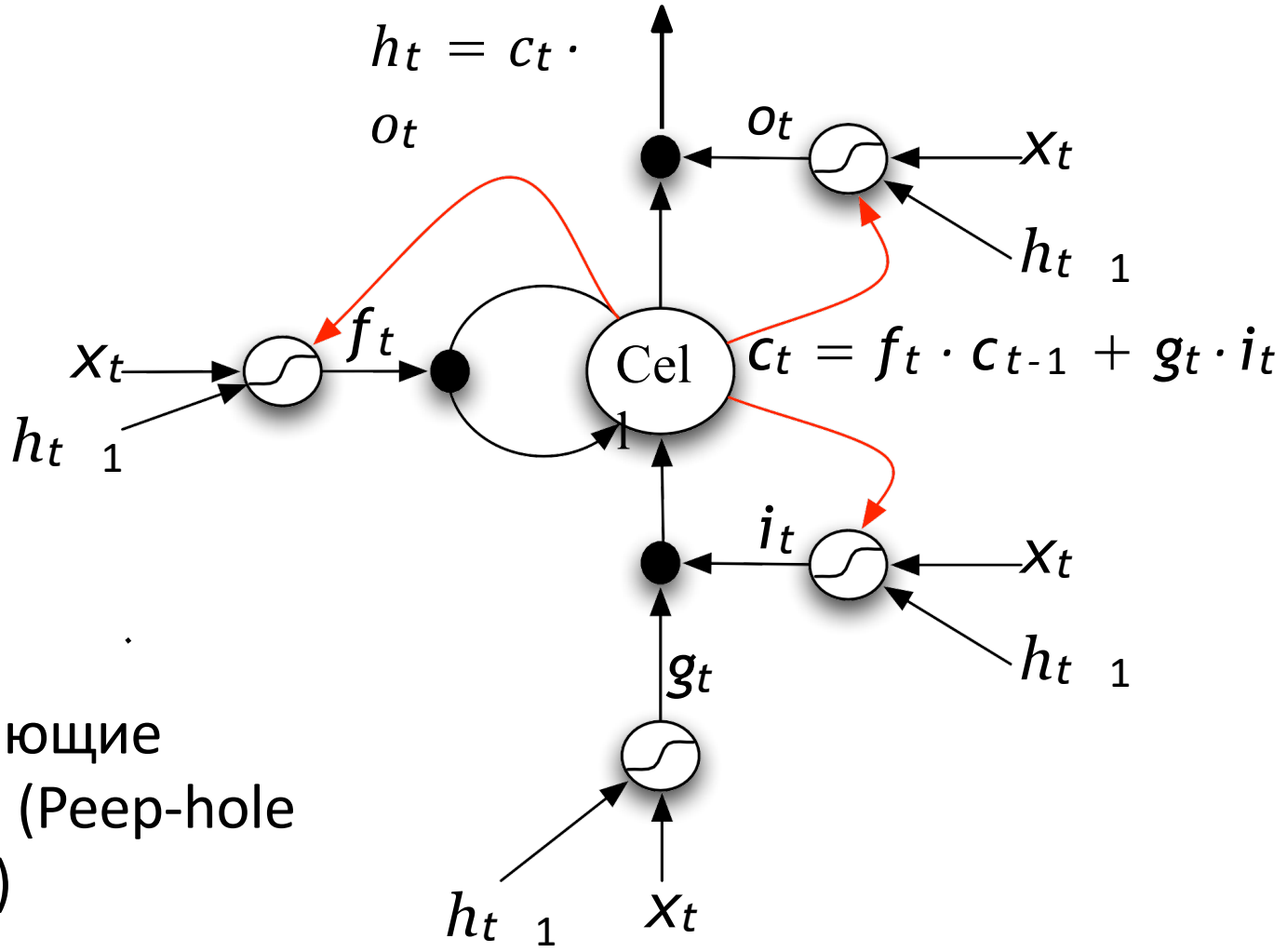
LSTM



$$f_t = \sigma_g(W_f x_t + U_f h_{t-1} + b_f)$$
$$i_t = \sigma_g(W_i x_t + U_i h_{t-1} + b_i)$$
$$o_t = \sigma_g(W_o x_t + U_o h_{t-1} + b_o)$$
$$c_t = f_t \circ c_{t-1} + i_t \circ \sigma_c(W_c x_t + U_c h_{t-1} + b_c)$$
$$h_t = o_t \circ \sigma_h(c_t)$$

- x_t — входной вектор,
- h_t — выходной вектор,
- c_t — вектор состояний,
- W, U и b — матрицы параметров и вектор,
- f_t, i_t и o_t — векторы вентилей,
  - f_t — вектор вентиля забывания, вес запоминания старой информации,
  - i_t — вектор входного вентиля, вес получения новой информации,
  - o_t — вектор выходного вентиля, кандидат на выход.

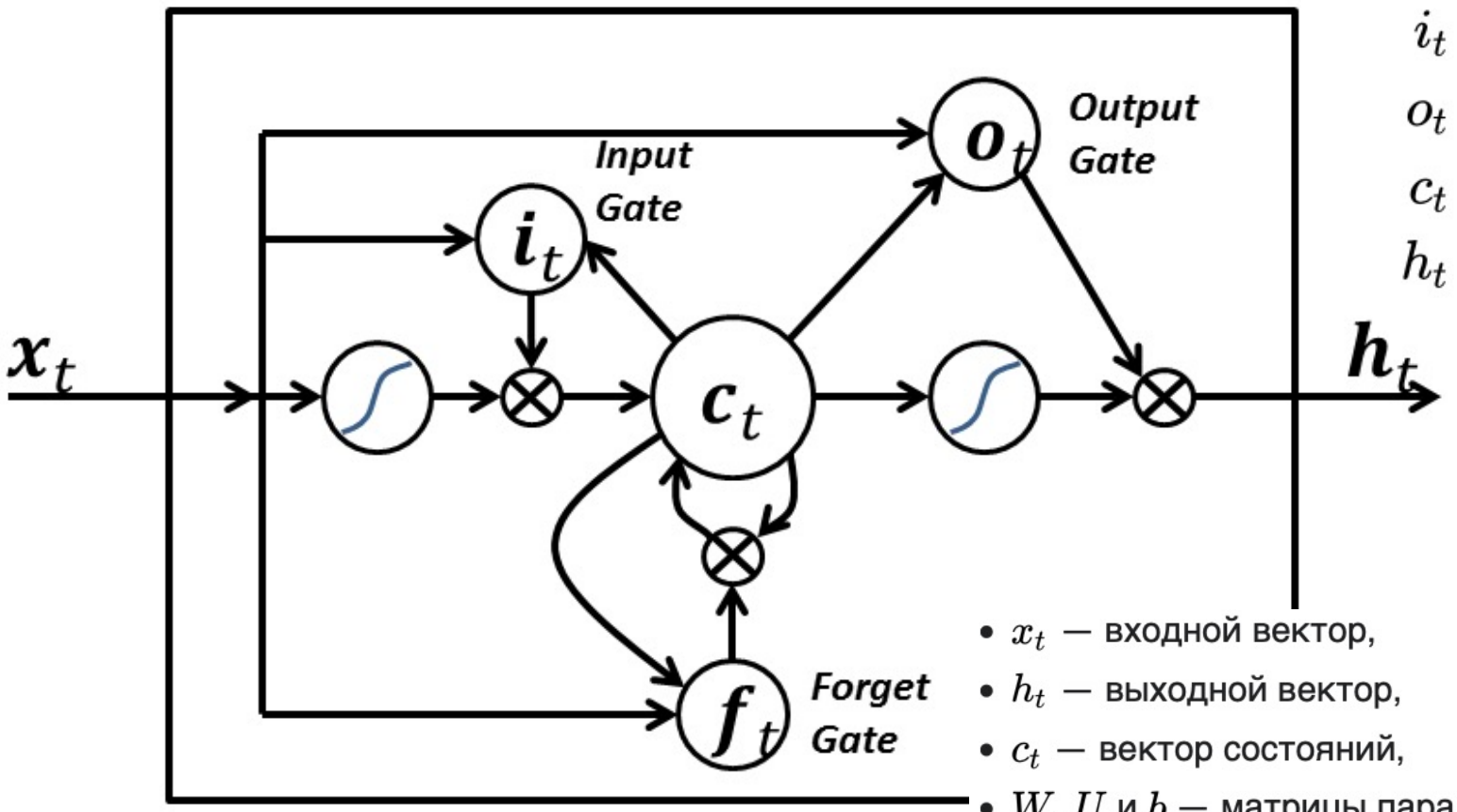
Долгая краткосрочная память (LSTM) с «глазками»



Подглядывающие соединения (Peep-hole connections)

Hochreiter et.al.,1997: Long Short-Term Memory

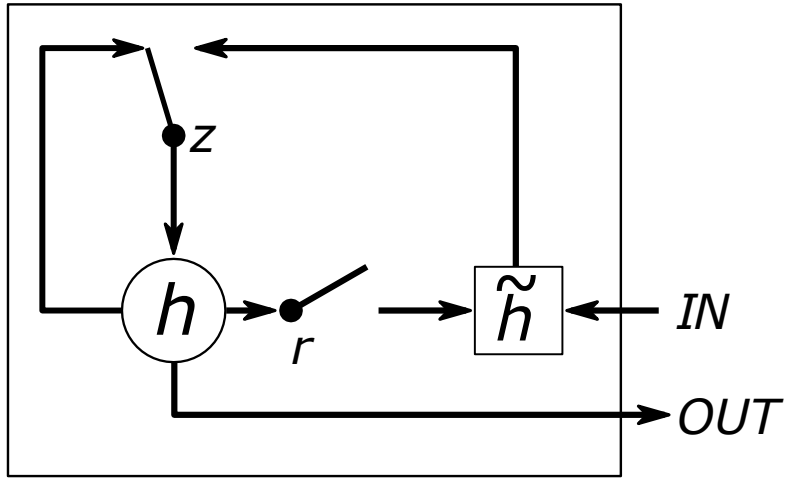
LSTM



$$f_t = \sigma_g(W_f x_t + U_f c_{t-1} + b_f)$$
$$i_t = \sigma_g(W_i x_t + U_i c_{t-1} + b_i)$$
$$o_t = \sigma_g(W_o x_t + U_o c_{t-1} + b_o)$$
$$c_t = f_t \circ c_{t-1} + i_t \circ \sigma_c(W_c x_t + b_c)$$
$$h_t = o_t \circ \sigma_h(c_t)$$

- x_t — входной вектор,
- h_t — выходной вектор,
- c_t — вектор состояний,
- W, U и b — матрицы параметров и вектор,
- f_t, i_t и o_t — векторы вентилей,
  - f_t — вектор вентиля забывания, вес запоминания старой информации,
  - i_t — вектор входного вентиля, вес получения новой информации,
  - o_t — вектор выходного вентиля, кандидат на выход.

Рекуррентные нейрон с вентилями (Gated recurrent unit, GRU)



– Вентиль обновления: $z_t^j = \sigma(W_z \mathbf{x}_t + U_z \mathbf{h}_{t-1})^j$.

– Вентиль перезаписи: $r_t^j = \sigma(W_r \mathbf{x}_t + U_r \mathbf{h}_{t-1})^j$.

– Кандидат на активацию: $\tilde{h}_t^j = \tanh(W \mathbf{x}_t + U(\mathbf{r}_t * \mathbf{h}_{t-1}))^j$,

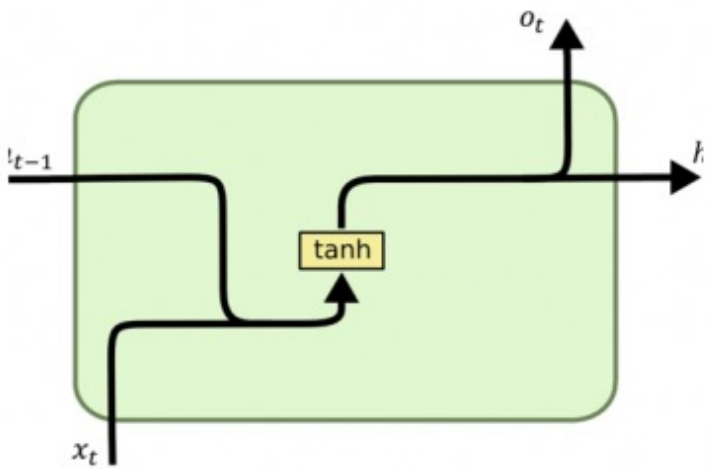
$$h_t^j = (1 - z_t^j) h_{t-1}^j + z_t^j \tilde{h}_t^j,$$

GRU

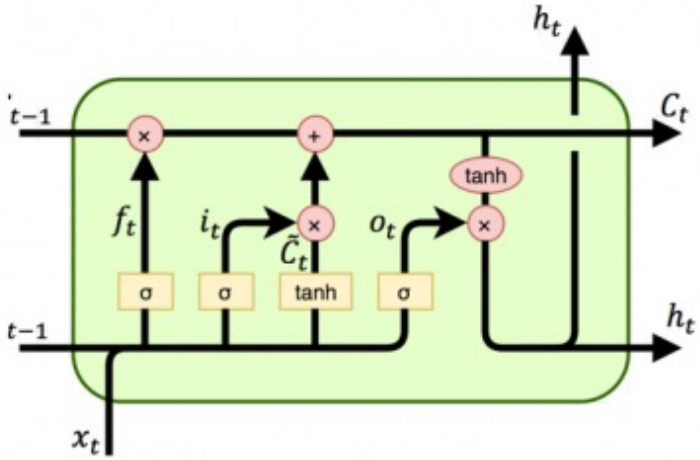
$$z_t = \sigma_g(W_z x_t + U_z h_{t-1} + b_z)$$
$$r_t = \sigma_g(W_r x_t + U_r h_{t-1} + b_r)$$
$$h_t = z_t \circ h_{t-1} + (1 - z_t) \circ \sigma_h(W_h x_t + U_h(r_t \circ h_{t-1}) + b_h)$$

- x_t: входной вектор
- h_t: выходной вектор
- z_t: вектор вентиля обновления
- r_t: вектор вентиля сброса
- W, U и b: матрицы параметров и вектор

RNN



LSTM



GRU