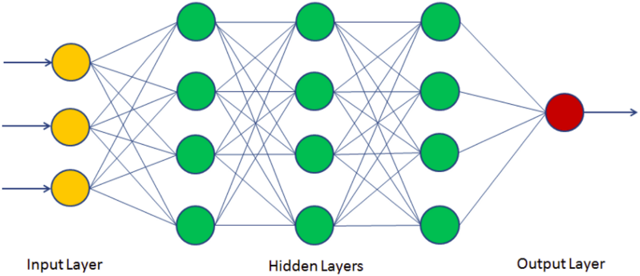
Многослойный перцептрон

Виктор Китов

v.v.kitov@yandex.ru



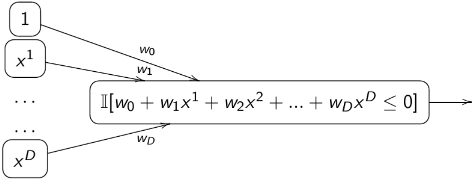
Содержание

История

- Нейронные сети появились как попытка моделировать работу человеческого мозга.

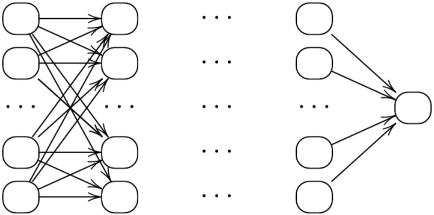

- Человеческий мозг состоит из взаимосвязанных нейронов.
  - порядка 86 миллиардов нейронов
  - нейроны связаны аксонами - вытянутыми отростками нервных клеток
  - взаимодействие нейронов осуществляется электро-химическими сигналами по аксонам

Простая модель нейрона



- Несколько входов посылают сигналы, которые домножаются на вес связи
- Нейрон принимает суммарный сигнал
- Нейрон активируется в полупространстве $w_0 + w_1 x^1 + w_2 x^2 + ... + w_D x^D \le 0$.
- w_0 отвечает за смещение

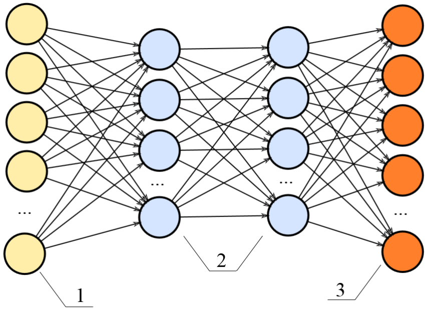
Архитектура многослойного персептрона



многослойный персептрон - ациклический направленный граф

- Несколько слоев, связи между соседними слоями - каждый с каждым.
- Каждый нейрон имеет свои собственные связи.

Слои



- Слои многослойного персептрона:
  - 1-входной слой (не учитывается в полном количестве слоев сети)
  - 2-скрытые слои
  - 3-выходной слой

Многослойный персептрон и ансамбли

- В стэкинге фиксируются базовые модели при настройке агрегирующей ф-ции.
- В бустинге фиксируются предыдущие базовые модели.
- В многослойном персептроне ранние и поздние нейроны настраиваются одновременно.
    - более сильное переобучение

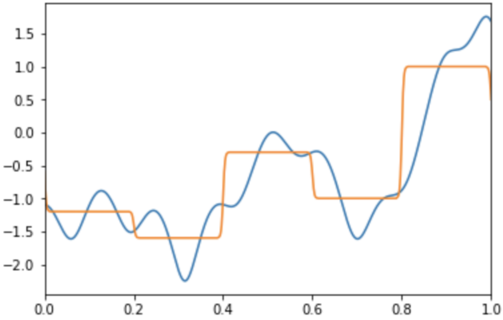
Содержание

Одномерная регрессия

- 1-мерная регрессия:

$$f(x) = \sum_i f(b_i)\mathbb{I}[x \in [a_i, b_i]] = \sum_i f(b_i)\left(\mathbb{I}[x \le b_i] - \mathbb{I}[x \le a_i]\right)$$

$$= \sum_i f(b_i)\mathbb{I}[x \le b_i] - \sum_i f(b_i)\mathbb{I}[x \le a_i] \quad \text{2-х слойный персептрон}$$



Многомерная регрессия

- AND/OR функции для $x_1, x_2 \in \{0, 1\}$ можно сделать 1 слойным персептроном:[1]:

$$\text{AND function}\mathbb{I}[x_1 + x_2 \geq 2] = \mathbb{I}[-x_1 - x_2 \leq -2]$$
$$\text{OR function}\mathbb{I}[x_1 + x_2 \geq 1] = \mathbb{I}[-x_1 - x_2 \leq -1]$$

- **D-мерная регрессия:**
  - один слой приближает линейную ф-цию
    - 2-х слойный персептрон моделирует индикаторную ф-цию на произвольном выпуклом многоугольнике (через AND)
    - 3-х слойный персептрон приближает произвольную непрерывную функцию (Липшицеву) (как взвешенную сумму индикаторов выпуклых многоугольников)
- Таким образом, 3-х слоев достаточно для приближения всех регулярных зависимостей.

[1] How to make XOR (exclusive OR) function?

Классификация

- **Классификация:**
  - один слой выделяет полупространства
  - 2-х слойный персептрон моделирует индикаторную ф-цию на произвольном выпуклом многоугольнике (через AND)
    - приближает произвольное выпуклое множество
  - 3-х слойный персептрон выделяет произвольный многоугольник (через OR) как объединение выпуклых многоугольников
- Таким образом, 3-х слоев достаточно для приближения любого множества.

Выбор числа слоёв

- Зачем использовать больше 3-х слоёв?
- 3-х слойные сети способны приближать любые регулярные зависимости, но может потребоваться слишком много нейронов - переобучение.
- Более глубокие слои могут переиспользовать ранние нейроны.
    - нужно меньше нейронов, меньше связей, меньше переобучение

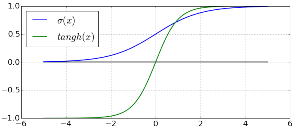
Содержание

Непрерывные активации

- $\mathbb{I}[w^T x - w_0 \le 0]$ - кусочно-постоянная, производная=0, не можем оптимизировать веса.
- Заменим $\mathbb{I}[w^T x - w_0 \le 0]$ непрерывной функцией активации $\phi(w^T x - w_0)$.

Основные функции активации

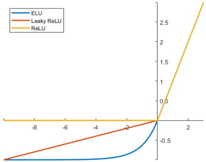
- сигмоида: $\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$
  - 1 нейрон с сигмоидой моделирует логистическую регрессию
- гиперболический тангенс: $\text{tangh}(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} = 2\sigma(2x) - 1$
  - преимущество: если $\mathbb{E}x = 0$, то $\mathbb{E}\,\text{tangh}(x) = 0$.



- Проблема: $\phi'(x) \approx 0$ вне интервала (-3,3).

Основные функции активации

- Rectified linear unit (ReLU): $\phi(x) = \max(0, x)$
  - аналог с гладкой производной - SoftPlus: $\phi(x) = \ln(1 + e^x)$
- Leaky ReLU: $\phi(x) = \begin{cases} x, & x \geq 0 \\ 0.01x, & x < 0 \end{cases}$
- Parametric ReLU (α оценивается): $\phi(x|\alpha) = \begin{cases} x, & x \geq 0 \\ \alpha x, & x < 0 \end{cases}$
- Exponential LU (α задано): $\phi(x) = \begin{cases} x, & x \geq 0 \\ \alpha(e^x - 1), & x < 0 \end{cases}$



Содержание

Выход и функция потерь: регрессия

- Регрессия: $\phi(I) = I$
- Скалярная регрессия $y \in \mathbb{R}$:

$$MSE(x, y) = (\widehat{y}(\mathbf{x}) - y)^2$$

- Векторная регрессия $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^K$:

$$MSE(x, y) = \|\widehat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) - \mathbf{y}\|_2^2$$

Выход и функция потерь: классификация, вероятности классов

- **Бинарная классификация**: $y \in \{0,1\}$

$$p(y=+1|x)=\frac{1}{1+e^{-I}}$$

$$\mathcal{L}(x,y)=-\ln p(y|x)=-\ln p(y=1|x)^{y}[1-p(y=1|x)]^{1-y}$$

- **Многоклассовая классификация**: $y \in 1,2,...C$

$$\{SoftMax(I_1,...I_C)\}_j=p(y=j|x)=\frac{e^{I_j}}{\sum_{k=1}^{C}e^{I_k}},\ j=1,2,...C$$

$$\mathcal{L}(x,y)=-\ln p(y|x)=-\ln\prod_{c=1}^{C}p(y=c|x)^{y_c},\qquad y_c=\mathbb{I}[y=c]$$

Выход и функция потерь: классификация, рейтинги классов

- **Бинарная классификация**: $y \in \{0, 1\}$

  $O(x) =$ относительная предпочтительность положительного класс

$$hinge(x, y) = [1 - yO(x)]_+$$

- **Многоклассовая классификация**: $y \in 1, 2, ... C$:

$$\{O_1(x), ... O_C(x)\} \text{ - рейтинги классов } 1, ... C$$

$$hinge_1(x, y) = \left[\max_{c \neq y} O_c + 1 - O_y\right]_+$$

$$hinge_2(x, y) = \sum_{c \neq y} [O_c + 1 - O_y]_+$$

Особые применения

Нейросети (как и др. модели) могут предсказывать не точки, а плотности распределений:

- предсказывать гистограмму из K столбцов.
- предсказывать параметры семейства, например μ, Σ для $y|x \sim \mathcal{N}(\mu(x), \Sigma(x))$

Автокодировщик позволяет воспроизводить ввод. Возможные применения

- извлечение информативных признаков, уменьшение размерности
- построить инициализацию для первых слоев глубокой сети.
- извлечение выбросов[2]

---

[2] как?

Содержание

Метод стохастического градиентного спуска (SGD)

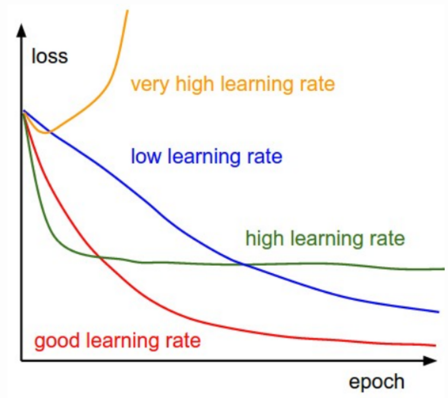
- Обозначим $\mathcal{L}(\widehat{y}, y)$ - функция потерь, $W = \#[\text{весов}]$, ε_t - шаг оптимизации на шаге t.
- Можем оптимизировать, используя стохастический градиентный спуск:

```
Инициализируем случано w, t = 0

повторять до сходимости:
    сэмплируем случайный объект (x_n, y_n)
    w := w − ε_t ∇_w L(w, x_n, y_n)
  t := t + 1
```

- Можно сэмплировать группу объектов ("минибатч")
- Сходимость: $t > threshold$, $\|L(w_{t+1}) - L(w_t)\| < threshold$, $\|w_{t+1} - w_t\| < threshold$
- Нормализация признаков позволяет ускорить сходимость.

Выбор шага оптимизации важен для сходимости



- На практике часто берут $\varepsilon = const$ и уменьшают при выходе на стабильные потери.
- Формально: сходимость при достаточно медленном $\varepsilon_t \to 0$.

SGD с инерцией (momentum)

```
Инициализируем случано w, t = 0

повторять до сходимости:
    сэмплируем случайный объект (x_n, y_n)
    Δw := αΔw + (1 − α) ∇_w L(w, x_n, y_n)
    w := w − ε_t Δw
    t := t + 1
```

- SGD с инерцией использует сглаженную по всем наблюдениям более точную оценку градиента
    - можем сделать ε_t выше и быстрее сойтись.

- Инерция Нестерова: "заглядывание вперед" при расчете градиента: $\nabla_w \mathcal{L}(w - \varepsilon_t \alpha \Delta w, x_n, y_n)$

Оценка градиента

- Вычисление $\nabla\mathcal{L}(w)$ через разностную аппроксимацию ($\varepsilon_i = [0, ...0, \varepsilon, 0, ...0]$)

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial w_i} = \frac{\mathcal{L}(w+\varepsilon_i) - \mathcal{L}(w)}{\varepsilon} + O(\varepsilon) \tag{1}$$

или более точная оценка

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial w_i} = \frac{\mathcal{L}(w+\varepsilon_i) - \mathcal{L}(w-\varepsilon_i)}{2\varepsilon} + O(\varepsilon^2) \tag{2}$$

имеет вычислительную сложность $O(K^2)$, K - #весов

  - нужно посчитать K производных
  - сложность вычисления каждой: $O(K)$

Алгоритм обратного распространения ошибки (backpropagation) требует только $O(K)$ для расчета всех производных.

Пример вычисления градиента

- Рассмотрим бинарную классификацию $y \in \{+1, -1\}$, сеть предсказывает $p(y = +1|x)$:

$$p(y = +1|x) = \frac{1}{1 + e^{-w^T x}}$$

- Качество - вероятность истинного класса:

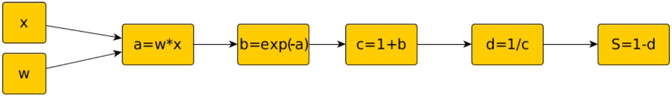
$$S = p(y|x) = \mathbb{I}[y = +1]p(y = +1|x) + \mathbb{I}[y = -1](1 - p(y = +1|x)$$

- Предположим $y = -1$, и мы обновляем w, чтобы $1 - p(y = +1|x)$ была выше:

$$w := w + \varepsilon \frac{\partial S}{\partial w} = w + \varepsilon \frac{\partial [1 - p(y = +1|x)]}{\partial w}$$

Алгоритм обратного распространения ошибки

$$\frac{\partial[1-p(y=+1|x)]}{\partial w}=\frac{\partial}{\partial w}\left[1-\frac{1}{1+e^{-w^T x}}\right]-?$$



Рассчитаем все промежуточные активации слева-направо за $O(K)$, а производные - справа-налево за $O(K)$:

$$\frac{\partial S}{\partial d}=-1,\ \frac{\partial S}{\partial c}=\frac{\partial S(d(c))}{\partial c}=\frac{\partial S}{\partial d}\frac{\partial d}{\partial c}=\frac{\partial S}{\partial d}\left(-\frac{1}{c^2}\right);\ \frac{\partial S}{\partial b}=$$
$$\frac{\partial S(c(b))}{\partial b}=\frac{\partial S}{\partial c}\frac{\partial c}{\partial b}=\frac{\partial S}{\partial b}\cdot 1;\ \frac{\partial S}{\partial a}=\frac{\partial S(b(a))}{\partial a}=\frac{\partial S}{\partial b}\frac{\partial b}{\partial a}=-\frac{\partial S}{\partial b}e^{-a}$$
$$\frac{\partial S}{\partial w}=\frac{\partial S(a(w))}{\partial w}=\frac{\partial S}{\partial a}\frac{\partial a}{\partial w}=\frac{\partial S}{\partial a}x$$

Особенности оптимизации нейросетей

- Зависимость $\widehat{y}(x)$ в общем случае невыпукла.
- $\mathcal{L}(\widehat{y}, y)$ - невыпукла => много локальных минимумов.
- На найденный минимум влияют:
  - начальное приближение
  - объекты минибатчей
  - метод обучения и динамика ε_t
- Можно настраивать разными способами, а потом
  - выбрать наилучшее решение по валидации
  - усреднить несколько решений

Заключение

- Нейросети - универсальный аппроксиматор: может моделировать сложные нелинейные зависимости.
- ReLU, LeakyReLU - рекомендуемые функции нелинейности.
- Алгоритм обратного распространения ошибки позволяет посчитать $\nabla\mathcal{L}_w(\widehat{y}, y)$ за линейное относительно #весов время.
- Функция потерь невыпукла, возможны локальные оптимумы.
    - можно искать решение разными способами, а потом выбрать лучшее