Тятя! Тятя! Нейросети заменили продавца!

Ппилиф Ульянкин

https://github.com/FUlyankin/neural_nets_prob

Листочек 5: алгоритм обратного распространения ошибки

> К толковому выбору приводит опыт,а к нему приводит выбор бестолковый.
>
> *JSON Стэтхэм*

Упражнение 1 (граф вычислений)

Как найти производную a по b в графе вычислений? Находим не посещённый путь из a в b, перемножаем все производные на рёбрах получившегося пути. Добавляем это произведение в сумму. Так делаем для всех путей. Маша хочет попробовать этот алгоритм на функции

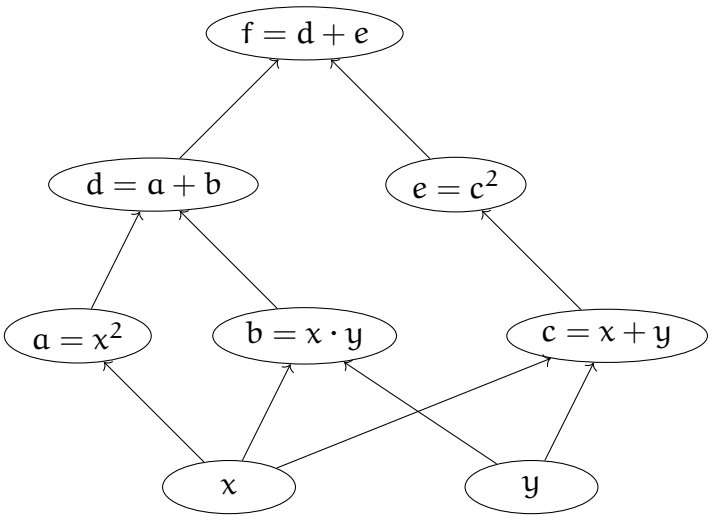
$$f(x, y) = x^2 + xy + (x + y)^2.$$

Помогите ей нарисовать граф вычислений и найти $\frac{\partial f}{\partial x}$ и $\frac{\partial f}{\partial y}$. В каждой вершине графа записывайте результат вычисления одной элементарной операции: сложений или умножения[1].

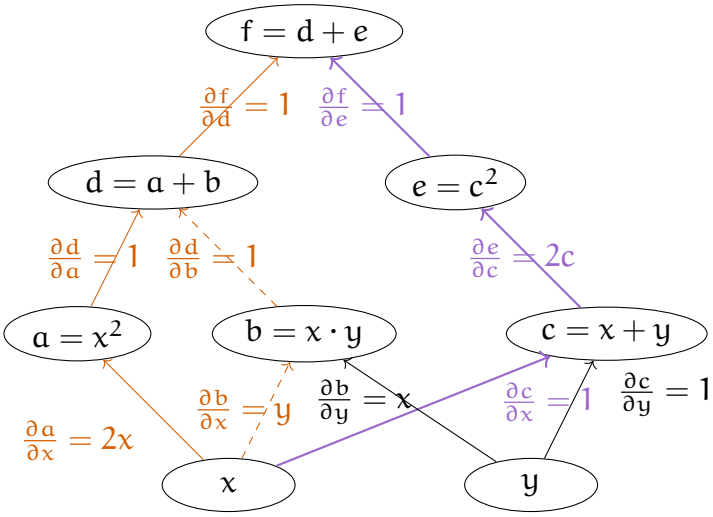
Решение:

Нарисуем граф вычислений.

[1] По мотивам книги Николенко "Глубокое обучение"(стр. 79)



Каждому ребру припишем производную выхода по входу. Например, ребру между x и a будет соответствовать $\frac{\partial a}{\partial x} = 2x$.



Теперь пройдём по всем траекториям из x в f и перемножим производные на рёбрах. После просуммируем получившиеся множители

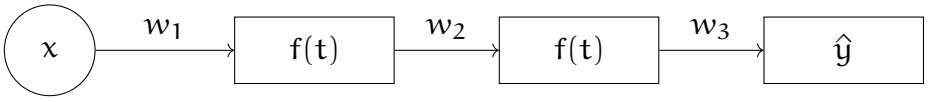
$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial d} \cdot \frac{\partial d}{\partial a} \cdot \frac{\partial a}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial d} \cdot \frac{\partial d}{\partial b} \cdot \frac{\partial b}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial e} \cdot \frac{\partial e}{\partial c} \cdot \frac{\partial c}{\partial x} = \\ = 1 \cdot 1 \cdot 2x + 1 \cdot 1 \cdot y + 1 \cdot 2c \cdot 1 = 2x + y + 2(x + y).$$

По аналогии найдём производную по траекториям из y в f:

$$\frac{\partial f}{\partial y} = 1 \cdot 1 \cdot x + 1 \cdot 2c \cdot 1 = x + 2(x + y).$$

Упражнение 2 (придумываем backpropagation)

У Маши есть нейросеть с картинки ниже, где w_k — веса для k слоя, $f(t)$ — какая-то функция активации. Маша хочет научиться делать для такой нейронной сетки градиентный спуск.



а. Запишите Машину нейросеть, как сложную функцию.

б. Предположим, что Маша решает задачу регрессии. Она прогоняет через нейросетку одно наблюдение. Она вычисляет знчение функции потерь $L(w_1, w_2, w_3) = \frac{1}{2} \cdot (y - \hat{y})^2$. Найдите производные функции L по всем весам w_k.

в. В производных постоянно повторяются одни и те же части. Постоянно искать их не очень оптимально. Выделите эти части в прямоугольнички цветными ручками.

г. Выпишите все производные в том виде, в котором их было бы удобно использовать для алгоритма обратного распространения ошибки, а затем, сформулируйте сам алгоритм. Нарисуйте под него удобную схемку.

Решение:

Чтобы записать нейросеть как сложную функцию, нужно просто последовательно применить все слои

$$\hat{y}_i = f(f(f(x_i \cdot w_1) \cdot w_2) \cdot w_3.$$

Запишем функцию потерь и аккуратно найдём все производные

$$L(w_1, w_2, w_3) = \frac{1}{2} \cdot (y - \hat{y})^2 = \frac{1}{2} \cdot (y - f(f(x \cdot w_1) \cdot w_2) \cdot w_3)^2.$$

Делаем это по правилу взятия производной сложной функции. Как в школе.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial w_3} &= \frac{\partial L}{\partial \hat{y}} \cdot \frac{\partial \hat{y}}{\partial w_3} = (y - \hat{y}) \cdot f(f(x \cdot w_1) \cdot w_2) \\
\frac{\partial L}{\partial w_2} &= \frac{\partial L}{\partial \hat{y}} \cdot \frac{\partial \hat{y}}{\partial w_2} = (y - \hat{y}) \cdot w_3 \cdot f'(f(x \cdot w_1) \cdot w_2) \cdot f(x \cdot w_1) \\
\frac{\partial L}{\partial w_1} &= \frac{\partial L}{\partial \hat{y}} \cdot \frac{\partial \hat{y}}{\partial w_1} = (y - \hat{y}) \cdot w_3 \cdot f'(f(x \cdot w_1) \cdot w_2) \cdot w_2 \cdot f'(x \cdot w_1) \cdot x
\end{aligned}$$

Выделим в прямоугольники части, которые каждый раз считаются заново, хотя могли бы переиспользоваться.

$$\frac{\partial L}{\partial w_3} = \frac{\partial L}{\partial \hat{y}} \cdot \frac{\partial \hat{y}}{\partial w_3} = \boxed{(y - \hat{y})} \cdot f(f(x \cdot w_1) \cdot w_2)$$
$$\frac{\partial L}{\partial w_2} = \frac{\partial L}{\partial \hat{y}} \cdot \frac{\partial \hat{y}}{\partial w_2} = \boxed{(y - \hat{y})} \cdot \boxed{w_3 \cdot f'(f(x \cdot w_1) \cdot w_2)} \cdot f(x \cdot w_1)$$
$$\frac{\partial L}{\partial w_1} = \frac{\partial L}{\partial \hat{y}} \cdot \frac{\partial \hat{y}}{\partial w_1} = \boxed{(y - \hat{y})} \cdot \boxed{w_3 \cdot f'(f(x \cdot w_1) \cdot w_2)} \cdot w_2 \cdot f'(x \cdot w_1) \cdot x$$

Если бы слоёв было бы больше, переиспользования возникали бы намного чаще. Градиентный спуск при таком подходе мы могли бы сделать точно также, как и в любых других моделях

$$w_3^t = w_3^{t-1} - \eta \cdot \frac{\partial L}{\partial w_3}(w_3^{t-1})$$
$$w_2^t = w_2^{t-1} - \eta \cdot \frac{\partial L}{\partial w_2}(w_2^{t-1})$$
$$w_1^t = w_1^{t-1} - \eta \cdot \frac{\partial L}{\partial W_1}(w_1^{t-1}).$$

Проблема в том, что такой подход из-за постоянных перевычислений будет работать долго. Алгоритм обратного распространения ошибки помогает более аккуратно считать производную и ускорить обучение нейросетей.

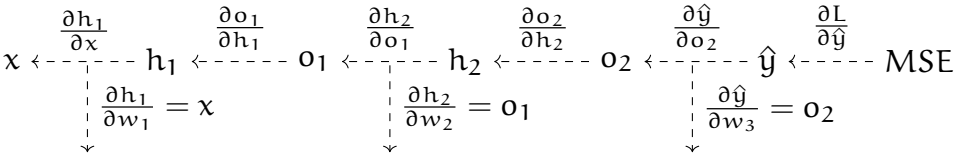
Выпишем алгоритм обратного распространения ошибки. Договоримся до следующих обозначений. Буквами h^k будем обозначать выход k—го слоя до применения функции активации. Буквами o^k будем обозначать всё то же самое после применения функции активации. Например, для первого слоя:

$$h_i^1 = w_1 \cdot x_i$$
$$o_i^1 = f(h_i^1).$$

Сначала мы делаем прямой проход по нейросети (forward pass):

$$x \xrightarrow{w_1} h_1 \xrightarrow{f} o_1 \xrightarrow{w_2} h_2 \xrightarrow{f} o_2 \xrightarrow{w_3} \hat{y} \longrightarrow L(y, \hat{y})$$

Наша нейросеть — граф вычислений. Давайте запишем для каждого ребра в рамках этого графа производную.



Мы везде работаем со скалярами. Все производные довольно просто найти по графу, на котором мы делаем прямой проход. Например,

$$\frac{\partial h_2}{\partial w_2} = \frac{\partial (o_2 \cdot w_2)}{\partial w_2} = o_2.$$

Если в качестве функции активации мы используем сигмоиду

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

тогда

$$\frac{\partial \sigma}{\partial z} = \left(\frac{e^z}{1 + e^z}\right)' = \frac{e^z}{1 + e^z} - \frac{e^z}{(1 + e^z)^2} \cdot e^z = \frac{e^z}{1 + e^z}\left(1 - \frac{e^z}{1 + e^z}\right) = \sigma(z)(1 - \sigma(z)).$$

Получается, что

$$\frac{\partial o_2}{\partial h_2} = \sigma'(h_2) = \sigma(h_2) \cdot (1 - \sigma(h_2)) = o_2 \cdot (1 - o_2).$$

Осталось только аккуратно записать алгоритм. В ходе прямого прохода мы запоминаем все промежуточные результаты. Они нам пригодятся для поиска производных при обратном проходе. Например, выше, в сигмоиде, при поиске производной, используется результат прямого прохода o_2.

Заведём для накопленного значения производной переменную d. На первом шаге нам надо найти $\frac{\partial L}{\partial w_3}$. Сделаем это в два хода

$$d = \frac{\partial L}{\partial \hat{y}}$$
$$\frac{\partial L}{\partial w_3} = d \cdot o_2.$$

Для поиска производной $\frac{\partial L}{\partial w_2}$ переиспользуем значение, которое накопилось в d. Нам надо найти

$$\frac{\partial L}{\partial w_2} = \frac{\partial L}{\hat{y}} \cdot \frac{\partial \hat{y}}{\partial o_2} \cdot \frac{\partial o_2}{\partial h_2} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial w_2} = d \cdot \boxed{\frac{\partial \hat{y}}{\partial o_2} \cdot \frac{\partial o_2}{\partial h_2}} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial w_2}.$$

Часть, выделенную в прямоугольник мы будем переиспользовать для поиска $\frac{\partial L}{\partial w_1}$. Хорошо бы дописать её в d для этого. Получается, вторую производную тоже надо найти в два хода

$$d = d \cdot \frac{\partial \hat{y}}{\partial o_2} \cdot \frac{\partial o_2}{\partial h_2}$$
$$\frac{\partial L}{\partial w_2} = d \cdot o_1.$$

Осталась заключительная производная $\frac{\partial L}{\partial w_1}$. Нам надо найти

$$\frac{\partial L}{\partial w_2} = \frac{\partial L}{\hat{y}} \cdot \frac{\partial \hat{y}}{\partial o_2} \cdot \frac{\partial o_2}{\partial h_2} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial o_1} \cdot \frac{\partial o_1}{\partial h_1} \cdot \frac{\partial h_1}{\partial w_1} = d \cdot \frac{\partial h_2}{\partial o_1} \cdot \frac{\partial o_1}{\partial h_1} \cdot \frac{\partial h_1}{\partial w_1}.$$

Снова делаем это в два шага

$$d = d \cdot \frac{\partial h_2}{\partial o_1} \cdot \frac{\partial o_1}{\partial h_1}$$
$$\frac{\partial L}{\partial w_1} = d \cdot x.$$

Если бы нейросетка была бы глубже, мы смогли бы переиспользовать d на следующих слоях. Каждую производную мы нашли ровно один раз. **Это и есть алгоритм обратного распространения ошибки.** В случае матриц происходит всё ровно то же самое, но дополнительно надо проследить за всеми размерностями и более аккуратно перемножить матрицы.

Упражнение 3 (сигмоида)

В **не**глубоких сетях в качестве функции активации можно использовать сигмоиду

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

Маша хочет использовать сигмоиду внутри нейросети. Предполагается, что после прямого шага, наши вычисления будут использованы в другой части нейросети. В конечном итоге, по выходу из нейросети мы вычислим какую-то функцию потерь L.

У сигмоиды нет параметров. Чтобы обучить нейросеть, Маше понадобится производная $\frac{\partial L}{\partial z}$. Выпишите её в матричном виде через производные $\frac{\partial L}{\partial \sigma}$ и $\frac{\partial \sigma}{\partial z}$.

Решение:

При решении предыдущей задачи мы выяснили, что $\sigma'(z) = \sigma(z) \cdot (1 - \sigma(z))$. Тогда по цепному правилу

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

Получается, при прямом проходе мы вычисляем сигмоиду по формуле из условия. При обратном проходе мы умножаем пришедшую к нам производную на производную сигмоиды. Если на вход приходит матрица, мы берём сигмоиду от каждого её элемента. Если на вход

приходит матрица $Z_{[n\times k]}$, на выходе мы получаем матрицу $\Sigma_{[n\times k]}$.

Когда мы берём сигмоиду от матрицы, мы применяем функцию к каждому её элементу. из-за этого, в производной все умножения мы делаем поэлементно, то есть матрица $\Sigma * (1-\Sigma)$ останется размера $[n \times k]$. Когда мы применяем цепное правило, под $\frac{\partial L}{\partial \Sigma}$ мы подразумеваем производную функции потерь L по каждому элементу матрицы Σ. Получается, что это матрица размера $[n\times k]$. Её мы поэлементно умножаем на $\Sigma*(1-\Sigma)$ и снова получаем матрицу размера $[n \times k]$. Все размерности оказываются соблюдены.

Упражнение 4 (линейный слой)

Маша знает, что главный слой в нейронных сетях — линейный. В матричном виде его можно записать как $Z = XW$.

Маша хочет использовать этот слой внутри нейросети. Предполагается, что после прямого шага наши вычисления будут использованы в другой части нейросети. В конечном итоге, по выходу из нейросети мы вычислим какую-то функцию потерь L.

Чтобы обучить нейросеть, Маше понадобятся производные $\frac{\partial L}{\partial X}$ и $\frac{\partial L}{\partial W}$. Аккуратно найдите их и запишите в матричном виде[2]. Предполагается, что

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \end{pmatrix} \qquad W = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \end{pmatrix}$$

$$Z = XW = \begin{pmatrix} z_{11} & z_{12} & z_{13} \\ z_{21} & z_{22} & z_{23} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{11}w_{11} + x_{12}w_{21} & x_{11}w_{12} + x_{12}w_{22} & x_{11}w_{13} + x_{12}w_{23} \\ x_{21}w_{11} + x_{22}w_{21} & x_{21}w_{12} + x_{22}w_{22} & x_{21}w_{13} + x_{22}w_{23} \end{pmatrix}$$

Решение:

При обратном распространении ошибки мы предполагаем, что производная $\frac{\partial L}{\partial Z}$ у нас уже есть. Так как Z — это матрица размера 2×3, эта производная будет выглядеть как

$$\frac{\partial L}{\partial Z} = \begin{pmatrix} \frac{\partial L}{\partial z_{11}} & \frac{\partial L}{\partial z_{12}} & \frac{\partial L}{\partial z_{13}} \\ \frac{\partial L}{\partial z_{21}} & \frac{\partial L}{\partial z_{22}} & \frac{\partial L}{\partial z_{23}} \end{pmatrix}.$$

По цепному правилу мы можем использовать $\frac{\partial L}{\partial Z}$ для поиска интересующих нас градиентов

$$\frac{\partial L}{\partial X} = \frac{\partial L}{\partial Z} \cdot \frac{\partial Z}{\partial X} \qquad \frac{\partial L}{\partial W} = \frac{\partial L}{\partial Z} \cdot \frac{\partial Z}{\partial W}.$$

Нужно, чтобы у матриц совпали размерности. Производные $\frac{\partial Z}{\partial X}$ и $\frac{\partial Z}{\partial W}$ — это матрицы Якоби нашего линейного слоя. Пусть W это параметры, а X аргумент функции. Функция $f(X) = XW$ бьёт из пространства матриц $X_{[2\times 2]}$ в пространство матриц $Z_{[2\times 3]}$. Нам надо взять производ-

[2] https://web.eecs.umich.edu/~justincj/teaching/eecs442/notes/linear-backprop.html

ную от каждого элемента матрицы Z по каждому элементу из матрицы X. Всего получится 24 производных. По правилам из матана мы должны будем записать их в виде четырёхмерной матрицы[3]. Это жутко неудобно.

К счастью, многие производные будут нулевыми. Поэтому мы можем схитрить, сначала найти $\frac{\partial L}{\partial X}$,

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial L}{\partial X} = \begin{pmatrix} \frac{\partial L}{\partial x_{11}} & \frac{\partial L}{\partial x12} \\ \frac{\partial L}{\partial x_{21}} & \frac{\partial L}{\partial x_{22}} \end{pmatrix},$$

а затем написать удобные формулы в общем виде. Найдём $\frac{\partial L}{\partial x_{11}}$ с помощью цепного правила

$$\frac{\partial L}{\partial x_{11}} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{d} \frac{\partial L}{\partial z_{ij}} \cdot \frac{\partial z_{ij}}{\partial x_{11}} = \langle \frac{\partial L}{\partial Z}, \frac{\partial Z}{\partial x_{11}} \rangle.$$

Работать с суммами неудобно. Мы помним, что $\frac{\partial L}{\partial Z}$ и $\frac{\partial Z}{\partial x_{11}}$ — матрицы из производных. Поэтому сумму можно записать в виде скалярного произведения матриц. Мы должны в нём умножить элементы матриц друг на друга, а затем сложить. Давайте найдём производную матрицы Z по x_{11}

$$Z = XW = \begin{pmatrix} x_{11}w_{11} + x_{12}w_{21} & x_{11}w_{12} + x_{12}w_{22} & x_{11}w_{13} + x_{12}w_{23} \\ x_{21}w_{11} + x_{22}w_{21} & x_{21}w_{12} + x_{22}w_{22} & x_{21}w_{13} + x_{22}w_{23} \end{pmatrix}.$$

Переменная x_{11} фигурирует только в первой строке

$$\frac{\partial Z}{\partial x_{11}} = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Выходит, что

$$\frac{\partial L}{\partial x_{11}} = \left\langle \begin{pmatrix} \frac{\partial L}{\partial z_{11}} & \frac{\partial L}{\partial z_{12}} & \frac{\partial L}{\partial z_{13}} \\ \frac{\partial L}{\partial z_{21}} & \frac{\partial L}{\partial z_{22}} & \frac{\partial L}{\partial z_{23}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{\partial L}{\partial z_{11}} \cdot w_{11} + \frac{\partial L}{\partial z_{12}} \cdot w_{12} + \frac{\partial L}{\partial z_{13}} \cdot w_{13}.$$

По аналогии мы можем найти оставшиеся три производные. Например,

$$\frac{\partial L}{\partial x_{21}} = \left\langle \begin{pmatrix} \frac{\partial L}{\partial z_{11}} & \frac{\partial L}{\partial z_{12}} & \frac{\partial L}{\partial z_{13}} \\ \frac{\partial L}{\partial z_{21}} & \frac{\partial L}{\partial z_{22}} & \frac{\partial L}{\partial z_{23}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ w_{11} & w_{12} & w_{13} \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{\partial L}{\partial z_{21}} \cdot w_{11} + \frac{\partial L}{\partial z_{22}} \cdot w_{12} + \frac{\partial L}{\partial z_{23}} \cdot w_{13}.$$

[3]Про это можно более подробно почитать в разделе про матричные производные.

Попробуем выписать $\frac{\partial L}{\partial X}$ через $\frac{\partial L}{\partial Z}$ и W

$$\frac{\partial L}{\partial X} = \begin{pmatrix} \frac{\partial L}{\partial x_{11}} & \frac{\partial L}{\partial x12} \\ \frac{\partial L}{\partial x_{21}} & \frac{\partial L}{\partial x_{22}} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial L}{\partial z_{11}} \cdot w_{11} + \frac{\partial L}{\partial z_{12}} \cdot w_{12} + \frac{\partial L}{\partial z_{13}} \cdot w_{13} & \frac{\partial L}{\partial z_{11}} \cdot w_{21} + \frac{\partial L}{\partial z_{12}} \cdot w_{22} + \frac{\partial L}{\partial z_{13}} \cdot w_{23} \\ \frac{\partial L}{\partial z_{21}} \cdot w_{11} + \frac{\partial L}{\partial z_{22}} \cdot w_{12} + \frac{\partial L}{\partial z_{23}} \cdot w_{13} & \frac{\partial L}{\partial z_{21}} \cdot w_{21} + \frac{\partial L}{\partial z_{22}} \cdot w_{22} + \frac{\partial L}{\partial z_{23}} \cdot w_{23} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial L}{\partial z_{11}} & \frac{\partial L}{\partial z_{12}} & \frac{\partial L}{\partial z_{13}} \\ \frac{\partial L}{\partial z_{21}} & \frac{\partial L}{\partial z_{22}} & \frac{\partial L}{\partial z_{23}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} w_{11} & w_{21} \\ w_{12} & w_{22} \\ w_{13} & w_{23} \end{pmatrix} = \frac{\partial L}{\partial Z} W^T$$

Нам повезло! Наша хитрость увенчалась успехом, и нам удалось записать нашу формулу в виде произведения двух матриц без вычисления четырёхмерных якобианов.

Провернём ровно такой же фокус с поиском производной $\frac{\partial L}{\partial W}$.

$$W = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial L}{\partial W} = \begin{pmatrix} \frac{\partial L}{\partial w_{11}} & \frac{\partial L}{\partial w_{12}} & \frac{\partial L}{\partial w_{13}} \\ \frac{\partial L}{\partial w_{21}} & \frac{\partial L}{\partial w_{22}} & \frac{\partial L}{\partial w_{23}} \end{pmatrix}.$$

По аналогии с предыдущей производной

$$\frac{\partial L}{\partial w_{kl}} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{d} \frac{\partial L}{\partial z_{ij}} \cdot \frac{\partial z_{ij}}{\partial w_{kl}} = \langle \frac{\partial L}{\partial Z}, \frac{\partial Z}{\partial w_{kl}} \rangle.$$

По матрице

$$Z = XW = \begin{pmatrix} x_{11}w_{11} + x_{12}w_{21} & x_{11}w_{12} + x_{12}w_{22} & x_{11}w_{13} + x_{12}w_{23} \\ x_{21}w_{11} + x_{22}w_{21} & x_{21}w_{12} + x_{22}w_{22} & x_{21}w_{13} + x_{22}w_{23} \end{pmatrix}$$

мы можем найти все требуемые производные

$$\frac{\partial Z}{\partial w_{11}} = \begin{pmatrix} x_{11} & 0 & 0 \\ x_{21} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \frac{\partial Z}{\partial w_{12}} = \begin{pmatrix} 0 & x_{11} & 0 \\ 0 & x_{21} & 0 \end{pmatrix} \quad \frac{\partial Z}{\partial w_{13}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & x_{11} \\ 0 & 0 & x_{21} \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial Z}{\partial w_{21}} = \begin{pmatrix} x_{12} & 0 & 0 \\ x_{22} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \frac{\partial Z}{\partial w_{22}} = \begin{pmatrix} 0 & x_{12} & 0 \\ 0 & x_{22} & 0 \end{pmatrix} \quad \frac{\partial Z}{\partial w_{23}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & x_{12} \\ 0 & 0 & x_{22} \end{pmatrix}.$$

Чтобы найти $\frac{\partial L}{\partial w_{kl}}$ нам надо посчитать между матрицами $\frac{\partial L}{\partial Z}$ и $\frac{\partial Z}{\partial w_{kl}}$ скалярное произведе-

ние. Например,

$$\frac{\partial L}{\partial w_{21}} = \left\langle \begin{pmatrix} \frac{\partial L}{\partial z_{11}} & \frac{\partial L}{\partial z_{12}} & \frac{\partial L}{\partial z_{13}} \\ \frac{\partial L}{\partial z_{21}} & \frac{\partial L}{\partial z_{22}} & \frac{\partial L}{\partial z_{23}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x_{12} & 0 & 0 \\ x_{22} & 0 & 0 \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{\partial L}{\partial z_{11}} \cdot x_{12} + \frac{\partial L}{\partial z_{11}} \cdot x_{22}.$$

Получается, что всю матрицу $\frac{\partial L}{\partial W}$ целиком можно найти как

$$\frac{\partial L}{\partial W} = \frac{\partial L}{\partial W} = \begin{pmatrix} \frac{\partial L}{\partial w_{11}} & \frac{\partial L}{\partial w_{12}} & \frac{\partial L}{\partial w_{13}} \\ \frac{\partial L}{\partial w_{21}} & \frac{\partial L}{\partial w_{22}} & \frac{\partial L}{\partial w_{23}} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial L}{\partial z_{11}} \cdot x_{11} + \frac{\partial L}{\partial z_{21}} \cdot x_{21} & \frac{\partial L}{\partial z_{12}} \cdot x_{11} + \frac{\partial L}{\partial z_{22}} \cdot x_{21} & \frac{\partial L}{\partial z_{13}} \cdot x_{11} + \frac{\partial L}{\partial z_{23}} \cdot x_{21} \\ \frac{\partial L}{\partial z_{11}} \cdot x_{12} + \frac{\partial L}{\partial z_{21}} \cdot x_{22} & \frac{\partial L}{\partial z_{12}} \cdot x_{12} + \frac{\partial L}{\partial z_{22}} \cdot x_{22} & \frac{\partial L}{\partial z_{13}} \cdot x_{12} + \frac{\partial L}{\partial z_{23}} \cdot x_{22} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} x_{11} & x_{21} \\ x_{12} & x_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial L}{\partial z_{11}} & \frac{\partial L}{\partial z_{12}} & \frac{\partial L}{\partial z_{13}} \\ \frac{\partial L}{\partial z_{21}} & \frac{\partial L}{\partial z_{22}} & \frac{\partial L}{\partial z_{23}} \end{pmatrix} = X^T \frac{\partial L}{\partial Z}.$$

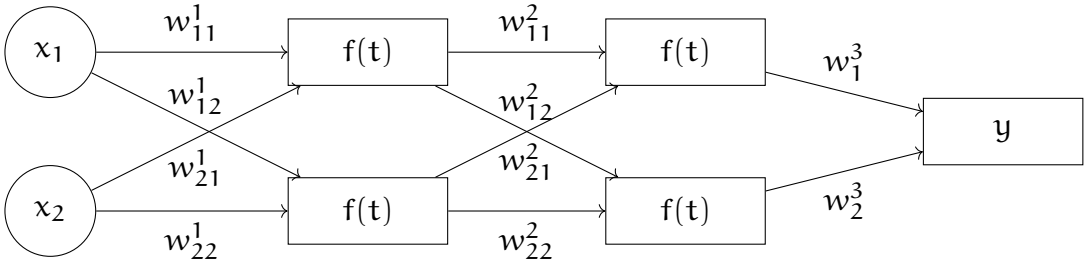
Таким образом, для линейного слоя, мы всегда можем посчитать производные как

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

Дальше под $\frac{\partial Z}{\partial W}$ будем всегда подразумевать X^T, а под $\frac{\partial Z}{\partial X}$ будем иметь в виду W^T.

Упражнение 5 (Backpropagation в матричном виде)

У Маши есть нейросеть с картинки ниже, где w_{ij}^k — веса для k слоя, $f(t)$ — какая-то функция активации. Маша хочет научиться делать для такой нейронной сетки градиентный спуск.



а. Запишите Машину нейросеть, как сложную функцию. Сначала в виде нескольких уравнений, а затем в матричном виде.

б. Выпишите все производные в том виде, в котором их было бы удобно использовать для алгоритма обратного распространения ошибки, а затем, сформулируйте сам алгоритм. Нарисуйте под него удобную схемку.

Решение:

Договоримся до следующих обозначений. Буквами h_{ij}^k будем обозначать выход k—го слоя для

j—го нейрона для i—го наблюдения до применения функции активации. Буквами o_{ij}^k будем обозначать всё то же самое после применения функции активации. Например, для первого слоя:

$$h_{i1}^1 = w_{11}^1 \cdot x_{i1} + w_{21}^1 \cdot x_{i2}$$
$$o_{i1}^1 = f(h_{i1}^1).$$

Делай раз. Для начала перепишем сетку в виде нескольких уравнений. Для первого слоя мы находим

$$o_{i1}^1 = f(w_{11}^1 \cdot x_{i1} + w_{21}^1 \cdot x_{i2})$$
$$o_{i2}^1 = f(w_{12}^1 \cdot x_{i1} + w_{22}^1 \cdot x_{i2}).$$

Для второго работают аналогичные уравнения, но значения x заменяются на соответствующие o. На выходе мы предсказываем y, как взвешенную суммы выходов со второго слоя

$$\hat{y}_i = w_1^3 \cdot o_{i1}^2 + w_2^3 \cdot o_{i2}^2.$$

Подставим вместо o_{1i}^2 и o_{2i}^2 результат вычисления предыдущих слоёв

$$\hat{y}_i = w_1^3 \cdot f(w_{12}^1 \cdot o_{i1}^1 + w_{22}^1 \cdot o_{i2}^1) + w_2^3 \cdot f(w_{12}^1 \cdot o_{i1}^1 + w_{22}^1 \cdot o_{i2}^1).$$

Подставим результат вычисления первого слоя

$$\hat{y}_i = w_1^3 \cdot f(w_{12}^1 \cdot f(w_{11}^1 \cdot x_{i1} + w_{21}^1 \cdot x_{i2}) + w_{22}^1 \cdot f(w_{12}^1 \cdot x_{i1} + w_{22}^1 \cdot x_{i2})) + \\ + w_2^3 \cdot f(w_{12}^1 \cdot f(w_{11}^1 \cdot x_{i1} + w_{21}^1 \cdot x_{i2}) + w_{22}^1 \cdot f(w_{12}^1 \cdot x_{i1} + w_{22}^1 \cdot x_{i2})).$$

Мы записали нашу нейросеть в виде сложной функции. Выглядит ужасно.

Давайте перепишем всё то же самое более компактно, в матричном виде. Начнём с первого слоя. На самом деле, чтобы найти строчку (h_{i1}^1, h_{i2}^1) мы делаем матричное умножение. Строчку (x_{i1}, x_{i2}) мы умножаем на матрицу весов W_1

$$\begin{pmatrix} h_{i1}^1 & h_{i2}^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{i1} & x_{i2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} w_{11}^1 & w_{12}^1 \\ w_{21}^1 & w_{22}^1 \end{pmatrix}.$$

Чтобы получить h_1 мы умножаем строчку из переменных на первый столбец, чтобы получить h_2, на второй столбец. Получается, что в терминах матриц каждый нейрон нашей сети — это столбец. Если мы добавим ещё один столбец из весов в матрицу, это будет эквивалентно добавлению в сетку третьего нейрона, так как на выходе мы будем получать ещё и h_3. Если у нас появится дополнительный вход x_3, в матрицу нам нужно будет добавить ещё одну строчку из весов.

Запишем первый слой в матричном виде. На вход идёт матрица из наблюдений $X_{[n \times 2]}$,

она умножается на матрицу весов $W_{[2\times 2]}$, получается матрица $H_{[n\times 2]}$. Ко всем элементам этой матрицы мы применяем функцию активации f. Делаем это поэлементно

$$O_1 = f(H_1) = f(X \cdot W_1).$$

Остальные слои записываются по аналогии. Получается, что наша нейросеть в матричном виде выглядит как

$$\hat{y} = f(f(X \cdot W_1) \cdot W_2) \cdot W_3.$$

Здесь $\hat{y}$ — вектор столбец размера $[n \times 1]$, а матрицы весов обладают размерностями $[2 \times 2]$, $[2 \times 2]$ и $[2 \times 1]$ соответственно.

Делай два. Выпишем алгоритм обратного распространения ошибки в виде красивой схемки. Сначала мы делаем прямой проход по нейросети (forward pass):

$$\underset{[n\times 2]}{X} \xrightarrow{\underset{[2\times 2]}{W_1}} \underset{[n\times 2]}{H_1} \xrightarrow{f} \underset{[n\times 2]}{O_1} \xrightarrow{\underset{[2\times 2]}{W_2}} \underset{[n\times 2]}{H_2} \xrightarrow{f} \underset{[n\times 2]}{O_2} \xrightarrow{\underset{[2\times 1]}{W_3}} \underset{[n\times 1]}{\hat{y}} \longrightarrow L(y, \hat{y})$$

Под всеми матрицами подписаны размерности. Взятие функции активации — поэлементная операция, она никак не меняет размер матрицы. Это будет важно при взятии производных. В ходе прямого прохода мы запоминаем все промежуточные результаты. Они нам пригодятся для поиска производных при обратном проходе. Например, $\frac{\partial H_2}{\partial W_2} = O_1^T$. Получается, в какой-то момент нам надо будет переиспользовать результаты вычислений, полученных при прямом проходе.

Наша нейросеть — граф вычислений. Давайте запишем для каждого ребра в рамках этого графа производную.

$$X \xleftarrow[\frac{\partial H_1}{\partial W_1}]{\frac{\partial H_1}{\partial X}} H_1 \xleftarrow{\frac{\partial O_1}{\partial H_1}} O_1 \xleftarrow[\frac{\partial H_2}{\partial W_2}]{\frac{\partial H_2}{\partial O_1}} H_2 \xleftarrow{\frac{\partial O_2}{\partial H_2}} O_2 \xleftarrow[\frac{\partial \hat{y}}{\partial W_3}]{\frac{\partial \hat{y}}{\partial O_2}} \hat{y} \xleftarrow{\frac{\partial L}{\partial \hat{y}}} MSE$$

Осталось только аккуратно записать обратный ход алгоритма. Заведём для накопленного значения производной переменную d. На первом шаге нам надо найти $\frac{\partial L}{\partial W_3}$. Не будем забывать, как выглядят производные для линейного слоя, полученные в предыдущей задаче. Сделаем это в два хода

$$d = \frac{\partial L}{\partial \hat{y}}$$
$$\frac{\partial L}{\partial W_3} = \frac{\partial L}{\partial \hat{y}} \cdot \frac{\partial \hat{y}}{\partial W_3} = O_2^T \cdot d.$$

Матрица O_2^T будет размера $[2 \times n]$, вектор d будет размера $[n \times 1]$, размер производной будет $[2 \times 1]$, что совпадает с размером матрицы W_3.

Для поиска производной $\frac{\partial L}{\partial W_2}$ переиспользуем значение, которое накопилось в d

$$d = \frac{\partial L}{\partial H_2} = d \cdot \frac{\partial \hat{y}}{\partial O_2} \cdot \frac{\partial O_2}{\partial H_2} = d \cdot W_3^T * f'(H_2)$$
$$\frac{\partial L}{\partial W_2} = O_1^T \cdot d.$$

Размер d был $[n \times 1]$, после персчёта стал $[n \times 1] \cdot [1 \times 2] * [n \times 2] = [n \times 2]$. Поэлементное умножение на производную функции активации не повлияло на размер матрицы. Размер производной $\frac{\partial L}{\partial W_2}$ оказывается $[2 \times 2]$, что совпадает с размером матрицы W_2.

Осталась заключительная производная $\frac{\partial L}{\partial W_1}$. Нам надо найти

$$d = \frac{\partial L}{\partial H_1} = \frac{\partial L}{\partial H_2} \cdot \frac{\partial H_2}{\partial O_1} \cdot \frac{\partial O_1}{\partial H_1} = d \cdot W_2^T * f'(H_1)$$
$$\frac{\partial L}{\partial W_1} = X^T \cdot d.$$

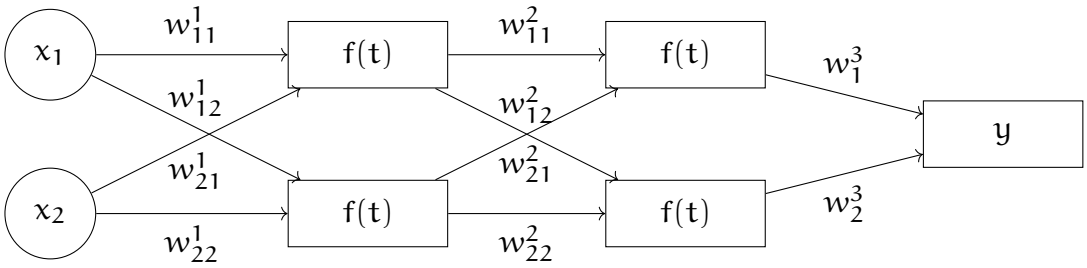
Если бы сетка была глубже, мы продолжили бы переиспользовать d. Каждую производную мы посчитали один раз. Такой алгоритм обучения линеен по числу параметров.

Упражнение 6 (Backpropagation своими руками)

У Маши есть нейросеть с картинки ниже. Она использует функцию потерь

$$L(W_1, W_2, W_3) = \frac{1}{2} \cdot (\hat{y} - y)^2.$$

В качестве функции активации Маша выбрала сигмоиду $\sigma(t) = \frac{e^t}{1+e^t}$.



Выпишите для Машиной нейросетки алгоритм обратного распространения ошибки в общем виде. Пусть Маша инициализировала веса нейронной сети нулями. У неё есть два наблюдения

№	x_1	x_2	y
1	1	1	1
2	5	2	0

Сделайте руками два шага алгоритма обратного распространения ошибки. Пусть скорость обучения $\eta = 1$. Стохастический градиентный спуск решил, что сначала для шага будет использоваться второе наблюдение, а затем первое. Объясните, почему инициализировать веса нулями — плохая идея. Почему делать инициализацию весов любой другой константой — плохая идея?

Решение:

Для начала запишем алгоритм в общем виде. Для этого нам надо взять схему из предыдущей задачи и записать там все производные. Для сигмоиды $\sigma'(t) = \sigma(t) \cdot (1 - \sigma(t))$. Прямой проход по нейронной сети (forward pass):

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

Обратный проход по нейронной сети (backward pass):

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

$$X^T \qquad O_1^T \qquad O_2^T$$

По аналогии с предыдущей задачей выпишем формулы для обратного распространения ошибки:

$$d = (\hat{y} - y) \qquad d = d \cdot W_3^T * O_2 * (1 - O_2) \qquad d = d \cdot W_2^T * O_1 * (1 - O_1)$$

$$\frac{\partial MSE}{\partial W_3} = O_2^T \cdot d \qquad \frac{\partial MSE}{\partial W_2} = O_1^T \cdot d \qquad \frac{\partial MSE}{\partial W_1} = X^T \cdot d$$

Когда мы аккуратно подставим все числа, можно будет сделать шаг SGD

$$W_3^t = W_3^{t-1} - \eta \cdot \frac{\partial MSE}{\partial W_3} \qquad W_2^t = W_2^{t-1} - \eta \cdot \frac{\partial MSE}{\partial W_2} \qquad W_1^t = W_1^{t-1} - \eta \cdot \frac{\partial MSE}{\partial W_1}$$

Сделаем шаг SGD для второго наблюдения. Делаем прямое распространение для второго наблюдения, напомним, что матрицы весов инициализированы нулями:

$$(5, 2) \xrightarrow{W_1} (0, 0) \xrightarrow{\sigma} (0.5, 0.5) \xrightarrow{W_2} (0, 0) \xrightarrow{\sigma} (0.5, 0.5) \xrightarrow{W_3} 0 \longrightarrow 0.5 \cdot (0 - 1)^2$$

Делаем обратный проход.

Шаг 1:

$$d = (\hat{y} - y) = -1$$
$$\frac{\partial MSE}{\partial W_3} = O_2^T \cdot d = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix} \cdot (-1) = \begin{pmatrix} -0.5 \\ -0.5 \end{pmatrix}$$

Шаг 2:

$$d = d \cdot W_3^T * O_2 * (1 - O_2) = -1 \cdot (0,0) * (0.5, 0.5) * (0.5, 0.5) = (0,0)$$
$$\frac{\partial MSE}{\partial W_2} = O_1^T \cdot d = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix} \cdot (0,0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Шаг 3:

$$d = d \cdot W_2^T * O_1 * (1 - O_1) = (0,0) \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} * (0.5, 0.5) * (0.5, 0.5) = (0,0)$$
$$\frac{\partial MSE}{\partial W_1} = X^T \cdot d = \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \end{pmatrix} \cdot (0,0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Делаем шаг градиентного спуска

$$W_1^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - 1 \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
$$W_2^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - 1 \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
$$W_3^1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} - 1 \cdot \begin{pmatrix} -0.5 \\ -0.5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix}$$

Сделаем шаг SGD для первого наблюдения. Делаем прямое распространение для второго наблюдения, напомним, что матрицы весов инициализированы нулями:

$$(1,1) \xrightarrow{W_1} (0,0) \xrightarrow{\sigma} (0.5, 0.5) \xrightarrow{W_2} (0,0) \xrightarrow{\sigma} (0.5, 0.5) \xrightarrow{W_3} 0.5 \longrightarrow 0.5 \cdot (0.5 - 0)^2$$

Делаем обратный проход.

Шаг 1:

$$d = (\hat{y} - y) = 0.5$$
$$\frac{\partial MSE}{\partial W_3} = O_2^T \cdot d = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix} \cdot (0.5) = \begin{pmatrix} 0.25 \\ 0.25 \end{pmatrix}$$

Шаг 2:

$$d = d \cdot W_3^T * O_2 * (1 - O_2) = 0.5 \cdot (0.5, 0.5) * (0.5, 0.5) * (0.5, 0.5) = (1/16, 1/16)$$

$$\frac{\partial MSE}{\partial W_2} = O_1^T \cdot d = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix} \cdot (1/16, 1/16) = \begin{pmatrix} 1/32 & 1/32 \\ 1/32 & 1/32 \end{pmatrix}$$

Шаг 3:

$$d = d \cdot W_2^T * O_1 * (1 - O_1) = (1/16, 1/16) \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} * (0.5, 0.5) * (0.5, 0.5) = (0, 0)$$

$$\frac{\partial MSE}{\partial W_1} = X^T \cdot d = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot (0, 0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

На этой задаче видно, как сигмоида способствует затуханию градиента. Её производная по абсолютной величине всегда принимает значения меньше 1. Из-з этого значение d от слоя к слою становится всё меньше и меньше. Чем ближе к началу нашей сети мы находимся, тем на меньшую величину шагают веса. Если сетка оказывается очень глубокой, такой эффект ломает её обучение. Его обычно называют **параличом нейронной сети**. Именно из-за этого сигмоиду обычно не используют в глубоких архитектурах.

Делаем шаг градиентного спуска

$$W_3^2 = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix} - 1 \cdot \begin{pmatrix} 0.25 \\ 0.25 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.25 \\ 0.25 \end{pmatrix}$$

$$W_2^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - 1 \cdot \begin{pmatrix} 1/32 & 1/32 \\ 1/32 & 1/32 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/32 & -1/32 \\ -1/32 & -1/32 \end{pmatrix}$$

$$W_1^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - 1 \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Из-за того, что мы инициализировали веса нулями, слои поначалу учатся по-очереди. Пока мы не сдвинем веса более поздних слоёв, веса более ранних слоёв не сдвинутся. Это замедляет обучение. Обратите внимание, что все веса меняются на одну и ту же величину в одном и том же направлении. При инициализации любой другой константой этот эффект сохраниться. Нам хочется, чтобы после обучения нейроны внутри сетки были максимально разнообразными. Для этого веса лучше инициализировать случайно. В будущем мы обсудим грамотные способы инициализации, которые не портят обучение.

Упражнение 7 (Незаметный backpropagation)

Маша собрала нейросеть:

$$y = \max\left(0; X \cdot \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0.5 & 0 \end{pmatrix}\right) \cdot \begin{pmatrix} 0.5 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Теперь Маша внимательно смотрит на неё.

а) Первый слой нашей нейросетки — линейный. По какой формуле делается forward pass? Сделайте его для матрицы

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

б) Найдите для первого слоя производную выхода по входу. При обратном движении по нейросетке, в первый слой пришёл накопленный градиент

$$d = \begin{pmatrix} -0.5 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Каким будет новое накопленное значение градиента, которое выплюнет из себя линейный слой? По какой формуле делается backward pass?

в) Второй слой нейросетки — функция активации, ReLU. По какой формуле делается forward pass? Сделайте его для матрицы

$$H_1 = \begin{pmatrix} 2 & -0.5 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

г) Найдите для второго слоя производную выхода по входу. При обратном движении по нейросетке во второй слой пришёл накопленный градиент

$$d = \begin{pmatrix} -0.5 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Каким будет новое накопленное значение градиента, которое выплюнет из себя ReLU? По какой формуле делается backward pass?

д) Третий слой нейросетки — линейный. По какой формуле делается forward pass? Сделайте его для матрицы

$$O_1 = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

е) Найдите для третьего слоя производную выхода по входу. При обратном движении по нейросетке, в третий слой пришёл накопленный градиент $d = (-1, 0)^T$. Каким будет новое накопленное значение градиента, которое выплюнет из себя линейный слой?

ж) Мы решаем задачу Регрессии. В качестве функции ошибки мы используем

$$MSE = \frac{1}{2n} \sum (\hat{y}_i - y_i)^2.$$

Пусть для рассматриваемых наблюдений реальные значения $y_1 = 2, y_2 = 1$. Найдите значение MSE.

з) Чему равна производная MSE по прогнозу? Каким будет накопленное значение градиента, которое MSE выплюнет из себя в предыдущий слой нейросетки?

и) Пусть скорость обучения $\gamma = 1$. Сделайте для весов нейросети шаг градиентного спуска.

к) Посидела Маша, посидела, и поняла, что неправильно она всё делает. В реальности перед ней не задача регрессии, а задача классификации. Маша применила к выходу из нейросетки сигмоиду. Как будет для неё выглядеть forward pass?

л) В качестве функции потерь Маша использует logloss . Как для этой функции потерь выглядит forward pass? Сделайте его.

м) Найдите для logloss производную прогнозов по входу в сигмоиду. Как будет выглядеть backward pass, если $y_1 = 0, y_2 = 1$? Как поменяется оставшаяся часть алгоритма обратного распространения ошибки?

Решение:

Весь путь по нейросети от начала к концу, то есть forward pass будет выглядеть следующим образом:

$$H_1 = X \cdot W_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0.5 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & -0.5 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$O_1 = ReLU(H_1) = \begin{pmatrix} \max(0,2) & \max(0,-0.5) \\ \max(0,0) & \max(0,1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{y} = O_1 \cdot W_2 = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0.5 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$MSE = \frac{1}{4} \cdot ((1-2)^2 + (1-1)^2) = 0.25$$

Все необходимые для обратного прохода производные выглядят как

$$\frac{\partial MSE}{\partial \hat{y}} = \begin{pmatrix} \hat{y}_1 - y_1 \\ \hat{y}_2 - y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial O_1} = W_2^T = (0.5, 1) \qquad \frac{\partial \hat{y}}{\partial W_2} = O_1^T = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial O_1}{\partial H_1} = [H_{ij} > 0] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial H_1}{\partial X} = W_1^T = \begin{pmatrix} 1 & 0.5 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \frac{\partial H_1}{\partial W_1} = X^T = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$$

Когда мы считаем производную MSE, мы ищем её по каждому прогнозу. В случае производной для ReLU запись $[H_{ij} > 0]$ означает, что на месте ij стоит 1, если элемент больше нуля

и ноль иначе. Делаем шаг обратного распространения ошибки

$$d = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial MSE}{\partial W_2} = O_1^T \cdot d = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$d = d \cdot W_2^T * [H_{ij} > 0] = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot (0.5, 1) * \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.5 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.5 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial MSE}{\partial W_1} = X^T \cdot d = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -0.5 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.5 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Делаем шаг градиентного спуска

$$W_1 = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0.5 & 0 \end{pmatrix} - \gamma \cdot \begin{pmatrix} -0.5 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$W_2 = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 1 \end{pmatrix} - \gamma \cdot \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Меняем MSE на logloss и добавляем сигмоиду. Производная для сигмоиды выглядит как

$$\text{logloss} = y_i \cdot \ln \hat{p}_i + (1 - y_i) \cdot (1 - \hat{p}_i)$$

$$\frac{\partial \text{logloss}}{\partial \hat{p}_i} = \frac{y_i}{\hat{p}_i} - \frac{1 - y_i}{1 - \hat{p}_i}.$$

Так как в бинарной классификации y_i принимает значения $\{0, 1\}$, производная равна либо первому либо второму слагаемому. Получаем вычисления

$$O_2 = \sigma(\hat{y}) = \begin{pmatrix} 0.73 \\ 0.73 \end{pmatrix} \qquad \frac{\partial O_2}{\partial \hat{y}} = O_2 \cdot (1 - O_2) \approx \begin{pmatrix} 0.2 \\ 0.2 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial \text{logloss}}{\partial \hat{p}} \approx \begin{pmatrix} 3.7 \\ 1.4 \end{pmatrix} \qquad \frac{\partial \text{logloss}}{\partial \hat{y}} \approx \begin{pmatrix} 3.7 \\ 1.4 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 0.2 \\ 0.2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.74 \\ 0.28 \end{pmatrix}$$

Дальше алгоритм делается ровно также, только в качестве стартового d используется $\text{logloss}'_{\hat{y}}$, а не $MSE'_{\hat{y}}$.

Упражнение 8 (Нестеров и backprop)

К Маше приехал её папа и загрузил её интересным вопросом. В алгоритме обратного распространения ошибки мы можем делать шаг как минимум двумя способами:

а. Зафиксировали все w_{t-1}, нашли все градиенты, сделали сразу по всем весам шаг градиентного спуска.

б. Нашли градиенты для последнего слоя и сделали шаг для его весов, получили w_t^k. Для поиска градиентов предпоследнего слоя используем веса w_t^k, а не w_{t-1}^k. Все остальные слои обновляем по аналогии.

Как думаете, какой из способов будет приводить к более быстрой сходимости и почему[4]?

Решение:

С одной стороны идея чем-то похожа на градиентный спуск с поправкой Нестерова. Возможно, сходимость ускорится. С другой стороны, градиенты оказываются смещёнными. Если сеть глубокая, в её начале смещение может быть очень большим. Из-за этого сходимость может сломаться.

[4]Я придумал эту задачу и не смог найти статью, где делали бы что-то похожее. Если вы видели такую, пришлите мне её плиз.