ENSTA: apprentissage automatique

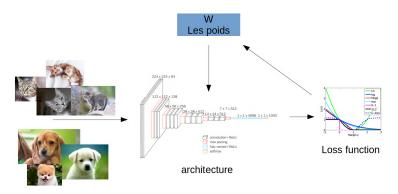
Introduction aux réseau de neurones

mots clés : réseau de neurones, théorème d'universalité, double descente, backpropagation

Adrien CHAN-HON-TONG ONERA

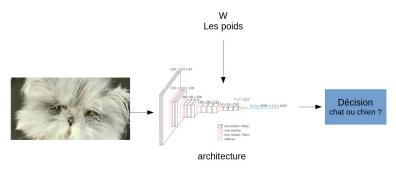
Rappel: apprentissage vs test

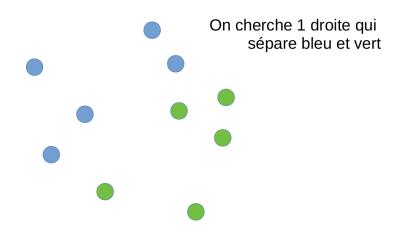
Apprentissage

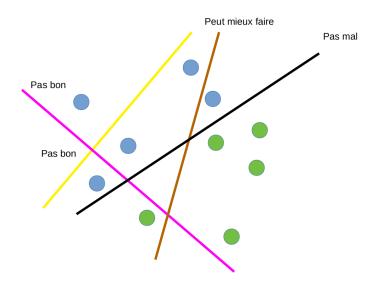


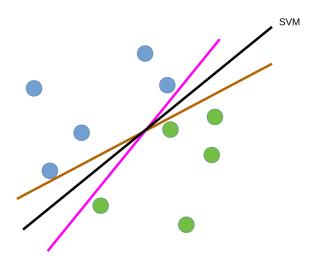
Rappel: apprentissage vs test

Test et/ou production et/ou inférence



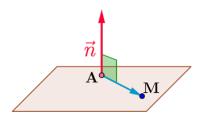






Rappel de math

On peut le paramétrer par un vecteur normal $w \in \mathbb{R}^D$ et un bias $b \in \mathbb{R}$. L'équation du plan est $w^Tx + b = 0$. Le plan sépare alors l'espace en $2 : \{x \mid w^Tx + b > 0\}$ et $\{x \mid w^Tx + b < 0\}$.



ici $w = \overrightarrow{n}$, M est dans le plan car $\overrightarrow{n} \cdot \overrightarrow{AM} = 0$, si $\overrightarrow{n} \cdot \overrightarrow{AM} > 0$ on est au dessus et sinon en dessous.

Linear feasibility

On a des points $x_1, ..., x_N \in \mathbb{R}^D$ avec une couleur (bleu ou pas bleu) $(y_1, ..., y_N) \in \{-1, 1\}^N$.

Et on cherche un plan w, b tel que $y_n = 1 \rightarrow w^T x_n + b > 0$ et $y_n = -1 \rightarrow w^T x_n + b < 0$, ce qu'on peut résumer en

$$\forall n \in \{1, ..., N\}, \ y_n(w^Tx_n + b) > 0$$

Le SVM

On a des points $x_1, ..., x_N \in \mathbb{R}^D$ avec une couleur (bleu ou pas bleu) $(y_1, ..., y_N) \in \{-1, 1\}^N$.

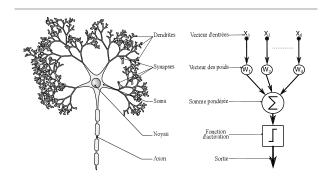
Et le plan w, b qui sépare les points en étant le plus distant possible

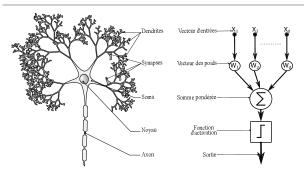
$$\min_{w,b} w^T w$$

$$sc: \forall n \in \{1, ..., N\}, \ y_n(w^Tx_n + b) \ge 1$$

Plan

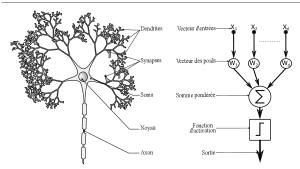
- ► Rappel : SVM
- Séparation hyperplane et modèle du neurone
- Neurone et réseau
- Théorème d'universalité
- ► Rappel : Compromis simplicité/complexité
- Méthodes par ensemble, double descente
- Descente de gradient Stochastique





Le neurone sépare l'ensemble des situations où il ne s'active pas et l'ensemble des situations où il s'active.

Biologiquement, l'excitation du neurones n'est **PAS** une simple somme pondérés de ses signaux entrants.



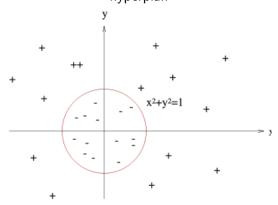
Le neurone sépare l'ensemble des situations où il ne s'active pas et l'ensemble des situations où il s'active.

Biologiquement, l'excitation du neurones n'est **PAS** une simple somme pondérés de ses signaux entrants.

Mais c'est un modèle simplifié : neurone = hyperplan

Si un neurone est un hyperplan, quel différence avec les SVM?

⇒ Parfois on ne peut PAS séparer les données avec un seul hyperplan



Le neurone

$$neurone_{\alpha,\beta}: egin{array}{ccc} \mathbb{R}^\phi & o & \mathbb{R} \\ u & o & lpha.u + eta \end{array}$$

 $\alpha \in \mathbb{R}^{\phi}$ et $\beta \in \mathbb{R}$ sont les **poids** du neurones.

Attention, ici, un neurone n'est pas nécessairement connecté à la donnée à traiter.

La couche de neurone

Une couche de ψ de neurones est une séquence de ψ neurones prenant la même entrée, et, dont les ψ sorties sont regroupées en 1 vecteur :

$$\mathbb{R}^{\phi}
ightarrow \mathbb{R}^{\psi}$$
 couche $_{A,b}$: $u
ightarrow \left(egin{array}{c} ext{neurone}_{A_1,b_1}(u) \ ext{...} \ ext{neurone}_{A_{\psi},b_{\psi}}(u) \end{array}
ight)$

 $A \in \mathbb{R}^{\psi \times \phi}$ et $b \in \mathbb{R}^{\psi}$ sont les **poids** de l'ensemble des ψ neurones.

La couche de neurone est aussi linéaire : $couche_{A,b}(u) = Au + b$ mais avec des tailles arbitraires en entrée et sorti.

Le réseau de neurone

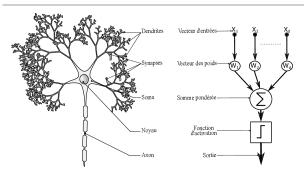
Si on empile 2 couches de neurones c'est exactement comme s'il y en avait qu'une :

$$A'(Au + b) + b' = (A'A)u + (A'b + b')$$

Oui mais si on met une non linéarité entre les 2 c'est différents.

$$A'$$
activation $(Au + b) + b' \neq activation((A'A)u + (A'b + b'))$

Le modèle du neurone



1 neurone c'est comme 1 frontière hyperplane Mais 2 neurones connecté c'est différent à cause de la fonction d'activation!

Le réseau de neurone

On empile des couches de neurones AVEC activation :

$$A'$$
activation $(Au + b) + b'$

Sur pytorch: il y en a un certain nombre relu, elu, leaky-relu, sigmoide, arctan, hard sigmoid, hard arctan, prelu, relu6, rrelu, celu, selu, gelu, hard shirk, soft shirk, log sigmoid, soft sign, tanh, tanhshirk

globalement avant on utilisait une sigmoide car le gradient existe partout. De 2012 à aujourd'hui, c'est plutôt relu $relu(u) = [u]_+ = max(u,0)$ car ça laisse passer le gradient tout en étant simple.

Par extention, le relu d'un vecteur c'est le vecteur des relu!

Le réseau de neurone

Un réseau de neurones entièrement connectées **MLP** (multi layer perceptron en anglais) de profondeur Q est un empilement de Q couche de neurones - séparé par des activations - la dernière est classiquement un seul neurone :

$$reseau_w: egin{array}{cccc} \mathbb{R}^D & \to & \mathbb{R} \ x & o & C_{w_Q}(relu(C_{w_{Q-1}}(...relu(C_{w_1}(x))...))) \end{array}$$

c'est à dire

$$reseau_w(x) = w_Q \times relu(w_{Q-1} \times relu(...(relu(w_1 \times x))))$$

 $w_1, ..., w_Q, Q$ matrices dont la seule chose imposée étant que w_1 ait D colonnes, et w_Q 1 ligne (et que les tailles soit cohérentes entre elles)

Bilan

SVM vs DL

Dans le cas du SVM, on a $f(x, w) = w^T x + w_{biais}$ qui donne un signe

$$f(x, w) > 0$$
 ou $f(x, w) < 0$

pour dire de quel coté on est.

Dans un réseau de neurone c'est PAREIL sauf que

$$f(x,w) = w_Q \times \mathit{relu}(w_{Q-1} \times \mathit{relu}(...(\mathit{relu}(w_1 \times x))))$$

Plan

- ► Rappel : SVM
- Séparation hyperplane et modèle du neurone
- Neurone et réseau
- Théorème d'universalité
- ► Rappel : Compromis simplicité/complexité
- Méthodes par ensemble, double descente
- Descente de gradient Stochastique

Valeur absolue pour
$$x \in \mathbb{R}$$

$$|x| = relu(x) + relu(-x) = \mathbf{1} \cdot relu\left(\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} x\right)$$

norme 1 pour
$$x \in \mathbb{R}^2$$

 $||x||_1 = |(1,0) \cdot x| + |(0,1) \cdot x| = relu((1,0) \cdot x) + relu((-1,0) \cdot x) + relu((0,1) \cdot x) + relu((0,-1) \cdot x) = 1 \cdot relu\left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} x\right)$

$$\begin{aligned} & \text{norme 1 pour } x \in \mathbb{R}^D \\ & ||x||_1 = \mathbf{1} \cdot \textit{relu} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 1 \\ -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & -1 \end{pmatrix} x \right) = \\ & \mathbf{1} \cdot \textit{relu} \left(\begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} \end{pmatrix} x \right) \end{aligned}$$

Avec biais

$$\forall x, q \in \mathbb{R}^D$$

$$||x-q||_1 = \mathbf{1} \cdot relu\left(\left(\begin{array}{c} \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} \end{array}\right) x + \left(\begin{array}{c} -q \\ q \end{array}\right)\right)$$

On peut coder la distance en norme 1 (à un point constant q) avec une simple couche de 2D neurones et 1 neurone pour sommer!

Le pseudo-dirac

$$\begin{split} g_q(x) &= \mathbf{1} \cdot \textit{relu}(1 - ||x - q||_1) \text{ verifie} \\ g_q &: \left\{ \begin{array}{c} g_q(q) = 1 \\ \forall x \ / \ ||x - q||_1 > 1, \ g_q(x) = 0 \end{array} \right. \end{split}$$

 $\forall x_1,...,x_N \in \mathbb{Z}^D$ tous distincts et $\forall (y_1,...,y_N) \in \{-1,1\}^N$, il suffit de $2 \times N \times D + N + 1$ neurones pour apprendre par coeur la base de données avec

$$f(x, w) = \sum_{n} y_{n} \times relu(1 - ||x - x_{n}||_{1})$$

$$= (y_{1} \dots y_{N}) \times \left(relu(-1 \times relu \begin{pmatrix} 1 \\ \dots \\ -1 \\ \dots \\ -1 \end{pmatrix} x + \begin{pmatrix} -x_{1} \\ \dots \\ -x_{N} \\ x_{1} \\ \dots \\ x_{N} \end{pmatrix} \right) + 1$$

Apprentissage

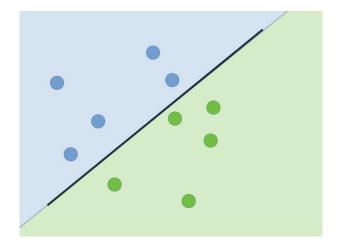
- On a des points colorés qu'on veut séparer
- Avec 1 neurone
 - Ça revient à cherche un hyperplan séparateur
 - $ightharpoonup f_w(x) = w^T x + w_{biais}$
 - Mais il peut ne pas exister de séparation
- Avec un réseau de neurones
 - $f_w(x) = w_Q \times relu(w_{Q-1} \times relu(...(relu(w_1 \times x))))$
 - Avec O(ND) neurones et 3 couches, on peut tout apprendre!

MAIS

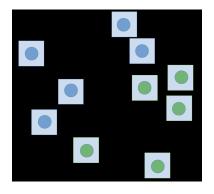
- On a des points colorés qu'on veut séparer
- Avec 1 neurone
 - Ça revient à cherche un hyperplan séparateur
 - $ightharpoonup f_w(x) = w^T x + w_{biais}$
 - Mais il peut ne pas exister de séparation
- Avec un réseau de neurones
 - $f_w(x) = w_Q \times relu(w_{Q-1} \times relu(...(relu(w_1 \times x))))$
 - Avec O(ND) neurones et 3 couches, on peut tout apprendre!

Attention : tout apprendre ce n'est pas nécessairement bien !

SVM



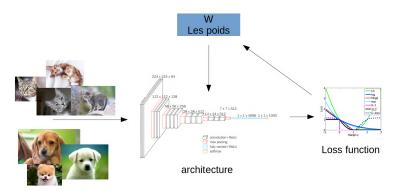
Théorème d'universalité



On ne prend aucune décision en dehors de la base d'apprentissage. Le classifier est **inutile** : il n'a fait qu'encoder la base d'apprentissage, et, ne donne aucune information sur des points hors de cette base.

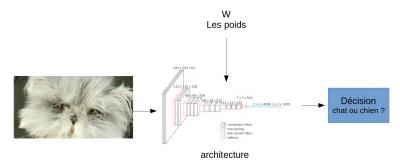
2 phases

Apprentissage



2 phases

Test et/ou production et/ou inférence



Ce qui compte c'est la performance sur les données de test!

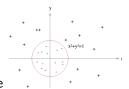
Plan

- ► Rappel : SVM
- Séparation hyperplane et modèle du neurone
- Neurone et réseau
- Théorème d'universalité
- ► Rappel : Compromis simplicité/complexité
- Méthodes par ensemble, double descente
- Descente de gradient Stochastique

Rappel: l'ancien paradigme

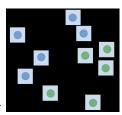
Vapnik Cherickov

- ▶ Pour avoir une bonne performance en test, il faut
- ni trop peu de paramètres



sinon on ne peut pas apprendre

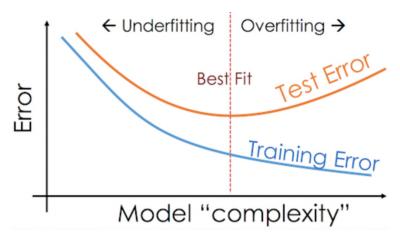
▶ ni trop de paramètres



sinon on apprend par coeur

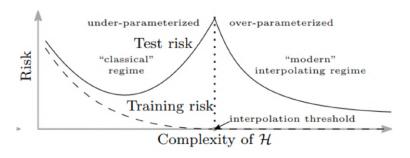
Rappel: l'ancien paradigme

Vapnik Cherickov



Le NOUVEAU paradigme

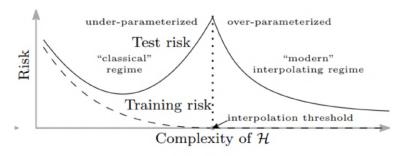
Double descente



https://www.lesswrong.com/posts/FRv7ryoqtvSuqBxuT/understanding-deep-double-descent

Le NOUVEAU paradigme

Double descente



Toujours prendre le plus gros réseaux possible c'est mieux!

Une prime à la puissance plutôt qu'à l'intelligence :-(

Le NOUVEAU paradigme

Pourquoi une double descente?

Quand on apprend un réseau, on apprendrait en réalité un ensemble de sous réseau dont la complexité s'adapterait au problèmes?!?

- durant l'apprentissage
 - ightharpoonup j'ai $x_1, ..., x_N, y_1, ..., y_N$
 - ▶ je forme w
- ► en test, j'utilise w

- ► si j'apprends plusieurs fois
 - ightharpoonup j'ai $x_1, ..., x_N, y_1, ..., y_N$
 - \triangleright je forme $w_1, ..., w_K$
- en test, je peux fusionner les différents modèles
- lacktriangle je tends alors vers les performances d'un modèle moyen w^*

- ▶ si j'apprends $K \gg 1$ fois
 - ightharpoonup j'ai $x_1, ..., x_N, y_1, ..., y_N$
 - ightharpoonup je forme $w_1, ..., w_K$
- en test, je peux fusionner les différents modèles
- \triangleright je tends alors vers les performances d'un modèle moyen w^*
- ▶ Attention w^* n'est pas optimal, il est juste moyen (typiquement pour le SVM dont l'apprentissage est déterministe $w_1 = ... = w_K = w^*$)

La complexité n'augmente pas avec le nombre de modèle mais seulement avec leur capacité.

Créer plein de modèle équivalent n'augmente pas l'overfitting!

La spécificité des réseaux de neurones?

ancien paradigme

- ► K réseaux de Q neurones ce n'est pas comme 1 réseau de KQ neurones
- K ne crée pas d'overfitting
- Q trop petit on n'apprend pas, Q trop grand on overfit

nouveau paradigme

- Un réseau de H neurones va se décomposer nativement en K réseau de H neurones
- $ightharpoonup rac{H}{K}$ serait nativement adapté au problème!

ATTENTION

C'est une explication plausible - rien de plus!



D'où viendrait cette spécificité des réseau de neurones?

de la façon de les apprendre : de la descente de gradient stochastique

Plan

- ► Rappel : SVM
- Séparation hyperplane et modèle du neurone
- Neurone et réseau
- Théorème d'universalité
- ► Rappel : Compromis simplicité/complexité
- Méthodes par ensemble, double descente
- Descente de gradient Stochastique

La descente de gradient

```
F est une fonction dérivable de \mathbb{R}^D dans \mathbb{R} alors \forall u, h \in \mathbb{R}^D, F(u+h) = F(u) + \nabla F_u | h + o(h) avec ho(h) \underset{h \to 0}{\rightarrow} 0 (notation petit o classique) Donc si \nabla F_u \neq 0 alors il existe \lambda > 0 tel que F(u - \lambda \nabla F_u) < F(u)
```

La descente de gradient

pseudo code

input : F, u_0

- 1. $u = u_0$
- 2. calculer ∇F_u
- 3. si $\nabla F_u \approx 0$ ou early stopping alors sortir
- 4. $\lambda = 1$
- 5. tant que $F(u \lambda \nabla F_u) \ge F(u)$ faire $\lambda = 0.5\lambda$
- 6. $u = u \lambda \nabla F_u$
- 7. go to 2

La descente de gradient

pseudo code

input : F, u_0

- 1. $u = u_0$
- 2. calculer ∇F_{μ}
- 3. si $\nabla F_u \approx 0$ ou early stopping alors sortir
- 4. $\lambda = 1$
- 5. tant que $F(u \lambda \nabla F_u) \ge F(u)$ faire $\lambda = 0.5\lambda$
- 6. $u = u \lambda \nabla F_u$
- 7. go to 2

cet algorithme converge vers un point u^* tel que $\nabla F_u = 0$

Apprentissage et descente de gradient

Appliquer à l'apprentissage :

- ▶ la variable u de la descente de gradient est les poids w du réseau
- ▶ la fonctionnelle (F) est (+/-) l'erreur d'apprentissage : $F(w) \approx \sum_{n} \mathbf{1}_{-}(y(x_{n})f(x_{n},w))$ avec $\mathbf{1}_{-}(t) = 1$ si $t \leq 0$ et $\mathbf{1}_{-}(t) = 0$ si t > 0

Apprentissage et descente de gradient

Test:

w fixé, on prend χ , et, on doit calculer $f(\chi, w)$

Apprentissage:

On prend $x_1, ..., x_N$, et, on doit approximer

$$\min_{w} \sum_{n} \mathbf{1}_{-}(y(x_n)f(x_n, w))$$

La descente de gradient ne marche qu'avec des fonctions globalement lisse.

Utiliser
$$F(w) = \min_{w} \sum_{n} \mathbf{1}_{-}(y(x_n)f(x_n, w))$$
 ne peut pas marcher

La descente de gradient ne marche qu'avec des fonctions globalement lisse.

Utiliser $F(w) = \min_{w} \sum_{n} \mathbf{1}_{-}(y(x_n)f(x_n, w))$ ne peut pas marcher

Il faut lisser l'erreur d'apprentissage via une loss function

$$F(w) = loss(w) = \sum_{n} l(y(x_n)f(x_n, w))$$

$$F(w) = loss(w) = \sum_{n} l(y(x_n)f(x_n, w))$$

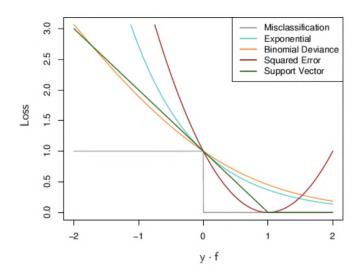
- / doit être assez lisse
- ▶ I doit avoir une valeur proche de 0 si $y(x_n)f(x_n, w)$ est grand
- ▶ I doit avoir une valeur très supérieure à 0 si $y(x_n)f(x_n, w)$ est très petit

$$F(w) = loss(w) = \sum_{n} l(y(x_n)f(x_n, w))$$

- / doit être assez lisse
- ▶ I doit avoir une valeur proche de 0 si $y(x_n)f(x_n, w)$ est grand
- ▶ I doit avoir une valeur très supérieure à 0 si $y(x_n)f(x_n, w)$ est très petit

hinge loss:

$$loss(w) = \sum_{n} relu(1 - y_n f(x_n, w))$$



Limite de la descente de gradient

$$loss(w) = \sum_{n} relu(1 - y_n f(x_n, w))$$

Si N = 1000000 ça veut dire que pour calculer loss(w) je dois appliquer f (plusieurs couches) à 1000000 points!

Descente de gradient stochastique

loss est une fonction dérivable de \mathbb{R}^D dans \mathbb{R} et que loss $(u) = \sum_{i=1}^{n} q_i(u)$

alors dans le cas convexe, il est possible de minimiser *loss* en faisant comme une descente de gradient mais en prenant une sous sommes des q_i tirée aléatoirement avec une politique $\lambda(t)$ fixée a priori (qui doit quand même vérifier certaines conditions).

Descente de gradient stochastique

pseudo code

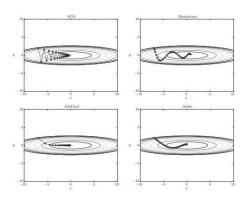
input :
$$x_1, y_1, ..., x_n, y_n, w_0$$

- 1. $w = w_0$
- 2. iter = 0
- 3. tirer n au hasard dans 1,...,N
- 4. $partial_loss = relu(1 y_n f(x_n, w))$
- 5. calculer $\nabla_w partial_loss$
- 6. $w = w \lambda_{iter} \nabla_w partial_loss$
- 7. iter = iter + 1
- 8. si condition d'arrêt alors sortir
- 9. go to 3

Descente de gradient stochastique

Optimizer

 $w=w-\lambda_{iter}\nabla_w partial_loss$ est une possibilité mais il y en a d'autres :



Bilan

L'apprentissage en pratique

$$f(x, w) = w_Q \times relu(w_{Q-1} \times relu(...(relu(w_1 \times x))))$$

L'apprentissage consiste à appliquer la méthode de la descente de gradient stochastique (optimiseur à choisir) à une fonction de perte (à choisir) qui approxime l'erreur d'apprentissage Par exemple

$$partial_loss(w) = \sum_{n \in Batch} relu(1 - y_n f(x_n, w))$$
 $w = w - \lambda_{iter} \nabla_w partial_loss$

Mais ça suppose qu'on sache calculer le gradient!!!!

```
objectif partial\_loss(w) = \sum_{n \in Batch} relu(1 - y_n f(x_n, w)) avec f(x, w) = w_Q \times relu(w_{Q-1} \times relu(...(relu(w_1 \times x)))) \Rightarrow on veut calculer  \frac{\partial partial\_loss(w)}{\partial w_{t,i,i}}
```

```
Forward for t for i  for \ j \\ A[t][i] \ += \ relu(A[t-1][j])^*w[t-1][i][j]
```

Réduction w - α

$$\frac{\partial loss}{\partial w_{t,i,j}} = \frac{\partial loss}{\partial \alpha_{t,i,j}} \frac{\partial \alpha_{t,i}}{\partial w_{t,i,j}} = \frac{\partial loss}{\partial \alpha_{t,i}} x_{t,j}$$

Réduction α - α

$$\frac{\partial loss}{\partial \alpha_{t,j}} = \sum_{i} \frac{\partial loss}{\partial \alpha_{t+1,i}} \frac{\partial \alpha_{t+1,i}}{\partial \alpha_{t,j}} = \sum_{i} \frac{\partial loss}{\partial \alpha_{t+1,i}} w_{t,i,j} relu'\left(\alpha_{t,j}\right)$$

relu est une fonction linéaire par morçeau, sa *dérivé* est donc une constante par morçeau

Attention

La somme dans
$$\frac{\partial loss}{\partial \alpha_{t,j}} = \sum_{i} \frac{\partial loss}{\partial \alpha_{t+1,i}} \frac{\partial \alpha_{t+1,i}}{\partial \alpha_{t,j}}$$
 ne vient **pas** de la somme dans $\alpha_{t+1,i} = \sum_{j} x_{t,j} w_{t,i,j}$.

Elle vient de f(u) = a(b(u), c(u)) implique $\frac{\partial f}{\partial u} = \frac{\partial a}{\partial b} \frac{\partial b}{\partial u} + \frac{\partial a}{\partial c} \frac{\partial c}{\partial u}$. Lui même vient de f(u + h) = f(u) + f'(u)h

```
\begin{array}{ll} \text{for } t & \\ \text{for } i & \\ \text{for } j & \\ & A[t][i] \mathrel{+=} relu(A[t-1][j])^*w[t-1][i][j] \\ DA[z][1] = partial\_loss & \\ \text{for } t \text{ from } z \text{ to } 1 & \\ \text{for } j & \\ & DA[t][j] \mathrel{+=} DA[t+1][i]^*w[t][i][j]^*relu'(A[t][j]) \end{array}
```

Questions?