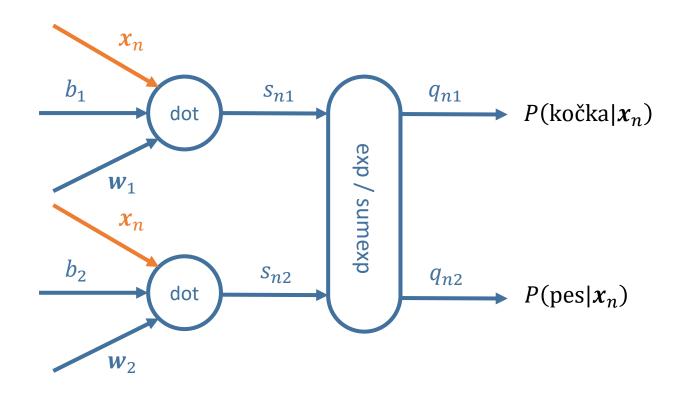
Aplikace neuronových sítí

Zpětná propagace

Multiclass logistická regrese (softmax klasifikátor)



$$q_{nc} = P(\text{třída } c | \mathbf{x}_n) = \frac{e^{s_{nc}}}{\sum_{i=1}^{C} e^{s_{ni}}}$$

Diferencovatelné výpočetní grafy

Řetízkové pravidlo (chain rule)

• Pro výpočet derivace složených funkcí formy z=f(y)=fig(g(x)ig) používáme



$$\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}y} \cdot \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}$$



"derivace vnější krát derivace vnitřní"

Příklad na řetízkové pravidlo

$$z = (x_1 + ax_2)^2$$

vnitřní funkce g:

$$y = x_1 + ax_2$$

$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = 1 \qquad \frac{\partial y}{\partial x_2} = a$$

vnější funkce f:

$$z = y^2$$

$$\frac{\partial z}{\partial y} = 2y$$

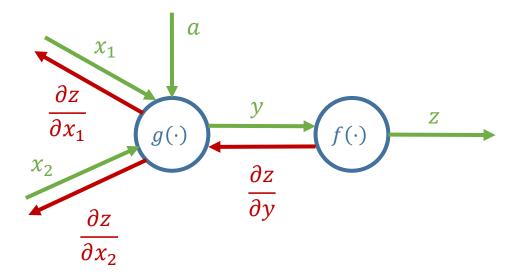
aplikace pravidla:

$$\frac{\partial z}{\partial x_1} = \frac{\partial z}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial x_1} = 2y \cdot 1 = 2(x_1 + ax_2)$$

$$\frac{\partial z}{\partial x_2} = \frac{\partial z}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial x_2} = 2y \cdot a = 2a(x_1 + ax_2)$$

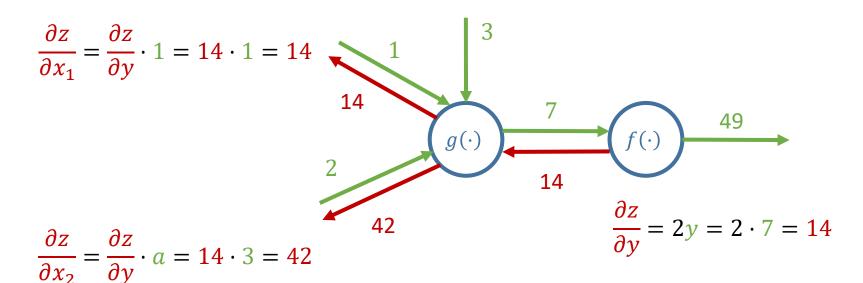
Funkce $z = (x_1 + ax_2)^2$ jako graf

$$z = (x_1 + ax_2)^2$$



Funkce $z = (x_1 + ax_2)^2$ jako graf

$$z = (x_1 + ax_2)^2$$



Funkce $z = (x_1 + ax_2)^2$ jako graf podrobně

dopředný průchod

$$(1) x_2' \leftarrow ax_2$$

(2)
$$y \leftarrow x_1 + x_2'$$

 $(3) z \leftarrow y^2$

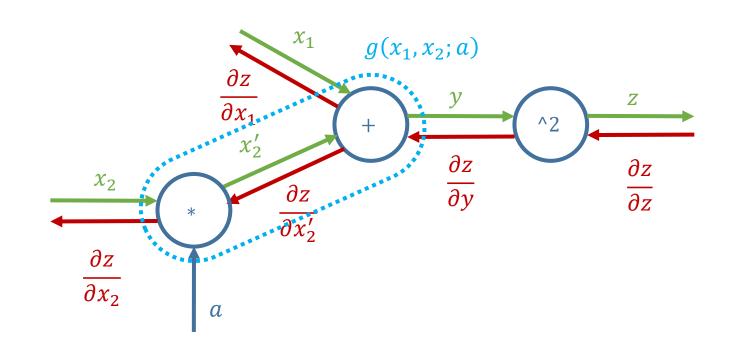
zpětný průchod

$$(0) \qquad \frac{\partial z}{\partial z} = 1$$

(1)
$$\frac{\partial z}{\partial y} \leftarrow \frac{\partial z}{\partial z} \cdot \frac{\partial z}{\partial y} = 2y$$

(2)
$$\frac{\partial z}{\partial x_1} = \frac{\partial z}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial x_1} = \frac{\partial z}{\partial y}$$
$$\frac{\partial z}{\partial x_2'} = \frac{\partial z}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial x_2'} = \frac{\partial z}{\partial y}$$

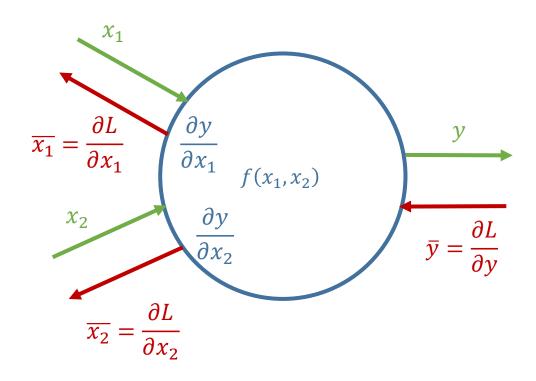
(3)
$$\frac{\partial z}{\partial x_2} = \frac{\partial z}{\partial x_2'} \cdot \frac{\partial x_2'}{\partial x_2} = \frac{\partial z}{\partial x_2'} \cdot \alpha$$



Uzel grafu a lokální gradient

- Na funkci lze nahlížet jako na orientovaný výpočetní graf
- Jednotlivé operace jsou uzly
- Hrany repezentují návaznosti vstupů a výstupů
- Jakobián:

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_1}{\partial x_D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_C}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_C}{\partial x_D} \end{bmatrix}$$



pruhová notace: https://people.maths.ox.ac.uk/gilesm/files/NA-08-01.pdf

Python kód funkce $z = (x_1 + ax_2)^2$ se zpětnou propagací

dopředný průchod

- $(1) x_2' \leftarrow ax_2$
- (2) $y \leftarrow x_1 + x_2'$
- (3) $z \leftarrow y^2$

zpětný průchod

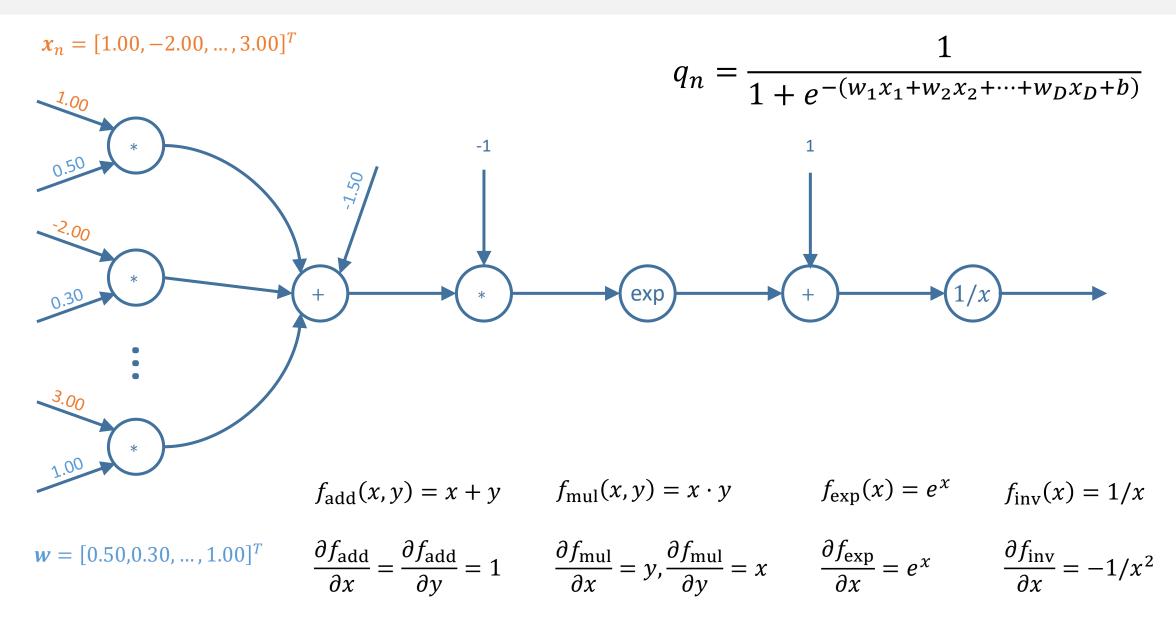
$$(0) \quad \frac{\partial z}{\partial z} = 1$$

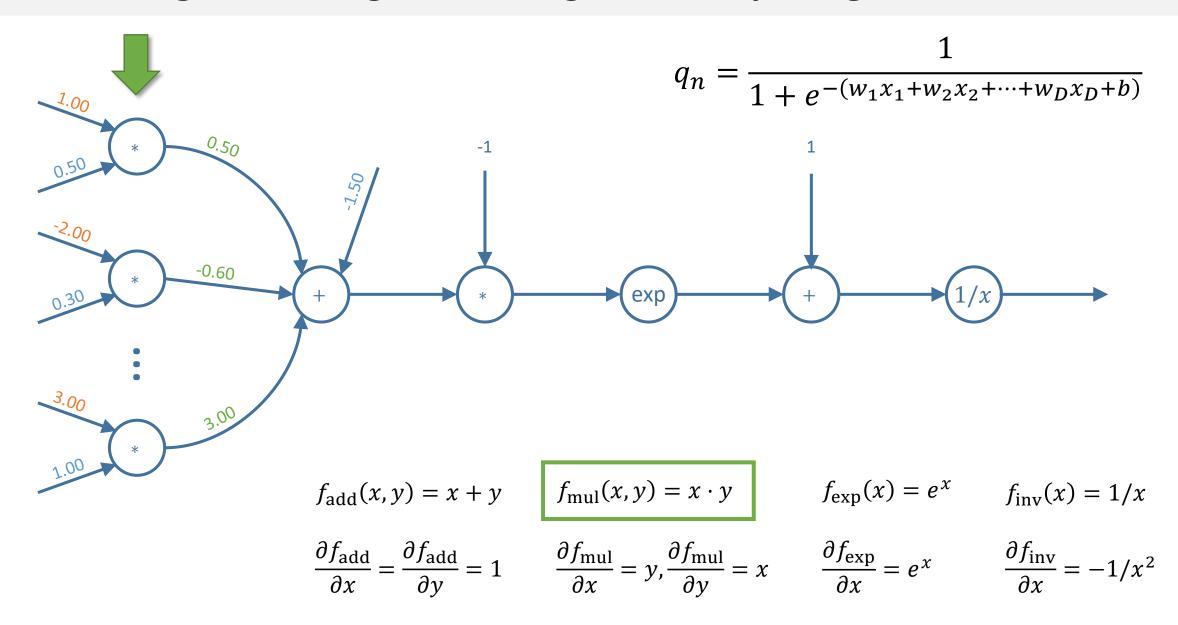
(1)
$$\frac{\partial z}{\partial y} \leftarrow \frac{\partial z}{\partial z} \cdot \frac{\partial z}{\partial y} = 2y$$

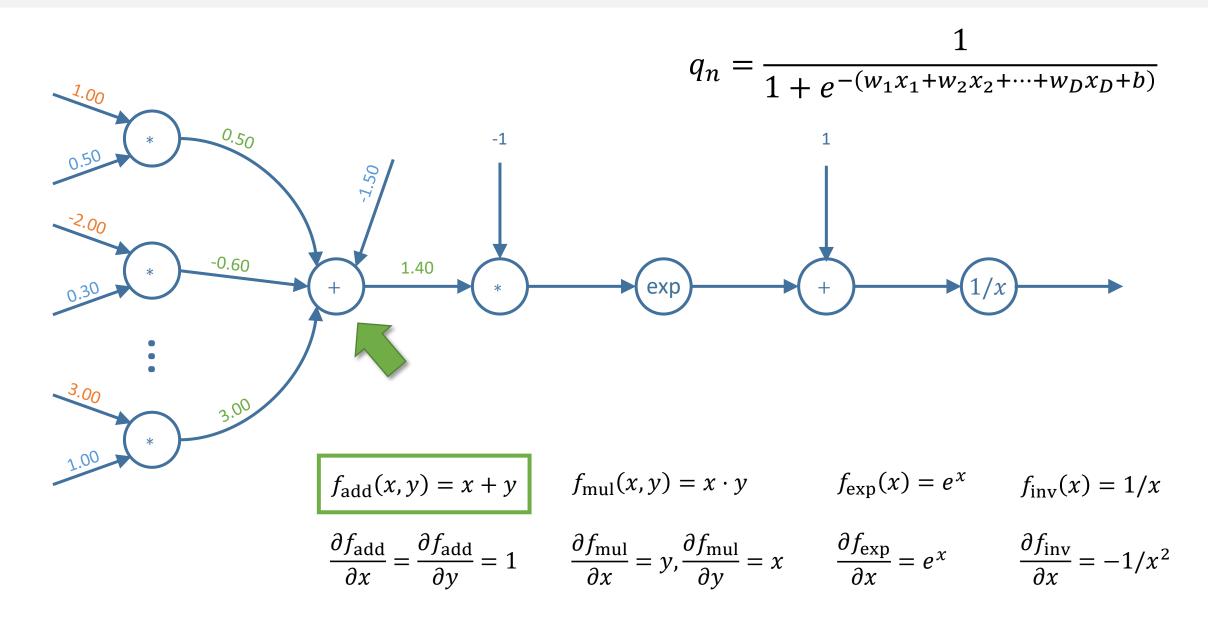
(2)
$$\frac{\partial z}{\partial x_1} = \frac{\partial z}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial x_1} = \frac{\partial z}{\partial y}$$
$$\frac{\partial z}{\partial x_2'} = \frac{\partial z}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial x_2'} = \frac{\partial z}{\partial y}$$

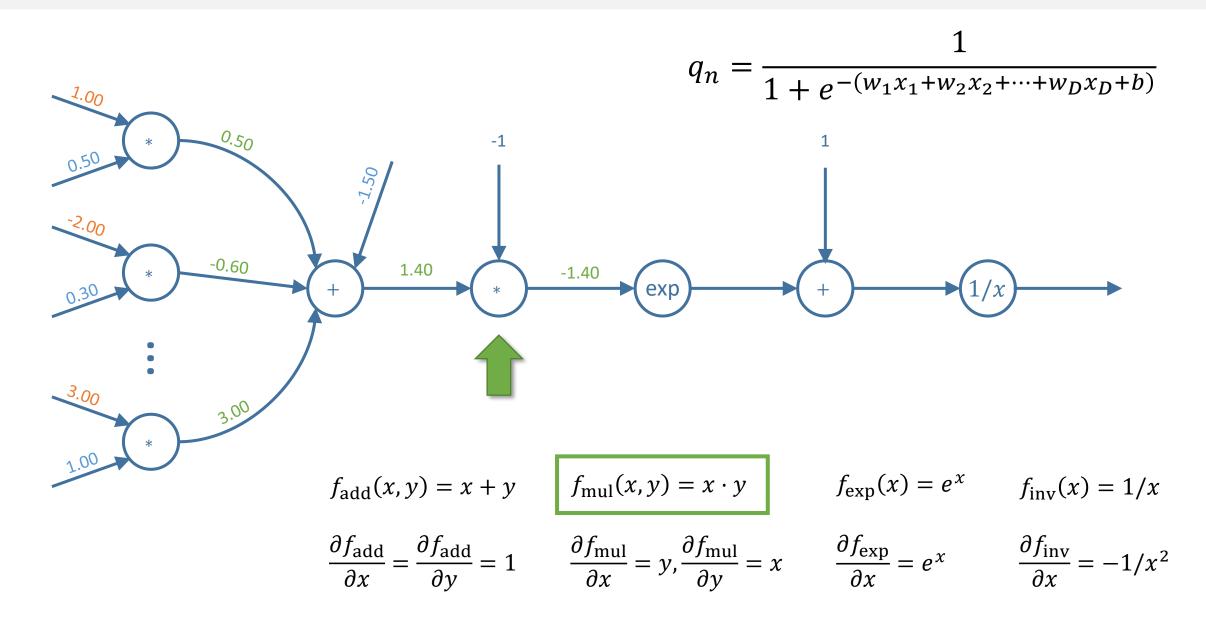
(3)
$$\frac{\partial z}{\partial x_2} = \frac{\partial z}{\partial x_2'} \cdot \frac{\partial x_2'}{\partial x_2} = \frac{\partial z}{\partial x_2'} \cdot \alpha$$

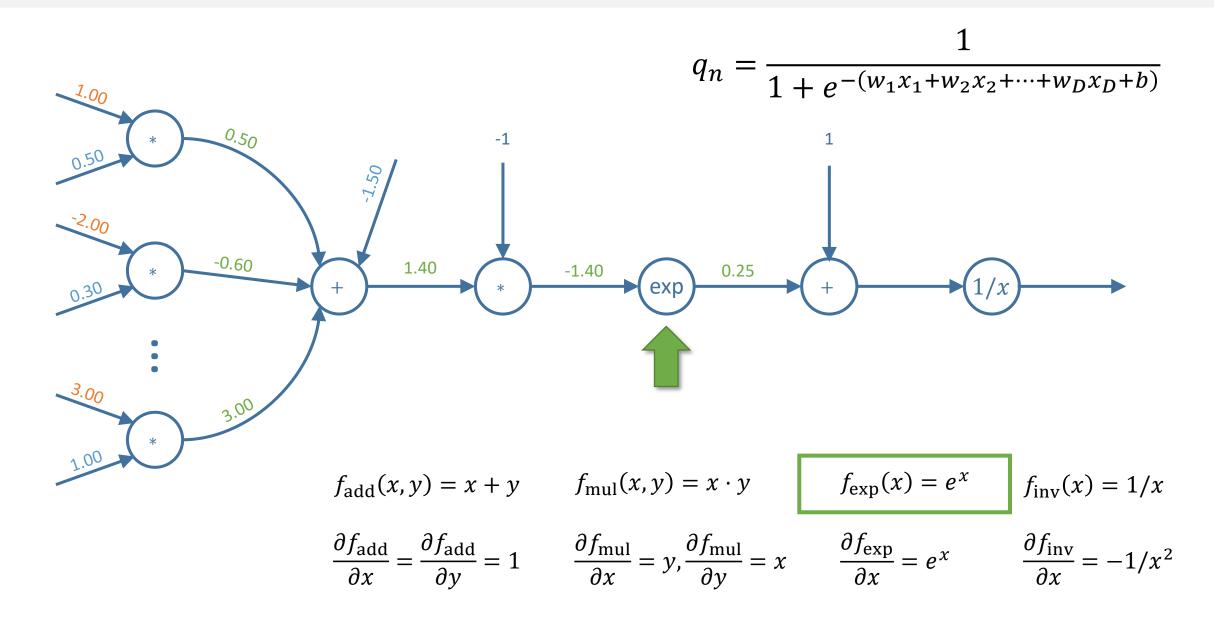
```
def forward(x1, x2, a):
                                                 def backward(dz, cache):
     # (1) forward
                                                     x2, a, y = cache
     x2 = a * x2
                                                     # (3) backward
                                                     dy = dz * 2 * y
     # (2) forward
     y = x1 + x2
                                                     # (2) backward
                                                     dx1 = dy
     # (3) forward
                                                     dx2_{-} = dy
                                                     # (1) backward
     z = y * y
                                                     dx2 = dx2_* * a
                                                     da = dx2 * x2
     cache = x2, a, y
     return z, cache
                                                     return dx1, dx2, da
>>> x1, x2, a = 1, 2, 3
>>> z, cache = forward(x1, x2, a)
\Rightarrow dx1, dx2, da = backward(1.0, cache)
>>> dx1, dx2, da
(14.0, 42.0, 28.0)
```

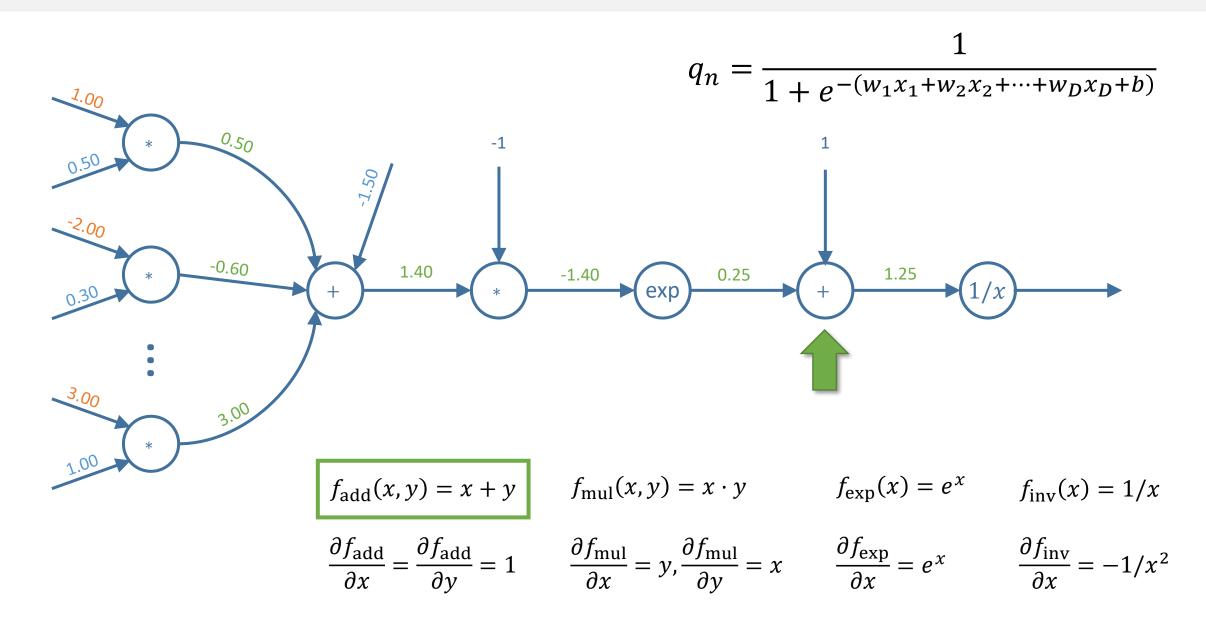


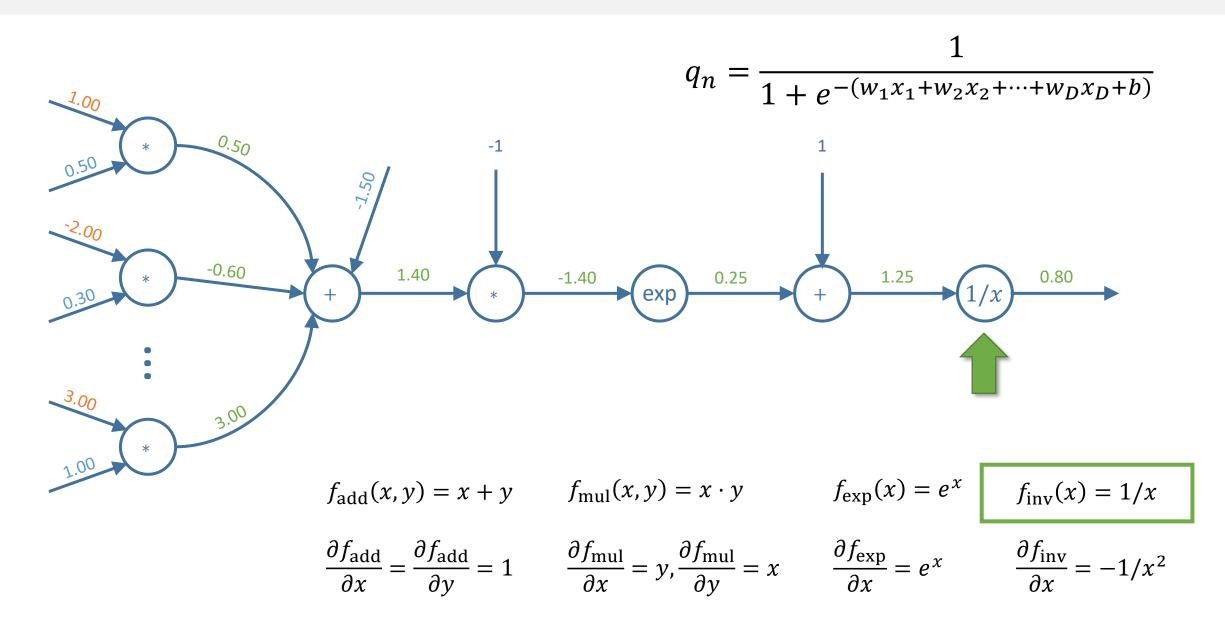


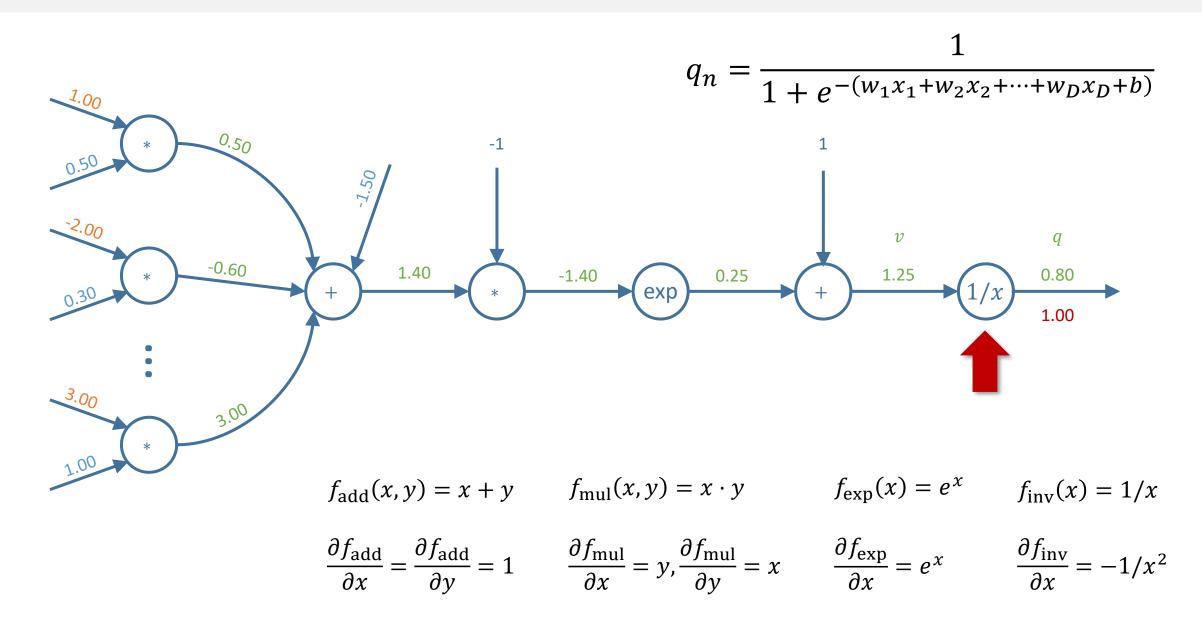


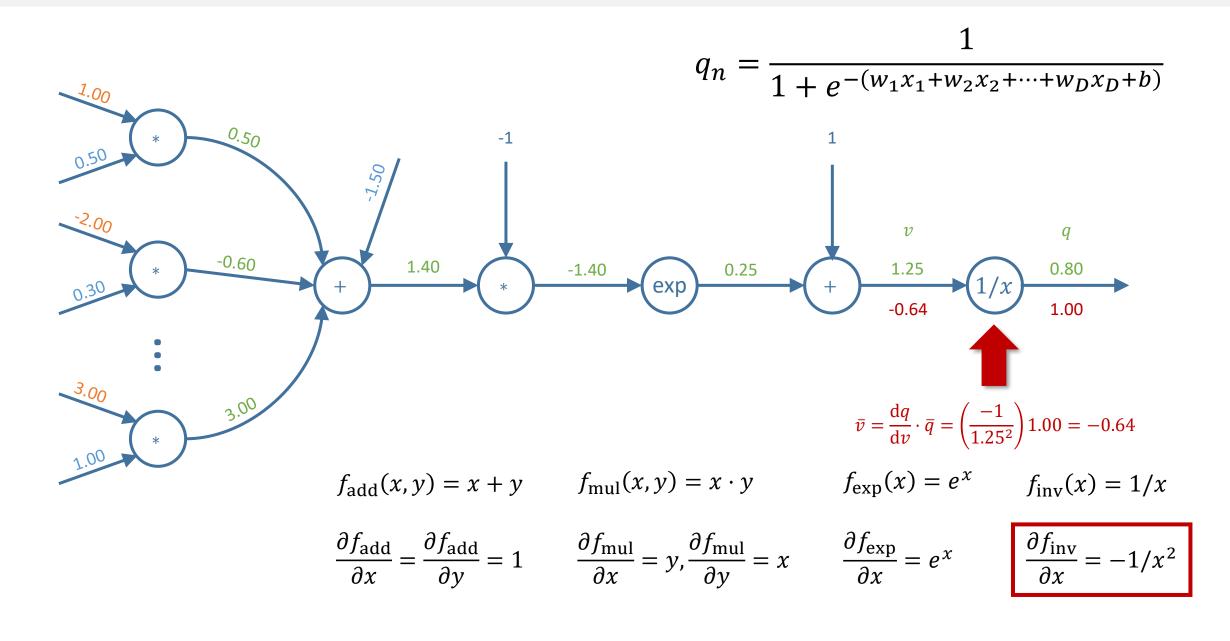


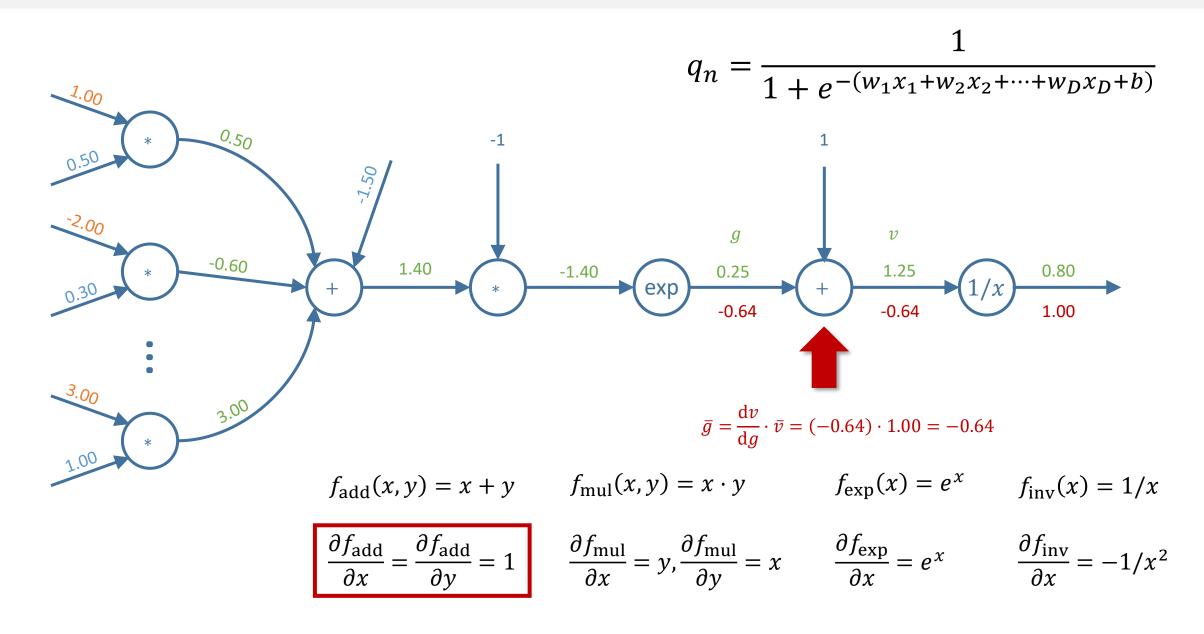


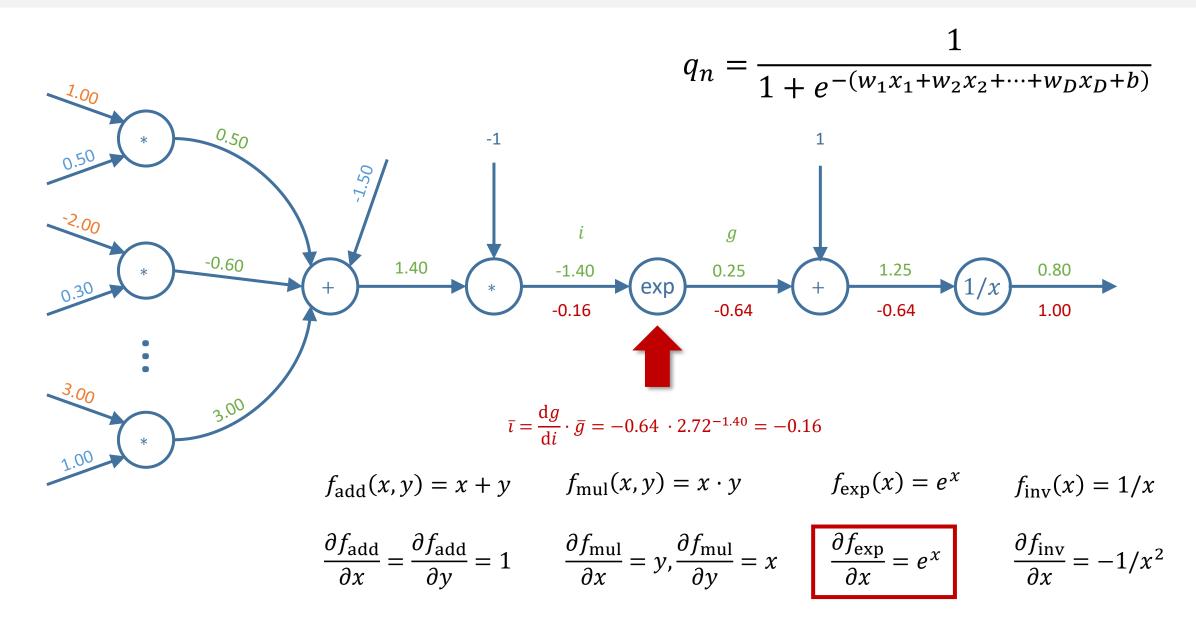


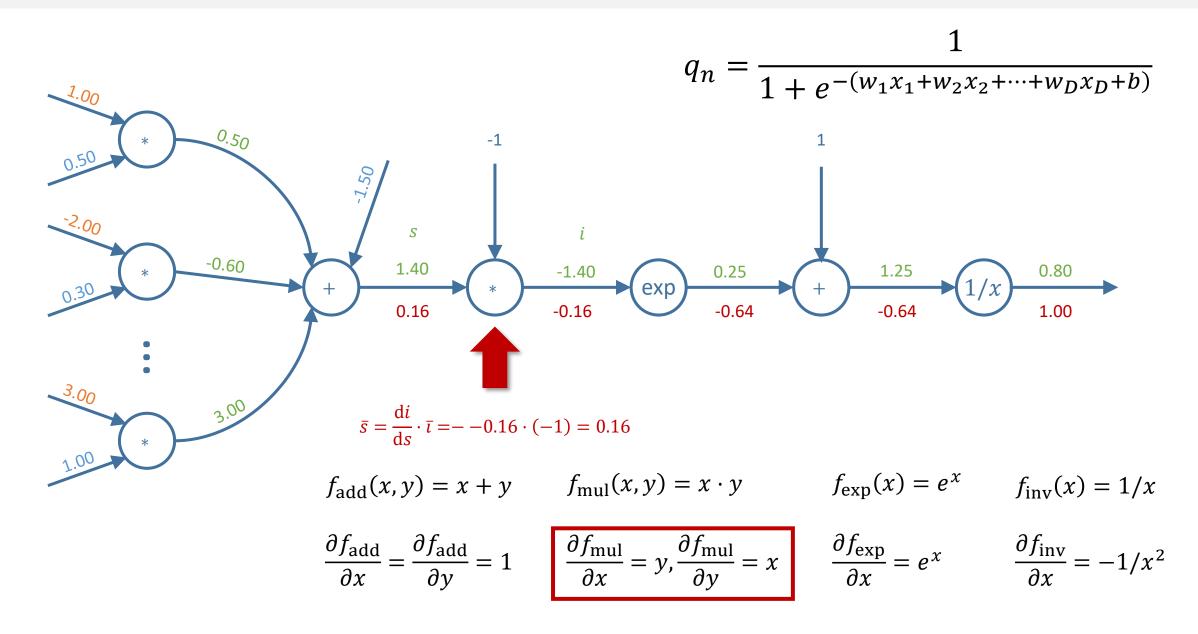


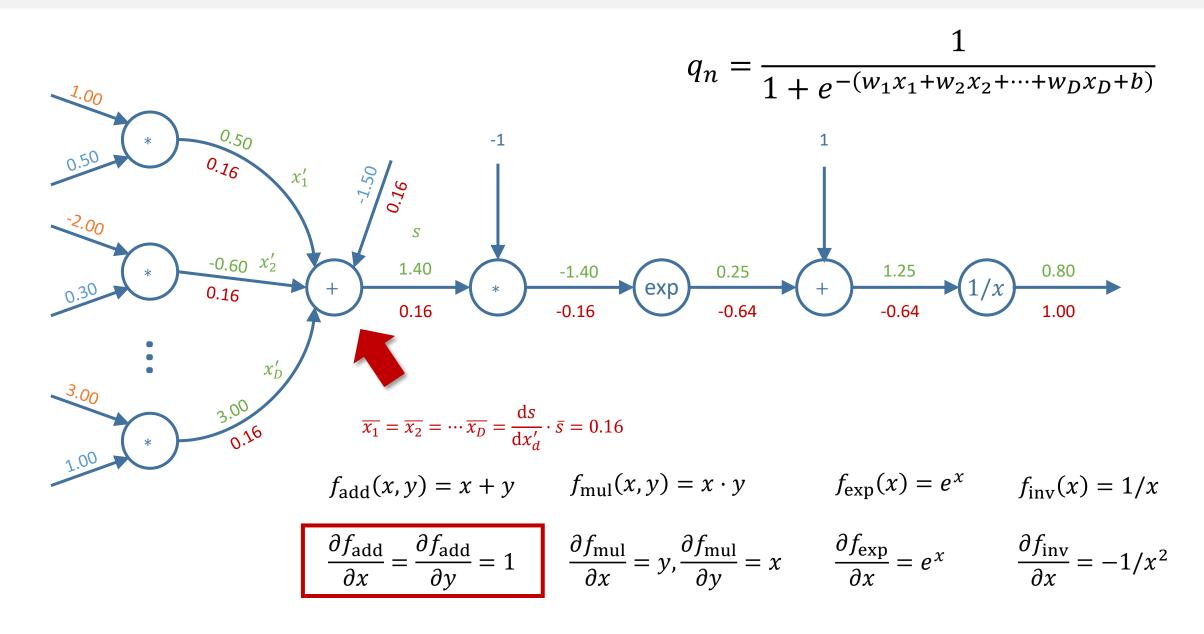


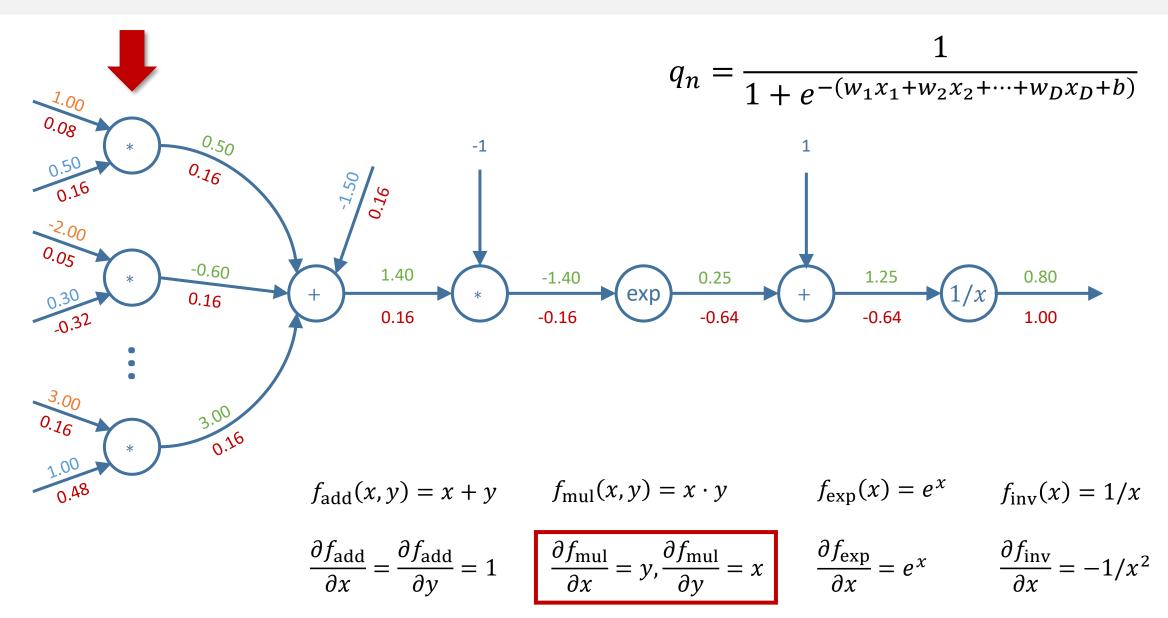


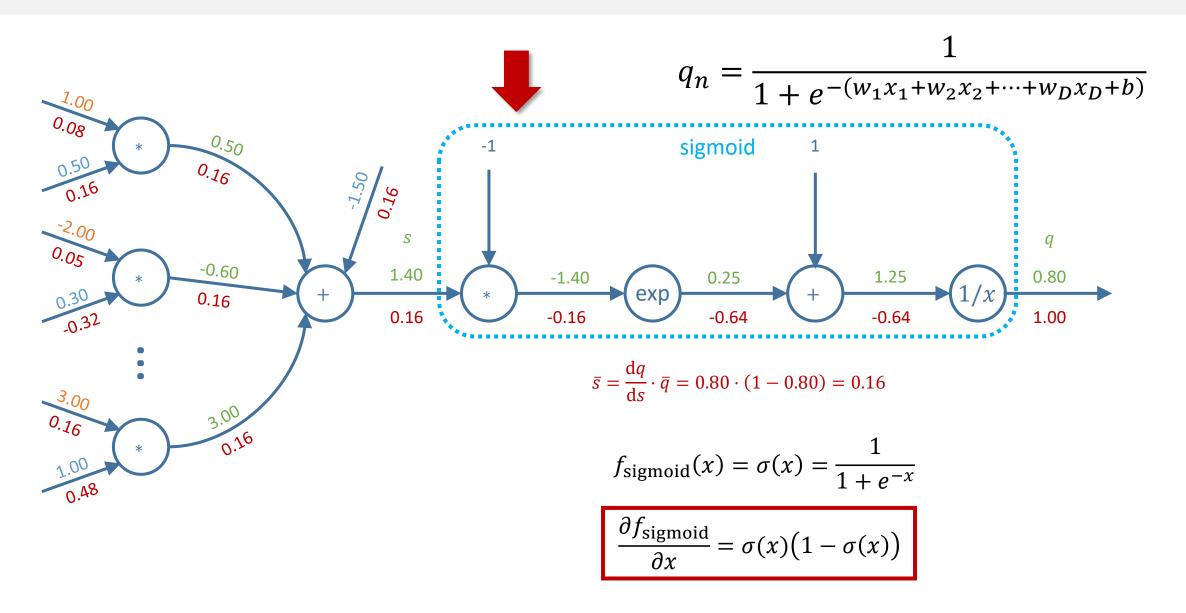






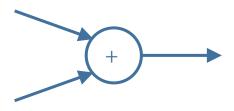






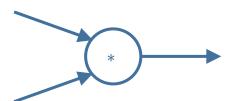
Druhy operací

- Operace v grafu se opakují -> platí i pro výpočet gradientu
- V grafu se opakují pouze 4 typy <u>vrstev</u>:
 - součet
 - násobení
 - exponenciální funkce
 - 4. inverze



$$f_{\rm add}(x,y) = x + y$$

$$\frac{\partial f_{\text{add}}}{\partial x} = \frac{\partial f_{\text{add}}}{\partial y} = 1$$



$$f_{\text{mul}}(x, y) = x \cdot y$$

$$\frac{\partial f_{\mathrm{mul}}}{\partial x} = y, \frac{\partial f_{\mathrm{mul}}}{\partial y} = x$$
 $\frac{\partial f_{\mathrm{exp}}}{\partial x} = e^x$

$$f_{\exp}(x) = e^x$$

$$\frac{\partial f_{\rm exp}}{\partial x} = e^x$$

$$f_{\rm inv}(x) = 1/x$$

$$\frac{\partial f_{\rm inv}}{\partial x} = -1/x^2$$

Sčítání

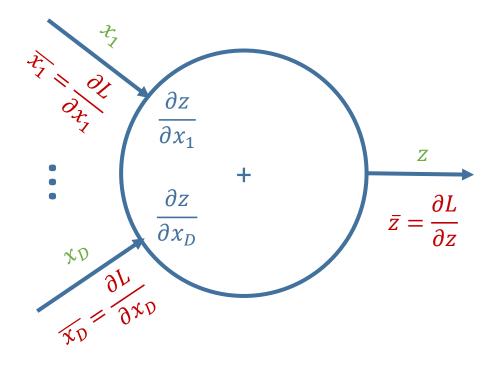
```
class AddNode(object):

    def forward(x_vec):
        # cache
        self.dim = x_vec.shape[0]
        z = np.sum(x_vec)
        return z

def backward(dz):
        dx_vec = dz * np.ones(self.dim)
        return dx_vec
```

ve zpětném režimu "rozdistribuje" příchozí gradient do všech vstupů:

$$\overline{x_d} = \overline{z}, \qquad d = 1, \dots, D$$



forward: $z = \sum_{d=1}^{D} x_d$

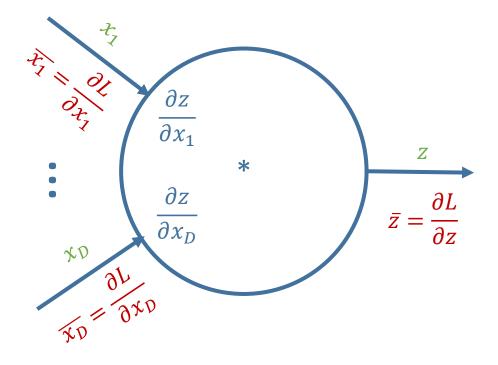
backward: $\frac{\partial z}{\partial x_d} = 1$

Násobení

```
class MultiplyNode(object):

    def forward(x_vec):
        # cache
        self.x = x_vec
        self.z = np.prod(self.x)
        return self.z

def backward(dz):
    # dx1 = (x1 * x2 * ... xD) / x1
    dx_vec = dz * self.z / self.x
    return dx_vec
```



forward: $z = \prod_{d=1}^{D} x_d$

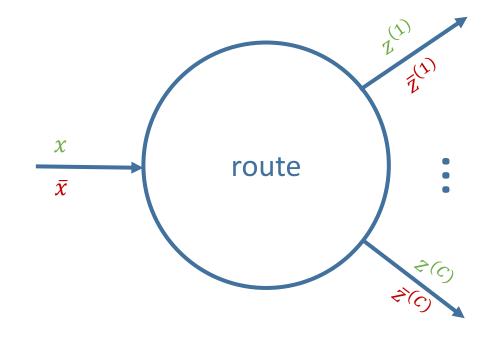
backward: $\frac{\partial z}{\partial x_d} = \prod_{i \neq d} x_i$

Výpočetní graf pro zabalení funkcí do jednoho bloku

```
class ComputationalGraph(object):
                                                    graf nesmí obsahovat cykly!
    def add node(node, *parents):
        self.nodes.append(node)
        self.parents[node] = parents
    def forward(*inputs):
        for node in topologically_sorted(self.nodes);
            inputs = [self.outputs[p] for p in self/parents[node]]
            self.outputs[node] = node.forward(*inputs)
        return top_nodes_outputs # napr. loss (treba cross entropy)
    def backward(dout):
        for node in reversed(topologically_sorted(self.nodes)):
            node_grads = node.backward(self.grads[node]) # retizkove pravidlo
            for p, g in zip(self.parents[node], node_grads):
                self.grads[p] = g
        return bottom_nodes_grads
```

Opakované použití jednoho výstupu

- Výstup vstupuje do více než jednoho bloku v další vrstvě
- Konečný výsledek (např. loss) je závislý na obou mezivýsledcích
- Všimněme si duality vůči bloku sčítání



forward: $z^{(c)} = x$

backward: $\bar{x} = \sum_{c=1}^{C} \bar{z}^{(c)}$

Příklad: "lineární" vrstva, gradient na vstup

• Lineární (afinní) vrstva

$$s = Wx + b$$

Rozvinutý zápis

$$\begin{bmatrix} s_1 \\ \vdots \\ s_C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{11} & \dots & w_{1D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{C1} & \dots & w_{CD} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_D \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_C \end{bmatrix}$$

• *c*-tý výstup

$$s_c = \sum_{d=1}^{D} w_{cd} x_d + b_c$$

Gradient pro jeden vstup a výstup

$$\frac{\partial s_c}{\partial x_d} = w_{cd}$$

• Každé x_d je ale použito C-krát: vyskytuje se ve výpočtech všech s_1, \ldots, s_C , a proto

$$\overline{x_d} = \sum_{c=1}^C w_{cd} \overline{s_c} = \boldsymbol{w}_{:,d} \overline{\boldsymbol{s}}$$

kde $w_{::d}$ je d-tý sloupec W

Celý gradient vektorově:

$$\overline{x} = W^{\mathsf{T}} \overline{s}$$

Příklad: "lineární" vrstva, gradient na váhy

• Pro c-tý výstup pouze c-tý řádek – např. s_1 nezávisí na w_{21}, \dots, w_{2D}

$$s_c = \sum_{d=1}^{D} w_{cd} x_d + b_c \implies \frac{\partial s_c}{\partial w_{id}} = \begin{cases} x_d & \text{když} & i = c \\ 0 & \text{když} & i \neq c \end{cases}$$

Celkový gradient tedy je

$$\overline{w_{cd}} = \sum_{i=1}^{C} \overline{s_i} \cdot \frac{\partial s_i}{\partial w_{cd}} = \overline{s_c} \cdot x_d$$

$$x \text{ co bylo na vstupu}$$

$$při dopředném$$

$$průchodu \rightarrow \underline{cache!}$$

Vektorově

$$\overline{\boldsymbol{W}} = \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{W}} = \begin{bmatrix} \overline{S_1} \\ \vdots \\ \overline{S_C} \end{bmatrix} \cdot [x_1, \dots, x_D] = \begin{bmatrix} \overline{S_1} \cdot x_1 & \dots & \overline{S_1} \cdot x_D \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \overline{S_C} \cdot x_1 & \dots & \overline{S_C} \cdot x_D \end{bmatrix} = \overline{\boldsymbol{s}} \cdot \boldsymbol{x}^{\mathsf{T}}$$

Sigmoid jako vrstva

Dopředný průchod

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

Žádné!

-10.0

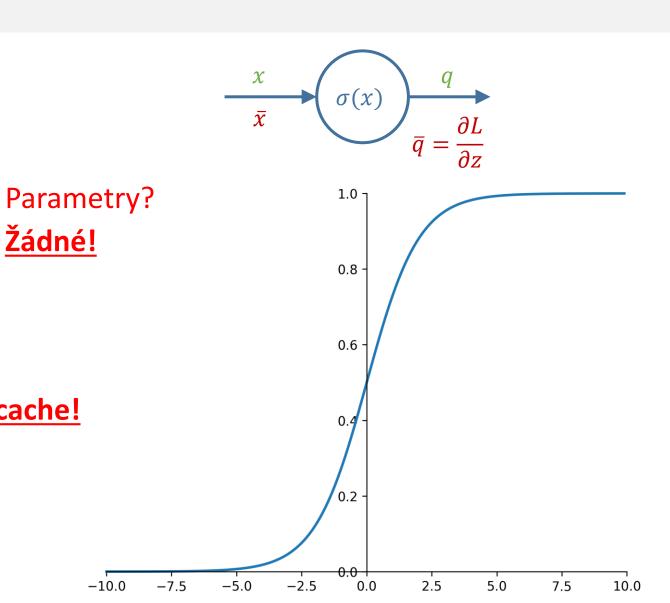
q ... cache!

Derivace funkce sigmoid

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(x)}{\mathrm{d}x} = \sigma(x) \big(1 - \sigma(x) \big)$$

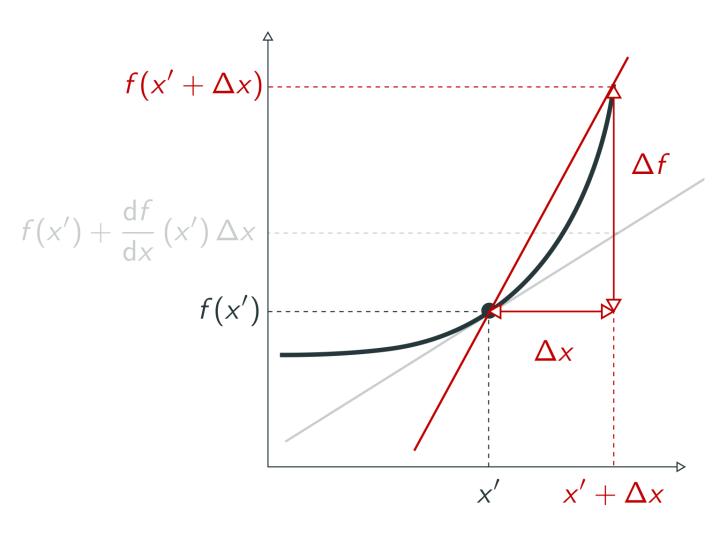
Zpětný průchod

$$\bar{x} = \bar{q} \cdot \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}x} = \bar{q} \cdot q \cdot (1 - q)$$



Numerický gradient

Aproximace derivace dopřednou diferencí



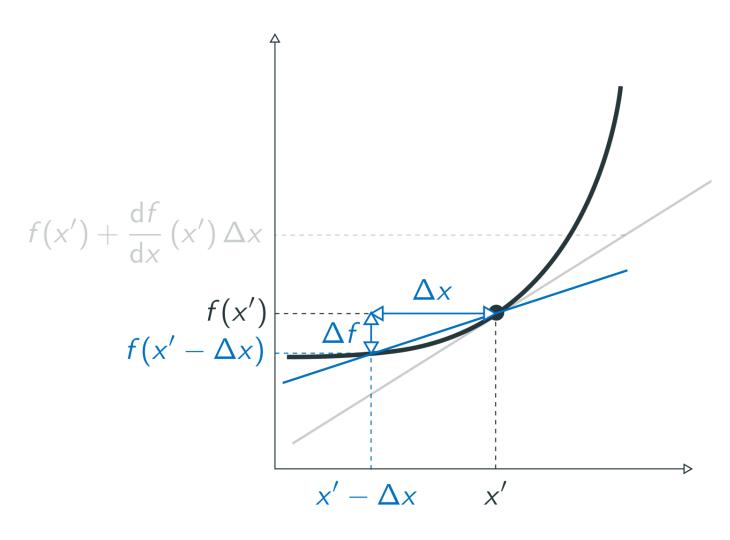
Derivace:

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta f}{\Delta x}$$

Aproximace dopředně:

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{f(x' + \Delta x) - f(x')}{\Delta x}$$

Aproximace derivace zpětnou diferencí



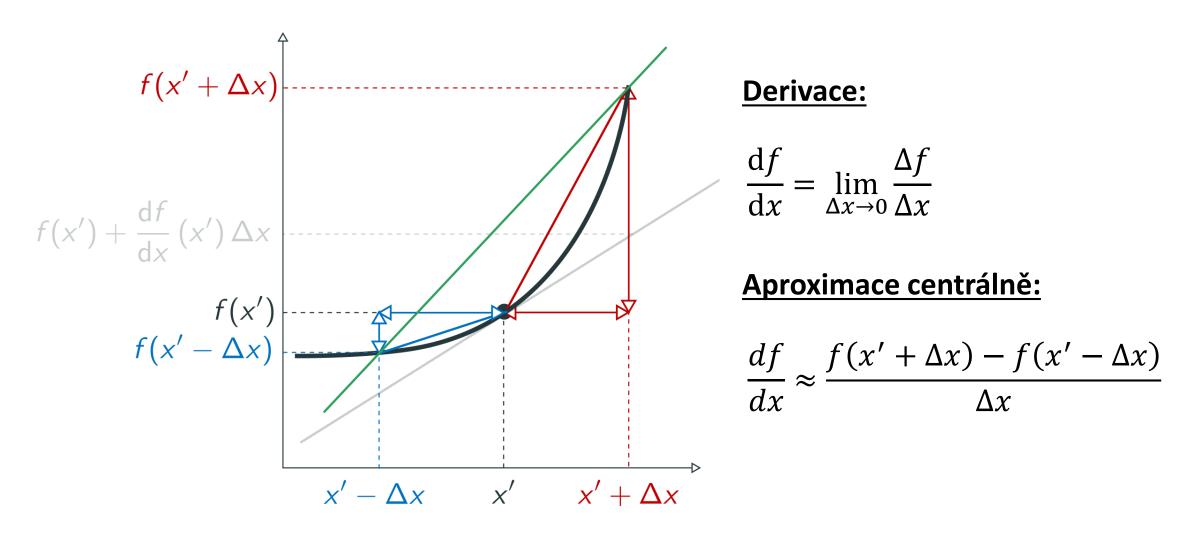
Derivace:

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta f}{\Delta x}$$

Aproximace zpětně:

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{f(x') - f(x' + \Delta x)}{\Delta x}$$

Aproximace derivace centrální diferencí



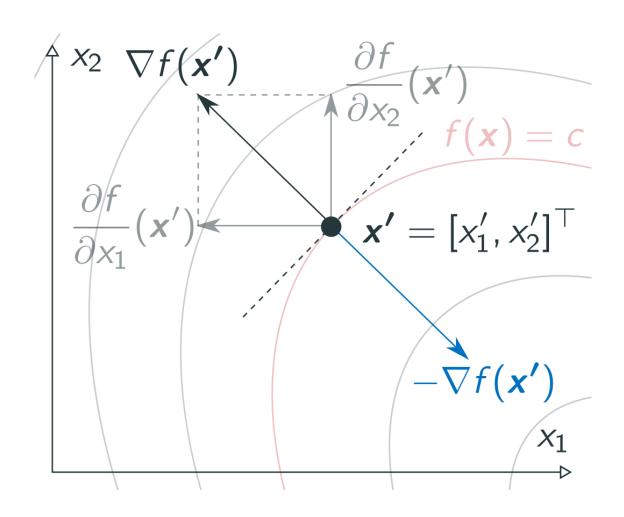
výhodou menší chyba aproximace $O(\Delta x^2)$ \rightarrow častější použití než jednostranné

Aproximace ve více rozměrech

Gradient je vektor parciálních derivací

$$\nabla f(x') = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}(x_1'), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_D}(x_D') \right]^{\mathsf{T}}$$

Aproximace tedy nutné provést <u>prokaždou</u> proměnnou funkce f



Příklad aproximace derivace numerickou diferencí

$$f(x) = \sum_{d=1}^{D} x_d^2$$
 $x = [1.0, 0.8, 1.3]^{\mathsf{T}}$

numerický odhad:

$$\widehat{Vf(x)} = \begin{bmatrix} \frac{f(x_1 + \Delta x, x_2, x_3) - f(x_1, x_2, x_3)}{\Delta x} \\ \frac{f(x_1, x_2 + \Delta x, x_3) - f(x_1, x_2, x_3)}{\Delta x} \\ \frac{f(x_1, x_2, x_3 + \Delta x) - f(x_1, x_2, x_3)}{\Delta x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{f(1.0 + 0.001, 0.8, 1.3) - f(1.0, 0.8, 1.3)}{0.001} \\ \frac{f(1.0, 0.8 + 0.001, 1.3) - f(1.0, 0.8, 1.3)}{0.001} \\ \frac{f(1.0, 0.8, 1.3 + 0.001) - f(1.0, 0.8, 1.3)}{0.001} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2.001}{1.601} \\ \frac{1.601}{2.601} \\ \frac{1.601$$

skutečný gradient:

$$\nabla f(\mathbf{x}) = [2x_1, 2x_2, 2x_3]^{\mathsf{T}} = [2.0, 1.6, 2.6]^{\mathsf{T}}$$

hluboké neurosítě bežně miliony parametrů \rightarrow pro vyčíslení gradientu nutné vyhodnotit jejich výstup min. jednou pro každý parametr a to v každém kroku gradient descentu!

Centrální diference v numpy

```
def eval_numerical_gradient_array(f, x, df, h=1e-5):
    grad = np.zeros_like(x)
    it = np.nditer(x, flags=['multi_index'], op_flags=['readwrite'])
    while not it.finished:
        ix = it.multi_index
        oldval = x[ix]
        x[ix] = oldval + h
        pos = f(x).copy()
        x[ix] = oldval - h
        neg = f(x).copy()
        x[ix] = oldval
        grad[ix] = np.sum((pos - neg) * df) / (2 * h)
        it.iternext()
        return grad
```

Kontrola gradientu

- Numerická aproximace je sice pomalá, ale vždy až na toleranci správná

 vhodná

 pouze pro kontrolu implementace backward metody
- V příkladu vyšlo

$$\widehat{\nabla f(x)} = [2.001, 1.601, 2.601]^T$$
 $\nabla f(x) = [2.0, 1.6, 2.6]^T$

Relativní chyba

$$\delta = \max \frac{|\widehat{\nabla f(x)} - \nabla f(x)|}{|\widehat{\nabla f(x)}| + |\nabla f(x)||} = \max \left(\frac{0.001}{4.001}, \frac{0.001}{3.201}, \frac{0.001}{5.201}\right) = 3.124 \cdot 10^{-4}$$

• Kód v numpy z předmetu cs231n Stanfordovy univerzity:

```
>>> def rel_error(x, y):
>>> return np.max(np.abs(x - y) / (np.maximum(1e-8, np.abs(x) + np.abs(y))))
>>> rel_error(np.array([2.001, 1.601, 2.601]), np.array([2.0, 1.6, 2.6]))
0.00031240237425800993
```

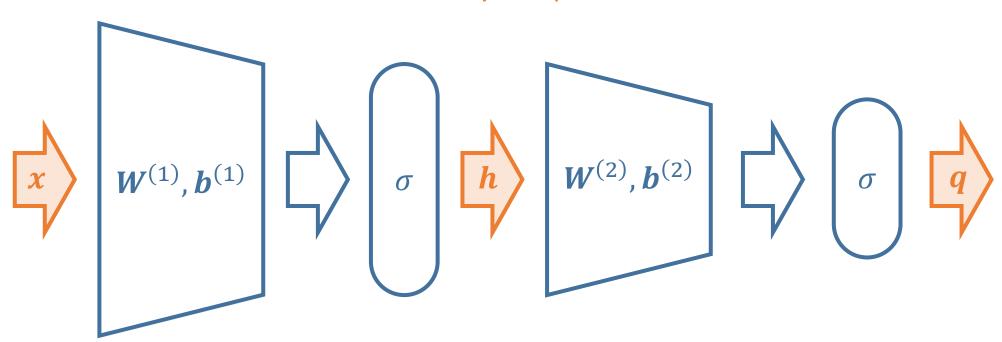
Vícevrstvé sítě

Vícevrstvý perceptron

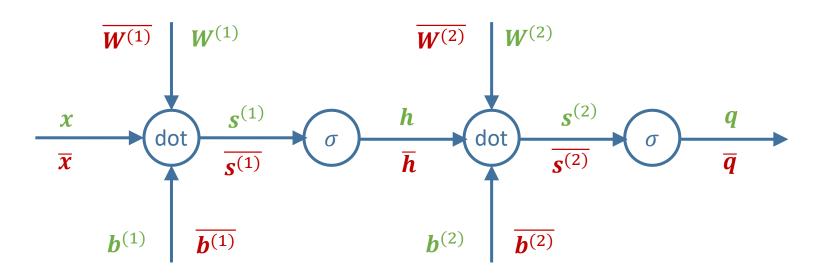
- Bloky s definovaným forward a backward chováním lze libovolně skládat za sebe
- Např. dvouvrstvý perceptron

$$q = \sigma \{ W^{(2)} \sigma (W^{(1)} x + b^{(1)}) + b^{(2)} \}$$

h ... skrytá reprezentace



Vícevrstvý perceptron



forward:



$$s^{(1)} \leftarrow W^{(1)}x + b^{(1)}$$
 $h \leftarrow \sigma(s^{(1)})$ $s^{(2)} \leftarrow W^{(2)}h + b^{(2)}$ $q \leftarrow \sigma(s^{(2)})$



$$h \leftarrow \sigma(s^{(1)})$$

$$s^{(2)} \leftarrow W^{(2)}h + b^{(2)}$$



$$\boldsymbol{q} \leftarrow \sigma(\boldsymbol{s}^{(2)})$$

backward:

$$\overline{x} \leftarrow W^{(1)^{\top}} \overline{s^{(1)}}$$

$$\overline{W^{(1)}} \leftarrow \overline{s^{(1)}} h^{\top}$$

$$\overline{b^{(1)}} \leftarrow \overline{s^{(1)}}$$



$$\overline{s^{(1)}} \leftarrow h(1-h)\overline{h} \qquad \overline{h} \leftarrow W^{(2)} \overline{s^{(2)}}$$

$$\overline{W^{(2)}} \leftarrow \overline{s^{(2)}} h^{\top}$$



$$\overline{\boldsymbol{h}} \leftarrow \boldsymbol{W}^{(2)^{\mathsf{T}}} \overline{\boldsymbol{s}^{(2)}}$$

$$\overline{W^{(2)}} \leftarrow \overline{s^{(2)}} h^{\top}$$

$$\overline{\boldsymbol{b}^{(2)}} \leftarrow \overline{\boldsymbol{s}^{(2)}}$$



$$\overline{s^{(2)}} \leftarrow q(1-q)\overline{q} \overline{q}$$



Dvouvrstvý perceptron v numpy na 11 řádků

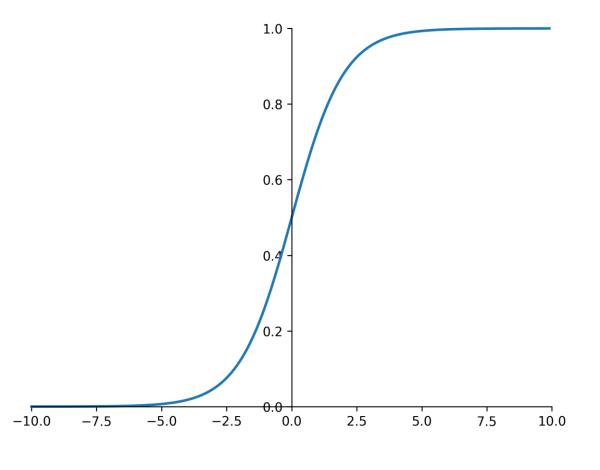
http://iamtrask.github.io/2015/07/12/basic-python-network/

Aktivace

Sigmoid

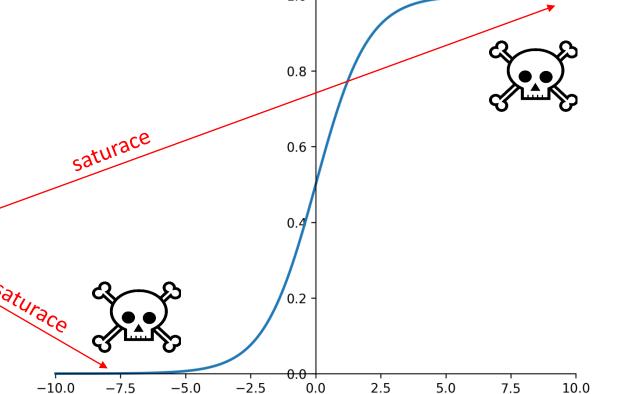
- Před Alexnet prakticky jediná používaná aktivace
- Převádí vstup na pravděpodobnost, tj. do intervalu $\langle 0,1 \rangle$
- Vstup x jsou typicky skóre s z předchozí lineární vrstvy
- Problémy:
 - 1. "mizející" gradient
 - 2. pouze kladné hodnoty
 - 3. exp funkce zbytečně náročná na výpočet

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



Sigmoid

- Před Alexnet prakticky jediná používaná aktivace
- Převádí vstup na pravděpodobnost, tj. do intervalu (0,1)
- Vstup x jsou typicky skóre s z předchozí lineární vrstvy
- Problémy:
 - 1. "mizející" gradient
 - 2. pouze kladné hodnoty
 - 3. exp funkce zbytečně náročná na výpočet



vodorovná tečna = nulová derivace (gradient)

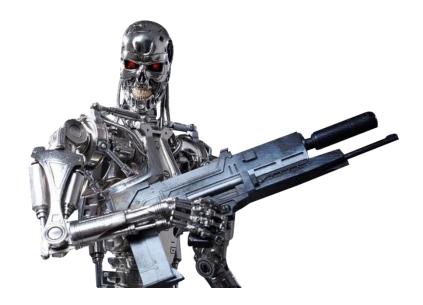
vanishing gradient

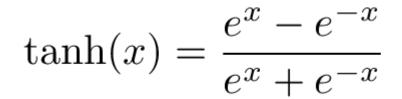
Hyperbolický tangens

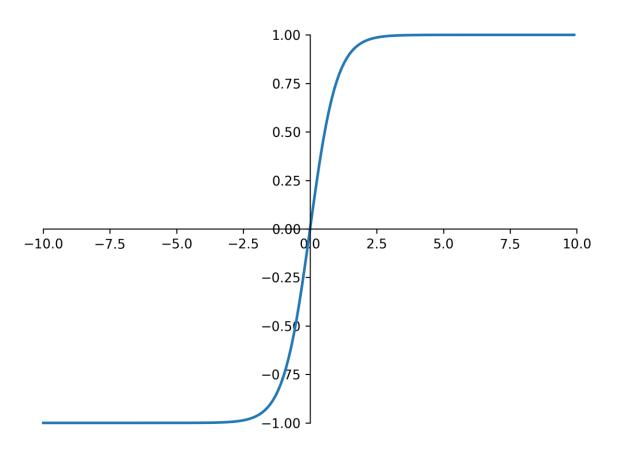
Vlastně jen přeškálovaný sigmoid

$$\tanh(x) = 2 \cdot \sigma(2x) - 1$$

- Pouze tedy vycentruje sigmoid
- Ale stále "zabíjí" gradient



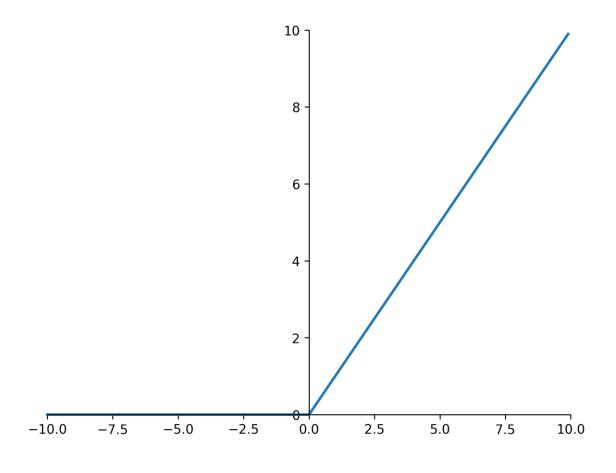




ReLU

- Rectified Linear Unit
- Saturuje pouze v záporu
- Výpočetně nenáročné (bez expů)
- Trénování je mnohem rychlejší než se sigmoid či tanh
- Defaultní volba pro **vnitřní** nelinearity

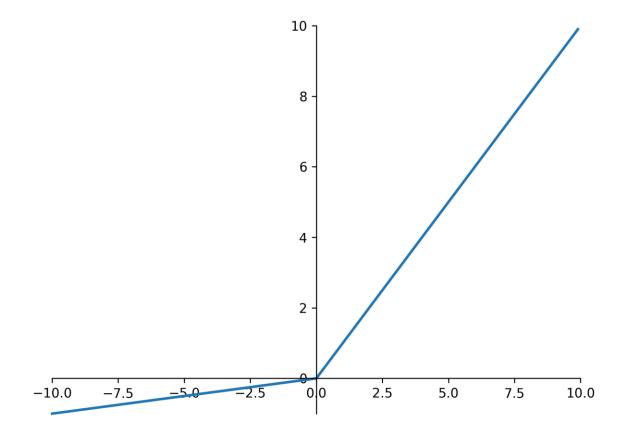
ReLU(x) = max(0, x)



Leaky/Parametric ReLU

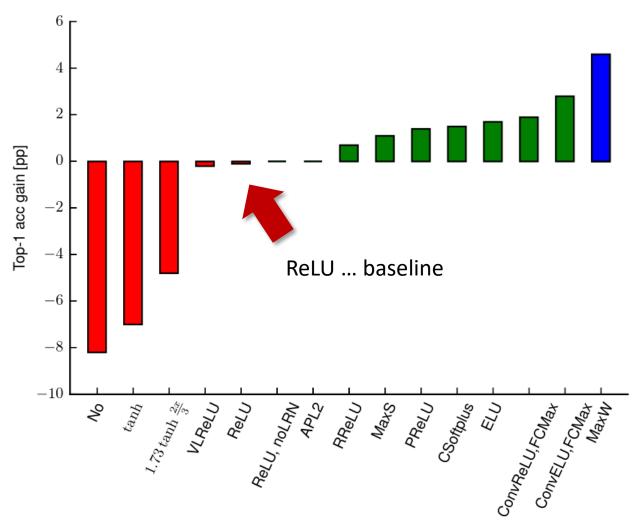
- nemá saturaci -> neumírá gradient
- zachovává rychlost
- Parametr α buď jako
 - konst. (např. 0.01) → Leaky ReLU
 - učitelný parameter -> Parametric ReLU

$PReLU(x) = max(\alpha x, x)$



Další nelinearity

Name	Formula	Year
none	y = x	-
sigmoid	$y = \frac{1}{1 + e^{-x}}$	1986
tanh	$y = \frac{e^{2x} - 1}{e^{2x} + 1}$	1986
ReLU	$y = \max(x, 0)$	2010
(centered) SoftPlus	$y = \ln\left(e^x + 1\right) - \ln 2$	2011
LReLU	$y = max(x, \alpha x), \alpha \approx 0.01$	2011
maxout	$y = \max(W_1 x + b_1, W_2 x + b_2)$	2013
APL	$y = \max(x,0) + \sum_{s=1}^{S} a_i^s \max(0, -x + b_i^s)$	2014
VLReLU	$y = max(x, \alpha x), \alpha \in 0.1, 0.5$	2014
RReLU	$y = max(x, \alpha x), \alpha = random(0.1, 0.5)$	2015
PReLU	$y = max(x, \alpha x), \alpha$ is learnable	2015
ELU	$y = x$, if $x \ge 0$, else $\alpha(e^x - 1)$	2015



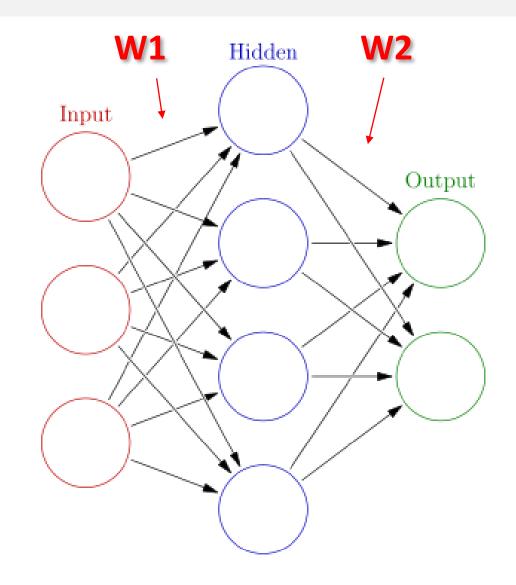
Inicializace

Náhodná inicializace

```
W1 = 0.01 * np.random.randn(3, 4)

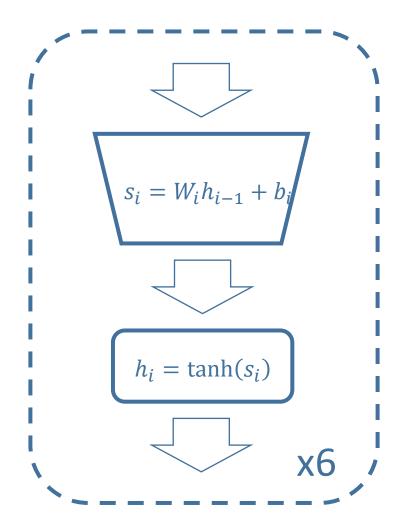
W2 = 0.01 * np.random.randn(4, 2)
```

- Proč náhodně? Proč ne všechno na nuly?
- Potřebujeme narušit symetrii (break the symmetry)
 - Řekněme, že váhy jsou nuly a hidden vrstva používá sigmoid
 - do output pak jdou samé 0.5
 - tzn., že i gradient bude všude téměř stejný
 - <u>chceme opak:</u> aby každý neuron dělal něco jiného

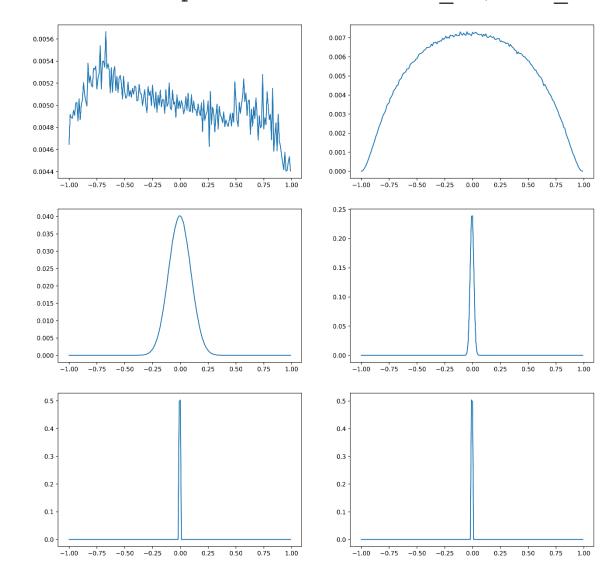


Příliš malé váhy

- 6 vrstev feed forward síť dle obr.
- histogram hodnot skrytých vrstev

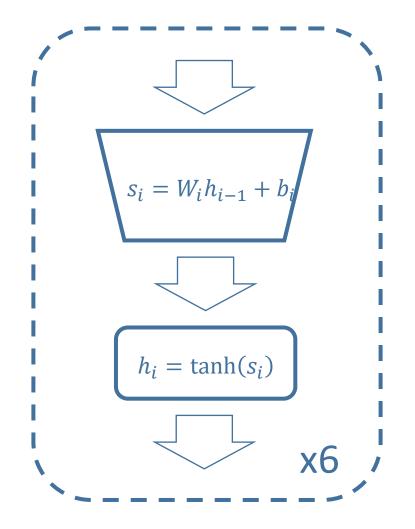


Wi = 0.01 * np.random.randn(fan in, fan out)



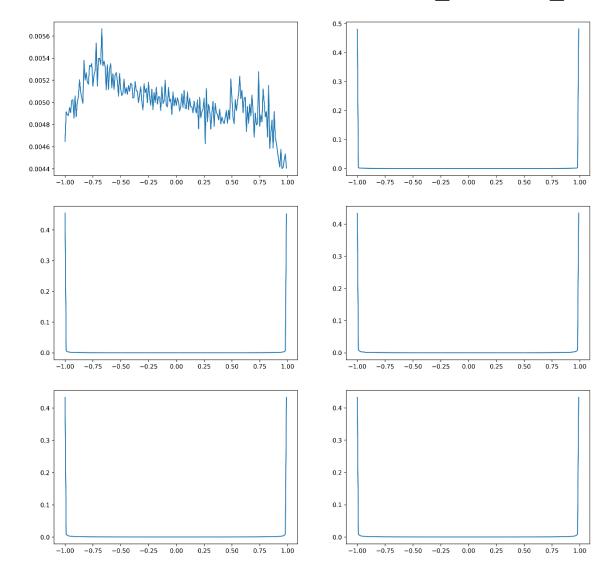
Příliš velké váhy

- 6 vrstev feed forward síť dle obr.
- histogram hodnot skrytých vrstev





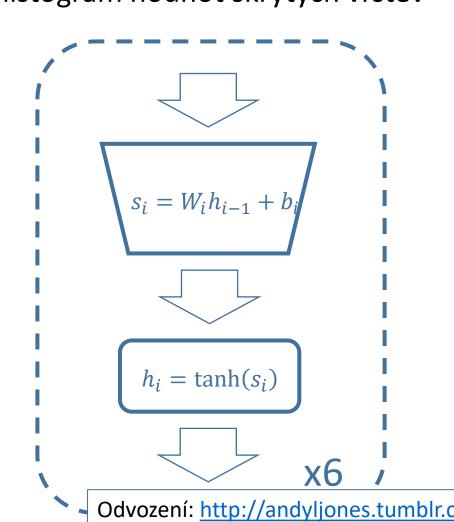
Wi = 1.00 * np.random.randn(fan in, fan out)



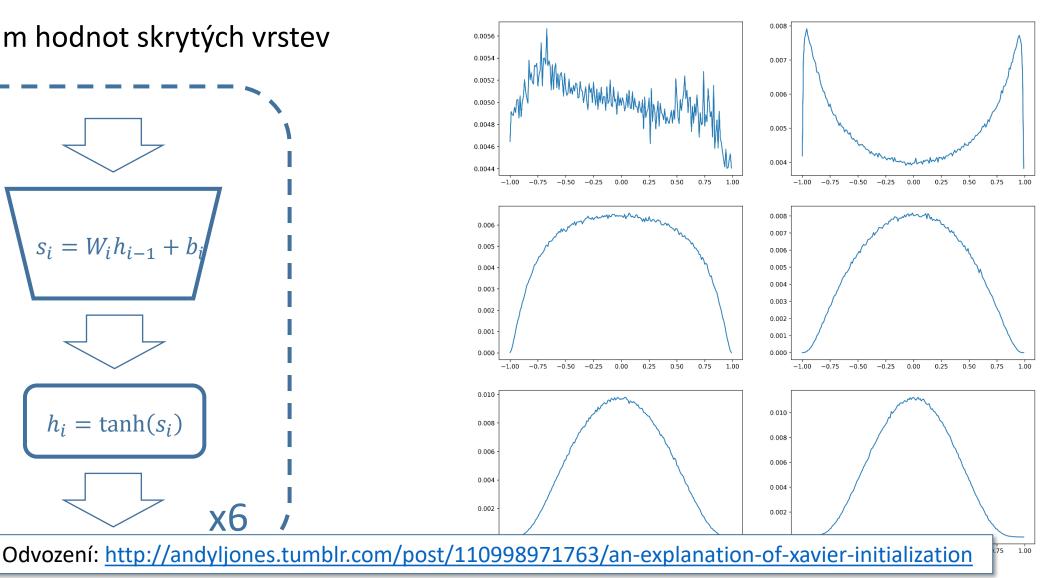
Xavier / Glorot inicializace



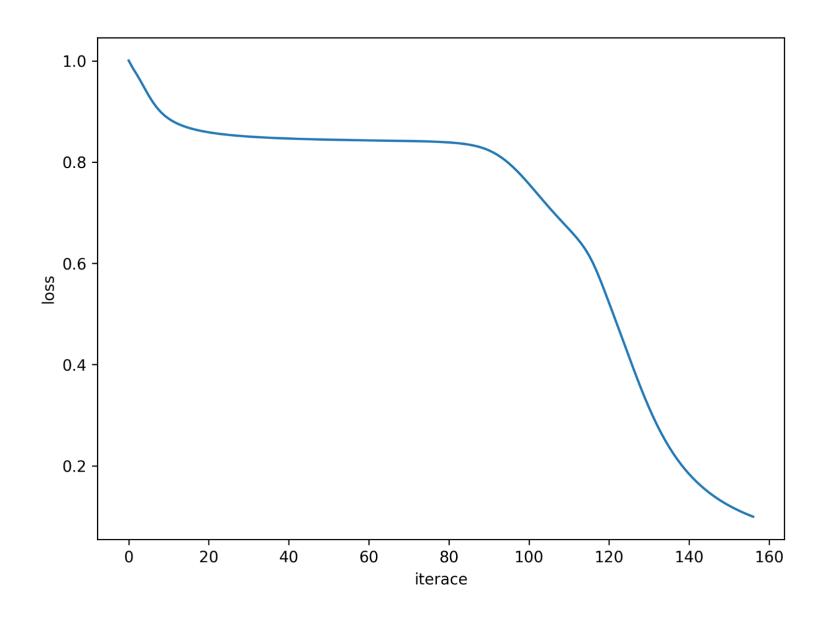
- 6 vrstev feed forward síť dle obr.
- histogram hodnot skrytých vrstev



Wi = np.random.randn(fan_in, fan_out) / np.sqrt(fan_in)



Špatná inicializace



Aktivace & Inicializace

- Nejjednodušší zkusit ReLU \rightarrow když funguje, vyzkoušet její varianty nebo např. SELU
- U ReLU namísto Glorot inicializace vhodnější He:

```
Wi = np.random.randn(fan_in, fan_out) / np.sqrt(fan_in / 2.)
```

- Odvození: http://andyljones.tumblr.com/post/110998971763/an-explanation-of-xavier-initialization
- Co biasy?
 - většinou inicializujeme na nuly: b = np.zeros(fan_out)
 - U ReLU možné malé kladné hodnoty: b = 0.01 * np.ones(fan_out)