

Лекция n1 Основы нейронных сетей

Нестеров Павел

4 декабря 2014 г.

План лекции

Предпосылки

Краткая история теории нейронных сетей

Многоснойная нейронная сеть прямого распространения

Алгоритм обратного распространения ошибки

Что дальше?

Принципиальное отличие

Теория статистического обучения

Линейная и логистическая регрессии, expectation-maximization, naive bayes classifier, random forest, support vectior machine, gradient boosting trees и т.д.

Имитация работы мозга человека

Perceptron, cognitron, self-organizing maps, multi-layer feedforward network, convolution network, Boltzmann machine, deep neural network и τ .д.

С другой стороны

Искусственная нейронная сеть

- алгоритмическая композиция (ансамбль) слабых моделей
- байесова или марковская сеть
- ▶ ???
- ▶ или любое другое обобщение, важны идеи лежащие в основе теории

Нервная система до нейробиологии



Рис.: 17 век, Рене Декарт о нервной системе: «Раздражение ступни передаётся по нервам в мозг, взаимодействует там с духом и таким образом порождает ощущение боли».

Нервная система в современном понимании

▶ В 1906 году врач и гистолог Сантьяго Рамон-и-Кахаль совместно с врачем Камилло Гольджи получают нобелевскую премию за "за работы по структуре нервной системы"; их работы заложили основы нейронной теории нервной системы и современной нейробиологии.

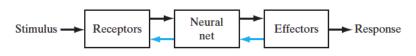
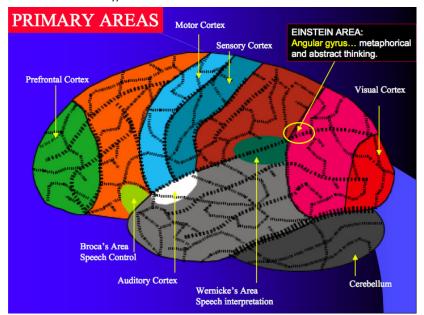


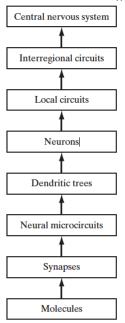
Рис.: Блок-схема нервной системы¹

¹Neural Networks and Learning Machines (3rd Edition), Simon O. Haykin

Мозг человека, #1

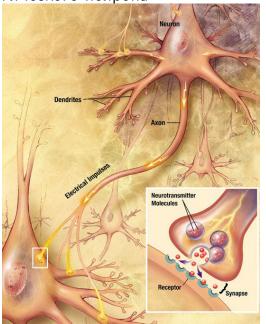


Мозг человека, #2



- ▶ $86 \cdot 10^9$ нейронов в мозге, из них $16.3 \cdot 10^9$ в коре
 - ► CPU: 15-core Xeon IvyBridge-EX 4.3 · 10⁹ транзисторов
 - ► GPU: Nvidia Tesla GK110 Kepler 7.08 · 10⁹ транзисторов
- нейроны (и мозг в целом) обладают нейропластичностью - способностью изменяться под действием опыта;
- мозг комплексная, нелинейная система параллельной обработки данных, способная изменять структуру своих составных частей;
- мозг решает определенный тип задач значительно быстрее чем любой современный компьютер, несмотря на то, что нейрон крайне медленная вычислительная единица.

Схема биологического нейрона



Нейронные ансамбли

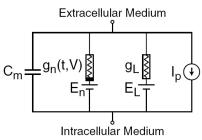
- ▶ Физиолог и нейропсихолог Дональд Хебб разработал теорию взаимосвязи головного мозга и мыслительных процессов в книге "The Organization of Behavior" (1949).
- ► Нейронный ансамбль совокупность нейронов, составляющих функциональную группу в высших отделах мозга.
- Нейроансамбль распределенный способ кодирования информации.
- ▶ Нейрон сам по себе генерирует по мимо сигнала еще и шум, но ансамбль в среднем генерирует чистый сигнал (bagging?).

Нейронная модель Ходжкина-Хаксли, #1

- ▶ Модель Ходжкина—Хаксли (1952 год) математическая модель, описывающая генерацию и распространение потенциалов действия в нейронах².
- ▶ Потенциал действия волна возбуждения, перемещающаяся по мембране живой клетки в процессе передачи нервного сигнала.
- Нобелевская премия по физиологии и медицине "за открытия, касающиеся ионных механизмов возбуждения и торможения в периферических и центральных участках нервных клеток" (1963 год).

²см. приложение Cellmembranion.gif

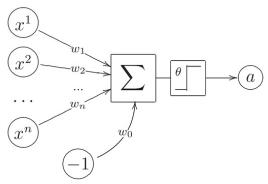
Нейронная модель Ходжкина-Хаксли, #2



Каждому элементу схемы соответствует свой биохимический аналог:

- $ightharpoonup C_m$ электроемкость внутреннего липидного слоя клеточной мембраны;
- g_n потенциал-зависимые ионные каналы отвечают за нелинейную электрическую проводимость;
- $ightharpoonup g_L$ каналы мембранных пор отвечают за пассивную проводимость;
- E_x источники напряжения побуждает ионы к движению через мембранные каналы.

Модель МакКаллока-Питтса (1943 год)



- $a(x) = \theta \left(\sum_{j=1}^{n} w_j \cdot x_i w_0 \right);$
- $m{ ilde{ heta}} \; heta \left(z
 ight) = \left[z \geq 0
 ight] = \left\{ egin{matrix} 0, z < 0 \ 1, z \geq 0 \end{matrix}
 ight. функция Хевисайда; \end{matrix}$
- эквивалентно линейному классификатору.

Данная модель, с незначительными изменениями, актуальна и по сей день.

Правила Хебба (1949)

В своей книге Дональд Хебб описал процесс адаптирования нейронов в мозге в процессе обучения, и сформулировал базовые механизмы нейропластичности:

- 1. если два нейрона по разные стороны от синапсов активируются синхронно, то "вес"синапса слегка возрастает;
- если два нейрона по разные стороны от синапсов активируются асинхронно, то "вес"синапса слегка ослабевает или синапс удаляется³.

Эти правила легли в основу зарождающейся теории нейросетей, сегодня в мы можем увидеть этот мета-алгоритм в основных методах обучения нейронных сетей.

 $^{^{3}}$ это расширенное правило, в оригинале второй части не было

Правила Хебба, математическая формулировка, #1

Допустим у нас имеется набор бинарных векторов размерности n, каждому из которых соответствует бинарный выход y:

- $X = {\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_m}, \forall \vec{x}_i \in {\{0, 1\}}^n$
- $Y = \{y_1, y_2, \dots, y_m\}, \forall y_i \in \{0, 1\}$
- $D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$

Тогда нейрон может совершить два типа ошибок:

- 1. $\hat{y}_i = 0 \land y_i = 1 \Rightarrow$ увеличить веса при тех входах равных 1
- 2. $\hat{y}_i = 1 \land y_i = 0 \Rightarrow$ уменьшить веса при тех входах равных 1

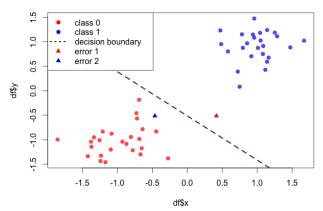
14 / 55

Правила Хебба, математическая формулировка, #2

Тогда нейрон может совершить два типа ошибок:

- $1.~\hat{y_i} = 0 \land y_i = 1 \Rightarrow \mathit{увеличить}$ веса при тех входах равных 1
 - ▶ не преодолели порог ⇒ увеличить скалярное произведение
- 2. $\hat{y}_i = 1 \land y_i = 0 \Rightarrow$ уменьшить веса при тех входах равных 1
 - ▶ перешагнули порог ⇒ уменьшить скалярное произведение

Two types of error

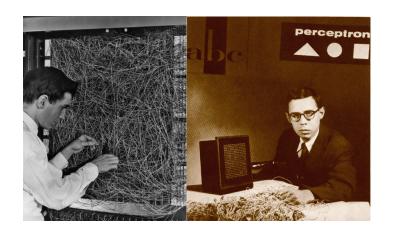


Однослойный персептрон Розенблатта (1958 год)

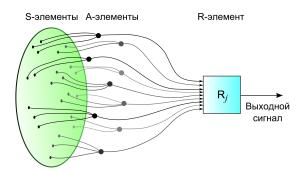
Нейрофизиолог Френк Розенблатт предложил схему устройства, моделирующего процесс человеческого восприятия, и назвал его "персептроном". По мимо этого:

- показал, что персептрон может выполнять базовые логические операции;
- разработал алгоритм обучения такой модели метод коррекции ошибки;
- доказал сходимость алгоритма (теорема сходимости персептрона), но только для линейно разделимых классов;
- реализовал физический прототип такой модели;
- ▶ реализовал первый в мире нейрокомпьютер "MARK-1".

Нейрокомпьютер MARK-1



Элементарный персептрон

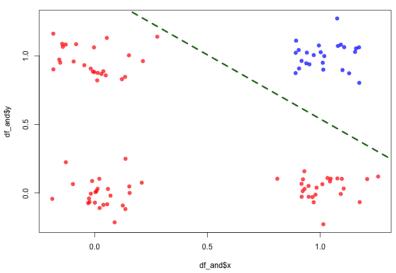


Метод коррекции ошибки

- $\hat{y}_i = 0 \land y_i = 1 \Rightarrow \Delta w = \eta(n) \cdot x(n)$
- $\hat{y}_i = 1 \land y_i = 0 \Rightarrow \Delta w = -\eta(n) \cdot x(n)$
 - $ightharpoonup \eta(n)$ скорость обучения, зависящая от итерации
 - \triangleright x(n) входной образ на итерации n

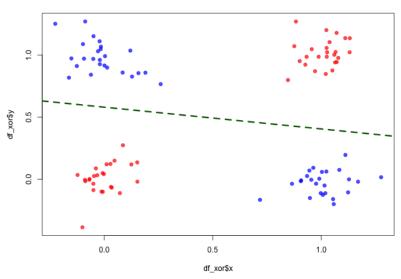
Недостатки элементарного персептрона, AND





Недостатки элементарного персептрона, XOR





Анимация сходимости для операций AND и XOR

- ▶ операция OR 1layer-net-or.gif
- ▶ операция AND 1layer-net-and1.gif
- операция XOR 1layer-net-xor.gif ⁴

 $^{^4}$ http://theclevermachine.wordpress.com/2014/09/11/a-gentle-introduction-to-artificial-neural-networks/

Доказательства неэффективности нейронных сетей

- В 1969 году математик и исследователь ИИ Марвин Минский провел детальный математический анализ персептрона и опубликовал формальное доказательство ограниченности этой модели.
- ▶ "There is no reason to suppose that any of these virtues carry over to the many-layered version. Nevertheless, we consider it to be an important research problem to elucidate (or reject) our intuitive judgement that the extension to multilayer systems is sterile."

 5
- Отсутствие преимуществ + ограничения модели в итоге поубавили интерес научного сообщества к нейронным сетям, требовалось, что то принципиально новое

 $^{^5}$ Персептроны, Марвин Минский в соавторстве с Сеймуром Папертом, МІТ Press. 1969

Период "забвения"

Исследования искусственных нейросетей не спеша продолжаются, но в режиме поиска чего-то нового:

- ▶ 1972: Т. Кохонен разрабатывает новый тип нейросетей, способных функционировать в качестве памяти;
- ▶ 1975-1980: К. Фукусима разрабатывает когнитрон и неокогнитрон, совершенно новый тип многослойной сверточной сети, созданной по аналогии со строением зрительной системы;
- 1982: Дж. Хопфилд разрабатывает новый тип нейросети с обратными связями, выполняющей функции ассоциативной памяти;
- ▶ 1986: Дэвид Румельхарт, **Дж. Хинтон** и Рональд Вильямс разрабатывают *вычислительно эффективный* многослойных нейросетей метод обратного распространения ошибки (именно работа этих авторов возрождает интерес к нейронным сетям в мире).

Теорема универсальной аппроксимации⁶

Введем следующие обозначения:

- $\phi(x)$ не тождественная, ограниченная и монотонно возрастающая функция
- I_n n-мерный единичный гиперкуб
- $ightharpoonup C(I_n)$ множество непрерывных функций на I_n

$$\Rightarrow \forall f \land \forall \epsilon > 0 \exists$$

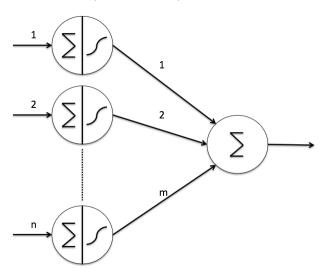
- $ightharpoonup m \in \mathbb{N}$
- $\blacktriangleright \{\beta_i\}_{i=1,\dots,m}, \forall \beta_i \in \mathbb{R}$
- $\{\alpha_i\}_{i=1, m}, \forall \alpha_i \in \mathbb{R}$
- $\qquad \qquad \left\{ w_{ij} \right\}_{j=1...n, j=1...m}, \forall w_{ij} \in \mathbb{R}$

$$|F(x_1,\ldots,x_n)-f(x_1,\ldots,x_n)|<\epsilon$$

Какая архитектура нейросети удовлетворяет такой формулировке?

⁶Neural Networks and Learning Machines (3rd Edition), Simon O. Haykin

Универсальный аппроксиматор



В чем проблема универсального аппроксиматора, исходя из условий теоремы?

Демонстрация сходимости нейросети с одним скрытым слоем

- ▶ операция XOR 2layer-net-xor.gif
- ▶ бинарная классификация 2layer-net-ring.gif
- ▶ аппроксимация функции sin 2layer-net-regression-sine.gif
- ▶ аппроксимация функции abs 2layer-net-regression-abs.gif⁷

 $^{^7}$ http://theclevermachine.wordpress.com/2014/09/11/a-gentle-introduction-to-artificial-neural-networks/

Многоснойная нейронная сеть прямого распространения

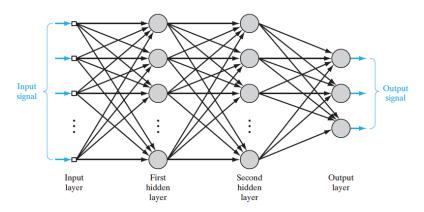


Рис.: Архитектура сети с двумя скрытыми слоями⁸

⁸Neural Networks and Learning Machines (3rd Edition), Simon O. Haykin

Отличие персептрона Румельхарта от персептрона Розенблатта

- Нелинейная функция активации;
- один и более скрытых слоев (до работ Хинтона по ограниченной машине Больцмана, на практике не использовали более двух скрытых слоев, а чаще всего один);
- сигналы на входе и на выходе не обязательно бинарные;
- произвольная архитектура сети (в рамках многослойности);
- ошибка сети интерпретирует в смысле некоторой меры, а не как число неправильных образов в режиме обучения.

Модифицированная модель нейрона МакКаллока-Питтса

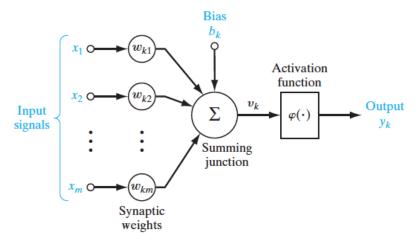


Рис.: Схема искусственного нейрона

⁹Neural Networks and Learning Machines (3rd Edition), Simon O. Haykin

Функция активации

Задача функции активации - ограничить амплитуду выходного значения нейрона; чаще всего для этого используется одна из сигмоидальных (S-образных) функций:

- lacktriangle логистическая функция: $f(z)=rac{1}{1+e^{-a\cdot z}}, orall a\in \mathbb{R}$
- ▶ гиперболический тангенс: $f(z)=rac{e^{a\cdot x}-e^{-a\cdot x}}{e^{a\cdot x}+e^{-a\cdot x}}, orall a\in \mathbb{R}$

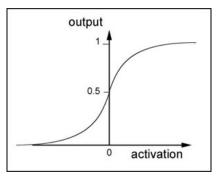


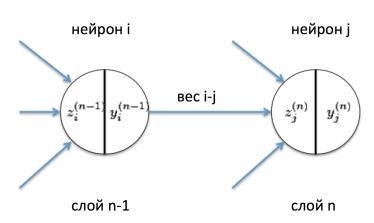
Рис.: Логистический сигмоид

Backprop, обозначения #1

$$z_{j}^{(n)} = b_{j}^{(n)} + \sum_{i=1}^{N_{n-1}} w_{ij}^{(n)} x_{i}^{(n)} = \sum_{i=0}^{N_{n-1}} w_{ij}^{(n)} x_{i}^{(n)}$$

$$y_{k}^{(n)} = f_{k}^{(n)} \left(z_{k}^{(n)} \right)$$
(2)

$$y_k^{(n)} = f_k^{(n)} \left(z_k^{(n)} \right) \tag{2}$$



Backprop, обозначения #2

Обычное обучение с учителем:

- ▶ дан набор данных $D = \left\{ (x_1, t_1), (x_2, t_2), \dots, (x_{|D|}, t_{|D|}) \right\}, x_i \in \mathbb{R}^{N_{\text{INPUT}}}, y_i \in \mathbb{R}^{N_{\text{OUTPUT}}}$
- необходимо построить такое отображение (нейросеть) $f_{\text{NETWORK}}: X \to Y$, которое минимизирует некоторый функционал ошибки $E: \mathbb{R}^{N_{\text{OUTPUT}}} \times \mathbb{R}^{N_{\text{OUTPUT}}} \to \mathbb{R}$, например
 - ▶ Евклидово расстояние для задачи регрессии
 - логарифм функции правдоподобия распределения Бернулли для задачи классификации среди пересекающихся классов
 - кросс-энтропия для задачи классификации среди непересекающихся классов

Градиентный спуск, #1

Алгоритм backprop - это модификация классического градиентного спуска. Параметрами модели являются только веса всех нейронов сети:

$$\delta_{ij}^{(n)} = -\eta \frac{\partial E\left(\vec{y}^{(n)}, \vec{t}\right)}{\partial w_{ij}^{(n)}} \tag{3}$$

- \triangleright η скорость обучения (спуска, learning rate)
- $ightarrow ec{y}^{(n)}$ вектор выходов нейросети (выходы последнего слоя)
- $ightharpoonup ec{t}$ ожидаемые выходы нейросети для текущего примера

Есть идеи?

Градиентный спуск, #2

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(n)}} = \frac{\partial E}{\partial z_j^{(n)}} \frac{\partial z_j^{(n)}}{\partial w_{ij}^{(n)}}$$

$$????$$

Градиентный спуск, #3

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(n)}} = \frac{\partial E}{\partial z_j^{(n)}} \frac{\partial z_j^{(n)}}{\partial w_{ij}^{(n)}}$$

$$\frac{\partial z_j^{(n)}}{\partial w_{ij}^{(n)}} = \sum_i \frac{\partial w_{ij}^{(n)} x_i^{(n-1)}}{\partial w_{ij}^{(n)}} = x_i^{(n-1)}$$

В итоге получим:

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(n)}} = x_i^{(n-1)} \frac{\partial E}{\partial z_j^{(n)}} \tag{4}$$

Градиентный спуск, выходной слой, #1

- ► E(y(z), t) ???

Градиентный спуск, выходной слой, #2

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(n)}} = x_i^{(n-1)} \frac{\partial E}{\partial z_j^{(n)}} = x_i^{(n-1)} \frac{\partial E}{\partial y_j^{(n)}} \frac{\partial y_j^{(n)}}{\partial z_j^{(n)}}$$
(5)

Таким образом при условии дифференцируемости целевой функции и функции активации, вычисление градиента любого из весов выходного слоя становится легко решаемой задачей.

Градиентный спуск, любой скрытый слой, #1

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(n)}} = x_i^{(n-1)} \frac{\partial E}{\partial z_j^{(n)}}
= x_i^{(n-1)} \sum_k \frac{\partial E}{\partial z_k^{(n+1)}} \frac{\partial z_k^{(n+1)}}{\partial z_j^{(n)}}
= x_i^{(n-1)} \sum_k \frac{\partial E}{\partial z_k^{(n+1)}} \frac{\partial z_k^{(n+1)}}{\partial y_j^n} \frac{\partial y_j^n}{\partial z_j^n}$$

Градиентный спуск, любой скрытый слой, #2

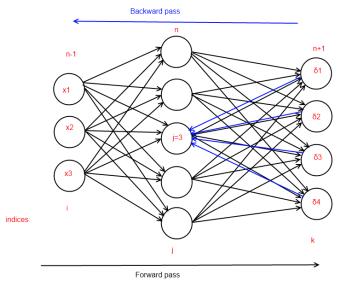


Рис.: Схема прямого (нелинейного) и обратного (линейного) распространения сигнала в сети

Градиентный спуск, любой скрытый слой, #3

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(n)}} = x_i^{(n-1)} \frac{\partial E}{\partial z_j^{(n)}}
= x_i^{(n-1)} \sum_k \frac{\partial E}{\partial z_k^{(n+1)}} \frac{\partial z_k^{(n+1)}}{\partial z_j^{(n)}}
= x_i^{(n-1)} \sum_k \frac{\partial E}{\partial z_k^{(n+1)}} \frac{\partial z_k^{(n+1)}}{\partial y_j^n} \frac{\partial y_j^n}{\partial z_j^n}$$

Градиентный спуск, любой скрытый слой, #4

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(n)}} = x_i^{(n-1)} \frac{\partial E}{\partial z_j^{(n)}}$$

$$= x_i^{(n-1)} \sum_k \frac{\partial E}{\partial z_k^{(n+1)}} \frac{\partial z_k^{(n+1)}}{\partial z_j^{(n)}}$$

$$= x_i^{(n-1)} \sum_k \frac{\partial E}{\partial z_k^{(n+1)}} \frac{\partial z_k^{(n+1)}}{\partial y_j^n} \frac{\partial y_j^n}{z_j^n}$$

$$= x_i^{(n-1)} \sum_k w_{ik}^{(n+1)} \frac{\partial E}{\partial z_k^{(n+1)}} \frac{\partial y_j^n}{\partial z_j^n}$$

Некоторые функции стоимости, #1

Среднеквадратичная ошибка:

- $\blacktriangleright E = \frac{1}{2} \sum_{i \in \text{OUTPUT}} (t_i y_i)^2$

Логарифм правдоподобия Бернулли:

- $\blacktriangleright E = -\sum_{i \in \text{OUTPUT}} (t_i \log y_i + (1 t_i) \log (1 y_i))$

Некоторые функции стоимости, #2

Среднеквадратичная ошибка:

$$\blacktriangleright E = \frac{1}{2} \sum_{i \in \text{OUTPUT}} (t_i - y_i)^2$$

Логарифм правдоподобия Бернулли:

$$\blacktriangleright E = -\sum_{i \in \text{OUTPUT}} (t_i \log y_i + (1 - t_i) \log (1 - y_i))$$

Некоторые функции активации, #1

Логистическая функция:

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

$$ightharpoonup \frac{\partial f}{\partial z}$$
 ???

Гиперболический тангенс:

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

$$ightharpoonup \frac{\partial f}{\partial z}$$
 ???

Некоторые функции активации, #2

Логистическая функция:

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

Гиперболический тангенс:

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

Режимы обучения

- ▶ online learning
- ▶ batch learning
- ▶ full-batch learning

Что это и зачем?

$$E_R = E(\vec{y}, \vec{t}) + R(W)$$

Примеры L1 и L2 регуляризации:

$$\blacktriangleright R_{L1}(W) = \sum_{ijn} \left| w_{ij}^{(n)} \right|$$

$$R_{L2}(W) = \frac{1}{2} \sum_{ijn} \left(w_{ij}^{(n)} \right)^2$$

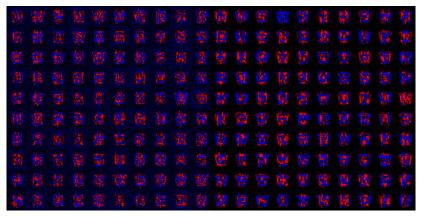
$$\qquad \qquad \frac{\partial R_{L2}(W)}{\partial w_{ii}^{(n)}} ???$$

$$E_R = E(\vec{y}, \vec{t}) + \lambda \cdot R(W)$$

Примеры L1 и L2 регуляризации:

$$R_{L1}(W) = \sum_{ijn} \left| w_{ij}^{(n)} \right|$$

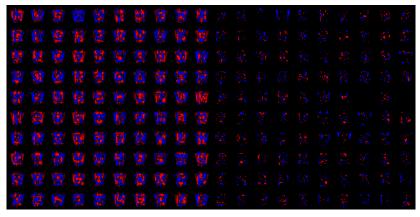
$$R_{L2}(W) = \frac{1}{2} \sum_{ijn} \left(w_{ij}^{(n)} \right)^2$$



(a) RBM, no reg

(b) RBM, L2 reg

Рис.: Иллюстрация эффекта регуляризации



(a) RBM, L2 reg

(b) RBM, L1 reg

Рис.: Иллюстрация эффекта регуляризации

Критерий остановки

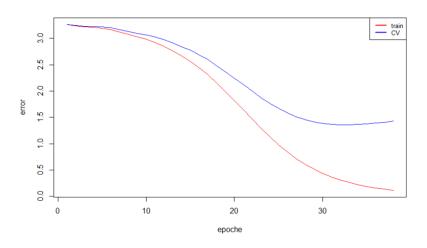


Рис.: Кроссвалидация

Ускорение сходимости

Добавление момента обучения:

$$\Delta w_{ij}(\tau) = \eta \left(\mu \Delta w_{ij} \left(\tau - 1 \right) + \nabla w_{ij} \right) \tag{6}$$

Локальная скорость обучения:

$$\delta_{ij}^{(n)} = -\eta \cdot r_{ij}^{(n)} \cdot (\cdots) \tag{7}$$

$$r_{ij}^{(n)} = \begin{cases} r_{ij}^{(n)} = b + r_{ij}^{(n)}, \nabla w_{ij}^{(n)}(\tau - 1) \cdot \nabla w_{ij}^{(n)}(\tau) > 0 \\ r_{ij}^{(n)} = p \cdot r_{ij}^{(n)} \end{cases}$$
(8)

где

- ▶ b аддитивный бонус
- р мультпликативный штраф
- ▶ b + p = 1
- естьсмысл добавить верхнюю и нижнюю границы для значения $r_{ii}^{(n)}$

Планы

- ▶ softmax слой в сети прямого распространения
- обучение без учителя;
- стохастический нейрон и стохастическая нейросеть;
- ограниченная машина Больцмана.
- глубокие сети

