Машинное обучение в экономике

Нейронные сети

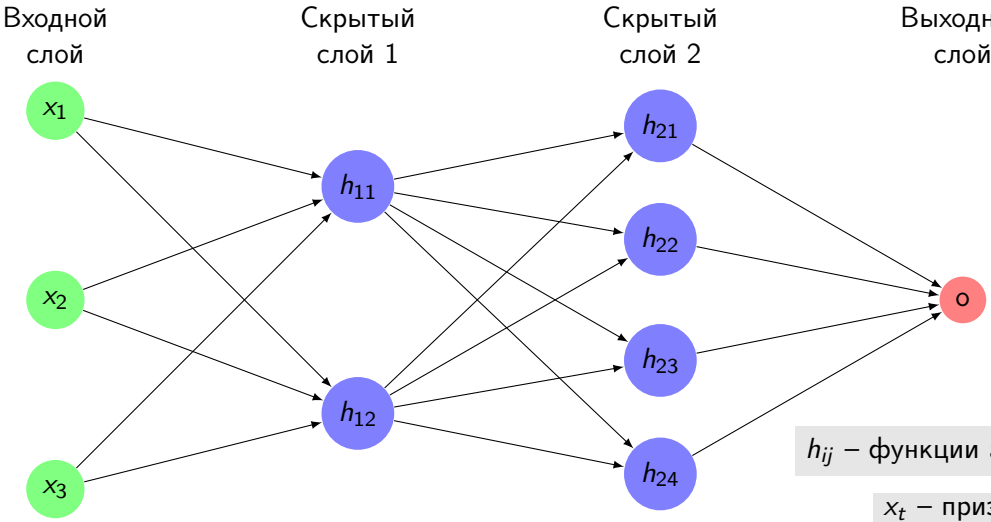
Потанин Богдан Станиславович

доцент, кандидат экономических наук

2024–2025

Нейронная сеть

Графическая репрезентация идеи

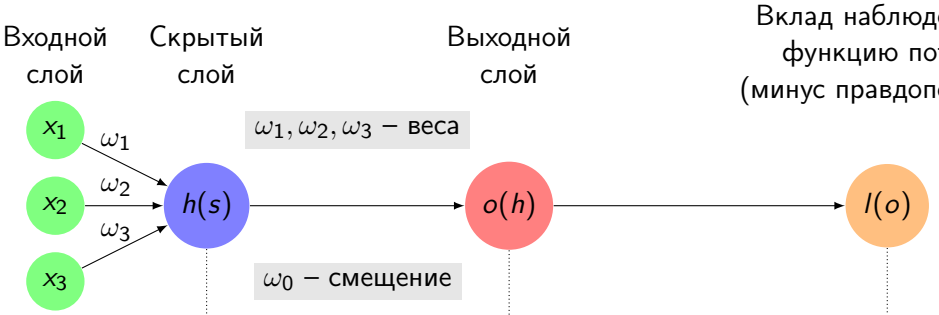


h_{ij} – функции активации

x_t – признак

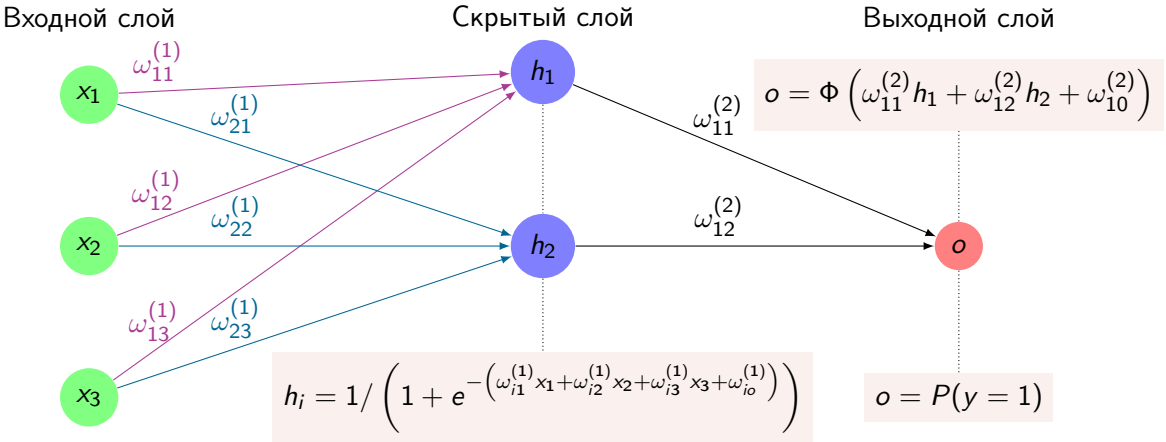
Нейронная сеть

Логистическая регрессия как нейронная сеть



Нейронная сеть

Пример с двумя нейронами в скрытом слое



- Определяется функция потерь. Например, в задаче классификации в качестве функции потерь может выступать умноженная на минус единицу функция правдоподобия. При работе с непрерывными переменными можно рассмотреть сумму квадратов отклонений предсказанных значений от истинных.
- Сперва представим, что веса зафиксированы. В таком случае для получения значения функции потерь достаточно каждое наблюдение провести через нейросеть (от входного слоя до выходного слоя) и воспользоваться полученными значениями (из выходного слоя) для расчета функции потерь. В задаче классификации эти значения, как правило, представляют собой вероятности, а при работе с непрерывными переменными – предсказанные значения целевой переменной.
- Можно воспользоваться любым удобным алгоритмом численной оптимизации, для того чтобы найти веса $\omega^k_{(ij)}$ и смещения $\omega^k_{(i0)}$ нейросети, минимизирующие функцию потерь.
- Число слоев и нейронов, а также функции активации являются гиперпараметрами нейросети.

Функции активации

Общая идея

- Как правило во всех скрытых слоях применяется одна и та же функция активации. Однако, можно использовать разные функции активации даже в рамках одного слоя, а также включать дополнительные оцениваемые параметры этих функций ативации.
- Некоторые популярные функции активации:

$$\text{Сигмоида (логистическая):} \qquad 1/\left(1+e^{-s}\right)$$

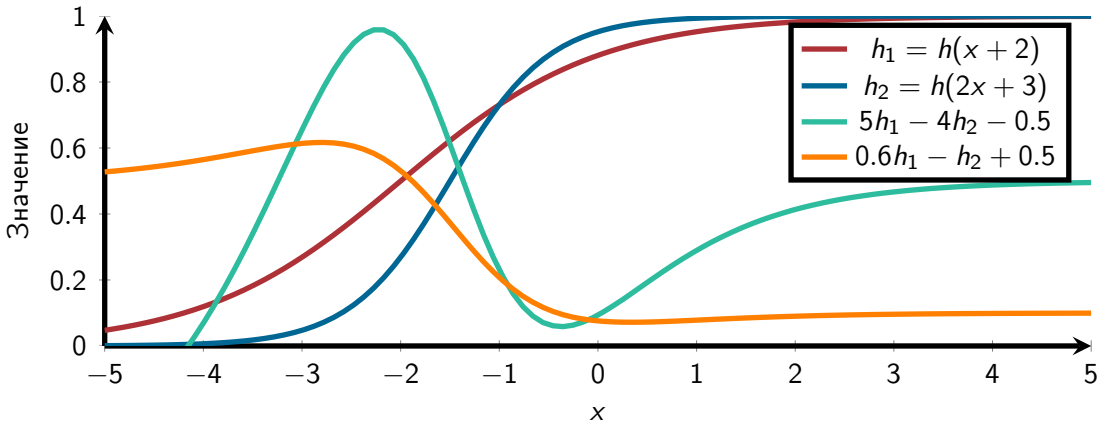
$$\text{ReLU:} \qquad \max(0,s) = 0.5(s+|s|)$$

$$\text{ELU:} \qquad \begin{cases} \alpha\left(e^{s}-1\right), \text{ если } s \leq 0 \\ s, \text{ если } s > 0 \end{cases}$$

- Форма каждой функции активации варьируется достаточно слабо, однако линейные комбинации даже одних и тех же функций могут принимать самые разнообразные формы, благодаря чему и достигается гибкость нейросети.

Функции активации

Графический пример с одним признаком и линейной комбинацией логистических функций активации



Вывод – h_1 и h_2 похожи, но их линейные комбинации могут принимать разнообразные формы, что позволяет аппроксимировать очень сложные зависимости.

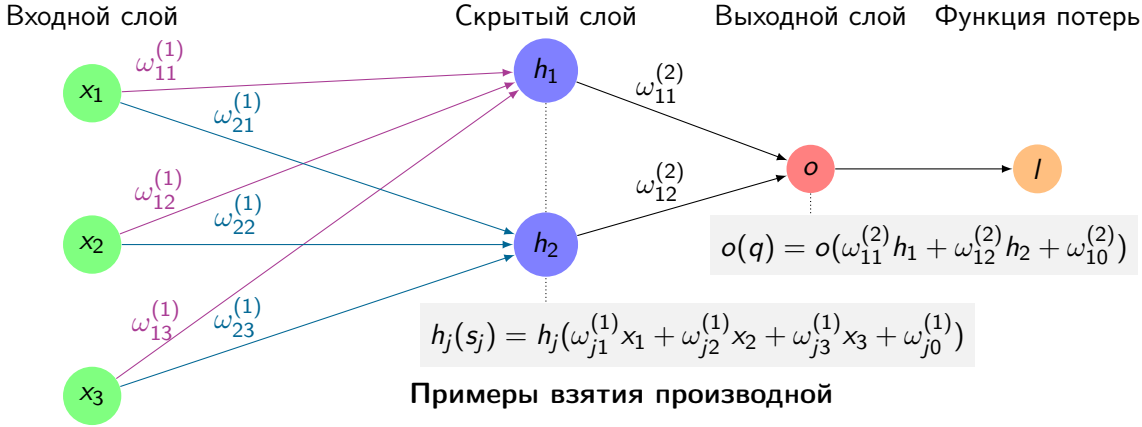
Алгоритм обратного распространения ошибки (backpropagation)

Основная идея

- Для повышения скорости оптимизации нейронных сетей обычно используются методы численной оптимизации, опирающиеся на информацию о градиентне, такие как, например, градиентный спуск и BFGS.
- Численный расчет градиента может привести к существенным потерям в скорости расчетов, поэтому, в качестве альтернативы часто рассматривается аналитический градиент.
- Для расчета градиента по параметрам нейросети (весам и смещению) часто применяется **алгоритм обратного распространения ошибки**. Этот алгоритм сводится к обычному применению дифференцирования по цепочке (chain rule) и его идея легко иллюстрируется графически.
- **Преимущество** - для того, чтобы запрограммировать производную функции потерь по параметру нейросети, достаточно запрограммировать частные производные функций активации, выходного слоя и функции потерь, а затем, с помощью правила цепочки, перемножить эти производные.

Алгоритм обратного распространения ошибки (backpropagation)

Графическая иллюстрация



Примеры взятия производной

$$\frac{\partial l}{\partial \omega_{13}^{(1)}} = \frac{\partial l}{\partial o}\frac{\partial o}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial h_1}\frac{\partial h_1}{\partial s_1}\frac{\partial s_1}{\partial \omega_{13}^{(1)}} = \frac{\partial l}{\partial o}\frac{\partial o}{\partial q}\omega_{11}^{(2)}\frac{\partial h_1}{\partial s_1}x_3$$

$$\frac{\partial l}{\partial \omega_{12}^{(2)}} = \frac{\partial l}{\partial o}\frac{\partial o}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial \omega_{12}^{(2)}} = \frac{\partial l}{\partial o}\frac{\partial o}{\partial q}h_2$$

Модификации градиентного спуска

Стохастический градиентный спуск

- **Проблема** – обычно нейросети обучаются на очень большом числе наблюдений, поэтому численная оптимизация, например, с помощью градиентного спуска, оказывается очень времязатратной.
- **Решение** – воспользоваться **стохастическим градиентным спуском**.
- Обратим внимание, что во многих оптимизационных задачах функция потерь может быть представлена в аддитивном по наблюдениям виде:

$$\mathrm{L}\left(Y, F(X;\theta)\right) = \sum_{i=1}^{n} \mathrm{L}\left(Y_i, F(X_i;\theta)\right)$$

- В частности, в нейросети параметры θ будут отражать веса w (включая смещение - константу), а функция $F(X_i, \theta)$ – выходное (output) значение для i-го наблюдения.
- Стохастический градиентный спуск (SGD) отличается от обычного градиентно спуска (GD) лишь тем, что значение параметра на k-й итерации алгоритма $\theta^{(k)}$ рассчитывается не по всем наблюдениям, а по каждому наблюдению поорчедено:

$$\textbf{SGD: } \theta^{(k+1)} = \theta^{(k)} - \alpha \nabla \mathrm{L}\left(Y_i, F(X_i;\theta^{(k)})\right) \qquad \text{вместо} \qquad \textbf{GD: } \theta^{(k+1)} = \theta^{(k)} - \alpha \nabla \mathrm{L}\left(Y, F(X;\theta^{(k)})\right)$$

- После того, как были перебраны все наблюдения, они сортируются в случайном порядке и алгоритм повторяется, что позволяет избежать зацикливания.

- **Проблема** – стохастический градиентный спуск аппроксимирует градиент всей функции с помощью одного наблюдения, что может приводить к большим погрешностям и, как следствие, к тому, что на некоторых итерация функция будет не уменьшаться, а увеличиваться.
- **Решение** – повысить точность аппроксимации наблюдений за счет использования не одного, а группы наблюдений.
- Выборка делится на m выборок приблизительно равного размера. Эти подвыборки именуются **мини-пакетами** (mini-batch).
- Например, выборка из 1000 наблюдений может быть разделена на $m = 10$ мини-пакетов по 100 наблюдений в каждом.
- **Мини-пакетный градиентный спуск** (MBGD) рассчитывает значение параметра на k-й итерации алгоритма $\theta^{(k)}$ по выборке из мини-пакетов:

$$\theta^{(k+1)} = \theta^{(k)} - \alpha \nabla \mathsf{L}\left(Y^{(b)}, F(X^{(b)}; \theta^{(k)})\right)$$

  Где $Y^{(b)}$ и $X^{(b)}$ отражают мини-пакет $b \in \{1, ..., m\}$.
- После того, как были использованы все мини-пакеты, перед продолжением алгоритма они сортируются в случайном порядке во избежание зацикливания.

- **Проблема** - поскольку нейронные сети очень хорошо аппроксимируют данные, то они склонны к переобучению.
- **Решение** - воспользоваться регуляризацией.
- **Штрафы** - можно накладывать штрафы на большие значения параметров нейросети, например, с помощью лассо или ридж регуляризации. В частности, при лассо регуляризации наименее важные веса могут обнуляться.
- **Ранняя остановка** - вместо того, чтобы искать минимум функции потерь, можно прекратить алгоритм численной оптимизации до нахождения точного решения, что снижает степень подгонки под данные и благодаря этому иногда воспрепятствует переобучению.
- **Зашумление** - можно добавить некоторую случайную компоненту в данные или в градиент.

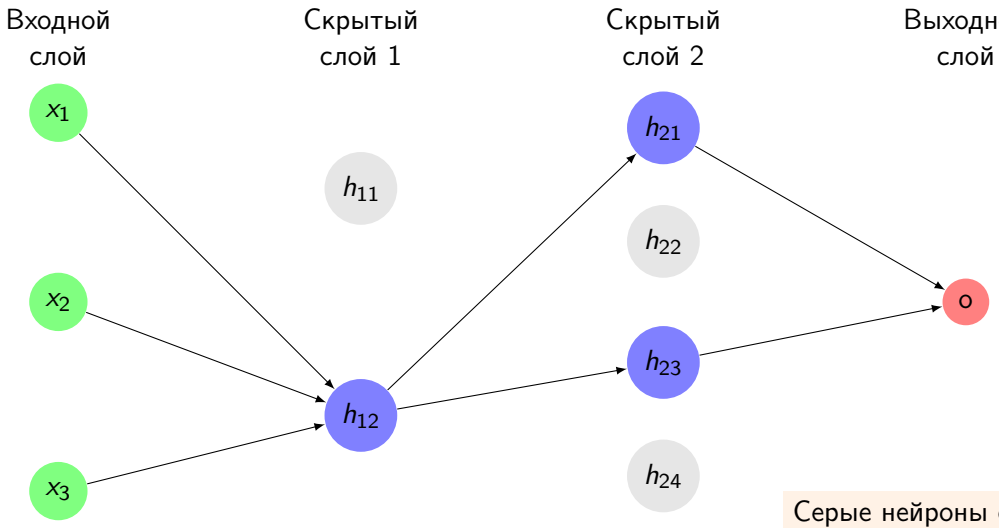
Исключение (dropout / dilution)

Основная идея

- **Исключение** (dropout / dilution) - модификация методов численной оптимизации параметров нейросети, при которой на каждой итерации алгоритма случайным образом исключаются некоторые из нейронов.
- Обычно эта техника используются вместе с мини-пакетным градиентным спуском, где значение и градиент функции потерь для каждого мини-пакета рассчитывается не по исходной, а по **утонченной нейросети**.
- **Утонченная нейросеть** (thinned network) обладает теми же параметрами (весами), что и исходная. Однако, каждый нейрон исходной нейросети входит в утонченную сеть лишь с некоторой вероятностью p, которая в самом простом случае одинакова для всех нейронов.
- Исключение нейрона равносильно **временному** обнулению входящих и исходящих из него весов.
- Каждый раз, в том числе при повторном использовании мини-пакета, для него генерируется новая утонченная нейросеть, с использованием которой рассчитывается градиент функции потерь для очередного шага мини-пакетного градиентного спуска.
- Для прогнозирования обычно используется исходная нейросеть с весами, обученными мини-пакетным градиентным спусктом с исключением и домноженными на вероятность p.

Исключение (dropout / dilution)

Утонченная нейронная сеть



Серые нейроны отключены

Исключение (dropout / dilution)

Алгоритм

- Рассмотрим k-ю итерацию типичного алгоритма обучения параметров нейросети с помощью мини-пакетного градиентного спуска с исключением.
- **Шаг 1**. Генерируется утонченная нейросеть за счет того, что каждый из нейронов исключается с вероятностью $1 - p$.
- **Шаг 2**. Обновляются значения параметров нейросети w с использованием мини-пакета $(X^{(b)}, Y(b))$ и утонченной нейросети F_k, в которой используются лишь те из весов предыдущего шага алгоритма $w^{(k)}$, которые относятся к неисключенным нейронам.

$$w^{(k+1)} = w^{(k)} - \alpha \nabla \mathrm{L}\left(Y^{(b)}, F_k(X^{(b)}; w^{(k)})\right)$$

Примечание - очевидно, что градиент функции потерь по исключенным весам равняется нулю.

- При прогнозировании вместо обученных весов w обычно используется их скорректированная на вероятность исключения нейрона версия pw.
- **Обратное исключение** – каждую итерацию обучения вместо $F_k(X^{(b)}; w^{(k)})$ используется $F_k(X^{(b)}; w^{(k)}/p)$, а при прогнозировании обычные обученные веса w, что иногда снижает вычислительную нагрузку.
- **Интиуиция** – деление $w^{(k)}/p$ позволяет сохранить ожидаемые значения линейных комбинаций и поэтому помогает избежать проблем с изменениями размерности вследствие исключения нейронов.

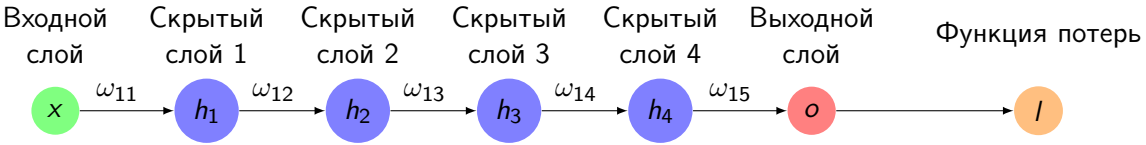
Исключение (dropout / dilution)

Технические рекомендации

- Рекомендуется использовать достаточно большую скорость обучения α, примерно в $10 - 100$ раз больше, чем при обычном (без исключения) обучении нейросети.
- Для того, чтобы избежать чрезмерно больших значений весов при большом значении скорости обучения α, рекомендуется устанавливать ограничение на L2-норму $||W||_2 \leq c$, где c выступает в качестве гиперпараметра, обычно принимающего значения в интервале $(3, 4)$.
- Если в одном из скрытых слоев отключены все нейроны, то из него передается только константа.
- Вероятность p рекомендуется брать из интервала $(0.5, 0.8)$ и делать ее тем большей, чем меньше общее число нейронов в нейросети.

Проблема затухающих и взрывающихся градиентов

Иллюстрация на простом примере с одним признаком



$$s_j = \begin{cases} \omega_{11} x + \omega_{01}, \text{ если } j = 1 \\ \omega_{1j} h_{j-1} + \omega_{0j}, \text{ если } j > 1 \end{cases}$$

$$\frac{\partial l}{\partial \omega_{11}} = \frac{\partial l}{\partial o} \frac{\partial o}{\partial s_5} \frac{\partial s_5}{\partial h_4} \frac{\partial h_4}{\partial s_4} \frac{\partial s_4}{\partial h_3} \frac{\partial h_3}{\partial s_3} \frac{\partial s_3}{\partial h_2} \frac{\partial h_2}{\partial s_2} \frac{\partial s_2}{\partial h_1} \frac{\partial h_1}{\partial s_1} \frac{\partial s_1}{\partial \omega_{11}} = \frac{\partial l}{\partial o} \frac{\partial o}{\partial s_5} \omega_{15} \frac{\partial h_4}{\partial s_4} \omega_{14} \frac{\partial h_3}{\partial s_3} \omega_{13} \frac{\partial h_2}{\partial s_2} \omega_{12} \frac{\partial h_1}{\partial s_1} x$$

Интуиция – если произведения $(\partial h_j / \partial s_j)\,\omega_{1j}$, как правило, оказываются по модулю меньше (больше) единицы, то возникает **проблема затухающих (взрывающихся) градиентов**: при большом числе скрытых слоев производные весов быстро приближаются к нулю (большим значениям). Из-за этого при использовании методов численной оптимизации, опирающихся на информацию о градиенте, например, градиентного спуска, скорость обучения весов в первых (последних) слоях окажется гораздо ниже. Эта неравномерность в скорости обучения, в частности, серьезно повышает время численной оптимизации.

Проблема затухающих и взрывающихся градиентов

Решение с помощью использования специальных функций активации

- Проблема затухающих градиентов чаще встречается при использовании определенный функций активации, таких как, например, сигмоида, производная которой имеет вид:

$$h(t) = \frac{1}{1+e^{-t}} \implies h'(t) = \frac{e^{-t}}{(1+e^{-t})^2} \in (0, 0.25)$$

- **Проблема** – производная сигмоидной функции активации принимает значения меньше 0.25 и достаточно быстро убывает, в частности, при аргументах $|t| > 3$ оказывается меньше 0.05, что благоприятствует затуханию градиентов.
- **Решение** – воспользоваться альтернативными функциями активации, такими как, например, ReLU (rectified linear unit), производная которой принимает два значения:

$$h(t) = \max(0, t) \implies h'(t) = \begin{cases} 1, \text{ если } t > 0 \\ \text{не определена, но берут 0 или 1, если } t = 0 \\ 0, \text{ если } t < 0 \end{cases}$$

- **Проблема** – если производная нейрона равняется нулю при всех возможных значениях признаков в выборке x_i,то он умирает в том смысле, что связанные с ним веса перестают обучаться.
- **Решение** – заменить ReLU на ELU, чьи производные могут быть очень малы, но не равняются нулю.

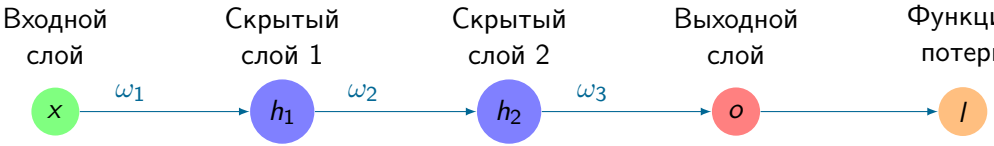
Пакетная нормализация (batch normalization)

Краткое описание

- Для того, чтобы повысить стабильность вычислений в нейронной сети, рекомендуется **нормализовать** данные (к нулевому выборочному среднему и единичной выборочной дисперсии) входного слоя, то есть признаки.
- **Проблема внутреннего ковариатного сдвига** – даже если данные входного слоя нормализированы, распределение значений скрытых слоев может существенно разниться и изменяться вместе с весами нейронной сети по мере численной оптимизации. В частности, это может приводить к проблеме затухающих и взрывающихся градиентов.
- **Решение** – использовать **пакетную нормализацию**, основная идея которой заключается в нормализации данных каждого скрытого слоя. При использовании мини-пакетного градиентно спуска для этого используются выборочное среднее и выборочная дисперсия данных слоя, рассчитанные лишь с использованием мини-пакета.
- Вследствие нормализации теряется часть полезной информации, с целью сохранения возможности восстановления которой нормализованные данные h_{kt}, относящиеся к t-й функции активации k-го слоя, перед передачей в следующий слой преобразуются как $h^*_{kt} = \tau_{1kt} \times h_{kt} + \tau_{0kt}$, где τ_{1kt} и τ_{0kt} обучаются вместе с весами.

Нейросети в матричном виде

Формулировка



- Часто нейронные сети удобно мыслить в матричном виде:

$$x = \begin{bmatrix} x_{11} & \dots & x_{1m_0} \\ x_{21} & \dots & x_{2m_0} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & \dots & x_{nm_0} \end{bmatrix} \quad \omega_j = \begin{bmatrix} \omega_{j11} & \dots & \omega_{j1m_{(j-1)}} \\ \omega_{j21} & \dots & \omega_{j2m_{(j-1)}} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \omega_{jm_j1} & \dots & \omega_{jm_jm_{(j-1)}} \end{bmatrix} \quad b_j = \begin{bmatrix} b_{j1} & \dots & b_{jm_j} \\ b_{j1} & \dots & b_{jm_j} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ b_{j1} & \dots & b_{jm_j} \end{bmatrix} \quad o = \begin{bmatrix} o_1 \\ o_2 \\ \vdots \\ o_n \end{bmatrix} \quad l = \begin{bmatrix} l_1 \\ l_2 \\ \vdots \\ l_n \end{bmatrix}$$

$$h_1 = a_1(x\omega_1^T + b_1) \qquad h_2 = a_2(h_1\omega_2^T + b_2) \qquad o = g(h_2\omega_3^T + b_3) \qquad \mathrm{L}(y, o) = \sum_{i=1}^{n} l_i = \sum_{i=1}^{n} \mathrm{L}(y_i, o_i)$$

- **Важно** – в данном случае h_j обозначет не один нейрон, а вектор (сразу несколько) нейронов.
- Функции активации $\alpha_1(.), \alpha_2(.)$ и функция $g(.)$ берутся **поэлементно** от соответствующих матриц.
- Число нейронов в скрытом слое j обозначается m_j, а через b_{jk} обозначается относящаяся к его k-й линейной комбинации константа (смещение). Через m_0 обозначается число признаков.

Нейросети в матричном виде

Численный пример расчета

- Рассмотрим случай с двумя признаками, тремя наблюдениями, без смещений (констант), с тремя нейронами в первом скрытом слое и двумя нейронами во втором скрытом слое:

$$x = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} \qquad y = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \omega_1 = \begin{bmatrix} -0.1 & 0.2 \\ 0.3 & -0.4 \\ -0.5 & 0.6 \end{bmatrix} \qquad \omega_2 = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.8 & 0.9 \\ 1 & 1.1 & 1.2 \end{bmatrix} \qquad \omega_3 = \begin{bmatrix} 1.3 & -1.4 \end{bmatrix}$$

- Предположим следующие функции активации:

$$\alpha_1(s) = \frac{e^s - e^{-s}}{e^s + e^{-s}} \qquad \alpha_2(s) = \max(0, s) \qquad g(s) = \frac{1}{1 + e^{-s}}$$

- По результатам расчетов получаем значения нейронов и выходного слоя:

$$h_1 \approx \begin{bmatrix} 0.29 & -0.46 & 0.6 \\ 0.46 & -0.6 & 0.72 \\ 0.6 & -0.72 & 0.8 \end{bmatrix} \qquad h_2 \approx \begin{bmatrix} 0.38 & 0.51 \\ 0.48 & 0.66 \\ 0.57 & 0.78 \end{bmatrix} \qquad o \approx \begin{bmatrix} 0.45 \\ 0.43 \\ 0.41 \end{bmatrix}$$

- Если функция потерь является логистической, то ее значение при соответствующих весах будет:

$$l_i = -y_i \ln(o_i) - (1 - y_i) \ln(1 - o_i) \implies l \approx \begin{bmatrix} 0.81 \\ 0.56 \\ 0.88 \end{bmatrix} \implies \mathrm{L}(y, o) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} l_i \approx \frac{0.81 + 0.56 + 0.88}{3} = 0.75$$

Нейросети в матричном виде

Обучение – поворение основных идей с матричными обозначениями

- Для удобства введем общее обозначение для вектора всех параметров нейросети:

$$W = (\text{vec}(w_1), \text{vec}(w_2), ..., \text{vec}(w_{n_h}), b_{11}, \ldots, b_{n_h m_h})$$

Через n_h обозначается количество слоев. Функция vec(.) превращает матрицу в вектор, раскладывая ее по столбцам. В частности, в предыдущем примере:

$$\text{vec}\,(\omega_1) = (-0.1, 0.3, -0.5, 0.2, -0.4, 0.6)$$

- Напомним, что итоговый градиент можно посчитать методом обратного распространения ошибки. Для этого удобно использовать формулы матричного дифференцирования, например, по $\text{vec}(w_j)$. Однако, частные производные можно считать и отдельно по каждому параметру:

$$\nabla \mathsf{L} = \left(\frac{\partial \mathsf{L}}{\partial W_1}, ..., \frac{\partial \mathsf{L}}{\partial W_N} \right) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial l_i}{\partial W_1}, ..., \frac{\partial l_i}{\partial W_N} \right)$$

Где N - общее число параметров нейросети.

- Напомним, что обучение весов происходит с помощью численной оптимизации, например, в случае применения обычного градиентного спуска со скорость обучения α каждая итерация выглядит как:

$$W^{\text{new}} = W^{\text{old}} - \alpha \nabla \mathsf{L}(y, F(x; W^{\text{old}}))$$