Réseaux de neurones

IFT 780

Réseaux de neurones multicouches

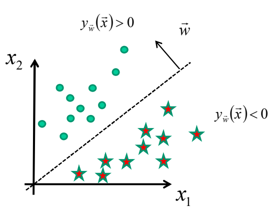
Par

Pierre-Marc Jodoin

1

Séparation linéaire

(2D et 2 classes)



biais **poids**

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2$$
$$= w_0 + \vec{w}^T \vec{x}$$
$$= \vec{w}'^T \vec{x}'$$

$$\boxed{y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{x}}$$

Par simplicité

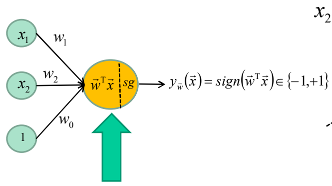
2 grands **avantages**. Une fois l'entraînement terminé,

1. Plus besoin de données d'entraînement
2. Classification est très rapide (**produit scalaire** entre 2 vecteurs)

2

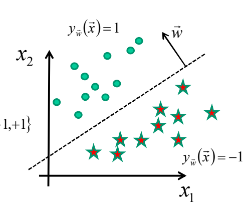
Perceptron

(2D et 2 classes)



Neurone

Produit scalaire + fonction d'activation



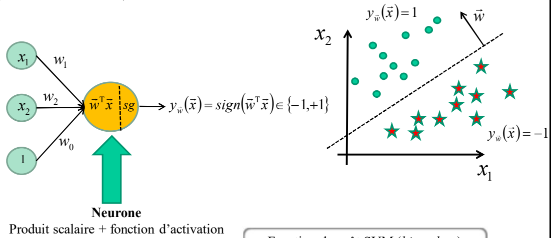
Fonction de coût perceptron (loss) et gradient

$$E_D(\vec{w}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{x}_n \in M} -t_n \vec{w}^T \vec{x}$$ où M est l'ensemble des données mal classées

$$\nabla E_D(\vec{w}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{x}_n \in M} -t_n \vec{x}_n$$

3

Hinge Loss
(2D et 2 classes)



Fonction de coût SVM (*hinge loss*) et gradient

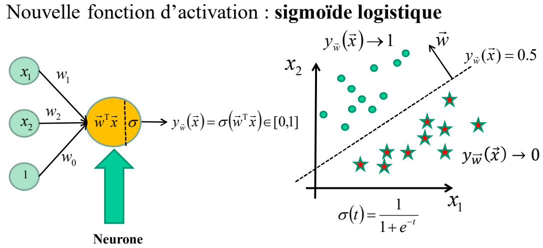
$$E_D(\vec{w}) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \max(0, 1 - t_n \vec{w}^T \vec{x})$$

$$\nabla E_D(\vec{w}) = \frac{1}{N}\sum_{\vec{x}_n \in M} -t_n \vec{x}_n$$

4

Régression logistique
(2D, 2 classes)

Nouvelle fonction d'activation : **sigmoïde logistique**



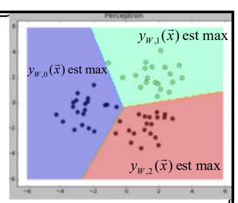
Fonction de coût (*loss*) et gradient

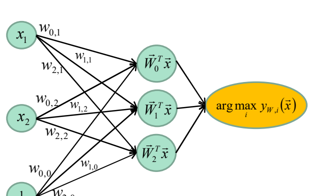
$$E_D(\vec{W}) = -\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} t_n \ln(y_W(\vec{x}_n)) + (1-t_n)\ln(1-y_W(\vec{x}_n))$$

$$\nabla E_D(\vec{W}) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(y_W(\vec{x}_n) - t_n)\,\vec{x}_n$$

5

Perceptron Multiclasse
(2D et 3 classes)





$$y_W(\vec{x}) = W^{\mathrm{T}}\vec{x}$$

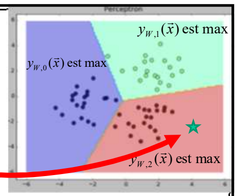
$$y_W(\vec{x}) = \begin{bmatrix} w_{0,0} & w_{0,1} & w_{0,2} \\ w_{1,0} & w_{1,1} & w_{1,2} \\ w_{2,0} & w_{2,1} & w_{2,2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

6

Perceptron Multiclasse

Exemple

(1.1, -2.0)



$$y_W(\vec{x}) = \begin{bmatrix} -2 & -3.6 & 0.5 \\ -4 & 2.4 & 4.1 \\ -6 & 4 & -4.9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1.1 \\ -2 \end{bmatrix} = \begin{array}{cl} \begin{bmatrix} -6.9 \\ -9.6 \\ 8.2 \end{bmatrix} & \begin{array}{l} \text{Classe 0} \\ \text{Classe 1} \\ \text{Classe 2} \end{array} \end{array}$$

7

Perceptron Multiclasse

Fonction de coût (***Perceptron loss – One-VS-One***)

$$E_D(W) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{x}_n \in M} \left(\vec{W}_j^T \vec{x}_n - \vec{W}_{t_n}^T \vec{x}_n \right)$$

Somme sur l'ensemble des données mal classées

Score de la bonne classe

Score de la classe faussement prédite par le modèle

8

Perceptron Multiclasse

Fonction de coût (***Perceptron loss – One-VS-One***)

$$E_D(W) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{x}_n \in M} \underbrace{\left(\vec{W}_j^T \vec{x}_n - \vec{W}_{t_n}^T \vec{x}_n \right)}_{E_{\vec{x}_n}}$$

$$\nabla_{W_j} E_{\vec{x}_n} = \vec{x}_n$$

$$\nabla_{W_{t_n}} E_{\vec{x}_n} = -\vec{x}_n$$

$$\nabla_{W_i} E_{\vec{x}_n} = 0 \quad \forall i \neq j \text{ et } t_n$$

9

Perceptron Multiclasse one-vs-one

Descente de gradient stochastique (version naïve, batch_size = 1)

Initialiser **W**
k=0, i=0
DO k=k+1
  FOR n = 1 to N
    $j = \arg\max \mathrm{W}^T \vec{x}_n$
    IF $j \neq t_i$ THEN /* donnée mal classée*/
      $\vec{w}_j = \vec{w}_j - \eta \vec{x}_n$
      $\vec{w}_{t_n} = \vec{w}_{t_n} + \eta \vec{x}_n$
UNTIL toutes les données sont bien classées.

10

Perceptron Multiclasse one-vs-one

Exemple d'entraînement ($\eta=1$)

$\vec{x}_n = (0.4, -1), t_n = 1$

$$y_W(\vec{x}) = \begin{bmatrix} -2 & 3.6 & 0.5 \\ -4 & 2.4 & 4.1 \\ -6 & 4 & -4.9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0.4 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.6 \\ -7.1 \\ 0.5 \end{bmatrix} \begin{array}{l} \text{Classe 0} \\ \text{Classe 1} \\ \text{Classe 2} \end{array}$$

FAUX!

11

11

Perceptron Multiclasse

Exemple d'entraînement ($\eta=1$)

$$\vec{x}_n = (0.4, -1.0), t_n = 0$$

$$\vec{w}_0 \leftarrow \vec{w}_0 + \vec{x}_n \qquad \begin{bmatrix} -2.0 \\ 3.6 \\ 0.5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 0.4 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.0 \\ 4.0 \\ -0.5 \end{bmatrix}$$

$$\vec{w}_2 \leftarrow \vec{w}_2 - \vec{x}_n \qquad \begin{bmatrix} -6.0 \\ 4.0 \\ -4.9 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ 0.4 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -7.0 \\ 3.6 \\ -3.9 \end{bmatrix}$$

12

12

Hinge Multiclasse

Fonction de coût (***Hinge loss*** ou ***SVM loss – One vs one***)

$$E_D(\mathrm{W}) = \frac{1}{N}\sum_{\vec{x}_n \in M} \max\left(0, 1 + \vec{W}_j^{\mathrm{T}}\vec{x}_n - \vec{W}_{t_n}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n\right)$$

Somme sur l'ensemble des Données mal classées

Score de la bonne classe

Score de la mauvaise classe prédite

13

Hinge Multiclasse

Fonction de coût (***Hinge loss*** ou ***SVM loss – One vs One***)

$$\underbrace{E_D(\mathrm{W}) = \frac{1}{N}\sum_{\vec{x}_n \in M} \max\left(0, 1 + \vec{W}_j^{\mathrm{T}}\vec{x}_n - \vec{W}_{t_n}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n\right)}_{E_{\vec{x}_n}}$$

$$\nabla_{W_{t_n}} E_{\vec{x}_n} = \begin{cases} -\vec{x}_n & \text{si } \vec{W}_{t_n}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n < \vec{W}_j^{\mathrm{T}}\vec{x}_n + 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$\nabla_{W_j} E_{\vec{x}_n} = \begin{cases} \vec{x}_n & \text{si } \vec{W}_{t_n}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n < \vec{W}_j^{\mathrm{T}}\vec{x}_n + 1 \text{ et } j \neq t_n \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

14

Hinge Multiclasse one-vs-one

Descente de gradient stochastique (version naïve, batch_size = 1)

Initialiser **W**
k=0, i=0
DO k=k+1
FOR n = 1 to N
IF $\vec{W}_{t_n}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n < \vec{W}_j^{\mathrm{T}}\vec{x}_n + 1$ THEN
$\vec{w}_{t_n} = \vec{w}_{t_n} + \eta\vec{x}_n$
$\vec{w}_j = \vec{w}_j - \eta\vec{x}_n$

UNTIL toutes les données sont bien classées.

Au TP1, implanter cette version « naïve »

15

Hinge Multiclasse

Fonction de coût (***Hinge loss*** ou ***SVM loss – One vs all***)

$$E_D(\mathrm{W}) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{j}\max\left(0, 1 + \vec{W}_j^{\mathrm{T}}\vec{x}_n - \vec{W}_{t_n}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n\right)$$

Somme sur l'ensemble des données

Score d'une mauvaise classe

Score de la bonne classe

16

Hinge Multiclasse

Fonction de coût (***Hinge loss*** ou ***SVM loss – One vs all***)

$$E_D(\mathrm{W}) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\underbrace{\sum_{j}\max\left(0, 1 + \vec{W}_j^{\mathrm{T}}\vec{x}_n - \vec{W}_{t_n}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n\right)}_{E_{\vec{x}_n}}$$

$$\nabla_{W_{t_n}} E_{\vec{x}_n} = \begin{cases} -\vec{x}_n & \text{si } \vec{W}_{t_n}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n < \vec{W}_j^{\mathrm{T}}\vec{x}_n + 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$\nabla_{W_j} E_{\vec{x}_n} = \begin{cases} \vec{x}_n & \text{si } \vec{W}_{t_n}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n < \vec{W}_j^{\mathrm{T}}\vec{x}_n + 1 \text{ et } j \neq t_n \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

17

Hinge Multiclasse one-vs-all

Descente de gradient stochastique (version naïve, batch_size = 1)

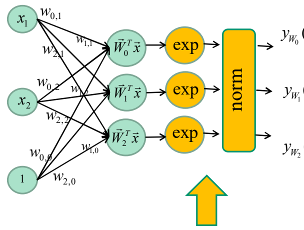
Initialiser **W**
k=0, i=0
DO k=k+1
  FOR n = 1 to N
    IF $\vec{W}_{t_n}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n < \vec{W}_j^{\mathrm{T}}\vec{x}_n + 1$ THEN
      $\vec{w}_{t_n} = \vec{w}_{t_n} + \eta\vec{x}_n$

    FOR j=1 to NB_CLASSES THEN
      IF $\vec{W}_{t_n}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n < \vec{W}_j^{\mathrm{T}}\vec{x}_n + 1$ AND $j \neq t_n$ THEN
        $\vec{w}_j = \vec{w}_j - \eta\vec{x}_n$

UNTIL toutes les données sont bien classées.

18

Régression logistique multiclasse



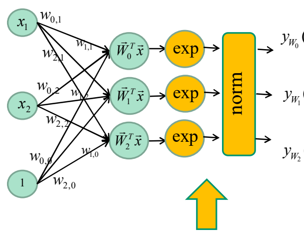
$$y_{W_0}(\vec{x}) = \frac{e^{\vec{W}_0^T \vec{x}}}{\sum_{j=0}^{2} e^{\vec{W}_j^T \vec{x}}}$$

$$y_{W_1}(\vec{x}) = \frac{e^{\vec{W}_1^T \vec{x}}}{\sum_{j=0}^{2} e^{\vec{W}_j^T \vec{x}}}$$

$$y_{W_2}(\vec{x}) = \frac{e^{\vec{W}_2^T \vec{x}}}{\sum_{j=0}^{2} e^{\vec{W}_j^T \vec{x}}}$$

19

Régression logistique multiclasse



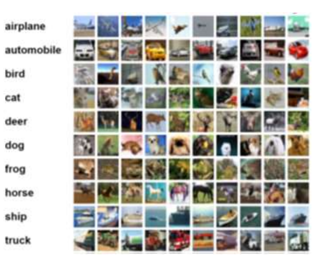
$$y_{W_0}(\vec{x}) = \frac{e^{\vec{W}_0^T \vec{x}}}{\sum_{j=0}^{2} e^{\vec{W}_j^T \vec{x}}} \Rightarrow P(c_0 \mid W, \vec{x})$$

$$y_{W_1}(\vec{x}) = \frac{e^{\vec{W}_1^T \vec{x}}}{\sum_{j=0}^{2} e^{\vec{W}_j^T \vec{x}}} \Rightarrow P(c_1 \mid W, \vec{x})$$

$$y_{W_2}(\vec{x}) = \frac{e^{\vec{W}_2^T \vec{x}}}{\sum_{j=0}^{2} e^{\vec{W}_j^T \vec{x}}} \Rightarrow P(c_2 \mid W, \vec{x})$$

20

Régression logistique multiclasse



'airplane' $\Rightarrow$ t = [1000000000]
'automobile ' $\Rightarrow$ t = [0100000000]
'bird' $\Rightarrow$ t = [0010000000]
'cat' $\Rightarrow$ t = [0001000000]
'deer' $\Rightarrow$ t = [0000100000]
'dog' $\Rightarrow$ t = [0000010000]
'frog' $\Rightarrow$ t = [0000001000]
'horse' $\Rightarrow$ t = [0000000100]
'ship' $\Rightarrow$ t = [0000000010]
'truck' $\Rightarrow$ t = [0000000001]

Étiquettes de classe : ***one-hot vector***

21

Régression logistique multiclasse

Fonction de coût est une **entropie croisée** (*cross entropy loss*)

$$E_D(\mathrm{W}) = -\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} t_{kn} \ln y_{W_k}(\vec{x}_n)$$

$$\nabla E_D(\mathrm{W}) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \vec{x}_n \left(y_W(\vec{x}_n) - \vec{t}_n\right)^T$$

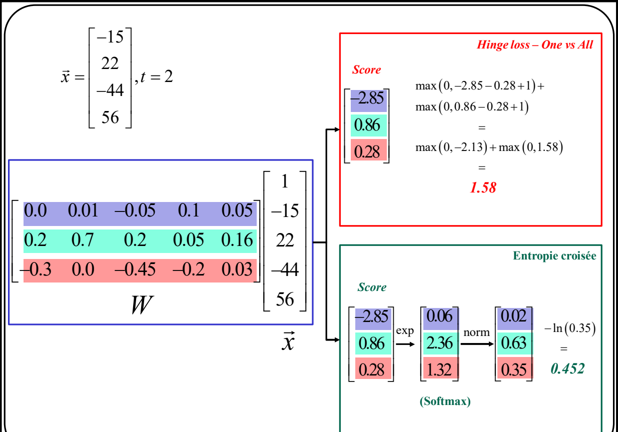
22

Tous les détails du gradient de l'entropie croisée :

jodoin.github.io/cours/ift603/softmax_grad.html

Au tp1: implanter une **version naïve** avec des boucles for et une **version vectorisée** **SANS boucle for.**

23



24

Maximum *a posteriori*

Régularisation

Constante

$$\arg\min_{W} = E_D(W) \; + \lambda R(W)$$

Fonction de perte

Régularisation

En général L1 ou L2 $R(\mathrm{W}) = \|\mathrm{W}\|_1$ ou $\|\mathrm{W}\|_2$

25

Optimisation

Descente de gradient

$$\mathrm{w}^{[k+1]} = \mathrm{w}^{[k]} - \eta^{[k]} \nabla E$$

→ Gradient de la function de coût

→ Taux d'apprentissage ou "learning rate".

Descente de gradient stochastique

Initialiser **w**
k=0
FAIRE k=k+1
FOR n = 1 to N
$\mathbf{w} = \mathbf{w} - \eta^{[k]} \nabla E(\vec{x}_n)$
JUSQU'À ce que toutes les données soient bien classées ou k==MAX_ITER

Optimisation par *Batch*

Initialiser **w**
k=0
FAIRE k=k+1
$\mathbf{w} = \mathbf{w} - \eta^{[k]} \sum_i \nabla E(\vec{x}_i)$
JUSQU'À ce que toutes les données sont bien classées ou k==MAX_ITER

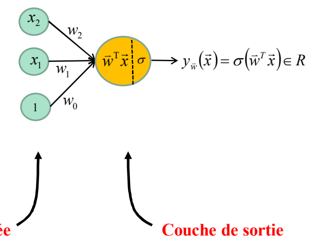
Parfois $\eta^{[k]} = cst / k$

26

Maintenant, rendons le réseau **profond**

27

2D, 2Classes, Régression logistique linéaire



Couche d'entrée
(3 « neurones »)

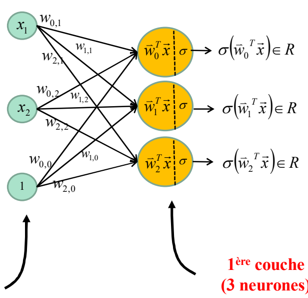
Couche de sortie
(1 neurone avec sigmoïde)

28

28

2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée

Maintenant, ajoutons arbitrairement 3 neurones



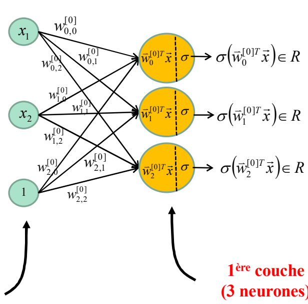
Couche d'entrée
(3 « neurones »)

1ère couche
(3 neurones)

29

2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée

Puisque les poids sont **entre la couche d'entrée** et la **première couche** on va les identifier à l'aide de **l'indice [0]**

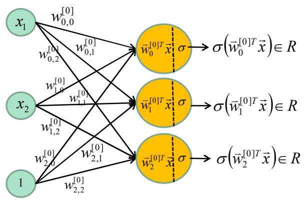


Couche d'entrée
(3 « neurones »)

1ère couche
(3 neurones)

30

2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée

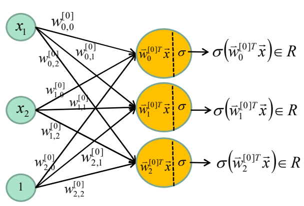


NOTE: à la sortie de la première couche, on a **3 réels** calculés ainsi

$$\sigma\left(\begin{bmatrix} w_{0,0}^{[0]} & w_{0,1}^{[0]} & w_{0,2}^{[0]} \\ w_{1,0}^{[0]} & w_{1,1}^{[0]} & w_{1,2}^{[0]} \\ w_{2,0}^{[0]} & w_{2,1}^{[0]} & w_{2,2}^{[0]} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ 1 \end{bmatrix}\right)$$

31

2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée



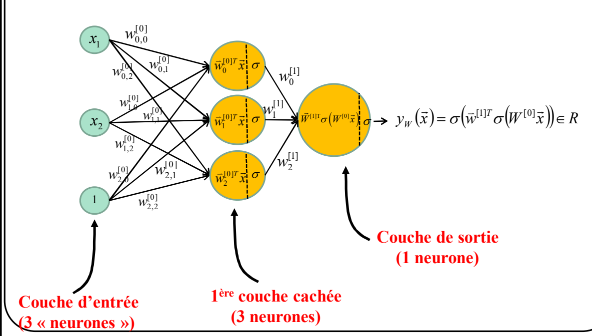
NOTE: représentation plus simple de la sortie de la 1ère couche (**3 réels**)

$$\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)$$

32

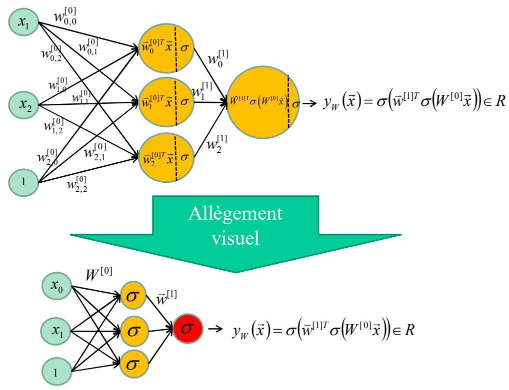
2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée

Si on veut effectuer une **classification 2 classes** via une **régression logistique** (donc **une fonction coût par « entropie croisée »**) on doit ajouter **un neurone de sortie.**



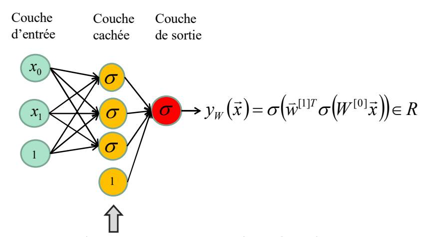
33

2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée



34

2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée



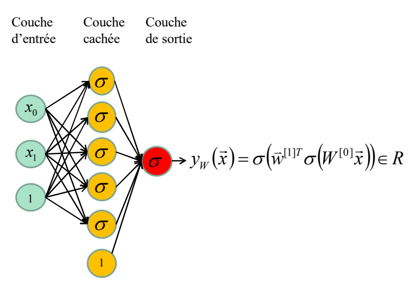
Très souvent, on ajoute un **neurone de biais** à la couche cachée.

Ce réseau possède au total **13 paramètres**

$\underbrace{3\text{x}3}_{\text{Couche entrée / Couche cachée}}$ $\underbrace{1\text{x}4}_{\text{Couche cachée / Couche de sortie}}$

35

2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée



Plus on augmente le nombre de neurones dans la couche cachée, plus on **augmente la capacité du système.**

Ce réseau a 5x3+1x6=**21 paramètres** 36

36

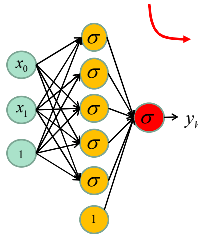
NOTE Importante

Le but de la première couche est de **projeter les données d'entrée** (ici $\vec{x} \in R^2$) vers un espace dimensionnel plus grand (ici $\sigma(W^{[0]}\vec{x}) \in R^5$) là où les **classes sont linéairement séparables**.

Car il ne faut pas oublier que la **couche de sortie** est une **régression logistique linéaire**.

Par conséquent, au lieu de fixer nous même la fonction de base, on laisse le **réseau l'apprendre**.

End-to-end training



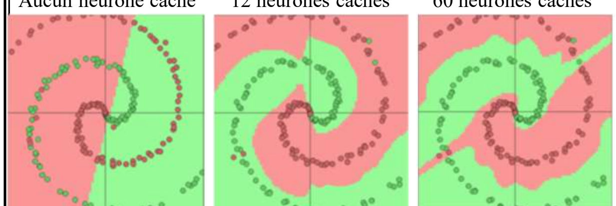
$$y_W(\vec{x}) = \sigma\left(\vec{w}^{[1]T}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right) \in R$$

37

37

Nombre de neurons VS Capacité

Aucun neurone caché	12 neurones cachés	60 neurones cachés



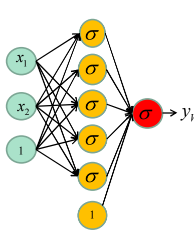
Cassification linéaire **Underfitting** (pas assez de capacité)	Classification non linéaire **BON RÉSULTAT** (bonne capacité)	Classification non linéaire **Over fitting** (trop grande capacité)

http://cs.stanford.edu/people/karpathy/convnetjs/demo/classify2d.html

38

2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée

Couche d'entrée | Couche cachée | Couche de sortie

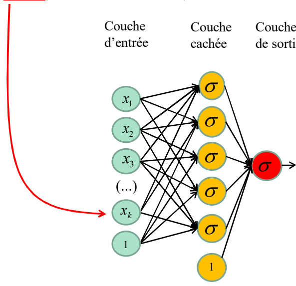


$$y_W(\vec{x}) = \sigma\left(\vec{w}^{[1]T}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right) \in R$$

39

39

kD, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée



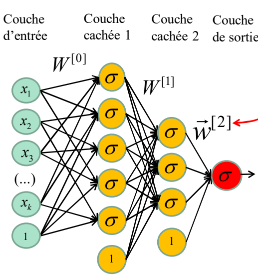
$$\rightarrow y_W(\vec{x}) = \sigma\left(\vec{w}^{[1]T}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right) \in R$$

Ou peut facilement augmenter la dimensionnalité des données d'entrée.
Cela n'a pour effet que **d'augmenter le nombre de colonnes dans** $W^{[0}$

Ce réseau a 5x(k+1)+1x6 **paramètres** 40

40

kD, 2Classes, Réseau à **2 couches** cachées



$W^{[0]} \in R^{5\times k+1}$

$W^{[1]} \in R^{3\times 6}$

$\vec{w}^{[2]} \in R^{4}$

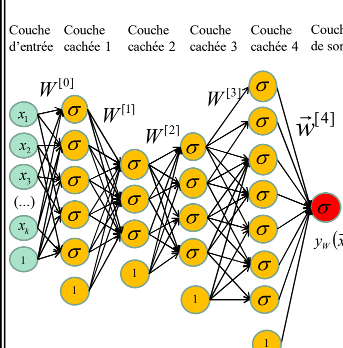
$$\rightarrow y_W(\vec{x}) = \sigma\left(\vec{w}^{[2]T}\sigma\left(W^{[1]}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right)\right)$$

En ajoutant une couche cachée, on ajoute une multiplication matricielle

Ce réseau a 5x(k+1)+6x3 + 1x4 **paramètres** 41

41

kD, 2 Classes, Réseau à 4 couches cachées



$W^{[0]} \in R^{5\times k+1}$

$W^{[1]} \in R^{3\times 6}$

$W^{[2]} \in R^{4\times 4}$

$W^{[3]} \in R^{5\times 7}$

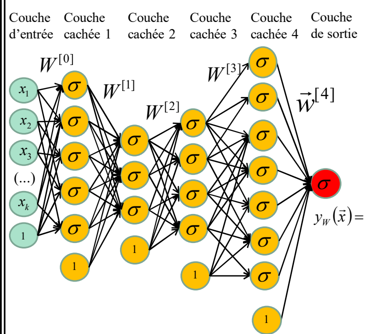
$\vec{w}^{[4]} \in R^{8}$

$$y_W(\vec{x}) = \sigma\left(\vec{w}^{[4]T}\sigma\left(W^{[3]}\sigma\left(W^{[2]}\sigma\left(W^{[1]}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right)\right)\right)\right)$$

Ce réseau a 5x(k+1)+6x3 + 4x4+7x5+1x8 **paramètres** 42

42

kD, 2 Classes, Réseau à 4 couches cachées



$W^{[0]} \in R^{5\times k+1}$

$W^{[1]} \in R^{3\times 6}$

$W^{[2]} \in R^{4\times 4}$

$W^{[3]} \in R^{5\times 7}$

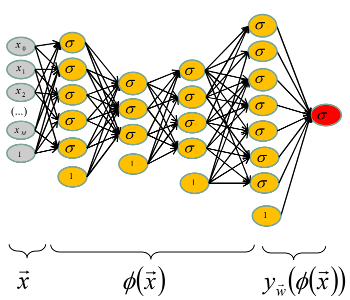
$\vec{w}^{[4]} \in R^{8}$

$$y_W(\vec{x}) = \sigma\left(\vec{w}^{[4]T}\sigma\left(W^{[3]}\sigma\left(W^{[2]}\sigma\left(W^{[1]}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right)\right)\right)\right)$$

NOTE : plus on augmente le nombre de couches, plus le réseau devient **profond** et plus on **augmente la capacité** du réseau.

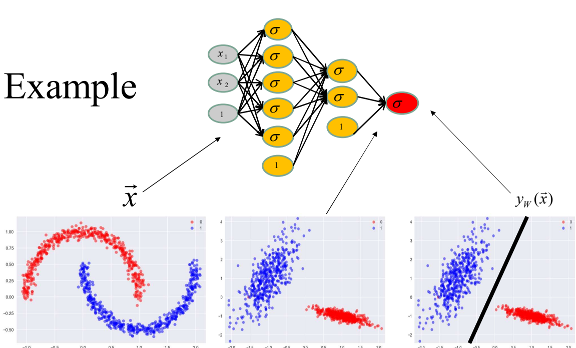
43

Réseau de neurones multicouches = apprendre une function de base



44

Example



Données en entrée

Sortie de la dernière couche

Sortie du réseau

45

Augmenter le nombre de neurones par couche

Augmenter le nombre de couches

Augmenter la capacité du réseau

46

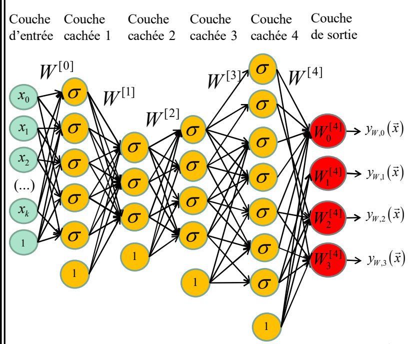
Augmenter la capacité d'un réseau peut entraîner du **sur-apprentissage**

47

Lorsqu'un réseau doit prédire **plus de 2 classes**, on lui assigne **K neurones de sortie**, une par classe.

48

kD, **4 Classes**, Réseau à 4 couches cachées

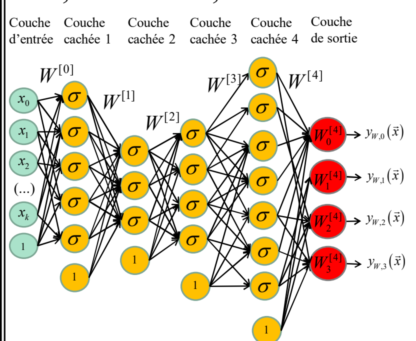


$W^{[0]} \in R^{5\times k+1}$
$W^{[1]} \in R^{3\times 6}$
$W^{[2]} \in R^{4\times 4}$
$W^{[3]} \in R^{5\times 7}$
$W^{[4]} \in R^{4\times 8}$

$$y_W(\vec{x}) = W^{[4]}\sigma\left(W^{[3]}\sigma\left(W^{[2]}\sigma\left(W^{[1]}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right)\right)\right)$$

49

kD, **4 Classes**, Réseau à 4 couches cachées



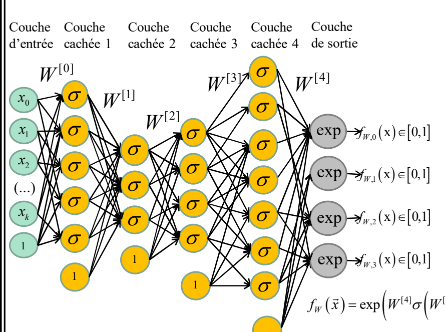
Hinge loss

$$y_W(\vec{x}) = W^{[4]}\sigma\left(W^{[3]}\sigma\left(W^{[2]}\sigma\left(W^{[1]}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right)\right)\right)$$

50

kD, **4 Classes**, Réseau à 4 couches cachées

$W^{[0]} \in R^{5\times k+1}$
$W^{[1]} \in R^{3\times 6}$
$W^{[2]} \in R^{4\times 4}$
$W^{[3]} \in R^{5\times 7}$
$W^{[4]} \in R^{4\times 8}$

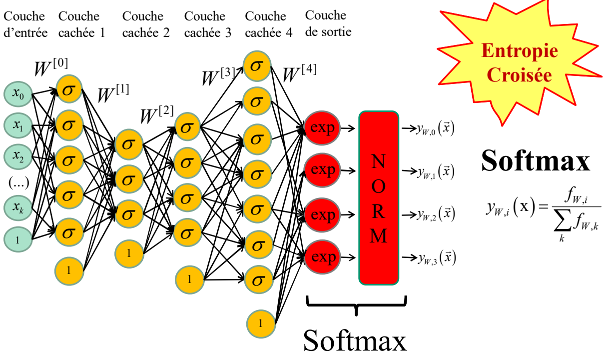


$$f_W(\vec{x}) = \exp\left(W^{[4]}\sigma\left(W^{[3]}\sigma\left(W^{[2]}\sigma\left(W^{[1]}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right)\right)\right)\right)$$

Softmax $y_{W,i}(x) = \frac{f_{W,i}}{\sum_k f_{W,k}}$

51

kD, **4 Classes**, Réseau à 4 couches cachées



$$y_W(\vec{x}) = \text{softmax}\left(W^{[4]}\sigma\left(W^{[3]}\sigma\left(W^{[2]}\sigma\left(W^{[1]}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right)\right)\right)\right)$$

52

Simulation

http://cs.stanford.edu/people/karpathy/convnetjs/demo/classify2d.html

53

Comment faire une prédiction?

Ex.: faire transiter un signal de **l'entrée à la sortie** d'un réseau à **3 couches cachées**

```
import numpy as np

def sigmoid(x):
    return 1.0 / (1.0+np.exp(-x))

x = np.insert(x,0,1) # Ajouter biais

H1 = sigmoid(np.dot(W0,x))
H1 = np.insert(H1,0,1) # Ajouter biais

H2 = sigmoid(np.dot(W1,H1))
H2 = np.insert(H2,0,1) # Ajouter biais

H3 = sigmoid(np.dot(W2,H2))
H3 = np.insert(H3,0,1) # Ajouter biais

y_pred = np.dot(W3,H3)
```

} Couche 1

} Couche 2

} Couche 3

} Couche sortie

Forward pass

54

Comment optimiser les paramètres?

0- Partant de

$$W = \arg\min_{W} E_D(W) + \lambda R(W)$$

Trouver une function de régularisation. En général

$$R(W) = \|W\|_1 \text{ ou } \|W\|_2$$

55

55

Comment optimiser les paramètres?

1- Trouver une loss $E_D(W)$ comme par exemple

Hinge loss

Entropie croisée (*cross entropy*)

N'oubliez pas d'ajuster la <u>sortie du réseau</u> en fonction de la <u>loss</u> que vous aurez choisi.

cross entropy => Softmax

56

Comment optimiser les paramètres?

2- Calculer le gradient de la loss par rapport à chaque paramètre

$$\frac{\partial\left(E_D(W) + \lambda R(W)\right)}{\partial w_{a,b}^{[c]}}$$

et lancer un algorithme de <u>descente de gradient</u> pour mettre à jour les paramètres.

$$\boxed{w_{a,b}^{[c]} = w_{a,b}^{[c]} - \eta \frac{\partial\left(E_D(W) + \lambda R(W)\right)}{\partial w_{a,b}^{[c]}}}$$

57

57

Comment optimiser les paramètres?

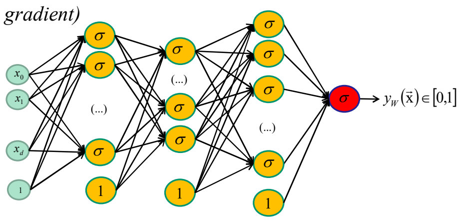
$$\frac{\partial\left(E_D(W)+\lambda R(W)\right)}{\partial w_{a,b}^{[c]}} \Rightarrow \text{calculé à } \underline{\text{l'aide d'une rétropropagation}}$$

58

58

Disparition du gradient

(vanishing gradient)



Malheureusement, l'entraînement d'un **réseau profond** avec **rétro-propagation** et des fonctions d'activations **sigmoïdales** entraîne des problèmes de

disparition du gradient

59

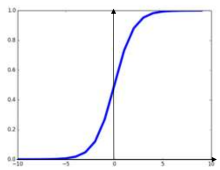
59

On résoud le problème de la disparition du gradient à l'aide **d'autres fonctions d'activations**

60

Fonction d'activation

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



Sigmoïde

- Ramène les valeurs entre 0 et 1
- Historiquement populaire

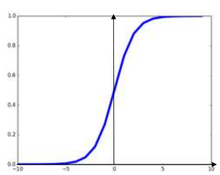
3 Problèmes :

- Un neurone saturé a pour effet de **« tuer » les gradients**

61

Fonction d'activation

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



Sigmoïde

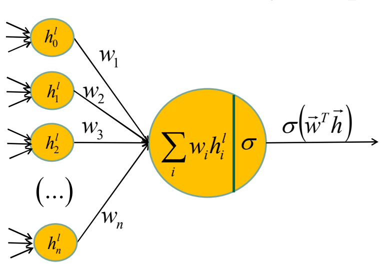
- Ramène les valeurs entre 0 et 1
- Historiquement populaire

3 Problèmes :

- Un neurone saturé a pour effet de **« tuer » les gradients**
- Sortie d'une sigmoïde n'est **pas centrée à zéro.**

62

Qu'arrive-t-il lorsque le vecteur d'entrée $\vec{h}$ d'un neurone est toujours positif?



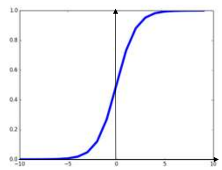
Le gradient par rapport à $\vec{w}$ est … **Positif? Négatif?**

Réponse : https://rohanvarma.me/inputnormalization/

63

Fonction d'activation

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



Sigmoïde

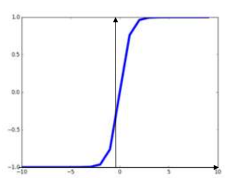
- Ramène les valeurs entre 0 et 1
- Historiquement populaire

3 Problèmes :

- Un neurone saturé a pour effet de **« tuer » les gradients**
- Sortie d'une sigmoïde n'est **pas centrée à zéro.**
- exp() est **coûteux** lorsque le nombre de neurones est élevé.

64

Fonction d'activation



Tanh(x)

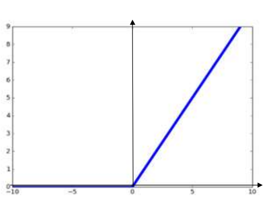
- Ramène les valeurs entre -1 et 1
- **Sortie centrée à zéro** ☺
- **Disparition du gradient** lorsque la fonction sature ☹

[LeCun et al., 1991]

65

Fonction d'activation

$$\text{ReLU}(x) = \max(0, x)$$



ReLU(x)
(Rectified Linear Unit)

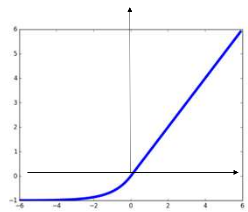
- Aucune **saturation** ☺
- Super **rapide** ☺
- **Convergence plus rapide** que sigmoïde/tanh (5 à 10x) ☺
- Sortie **non centrée à zéro** ☹
- **Un inconvénient :** qu'arrive-t-il au gradient lorsque x<0? ☹

[Krizhevsky et al., 2012]

66

Fonction d'activation

$$\text{ELU}(x) = \begin{cases} x & \text{si } x > 0 \\ \alpha(e^x - 1) & \text{sinon} \end{cases}$$



ELU(x)
(Exponential Linear Unit)

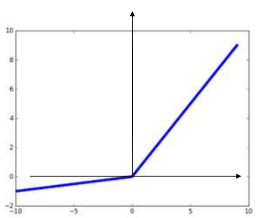
- Tous les avantages de **ReLU**☺
- Sortie plus **« centrée à zéro »** ☺
- **Converge plus rapide** que sigmoïde/tanh (5 à 10x) ☺
- **Gradients meurent plus lentement** 😐
- exp() est **coûteux** ☹

[Clevert et al., 2015]

67

Fonction d'activation

$$\text{LReLU}(x) = \max(0.01x, x)$$



Leaky ReLU(x)

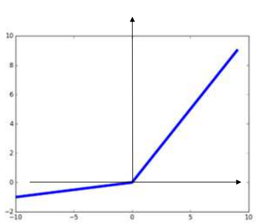
- Aucune **saturation** ☺
- Super **rapide** ☺
- **Converge plus rapide** que sigmoïde/tanh (5 à 10x) ☺
- **Gradients ne meurent pas** ☺
- 0.01 est un **hyperparamètre** 😐

[Mass et al., 2013]
[He et al., 2015]

68

Fonction d'activation

$$\text{PReLU}(x) = \max(\alpha x, x)$$



Parametric ReLU(x)

- Aucune **saturation** ☺
- Super **rapide** ☺
- **Converge plus rapide** que sigmoïde/tanh (5 à 10x) ☺
- **Gradients ne meurent pas** ☺
- ***α* appris** lors de la rétro-propagation ☺

[Mass et al., 2013]
[He et al., 2015]

69

Fonction d'activation

Plusieurs autres fonctions d'activation ont été proposée :

- GELU (Gaussian Error Linear Unit)
- SiLU (Sigmoid Linear Unit)
- Swish
- GLU (Gated Linear Unit)
- ReGLU (Rectified Gated Linear Unit)
- GEGLU (Gaussian Error Gated Linear Unit)
- SwiGLU (Swish-Gated Linear Unit)
- Etc.

À vous de les découvrir!

https://vitalab.github.io/blog/2024/08/20/new_activation_functions.html

70

En pratique

- Par défaut, le gens utilisent **ReLU**.
- Essayez **Leaky ReLU / PReLU / ELU / etc.**
- Essayez **tanh** mais n'attendez-vous pas à grand chose
- **Ne pas utiliser de sigmoïde** sauf à la sortie d'un réseau 2 classes ou pour des modèles d'attention.

71

Les bonnes pratiques

72

Optimisation

Descente de gradient

$$\mathbf{w}^{[k+1]} = \mathbf{w}^{[k]} - \eta^{[k]} \nabla E$$

Gradient de la function de coût

Taux d'apprentissage ou *"learning rate"*.

Descente de gradient stochastique

Initialiser **w**
k=0
FAIRE k=k+1
FOR n = 1 to N
$\mathbf{w} = \mathbf{w} - \eta^{[k]} \nabla E(\vec{x}_n)$
JUSQU'À ce que toutes les données soient bien classées ou k== MAX_ITER

Optimisation par *Batch*

Initialiser **w**
k=0
FAIRE k=k+1
$\mathbf{w} = \mathbf{w} - \eta^{[k]} \sum_i \nabla E(\vec{x}_i)$
JUSQU'À ce que toutes les données soient bien classées ou k==MAX_ITER

Parfois $\eta^{[k]} = cst / k$

73

Optimisation

TP1 TP2
TP3 TP4

Descente de gradient

$$\mathbf{w}^{[k+1]} = \mathbf{w}^{[k]} - \eta^{[k]} \nabla E$$

Gradient de la function de coût

Taux d'apprentissage ou "*learning rate*".

Optimisation par mini-batch

Initialiser **w**
k=0
FAIRE k=k+1
FAIRE n=0 à N par sauts de ***MBS /*Mini-batch size*/***
$\mathrm{w} = \mathrm{w} - \eta^{[k]} \sum_{i=n}^{n+MBS} \nabla E(\vec{x}_i)$ } **Itération**
JUSQU'À ce que toutes les données soient bien classées ou k==MAX_ITER

74

Optimisation

Descente de gradient

$$\mathbf{w}^{[k+1]} = \mathbf{w}^{[k]} - \eta^{[k]} \nabla E$$

Gradient de la function de coût

Taux d'apprentissage ou "*learning rate*".

Optimisation par *mini-batch*

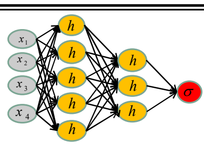
Initialiser **w**
k=0
FAIRE k=k+1
FAIRE n=0 à N par sauts de ***MBS /*Mini-batch size*/***
$\mathrm{w} = \mathrm{w} - \eta^{[k]} \sum_{i=n}^{n+MBS} \nabla E(\vec{x}_i)$
JUSQU'À ce que toutes les données sont bien classées ou k==MAX_ITER

} **Epoch**

75

Mini-batch = **vectorisation** de la propagation avant et de la rétro-propagation

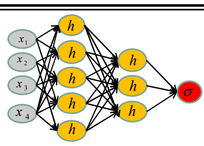
76

$\vec{x}$  $\sigma\left(\vec{W}_3^T h\left(W_2 h\left(W_1\vec{x}\right)\right)\right)$

Propagation avant pour un réseau à **2 couches cachées** (7 étapes)

	$\vec{x}$	$\in IR^4$
Étape 2 →	$W_1\vec{x}$	$\in IR^5$
	$h(W_1\vec{x})$	$\in IR^5$
	$W_2 h(W_1\vec{x})$	$\in IR^3$
	$h(W_2 h(W_1\vec{x}))$	$\in IR^3$
Étape 6 →	$\vec{W}_3^T\left(h\left(W_2 h\left(W_1\vec{x}\right)\right)\right)$	$\in IR$
	$\sigma\left(\vec{W}_3^T\left(h\left(\vec{W}_2 h\left(W_1\vec{x}\right)\right)\right)\right)$	$\in IR$

77

$X = \{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3\}$  $Y = \left\{ \begin{array}{l} \sigma\left(\vec{W}_3 h\left(W_2 h\left(W_1\vec{x}_1\right)\right)\right), \\ \sigma\left(\vec{W}_3 h\left(W_2 h\left(W_1\vec{x}_2\right)\right)\right), \\ \sigma\left(\vec{W}_3 h\left(W_2 h\left(W_1\vec{x}_3\right)\right)\right) \end{array} \right\}$

Propagation avant pour un réseau à **2 couches cachées** (7 étapes)

POUR i allant de 0 à 2

$\vec{x} = X[i]$	$\in IR^4$
$W_1\vec{x}$	$\in IR^5$
$h(W_1\vec{x})$	$\in IR^5$
$W_2 h(W_1\vec{x})$	$\in IR^3$
$h(W_2 h(W_1\vec{x}))$	$\in IR^3$
$\vec{W}_3^T\left(h\left(W_2 h\left(W_1\vec{x}\right)\right)\right)$	$\in IR$
$Y[i] = \sigma\left(\vec{W}_3^T\left(h\left(\vec{W}_2 h\left(W_1\vec{x}\right)\right)\right)\right)$	$\in IR$

Solution naïve et peu efficace

TP1

78

Solution

Il est plus efficace d'effectuer **UNE multiplication matricielle** que **PLUSIEURS multiplications matrice-vecteur** **(exemple de la 2[e] étape, batch de 3)**

$$W_1\vec{x}_1 = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} & w_{14} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} & w_{24} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} & w_{34} \\ w_{41} & w_{42} & w_{43} & w_{44} \\ w_{51} & w_{52} & w_{53} & w_{54} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix}$$

$$W_1\vec{x}_2 = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} & w_{14} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} & w_{24} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} & w_{34} \\ w_{41} & w_{42} & w_{43} & w_{44} \\ w_{51} & w_{52} & w_{53} & w_{54} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} d \\ e \\ f \\ g \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \end{bmatrix}$$

$$W_1\vec{x}_3 = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} & w_{14} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} & w_{24} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} & w_{34} \\ w_{41} & w_{42} & w_{43} & w_{44} \\ w_{51} & w_{52} & w_{53} & w_{54} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} h \\ i \\ j \\ k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \\ z_5 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_1 \\ u_1 \\ u_1 \\ u_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_1 \\ v_1 \\ v_1 \\ v_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_1 \\ z_1 \\ z_1 \\ z_1 \end{bmatrix}$$

TROIS multi. matrice-vecteur

79

Solution

Il est plus efficace d'effectuer **UNE multiplication matricielle** que **PLUSIEURS matrice-vecteur** **(exemple de la 2[e] étape, batch de 3)**

$$W_1X = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} & w_{14} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} & w_{24} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} & w_{34} \\ w_{41} & w_{42} & w_{43} & w_{44} \\ w_{51} & w_{52} & w_{53} & w_{54} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} a & d & h \\ b & e & i \\ c & f & j \\ d & g & k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1 & v_1 & z_1 \\ u_2 & v_2 & z_2 \\ u_3 & v_3 & z_3 \\ u_4 & v_4 & z_4 \\ u_5 & v_5 & z_5 \end{bmatrix}$$

UNE multiplication matricielle

80

$\vec{W}_3^T\left(h(W_2h(W_1\vec{x}))\right)$

Solution

Il est plus efficace d'effectuer UNE multiplication matricielle que **PLUSIEURS produits scalaires** **(exemple de la 6[e] étape, batch de 3)**

$$\begin{pmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = (w_1a + w_2b + w_3c)$$

$$\begin{pmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d \\ e \\ f \end{pmatrix} = (w_1d + w_2e + w_3f)$$

$$\begin{pmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g \\ h \\ i \end{pmatrix} = (w_1g + w_2h + w_3i)$$

$$\begin{pmatrix} w_1a + w_2b + w_3c \\ w_1d + w_2e + w_3f \\ w_1g + w_2h + w_3i \end{pmatrix} = Y$$

TROIS produits scalaires

81

Solution

Il est plus efficace d'effectuer **UNE multiplication matricielle** que PLUSIEURS produits scalaires **(exemple de la 6e étape, batch de 3)**

$$[w_1 \quad w_2 \quad w_3]\begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1 a + w_2 b + w_3 c \\ w_1 d + w_2 e + w_3 f \\ w_1 g + w_2 h + w_3 i \end{pmatrix} = Y$$

UNE multiplication matricielle

82

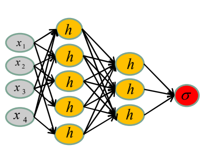
Vectorisation de la propagation avant

En résumé, lorsqu'on propage une « *batch* » de données

Au niveau **Neuronal** **(batch = 1)**	Multi. **Vecteur-Vecteur**	$\vec{W}^T\vec{x} = [w_1 \quad w_2 \quad w_3]\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$
Au niveau **Neuronal** **(batch = 3)**	Multi. **Vecteur-Matrice**	$\vec{W}^T X = [w_1 \quad w_2 \quad w_3]\begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix}$
Au niveau **de la couche** **(batch = 3)**	Multi. **Matrice-Matrice**	$WX = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} \end{bmatrix}\begin{pmatrix} a\ d\ h \\ b\ e\ i \\ c\ f\ j \end{pmatrix}$

83

$$X = \begin{bmatrix} | & | & | \\ \vec{x}_1 & \vec{x}_2 & \vec{x}_3 \\ | & | & | \end{bmatrix}$$



$$Y = \begin{bmatrix} \sigma\left(h\left(\vec{W}_2 h\left(W_1\vec{x}_1\right)\right)\right) \\ \sigma\left(h\left(\vec{W}_2 h\left(W_1\vec{x}_2\right)\right)\right) \\ \sigma\left(h\left(\vec{W}_2 h\left(W_1\vec{x}_3\right)\right)\right) \end{bmatrix}^T$$

Vectoriser la rétropropagation

84

Vectoriser la rétropropagation

Exemple simple pour **1 neurone et une *batch* de 3 données**

$$[w_1 \quad w_2 \quad w_3]\begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1a + w_2b + w_3c \\ w_1d + w_2e + w_3f \\ w_1g + w_2h + w_3i \end{pmatrix}^T$$

$$\vec{w}^T \qquad X \qquad Y$$

En supposant qu'on connaît le gradient pour les 3 éléments de Y provenant de la sortie du réseau, comment faire pour propager le gradient vers $\vec{w}^T$?

85

Vectoriser la rétropropagation

Exemple simple pour **1 neurone et une *batch* de 3 données**

$$[w_1 \quad w_2 \quad w_3]\begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1a + w_2b + w_3c \\ w_1d + w_2e + w_3f \\ w_1g + w_2h + w_3i \end{pmatrix}^T$$

$$\vec{w}^T \qquad X \qquad Y$$

Rappelons que l'objectif est de faire une **descente de gradient**, i.e.

$$w_1 \leftarrow w_1 - \eta \frac{\partial E}{w_1} \quad w_2 \leftarrow w_2 - \eta \frac{\partial E}{\partial w_2} \quad w_3 \leftarrow w_3 - \eta \frac{\partial E}{\partial w_3}$$

86

$$[w_1 \quad w_2 \quad w_3]\begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1a + w_2b + w_3c \\ w_1d + w_2e + w_3f \\ w_1g + w_2h + w_3i \end{pmatrix}^T$$

$$\vec{w}^T \qquad X \qquad Y$$

Concentrons-nous sur w_1

$$w_1 \leftarrow w_1 - \eta \frac{\partial E}{w_1}$$

$$w_1 \leftarrow w_1 - \eta \frac{\partial E}{\partial Y}^T \frac{\partial Y}{\partial w_1}$$ (par propriété de la dérivée en chaîne)

$$w_1 \leftarrow w_1 - \eta \underline{\begin{bmatrix} \frac{\partial E_1}{\partial Y} & \frac{\partial E_2}{\partial Y} & \frac{\partial E_3}{\partial Y} \end{bmatrix}} \begin{bmatrix} a \\ d \\ g \end{bmatrix}$$

(provient de la rétro-propagation)

$$w_1 \leftarrow w_1 - \eta \left(\frac{\partial E_1}{\partial Y} a + \frac{\partial E_2}{\partial Y} b + \frac{\partial E_3}{\partial Y} c \right)$$

87

$$[w_1 \quad w_2 \quad w_3]\begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1a + w_2b + w_3c \\ w_1d + w_2e + w_3f \\ w_1g + w_2h + w_3i \end{pmatrix}^T$$

$$\vec{w}^T \qquad X \qquad Y$$

Concentrons-nous sur w_1

$$w_1 \leftarrow w_1 - \eta \frac{\partial E}{w_1}$$

$$w_1 \leftarrow w_1 - \eta \frac{\partial E}{\partial Y}^T \frac{\partial Y}{\partial w_1}$$ (par propriété de la dérivée en chaîne)

$$w_1 \leftarrow w_1 - \eta \underbrace{\left[\frac{\partial E_1}{\partial Y} \quad \frac{\partial E_2}{\partial Y} \quad \frac{\partial E_3}{\partial Y}\right]}\begin{bmatrix} a \\ d \\ g \end{bmatrix}$$

(Puisqu'on a une batch de 3 éléments, on a 3 prédiction et donc 3 gradients)

$$w_1 \leftarrow w_1 - \eta\left(\frac{\partial E_1}{\partial Y}a + \frac{\partial E_2}{\partial Y}b + \frac{\partial E_3}{\partial Y}c\right)$$

88

$$[w_1 \quad w_2 \quad w_3]\begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1a + w_2b + w_3c \\ w_1d + w_2e + w_3f \\ w_1g + w_2h + w_3i \end{pmatrix}^T$$

$$\vec{w}^T \qquad X \qquad Y$$

Donc en résumé …

$$w_1 \leftarrow w_1 - \eta\left[\frac{\partial E_1}{\partial Y} \quad \frac{\partial E_2}{\partial Y} \quad \frac{\partial E_3}{\partial Y}\right]\begin{bmatrix} a \\ d \\ g \end{bmatrix}$$

89

$$[w_1 \quad w_2 \quad w_3]\begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1a + w_2b + w_3c \\ w_1d + w_2e + w_3f \\ w_1g + w_2h + w_3i \end{pmatrix}^T$$

$$\vec{w}^T \qquad X \qquad Y$$

Et pour tous les poids

$$w_1 \leftarrow w_1 - \eta\left[\frac{\partial E_1}{\partial Y} \quad \frac{\partial E_2}{\partial Y} \quad \frac{\partial E_3}{\partial Y}\right]\begin{bmatrix} a \\ d \\ g \end{bmatrix}$$

$$w_2 \leftarrow w_2 - \eta\left[\frac{\partial E_1}{\partial Y} \quad \frac{\partial E_2}{\partial Y} \quad \frac{\partial E_3}{\partial Y}\right]\begin{bmatrix} b \\ e \\ h \end{bmatrix}$$

$$w_3 \leftarrow w_3 - \eta\left[\frac{\partial E_1}{\partial Y} \quad \frac{\partial E_2}{\partial Y} \quad \frac{\partial E_3}{\partial Y}\right]\begin{bmatrix} c \\ f \\ i \end{bmatrix}$$

90

$$[w_1 \quad w_2 \quad w_3]\begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1 a + w_2 b + w_3 c \\ w_1 d + w_2 e + w_3 f \\ w_1 g + w_2 h + w_3 i \end{pmatrix}^T$$

$\vec{w}^T$ $\qquad X \qquad Y$

Et pour tous les poids

$$\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{bmatrix}^T \leftarrow \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{bmatrix}^T - \eta \begin{bmatrix} \frac{\partial E_1}{\partial Y} & \frac{\partial E_2}{\partial Y} & \frac{\partial E_3}{\partial Y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix}$$

$$\vec{w}^T \leftarrow \vec{w}^T - \eta \begin{bmatrix} \frac{\partial E_1}{\partial Y} & \frac{\partial E_2}{\partial Y} & \frac{\partial E_3}{\partial Y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \partial Y_1/\partial w_1 & \partial Y_1/\partial w_2 & \partial Y_1/\partial w_3 \\ \partial Y_2/\partial w_1 & \partial Y_2/\partial w_2 & \partial Y_2/\partial w_3 \\ \partial Y_3/\partial w_1 & \partial Y_3/\partial w_2 & \partial Y_3/\partial w_3 \end{bmatrix}$$

$$\vec{w}^T \leftarrow \vec{w}^T - \eta \frac{\partial \vec{E}^T}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial \vec{W}}$$

Matrice jacobienne

91

$$\begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} & w_{14} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} & w_{24} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} & w_{34} \\ w_{41} & w_{42} & w_{43} & w_{44} \\ w_{51} & w_{52} & w_{53} & w_{54} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} a & d & h \\ b & e & i \\ c & f & j \\ d & g & k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1 & v_1 & z_1 \\ u_2 & v_2 & z_2 \\ u_3 & v_3 & z_3 \\ u_4 & v_4 & z_4 \\ u_5 & v_5 & z_5 \end{bmatrix}$$

$W \qquad X \qquad Y$

Même chose pour **1 couche 5x4 et une *batch* de 3 données**

$$W \leftarrow W^T - \eta \begin{bmatrix} \frac{\partial E_1}{\partial Y_1} & \frac{\partial E_2}{\partial Y_1} & \frac{\partial E_3}{\partial Y_1} \\ \frac{\partial E_1}{\partial Y_2} & \frac{\partial E_2}{\partial Y_2} & \frac{\partial E_3}{\partial Y_2} \\ \frac{\partial E_1}{\partial Y_3} & \frac{\partial E_2}{\partial Y_3} & \frac{\partial E_3}{\partial Y_3} \\ \frac{\partial E_1}{\partial Y_4} & \frac{\partial E_2}{\partial Y_4} & \frac{\partial E_3}{\partial Y_4} \\ \frac{\partial E_1}{\partial Y_5} & \frac{\partial E_2}{\partial Y_5} & \frac{\partial E_3}{\partial Y_5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b & c & d \\ d & e & f & g \\ h & i & j & k \end{bmatrix}$$

$$W^T \leftarrow W^T - \eta \frac{\partial E^T}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial W}$$

92

Vectorisation de la rétro-propagation

En résumé, lorsqu'on rétro-propage le gradient d'une batch

Au niveau **neuronal**	Multi. **Vecteur-Matrice**	$W_i \leftarrow W_i - \eta \frac{\partial \vec{E}^T}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial W_i}$ $W_i \leftarrow W_i - \eta \frac{\partial \vec{E}^T}{\partial Y} X_i$

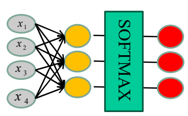
Au niveau **de la couche**	Multi. **Matrice-Matrice**	$W^T \leftarrow W^T - \eta \frac{\partial E^T}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial \vec{W}}$ $W^T \leftarrow W^T - \eta \frac{\partial E^T}{\partial Y} X$

93

Vectorisation de l’entropie croisée

94

Rappel : entropie croisée, 1 donnée



$y_W(\vec{x}) = \text{SoftMax}(W\vec{x})$

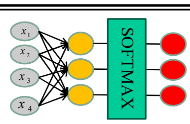
$$L_{\vec{x}}(W) = -\sum_{k=1}^{K} t_{kn} \ln y_{W_k}(\vec{x})$$

$$= -\vec{t}^T \ln y_W(\vec{x})$$

$$\nabla_W L_{\vec{x}}(W) = \left(y_W(\vec{x}_n) - \vec{t}\right) \vec{x}^T$$

95

$\vec{x} \in \mathbb{R}^4$



L

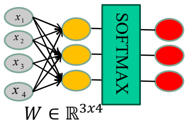
$W \in \mathbb{R}^{3x4}$

Propagation avant d’une donnée pour un réseau à **1 couche** (3 étapes)

$$\begin{array}{l|l} \vec{x} & \in IR^4 \\ W\,\vec{x} & \in IR^3 \\ Y = SM(W\vec{x}) & \in IR^3 \\ L = -\vec{t}^T \ln Y & \in IR \end{array}$$

96

$\vec{x} = [1,2,3,4]^T$



$W \in \mathbb{R}^{3x4}$ Y

$L = -\vec{t}^T \ln y_W(\vec{x})$

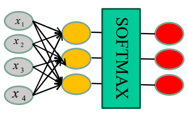
Exemple de perte:

$$Y = \begin{bmatrix} 0.1 \\ 0.6 \\ 0.3 \end{bmatrix} \text{ et } \vec{t} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} L &= -[0\ 0\ 1] \ln \begin{bmatrix} 0.1 \\ 0.6 \\ 0.3 \end{bmatrix} \\ &= -[0\ 0\ 1] \begin{bmatrix} -2.3 \\ -0.5 \\ -1.2 \end{bmatrix} \\ &= 1.2 \end{aligned}$$

97

$\vec{x} = [1,2,3,4]^T$



$W \in \mathbb{R}^{3x4}$

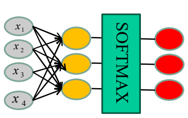
$$Y = \begin{bmatrix} 0.1 \\ 0.6 \\ 0.3 \end{bmatrix}, \vec{t} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Exemple de gradient

$$\begin{aligned} \nabla_W L &= (Y - \vec{t})\, \vec{x}^T \\ &= \left(\begin{bmatrix} 0.1 \\ 0.6 \\ 0.3 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right) [1,2,3,4] \\ &= \begin{bmatrix} 0.1 \\ 0.6 \\ -0.7 \end{bmatrix} [1,2,3,4] \\ &= \begin{bmatrix} .1 & .2 & .3 & .4 \\ .6 & 1.2 & 1.8 & 2.4 \\ .3 & .6 & .9 & 1.2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3x4} \end{aligned}$$

98

$X = \{\vec{x}_1, \vec{x}_2\}$



$W \in \mathbb{R}^{3x4}$ Y

Approche par batch

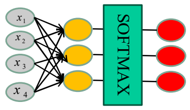
X	$\in IR^{4x}$
$W\,\vec{x}$	$\in IR^{3x2}$
$Y = SM(W\vec{x})$	$\in IR^{3x2}$
$L = -T^T \ln Y$	$\in IR^2$

Solution par batch

TP1

99

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & 6 & 7 & 8 \end{bmatrix}$$



$$L = -T^T \ln Y$$

$$Y = \begin{bmatrix} 0.1 & 0.7 \\ 0.6 & 0.25 \\ 0.3 & 0.05 \end{bmatrix}$$

Exemple de perte:

$$Y = \begin{bmatrix} 0.1 & 0.7 \\ 0.6 & 0.25 \\ 0.3 & 0.05 \end{bmatrix} \text{ et } T = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

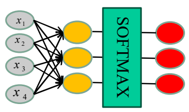
$$L = -\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \ln \begin{bmatrix} 0.1 & 0.7 \\ 0.6 & 0.25 \\ 0.3 & 0.05 \end{bmatrix}$$

$$= -\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -2.3 & -0.4 \\ -0.5 & -1.4 \\ -1.2 & -3.0 \end{bmatrix}$$

$$= [1.2 \quad 0.4]$$

100

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & 6 & 7 & 8 \end{bmatrix}$$



$$Y = \begin{bmatrix} 0.1 & 0.7 \\ 0.6 & 0.25 \\ 0.3 & 0.05 \end{bmatrix} \text{ et } T = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Exemple de gradient

$$\nabla_W L = (Y - T)\, X$$

$$= \left(\begin{bmatrix} 0.1 & 0.7 \\ 0.6 & 0.25 \\ 0.3 & 0.05 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & 6 & 7 & 8 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0.1 & -0.3 \\ 0.6 & 0.25 \\ -0.7 & 0.05 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & 6 & 7 & 8 \end{bmatrix}$$

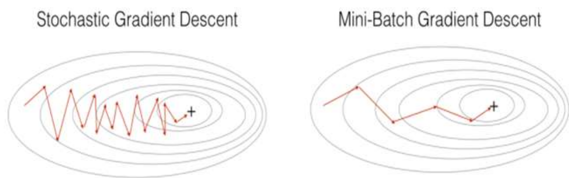
$$= \begin{bmatrix} -1.4 & -1.6 & -1.8 & -2 \\ 1.8 & 2.7 & 3.6 & 4.4 \\ -.5 & -1.1 & -1.7 & -2.4 \end{bmatrix}$$

101

Pour plus de détails:

https://medium.com/datathings/vectorized-implementation-of-back-propagation-1011884df84
https://peterroelants.github.io/posts/neural-network-implementation-part04/

102



103

Comment initialiser un réseau de neurones?

$$W = ?$$

104

Initialisation

Première idée: faibles valeurs aléatoires
(Gaussienne $\mu = 0, \sigma = 0.01$)

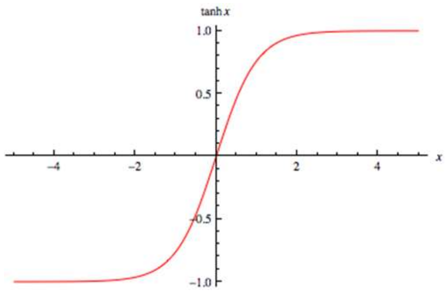
```
W_i=0.01*np.random.randn(H_i,H_im1)
```

Fonctionne bien pour de petits réseaux mais
pas pour des réseaux profonds.

E.g. réseau à 10 couches avec 500 neurones par couche et des **tanh** comme fonctions d’activation.

105

Rappel tanh…

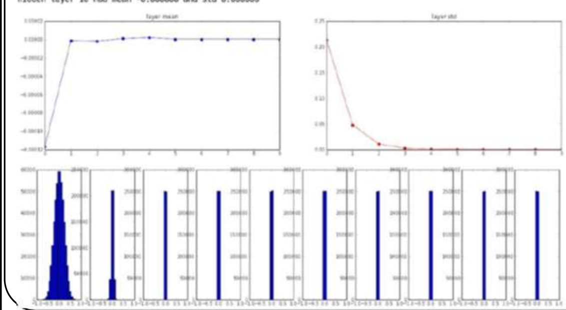


106

Histogrammes des valeurs de sortie des 10 couches.

```
input layer had mean 0.000927 and std 0.998388
hidden layer 1 had mean -0.000117 and std 0.213081
hidden layer 2 had mean -0.000001 and std 0.047551
hidden layer 3 had mean -0.000002 and std 0.010630
hidden layer 4 had mean 0.000001 and std 0.002378
hidden layer 5 had mean 0.000002 and std 0.000532
hidden layer 6 had mean -0.000000 and std 0.000119
hidden layer 7 had mean 0.000000 and std 0.000026
hidden layer 8 had mean -0.000000 and std 0.000006
hidden layer 9 had mean 0.000000 and std 0.000001
hidden layer 10 had mean -0.000000 and std 0.000000
```

L'activation des couches devient zéro!



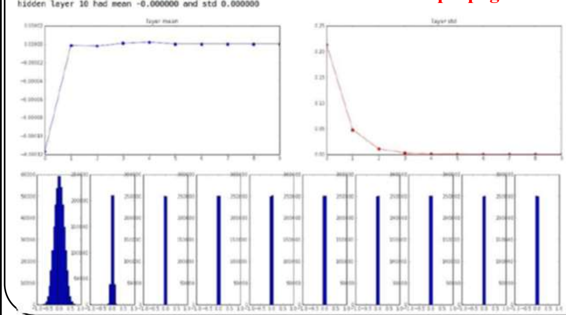
Crédit http://cs231n.stanford.edu/

107

Histogrammes des valeurs de sortie des 10 couches.

```
input layer had mean 0.000927 and std 0.998388
hidden layer 1 had mean -0.000117 and std 0.213081
hidden layer 2 had mean -0.000001 and std 0.047551
hidden layer 3 had mean -0.000002 and std 0.010630
hidden layer 4 had mean 0.000001 and std 0.002378
hidden layer 5 had mean 0.000002 and std 0.000532
hidden layer 6 had mean -0.000000 and std 0.000119
hidden layer 7 had mean 0.000000 and std 0.000026
hidden layer 8 had mean -0.000000 and std 0.000006
hidden layer 9 had mean 0.000000 and std 0.000001
hidden layer 10 had mean -0.000000 and std 0.000000
```

Vous voyez ce qui arrive à la ***forward pass*** et la **rétropropagation?**

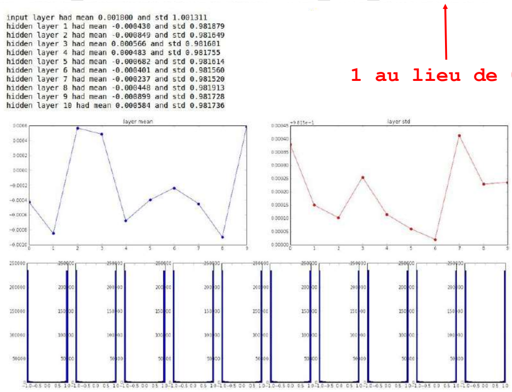


Crédit http://cs231n.stanford.edu/

108

W_i=np.random.randn(H_i,H_im1)*1

1 au lieu de 0.01

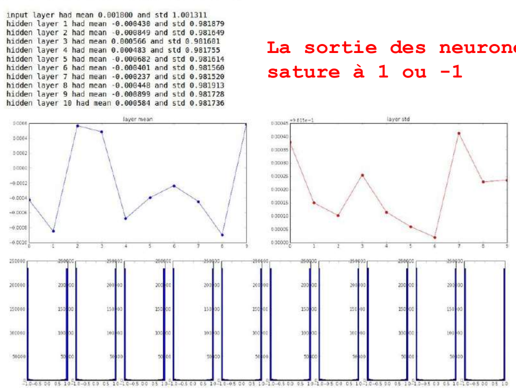


Crédit http://cs231n.stanford.edu/

109

W_i=np.random.randn(H_i,H_im1)*1

La sortie des neurones sature à 1 ou -1

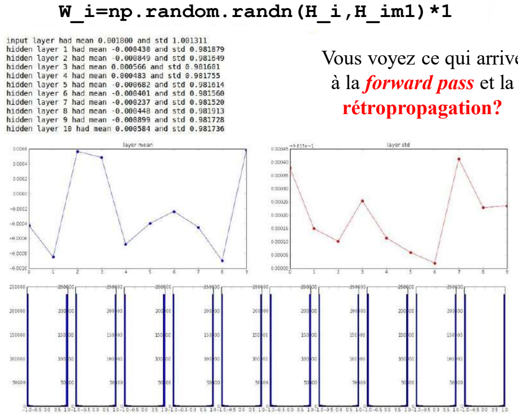


Crédit http://cs231n.stanford.edu/

110

W_i=np.random.randn(H_i,H_im1)*1

Vous voyez ce qui arrive à la ***forward pass*** et la **rétropropagation?**



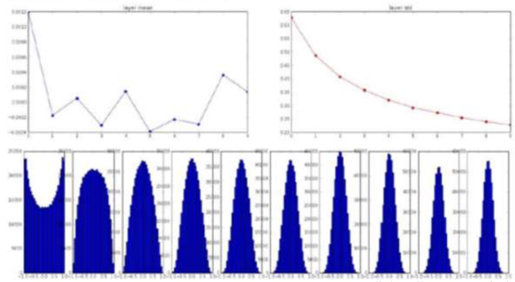
Crédit http://cs231n.stanford.edu/

111

```
W_i=np.random.randn(H_i,H_im1)/np.sqrt(H_im1)
```

```
input layer had mean 0.001000 and std 1.001311
hidden layer 1 had mean 0.001198 and std 0.627953
hidden layer 2 had mean -0.000175 and std 0.486051
hidden layer 3 had mean 0.000055 and std 0.407723
hidden layer 4 had mean -0.000306 and std 0.357108
hidden layer 5 had mean 0.000142 and std 0.320917
hidden layer 6 had mean -0.000389 and std 0.292116
hidden layer 7 had mean -0.000228 and std 0.273387
hidden layer 8 had mean -0.000291 and std 0.254935
hidden layer 9 had mean 0.000361 and std 0.239266
hidden layer 10 had mean 0.000139 and std 0.220008
```

Initialization de type “Xavier”
[Glorot et al., 2010]



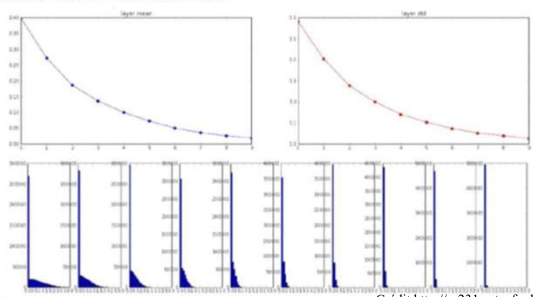
Crédit http://cs231n.stanford.edu/

112

```
W_i=np.random.randn(H_i,H_im1)/np.sqrt(H_im1)
```

```
input layer had mean 0.000501 and std 0.999444
hidden layer 1 had mean 0.398623 and std 0.582273
hidden layer 2 had mean 0.272352 and std 0.403795
hidden layer 3 had mean 0.186076 and std 0.276912
hidden layer 4 had mean 0.136442 and std 0.198685
hidden layer 5 had mean 0.099568 and std 0.140299
hidden layer 6 had mean 0.072234 and std 0.103280
hidden layer 7 had mean 0.049775 and std 0.072748
hidden layer 8 had mean 0.035138 and std 0.051572
hidden layer 9 had mean 0.025404 and std 0.038583
hidden layer 10 had mean 0.018408 and std 0.026076
```

Par contre en utilisant ReLU
on a encore un problème



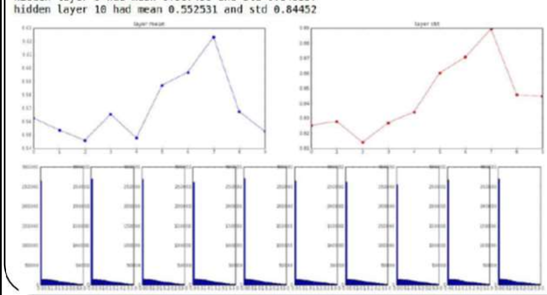
Crédit http://cs231n.stanford.edu/

113

```
W_i=np.random.randn(H_i,H_im1)/np.sqrt(H_im1/2)
```

```
input layer had mean 0.000501 and std 0.999444
hidden layer 1 had mean 0.562488 and std 0.825232
hidden layer 2 had mean 0.553614 and std 0.827835
hidden layer 3 had mean 0.545867 and std 0.813855
hidden layer 4 had mean 0.565396 and std 0.826902
hidden layer 5 had mean 0.547678 and std 0.834092
hidden layer 6 had mean 0.587103 and std 0.860035
hidden layer 7 had mean 0.596867 and std 0.870610
hidden layer 8 had mean 0.623214 and std 0.889348
hidden layer 9 had mean 0.567498 and std 0.845357
hidden layer 10 had mean 0.552531 and std 0.84452
```

He et al., 2015
(note additional /2)

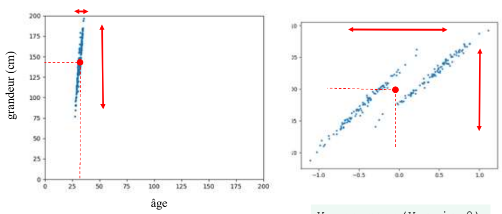


Crédit http://cs231n.stanford.edu/

114

Prétraitement des données

Centrer et **normaliser** les données d'entrée




```
X-=np.mean(X,axis=0)
X/=np.std(X,axis=0)
```

115

Les « sanity checks » ou vérifications diligentes

116

Sanity checks

1. Toujours s'assurer qu'une initialization aléatoire donne une **perte (*loss*) maximale**

Exemple : pour le cas ***10 classes***, une **régularisation à 0** et une ***entropie croisée***.

$$E_D(\mathrm{W}) = -\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} t_{kn} \ln y_{W,k}(\vec{x}_n)$$

Si l'initialisation est aléatoire, alors la probabilité sera en moyenne égale pour chaque classe

$$E_D(\mathrm{W}) = -\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\ln\frac{1}{10}$$
$$= \ln(10)$$
$$= 2.30$$

117

Sanity checks

1. Toujours s'assurer qu'une initialization aléatoire donne **une perte (*loss*) maximale**

Exemple : pour le cas ***10 classes***, une **régularisation à 0** et une ***entropie croisée***.

```
def init_two_layer_model(input_size, hidden_size, output_size):
  # initialize a model
  model = {}
  model['W1'] = 0.0001 * np.random.randn(input_size, hidden_size)
  model['b1'] = np.zeros(hidden_size)
  model['W2'] = 0.0001 * np.random.randn(hidden_size, output_size)
  model['b2'] = np.zeros(output_size)
  return model
```

```
model = init_two_layer_model(32*32*3, 50, 10) # input_size, hidden size, number of classes
loss, grad = two_layer_net(X_train, model, y_train, 0.0)
print loss
2.30261216167
```

disable regularization

loss ~2.3. "correct " for 10 classes

returns the loss and the gradient for all parameters

Crédit http://cs231n.stanford.edu/

Sanity checks

2. Et lorsqu'on **augmente la régularisation**, la perte augmente aussi

```
def init_two_layer_model(input_size, hidden_size, output_size):
  # initialize a model
  model = {}
  model['W1'] = 0.0001 * np.random.randn(input_size, hidden_size)
  model['b1'] = np.zeros(hidden_size)
  model['W2'] = 0.0001 * np.random.randn(hidden_size, output_size)
  model['b2'] = np.zeros(output_size)
  return model
```

```
model = init_two_layer_model(32*32*3, 50, 10) # input_size, hidden size, number of classes
loss, grad = two_layer_net(X_train, model, y_train, 1e3)
print loss
3.06859716482
```

crank up regularization

loss went up, good. (sanity check)

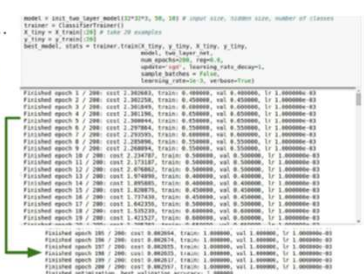
Crédit http://cs231n.stanford.edu/

Sanity checks

3. Toujours s'assurer qu'on peut **« over-fitter » sur un petit nombre de données**.

Lets try to train now…

Tip: Make sure that you can overfit very small portion of the training data

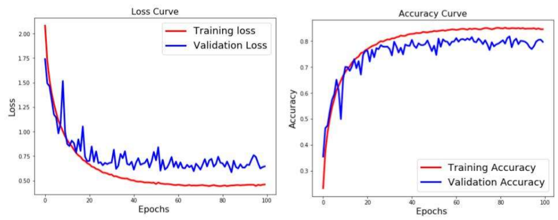


Very small loss, train accuracy 1.00, nice!

Crédit http://cs231n.stanford.edu/

Sanity checks

4. Toujours visualiser les courbes d'apprentissage et de validation

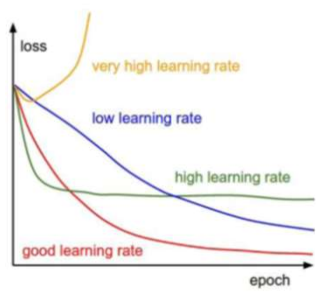


Source: https://www.learnopencv.com/wp-content/uploads/2017/11/cnn-keras-curves-without-aug.jpg

121

Sanity checks

4. Toujours visualiser les courbes d'apprentissage et de validation



Crédit http://cs231n.stanford.edu/

122

Sanity checks

5. Toujours vérifier la validité d'un gradient

Comme on l'a vu, calculer un gradient est sujet à erreur. Il faut donc toujours s'assurer que nos gradients sont bons au fur et à mesure qu'on écrit notre code. En voici la meilleure façon

Rappel

Approximation numérique de la dérivée

$$\frac{df(x)}{dx} = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

123

Sanity checks

5. Toujours vérifier la validité d'un gradient

On peut facilement calculer un gradient à l'aide d'une approximation numérique.

Rappel

Approximation numérique du gradient

$$\nabla E(W) \approx \frac{E(W+H)-E(W)}{H}$$

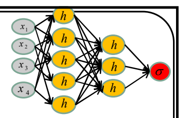
En calculant

$$\frac{\partial E(W)}{\partial w_i} \approx \frac{E(w_i+h)-E(w_i)}{h} \quad \forall i$$

124

Vérification du gradient

(exemple)



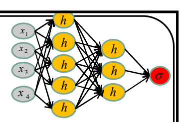
W	**W+h**	**gradient W**
$W_{00} = 0.34$	$W_{00} = 0.34$ **+0.0001**	**-2.5=(1.25322-1.25347)/0.0001**
$W_{01} = -1.11$	$W_{01} = -1.11$	
$W_{02} = 0.78$	$W_{02} = 0.78$	
...	...	
$W_{20} = -3.1$	$W_{20} = -3.1$	
$W_{21} = -1.5,$	$W_{21} = -1.5,$	
$W_{22} = 0.33$	$W_{22} = 0.33$	

E(W)=1.25347 **E(W+h)=1.25322**

125

Vérification du gradient

(exemple)

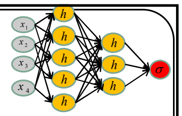


W	**W+h**	**gradient W**
$W_{00} = 0.34$	$W_{00} = 0.34$	**-2.5**
$W_{01} = -1.11$	$W_{01} = -1.11$ **+0.0001**	**0.6=(1.25353-1.25347)/0.0001**
$W_{02} = 0.78$	$W_{02} = 0.78$	
...	...	
$W_{20} = -3.1$	$W_{20} = -3.1$	
$W_{21} = -1.5,$	$W_{21} = -1.5,$	
$W_{22} = 0.33$	$W_{22} = 0.33$	

E(W)=1.25347 **E(W+h)=1.25353**

126

Vérification du gradient
(exemple)

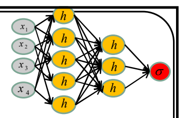


W	W+h	gradient W
$W_{00} = 0.34$	$W_{00} = 0.34$	-2.5
$W_{01} = -1.11$	$W_{01} = -1.11$	0.6
$W_{02} = 0.78$	$W_{02} = 0.78$ +0.0001	0.0=(1.25347-1.25347)/0.0001
...	...	
$W_{20} = -3.1$	$W_{20} = -3.1$	
$W_{21} = -1.5,$	$W_{21} = -1.5,$	
$W_{22} = 0.33$	$W_{22} = 0.33$	

E(W)=1.25347   E(W+h)=1.25347

127

Vérification du gradient
(exemple)

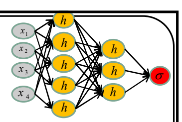


W	W+h	gradient W
$W_{00} = 0.34$	$W_{00} = 0.34$	-2.5
$W_{01} = -1.11$	$W_{01} = -1.11$	0.6
$W_{02} = 0.78$	$W_{02} = 0.78$	0.0
...	...	...
$W_{20} = -3.1$	$W_{20} = -3.1$	1.1
$W_{21} = -1.5,$	$W_{21} = -1.5,$	1.3
$W_{22} = 0.33$	$W_{22} = 0.33$	-2.1

E(W)=1.25347

128

Vérification du gradient
(exemple)



gradient W (numérique)		gradient W (retro-propagation)
-2.5		-2.5
0.6		0.6
0.0	=	0.0
...		...
1.1		1.1
1.3		1.3
-2.1		-2.1

Vérification réussie

129

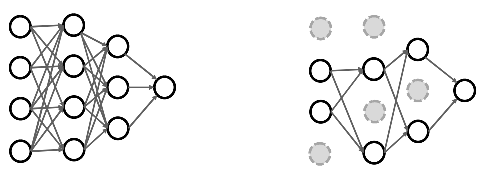
Autre bonne pratique

Dropout

130

Dropout

Forcer à zéro certains neurones de façon aléatoire à chaque itération



Srivastava et al. "Dropout: a simple way to prevent neural networks from overfitting", JMLR 2014

131

Dropout

Idée : s'assurer que **chaque neurone apprend pas lui-même**
en brisant au hasard des chemins.

132

Dropout

```python
p = 0.5 # probability of keeping a unit active. higher = less dropout

def train_step(X):
  """ X contains the data """

  # forward pass for example 3-layer neural network
  H1 = np.maximum(0, np.dot(W1, X) + b1)
  U1 = np.random.rand(*H1.shape) < p # first dropout mask
  H1 *= U1 # drop!
  H2 = np.maximum(0, np.dot(W2, H1) + b2)
  U2 = np.random.rand(*H2.shape) < p # second dropout mask
  H2 *= U2 # drop!
  out = np.dot(W3, H2) + b3

  # backward pass: compute gradients... (not shown)
  # perform parameter update... (not shown)
```

Crédit http://cs231n.stanford.edu/

133

Dropout

Le problème avec ***Dropout*** est en **prédiction (« test time »)**

car *dropout* **ajoute du bruit** à la prédiction

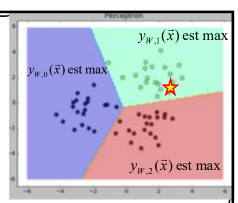
$$pred = y_W\left(\vec{x}, Z\right)$$

masque aléatoire

134

dropout **ajoute du bruit** à la prédiction.

Exemple simple : $\vec{x} = \begin{pmatrix} 2.2 \\ 1.3 \end{pmatrix}, t = 1$

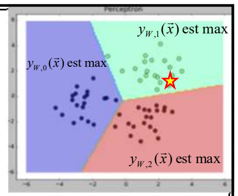


Si on lance le modèle 10 fois, on aura 10 réponses différentes

```
[ 0.09378555  0.76511644  0.141098   ]
[ 0.13982909  0.62885327  0.23131764]
[ 0.23658253  0.61960162  0.14381585]
[ 0.23779425  0.51357115  0.24863461]
[ 0.16005442  0.68060227  0.1593433 ]
[ 0.16303195  0.50583392  0.33113413]
[ 0.24183069  0.51319834  0.24497097]
[ 0.14521815  0.52006858  0.33471327]
[ 0.09952161  0.66276146  0.23771692]
[ 0.16172851  0.6044877   0.23378379]
```

135

dropout **ajoute du bruit** à la prédiction.



Exemple simple : $\vec{x}=\begin{pmatrix}2.2\\1.3\end{pmatrix}, t=1$

Solution, exécuter le modèle un grand nombre de fois et **prendre la moyenne**.

```
[ 0.09378555  0.76511644  0.141098  ]
[ 0.13982909  0.62885327  0.23131764]
[ 0.23658253  0.61960162  0.14381585]
[ 0.23779425  0.51357115  0.24863461]
[ 0.16005442  0.68060227  0.1593433 ]
[ 0.16303195  0.50583392  0.33113413]
[ 0.24183069  0.51319834  0.24497097]
[ 0.14521815  0.52006858  0.33471327]
[ 0.09952161  0.66276146  0.23771692]
[ 0.16172851  0.6044877   0.23378379]
                 (...)
[ 0.15933813,  0.65957005,  0.18109183]
```

136

Exécuter le modèle un grand nombre de fois et **prendre la moyenne** revient à calculer **l'espérance mathématique**

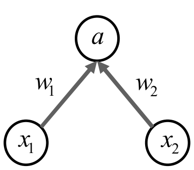
$$pred = E_z\left[y_W(\vec{x},\vec{z})\right]=\sum_i P(\vec{z})y_W(\vec{x},\vec{z})$$

Bonne nouvelle, on peut faire plus simple en approximant l'espérance mathématique!

137

Regardons pour un neurone

Avec une probabilité de *dropout* de 50%, en prédiction w_1 et w_2 seront **nuls 1 fois sur 2**



$$E[a]=\frac{1}{4}(w_1x_1+w_2x_2)+\frac{1}{4}(w_1x_1+0x_2)$$
$$+\frac{1}{4}(0x_1+w_2x_2)+\frac{1}{4}(0x_1+0x_2)$$
$$=\frac{1}{2}(w_1x_1+w_2x_2)$$

En prédiction, on a qu'à multiplier par la prob. de *dropout*.

138

```python
""" Vanilla Dropout: Not recommended implementation (see notes below) """

p = 0.5 # probability of keeping a unit active. higher = less dropout

def train_step(X):
  """ X contains the data """

  # forward pass for example 3-layer neural network
  H1 = np.maximum(0, np.dot(W1, X) + b1)
  U1 = np.random.rand(*H1.shape) < p # first dropout mask
  H1 *= U1 # drop!
  H2 = np.maximum(0, np.dot(W2, H1) + b2)
  U2 = np.random.rand(*H2.shape) < p # second dropout mask
  H2 *= U2 # drop!
  out = np.dot(W3, H2) + b3

  # backward pass: compute gradients... (not shown)
  # perform parameter update... (not shown)

def predict(X):
  # ensembled forward pass
  H1 = np.maximum(0, np.dot(W1, X) + b1) * p # NOTE: scale the activations
  H2 = np.maximum(0, np.dot(W2, H1) + b2) * p # NOTE: scale the activations
  out = np.dot(W3, H2) + b3
```

En prédiction, tous les neurones sont actifs

➔ tout ce qu'il faut faire est de **multiplier la sortie de chaque couche par la probabilité de dropout**

Crédit http://cs231n.stanford.edu/

139

NOTE

Au tp2, vous implanterez un **dropout inverse**. À vous de le découvrir!

140

Descente de gradient
version améliorée

141

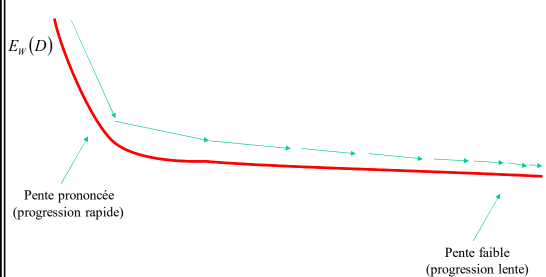
Descente de gradient

$$W^{[t+1]} = W^{[t]} - \eta \nabla E_{W^{[t]}}(D)$$

142

Descente de gradient : **problème**

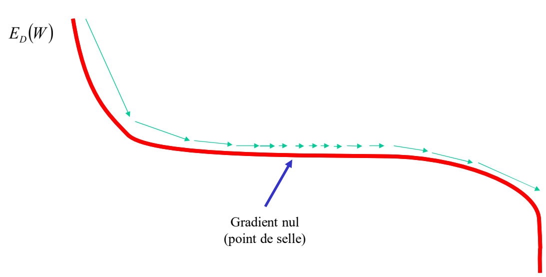
Progrès quasi nul lorsque la pente est très faible



143

Descente de gradient : **problème**

Les points de selles sont fréquents en haute dimension



144

Descente de gradient : **problème**

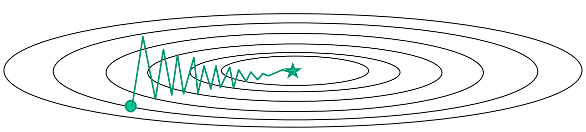
Qu'arrive-t-il si la fonction de coût (loss) a une pente prononcée dans une direction et moins prononcée dans une autre direction?

145

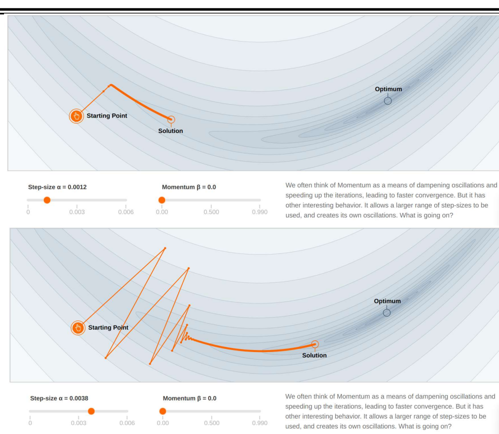
Descente de gradient : **problème**

Qu'arrive-t-il si la fonction de coût (loss) a une pente prononcée dans une direction et moins prononcée dans une autre direction?

Progrès très lent le long de la pente la plus faible et oscillation le long de l'autre direction.



146



https://distill.pub/2017/momentum/

147

Descente de gradient + **Momentum**

Descente de gradient $E_D(W)$ stochastique

$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta \nabla E_{\vec{x}_n}\left(\mathrm{w}_t\right)$$

Descente de gradient stochastique + **Momentum**

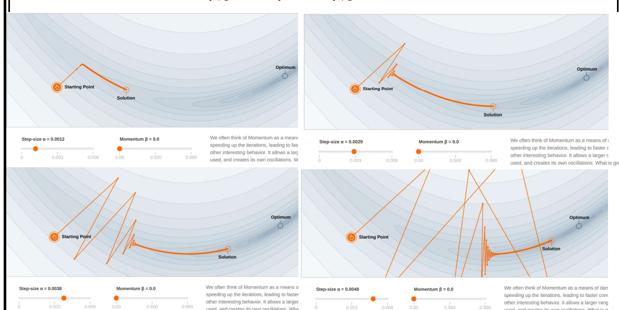
$$v_{t+1} = \alpha v_t + (1-\alpha)\nabla E_{\vec{x}_n}(W_t)$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta v_{t+1}$$

Provient de l'équation de la vitesse

ρ exprime la « friction », en général $\in [0.5, 1[$

148

$$v_{t+1} = \alpha v_t + (1-\alpha)\nabla E_{\vec{x}_n}(W_t)$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta v_{t+1}$$



https://distill.pub/2017/momentum/

149

$$v_{t+1} = \alpha v_t + (1-\alpha)\nabla E_{\vec{x}_n}(W_t)$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta v_{t+1}$$

150

AdaGrad (décroissance automatique de η)

Descente de gradient stochastique

$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$

AdaGrad

$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$
$$m_{t+1} = m_t + |dE_t|$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1} + \varepsilon} dE_t$$

151

AdaGrad (décroissance automatique de η)

Descente de gradient stochastique

$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$

AdaGrad

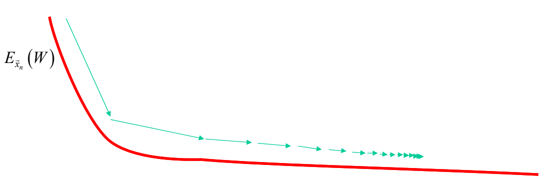
$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$
$$m_{t+1} = m_t + |dE_t|$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1} + \varepsilon} dE_t$$

η décroit sans cesse au fur et à mesure de l'optimisation

152

AdaGrad (décroissance automatique de η)

Qu'arrive-t-il à long terme?



$$\frac{\eta}{m_{t+1} + \varepsilon} \rightarrow 0$$

153

RMSProp (AdaGrad amélioré)

AdaGrad

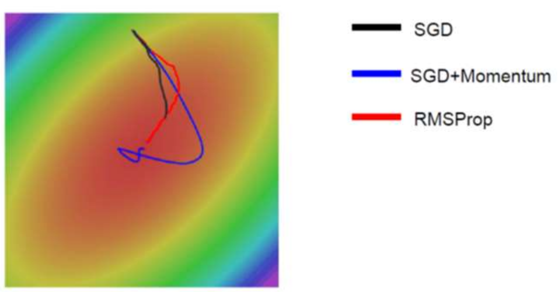
$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$
$$m_{t+1} = m_t + |dE_t|$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1} + \varepsilon} dE_t$$

RMSProp

$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$
$$m_{t+1} = \gamma m_t + (1-\gamma)|dE_t|$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1} + \varepsilon} dE_t$$

η décroit lorsque le gradient est élevé
η augmente lorsque le gradient est faible

154



155

Adam (Combo entre Momentum et RMSProp)

Momentum

$$v_{t+1} = \rho v_t + \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta v_{t+1}$$

Adam

$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$
$$v_{t+1} = \alpha v_t + (1-\alpha) dE_t$$
$$m_{t+1} = \gamma m_t + (1-\gamma)|dE_t|$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1} + \varepsilon} v_{t+1}$$

156

Adam (Combo entre Momentum et RMSProp)

Momentum

$$v_{t+1} = \rho v_t + \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$

$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta v_{t+1}$$

Adam

Momentum

$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$

$$\boxed{v_{t+1} = \alpha v_t + (1-\alpha) dE_t}$$

$$m_{t+1} = \gamma m_t + (1-\gamma)|dE_t|$$

$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1}+\varepsilon} v_{t+1}$$

157

Adam (Combo entre Momentum et RMSProp)

RMSProp

$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$

$$m_{t+1} = \gamma m_t + (1-\gamma)|dE_t|$$

$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1}+\varepsilon} dE_t$$

Adam

RMSProp

$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$

$$v_{t+1} = \alpha v_t + (1-\alpha) dE_t$$

$$\boxed{m_{t+1} = \gamma m_t + (1-\gamma)|dE_t|}$$

$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1}+\varepsilon} v_{t+1}$$

158

Adam (Version complète)

$$v_{t=0} = 0$$

$$m_{t=0} = 0$$

```
for t=1 à num_iterations
      for n=0 à N
```

$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$

$$v_{t+1} = \alpha v_t + (1-\alpha) dE_t$$

$$m_{t+1} = \gamma m_t + (1-\gamma)|dE_t|$$

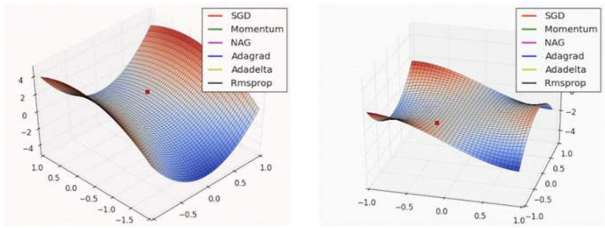
$$v_{t+1} = \frac{v_{t+1}}{1-\beta_1^t}, m_{t+1} = \frac{m_{t+1}}{1-\beta_2^t}$$

$\beta_1 = 0.9, \beta_2 = 0.99$

$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1}+\varepsilon} v_{t+1}$$

159

Illustrations

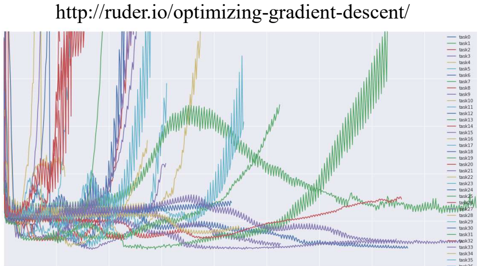


À voir sur :
www.denizyuret.com/2015/03/alec-radfords-animations-for.html

160

Autre excellent survol

http://ruder.io/optimizing-gradient-descent/



161