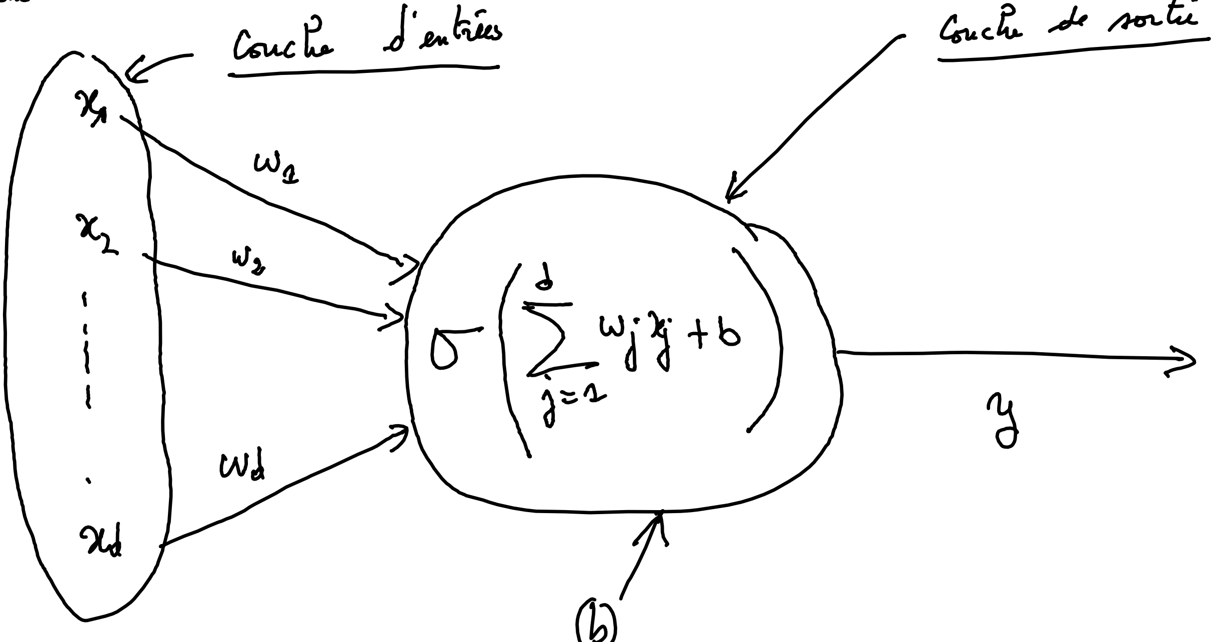
I) Architecture d'un réseau de neurones:

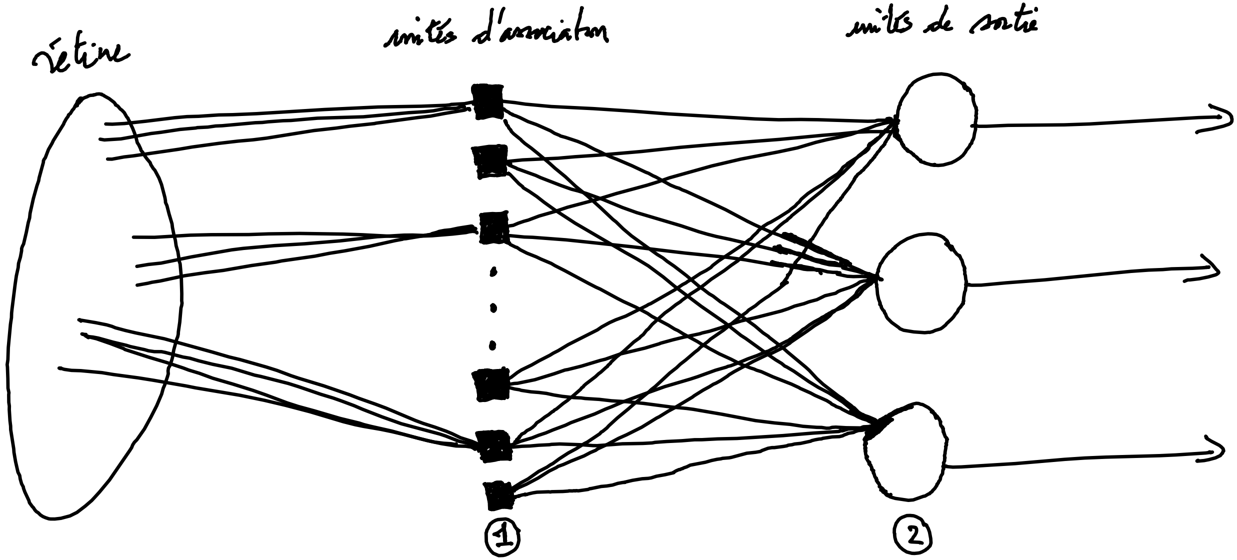
- Le neurophysiologiste Warren McCulloch et le mathématicien Walter Pitts ont réalisé un portrait à l'aide d'un circuit électrique.

- Un neurone de McCulloch-Pitts prend des entrées binaires, calcule une somme pondérée et renvoie 0 si le résultat est inférieur au <u>seuil</u> et 1 dans le cas contraire.



- À la fin des années 50, Frank Rosenblatt, psychologue à Cornell, a travaillé sur les systèmes de décision présents dans l'oeil d'une mouche, qui déterminent sa réaction de fuite.

- En 1958, il a proposé l'idée d'un perceptron qu'il a appelé "Mark I Perceptron". Il s'agissait d'un système avec une relation entrée-sortie simple, modelé par un neurone de McCulloch-Pitts.

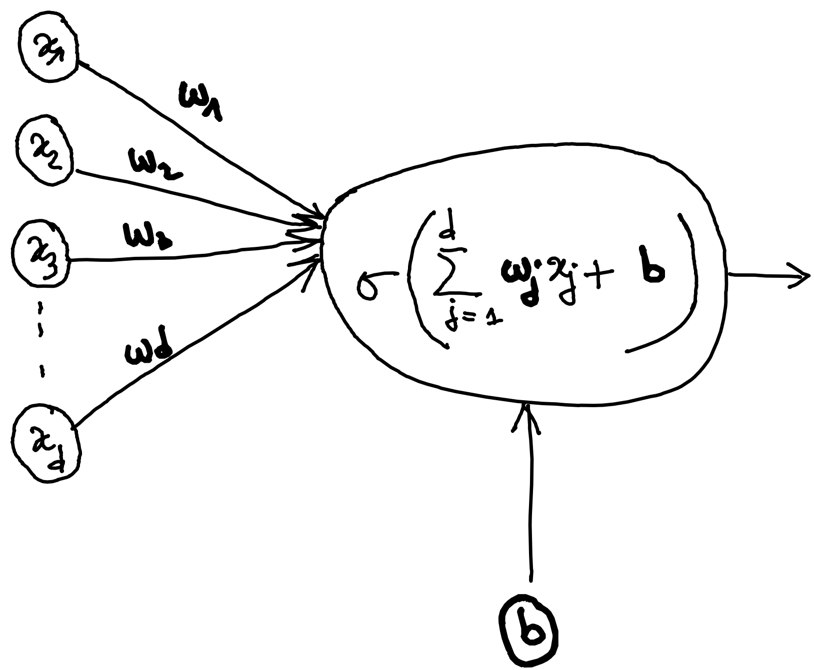


Les connexions entre 1 et 2 ne peuvent pas être optimisées.

Paramètres d'un perceptron:

- Fonction d'activation

$$\sigma(z) = \mathbb{1}_{]-\infty, 0[}(z)$$



"Learnable" :

- Poids $w = (w_1, ---, w_d) \in \mathbb{R}^d$

- biais $\underline{\underline{b}} \in \mathbb{R}$

Comment estimer (w, b) ?

Algorithme du Perceptron:

Nous avons les données $\mathcal{D}_n = \{(x_i, y_i), i=1, \dots, d\}$ avec $y_i \in \{-1, +1\}$.

On note $\tilde{w} = (w_1, \dots, w_d, b)$ et $\tilde{x}_i = (x_i, 1)$.

Algorithme du perceptron : (premier algorithme d'apprentissage)

* $\tilde{w} = 0$
* Pour chaque donnée $(\tilde{x}_i, y_i)$
  - Si $y_i \langle \tilde{w}, \tilde{x}_i \rangle \leq 0$ modifier $\tilde{w} = \tilde{w} + y_i \tilde{x}_i$
  - Sinon ne pas modifier $\tilde{w}$.

Questions:
- Pourquoi ça marche ? (intuition)
- Est-ce lié à une descente du gradient ?

Descente du gradient :

1. départ avec $\tilde{w} = 0$ (vecteur de zéros)

2. mise à jour $\tilde{w} \longleftarrow \tilde{w} - \eta \nabla \ell(\tilde{w})$

   ℓ est la fonction de perte à minimiser.

3. arrêt si $\tilde{w}$ ne bouge plus.

Une donnée est mal-classée si $y_i \langle \tilde{w}, \tilde{x}_i \rangle \leq 0$. On veut minimiser la perte

$$\ell(\tilde{w}) = - \sum_{i \in \mathcal{M}_{\tilde{w}}} y_i \langle \tilde{w}, \tilde{x}_i \rangle$$

où $\mathcal{M}_{\tilde{w}}$ est l'ensemble des indices des données mal-classées par $\tilde{w}$.

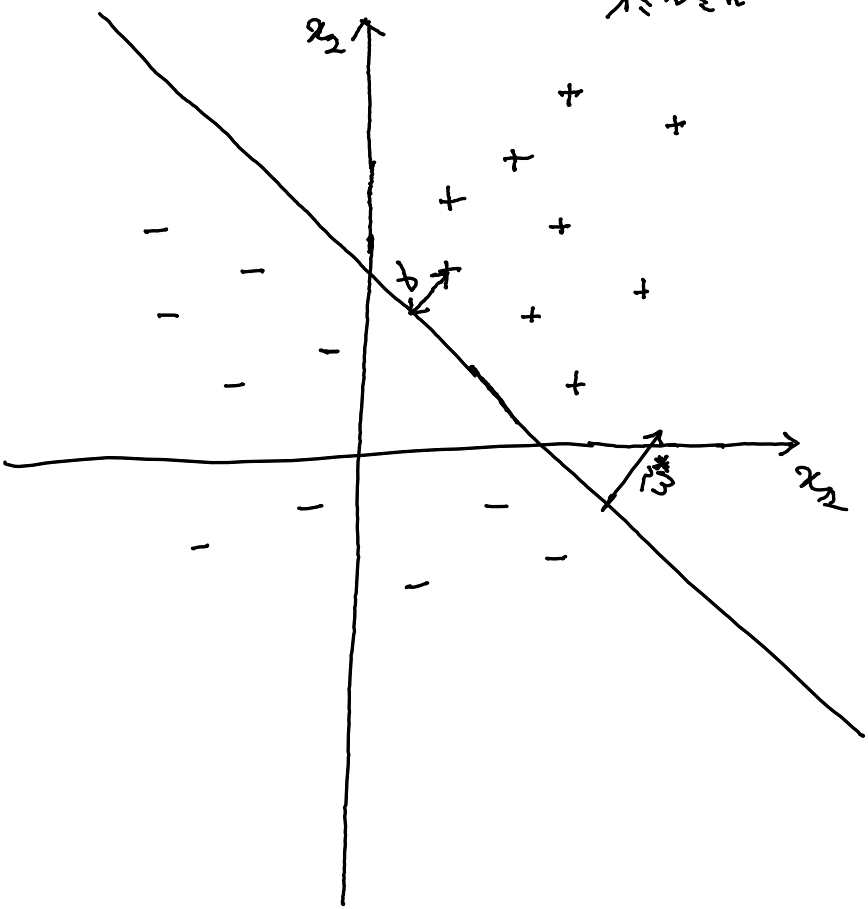
Descente du gradient : (stochastique)

1. Sélectionner au hasard un indice $i \in \mathcal{M}_{\tilde{w}}$

2. Mettre à jour $\tilde{w} \leftarrow \tilde{w} - \eta \nabla \ell_i(\tilde{w}) = \tilde{w} + \eta y_i \tilde{x}_i$.

Algorithme du perceptron : $\eta = 1$.

__Exercice :__ On note $R = \max_{1 \leq i \leq n} \|x_i\|$. Soit $\tilde{w}^*$ l'hyperplan optimal de marge $\gamma = \min_{1 \leq i \leq n} y_i \langle \tilde{w}^*, \tilde{x}_i \rangle$ où $\|\tilde{w}^*\| = 1$.



__Théorème :__ (Block (1962) et Novikoff (1963))

Supposons que le jeu de données $D_n = \{(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)\}$ est linéairement séparable ($\gamma > 0$). On initialise $\tilde{w}_0 = 0$. Le nombre de mises à jour k de l'algorithme du perceptron est borné par

$$k + 1 \leq \frac{1 + R^2}{\gamma^2}.$$

Inégalité de Cauchy-Schwarz : $\langle \tilde{w}^*, \tilde{w}_{k+1} \rangle \leq \|\tilde{w}_{k+1}\|_2$

car $\|\tilde{w}^*\|_2 = 1$ avec égalité si et seulement si $\tilde{w}_{k+1} \propto \tilde{w}^*$. Par construction,

$$
\begin{aligned}
\langle \tilde{w}^*, \tilde{w}_{k+1} \rangle &= \langle \tilde{w}^*, \tilde{w}_k \rangle + y_i \langle \tilde{w}^*, \tilde{x}_i \rangle \\
&\geqslant \langle \tilde{w}^*, \tilde{w}_k \rangle + \gamma \\
&\geqslant \langle \tilde{w}^*, \tilde{w}_0 \rangle + (k+1)\gamma \\
&\geqslant (k+1)\gamma \quad \text{car } \tilde{w}_0 = 0.
\end{aligned}
$$

Nous avons aussi :

$$
\begin{aligned}
\|\tilde{w}_{k+1}\|^2 &= \|\tilde{w}_k\|^2 + \|\tilde{x}_i\|^2 + 2\langle \tilde{w}_k, y_i \tilde{x}_i \rangle \\
&\leqslant \|\tilde{w}_k\|^2 + R^2 + 1 \\
&\leqslant (k+1)(1+R^2)
\end{aligned}
\quad \left.\right] \; \|\tilde{x}_i\|^2 = R^2 + 1 \text{ et } \langle \tilde{w}_k, y_i \tilde{x}_i \rangle \leq 0 \text{ car le point } (\tilde{x}_i, y_i) \text{ est mal-classé.}
$$

$$
(k+1)\gamma \leq \sqrt{(k+1)(1+R^2)} \iff k+1 \leqslant \frac{1+R^2}{\gamma^2}.
$$

Perceptron : bilan et critiques

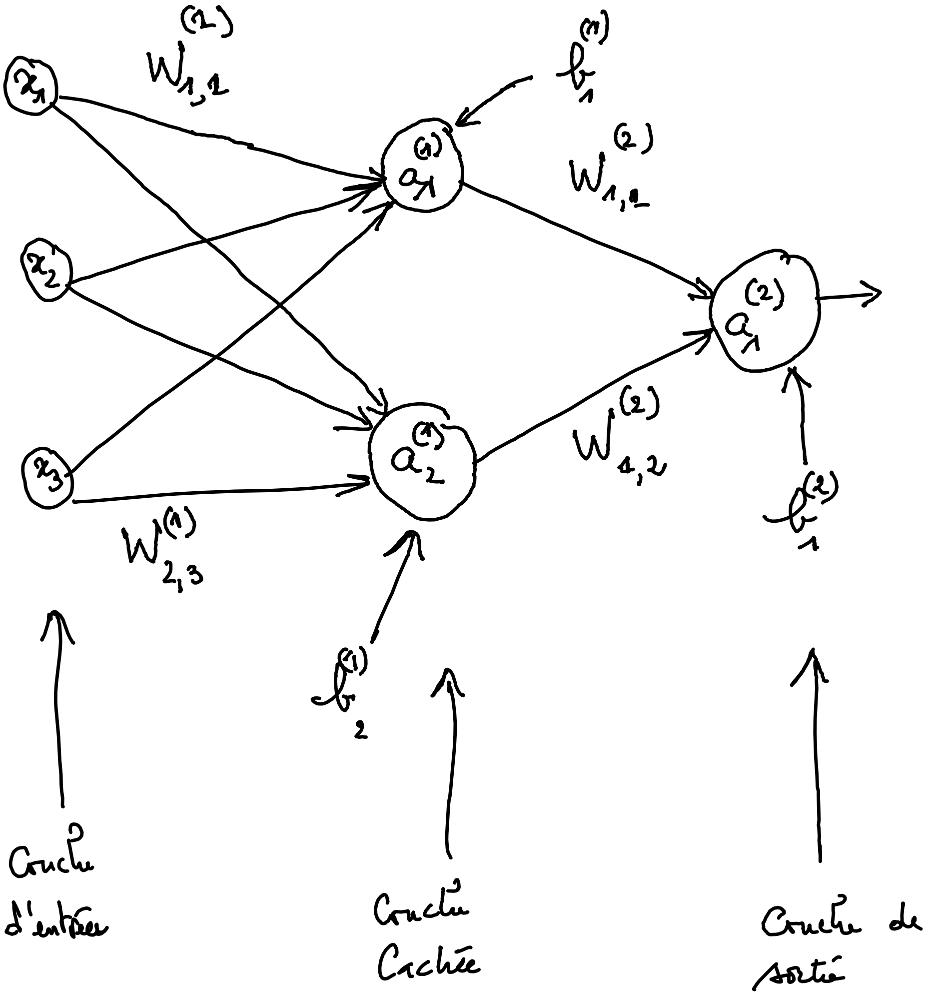
Bilan :

* Nous avons un jeu de données $D_n = \{(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$
* Nous utilisons l'algorithme du perceptron pour estimer les poids $\mathbf{w}$ et le terme dit de biais $\mathbf{b}$.
* On va prédire en utilisant la fonction $f_{(w,b)}(x) = \mathbb{1}_{\langle w, x \rangle + b > 0}$

Limites :

* La frontière de décision est linéaire ! (trop simple).
* L'algorithme du perceptron ne converge pas si les données ne sont pas linéairement séparables : dans ce cas, l'algorithme ne doit pas être utilisé.
* Donc, en pratique : **à ne pas utiliser**.

Réseau de neurones avec une couche cachée :



Notations :

1. $W^{(l)}_{i,j}$: poids entre le neurone $\underline{j}$ de la couche $l-1$ et le neurone $\underline{\underline{i}}$ de la couche l.

2. $b^{(l)}_j$: biais du neurone j de la couche l.

3. $a^{(l)}_j$: sortie du neurone j de la couche l.

4. $z^{(l)}_j$: entrée du neurone j de la couche l telle que

$$a^{(l)}_j = \sigma\left(z^{(l)}_j\right).$$

Estimation de poids et biais : (descente du gradient)

- La prédiction est donnée par $f_\theta(x)$

- Minimisation du risque empirique

$$\underset{\theta}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \ell(Y_i, f_\theta(X_i)) = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \ell_i(\theta)$$

Descente du gradient stochastique :

Tant que $\| \theta_t - \theta_{t-1} \| \geq \varepsilon$:

* On tire $I_t \subset \{1, \dots, n\}$
* $$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta_t \left(\frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} \nabla_\theta \ell_i(\theta_t) \right)$$

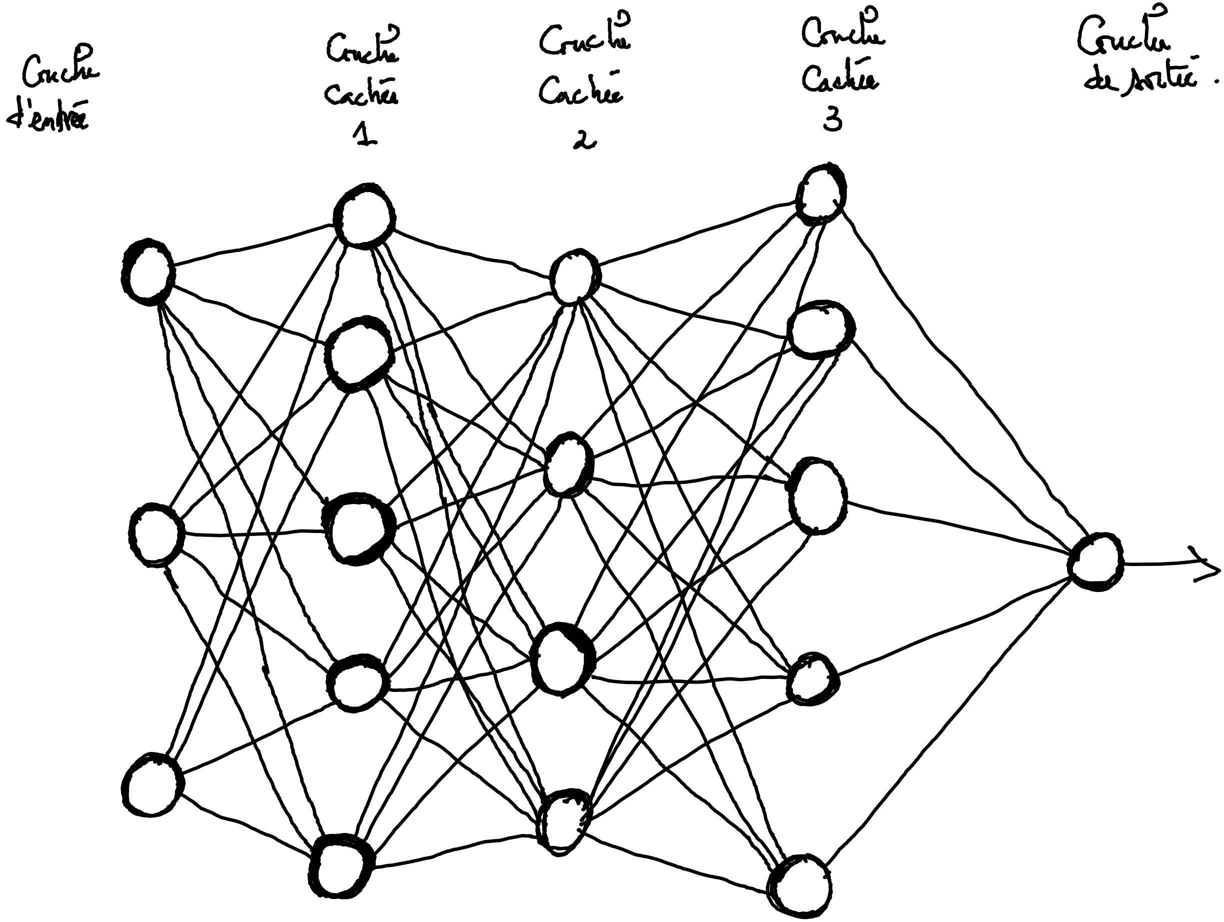
Peut-on calculer $\nabla_\theta \ell_i$ de manière efficace ?

Rétropropagation du gradient :

* Connu avec les travaux de Rumelhart, McClelland, Hinton en 1986.
* Remonte à Werbos en 1974.
* C'est une formule de dérivation en chaîne.

- C'est le secret de fonctionnement des réseaux de neurones.
- Au cœur du fonctionnement des réseaux de neurones profonds.

Idée de rétropropagation du gradient :



Equations de rétropropagation :

Un reseau de neurones avec L couches, avec une sortie vectorielle et une fonction de perte quadratique :

$$C = \frac{1}{2} \| y - a^{(L)} \|^2$$

Par définition : $$\delta_j^{(\ell)} = \frac{\partial C}{\partial z_j^{(\ell)}}$$

Les 4 équations de la rétropropagation du gradient sont données par :

$$\delta^{(L)} = \nabla_a C \odot \sigma'(z^{(L)}) \quad \text{--- (1)}$$

$$\delta^{(\ell)} = \left((w^{(\ell+1)})^T \delta^{(\ell+1)} \right) \odot \sigma'(z^{(\ell)}) \quad \text{---- (2)}$$

$$\frac{\partial C}{\partial b_j^{(\ell)}} = \delta_j^{(\ell)} \quad \text{--- (3)}$$

$$\frac{\partial C}{\partial w_{j,k}^{(\ell)}} = a_k^{(\ell-1)} \delta_j^{(\ell)} \quad \text{---- (4)}$$

Preuve: $\delta^{(L)} = \nabla_a C \odot \sigma'(z^{(L)})$, en appliquant la dérivation par chaine :

$$\delta_j^{(L)} = \sum_k \frac{\partial C}{\partial a_k^{(L)}} \frac{\partial a_k^{(L)}}{\partial z_j^{(L)}}.$$

où $z_j^{(L)}$ l'entrée du $j$ème neurone de la couche L. Comme l'activation $a_k^{(L)}$ ne dépend seulement de l'entrée $z_j^{(L)}$, nous avons:

$$\delta_j^{(L)} = \frac{\partial C}{\partial a_j^{(L)}} \times \frac{\partial a_j^{(L)}}{\partial z_j^{(L)}}$$

Comme $a_j^{(L)} = \sigma(z_j^{(L)})$, nous avons :

$$\underbrace{\delta_j^{(L)} = \frac{\partial C}{\partial a_j^{(L)}} \sigma'(z_j^{(L)})}_{},$$

c'est la $j$ème composante de l'équation (1).

Maintenant, on veut vérifier que

$$\delta^{(\ell)} = \left[(w^{(\ell+1)})^T \delta^{(\ell+1)}\right] \odot \sigma'(z^{(\ell)}) \quad \text{------} \quad (2)$$

<u>Dérivation par chaîne:</u>

$$\delta_j^{(\ell)} = \frac{\partial C}{\partial z_j^{(\ell)}}$$

$$= \sum_k \frac{\partial C}{\partial z_k^{(\ell+1)}} \frac{\partial z_k^{(\ell+1)}}{\partial z_j^{(\ell)}}.$$

$$= \sum_k \delta_k^{(\ell+1)} \frac{\partial z_k^{(\ell+1)}}{\partial z_j^{(\ell)}}$$

Rappelons que : $z_k^{(\ell+1)} = \sum_j w_{kj}^{(\ell+1)} \sigma(z_j^{(\ell)}) + b_k^{\ell+1}$, nous avons donc

$$\delta_j^{(\ell)} = \sum_k \delta_k^{(\ell+1)} w_{kj}^{(\ell+1)} \sigma'(z_j^{(\ell)}).$$

On peut maintenant vérifier que :

$$\frac{\partial C}{\partial b_j^{(\ell)}} = \delta_j^{(\ell)} \quad \text{- - - -} \quad (3)$$

Dérivation par chaîne :

$$\frac{\partial C}{\partial b_j^{\ell}} = \sum_k \frac{\partial C}{\partial z_k^{(\ell)}} \frac{\partial z_k^{(\ell)}}{\partial b_j^{\ell}}$$

$z_j^{(\ell)}$ dépend seulement de b_j^{ℓ} et $z_j^{(\ell)} = \sum_k W_{jk}^{(\ell)} \sigma\left(z_k^{(\ell-1)}\right) + b_j^{\ell}$.

donc

$$\frac{\partial C}{\partial b_j^{(\ell)}} = \delta_j^{(\ell)}.$$

Maintenant, on s'intéresse :

$$\frac{\partial C}{\partial w_{j,k}^{(\ell)}} = a_k^{(\ell-1)} \delta_j^{(\ell)} \quad \text{-----} \quad (4)$$

Dérivation par chaîne :

$$\frac{\partial C}{\partial w_{j,k}^{(\ell)}} = \sum_m \frac{\partial C}{\partial z_m^{(\ell)}} \frac{\partial z_m^{(\ell)}}{\partial w_{j,k}^{(\ell)}}$$

Comme $z_m^{(\ell)} = \sum_k w_{mk}^{(\ell)} \sigma(z_k^{\ell-1}) + b_m^{\ell}$, nous avons

$$\frac{\partial z_m^{(\ell)}}{\partial w_{j,k}^{(\ell)}} = \sigma(z_k^{(\ell-1)}) \mathbb{1}\{m=j\}.$$

Donc :

$$\frac{\partial C}{\partial w_{j,k}^{(\ell)}} = \delta_j^{(\ell)} \sigma(z_k^{(\ell-1)}) = a_k^{(\ell-1)} \delta_j^{(\ell)}.$$

Algorithme de rétropropagation :

Soit $$\delta_j^{(\ell)} = \frac{\partial C}{\partial z_j^{(\ell)}}$$ où $z_j^{(\ell)}$ est l'entrée du neurone j de la couche ℓ.

Entraînement d'un réseau de neurones :

(a) Initialiser aléatoirement les poids et biais du réseau

(b) Pour toutes les données $(x_i)_{i \in B}$ dans le lot $\underline{B}$.

à répéter jusqu'à convergence.

1. <u>Feed forward</u> : faire passer toutes les données du lot dans le réseau et stocker les valeurs la fonction d'activation et sa dérivée de chaque neurone.
2. <u>Perte</u> : Calculer la perte moyenne sur tout le lot du réseau.
3. <u>Rétropropagation</u> : Calculer récursivement les vecteurs $\delta^{(\ell)}$ en partant de $\ell = L$ à $\ell = 1$ à l'aide des équations (1) et (2). Calculer le gradient avec les équations (3) et (4).
4. <u>Optimisation</u> : Mise à jour des poids et biais à l'aide d'un pas de gradient

Vocabulaire des réseaux de neurones :

* (Mini) batch size : nombres de données dans un feedforward / backward. Plus la taille est grande, plus vous avez besoin de mémoire.

* Nombre d'itérations : nombre de mises à jour des paramètres pendant toute la durée de l'apprentissage.

* Époque (epoch) : nombre d'itérations nécessaires pour que le réseau ait "vu" autant d'observations qu'il y en a dans le jeu de données d'apprentissage.

Par exemple : pour un jeu de données de taille 12800, si on utilise un batch size de 128, nous avons besoin de 100 itérations pour "compléter 1 epoch".

Déclaration et entrainement d'un réseau de neurones :

Structure du réseau :

* Nombre de couches / neurones par couche
* Fonctions d'activation
* Unité de sortie
* Couches particulières (dropout et normalisation)

Optimisation :

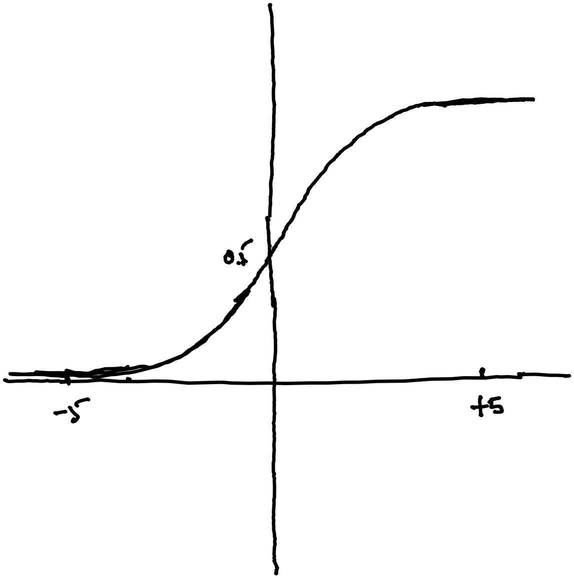
* Fonction de perte
* Algorithme d'optimisation
* Initialisation des poids / biais.

Nombre de neurones et couches cachées:

* Aucune règle particulière
* Suivre des articles de recherche autour de la question et tester les propositions
* tester des variations et regarder les performances.
* Attention : trop de pifométrie (sans base théorique).

* Quelques travaux:
  * Network pruning (Blalock et al. 2020).
  * AgEBO-Tabular (Egele et al. 2020).

Fonctions d'activation : Sigmoid



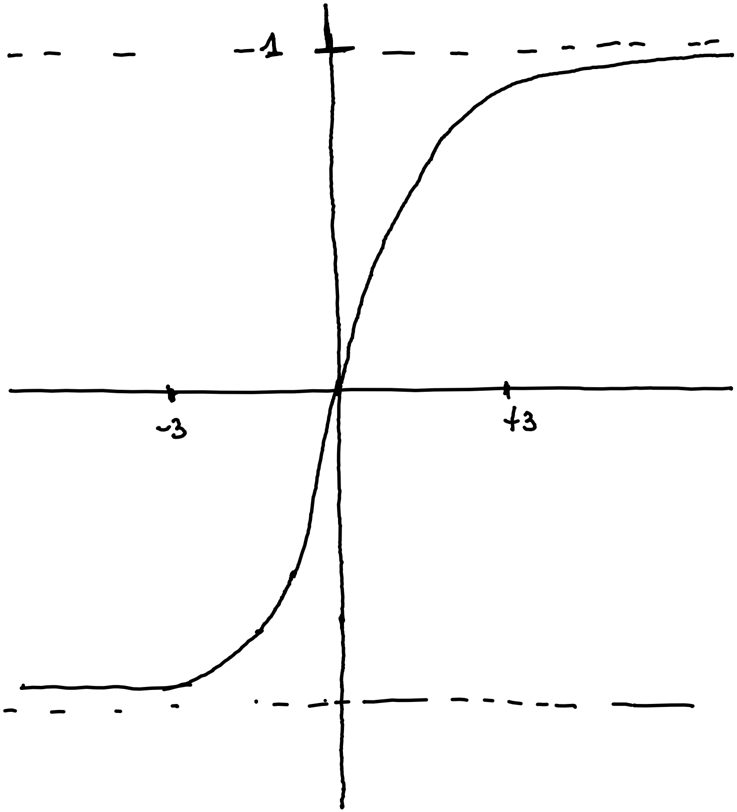
$$\sigma : x \longmapsto \frac{\exp(x)}{1 + \exp(x)}$$

Commentaires :

* Fonctions saturées en raison de asymptotes horizontales:
  1. Gradient proche de zéro dans ces zones.
  2. Normalisation des données de chaque couche pour éviter.

* $\exp(x)$ peut coûter un peu de temps.

Fonction d'activation : Tangente hyperbolique :



Commentaires :

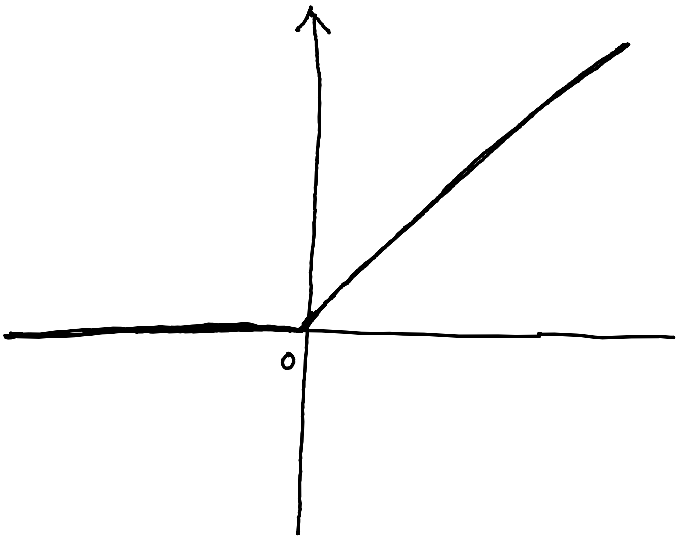
* Fonction centrée.
* Saturée
* Calcul de exp(x)

Notons que :

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

$$\tanh : x \longmapsto \frac{\exp(x) - \exp(-x)}{\exp(x) + \exp(-x)}$$

Fonction d'activation : Rectified Linear Unit (ReLU)



Commentaires :

* Non saturée à $+\infty$
* Saturée en $x \leq 0$.
* Calcul peu coûteux.

$$\mathrm{ReLU} : x \longmapsto \max(0, x)$$