



искусственные нейронные сети

Евгений Борисов

Нейросети

нейронные сети

- вычислительная нейробиология

цель: моделировать процессы в живых организмах

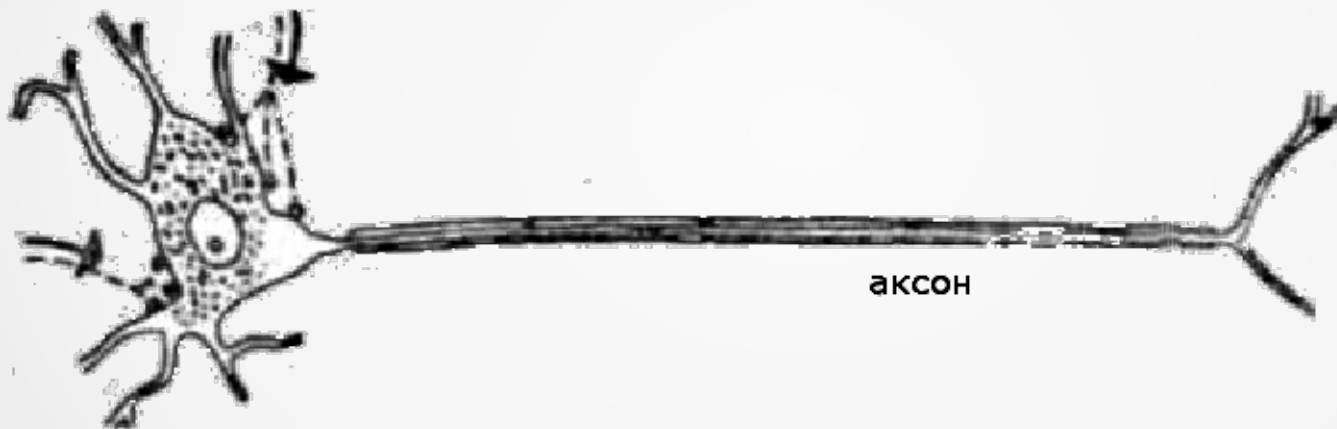
- теория искусственных нейронных сетей

цель: построить искусственную интеллектуальную систему

Нейросети

нервная клетка

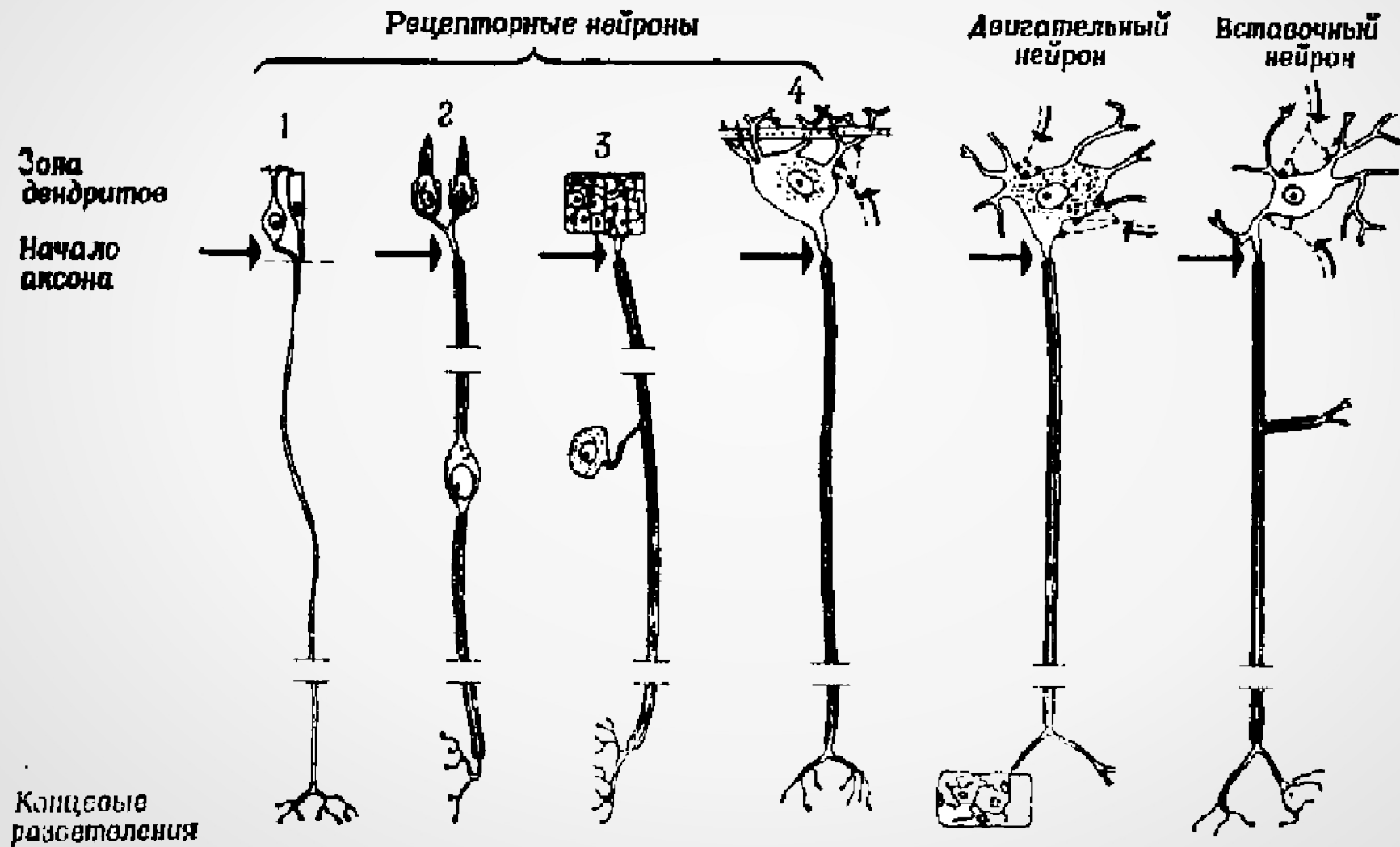
дендриты



аксон

Нейросети

различные типы нервных клеток



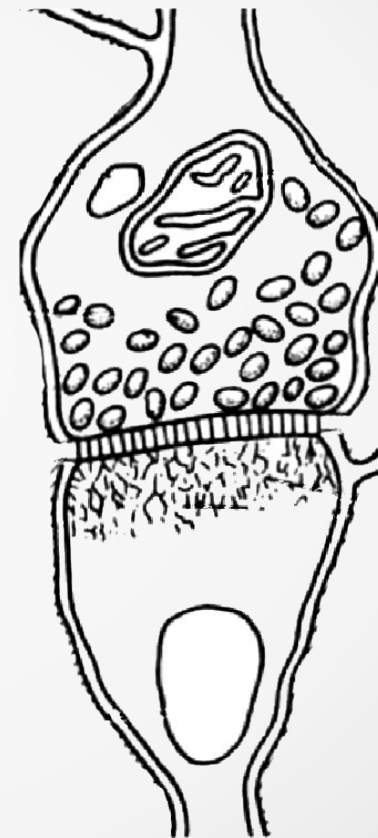
Нейросети

синапс - межнейронные соединения

ширина зазора ~50нм

однонаправленная передача сигнала

вещество-нейромедиатор передаёт
сигнал химическим способом



Нейросети

нервный импульс - электрохимическая реакция

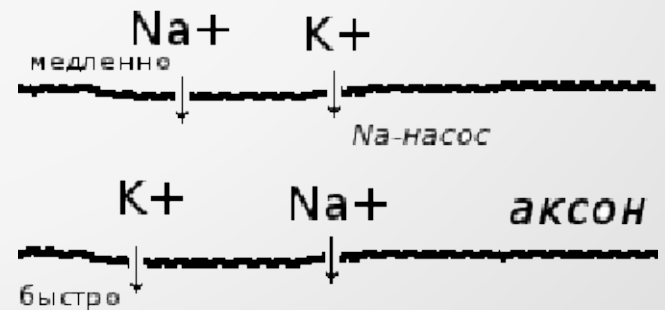
мембранная теория

разница потенциалов на клеточной мембране $\sim 60\text{мВ}$

при стимуляции разряжается, выбрасывает нейромедиатор

изменяемая проницаемость мембраны

проникновение ионов Na^+ K^+ через мембрану
с разной скоростью образует разницу потенциалов



Нейросети

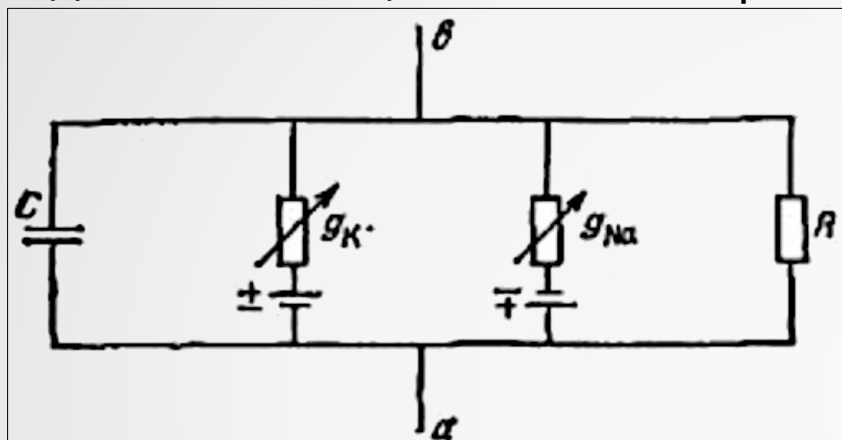
модель Ходжкина-Хаксли

Hodgkin, A., and Huxley, A. Currents carried by sodium and potassium ions through the membrane of the giant axon of loligo. - J. Physiol. (1952) 116, 449-472

Laboratory of the Marine Biological Association, Plymouth
Physiological Laboratory, University of Cambridge

Нейросети

модель Ходжкина-Хаксли изменение проницаемости при сдвиге потенциала на мембране нервной клетки



эквивалентная схема мембраны аксона кальмара

в - внешняя среда (вода)

а - внутренняя среда (аксоплазма)

параллельно включенные

- емкость C

- два элемента-источника тока

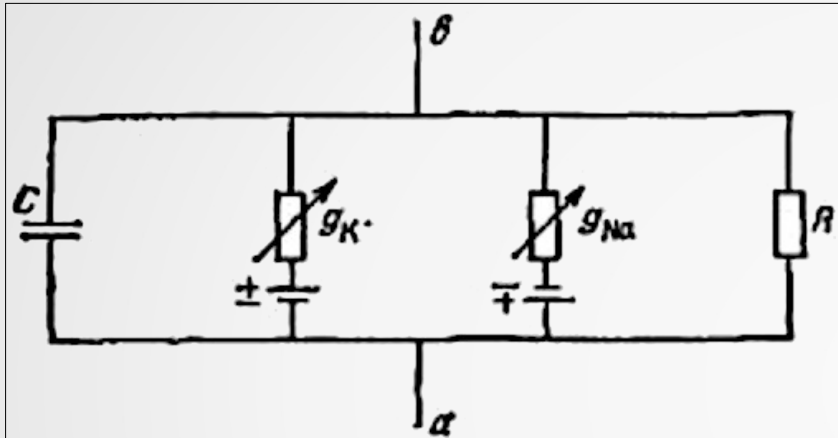
- переменные сопротивления

определяются калиевой g_K и g_{Na}

натриевой проводимостями

Нейросети

модель Ходжкина-Хаксли изменение проницаемости при сдвиге потенциала на мембране нервной клетки



эквивалентная схема мембраны аксона кальмара

в - внешняя среда (вода)
а - внутренняя среда (аксоплазма)

параллельно включенные
- емкость C
- два элемента-источника тока
- переменные сопротивления
определяются калиевой g_K и g_{Na}
натриевой проводимостями

$$C \frac{dV}{dt} = g_K (V - V_K) + g_{Na} (V - V_{Na}) + I(t),$$

$$g_K = g_{K \max} \cdot n^4,$$

$$g_{Na} = g_{Na \max} \cdot m^3 h,$$

$$\frac{dn}{dt} = \alpha_n (1 - n) - \beta_n \cdot n,$$

$$\frac{dm}{dt} = \alpha_m (1 - m) - \beta_m \cdot m,$$

$$\frac{dh}{dt} = \alpha_h (1 - h) - \beta_h \cdot h,$$

$$\alpha_n = \frac{0,01 (V - 10)}{1 - e^{(10-V)/10}}, \quad \beta_n = 0,125 e^{-V/80},$$

$$\alpha_m = \frac{0,1 (V - 25)}{1 - e^{(25-V)/10}}, \quad \beta_m = 4 e^{-V/18},$$

$$\alpha_h = 0,7 e^{-V/20}, \quad \beta_h = \frac{1}{1 + e^{(30-V)/10}}.$$

Нейросети

Импульсная нейронная сеть

Pulsed neural networks, PNN

Спайковая нейронная сеть

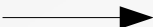
Spiking neural network, SNN

сеть получает на входы серию импульсов
и выдаёт импульсы на выходе.

параметры связей импульсного нейрона
- время задержки и величина веса

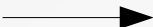
Нейросети

про историю авиации ...



Нейросети

про историю авиации ...



Николай Егорович
Жуковский



Нейросети

про историю авиации ...



Николай Егорович
Жуковский



не копировать
но использовать идею

Нейросети

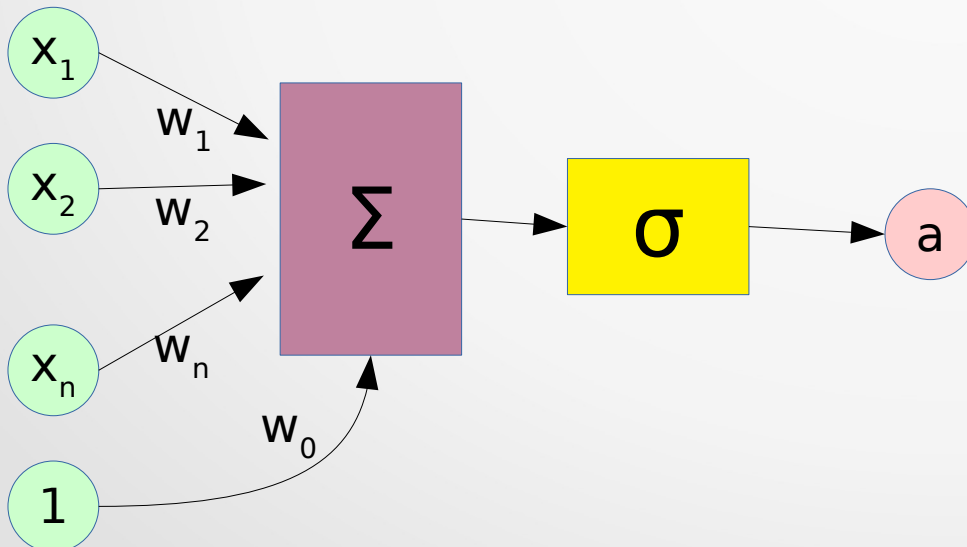
модель МакКаллока-Питтса (1943)

$$a(x, w) = \sigma \left(\sum_{i=1}^n x_i \cdot w_i - w_0 \right) = \sigma(\langle x, w \rangle)$$

x_i - ВХОД

w_i - ВЕС СВЯЗИ

σ - функция активации

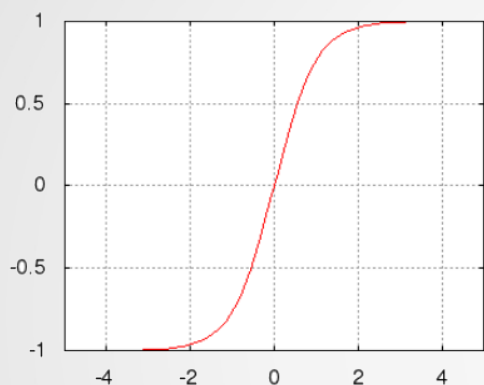


состояние нейрона

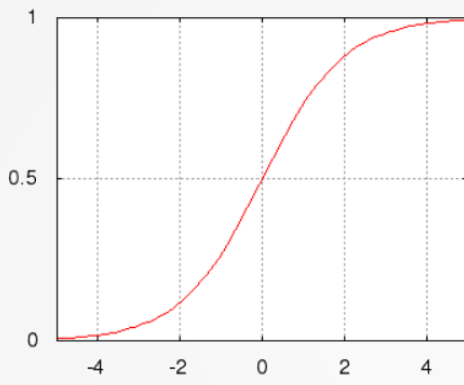
$$s(x, w) = \sum_{i=1}^n x_i \cdot w_i - w_0$$

Нейросети

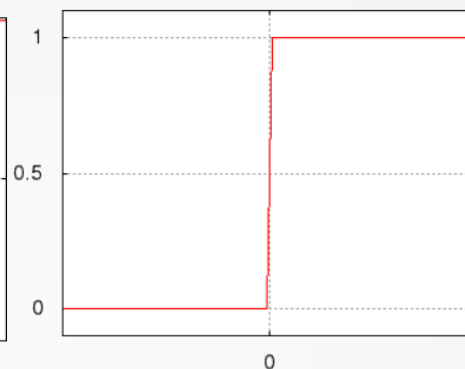
примеры функций активации



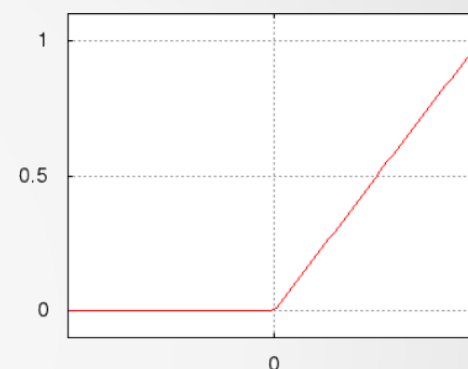
биполярный сигмоид



экспоненциальный сигмоид



пороговая функция



кусочно-линейная ReLU

softmax (экспоненциальная нормализация)
выходного слоя

$$(y_1, \dots, y_m) = \text{softmax}(s_1, \dots, s_m) = \frac{\exp(s)}{\sum_j \exp(s_j)}$$

стохастическая, выход нейрона
с вероятностью p равен 1
и $(1-p)$ равен 0

$$p = \frac{1}{1 + \exp(-s)}$$

Нейросети

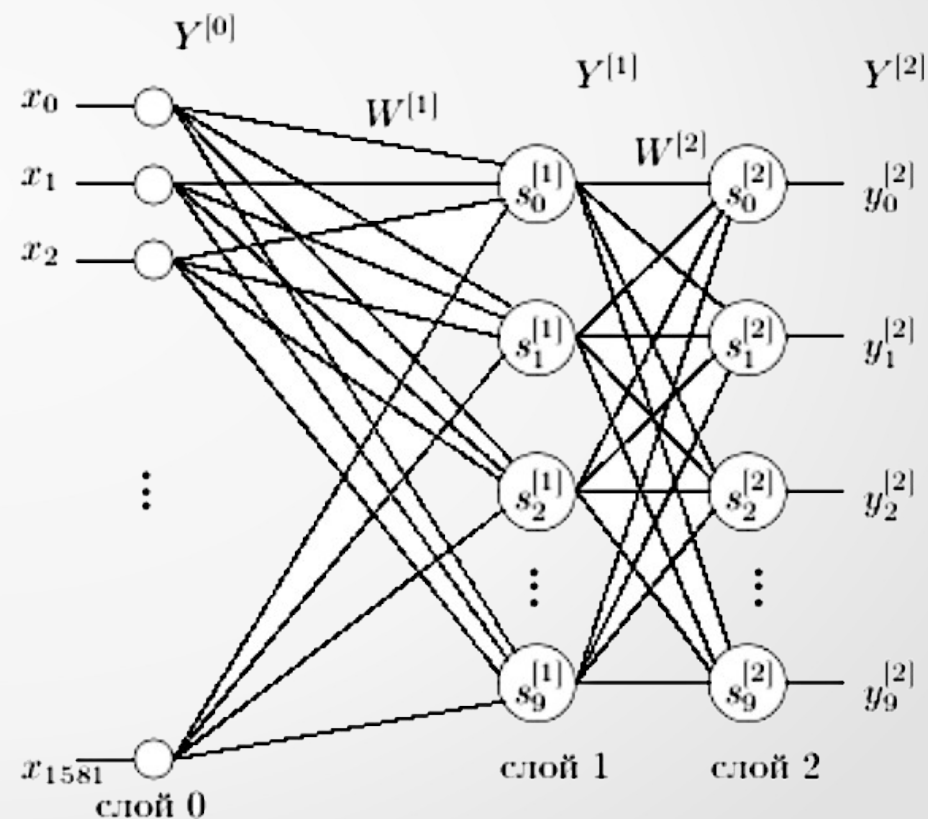
коннекционизм -

модель ИИ из связанных между собой простых элементов

многослойная сеть прямого распространения

нейроны объединены в слои

сигнал распространяется послойно



Нейросети

коннекционизм -

модель ИИ из связанных между собой простых элементов

многослойная сеть прямого распространения

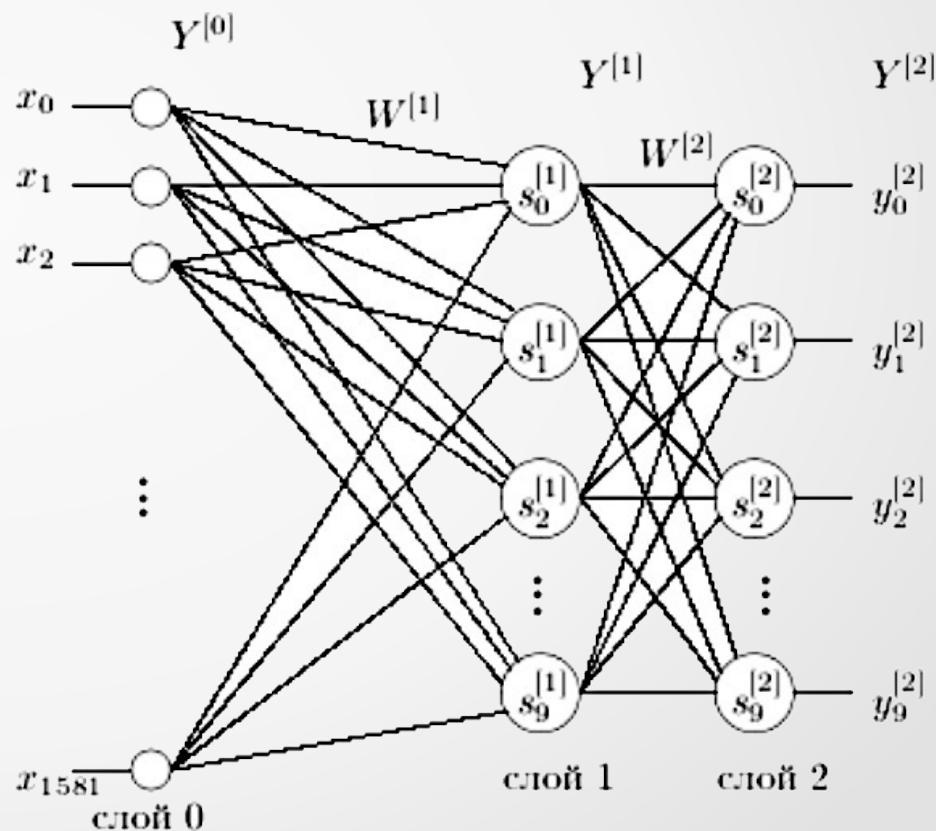
нейроны объединены в слои

сигнал распространяется послойно

входной распределительный слой

обрабатывающие скрытые слои

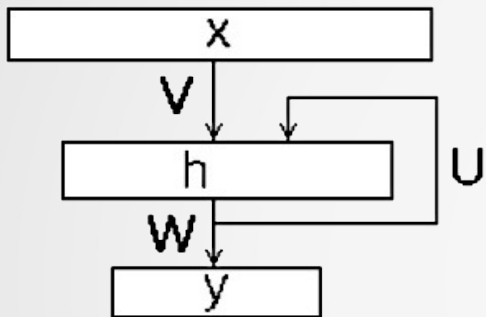
обрабатывающий выходной слой



Нейросети

другие типы моделей нейросетей

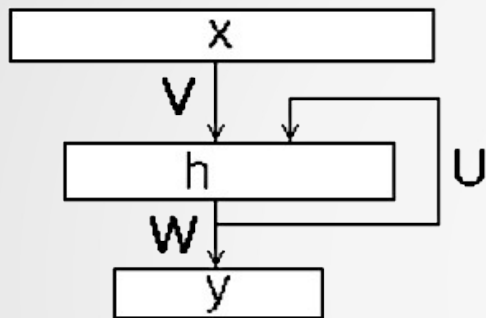
рекуррентные - Элман, LSTM



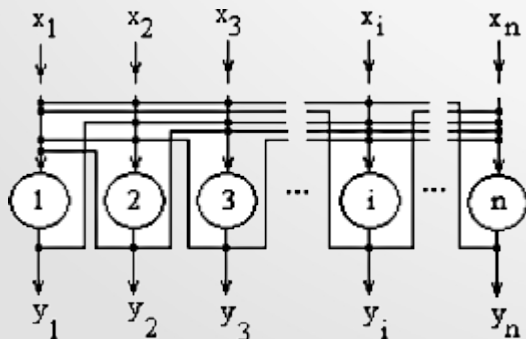
Нейросети

другие типы моделей нейросетей

рекуррентные - Элман, LSTM



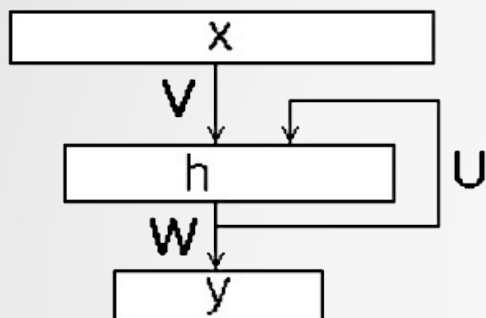
релаксационные - Хопфилд



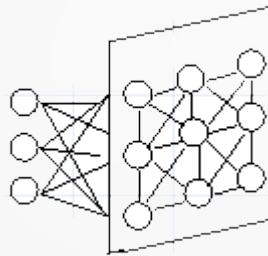
Нейросети

другие типы моделей нейросетей

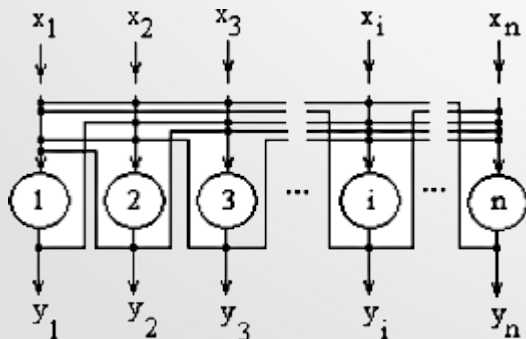
рекуррентные - Элман, LSTM



соревновательные - Кохонен



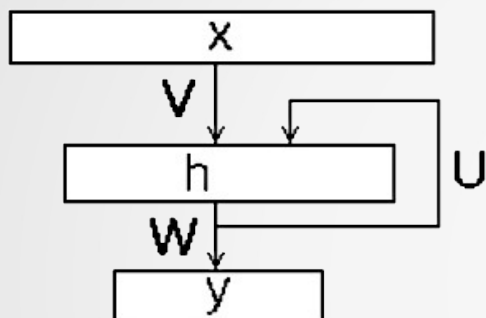
релаксационные - Хопфилд



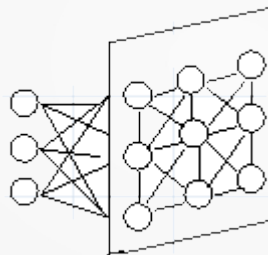
Нейросети

другие типы моделей нейросетей

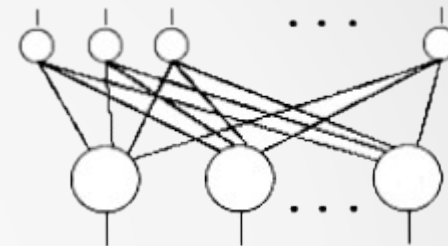
рекуррентные - Элман, LSTM



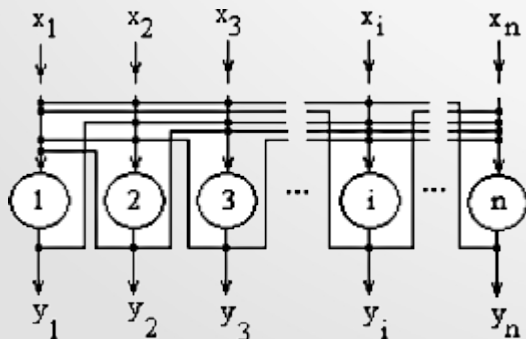
соревновательные - Кохонен



двунаправленные - Коско



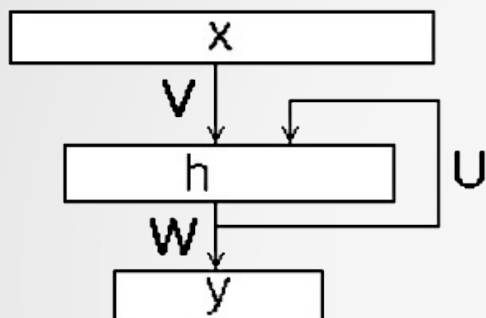
релаксационные - Хопфилд



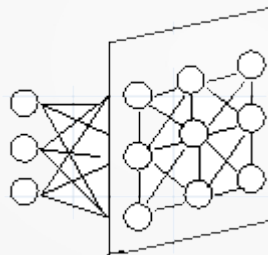
Нейросети

другие типы моделей нейросетей

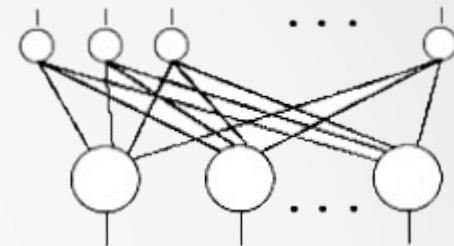
рекуррентные - Элман, LSTM



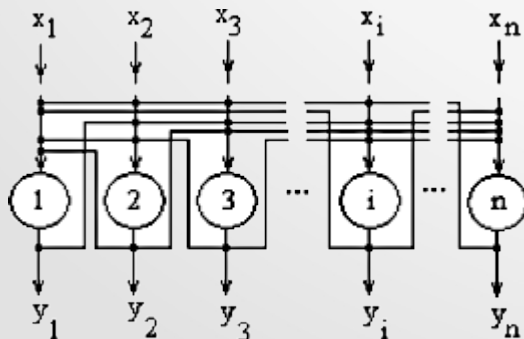
соревновательные - Кохонен



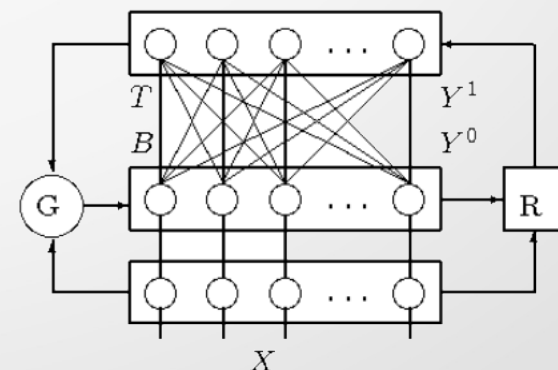
двунаправленные - Коско



релаксационные - Хопфилд



адаптивный резонанс - Гроссберг



Нейросети

Теоретическое обоснование моделей ИНС

Колмогоров А.Н. О представлении непрерывных функций нескольких переменных в виде суперпозиций непрерывных функций одного переменного и сложения // Докл. АН СССР, том 114, с. 953-956, 1957.

Арнольд В.И. О функциях трех переменных // Докл. АН СССР, том 114, N 4, 1957.

Hecht-Nielsen R. Kolmogorov's Mapping Neural Network Existence Theorem // IEEE First Annual Int. Conf. on Neural Networks, San Diego, 1987, Vol. 3, pp. 11-13.

Нейросети

о количестве слоёв

один обрабатывающий слой - гиперплоскость (линейный классификатор)

два обрабатывающих слоя - выпуклая разделяющая поверхность

три обрабатывающих слоя - поверхность любой формы

Нейросети

о количестве слоёв

один обрабатывающий слой - гиперплоскость (линейный классификатор)

два обрабатывающих слоя - выпуклая разделяющая поверхность

три обрабатывающих слоя - поверхность любой формы

многослойная нейросеть с линейной функцией активации
эквивалентна однослойной

Нейросети

о количестве слоёв

один обрабатывающий слой - гиперплоскость (линейный классификатор)

два обрабатывающих слоя - выпуклая разделяющая поверхность

три обрабатывающих слоя - поверхность любой формы

многослойная нейросеть с линейной функцией активации
эквивалентна однослойной

$$Y = a(a(a(X \cdot W_1) \cdot W_2) \dots W_n)$$

если активация линейная

$$a(s) = s$$

то

$$Y = X \cdot W_1 \cdot W_2 \dots W_n = X \cdot (W_1 \cdot W_2 \dots W_n) = X \cdot W$$

Нейросети

обучение многослойных сетей

$h: X \times W \rightarrow Y$ классификатор (X вход, W параметры, Y ответ)

$E: Y \times C \rightarrow \mathbb{R}$ функция потерь (Y ответ, C класс)

обучение классификатора как задача оптимизации

$$E(h(X, W), C) \rightarrow \min_W$$

Нейросети

примеры функций потерь

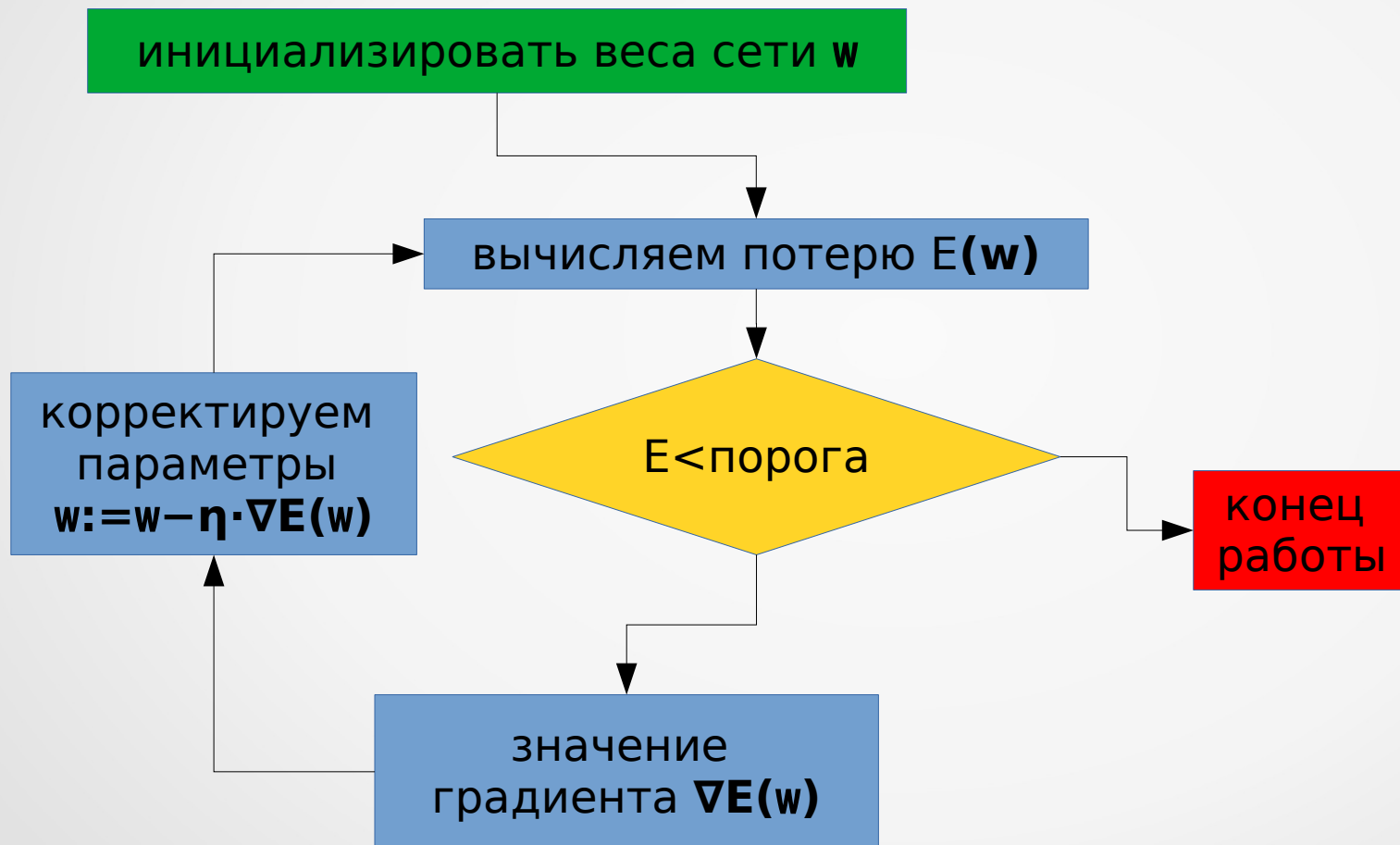
MSQE среднееквадратичное отклонение

Кросс-энтропия

Расстояние Кульбака-Лейблера

Нейросети

градиентный спуск (GD)



Нейросети

метод обратного распространения ошибки

вычисление градиента функции потерь
для многослойной нейросети

$$\nabla E(W) = \left[\frac{\partial E}{\partial w_1}, \dots, \frac{\partial E}{\partial w_k} \right]$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}} = \frac{\partial E}{\partial y_j} \frac{\partial y_j}{\partial s_j} \frac{\partial s_j}{\partial w_{ij}} \quad \text{градиент функции потерь для ИНС}$$

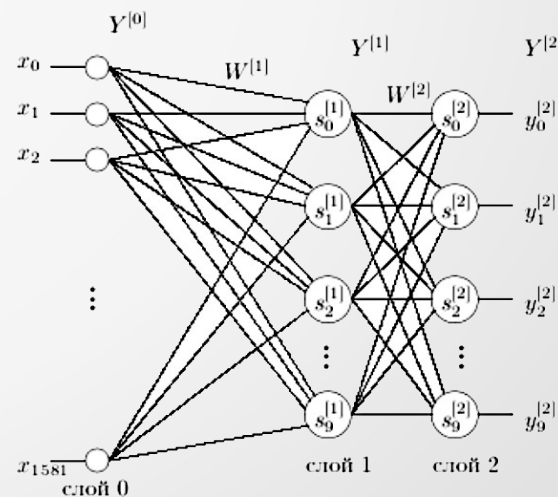
$$\frac{\partial s_j}{\partial w_{ij}} \quad \text{выход } i\text{-того нейрона предыдущего слоя (определен явно)}$$

$$\frac{\partial y_j}{\partial s_j} \quad \text{производная активационной функции (можем вычислить)}$$

$$\frac{\partial E_j}{\partial y_j} \quad \text{ошибка нейрона номер } j \text{ (определена для выходного слоя)}$$

$$\delta_i := \frac{\partial E}{\partial y_i} \quad \text{ошибка нейрона номер } j \text{ для выходного слоя}$$

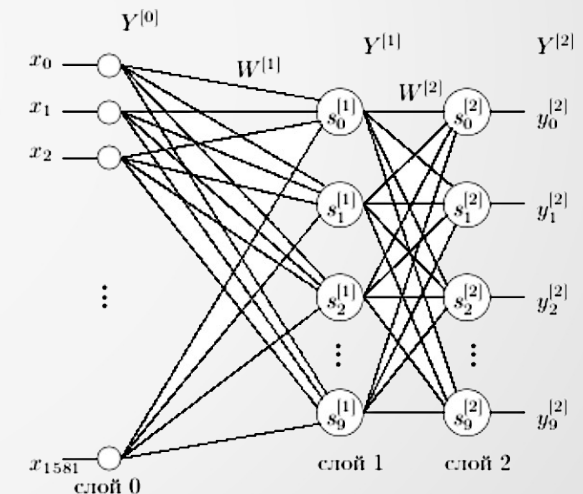
$$\delta_i := \frac{\partial y_i}{\partial s_i} \cdot \sum_j \delta_j w_{ij} \quad \text{ошибка нейрона номер } j \text{ для скрытого слоя}$$



Нейросети

метод обратного распространения ошибки backProp

1. прямой проход:
вычислить состояния нейронов s для всех слоёв и выход сети y
2. вычисляем значения ошибки выходного слоя $\delta := \partial E / \partial y$
3. обратный проход:
последовательно от конца к началу
вычисляем δ для всех скрытых слоёв
4. для каждого слоя вычисляем значение градиента
 $\nabla E = \partial E / \partial w = y \cdot \delta^T$



Нейросети

стратегии обучения

full batch - на каждой итерации используем все примеры

stochastic - на каждой итерации используем один случайный пример

mini batch - на каждой итерации используем случайное подмножество примеров

Нейросети

модификации градиентного спуска

момент или «тяжёлый шарик», вытаскивает из локальных минимумов

$$\Delta W_t := \eta \nabla E + \mu \Delta W_{t-1}$$

регуляризация - штрафует за чрезмерный рост весов
помогает бороться с переобучением

$$\Delta W_t := \eta (\nabla E + \rho W_{t-1}) + \mu \Delta W_{t-1}$$

Нейросети

простой градиентный спуск

iter: 1-407, error 0.23065

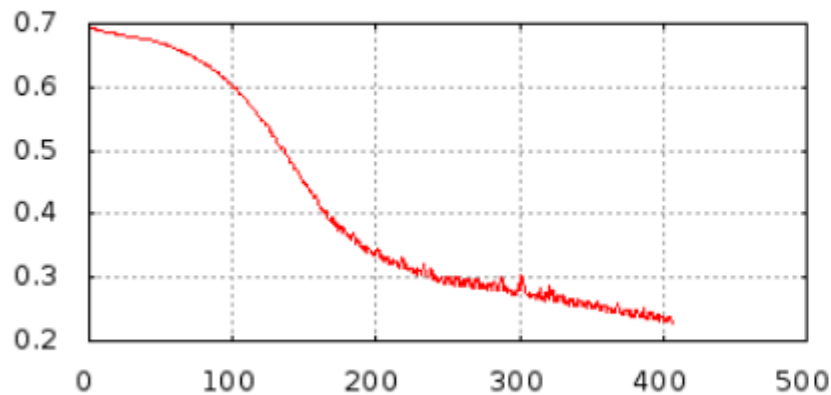


Рис.: история изменения ошибки ч.1

iter: 407-814, error 0.04843

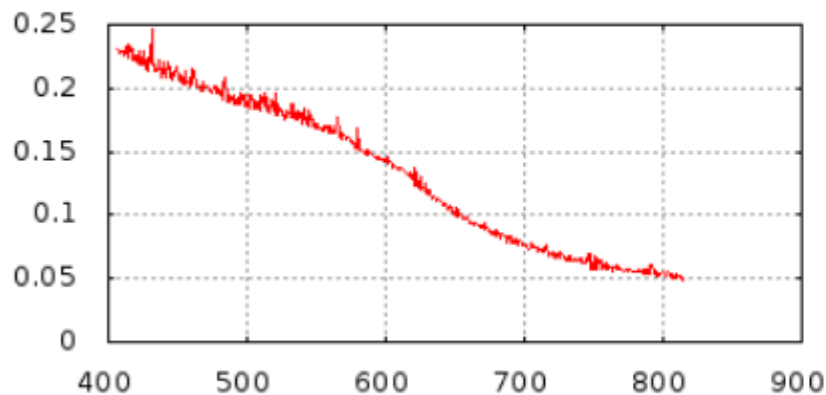


Рис.: история изменения ошибки ч.2

results - points: 1399, error: 0.041894

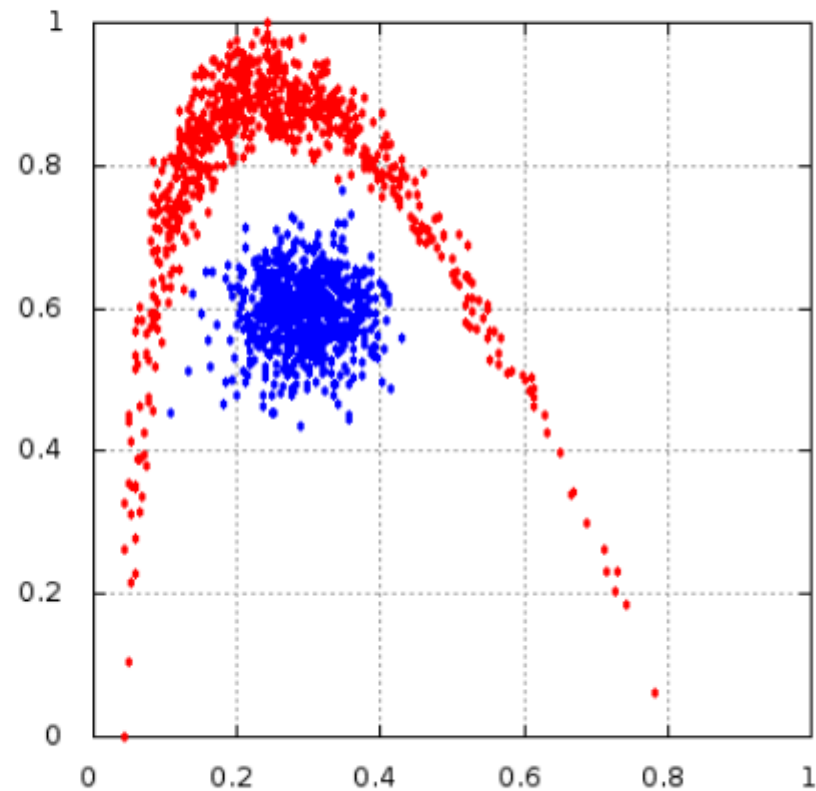


Рис.: результат теста

Нейросети

простой градиентный спуск

iter: 1-127, error 1.60625

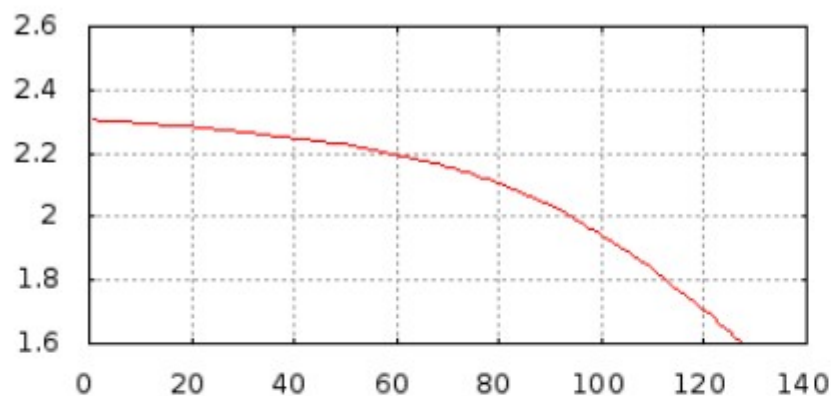


Рис.: история изменения ошибки ч.1

iter: 127-253, error 0.00925

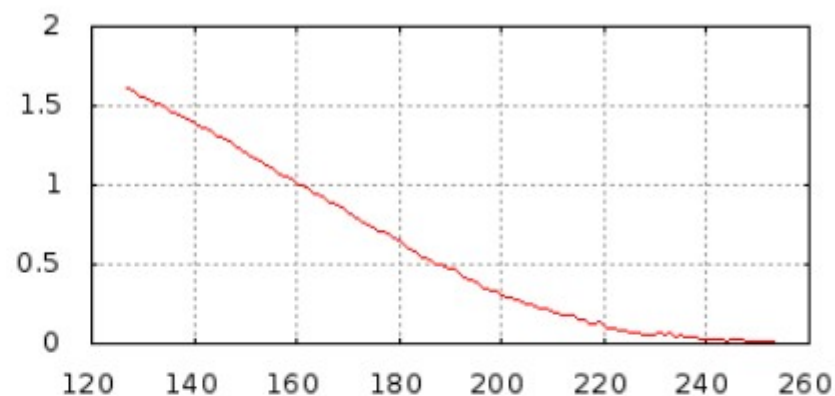


Рис.: история изменения ошибки ч.2



Рис.: состояния весов первого слоя

Нейросети

модификации градиентного спуска **quickProp**

параметр момента μ и коэффициент скорости обучения η задаются индивидуально для каждого параметра

$$\Delta W_t := \eta(\nabla E + \rho W_{t-1}) + \mu \Delta W_{t-1}$$

$$\eta = \begin{cases} \eta_0 & : (\Delta W = 0) \vee (-\Delta W \cdot S > 0) \\ 0 & : - \end{cases}$$

где $\eta_0 \in (0.01, 0.6)$ - константа, $S = \nabla E + \rho W$

Параметр момента выглядит следующим образом.

$$\mu = \begin{cases} \mu_{max} & : (\beta > \mu_{max}) \vee (\gamma < 0) \\ \beta & : - \end{cases}$$

где $\mu_{max} = 1.75$ - константа,

$$S = \nabla E + \rho W,$$

$$\beta = S(t) / (S(t-1) - S(t))$$

$$\gamma = S \cdot (-\Delta W) \cdot \beta$$

Нейросети

quickProp

iter: 1-537, error 0.15642

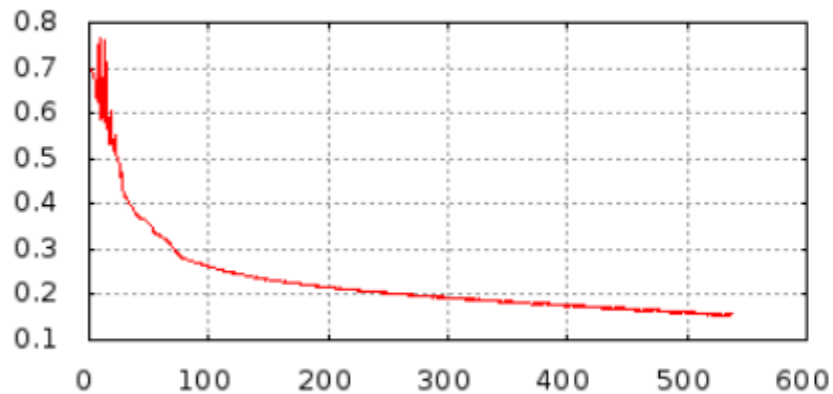


Рис.: история изменения ошибки ч.1

iter: 537-1074, error 0.04997

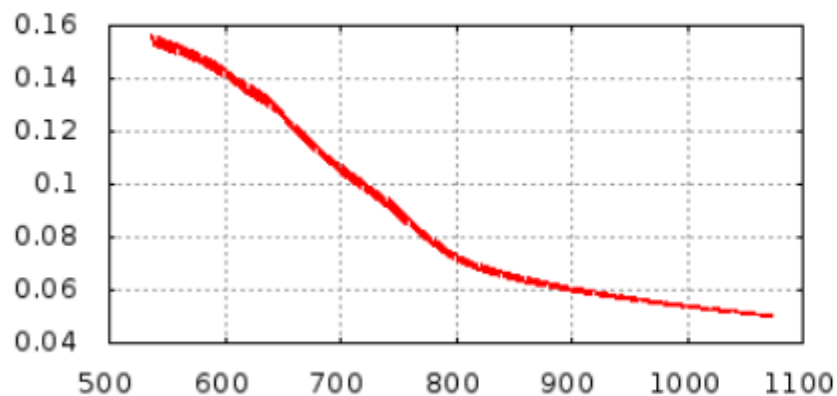


Рис.: история изменения ошибки ч.2

results - points: 1399, error: 0.042729

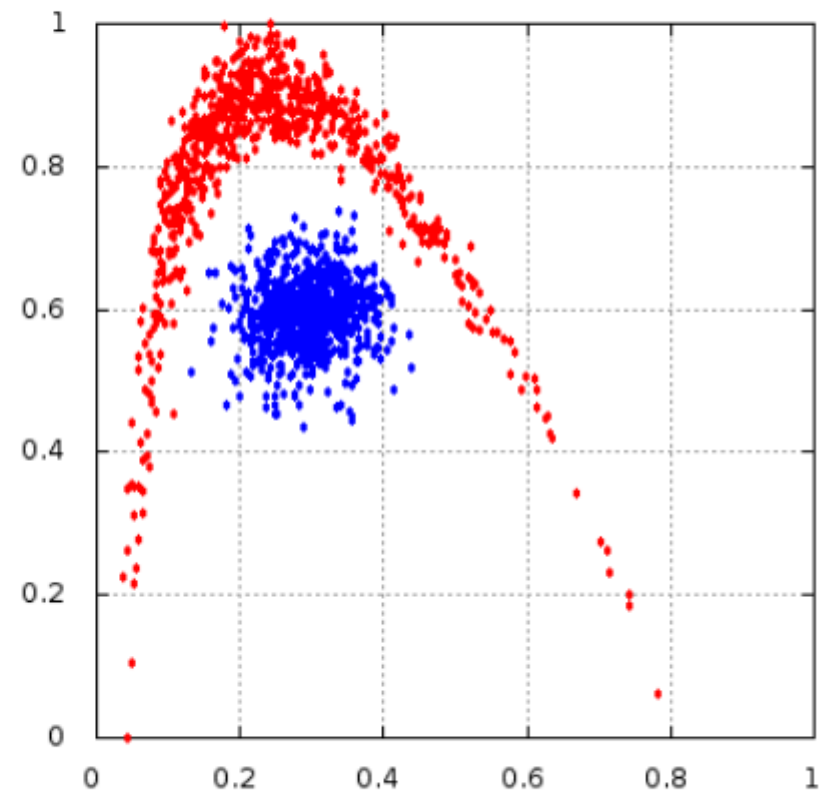


Рис.: результат теста

Нейросети

quickProp

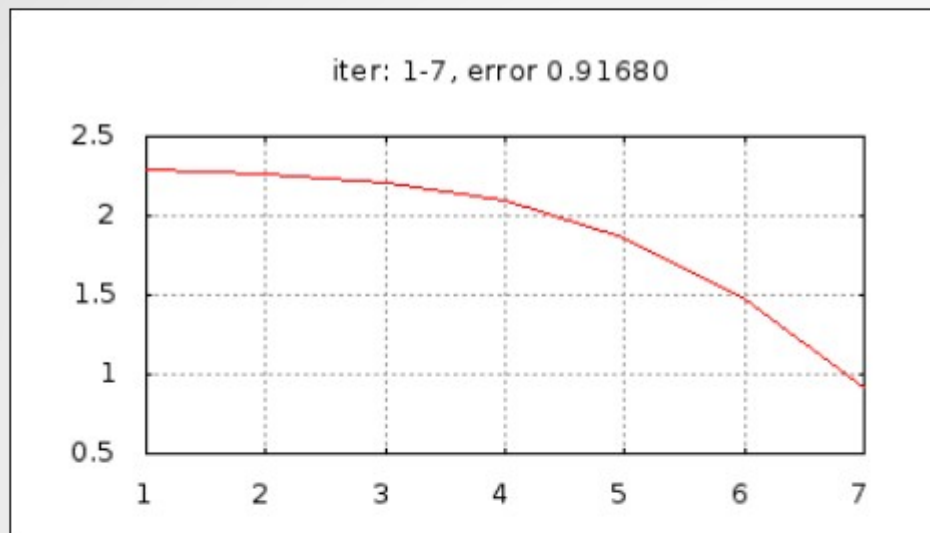


Рис.: история изменения ошибки ч.1

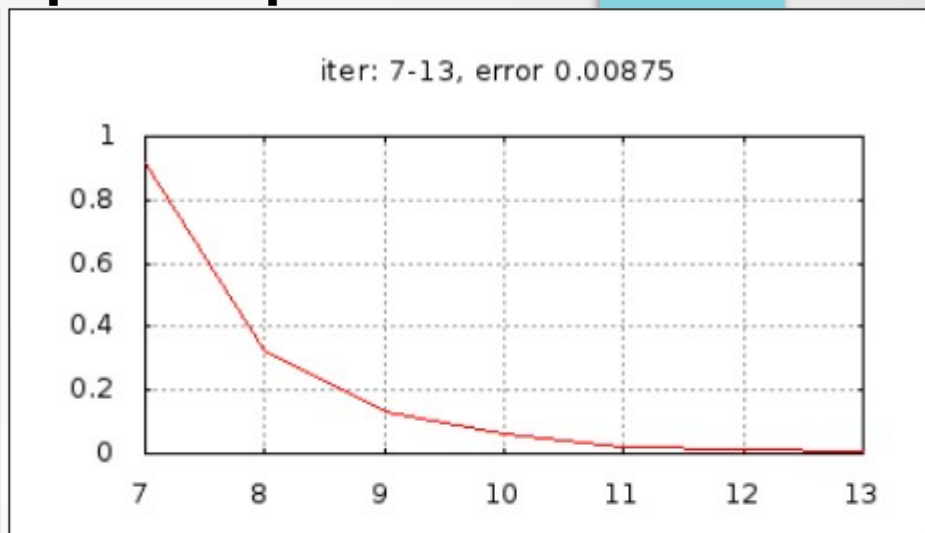


Рис.: история изменения ошибки ч.2

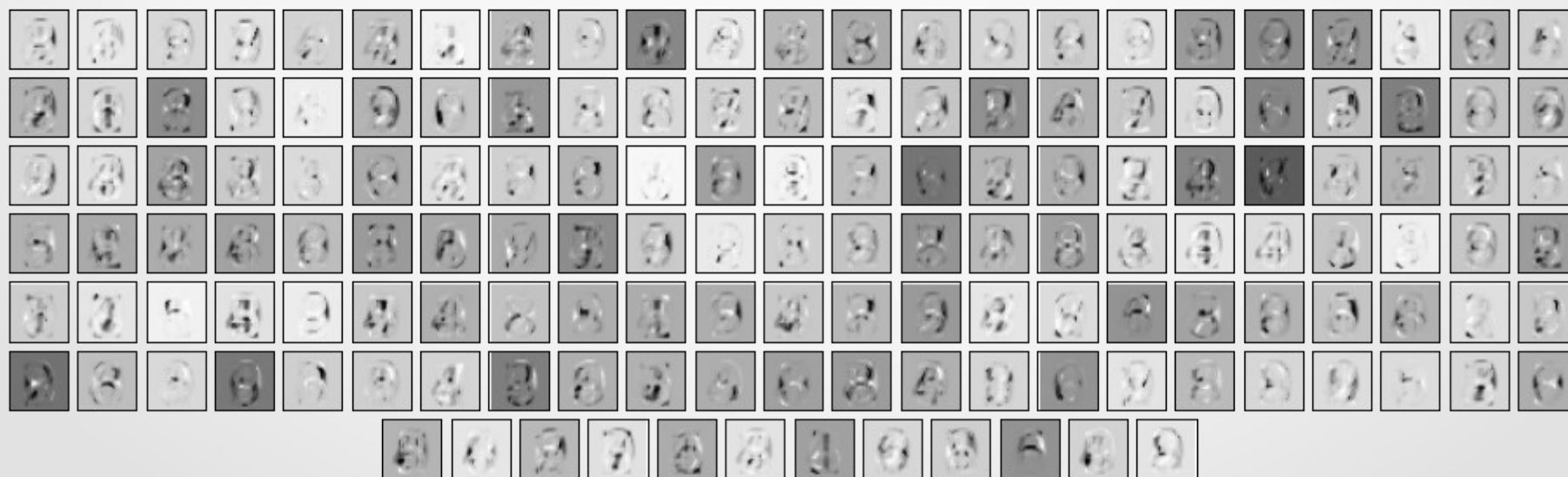


Рис.: состояния весов первого слоя

Нейросети

модификации градиентного спуска **rProp**

моменты и регуляризация не используются,
применяется простая стратегия full-batch.

параметр скорости обучения η , рассчитывается для каждого веса индивидуально

$$\eta(t) = \begin{cases} \min(\eta_{max}, a \cdot \eta(t-1)) & : S > 0 \\ \max(\eta_{min}, b \cdot \eta(t-1)) & : S < 0 \\ \eta(t-1) & : S = 0 \end{cases}$$

где $S = \nabla E(t-1) \cdot \nabla E(t)$ - произведения значений градиента на этом и предыдущем шаге,
 $\eta_{max} = 50$, $\eta_{min} = 10^{-6}$, $a = 1.2$, $b = 0.5$ - константы

Изменение параметров выглядит следующим образом.

$$\Delta W_t := \eta \cdot \text{sign}(\nabla E)$$

Нейросети

rProp

iter: 1-28, error 0.23458

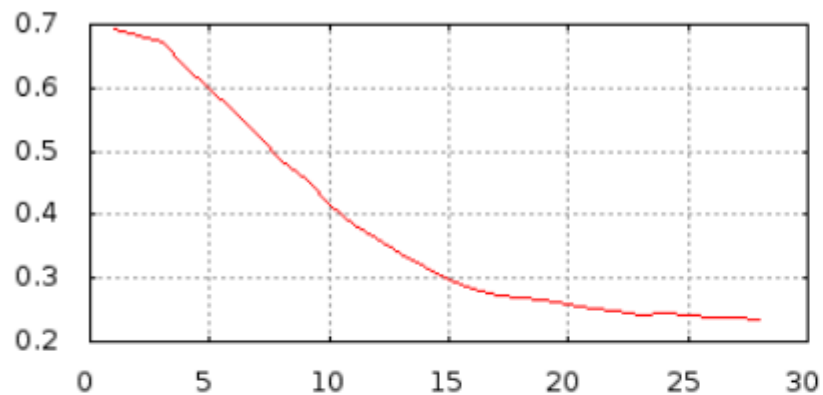


Рис.: история изменения ошибки ч.1

iter: 28-55, error 0.04764

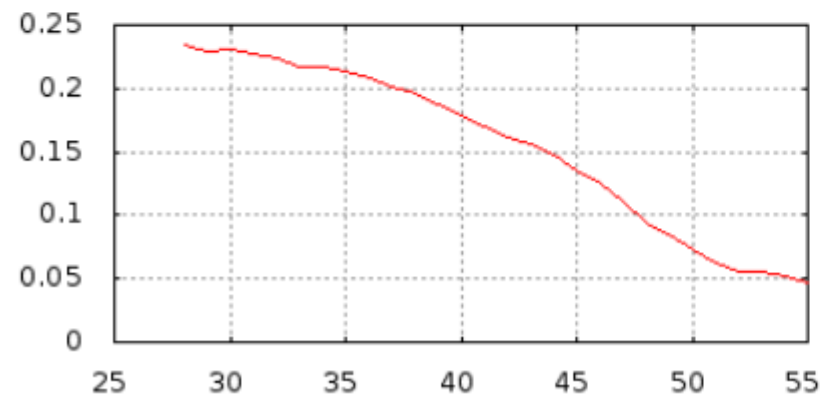


Рис.: история изменения ошибки ч.2

results - points: 1399, error: 0.036212

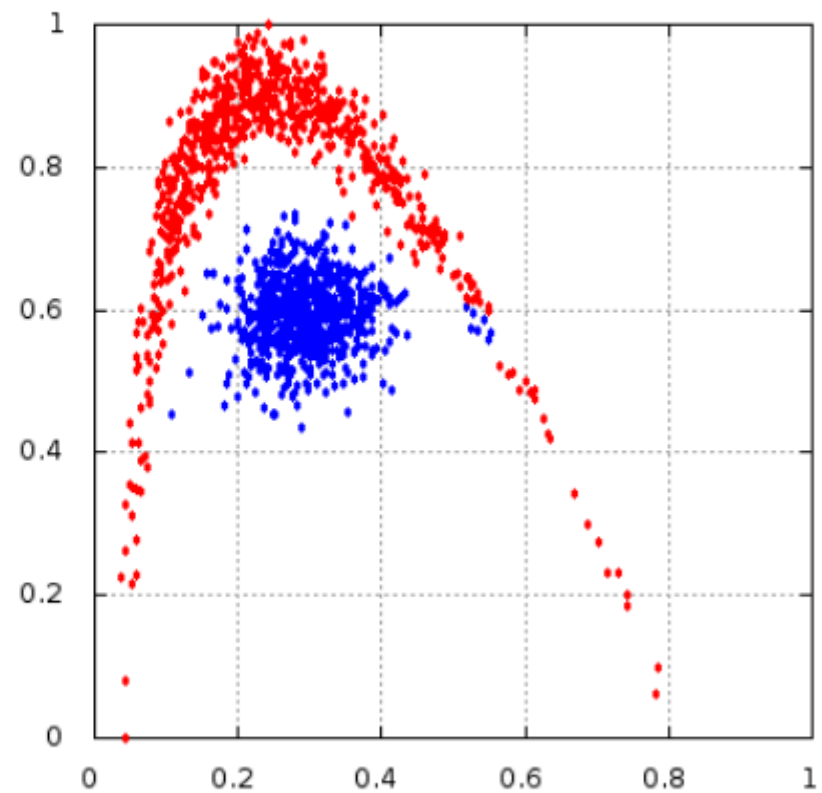


Рис.: результат теста

Нейросети

rProp



Рис.: история изменения ошибки ч.1



Рис.: история изменения ошибки ч.2



Рис.: состояния весов первого слоя

Нейросети

модификации градиентного спуска **сопряжённые градиенты (conjugate gradient)**

изменения параметров выбирается таким образом,
что бы было ортогональным к предыдущему направлению

$$\Delta W := \eta \cdot (p + \rho \cdot W) + \mu \cdot \Delta W$$

коэффициент скорости обучения η ,
выбирается на каждой итерации,
путём решения задачи оптимизации

$$\min_{\eta} E(\Delta W(\eta))$$

$p_0 := \nabla E$. начальное направление

$p = \nabla E + \beta \cdot p$ последующие направления изменения параметров

вычисление коэффициента сопряжения β
два основных способа

формула Флетчера-Ривса

$$\beta = \frac{g_t^T \cdot g_t}{g_{t-1}^T \cdot g_{t-1}}$$

формула Полака-Рибьера

$$\beta = \frac{g_t^T \cdot (g_t - g_{t-1})}{g_{t-1}^T \cdot g_{t-1}}$$

$g := \nabla E$

компенсация
погрешности
вычислений - сброс
сопряженного
направления
каждые n циклов
($\beta := 0$, $p := \nabla E$)

Нейросети

сопряжённые градиенты (conjugate gradient)

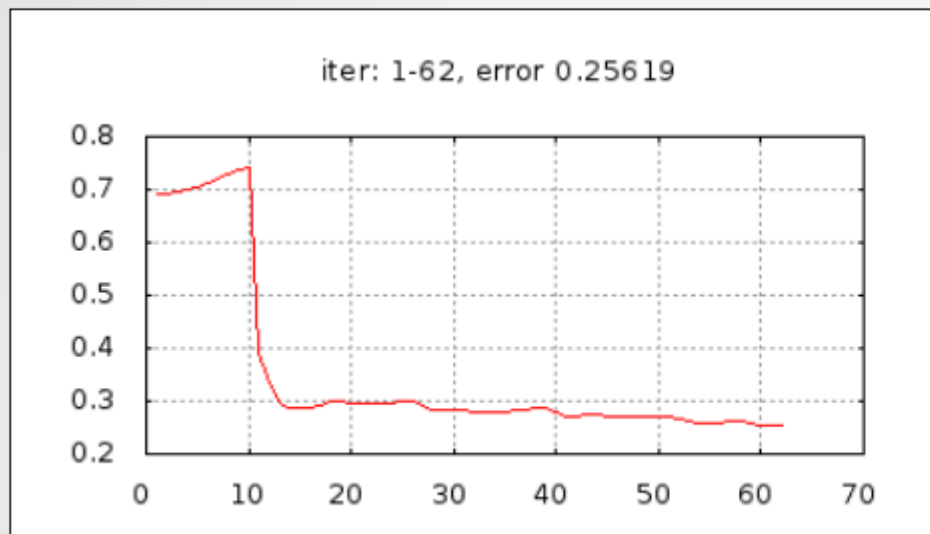


Рис.: история изменения ошибки ч.1

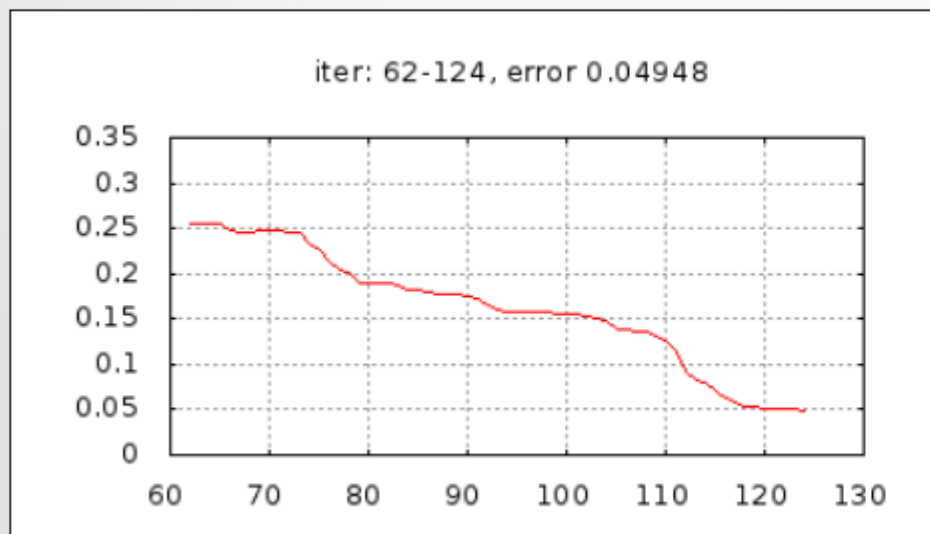


Рис.: история изменения ошибки ч.2

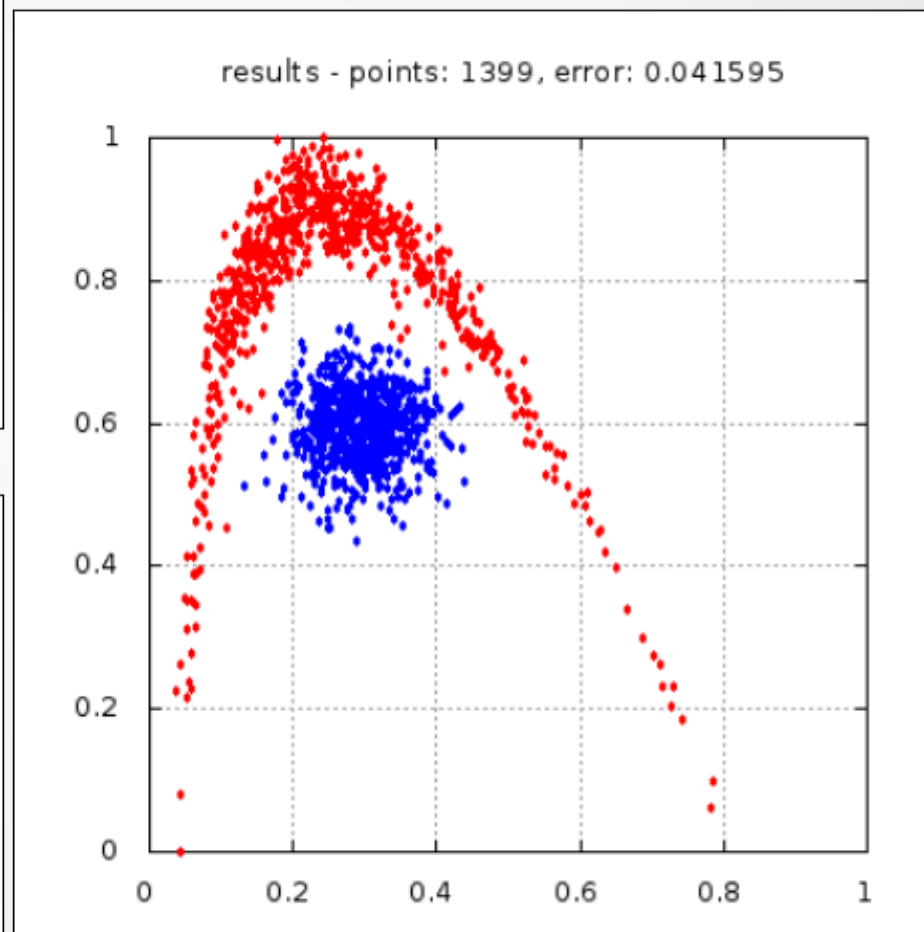


Рис.: результат теста

Нейросети

сопряжённые градиенты (conjugate gradient)

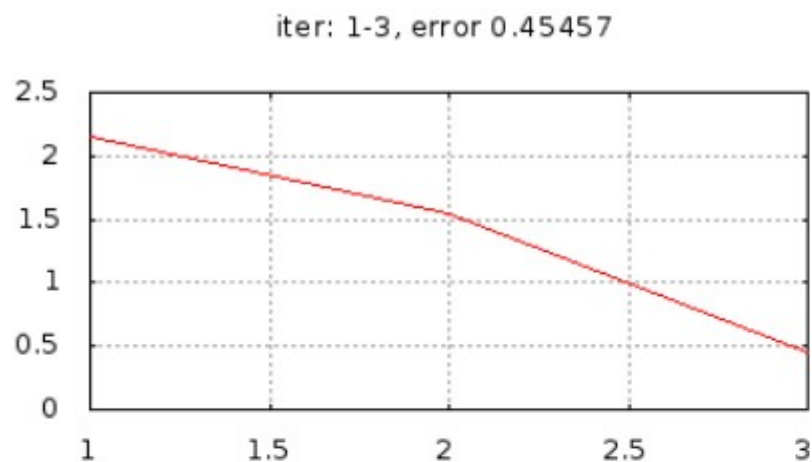


Рис.: история изменения ошибки ч.1



Рис.: история изменения ошибки ч.2



Рис.: состояния весов первого слоя

Нейросети

модификации градиентного спуска

NAG (Nesterov's Accelerated Gradient)

градиент вычисляется относительно сдвинутых на значение момента весов

$$\Delta W_t := \eta \cdot (\nabla E(W_{t-1} + \mu \cdot \Delta W_{t-1}) + \rho \cdot W_{t-1}) + \mu \cdot \Delta W_{t-1}$$

Нейросети

модификации градиентного спуска
AdaGrad (Adaptive Gradient)

учитывает историю значений градиента следующим образом

$$g_t := \frac{\nabla E_t}{\sqrt{\sum_{i=1}^t \nabla E_i^2}}$$

$$\Delta W_t := \eta \cdot (g_t + \rho \cdot W_{t-1}) + \mu \cdot \Delta W_{t-1}$$

Нейросети

модификации градиентного спуска

AdaDelta

учитывает историю значений градиента и историю изменения весов следующим образом

$$S_t := \alpha \cdot S_{t-1} + (1 - \alpha) \cdot \nabla E_t^2 ; S_0 := 0$$

$$D_t := \beta \cdot D_{t-1} + (1 - \beta) \cdot \Delta W_{t-1}^2 ; D_0 := 0$$

$$g_t := \frac{\sqrt{D_t}}{\sqrt{S_t}} \cdot \nabla E_t$$

$$\Delta W_t := \eta \cdot (g_t + \rho \cdot W_{t-1}) + \mu \cdot \Delta W_{t-1}$$

Нейросети

градиентные методы оптимизации второго порядка

кроме градиента - направления наискорейшего роста функции, использую информацию о её кривизне

Нейросети

градиентные методы оптимизации второго порядка

кроме градиента - направления наискорейшего роста функции, используя информацию о её кривизне

$$W := W - \Delta W \quad \Delta W = H^{-1} \cdot \nabla E$$

вектор градиента

$$g = \nabla E = \begin{bmatrix} \frac{\partial E}{\partial w_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial E}{\partial w_n} \end{bmatrix}$$

H - гессиан, матрица вторых производных целевой функции E

$$H = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial w_1 \partial w_1} & \cdots & \frac{\partial^2 E}{\partial w_1 \partial w_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 E}{\partial w_n \partial w_1} & \cdots & \frac{\partial^2 E}{\partial w_n \partial w_n} \end{bmatrix}$$

Нейросети

градиентные методы оптимизации второго порядка

кроме градиента - направления наискорейшего роста функции, используя информацию о её кривизне

$$W := W - \Delta W \quad \Delta W = H^{-1} \cdot \nabla E$$

вектор градиента

$$g = \nabla E = \begin{bmatrix} \frac{\partial E}{\partial w_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial E}{\partial w_n} \end{bmatrix}$$

H - гессиан, матрица вторых производных целевой функции E

$$H = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial w_1 \partial w_1} & \cdots & \frac{\partial^2 E}{\partial w_1 \partial w_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 E}{\partial w_n \partial w_1} & \cdots & \frac{\partial^2 E}{\partial w_n \partial w_n} \end{bmatrix}$$

вычисление гессиана H это затратная процедура
можно обойтись приближением H

Нейросети

метод BFGS

или алгоритм Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шанно
(Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno)

$$W := W - \Delta W \quad \Delta W = H^{-1} \cdot \nabla E$$

для вычисления обратного гессиана H^{-1}
использует изменение значений градиента ∇E и изменения весов ΔW .

вектор градиента ∇E вычисляется с помощью процедуры обратного распространения ошибки

Нейросети

метод BFGS

или алгоритм Бroyдена-Флетчера-Гольдфарба-Шанно
(Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno)

$$W := W - \Delta W \quad \Delta W = H^{-1} \cdot \nabla E$$

для вычисления обратного гессиана H^{-1}
использует изменение значений градиента ∇E и изменения весов ΔW .

вектор градиента ∇E вычисляется с помощью процедуры обратного распространения ошибки

приближение обратного гессиана $V \approx H^{-1}$
это матрица размера $n \times n$ (где n - длина вектора градиента g)

значения V вычисляются на каждом шаге алгоритма следующим образом.

$$V_0 := 1$$
$$V_{k+1} := V_k - \frac{V_k \cdot s \cdot s^T \cdot V_k}{s^T \cdot V_k \cdot s} + \frac{r \cdot r^T}{s^T \cdot s}$$

$r = \nabla E(t) - \nabla E(t-1)$ - изменение градиента
 $s = \Delta W = W(t) - W(t-1)$ - изменение весов

Нейросети

метод BFGS

iter: 1-867, error 0.22665

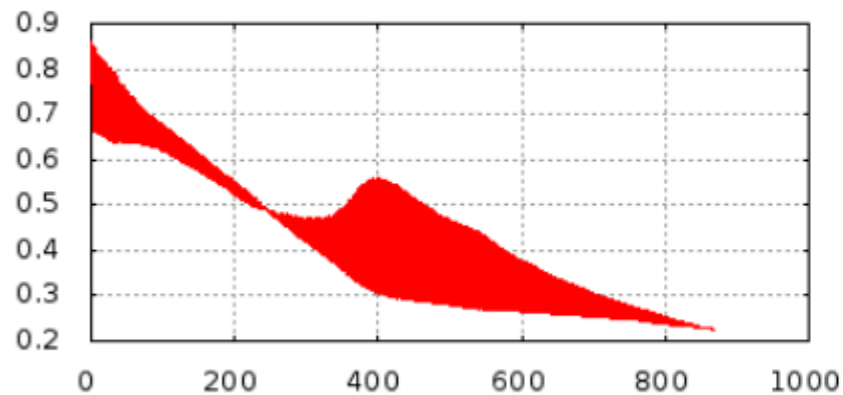


Рис.: история изменения ошибки ч.1

iter: 867-1733, error 0.04978

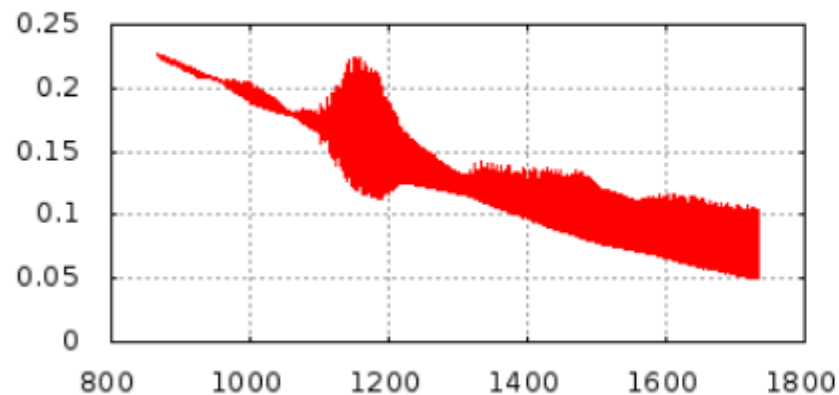


Рис.: история изменения ошибки ч.2

results - points: 1399, error: 0.039176

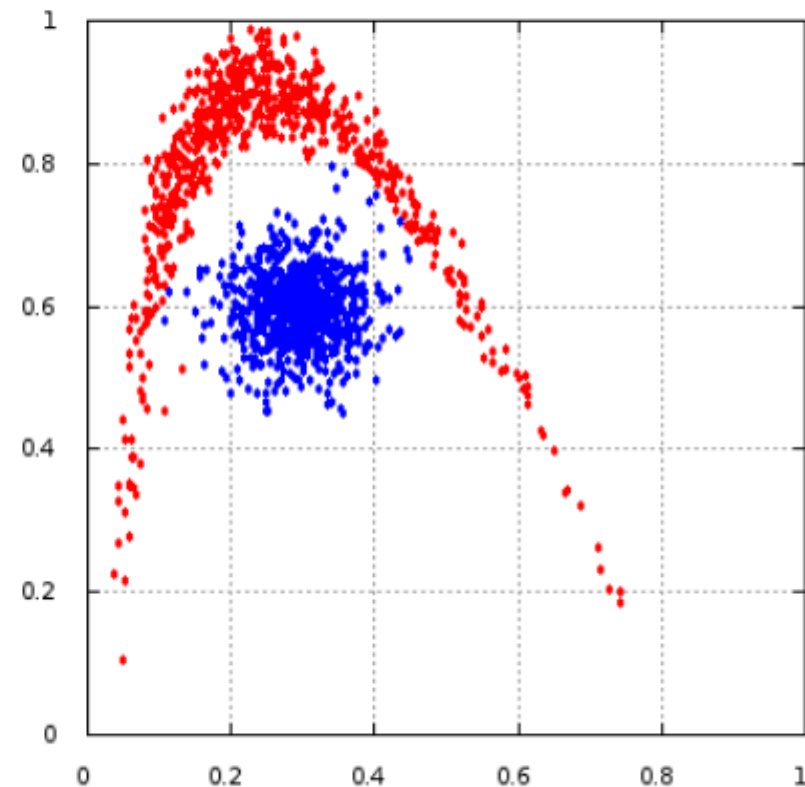


Рис.: результат теста

Нейросети

метод Левенберга-Марквардта (LMA)

вычисляем приближение гессиана H через якобиан J - матрицу первых производных, e - ошибки сети на всей учебной выборке, M - количество выходов, P - количество примеров.

$$e = d - o = \begin{bmatrix} e_{11} \\ \vdots \\ e_{M1} \\ e_{12} \\ \vdots \\ e_{MP} \end{bmatrix}$$

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial e}{\partial w} \end{bmatrix}$$

Нейросети

метод Левенберга-Марквардта (LMA)

вычисляем приближение гессиана H через якобиан J - матрицу первых производных, e - ошибки сети на всей учебной выборке, M - количество выходов, P - количество примеров.

$$e = d - o = \begin{bmatrix} e_{11} \\ \vdots \\ e_{M1} \\ e_{12} \\ \vdots \\ e_{MP} \end{bmatrix}$$

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial e}{\partial w} \end{bmatrix}$$

$$H \approx J^T \cdot J + \mu \cdot I$$

где

J - якобиан, матрица первых производных функции ошибки,

μ - параметр,

$I = (J^T \cdot J) \circ E$ - диагональная матрица из элементов главной диагонали $(J^T \cdot J)$,

\circ - поэлементное умножение матриц (Hadamard product).

Вектор градиента вычисляется следующим образом.

$$g = J^T \cdot e$$

Если собрать всё вместе то получаем следующую формулу для изменения весов сети.

$$\Delta W = (J^T \cdot J + \mu \cdot I)^{-1} \cdot J^T \cdot e$$

Нейросети

метод LMA

iter: 1-197, error 0.10123

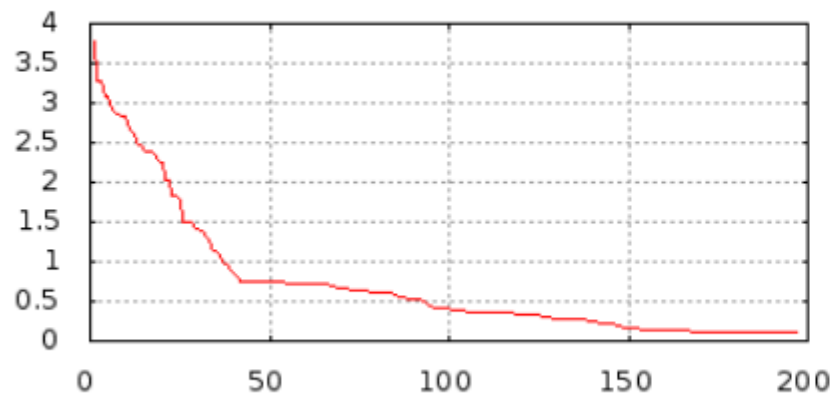


Рис.: история изменения ошибки ч.1

iter: 197-394, error 0.04982

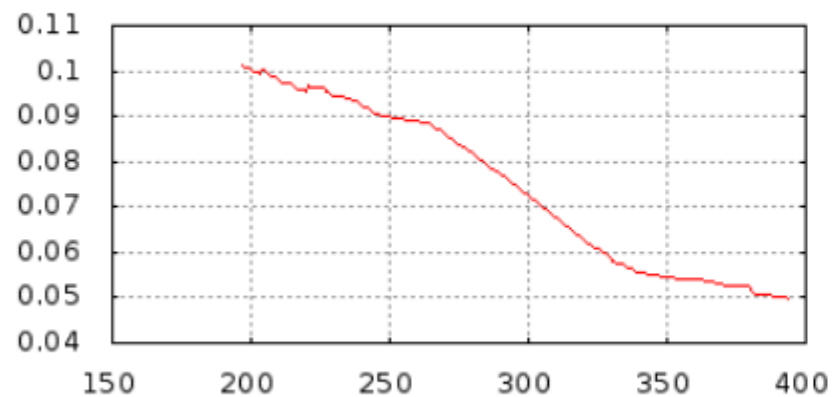


Рис.: история изменения ошибки ч.2

results - points: 1399, error: 0.047640

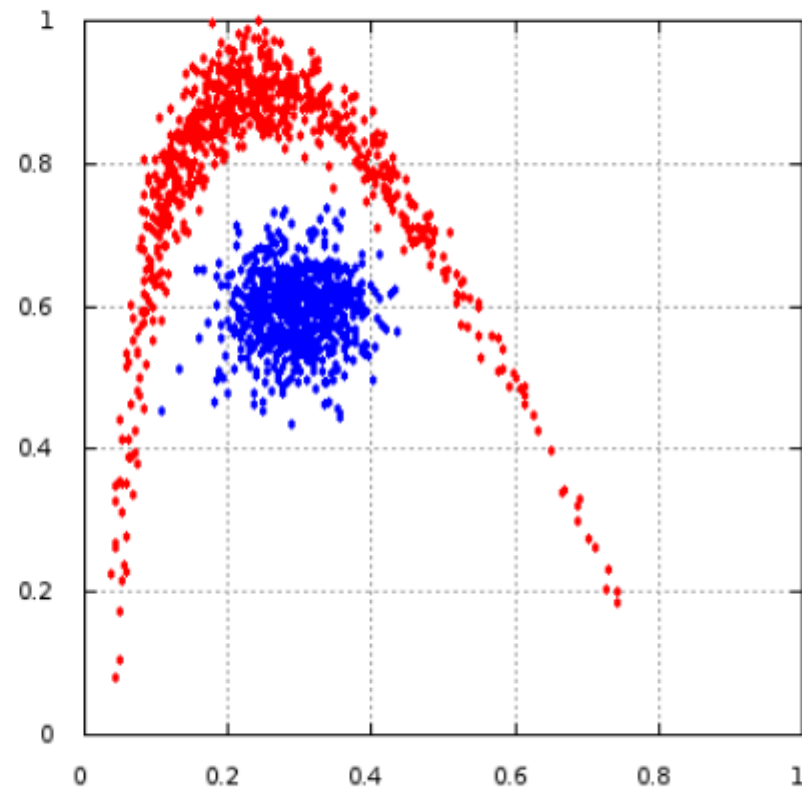


Рис.: результат теста

Нейросети: литература

git clone https://github.com/mechanoid5/ml_lectorium.git

- К.В. Воронцов Нейронные сети. - курс "Машинное обучение" ШАД Яндекс 2014
- Е.С.Борисов О методах обучения многослойных нейронных сетей прямого распространения.
<http://mechanoid.kiev.ua/neural-net-backprop.html>

Нейросети



Вопросы ?

Нейросети: практика

источники данных для экспериментов



sklearn.datasets
UCI Repository
kaggle



задание

- разделить на train/test
- реализовать minibatch
- реализовать одну из модификаций GD
- посчитать метрики качества