# Лекция 10:
# искусственные нейронные сети

Евгений Борисов

четверг, 22 ноября 2018 г.

# Нейросети

**нейронные сети**

- вычислительная нейробиология

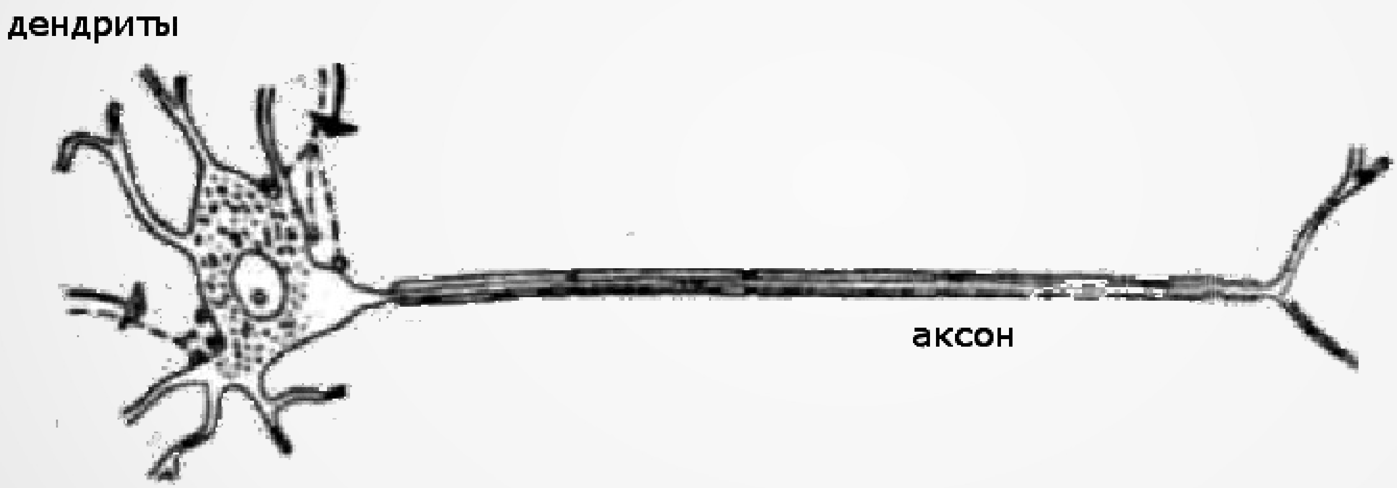
  цель: моделировать процессы в живых организмах

- теория искусственных нейронных сетей

  цель: построить искусственную интеллектуальную систему

# Нейросети

нервная клетка

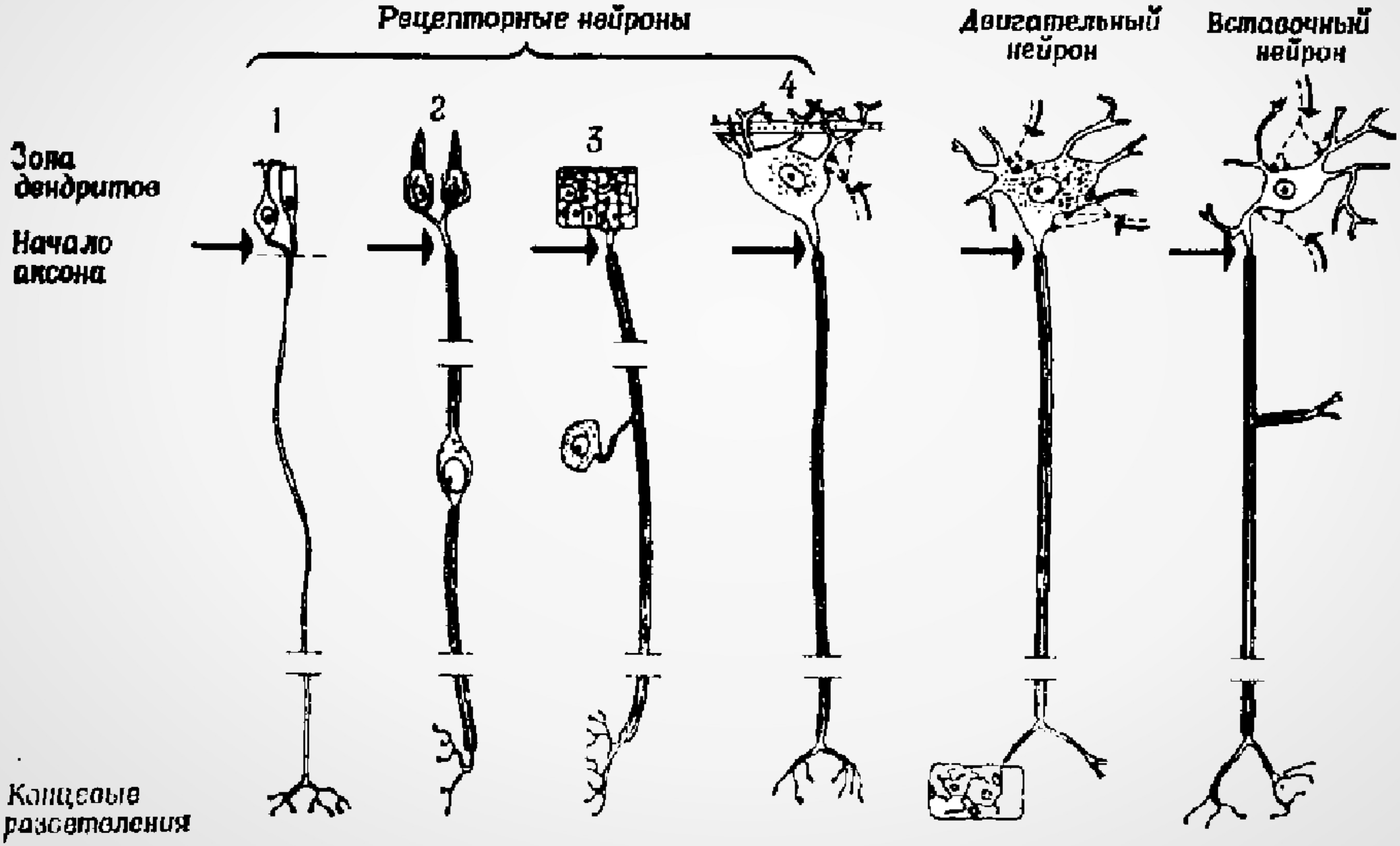





Вилли К., Детье В.   Биология, М.: Мир, 1975

# Нейросети

различные типы нервных клеток




Вилли К., Детье В.   Биология, М.: Мир, 1975

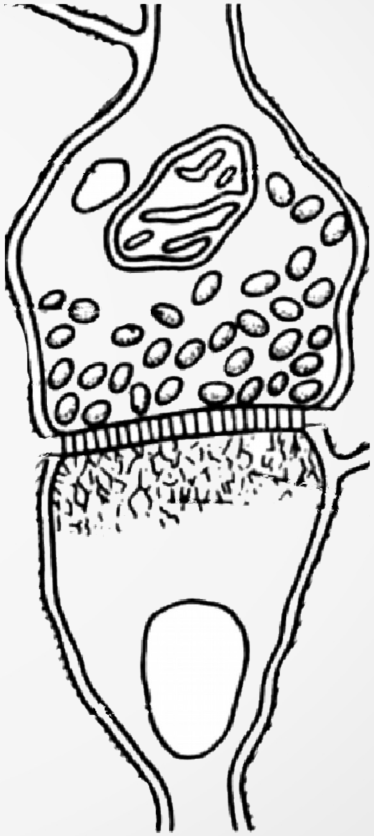
# Нейросети

**синапс** - межнейронные соединения

ширина зазора ~50нм

однонаправленная передача сигнала

вещество-нейромедиатор передаёт сигнал химическим способом





Вилли К., Детье В.   Биология, М.: Мир, 1975

# Нейросети

нервный импульс - электрохимическая реакция

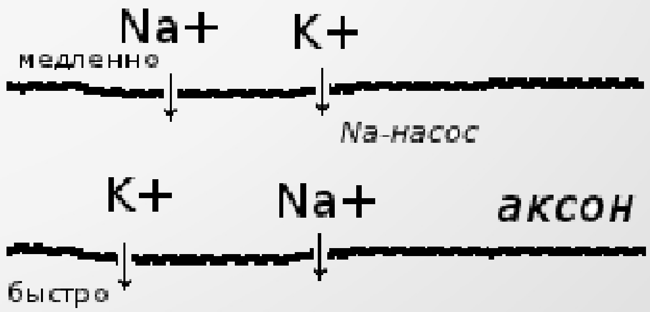
мембранная теория

разница потенциалов на клеточной мембране ~60мВ

при стимуляции разряжается,  выбрасывает нейромедиатор

изменяемая проницаемость мембраны

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






Вилли К., Детье В.   Биология, М.: Мир, 1975

# Нейросети

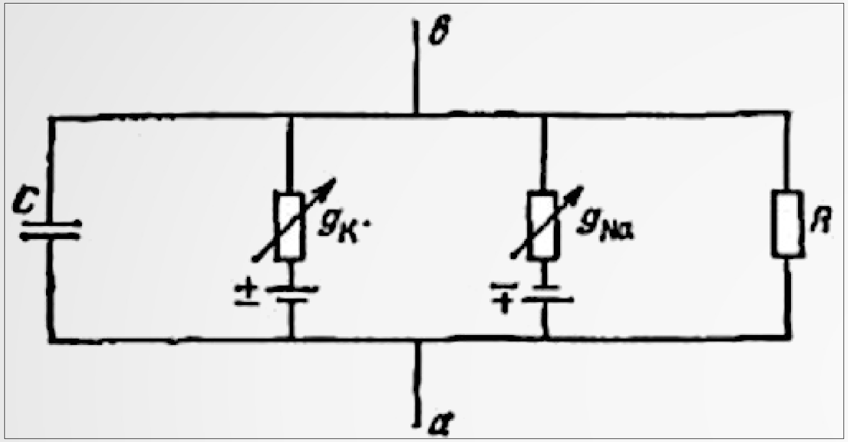
**модель Ходжкина-Хаксли**

Hodgkin, A., and Huxley, A.  Currents carried by sodium and potassium ions through the membrane of the giant axon of loligo. - J. Physiol. (I952) II6, 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



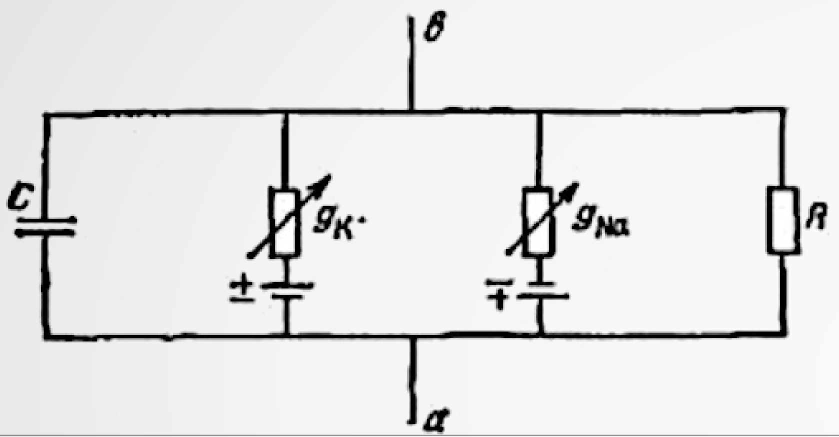

эквивалентная схема мембраны аксона кальмара

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

параллельно включенные
- емкость C
- два элемента-источника тока
- переменные сопротивления определяются калиевой gK и gNa натриевой проводимостями

# Нейросети

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




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

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

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

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

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

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

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

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

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

эквивалентная схема мембраны аксона кальмара

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

параллельно включенные
- емкость С
- два элемента-источника тока
- переменные сопротивления определяются калиевой gK и gNa натриевой проводимостями

# 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.

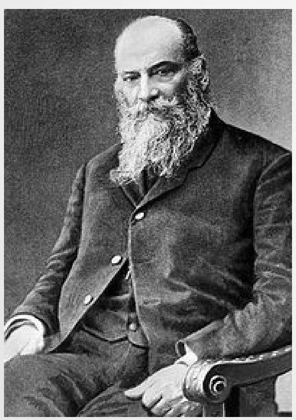
параметры связей импульсного нейрона
- время задержки и величина веса

# Нейросети

**про историю авиации ...**

# Нейросети

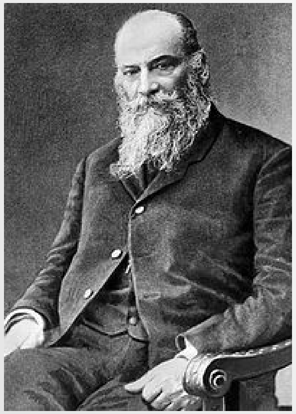
**про историю авиации ...**



Николай Егорович Жуковский

# Нейросети

**про историю авиации ...**



Николай Егорович Жуковский

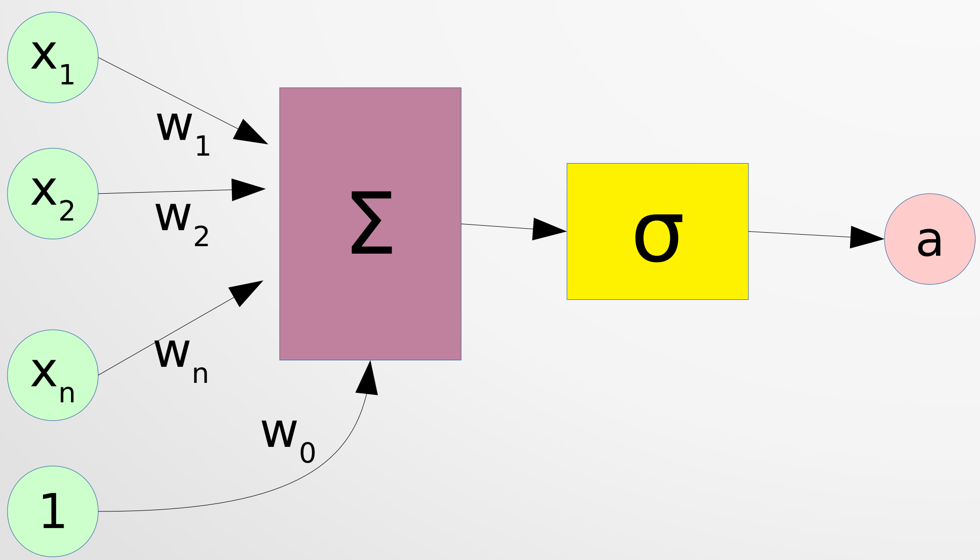
не копировать
но использовать идею

# 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

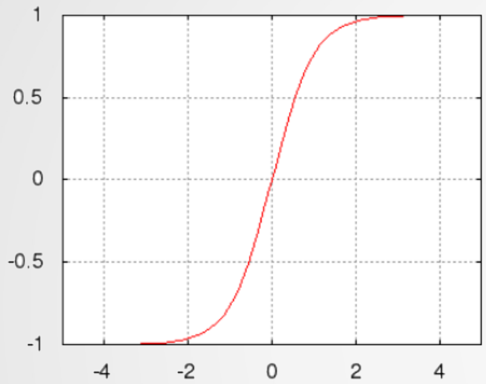



состояние нейрона

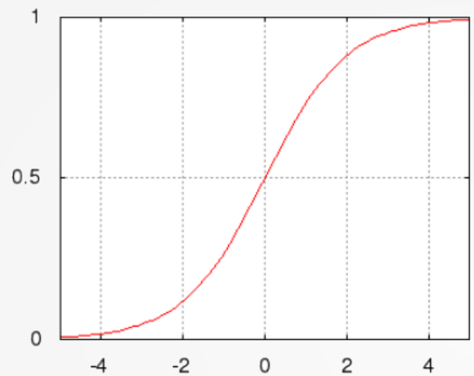
$$s(x,w)=\sum_{i=1}^{n} x_i \cdot w_i - w_0$$

# Нейросети

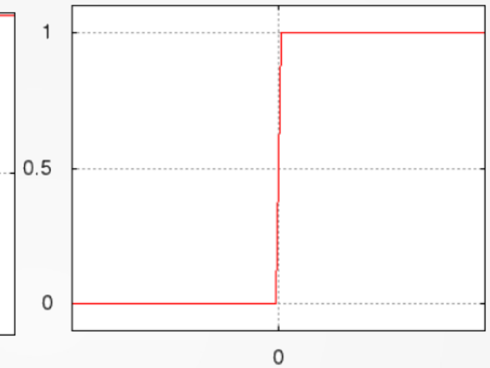
примеры функций активации



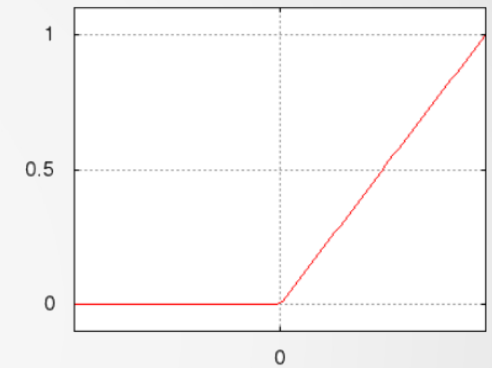

биполярный сигмоид




экспоненциальный сигмоид




пороговая функция




кусочно-линейная ReLU

softmax (экспоненциальная нормализация)
выходного слоя

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

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

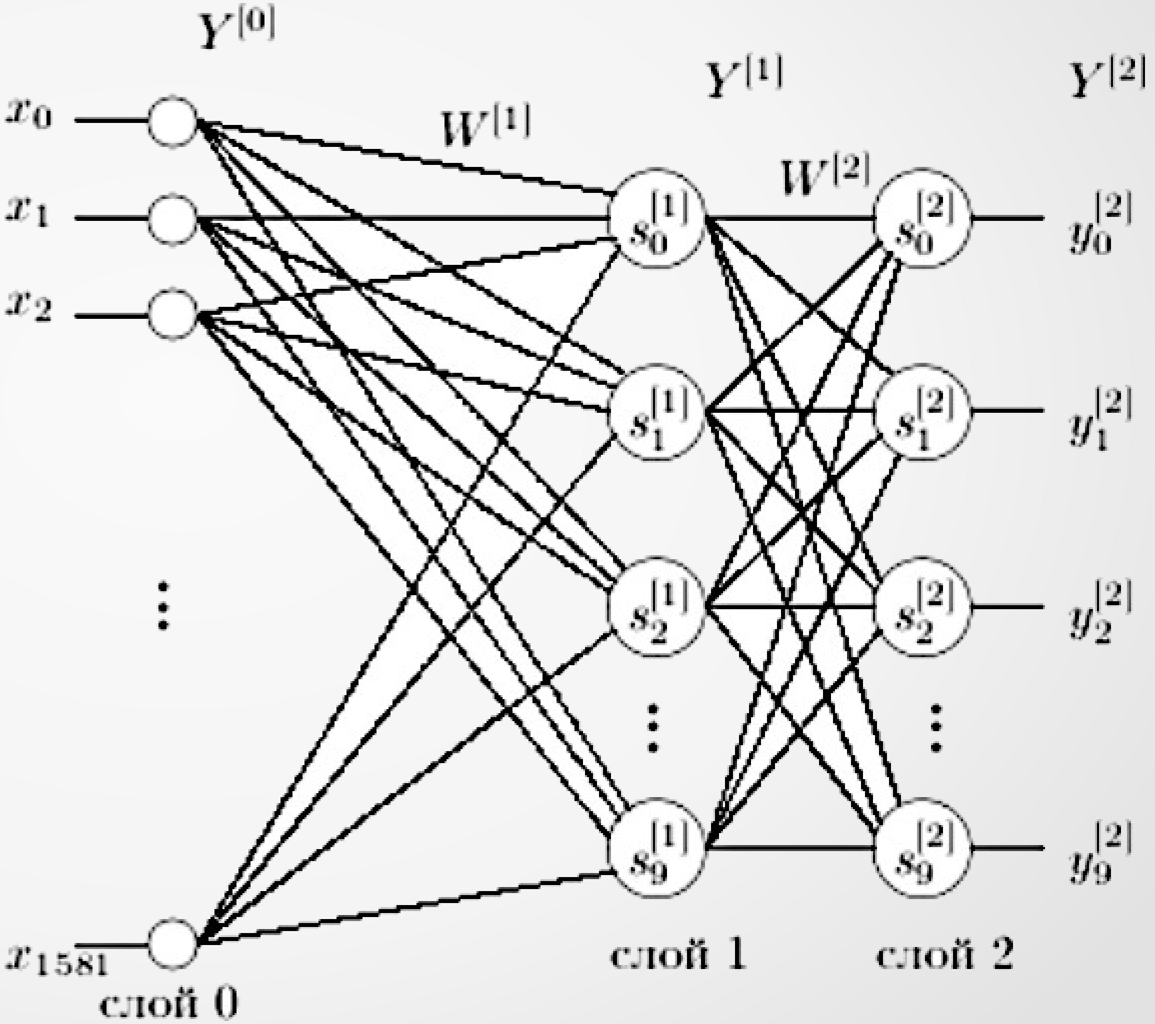
$$p = \frac{1}{1 + \exp(-s)}$$

# Нейросети

многослойная сеть прямого распространения

нейроны объединены в слои

сигнал распространяется послойно



# Нейросети

многослойная сеть прямого распространения

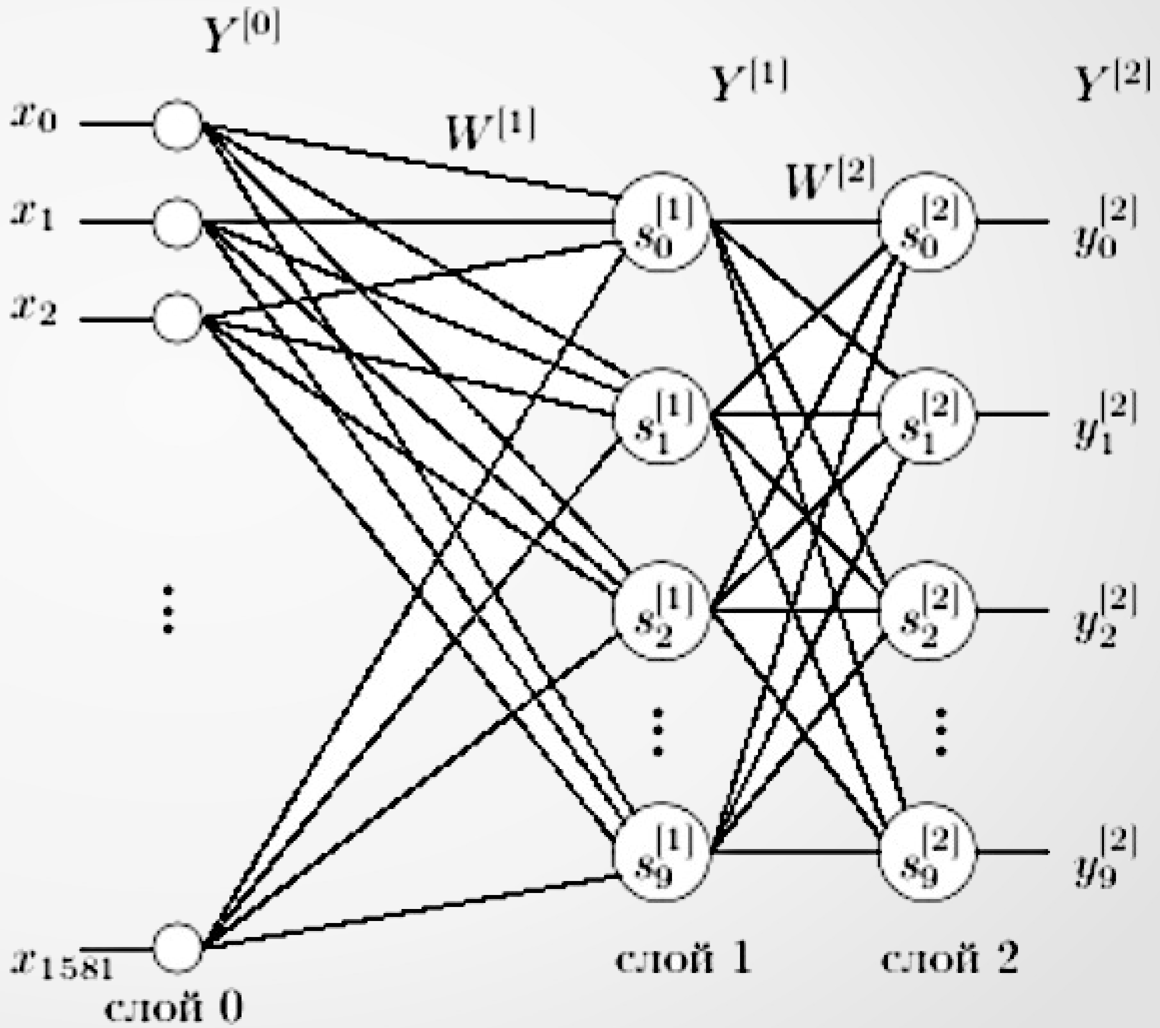
нейроны объединены в слои

сигнал распространяется послойно

входной рапределительный слой

обрабатывающие скрытые слои

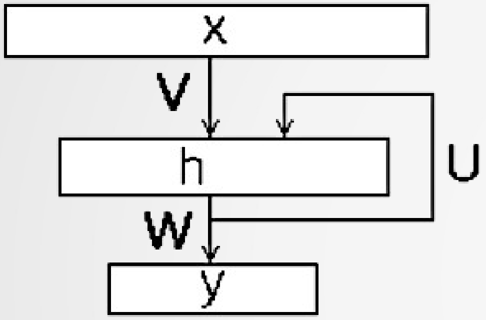
обрабатывающий выходной слой



# Нейросети

**другие типы моделей нейросетей**

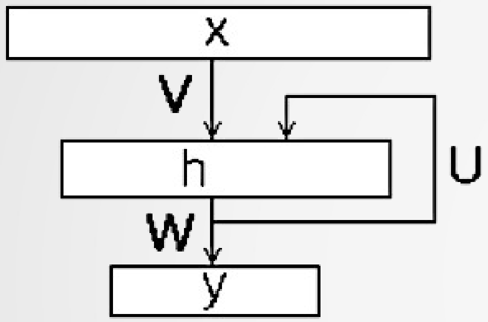
рекуррентные Элман, LSTM



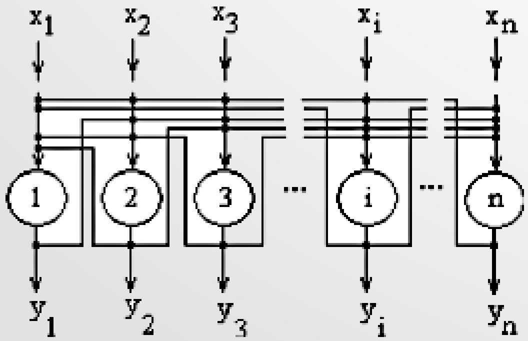
# Нейросети

**другие типы моделей нейросетей**

рекуррентные Элман, LSTM



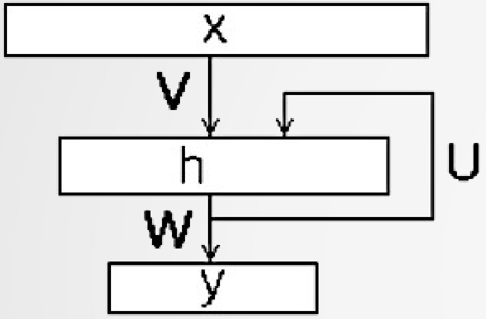

релаксационные Хопфилд



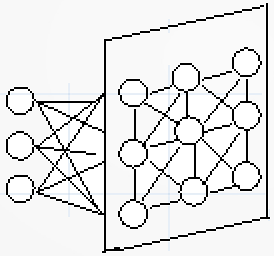
# Нейросети

**другие типы моделей нейросетей**

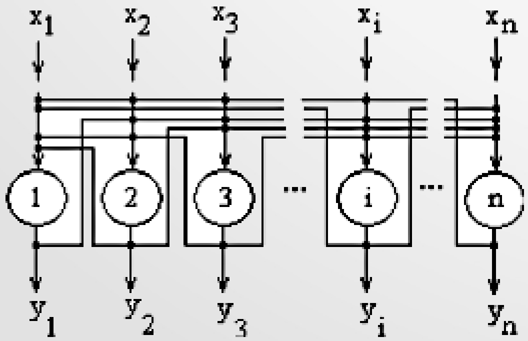
рекуррентные Элман, LSTM




соревновательные Кохонен



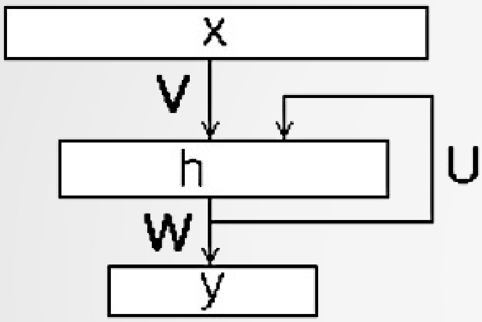
релаксационные Хопфилд



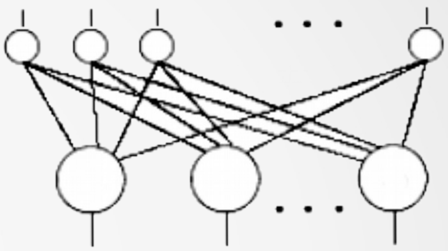
# Нейросети

**другие типы моделей нейросетей**

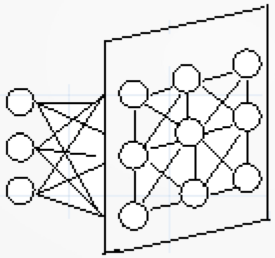
рекуррентные Элман, LSTM



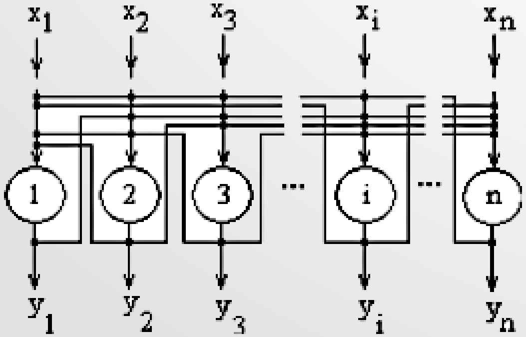

двунаправленные Коско



соревновательные Кохонен



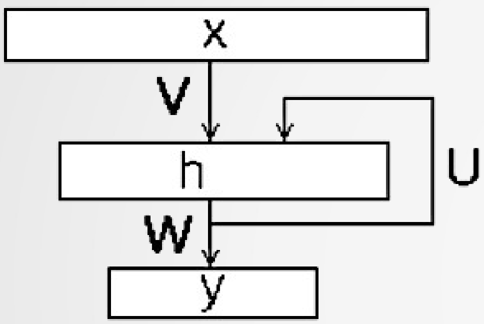
релаксационные Хопфилд



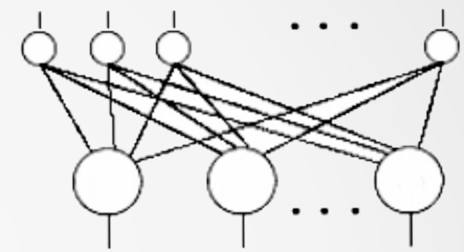
# Нейросети

**другие типы моделей нейросетей**

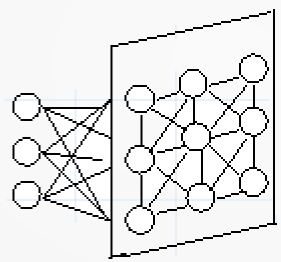
рекуррентные Элман, LSTM



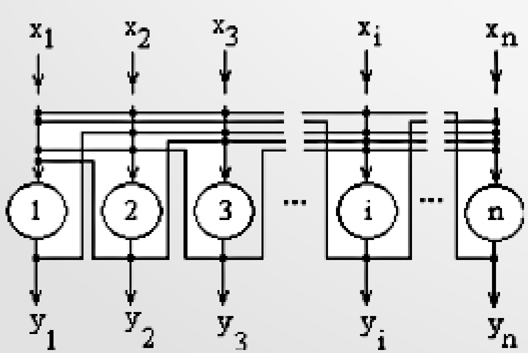

двунаправленные Коско



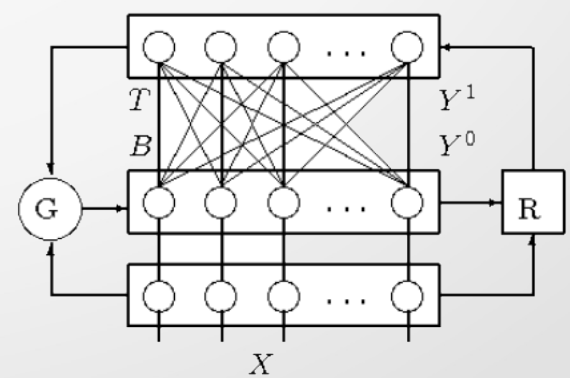
соревновательные Кохонен



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

$$Y = a\left(a\left(a\left(X \cdot W_1\right) \cdot W_2\right) \ldots W_n\right)$$

$$Y = X \cdot W_1 \cdot W_2 \ldots W_n = X \cdot \left(W_1 \cdot W_2 \ldots W_n\right) = X \cdot W$$

# 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 потери (Y ответ, C класс )

обучение классификатора как задача оптимизации

$$E\left(h\left(X, W\right), C\right) \rightarrow \min_{W}$$

# Нейросети

**примеры функций потери**

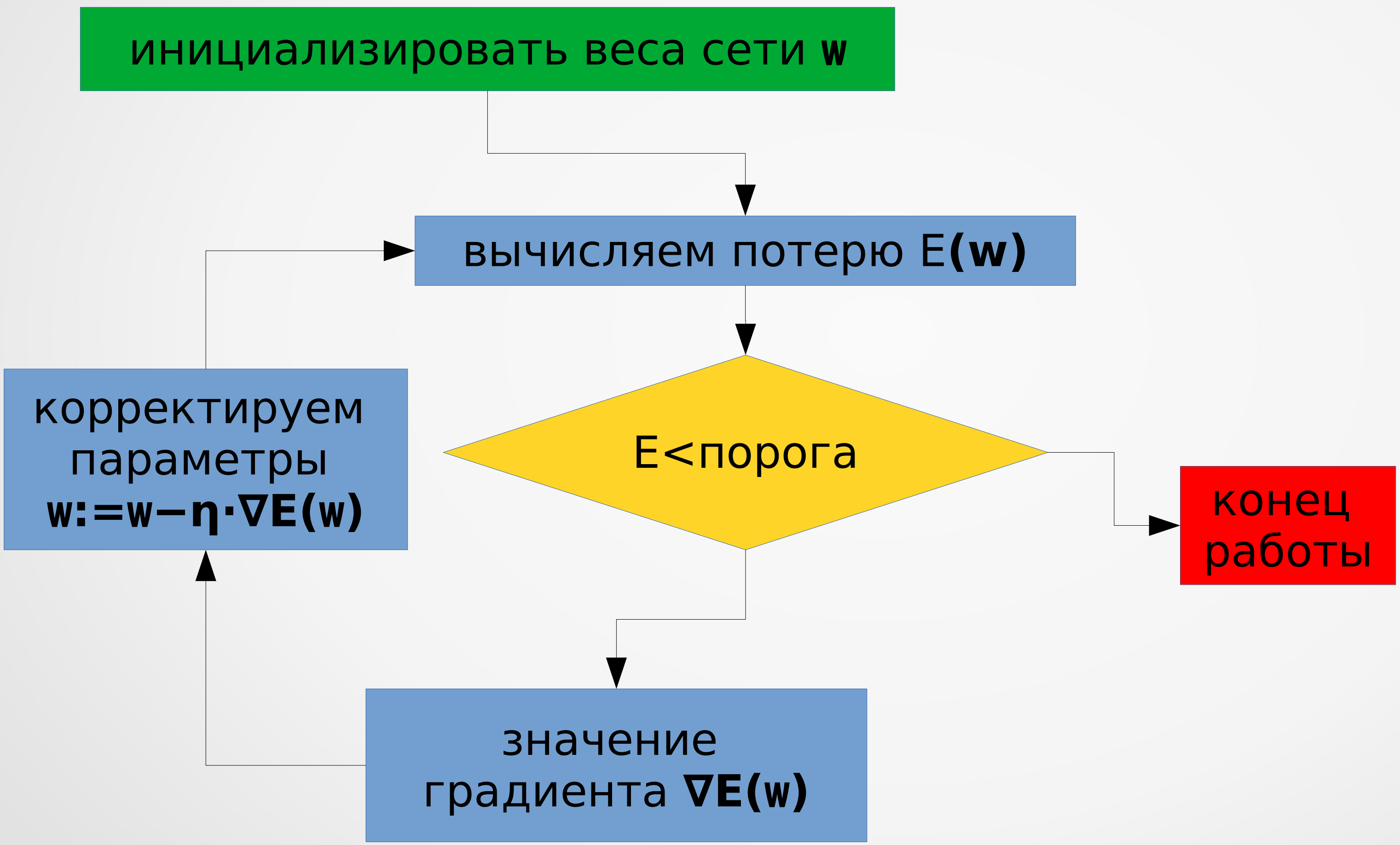
MSQE среднеквадратичное отклонение

Кросс-энтропия

Расстояние Кульбака-Лейблера

# Нейросети

## градиентный спуск (GD)



# Нейросети

метод обратного распространения ошибки

вычисление градиента функции потери
для многослойной нейросети

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

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

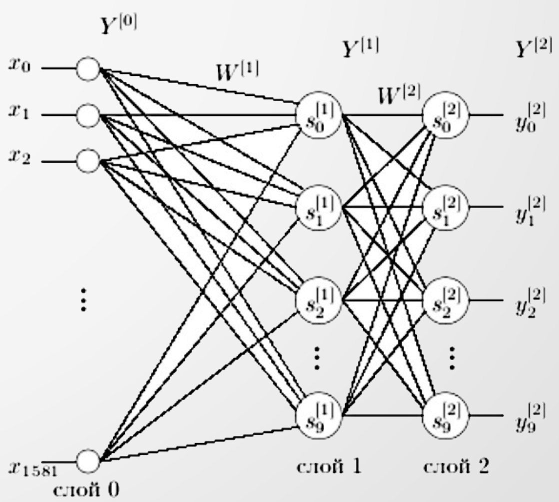
$$\frac{\partial s_j}{\partial w_{ij}}$$ выход i-того нейрона предыдущего слоя (определен явно)

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

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

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

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



# Нейросети

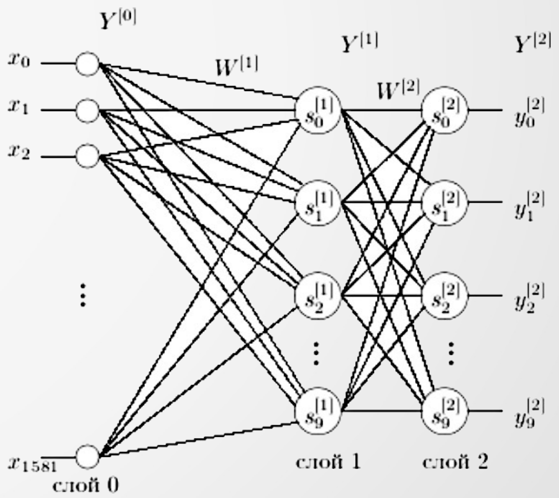
метод обратного распространения ошибки backProp

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

проблема исчезающего градиента

# 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

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

# Нейросети

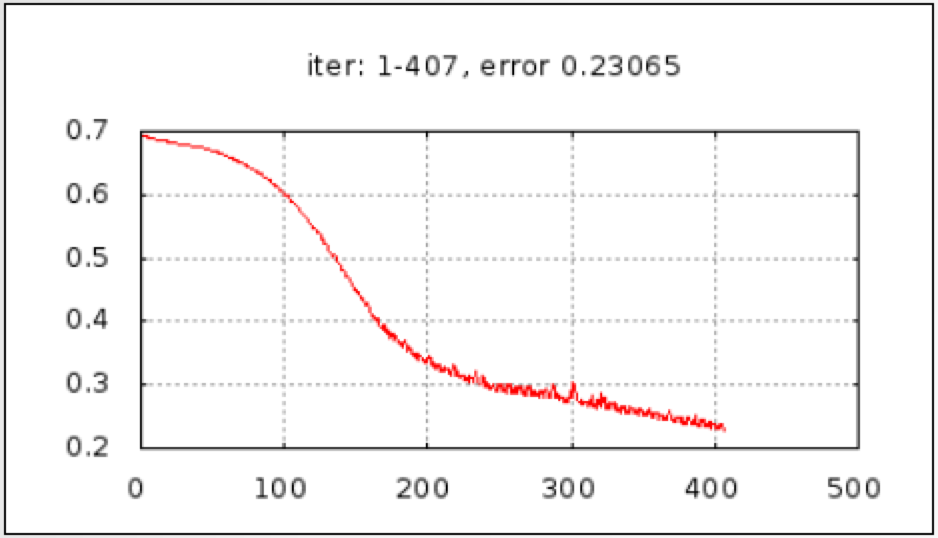



**Рис.:** история изменения ошибки ч.1

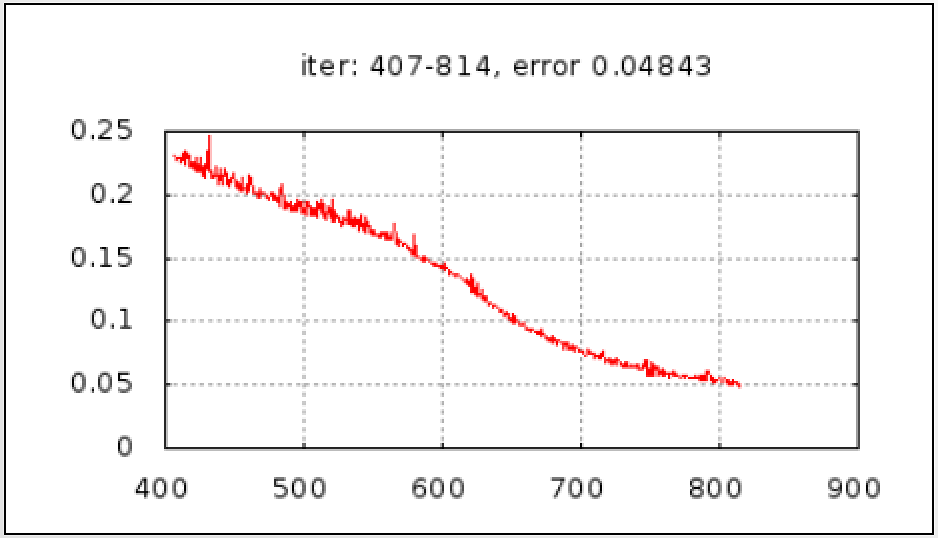



**Рис.:**история изменения ошибки ч.2

простой градиентный спуск

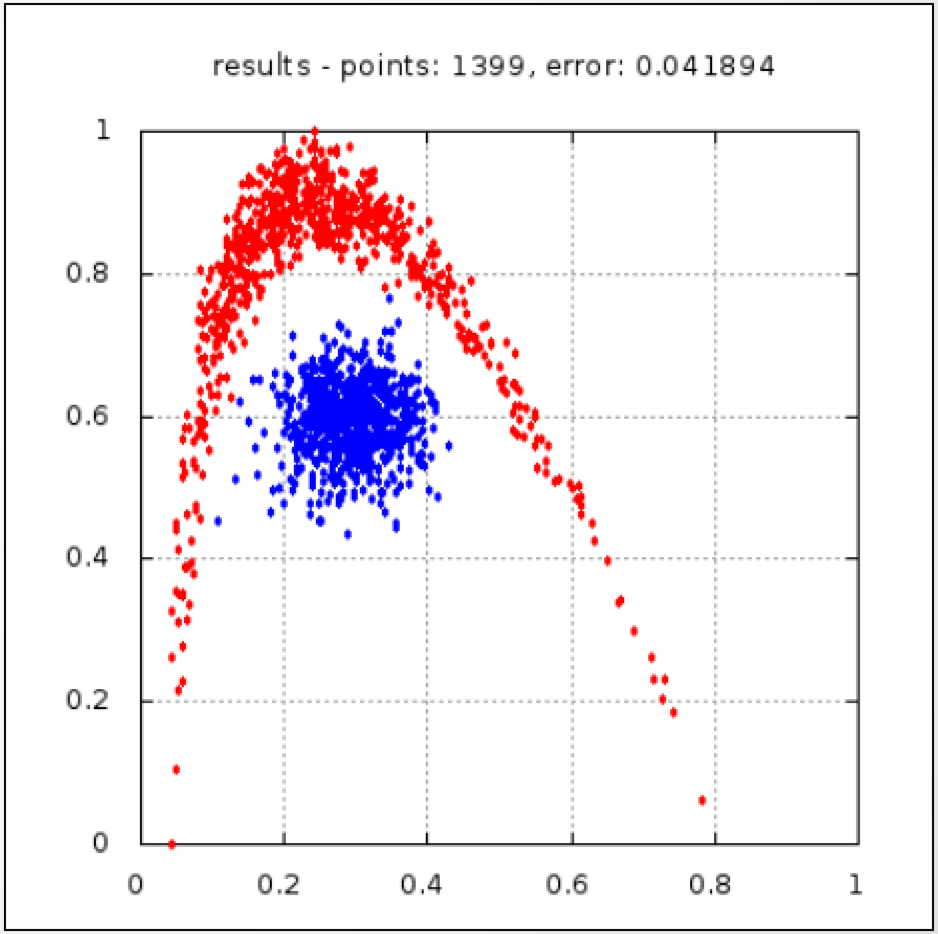



**Рис.:** результат теста

# Нейросети

простой градиентный спуск

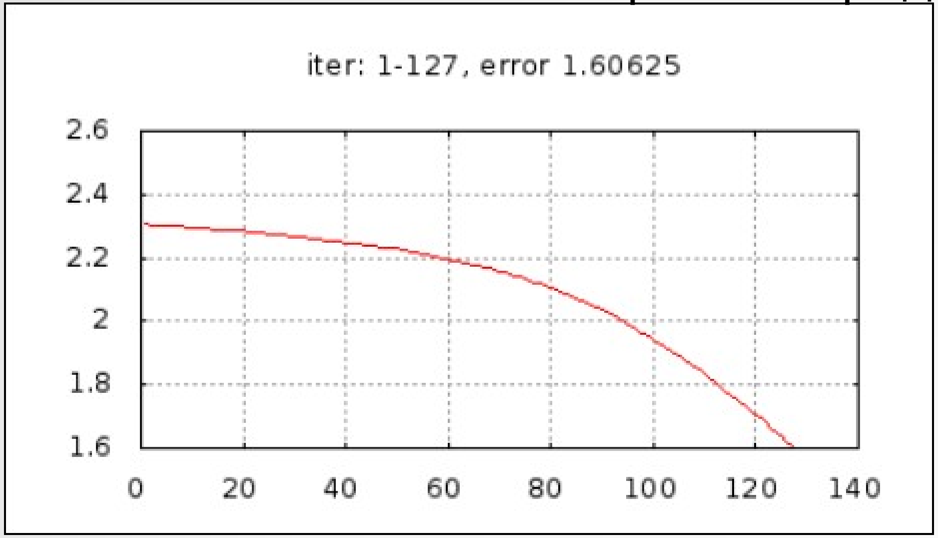



**Рис.:** история изменения ошибки ч.1

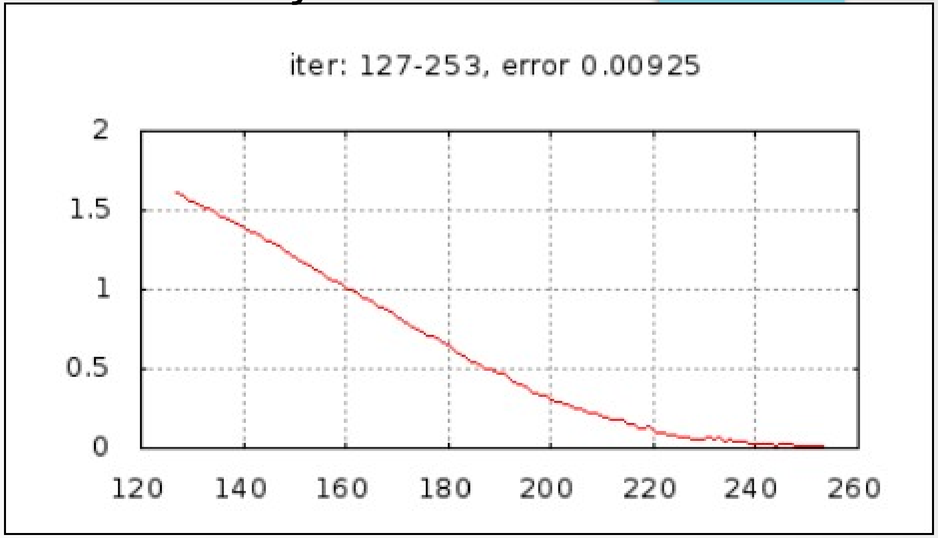



**Рис.:**история изменения ошибки ч.2

**Рис.:** состояния весов первого слоя

# Нейросети

модификации градиентного спуска **quickProp**

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

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

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

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

Параметр момента выглядит следующим образом.

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

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**

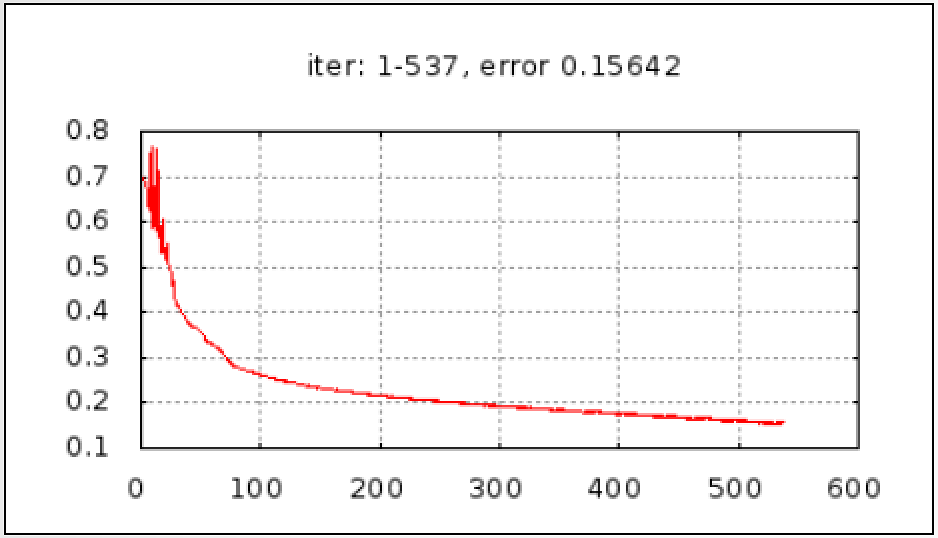



**Рис.:** история изменения ошибки ч.1

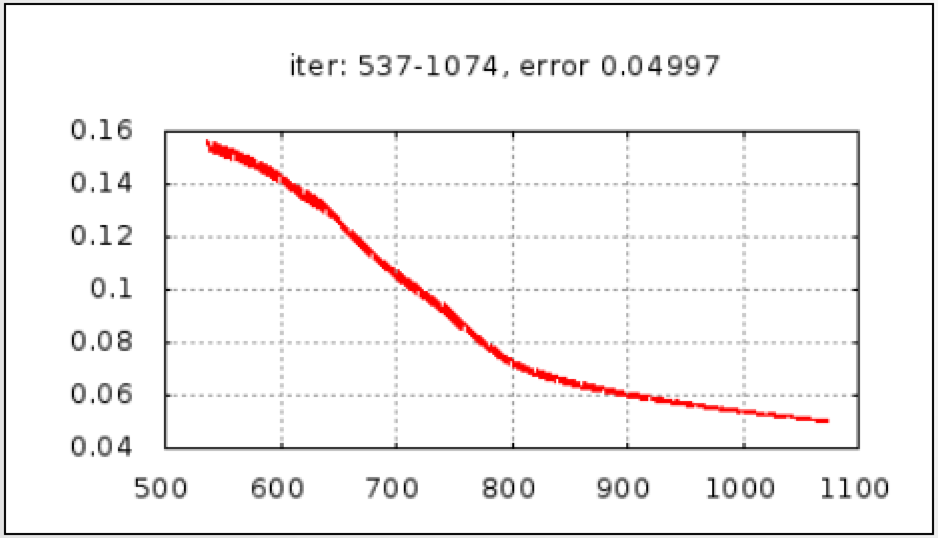



**Рис.:**история изменения ошибки ч.2

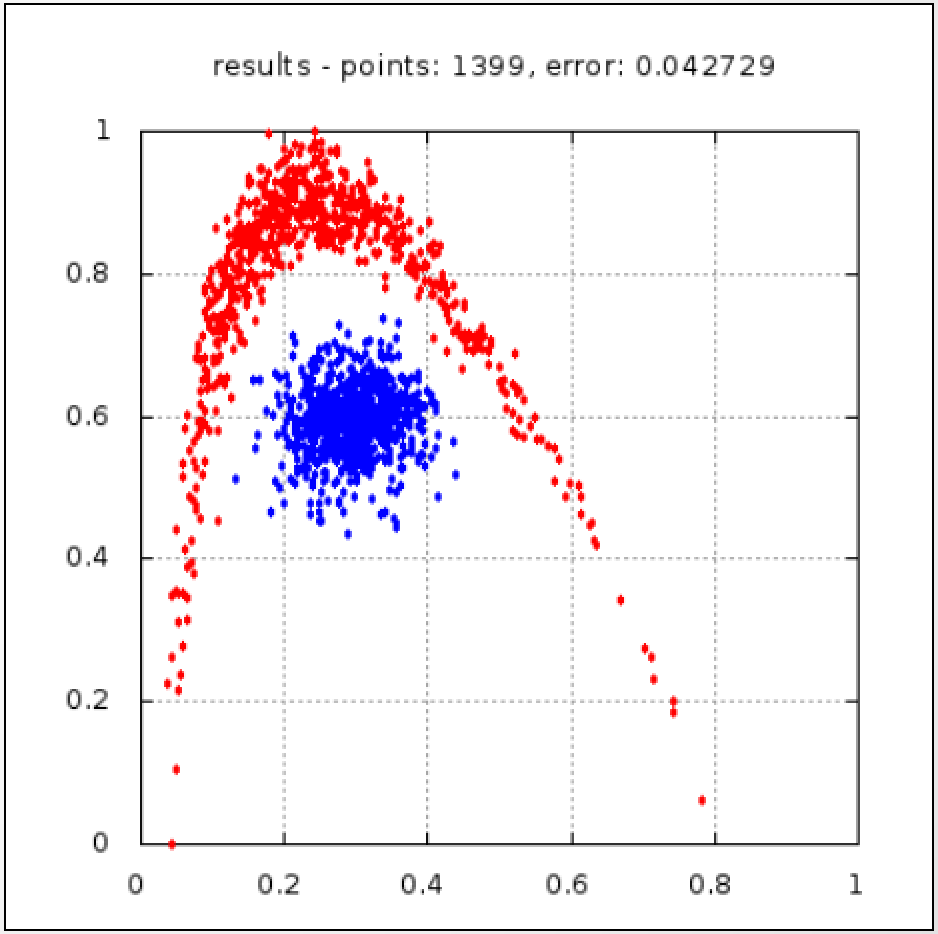



**Рис.:** результат теста

# Нейросети

**quickProp**

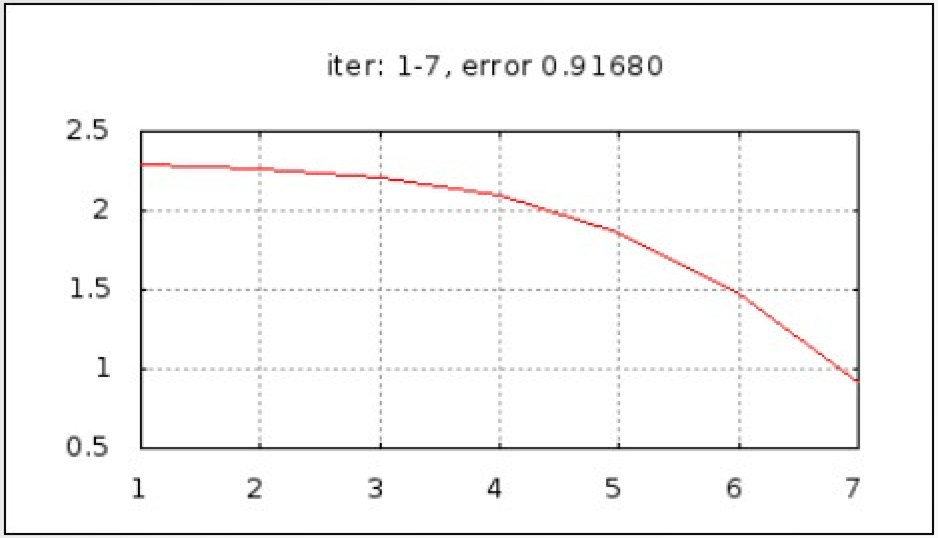



**Рис.:** история изменения ошибки ч.1

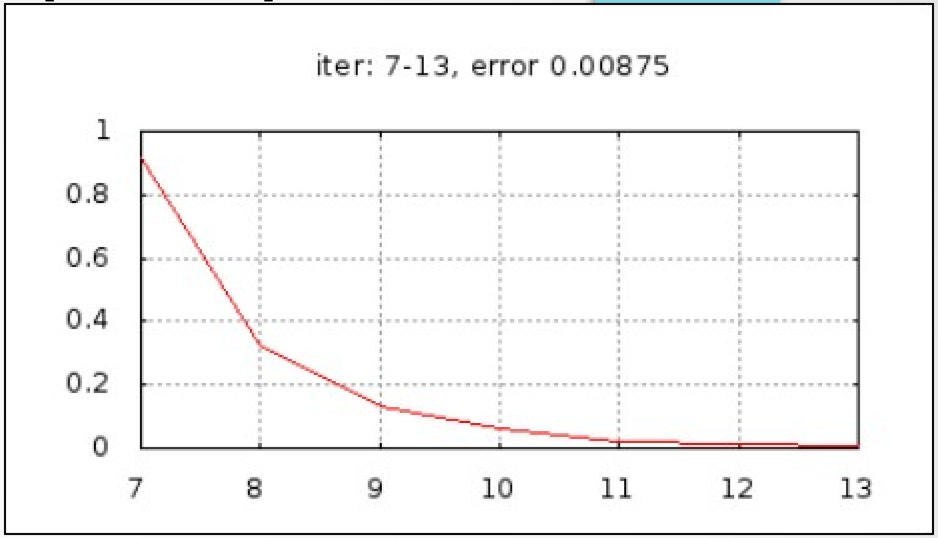



**Рис.:**история изменения ошибки ч.2

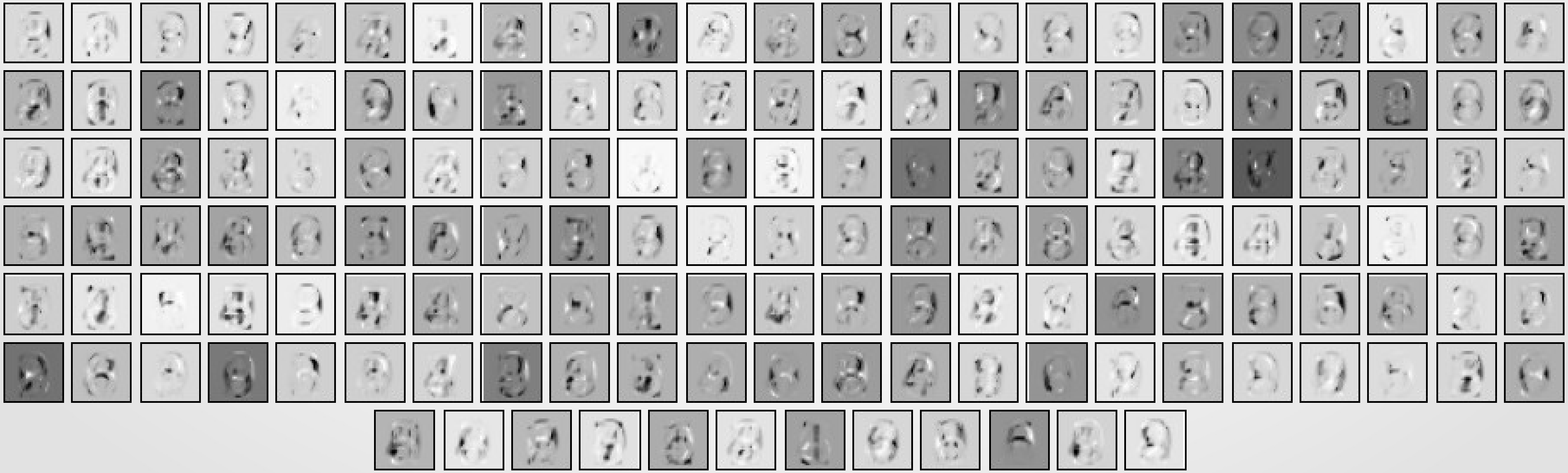


**Рис.:** состояния весов первого слоя

# Нейросети

модификации градиентного спуска **rProp**

моменты и регуляризация не используются,
применяется простая стратегия full-batch.
параметр скорости обучения η, рассчитывается для каждого веса индивидуально

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

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.

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

# Нейросети

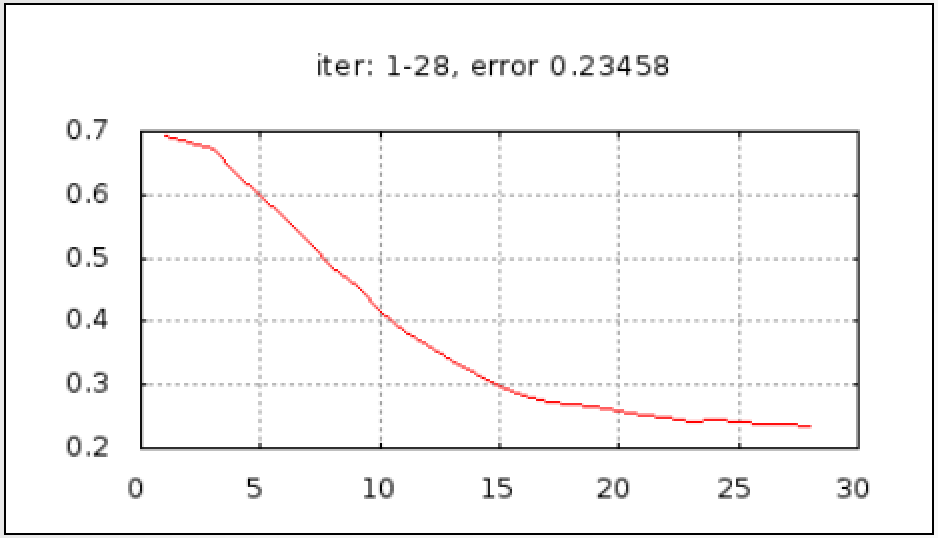



**Рис.:** история изменения ошибки ч.1

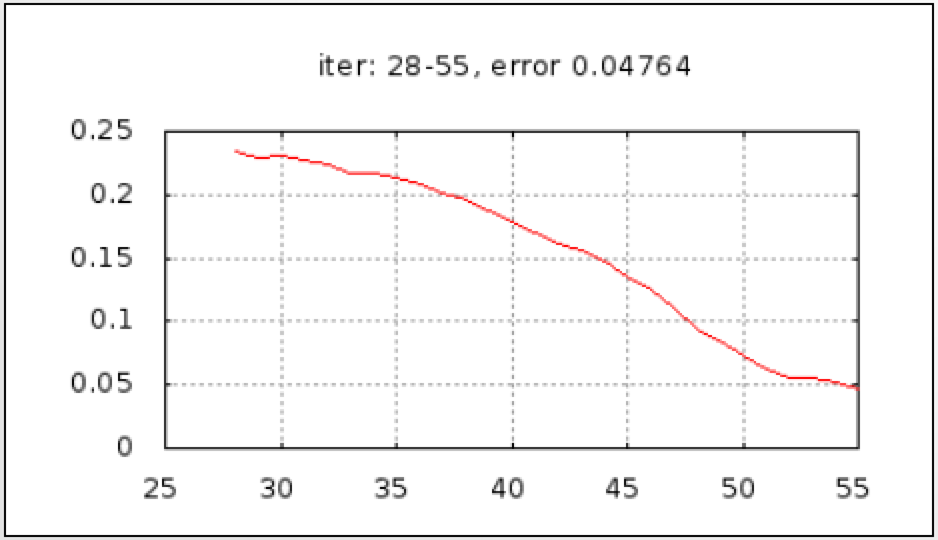



**Рис.:**история изменения ошибки ч.2

## rProp

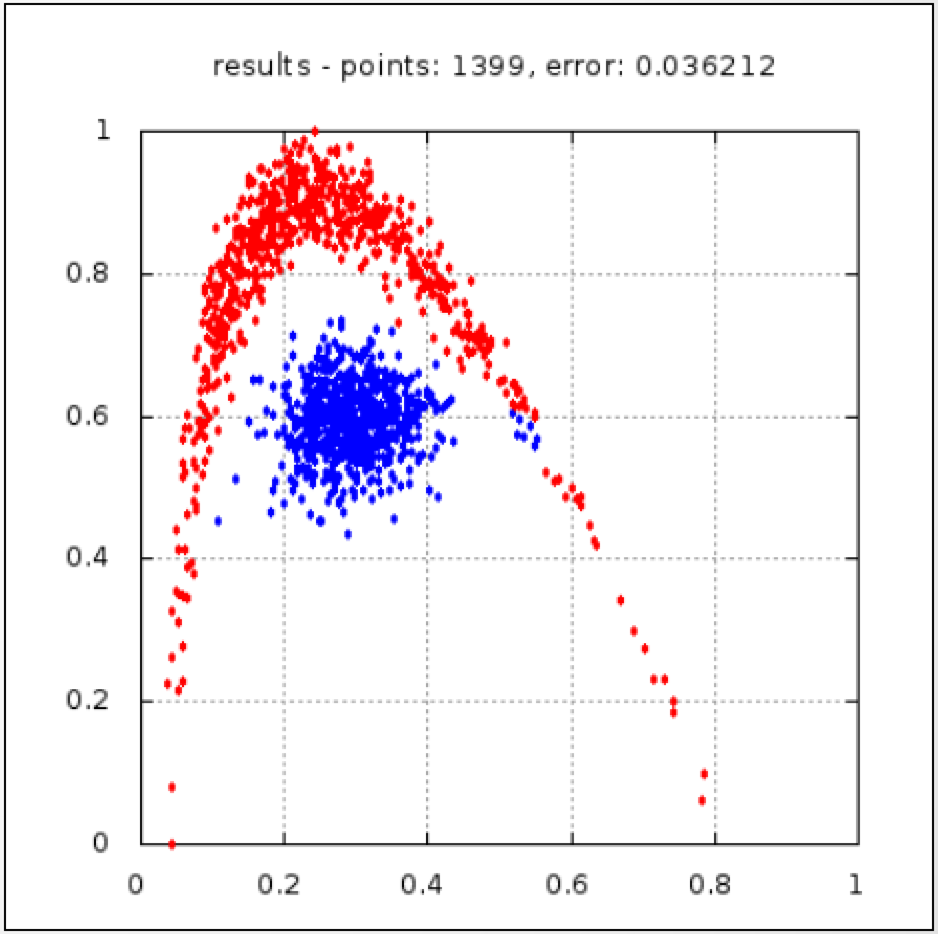



**Рис.:** результат теста

# Нейросети

**rProp**

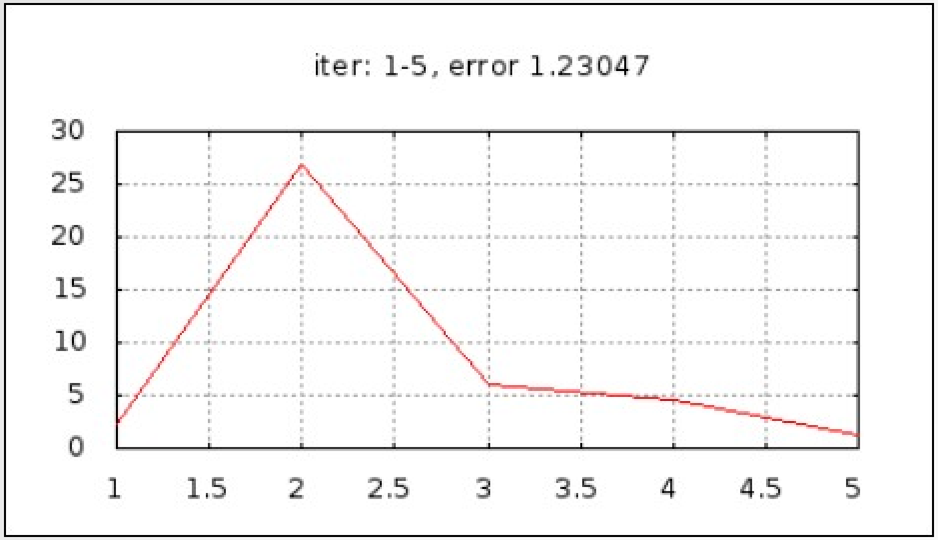



**Рис.:** история изменения ошибки ч.1

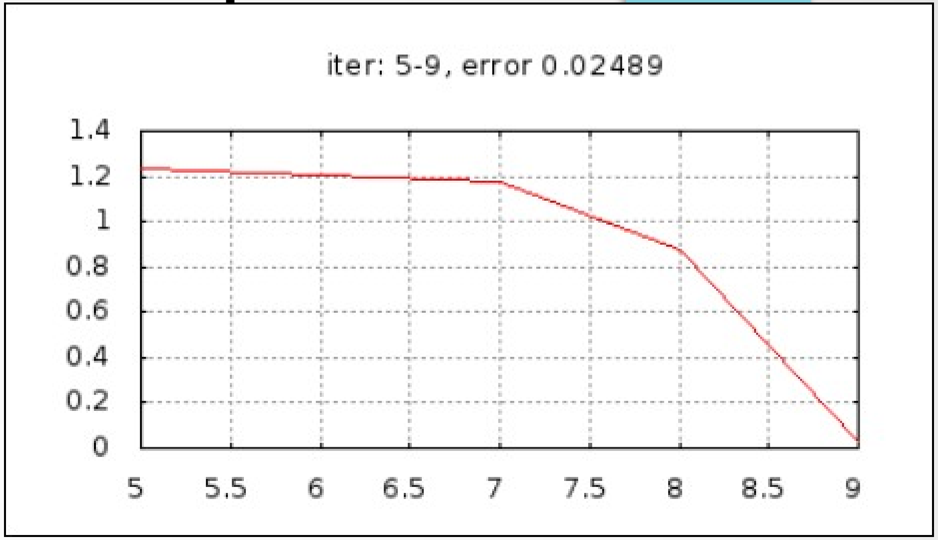



**Рис.:**история изменения ошибки ч.2

**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 измения параметров

компенсация погрешности вычислений - сброс сопряженного направления каждые n циклов (β:=0, p:=∇E)

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:=∇E

# Нейросети

**сопряжённые градиенты (conjugate gradient)**

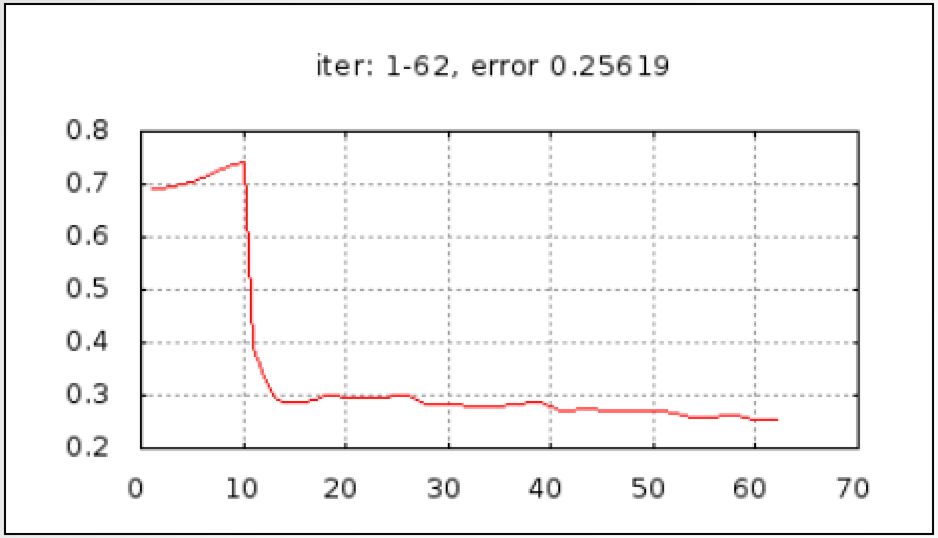



**Рис.:** история изменения ошибки ч.1

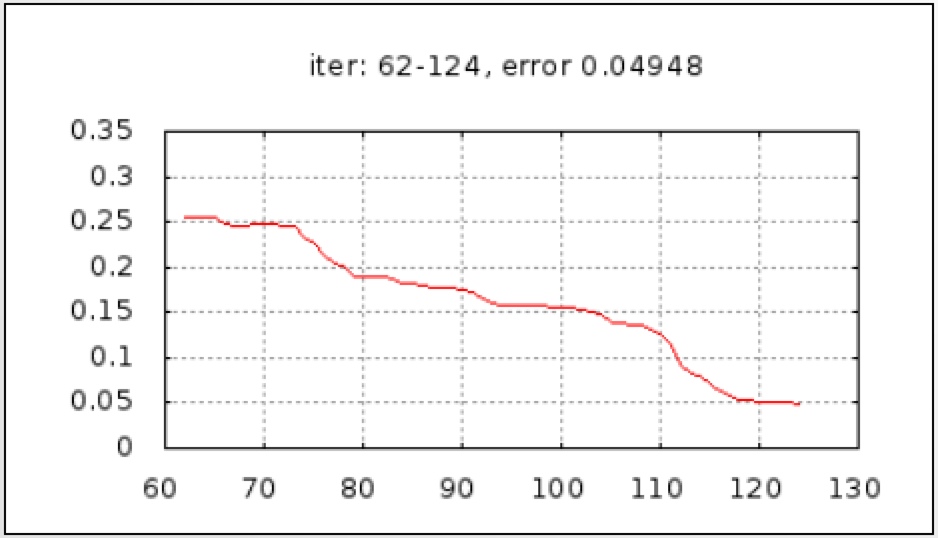



**Рис.:**история изменения ошибки ч.2

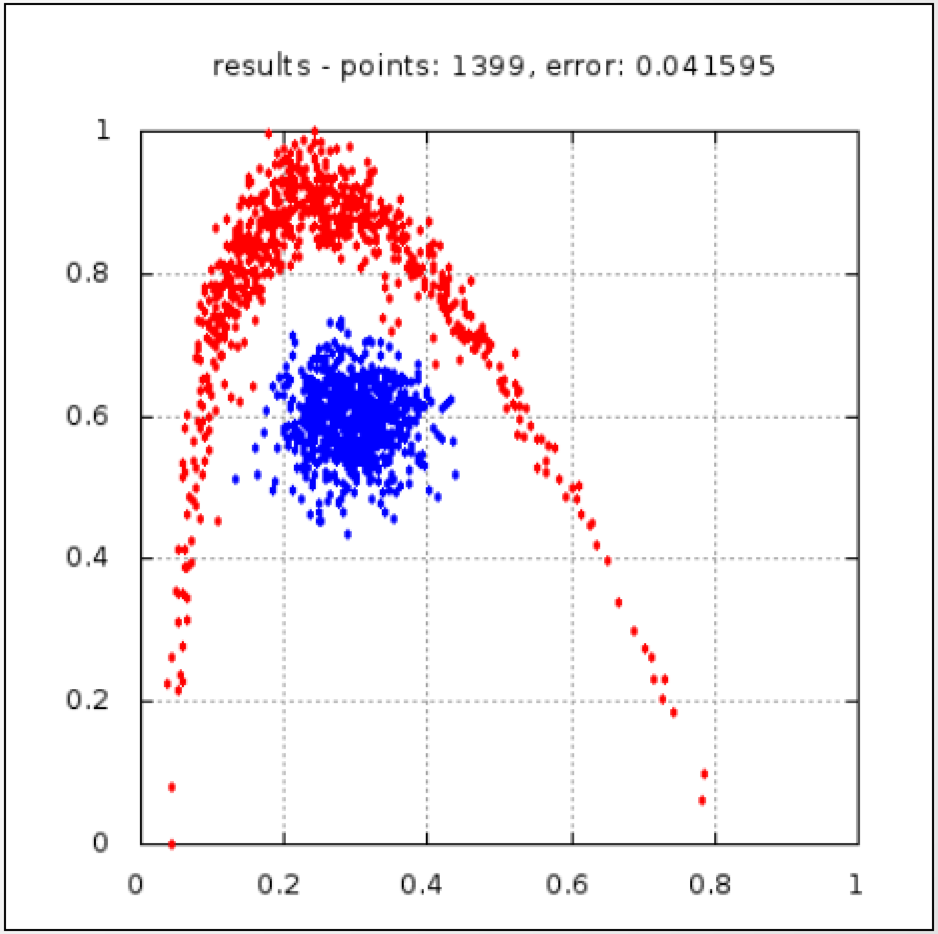



**Рис.:** результат теста

# Нейросети

**сопряжённые градиенты (conjugate gradient)**

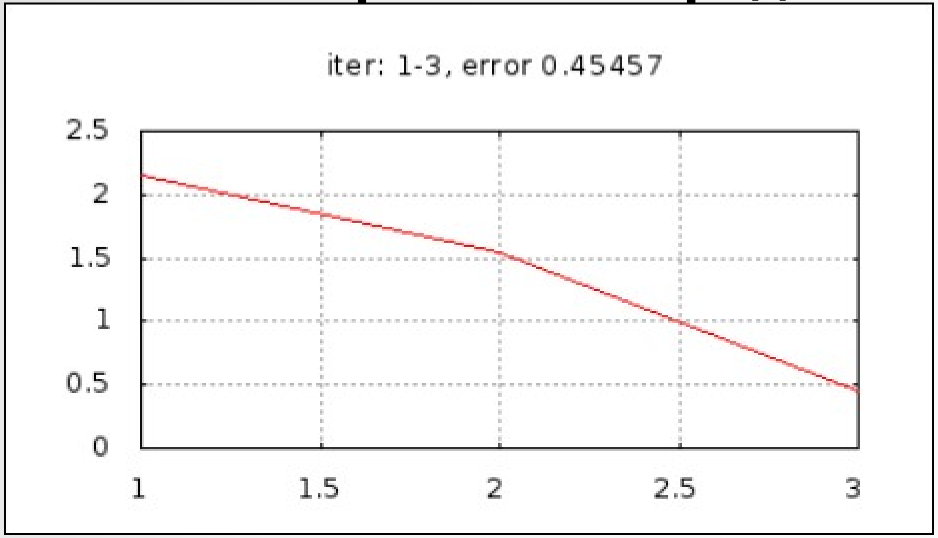



**Рис.:** история изменения ошибки ч.1


**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 найскорейшего роста функции, использую информацию о её кривизне

# Нейросети

**градиентные методы оптимизации второго порядка**

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

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

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 найскорейшего роста функции, использую информацию о её кривизне

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

H - гессиан, матрица вторых производных целевой функции E

вектор градиента

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

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

вычисление гессиана H это затратная процедура
можно обойтись приближением H

# Нейросети

**метод BFGS**
или алгоритм Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шанно
(Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno)

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

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

Е.С.Борисов О методах обучения многослойных нейронных сетей прямого распространения. (Часть 3)
http://mechanoid.kiev.ua/neural-net-backprop3.html

# Нейросети

**метод BFGS**
или алгоритм Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шанно
(Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno)

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

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×n (где n - длинна 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 = ∇E(t) - ∇E(t-1) - изменение градиента

s = ΔW = W(t) - W(t-1) - изменение весов

Е.С.Борисов О методах обучения многослойных нейронных сетей прямого распространения. (Часть 3)
http://mechanoid.kiev.ua/neural-net-backprop3.html

# Нейросети

**метод BFGS**

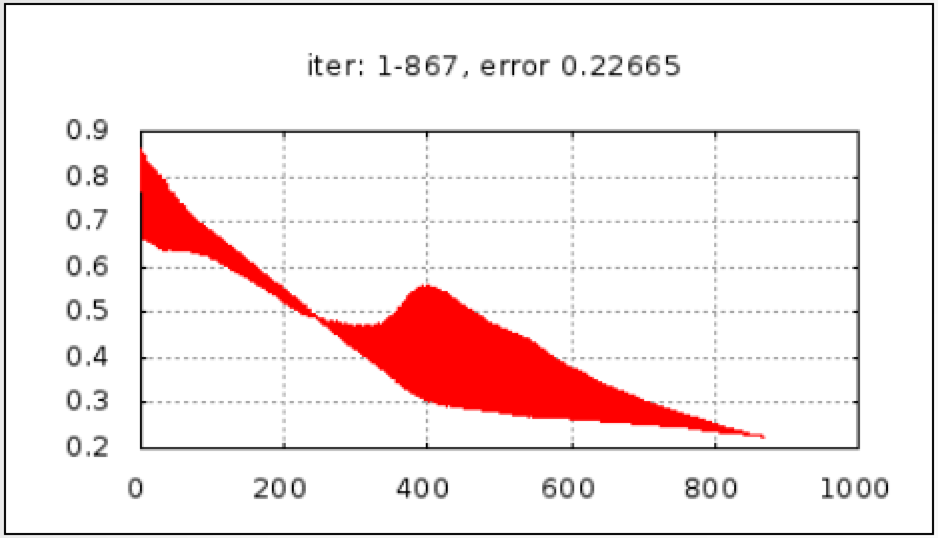



**Рис.:** история изменения ошибки ч.1

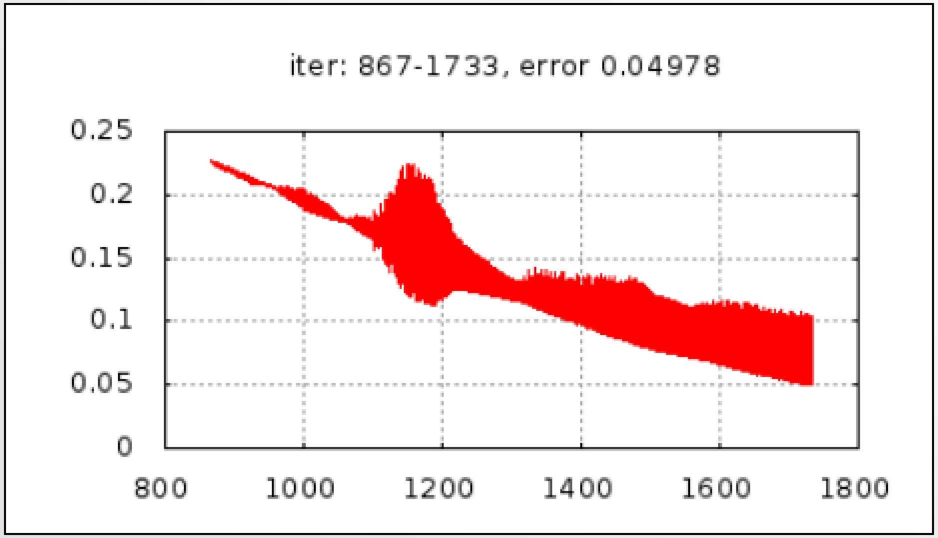



**Рис.:**история изменения ошибки ч.2

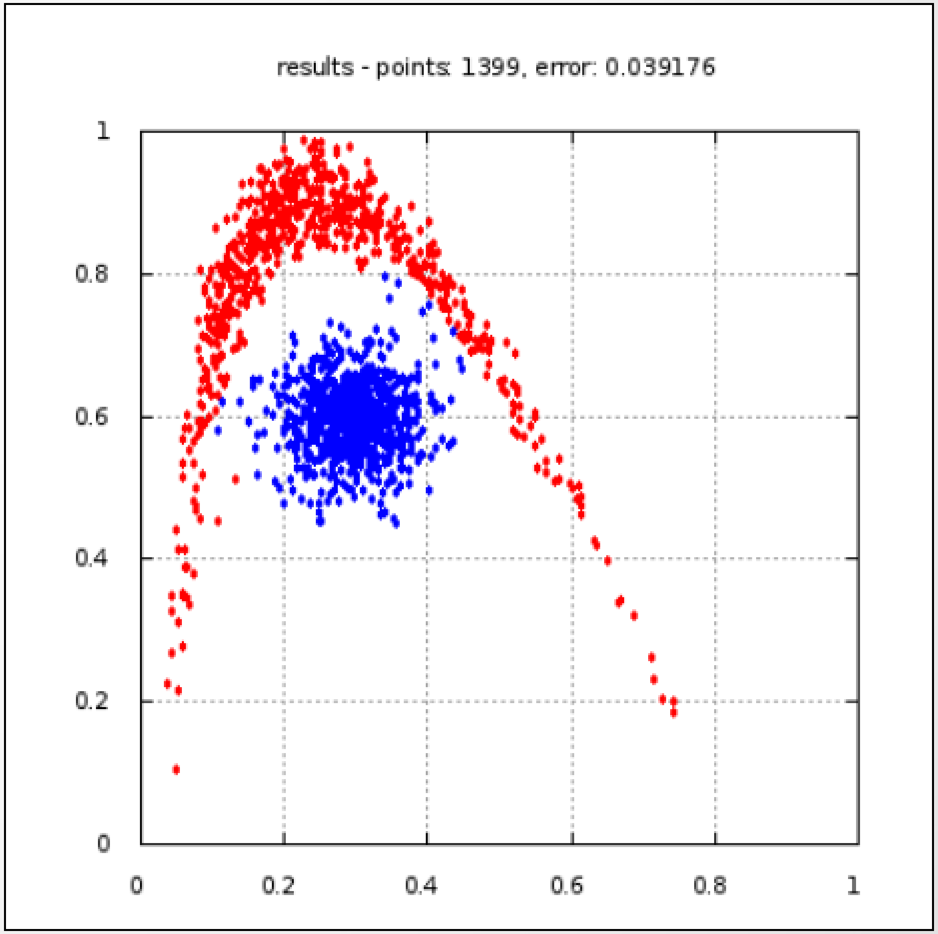



**Рис.:** результат теста

# 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.

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

$$J = \left[ \frac{\partial e}{\partial w} \right]$$

Е.С.Борисов О методах обучения многослойных нейронных сетей прямого распространения. (Часть 3)
http://mechanoid.kiev.ua/neural-net-backprop3.html

# 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.

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

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

где
$J$ - якобиан, матрица первых производных функции ошибки,
$\mu$ - 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.

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

$$J = \left[ \frac{\partial e}{\partial w} \right]$$

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

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

Е.С.Борисов О методах обучения многослойных нейронных сетей прямого распространения. (Часть 3)
http://mechanoid.kiev.ua/neural-net-backprop3.html

# Нейросети

**метод LMA**

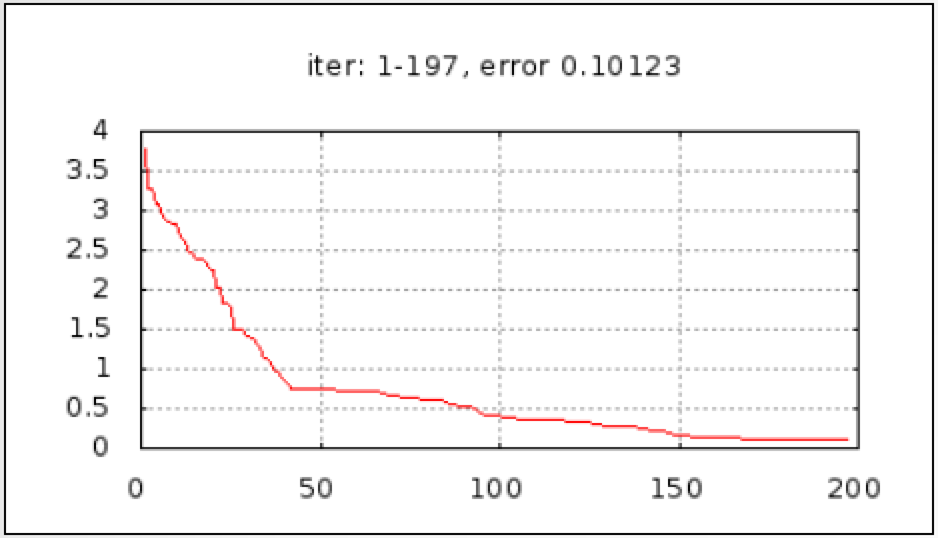



**Рис.:** история изменения ошибки ч.1

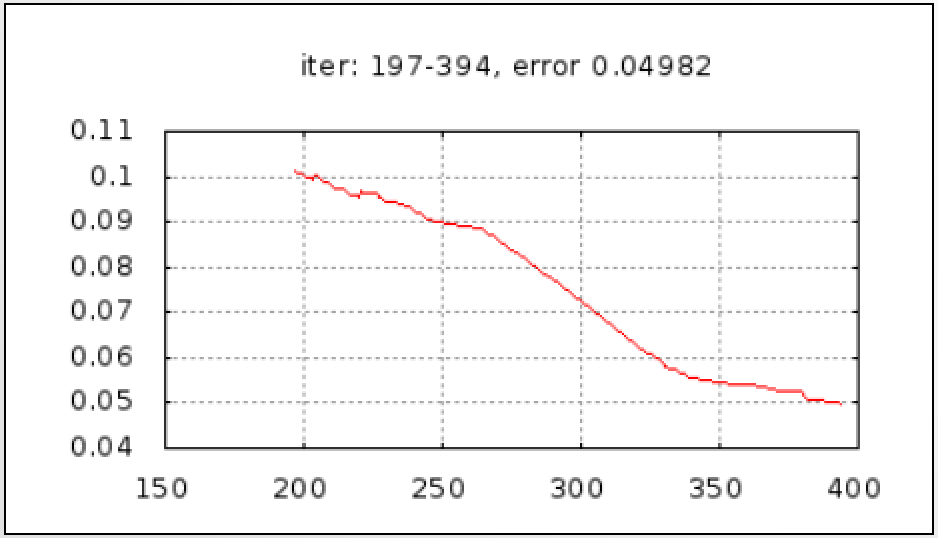



**Рис.:**история изменения ошибки ч.2

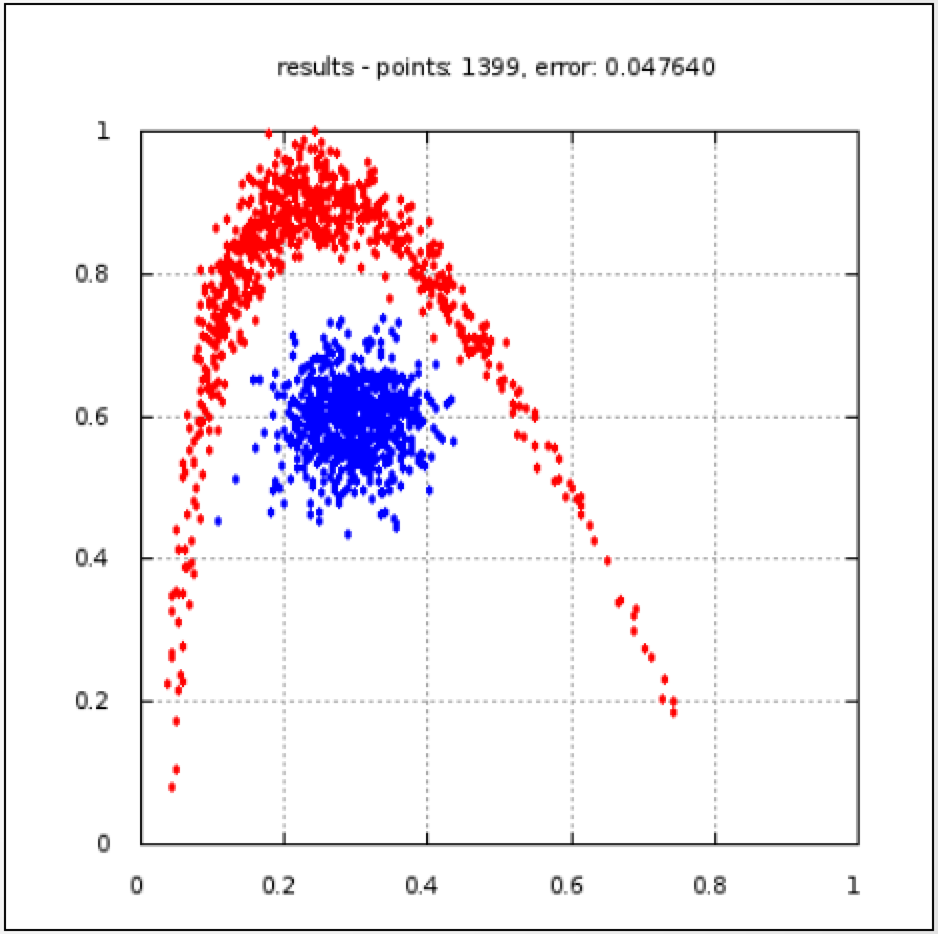



**Рис.:** результат теста

# 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