искусственные нейронные сети

Евгений Борисов

нейронные сети

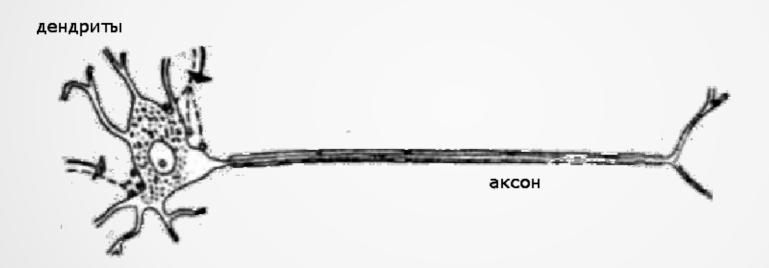
• вычислительная нейробиология

цель: моделировать процессы в живых организмах

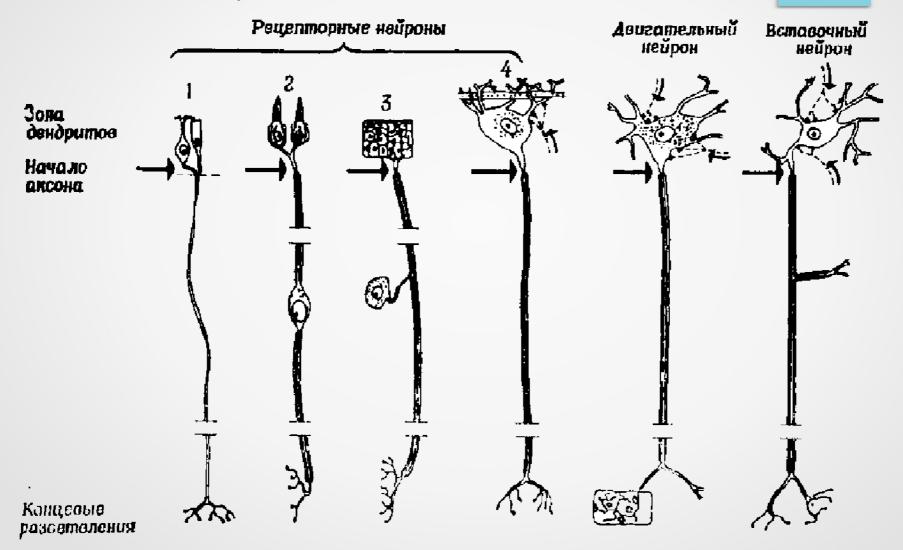
• теория искусственных нейронных сетей

цель: построить искусственную интеллектуальную систему

нервная клетка



различные типы нервных клеток

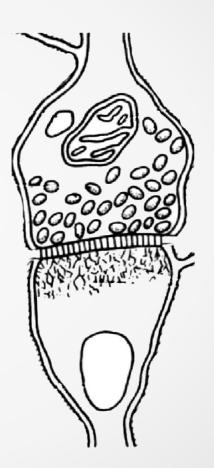


синапс - межнейронные соединения

ширина зазора ~50нм

однонаправленная передача сигнала

вещество-нейромедиатор передаёт сигнал химическим способом



нервный импульс - электрохимическая реакция

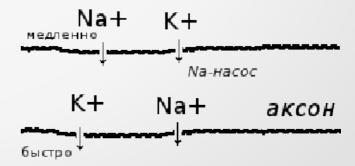
мембранная теория

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

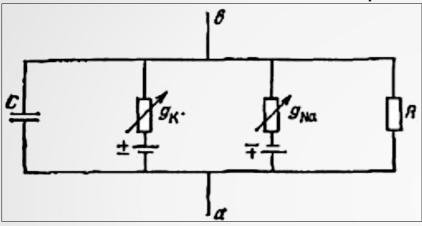


модель Ходжкина-Хаксли

Hodgkin, A., and Huxley, A. Currents carried by sodium and potassium ions through the membrane of the giant axon of loligo. - J. Physiol. (1952) II6, 449-472

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

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



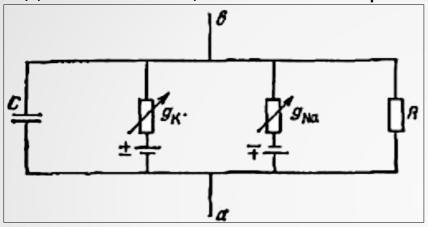
эквивалентная схема мембраны аксона кальмара

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

параллельно включенные

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

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

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

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

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

$$\frac{dn}{dt} = \alpha_{n} (1 - n) - \beta_{n} \cdot n,$$

$$\frac{dm}{dt} = \alpha_{m} (1 - m) - \beta_{m} \cdot m,$$

$$\frac{dh}{dt} = \alpha_{h} (1 - h) - \beta_{h} \cdot h,$$

$$\alpha_{n} = \frac{0.01 (V - 10)}{1 - e^{(10 - V)/10}}, \quad \beta_{n} = 0.125e^{-V/80},$$

$$\alpha_{m} = \frac{0.1 (V - 25)}{1 - e^{(25 - V)/10}}, \quad \beta_{m} = 4e^{-V/18},$$

$$\alpha_{h} = 0.7e^{-V/20}, \qquad \beta_{h} = \frac{1}{1 + e^{(30 - V)/10}}.$$

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

про историю авиации ...

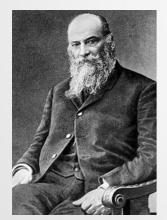




про историю авиации ...







Николай Егорович Жуковский





про историю авиации ...







Николай Егорович Жуковский



не копировать но использовать идею



История развития искусственных нейронных сетей

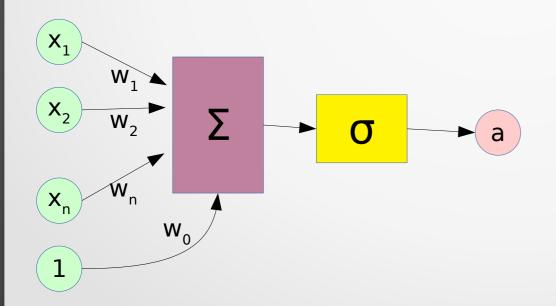
- [1950] МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ БИОЛОГИЧЕСКОГО НЕЙРОНА
 McCulloch W.S., Pitts W. A logical Calculus of Ideas Immanent in Nervous Activity
 Bull. Mathematical Biophysics, 1943
- [1960] модели нейронных сетей с одним обрабатывающим слоем F.Rosenblatt Principles of Neurodinamics. New York: Spartan Books, 1962.
- [1969] критика модели персептрона Розенблата
 M.Minsky,S.Papert Perceptrons an introduction to computational geometry, 1969, ISBN 0262130432
- [1970-80] метод обратного распространения, нейронные сети с несколькими обрабатывающими слоями Галушкин А. И. Синтез многослойных систем распознавания образов. М.: «Энергия», 1974.
 - D.E.Rumelhart, G.E.Hinton, R.J.Williams Learning internal representations by error propagation. // In Parallel distributed processing, vol. 1, pp. 318-62. Cambridg, MA: MIT Press, 1986.
- [2005] концепция Deep Learning

модель МакКаллока-Питтса (1943)

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

$$\mathbf{X_i}$$
 - ВХОД

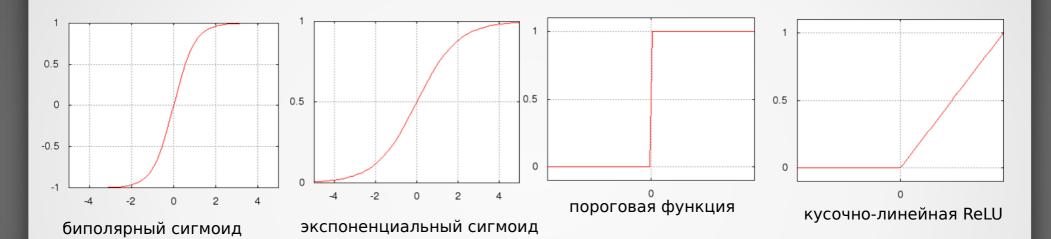
σ - функция активации



состояние нейрона

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

примеры функций активации



softmax (экспоненциальная нормализация) выходного слоя

$$(y_1,\ldots,y_m) = softmax(s_1,\ldots,s_m) = rac{\exp(s)}{\sum\limits_{j} \exp(s_j)}$$

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

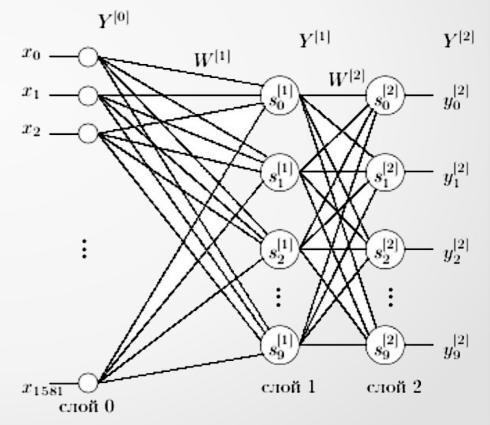
$$p = \frac{1}{1 + \exp(-s)}$$

коннекционизм -

модель ИИ из связанных между собой простых элементов

многослойная сеть прямого распространения

нейроны объединены в слои сигнал распространяется послойно



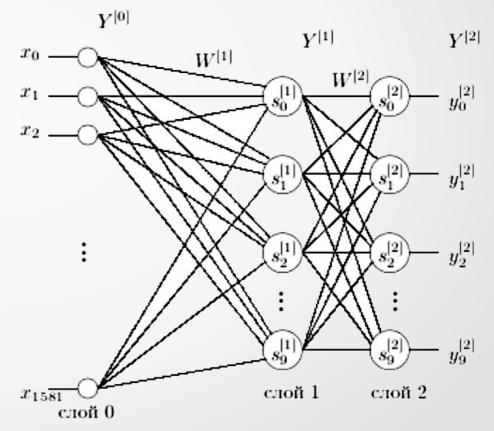
коннекционизм -

модель ИИ из связанных между собой простых элементов

многослойная сеть прямого распространения

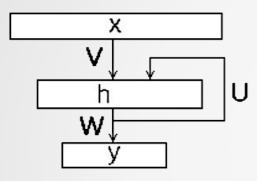
нейроны объединены в слои сигнал распространяется послойно

входной рапределительный слой обрабатывающие скрытые слои обрабатывающий выходной слой



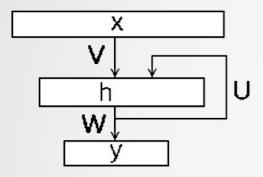
другие типы моделей нейросетей

рекуррентные - Элман, LSTM

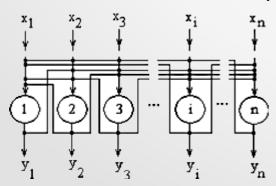


другие типы моделей нейросетей

рекуррентные - Элман, LSTM

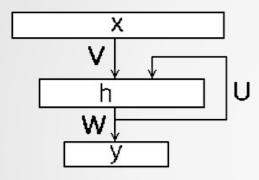


релаксационные - Хопфилд

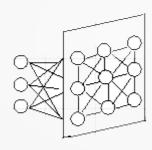


другие типы моделей нейросетей

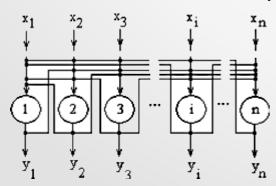
рекуррентные - Элман, LSTM



соревновательные - Кохонен



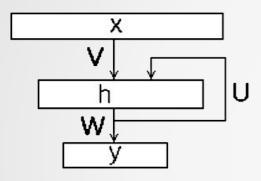
релаксационные - Хопфилд



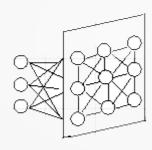
другие типы моделей нейросетей

рекуррентные - Элман, LSTM

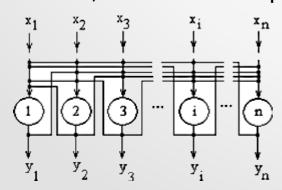
двунаправленные - Коско



соревновательные - Кохонен

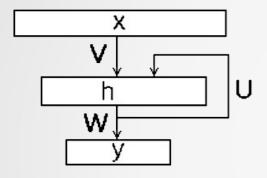


релаксационные - Хопфилд

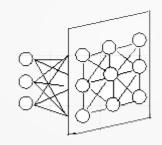


другие типы моделей нейросетей

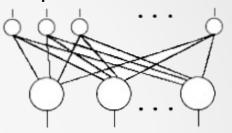
рекуррентные - Элман, LSTM



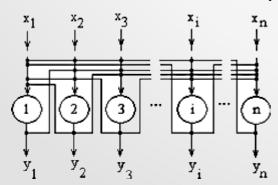
соревновательные - Кохонен



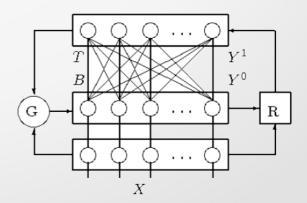
двунаправленные - Коско



релаксационные - Хопфилд



адаптивный резонанс - Гроссберг



ИНС прямого распространения (MLP)

- о количестве обрабатывающих слоёв
- 1 слой гиперплоскость (линейный классификатор)
- 2 слоя выпуклая разделяющая поверхность
- 3 слоя поверхность любой формы

ИНС прямого распространения (MLP)

о количестве обрабатывающих слоёв

- 1 слой гиперплоскость (линейный классификатор)
- 2 слоя выпуклая разделяющая поверхность
- 3 слоя поверхность любой формы

Теоретическое обоснование

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.

ИНС прямого распространения (MLP)

- о количестве обрабатывающих слоёв
- 1 слой гиперплоскость (линейный классификатор)
- 2 слоя выпуклая разделяющая поверхность
- 3 слоя поверхность любой формы

многослойная нейросеть с линейной функцией активации эквивалентна однослойной

многослойная нейросеть прямого распространения с линейной функцией активации эквивалентна однослойной

Доказательство:

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

если активация линейная a(s)=s

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

ИНС прямого распространения (MLP)

```
три слоя - поверхность любой формы
```

получается, что строить нейросети глубже трёх слоёв не имеет смысла ??...

«есть один нюанс...» (c) :)

Про обучение многослойных нейросетей

 $h: X \times W \rightarrow Y$ 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

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

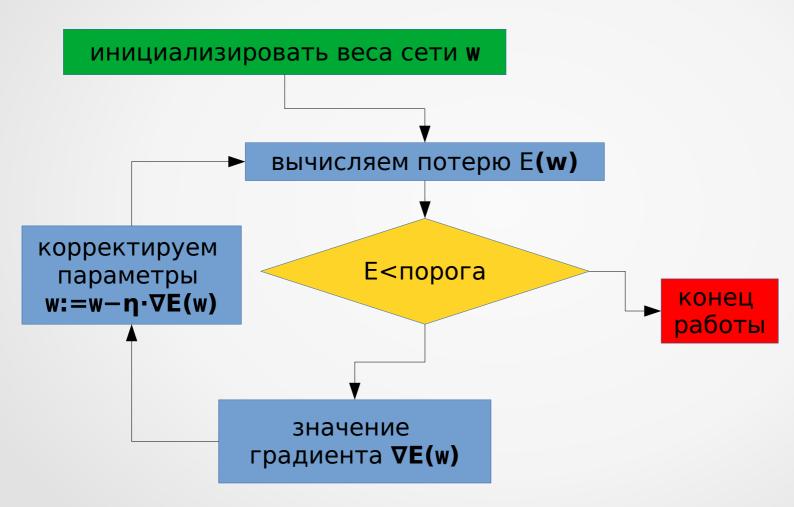
примеры функций потери

MSQE среднеквадратичное отклонение

Кросс-энтропия

Расстояние Кульбака-Лейблера

градиентный спуск (GD)



метод обратного распространения ошибки

вычисление градиента функции потери для многослойной нейросети

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

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

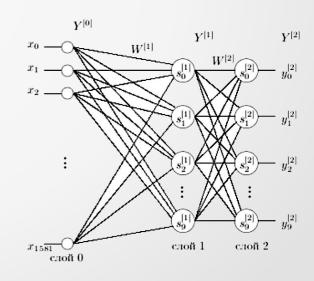
$$\frac{\partial s_j}{\partial w_{ii}}$$
 выход і-того нейрона предыдущего слоя (определен явно)

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

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

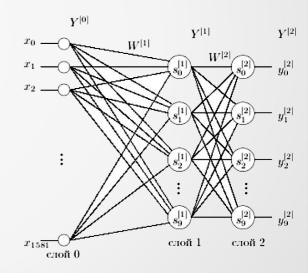
$$\delta_i := rac{\partial E}{\partial y_i}$$
 ошибка нейрона номер ј для выходного слоя

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



метод обратного распространения ошибки backProp

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



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

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

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

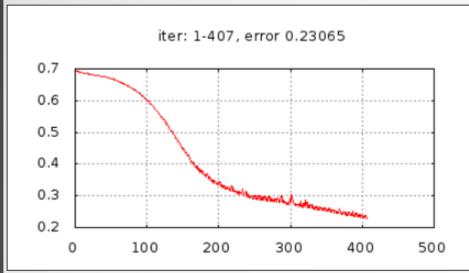


Рис.: история изменения ошибки ч.1

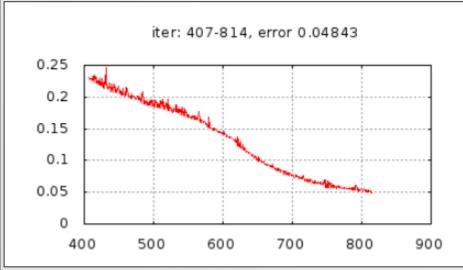
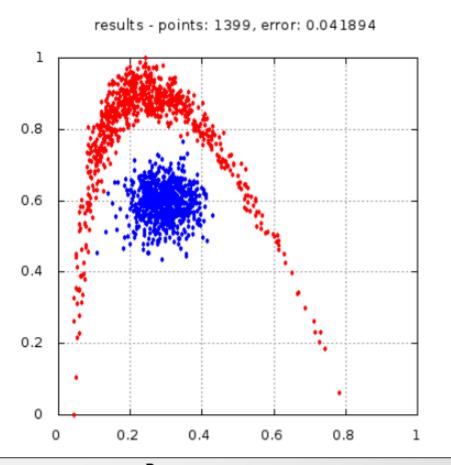


Рис.:история изменения ошибки ч.2

простой градиентный спуск



простой градиентный спуск



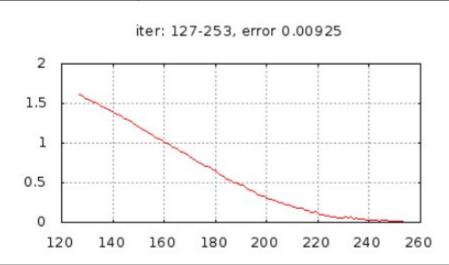


Рис.: история изменения ошибки ч.1

Рис.:история изменения ошибки ч.2



Рис.: состояния весов первого слоя

модификации градиентного спуска quickProp

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

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

$$\eta = \left\{ egin{array}{ll} \eta_0 &: & (\Delta W = 0) ee (-\Delta W \cdot S > 0) \ 0 &: & - \end{array}
ight.$$

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

Параметр момента выглядит следующим образом.

$$\mu = egin{cases} \mu_{max} & : & (eta > \mu_{max}) ee (\gamma < 0) \ eta & : & - \end{cases}$$

где
$$\mu_{max}=1.75$$
 - константа, $S=
abla E+
ho W$, $eta=S(t)/(S(t-1)-S(t))$ $\gamma=S\cdot(-\Delta W)\cdoteta$

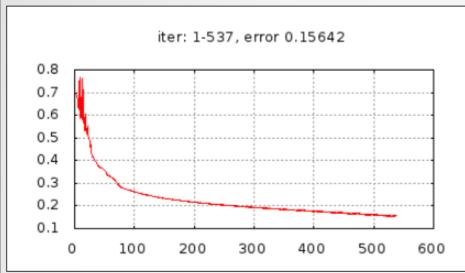


Рис.: история изменения ошибки ч.1

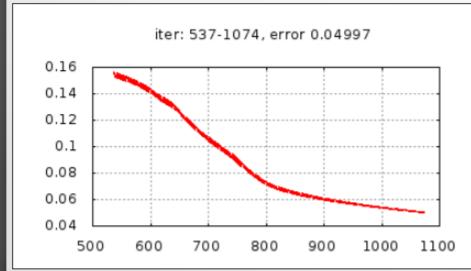
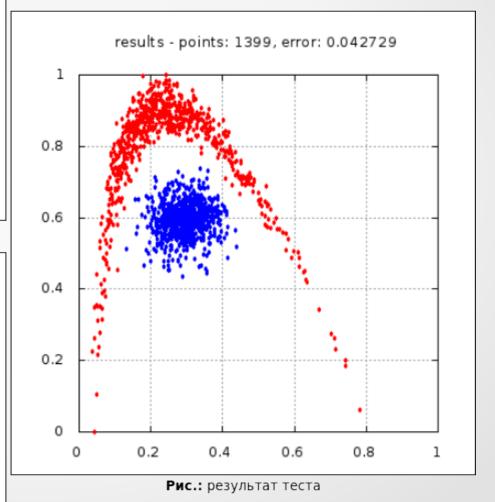
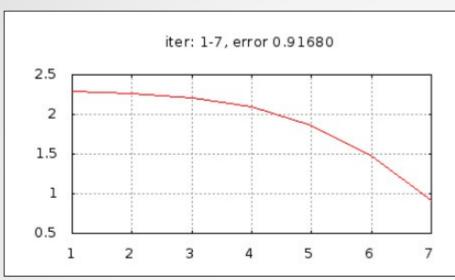


Рис.:история изменения ошибки ч.2

quickProp





quickProp

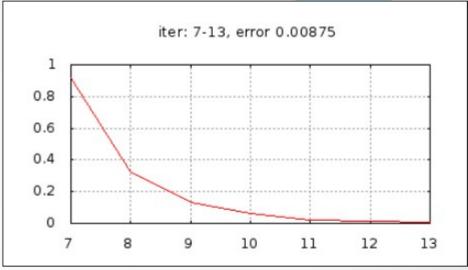


Рис.: история изменения ошибки ч.1

Рис.:история изменения ошибки ч.2

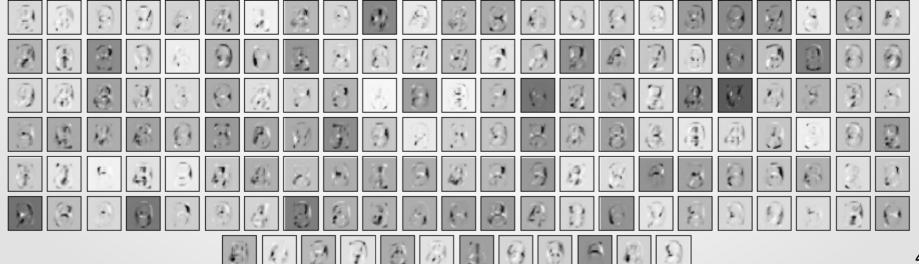


Рис.: состояния весов первого слоя

модификации градиентного спуска **rProp**

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

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

где $S=
abla E(t-1)\cdot
abla E(t)$ - 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.

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

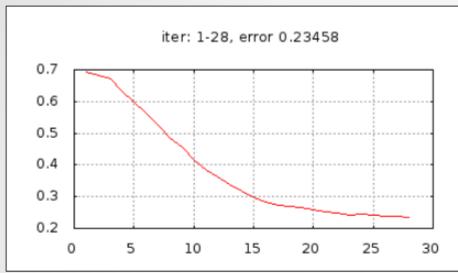


Рис.: история изменения ошибки ч.1

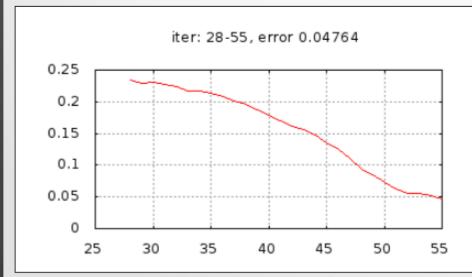
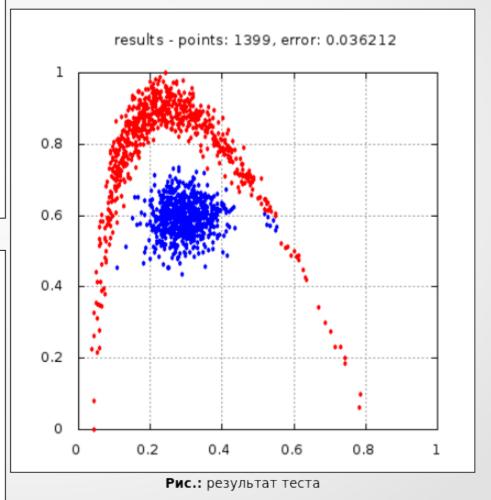


Рис.:история изменения ошибки ч.2

rProp



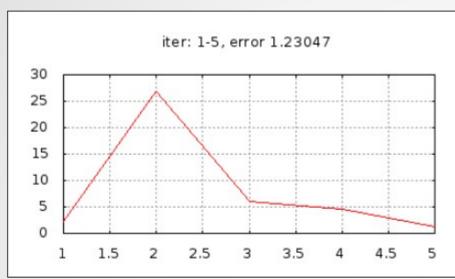


Рис.: история изменения ошибки ч.1

rProp



Рис.:история изменения ошибки ч.2



Рис.: состояния весов первого слоя

модификации градиентного спуска conpяжённые градиенты (conjugate gradient)

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

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

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

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

 $p_0 :=
abla E$. начальное направление

 $p =
abla E + eta \cdot p$ последующие направления измения параметров

вычисление коэффициента сопряжения β два основных способа

формула Флетчера-Ривса

$$eta = rac{g_t^T \cdot g_t}{g_{t-1}^T \cdot g_{t-1}}$$

$$eta = rac{g_t^T \cdot (g_t - g_{t-1})}{g_{t-1}^T \cdot g_{t-1}}.$$

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

сопряжённые градиенты (conjugate gradient)

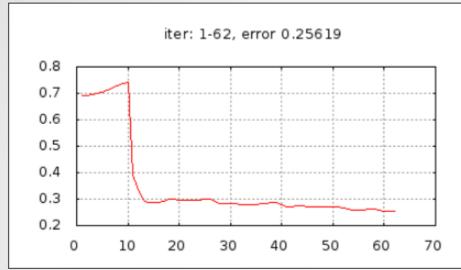


Рис.: история изменения ошибки ч.1

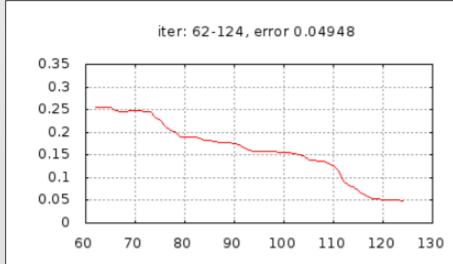
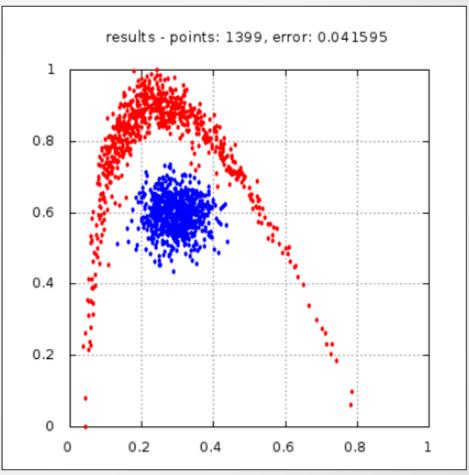


Рис.:история изменения ошибки ч.2



сопряжённые градиенты (conjugate gradient)

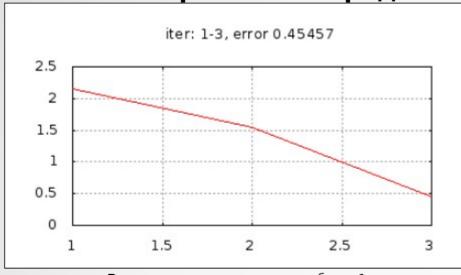




Рис.: история изменения ошибки ч.1

Рис.:история изменения ошибки ч.2



модификации градиентного спуска NAG (Nesterov's Accelerated Gradient)

градиент вычисляется относительно сдвинутых на значение момента весов

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

модификации градиентного спуска AdaGrad (Adaptive Gradient)

учитывает историю значений градиента следующим образом

$$g_t := rac{
abla E_t}{\sqrt{\sum\limits_{i=1}^t
abla E_i^2}} \ \Delta W_t := \eta \cdot (g_t +
ho \cdot W_{t-1}) + \mu \cdot \Delta W_{t-1}$$

модификации градиентного спуска AdaDelta

учитывает историю значений градиента и историю изменения весов следующим образом

$$egin{aligned} S_t := lpha \cdot S_{t-1} + (1-lpha) \cdot
abla E_t^2 \; ; \; S_0 := 0 \ D_t := eta \cdot D_{t-1} + (1-eta) \cdot \Delta W_{t-1}^2 \; ; \; D_0 := 0 \ g_t := rac{\sqrt{D_t}}{\sqrt{S_t}} \cdot
abla E_t \ \Delta W_t := \eta \cdot (g_t +
ho \cdot W_{t-1}) + \mu \cdot \Delta W_{t-1} \end{aligned}$$

градиентные методы оптимизации второго порядка

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

градиентные методы оптимизации второго порядка

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

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

вектор градиента

$$g =
abla E = \left[egin{array}{c} rac{\partial E}{\partial w_1} \ dots \ rac{\partial E}{\partial w_n} \end{array}
ight]$$

Н - гессиан, матрица вторых производных целевой функции Е

$$g =
abla E = egin{bmatrix} rac{\partial E}{\partial w_1} \ dots \ rac{\partial E}{\partial w_n} \end{bmatrix} \hspace{1cm} H = egin{bmatrix} rac{\partial^2 E}{\partial w_1 \partial w_1} & \cdots & rac{\partial^2 E}{\partial w_1 \partial w_n} \ dots & \ddots & dots \ rac{\partial^2 E}{\partial w_n \partial w_1} & \cdots & rac{\partial^2 E}{\partial w_n \partial w_n} \end{bmatrix}$$

градиентные методы оптимизации второго порядка

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

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

вектор градиента

$$g =
abla E = \left[egin{array}{c} rac{\partial E}{\partial w_1} \ dots \ rac{\partial E}{\partial w_n} \end{array}
ight]$$

Н - гессиан, матрица вторых производных целевой функции Е

$$g =
abla E = egin{bmatrix} rac{\partial E}{\partial w_1} \ dots \ rac{\partial E}{\partial w_n} \end{bmatrix} \hspace{1cm} H = egin{bmatrix} rac{\partial^2 E}{\partial w_1 \partial w_1} & \cdots & rac{\partial^2 E}{\partial w_1 \partial w_n} \ dots & \ddots & dots \ rac{\partial^2 E}{\partial w_n \partial w_1} & \cdots & rac{\partial^2 E}{\partial w_n \partial w_n} \end{bmatrix}$$

вычисление гессиана Н это затратная процедура можно обойтись приближением Н

метод BFGS

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

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

для вычисления обратного гессиана H^{-1} использует изменение значений градиента $\nabla \mathsf{E}$ и изменения весов $\Delta \mathsf{W}$.

вектор градиента ∇Е вычисляется с помощью процедуры обратного распространения ошибки

метод BFGS

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

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

для вычисления обратного гессиана H^{-1} использует изменение значений градиента $\nabla \mathsf{E}$ и изменения весов $\Delta \mathsf{W}$.

вектор градиента ∇Е вычисляется с помощью процедуры обратного распространения ошибки

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

значения V вычисляются на каждом шаге алгоритма следующим образом.

$$V_0:=1$$

$$V_{k+1}:=V_k-rac{V_k\cdot s\cdot s^T\cdot V_k}{s^T\cdot V_k\cdot s}+rac{r\cdot r^T}{s^T\cdot s}$$
 $r=
abla E(t)$ - $abla E(t)$

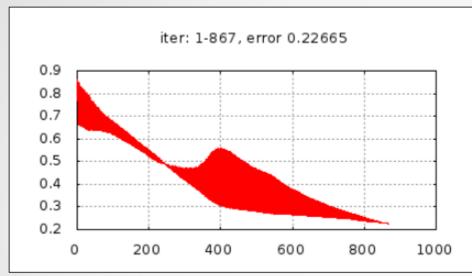


Рис.: история изменения ошибки ч.1

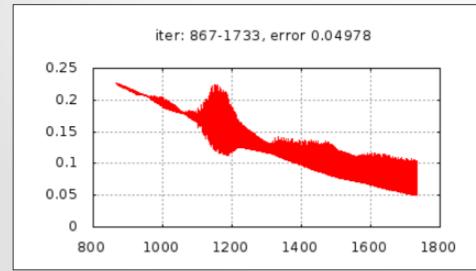
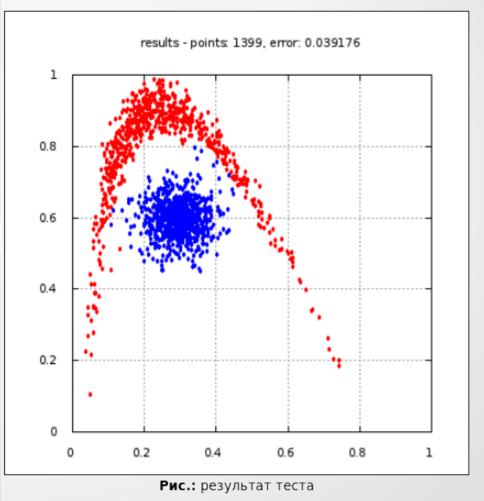


Рис.:история изменения ошибки ч.2

метод BFGS



метод Левенберга-Марквардта (LMA)

вычисляем приближение гессиана Н через якобиан J - матрицу первых производных, е - ошибки сети на всей учебной выборке, М - количество выходов, Р - количество примеров.

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

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

метод Левенберга-Марквардта (LMA)

вычисляем приближение гессиана Н через якобиан | - матрицу первых производных, е - ошибки сети на всей учебной выборке, М - количество выходов, Р - количество примеров.

$$e$$
 - ошибки сети на всей учебной выборке, М - количество выходов, Р - количес $E = d - o = egin{bmatrix} e_{11} \ dots \ e_{M1} \ e_{12} \ dots \ e_{MP} \end{bmatrix}$ $I = I$ $I =$

$$Hpprox J^T\cdot J + \mu\cdot I$$

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

Вектор градиента вычисляется следующим образом.

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

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

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

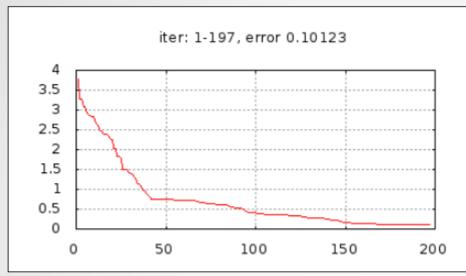


Рис.: история изменения ошибки ч.1

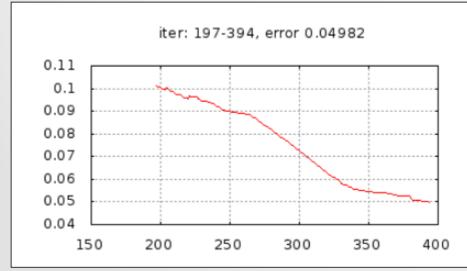


Рис.:история изменения ошибки ч.2

метод LMA

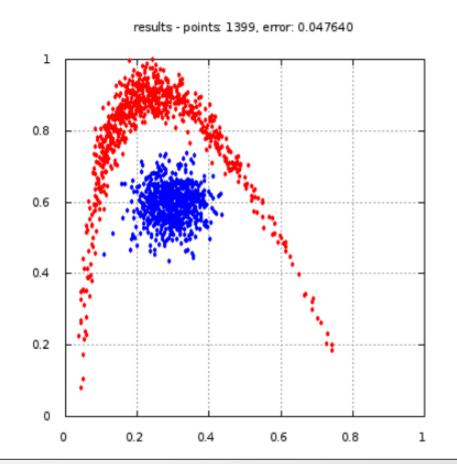


Рис.: результат теста

Ещё раз про количество слоёв

Если три обрабатывающих слоя строят поверхность любой формы

То зачем строить нейросети с количеством слоёв больше трёх?

Ещё раз про количество слоёв

Если три обрабатывающих слоя строят поверхность любой формы

То зачем строить нейросети с количеством слоёв больше трёх?

о концепции Deep Learning

искусственные нейронные сети с большим количеством слоёв

- много данных
- через большое количество слоёв
- с большим количеством нейронов

о концепции Deep Learning

многоуровневые модели интеллектуальных систем

Representation learning

функция слоёв - автоматическое извлеченеи признаков, свести к линейно разделимой задаче последний слой — линейный классификатор

слой 0	вход	данные
слой 1	переобразование данных	
	переобразование данных	извлечение признаков
слой N	переобразование данных	
слой N+1	выход	классификатор

Transfer learning — перенос частей обученных ИНС в другие модели

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.su/neural-net-backprop.html



Вопросы?

Нейросети: практика





sklearn.datasets UCI Repository kaggle



задание

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