### Лекция 14: искусственные нейронные сети

Евгений Борисов

### нейронные сети

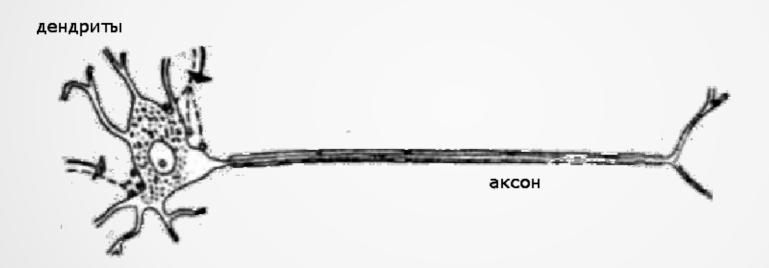
• вычислительная нейробиология

цель: моделировать процессы в живых организмах

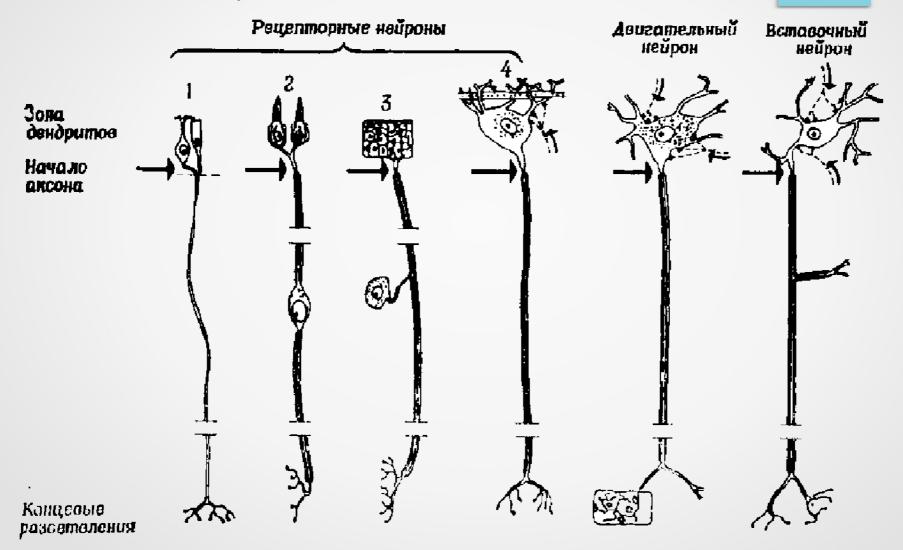
• теория искусственных нейронных сетей

цель: построить искусственную интеллектуальную систему

#### нервная клетка



различные типы нервных клеток

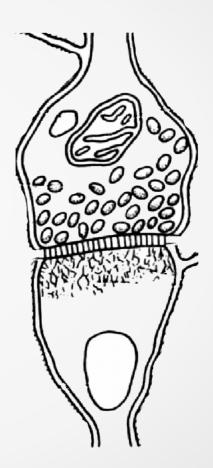


синапс - межнейронные соединения

ширина зазора ~50нм

однонаправленная передача сигнала

вещество-нейромедиатор передаёт сигнал химическим способом



нервный импульс - электрохимическая реакция

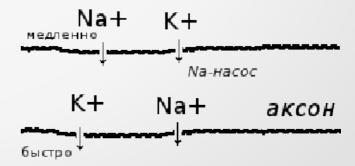
мембранная теория

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

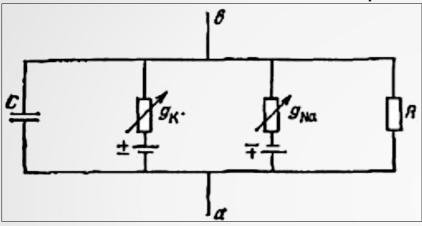


### модель Ходжкина-Хаксли

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



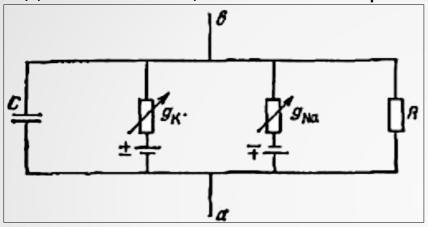
эквивалентная схема мембраны аксона кальмара

- 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

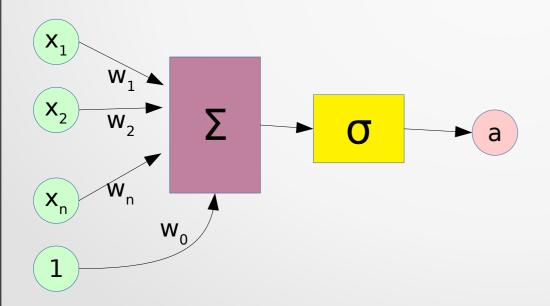


#### модель МакКаллока-Питтса (1943)

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

 $\mathbf{X_i}$  - вход

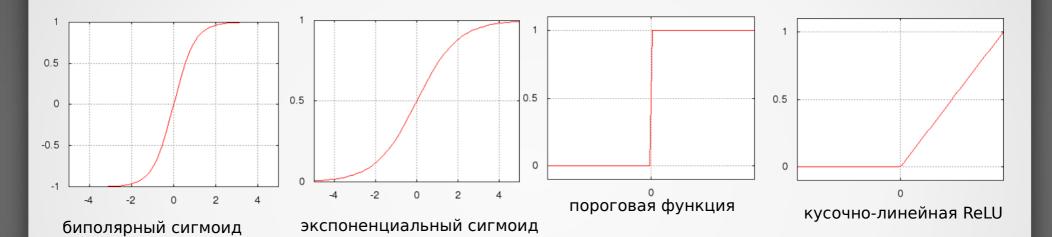
σ - функция активации



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

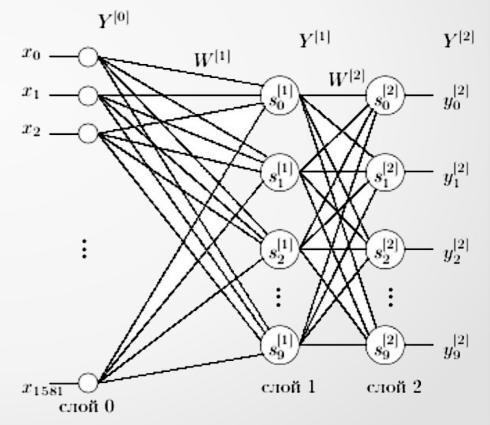
$$p = \frac{1}{1 + \exp(-s)}$$

#### коннекционизм -

модель ИИ из связанных между собой простых элементов

#### многослойная сеть прямого распространения

нейроны объединены в слои сигнал распространяется послойно



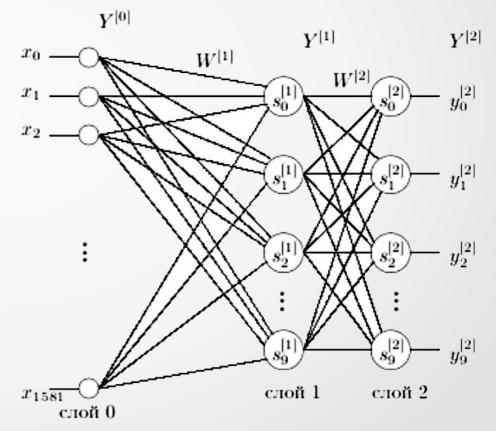
#### коннекционизм -

модель ИИ из связанных между собой простых элементов

#### многослойная сеть прямого распространения

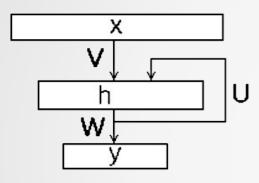
нейроны объединены в слои сигнал распространяется послойно

входной рапределительный слой обрабатывающие скрытые слои обрабатывающий выходной слой



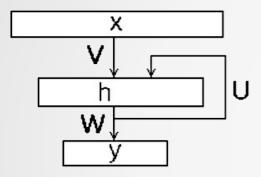
#### другие типы моделей нейросетей

рекуррентные - Элман, LSTM

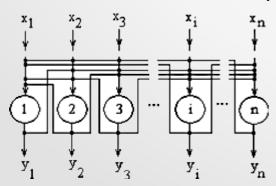


#### другие типы моделей нейросетей

рекуррентные - Элман, LSTM

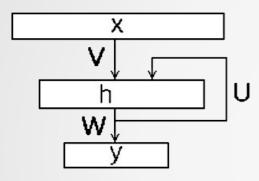


релаксационные - Хопфилд

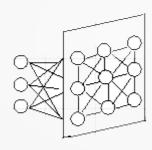


#### другие типы моделей нейросетей

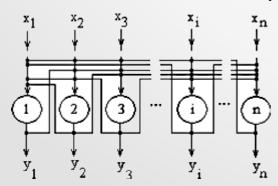
рекуррентные - Элман, LSTM



соревновательные - Кохонен

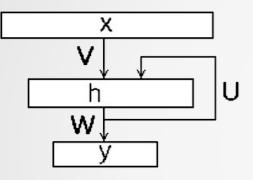


релаксационные - Хопфилд

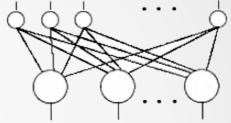


#### другие типы моделей нейросетей

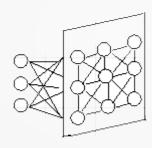
рекуррентные - Элман, LSTM



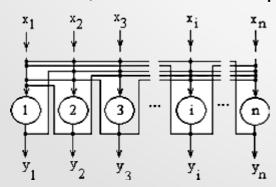
двунаправленные - Коско



соревновательные - Кохонен

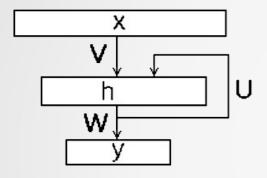


релаксационные - Хопфилд

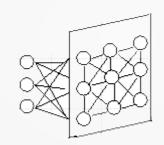


#### другие типы моделей нейросетей

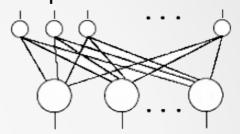
рекуррентные - Элман, LSTM



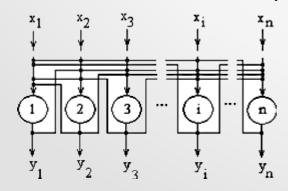
соревновательные - Кохонен



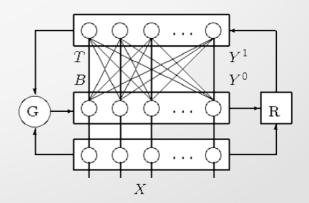
двунаправленные - Коско



релаксационные - Хопфилд



адаптивный резонанс - Гроссберг



#### 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.

#### о количестве слоёв

один обрабатывающий слой - гиперплоскость (линейный классификатор)
два обрабатывающих слоя - выпуклая разделяющая поверхность
три обрабатывающих слоя - поверхность любой формы

#### 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

#### 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

TO

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

#### 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

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

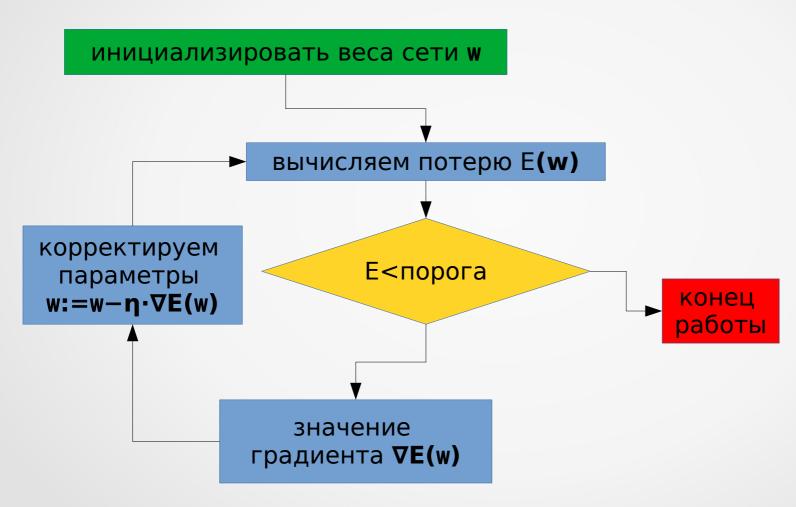
#### примеры функций потери

MSQE среднеквадратичное отклонение

Кросс-энтропия

Расстояние Кульбака-Лейблера

### градиентный спуск (GD)



метод обратного распространения ошибки

#### вычисление градиента функции потери для многослойной нейросети

$$abla E(W) = \left[ rac{\partial E}{\partial w_1} \dots, rac{\partial E}{\partial w_k} 
ight]$$

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

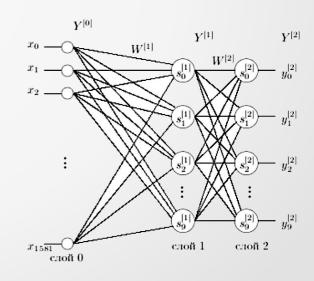
$$\frac{\partial s_j}{\partial w_{ii}}$$
 выход і-того нейрона предыдущего слоя (определен явно)

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

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

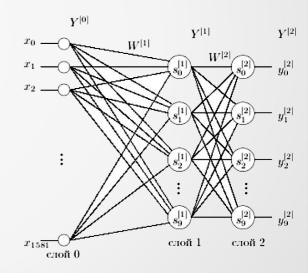
$$\delta_i := rac{\partial E}{\partial y_i}$$
 ошибка нейрона номер ј для выходного слоя

$$\delta_i := rac{\partial y_i}{\partial s_i} \cdot \sum_j \delta_j w_{ij}$$
 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  $\nabla E = \partial E / \partial w = y \cdot \delta^{T}$



#### 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

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

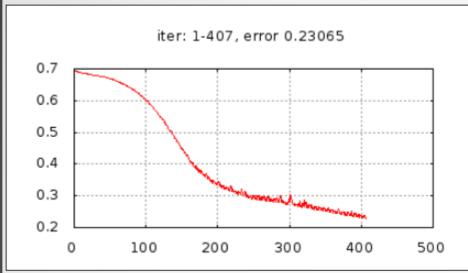
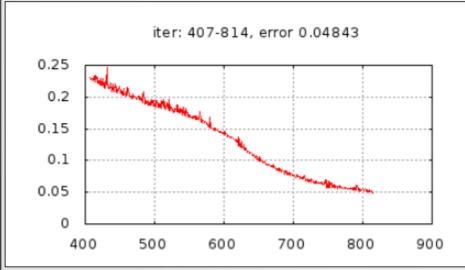


Рис.: история изменения ошибки ч.1



#### Рис.:история изменения ошибки ч.2

#### простой градиентный спуск

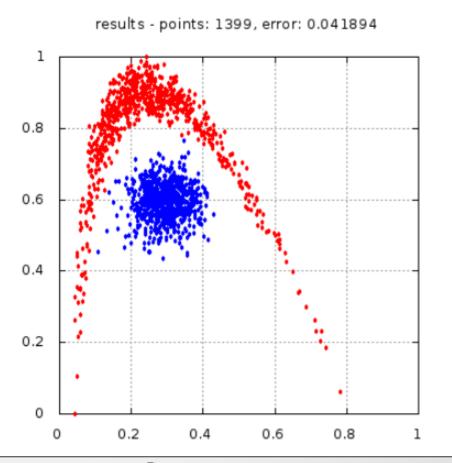
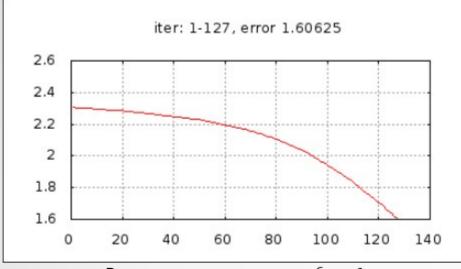


Рис.: результат теста

#### простой градиентный спуск



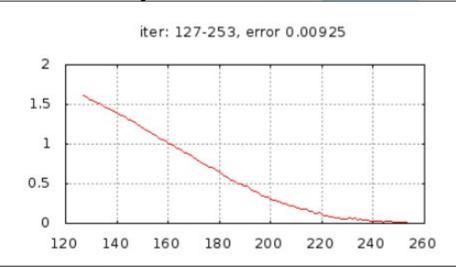


Рис.: история изменения ошибки ч.1

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.

$$\mu = \left\{ egin{array}{ll} \mu_{max} & : & (eta > \mu_{max}) ee (\gamma < 0) \ eta & : & - \end{array} 
ight.$$

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

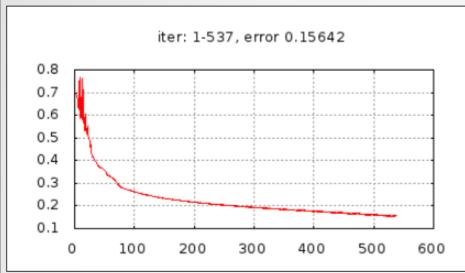


Рис.: история изменения ошибки ч.1

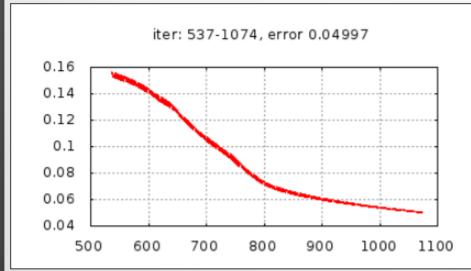
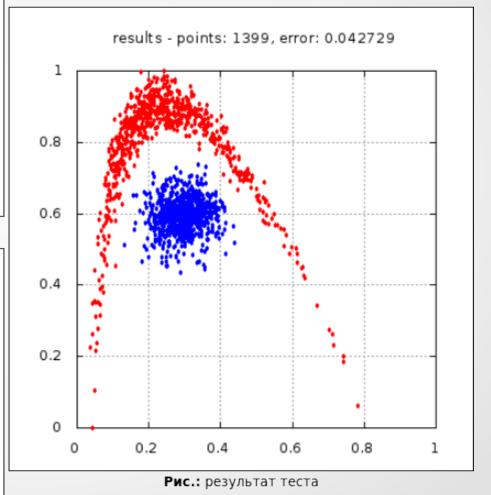


Рис.:история изменения ошибки ч.2

#### quickProp





quickProp

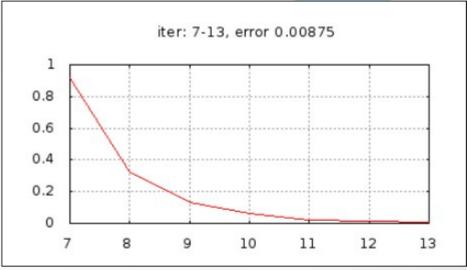


Рис.: история изменения ошибки ч.1

Рис.:история изменения ошибки ч.2

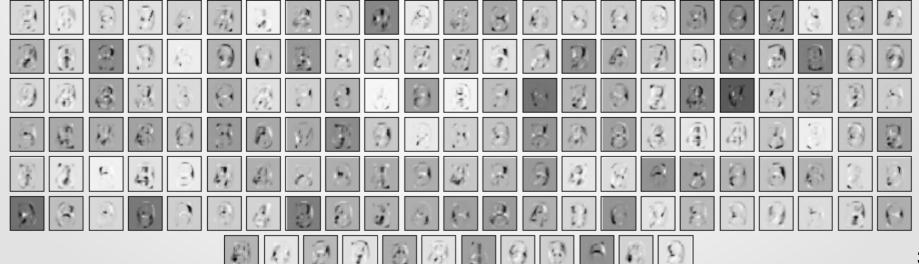


Рис.: состояния весов первого слоя

#### 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.

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

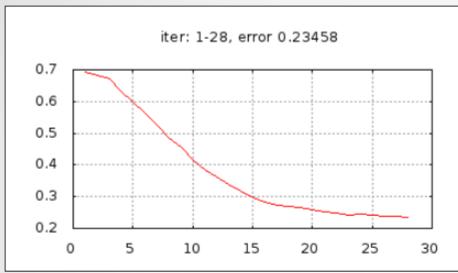
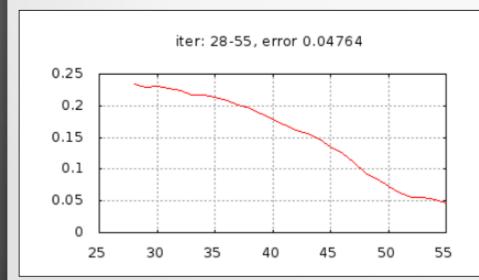
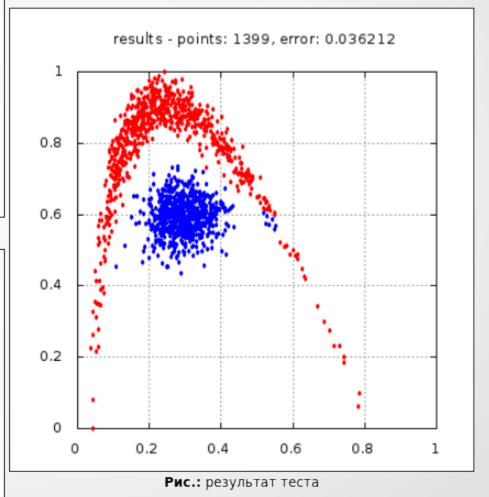


Рис.: история изменения ошибки ч.1



#### Рис.:история изменения ошибки ч.2

#### rProp



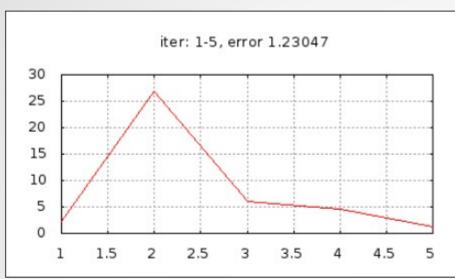


Рис.: история изменения ошибки ч.1

#### rProp

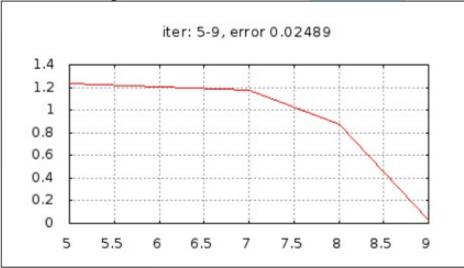


Рис.:история изменения ошибки ч.2



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

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

 $p_0 := \nabla E$ . 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  $(\beta:=0, p:=\nabla E)$ 

#### сопряжённые градиенты (conjugate gradient)

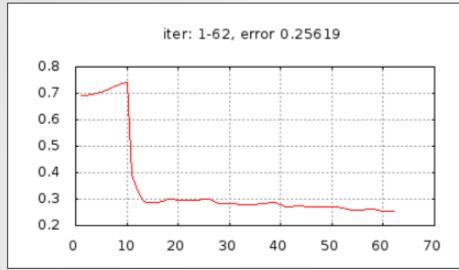


Рис.: история изменения ошибки ч.1

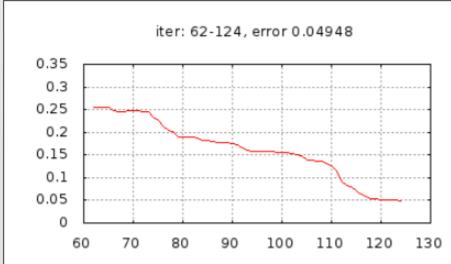


Рис.:история изменения ошибки ч.2

0 90 100 110 120 130

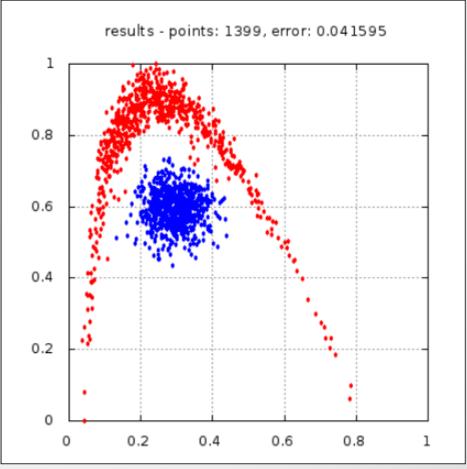


Рис.: результат теста

#### сопряжённые градиенты (conjugate gradient)

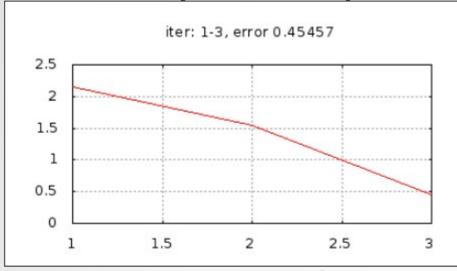




Рис.: история изменения ошибки ч.1

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

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

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  $\mathsf{H}^{-1}$  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<sup>-1</sup> использует изменение значений градиента ∇E и изменения весов ΔW.

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.

$$V_0:=1$$
 
$$V_{k+1}:=V_k-rac{V_k\cdot s\cdot s^T\cdot V_k}{s^T\cdot V_k\cdot s}+rac{r\cdot r^T}{s^T\cdot s}$$
  $r=
abla E(t)$  -  $abla E(t)$ 

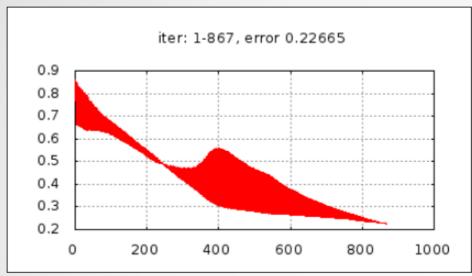


Рис.: история изменения ошибки ч.1

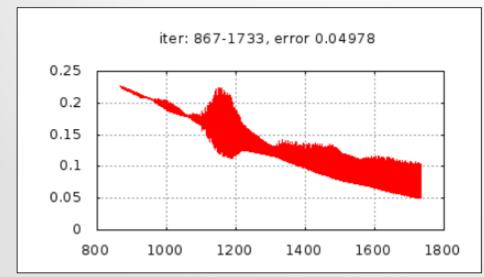
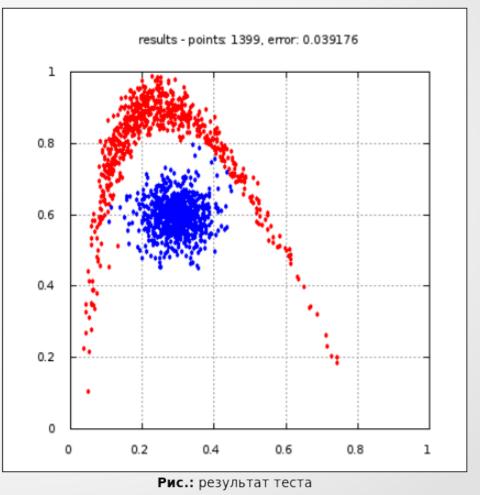


Рис.:история изменения ошибки ч.2

#### 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  $E = e_{11}$   $E = e_{M1}$   $E = e_{M1}$   $E = e_{M2}$   $E$ 

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

 $I = (J^T \cdot J) \circ E$  - 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.

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

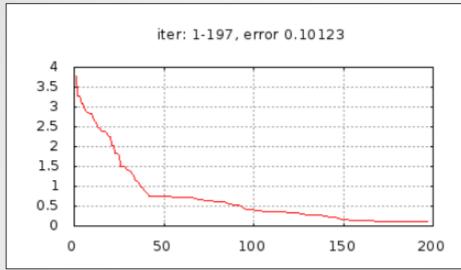


Рис.: история изменения ошибки ч.1

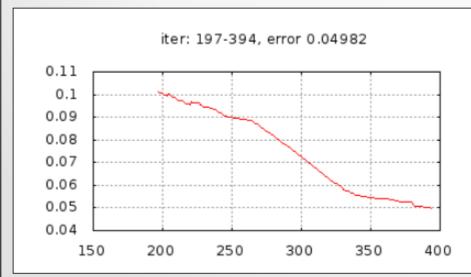


Рис.:история изменения ошибки ч.2

#### метод LMA

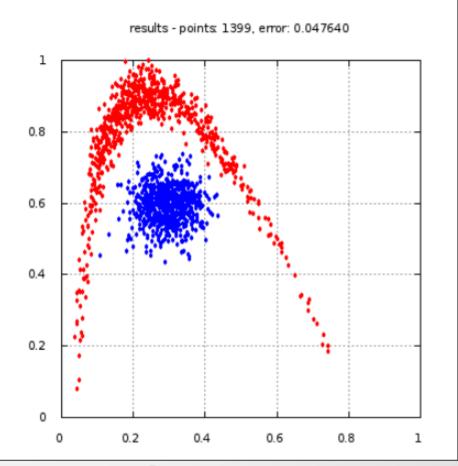


Рис.: результат теста

### Нейросети: литература

git clone <a href="https://github.com/mechanoid5/ml\_lectorium.git">https://github.com/mechanoid5/ml\_lectorium.git</a>

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



Вопросы?

### Нейросети: практика





sklearn.datasets UCI Repository kaggle



#### задание

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