Введение в глубокое обучение

План лекции

- Ограничения линейных моделей
- Модель глубокого обучения
- Вычислительные возможности нейросетей
- Слои моделей
- Функция активации
- Обратное распространение ошибки
- Реализации функции активации
- Эвристики стохастического градиентного спуска
- Нормировка признаков
- Регуляризация (прореживание)

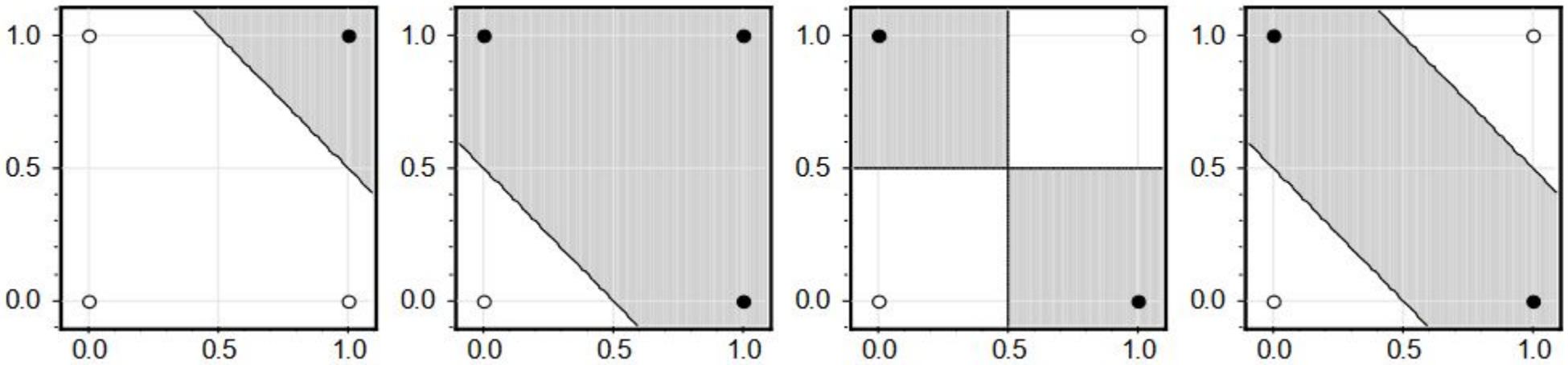
Ограничения линейных моделей

- Работают только с линейными зависимостями
- Сами не конструируют высокоабстрактные признаки
  - текстовые данные
  - графические данные

Задача «исключающего ИЛИ»

$$x^1 \vee x^2 = \left[x^1 + x^2 - \tfrac{1}{2} > 0\right]$$

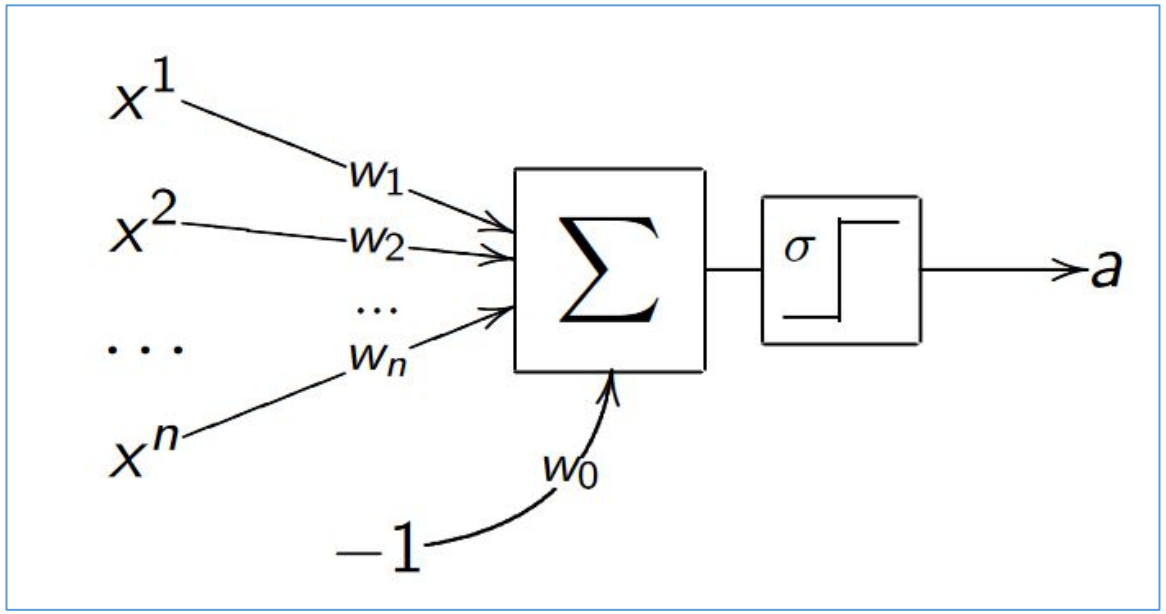
$$x^1 \oplus x^2 = \left[x^1 + x^2 - 2x^1x^2 - \tfrac{1}{2} > 0\right]$$



$$x^1 \wedge x^2 = \left[x^1 + x^2 - \tfrac{3}{2} > 0\right]$$

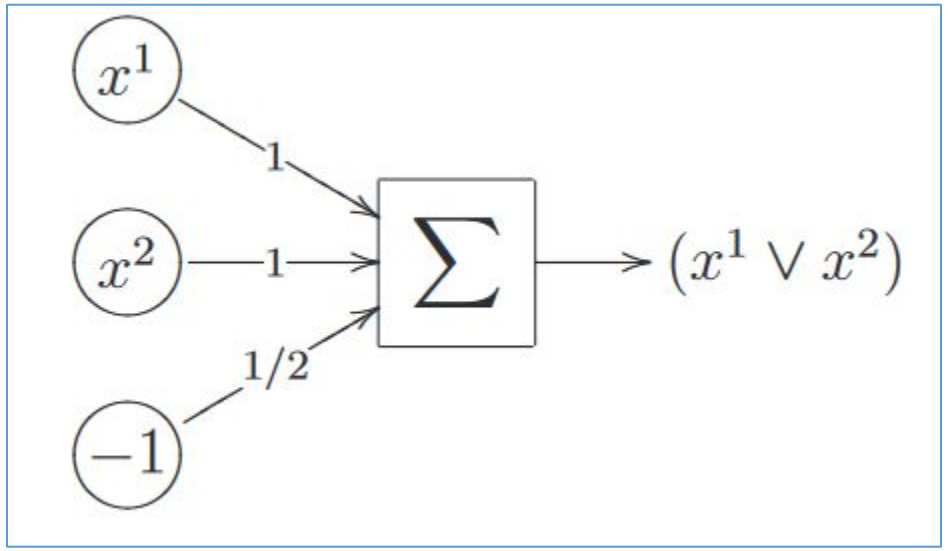
Задача «исключающего ИЛИ»

$$a(x,w) = \sigma\big(\langle w,x\rangle\big) = \sigma\left(\sum_{j=1}^{n} w_j f_j(x) - w_0\right)$$

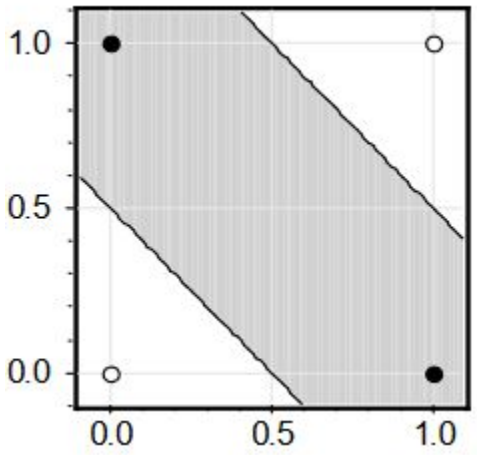


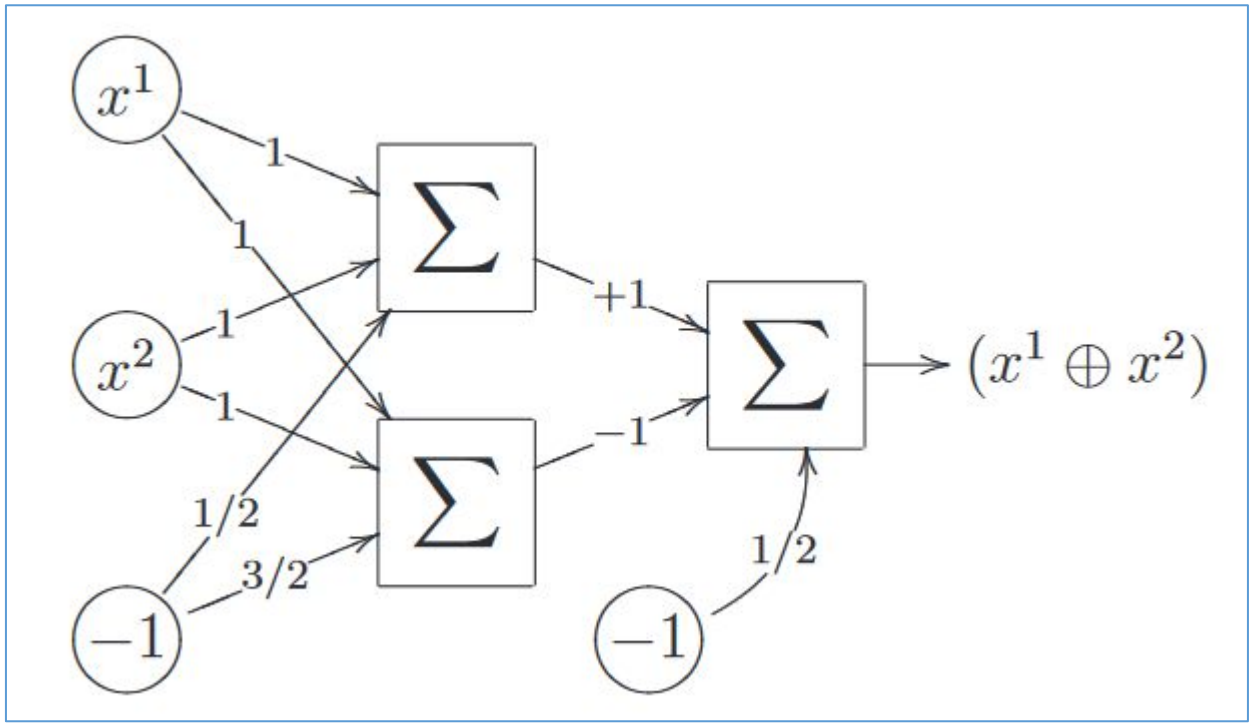
Задача «исключающего ИЛИ»

$$x^1 \vee x^2 = \left[x^1 + x^2 - \tfrac{1}{2} > 0\right]$$



Задача «исключающего ИЛИ»





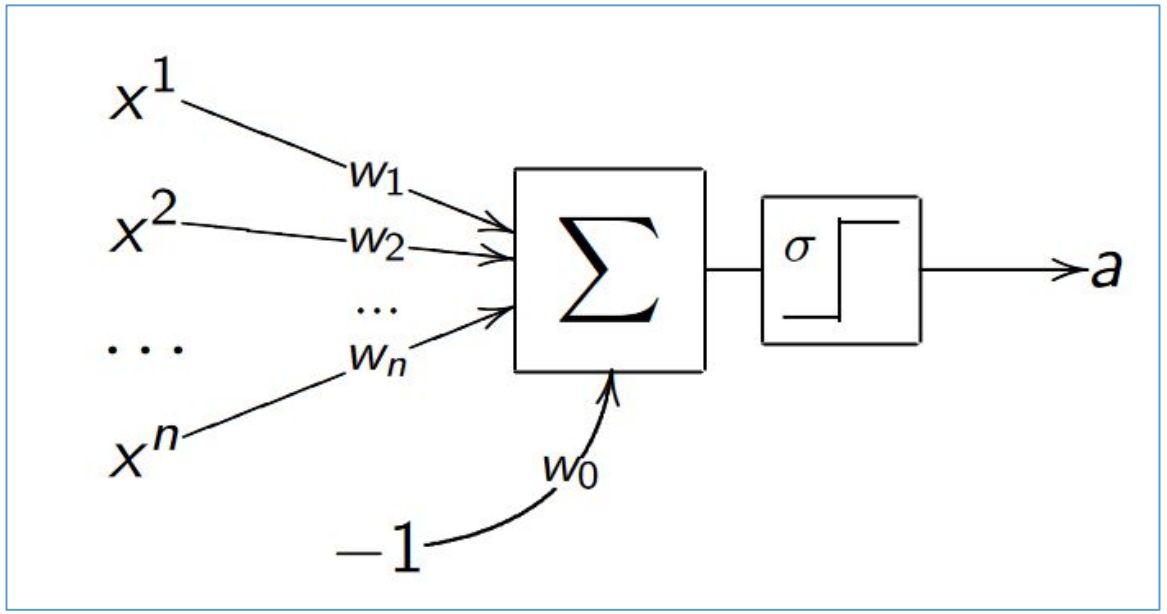
Задача «исключающего ИЛИ»

Таким образом два решения:

- конструирование нового признака на основе исходных (*сложно*)
- построение композиции моделей

Новый подход

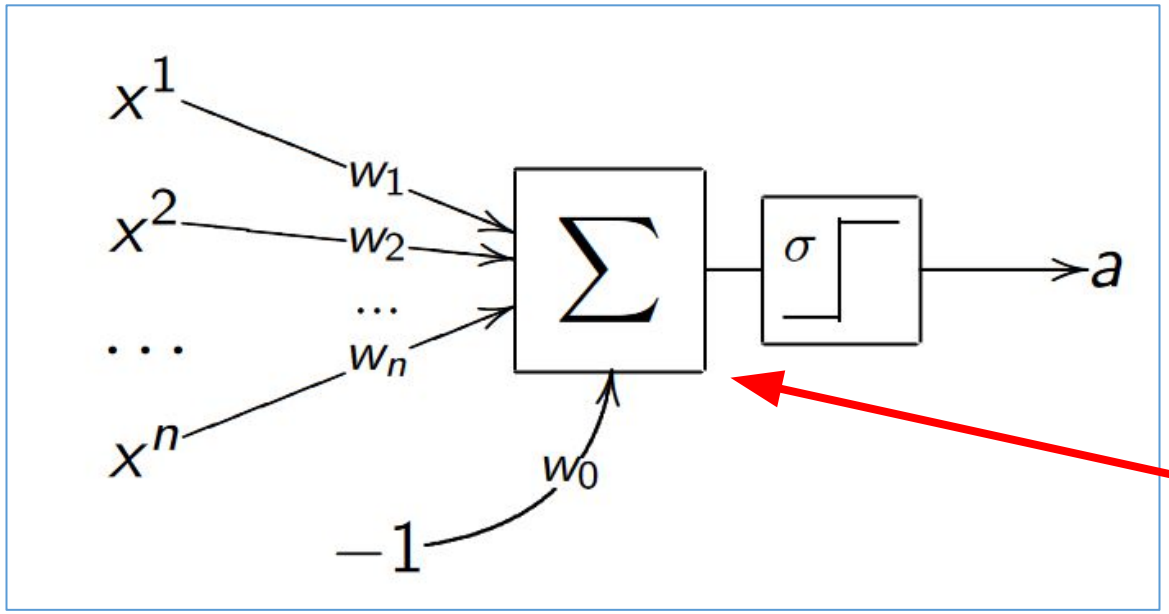
$$a(x,w) = \sigma\big(\langle w,x\rangle\big) = \sigma\left(\sum_{j=1}^{n} w_j f_j(x) - w_0\right)$$



Новый подход

$$a(x,w) = \sigma(\langle w,x\rangle) = \sigma\left(\sum_{j=1}^{n} w_j f_j(x) - w_0\right)$$

перцептрон
(МакКаллок и Питтс, 1943 год)



искусственный нейрон

Модель глубокого обучения (нейросеть)

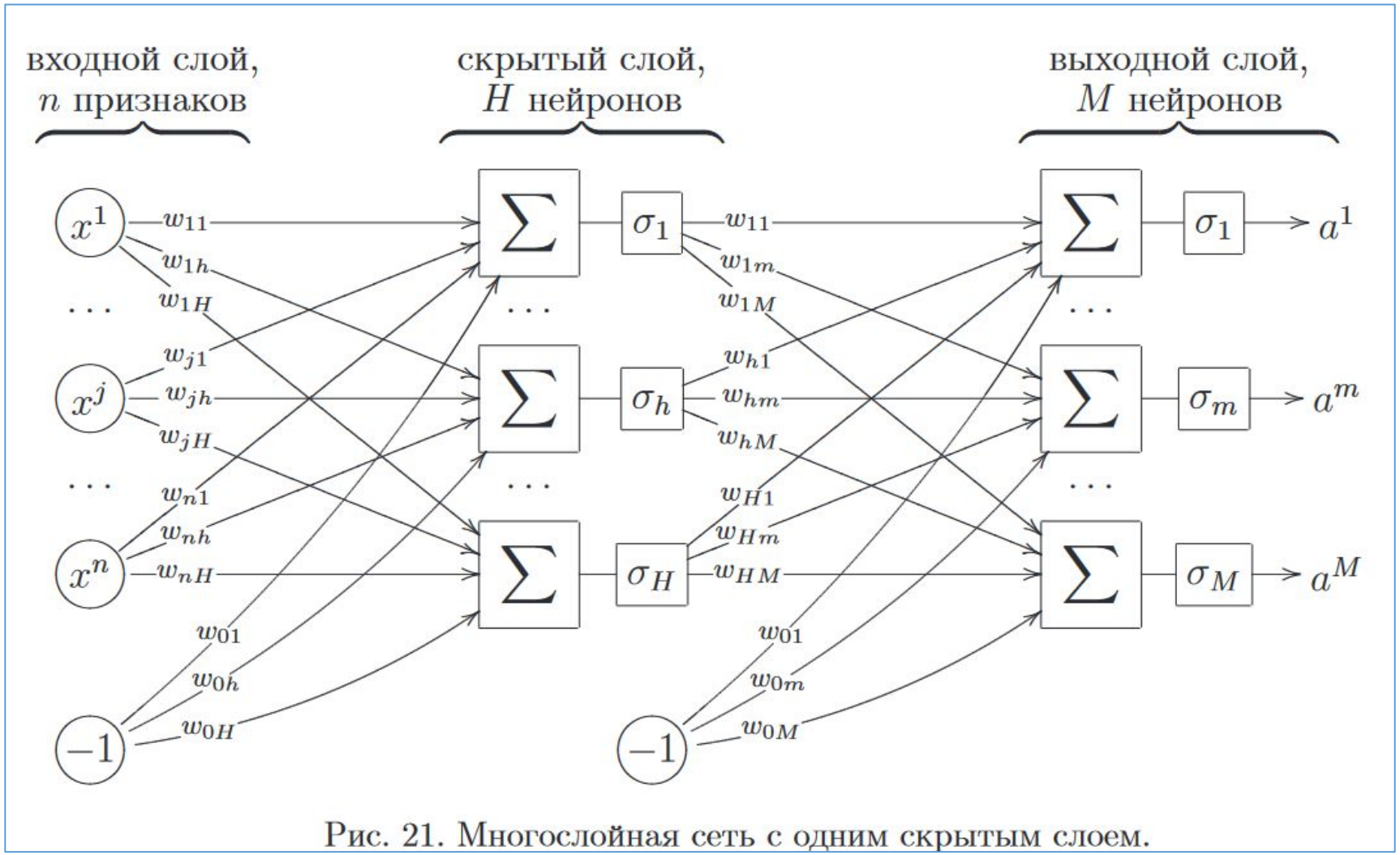
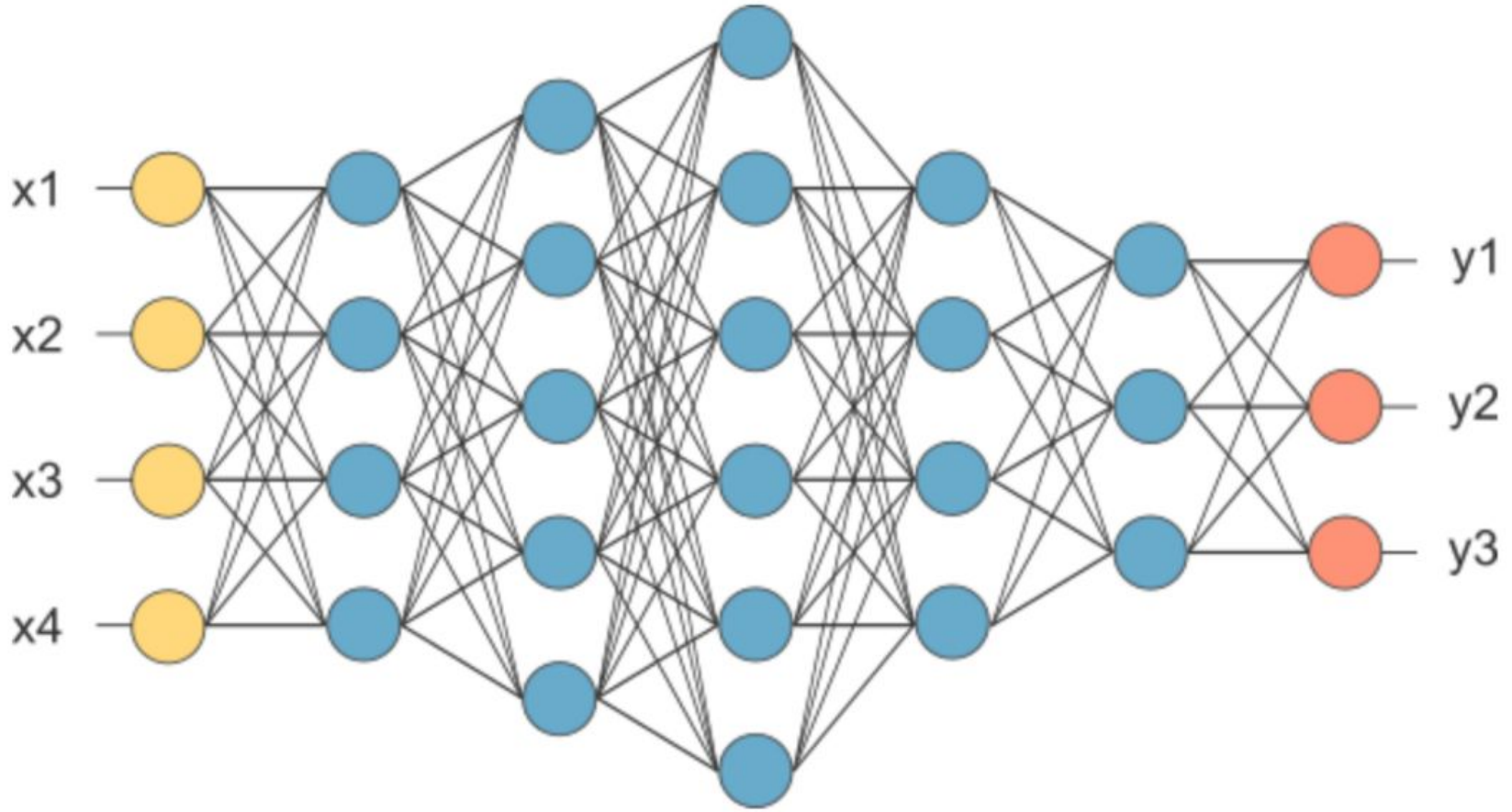
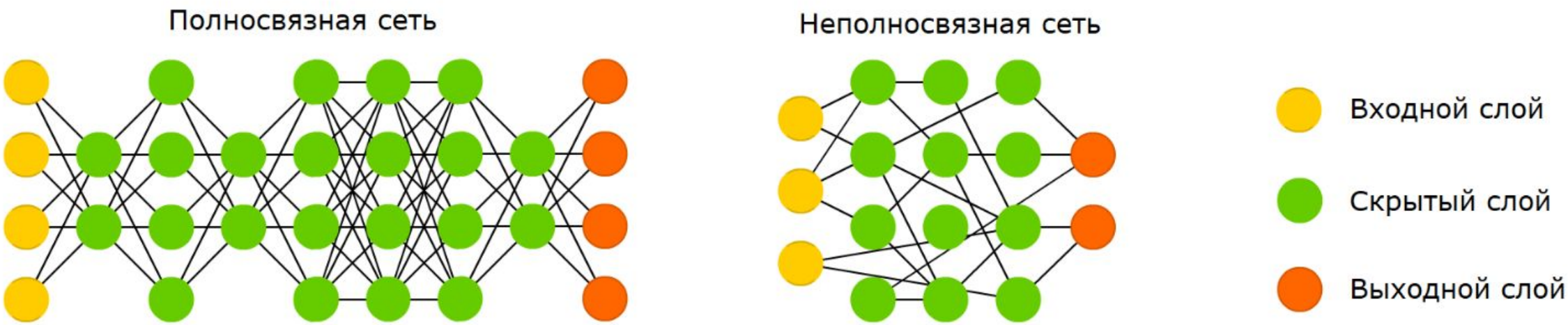


Рис. 21. Многослойная сеть с одним скрытым слоем.

Модель глубокого обучения (нейросеть)



Модель глубокого обучения (нейросеть)



Вычислительные возможности нейросетей

1. Теорема Вейерштрасса – Стоуна
2. Теорема Колмогорова – Арнольда (13 проблема Гильберта)
3. Универсальная теорема аппроксимации (теорема Цыбенко)
   Двухслойная сеть может аппроксимировать любую непрерывную функцию многих переменных с любой точностью при достаточном количестве скрытых нейронов
4. Обобщенная аппроксимационная теорема (теорема Горбаня)
   С помощью линейных операций и одной нелинейной функции активации можно приблизить любую непрерывную функцию с любой желаемой точностью

Вычислительные возможности нейросетей

Несколько замечаний:

- двух слоёв достаточно для аппроксимации практически всех «математических» функций
- нейросети обучаются преобразованию признаков
- глубина сети позволяет распознавать и конструировать высокоабстрактные признаки

Слои модели

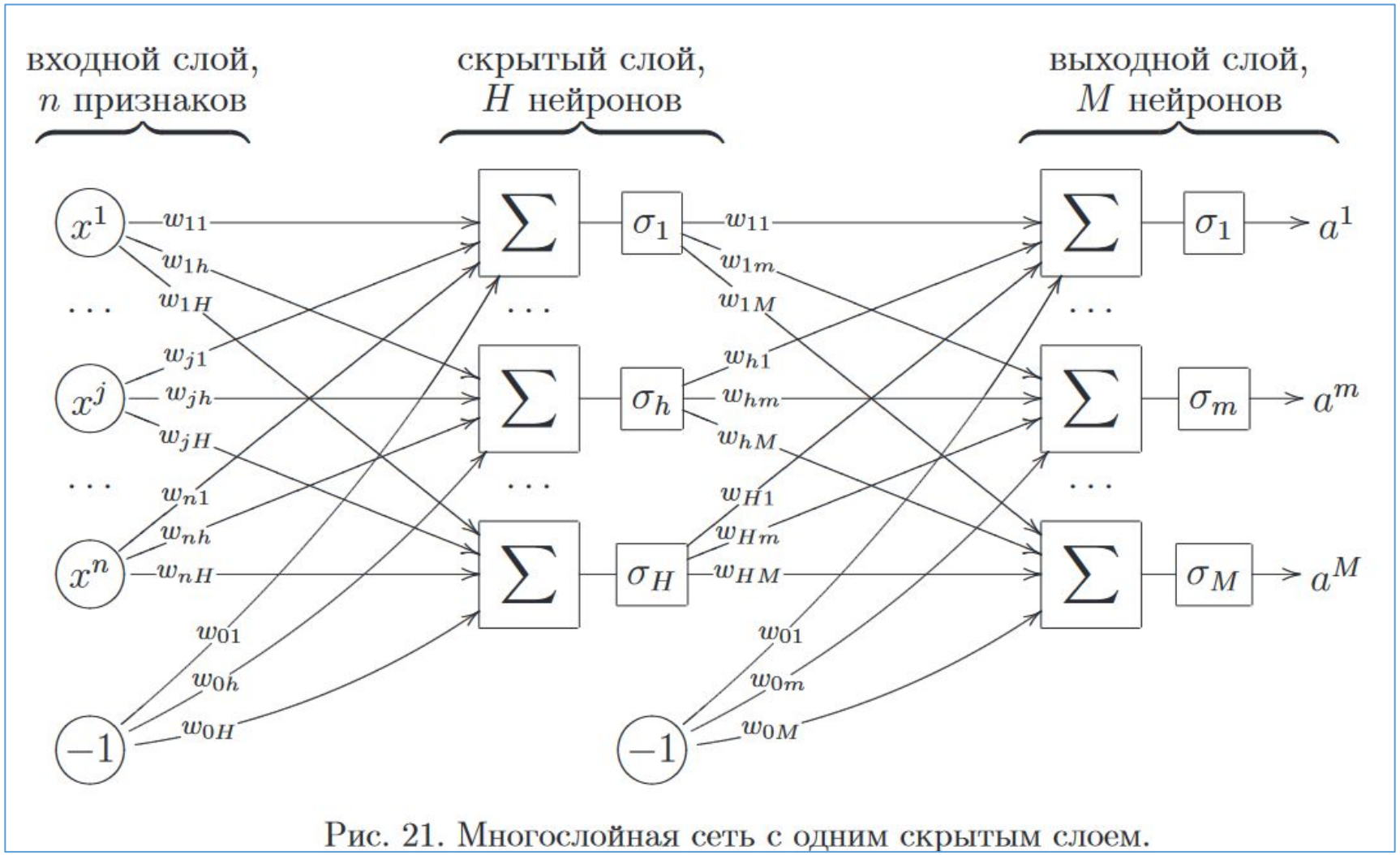
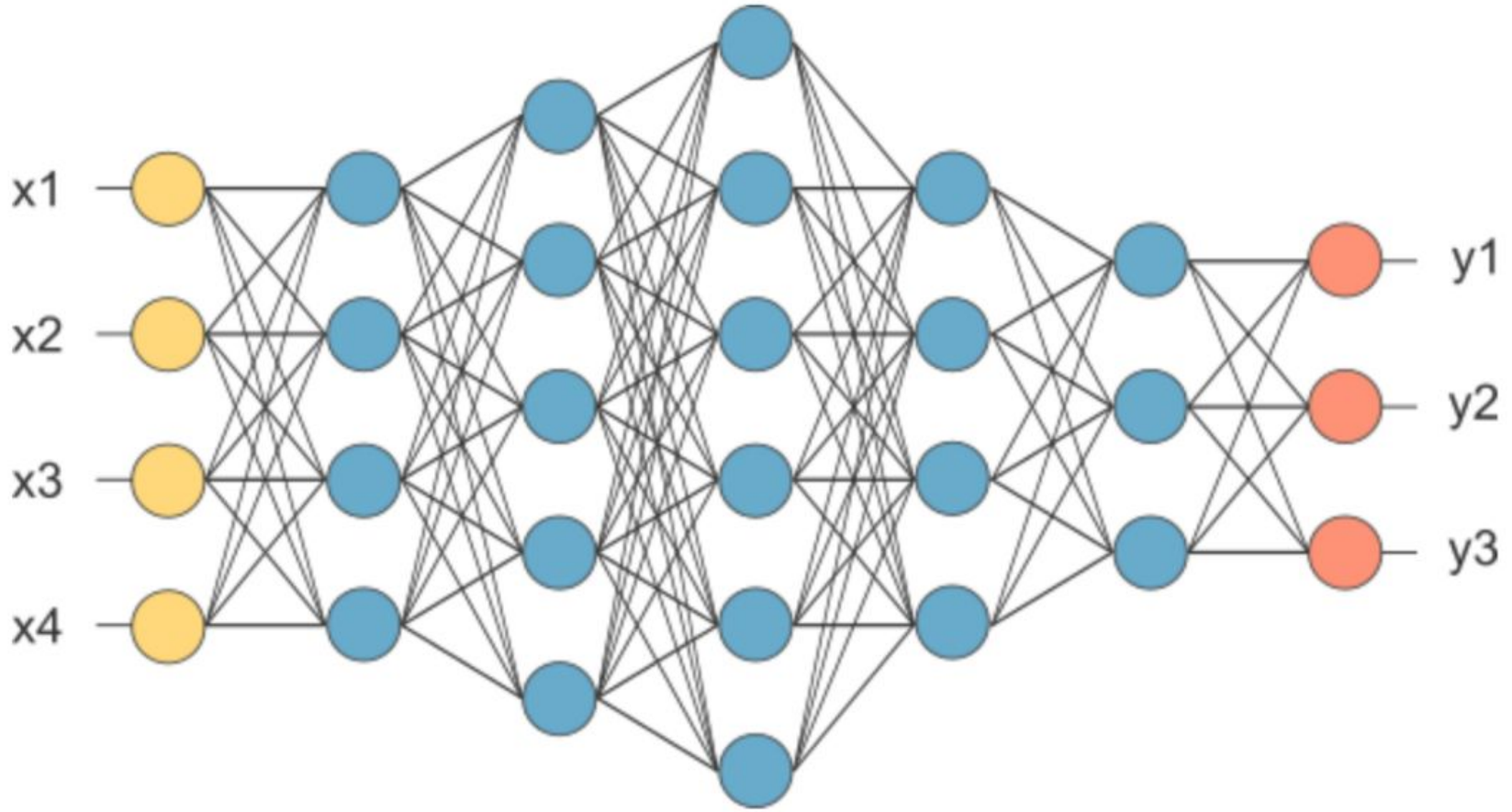


Рис. 21. Многослойная сеть с одним скрытым слоем.

Слои модели



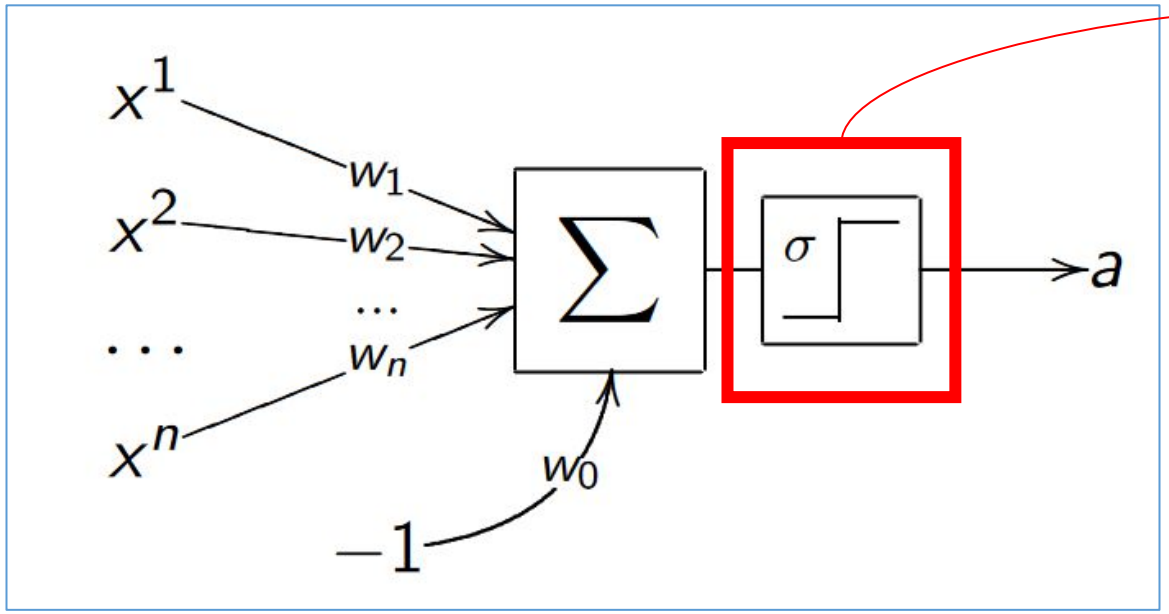
Слои модели

- модель состоит из взаимосвязанных слоёв (*Layers*)
- самый простой и распространённый слой – плотный (*Dense*), но есть и другие ...
- первый слой – *входной*, последний – *выходной*
- выходной слой, по сути, это линейная модель
- *скрытые слои* – все слои кроме последнего
- слои хранят параметры (веса) модели

Функция активации

$$a(x,w) = \sigma\big(\langle w,x\rangle\big) = \sigma\left(\sum_{j=1}^{n} w_j f_j(x) - w_0\right)$$

функция активации

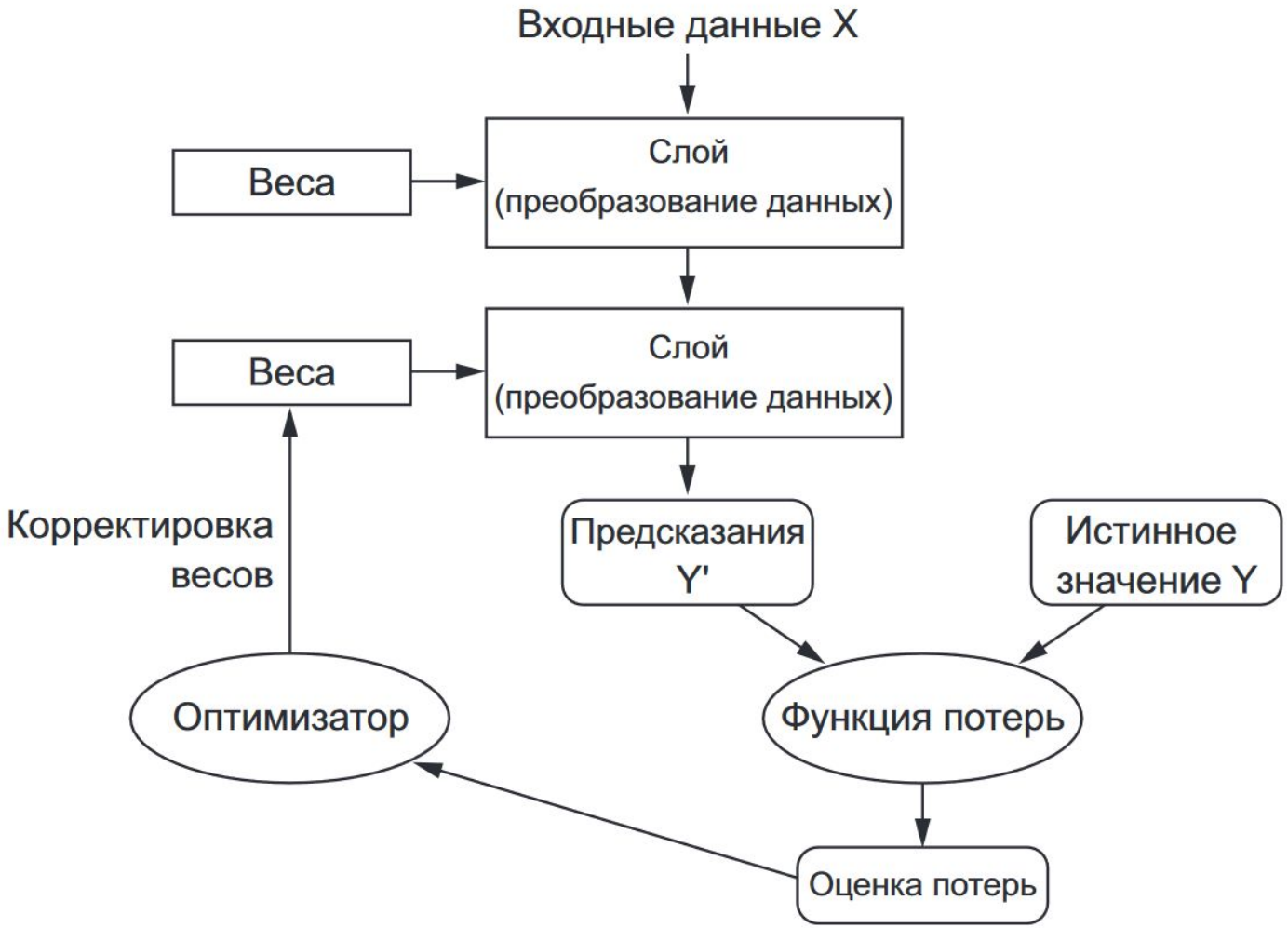


Функция активации

Несколько замечаний:

- применяется после линейного преобразования признаков
- *отвечает* за нелинейность
- главное требование – дифференцируемость
- может быть реализована различными функциями

Обучение модели



Обучение модели

Напоминание:

- функция потерь численно определяет, на сколько решена задача
- оптимизатор корректирует параметры модели в сторону оптимальных
  - у линейных моделей оптимизатор использовал метод SGD

Обучение модели

Каким методом будем обучать нейросеть?

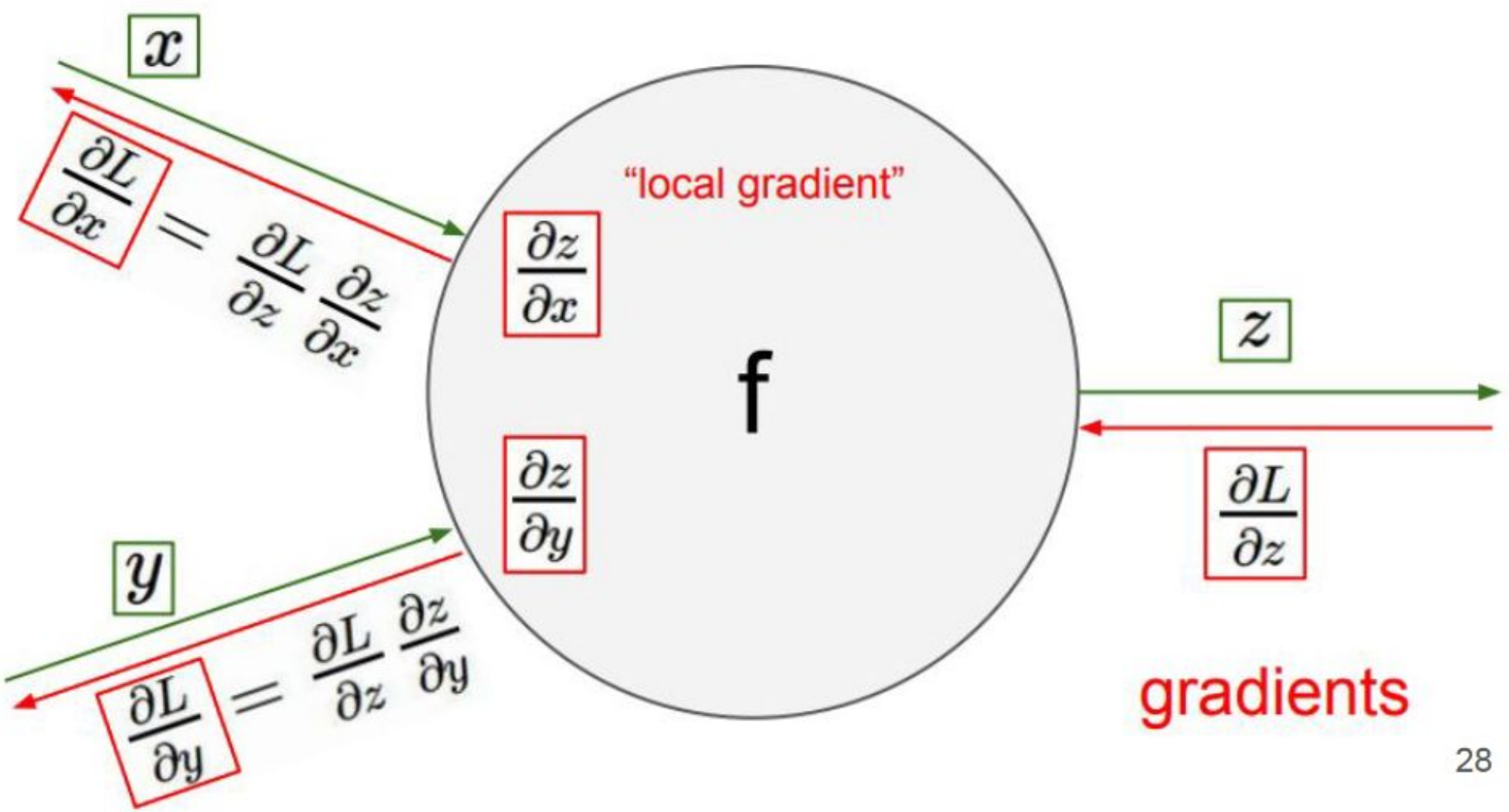
Стохастическим градиентным спуском

Обратное распространение ошибки

Он же:

- backpropagation
- цепное правило
- производная сложной функции

Обратное распространение ошибки



Обратное распространение ошибки

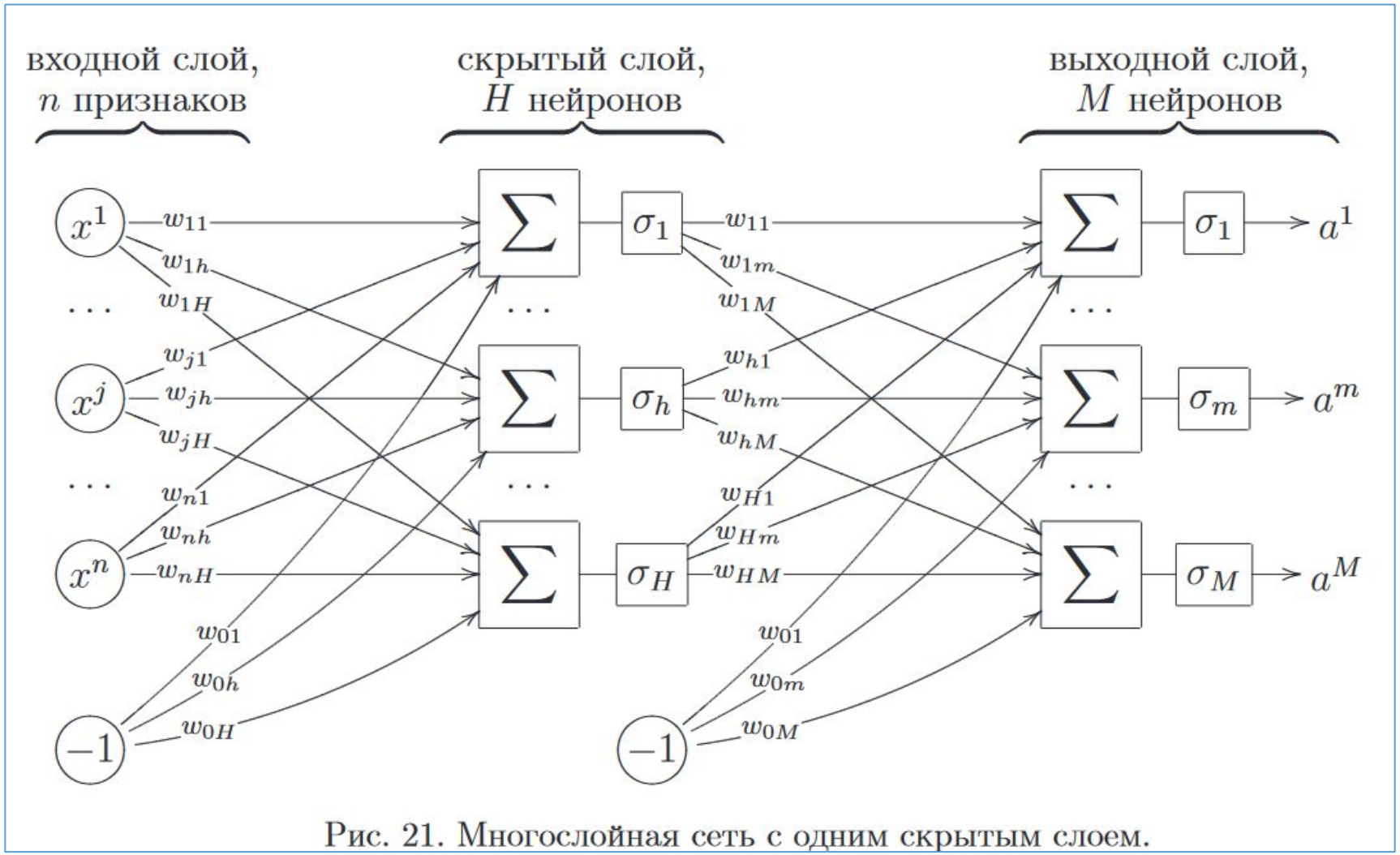


Рис. 21. Многослойная сеть с одним скрытым слоем.

Алгоритм обратного распространения ошибки

Вход: выборка $(x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$, архитектура $(H_l)_{l=1}^{L}$, параметры η, λ;
Выход: вектор весов всех слоёв $w = (W^1, \ldots, W^L)$;
инициализировать веса w;
повторять
  выбрать объект x_i из X^ℓ (например, случайно);
  прямой ход: для всех $l = 1..L$, $h = 1..H_l$
    $\Sigma_{ih}^l := \sum_{k=0}^{H_{l-1}} w_{kh}^l x_{ik}^{l-1}$; $x_{ih}^l := \sigma_h^l(\Sigma_{ih}^l)$; $z_{ih}^l := (\sigma_h^l)'(\Sigma_{ih}^l)$;
  $\varepsilon_{hi}^L := \frac{\partial \mathscr{L}_i(w)}{\partial x_h^L}$, $h = 1..H_L$;
  обратный ход: для всех $l = L..2$, $k = 0..H_{l-1}$
    $\varepsilon_{ik}^{l-1} = \sum_{h=0}^{H_l} \varepsilon_{ih}^l z_{ih}^l w_{kh}^l$;
  градиентный шаг: для всех $l = 1..L$, $k = 0..H_{l-1}$, $h = 1..H_l$
    $w_{kh} := w_{kh} - \eta\, \varepsilon_{ih}^l z_{ih}^l x_{ik}^{l-1}$;
пока значения Q и/или веса w не стабилизируются;

Обратное распространение ошибки

Плюсы метода:

+ вычисляется, практически рекурсивно, что даёт скорость
+ работает с любой шириной, глубиной сети и функциями активации
+ возможность распараллелить

Минусы:

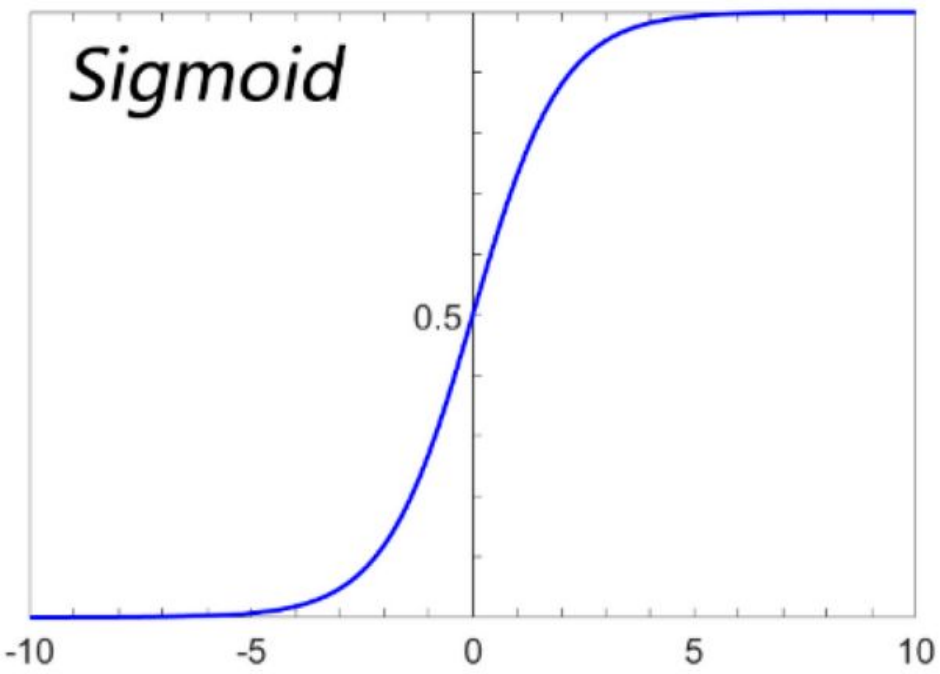
- медленная сходимость
- застревание в локальных экстремумах
- «паралич» сети из-за горизонтальных асимптот сигмоиды
- проблема переобучения
- подбор – искусство

Модель глубокого обучения

Предварительные выводы:

- модели глубокого обучения состоят из взаимосвязанных слоёв
- слои хранят параметры модели
- слои состоят из нейронов (иногда называют *ядра*)
- выходное значение нейрона подаётся на функцию активации
- обучаются модели с помощью метода обратного распространения ошибки, который использует две идеи:
  - метод случайного градиентного спуска
  - производная сложной функции
- Сайт для представления, как нейросети обучаются
  - http://playground.tensorflow.org

Функция активации: сигмоида

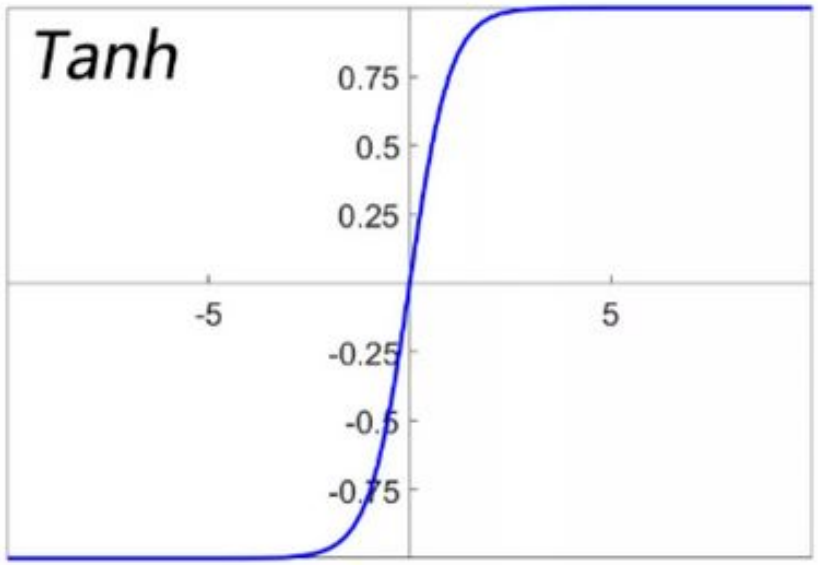


$$f(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$$

Минусы:

- на плечах производная ноль
- ОДЗ не центрирована
- вычисление экспоненты

Функция активации: гиперболический тангенс



$$f(x) = \frac{e^{x} - e^{-x}}{e^{x} + e^{-x}}$$

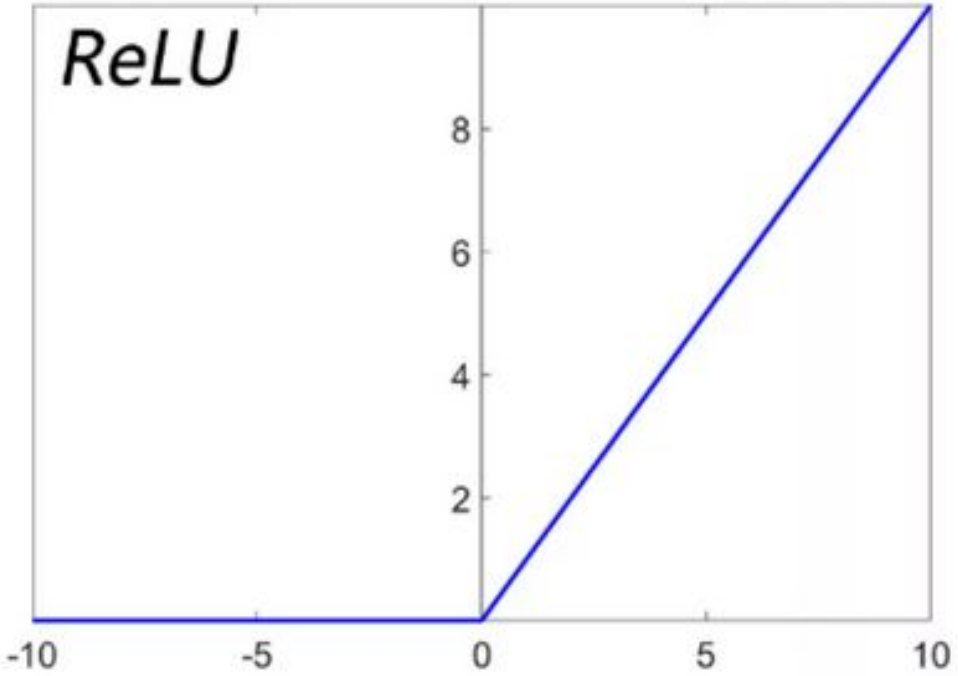
Плюсы:

\+ центрирован

Минусы:

- на плечах производная ноль
- ОДЗ не центрирована
- вычисление экспоненты

Функция активации: ReLU



$$f(x) = \max(0, x)$$

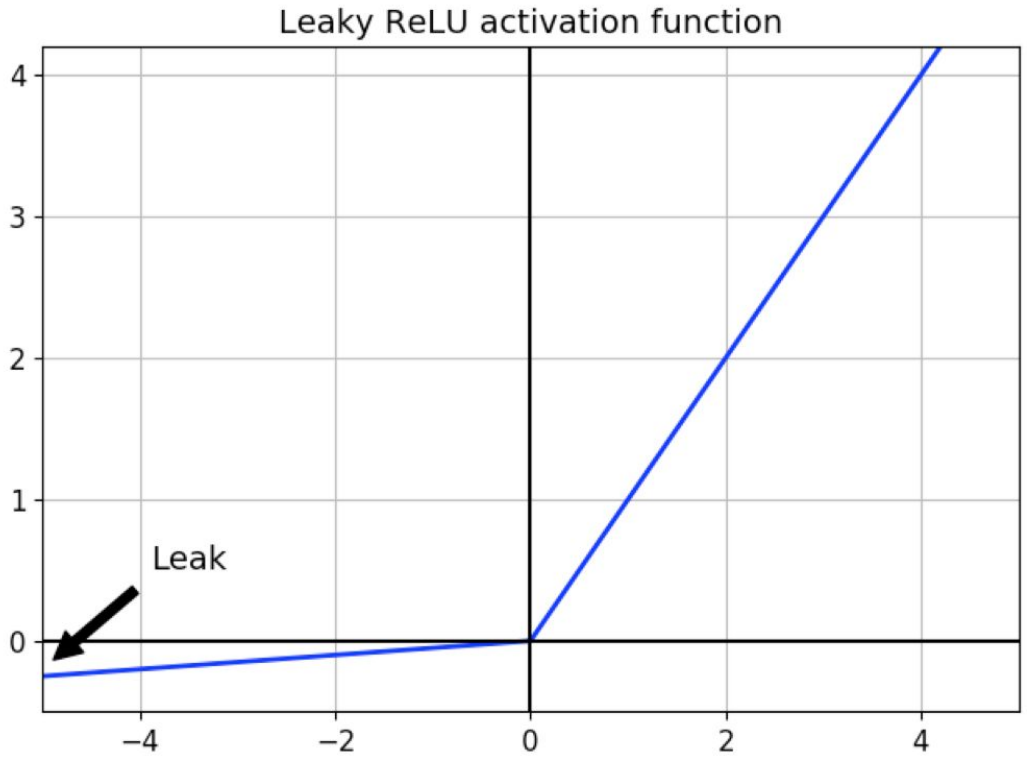
Плюсы:

+ центрирована
+ нелинейная
+ быстрая
+ дифференцируемая

Минусы:

- не центрирована

Функция активации: Leaky ReLU



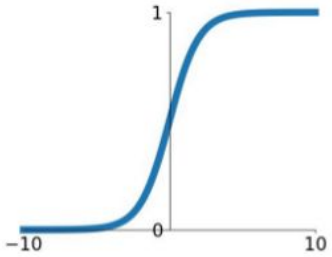
Плюсы:

+ центрирована
+ нелинейная
+ быстрая
+ дифференцируемая
+ «центрирована»

Различные функции активации

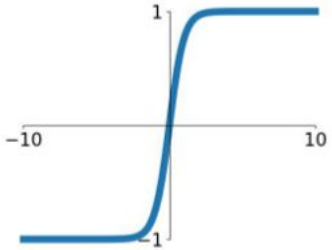
Sigmoid

$$\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$$



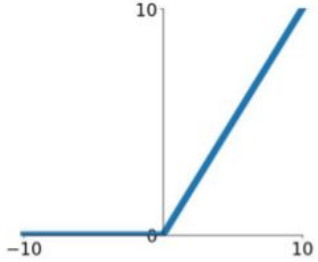
tanh

$$\tanh(x)$$



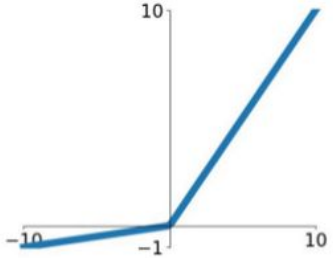
ReLU

$$\max(0, x)$$



Leaky ReLU

$$\max(0.1x, x)$$

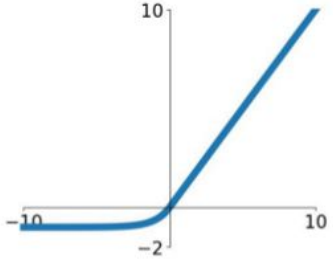


Maxout

$$\max(w_1^T x + b_1, w_2^T x + b_2)$$

ELU

$$\begin{cases} x & x \geq 0 \\ \alpha(e^x - 1) & x < 0 \end{cases}$$



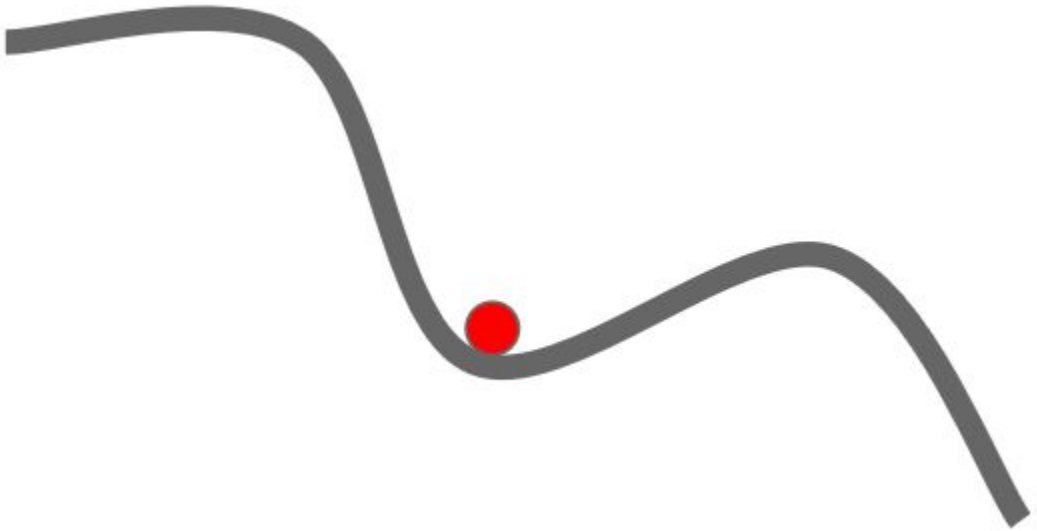
Различные функции активации

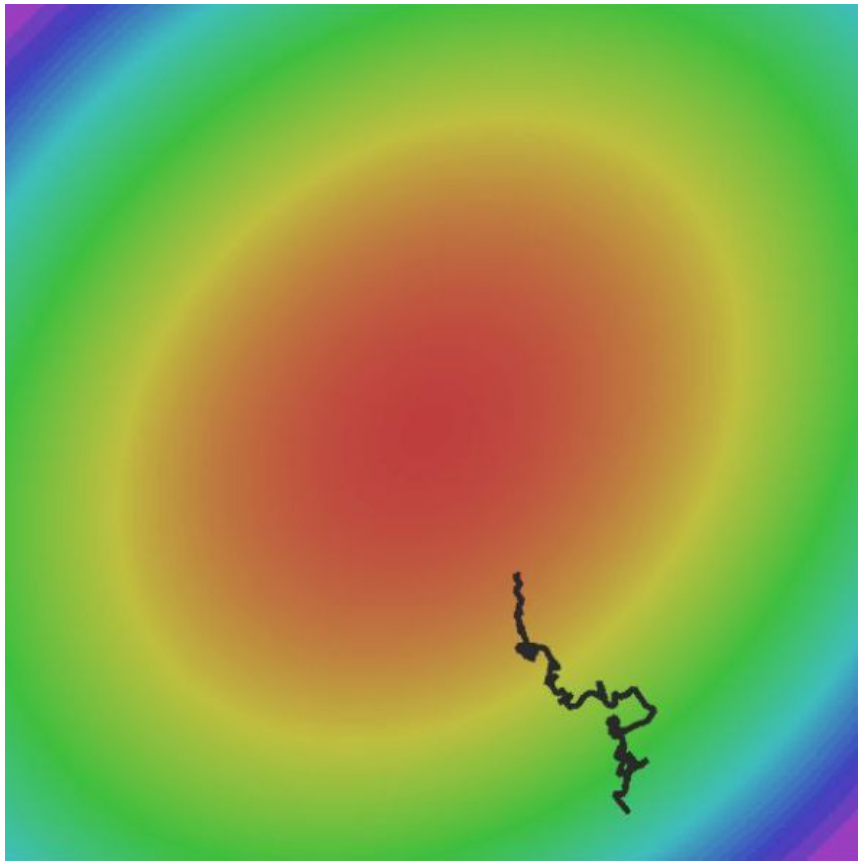
Замечание:

- ReLU – отправная точка
- изменяйте аккуратно скорость обучения
- попробуйте Leaky ReLU или ELU
- вряд ли гиперболический тангенс взлетит
- не используйте сигмоиду

Недостатки SGD

- застревание в локальных экстремумах
- «медленная» сходимость



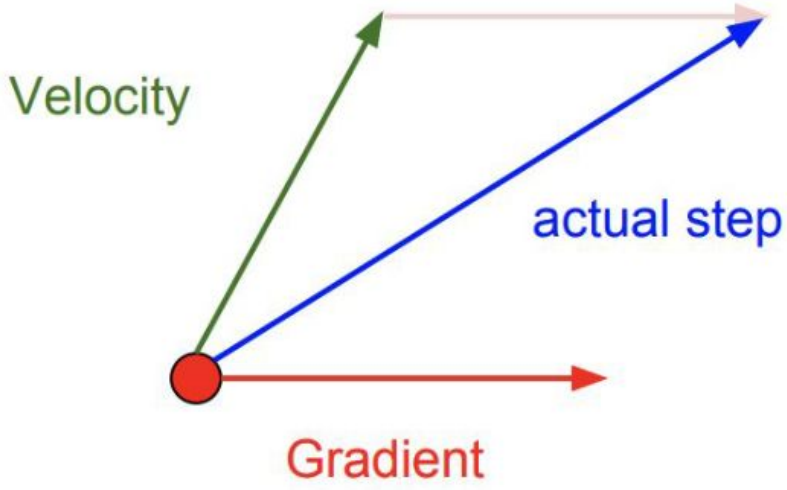


Эвристики SGD: Momentum

Simple SGD

$$x_{t+1} = x_t - \alpha \nabla f(x_t)$$

Momentum update:



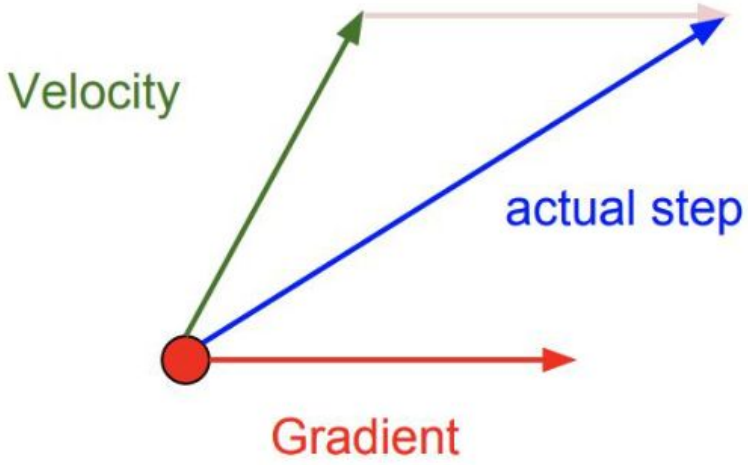
SGD with momentum

$$v_{t+1} = \rho v_t + \nabla f(x_t)$$

$$x_{t+1} = x_t - \alpha v_{t+1}$$

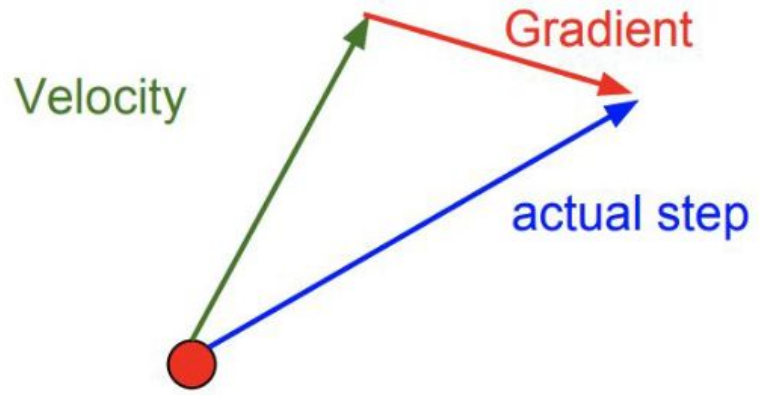
Эвристики SGD: Momentum

Momentum update:



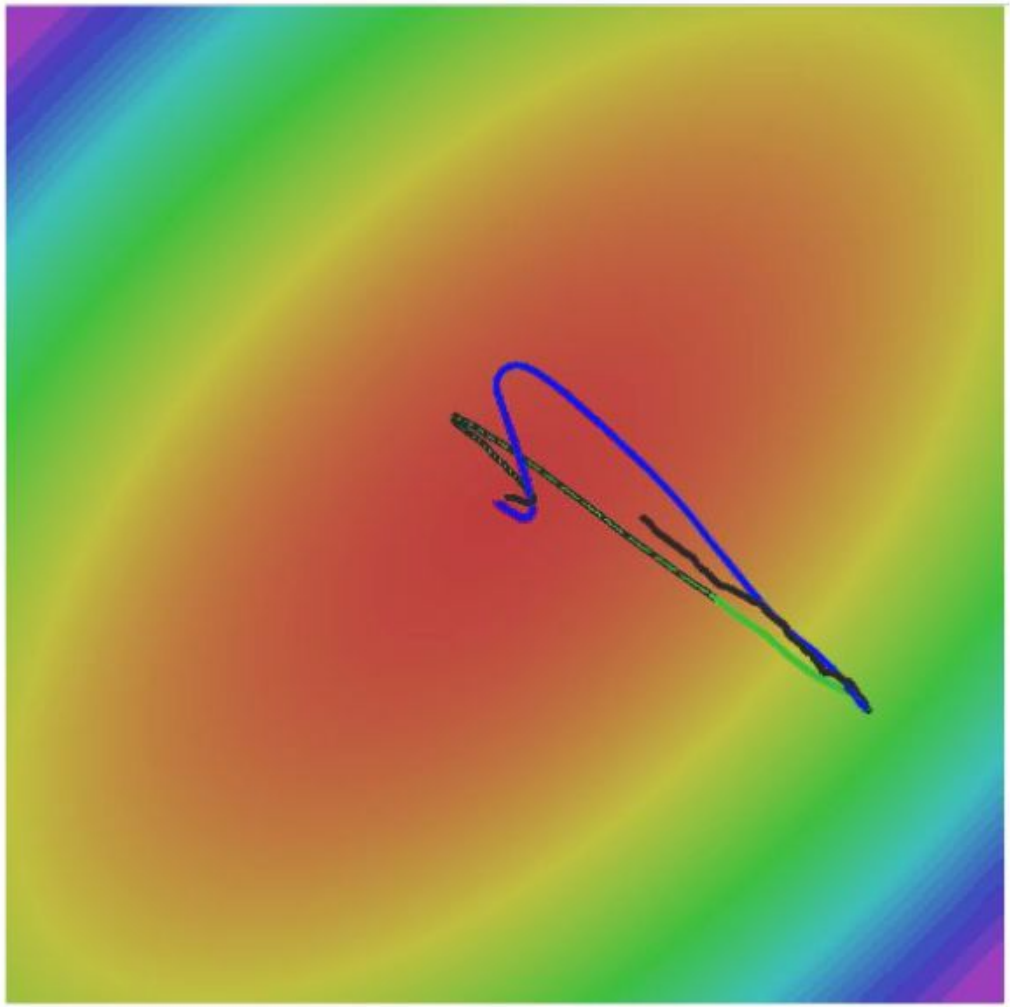
$$v_{t+1} = \rho v_t + \nabla f(x_t)$$
$$x_{t+1} = x_t - \alpha v_{t+1}$$

Nesterov Momentum



$$v_{t+1} = \rho v_t - \alpha \nabla f(x_t + \rho v_t)$$
$$x_{t+1} = x_t + v_{t+1}$$

Эвристики SGD: Momentum



SGD

SGD+Momentum

Nesterov

Эвристики SGD: AdaGrad и RMSProp

Adagrad: SGD with cache

$$\text{cache}_{t+1} = \text{cache}_t + (\nabla f(x_t))^2$$

$$x_{t+1} = x_t - \alpha \frac{\nabla f(x_t)}{\text{cache}_{t+1} + \varepsilon}$$

RMSProp: SGD with cache with exp. Smoothing

$$\text{cache}_{t+1} = \beta \text{cache}_t + (1 - \beta)(\nabla f(x_t))^2$$

$$x_{t+1} = x_t - \alpha \frac{\nabla f(x_t)}{\text{cache}_{t+1} + \varepsilon}$$

Slide 29 Lecture 6 of Geoff Hinton's Coursera class
http://www.cs.toronto.edu/~tijmen/csc321/slides/lecture_slides_lec6.pdf

Эвристики SGD: Adam

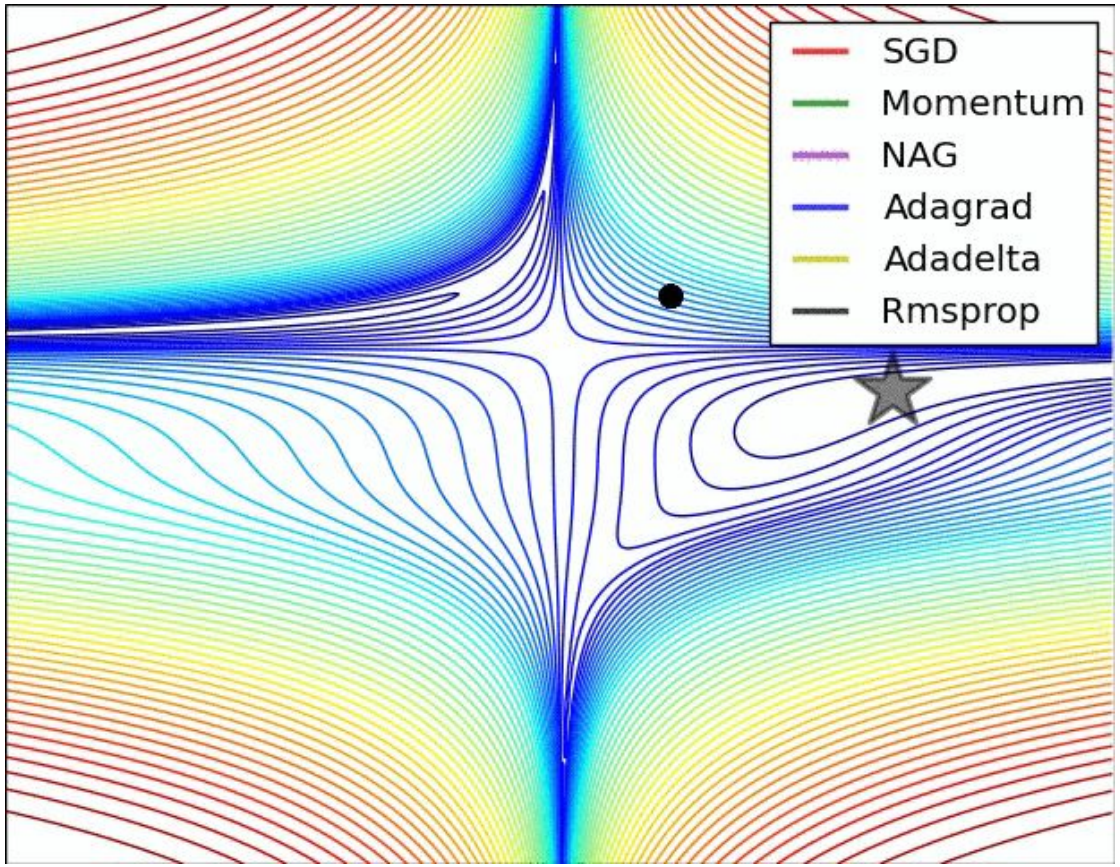
Включает в себя все перечисленные подходы

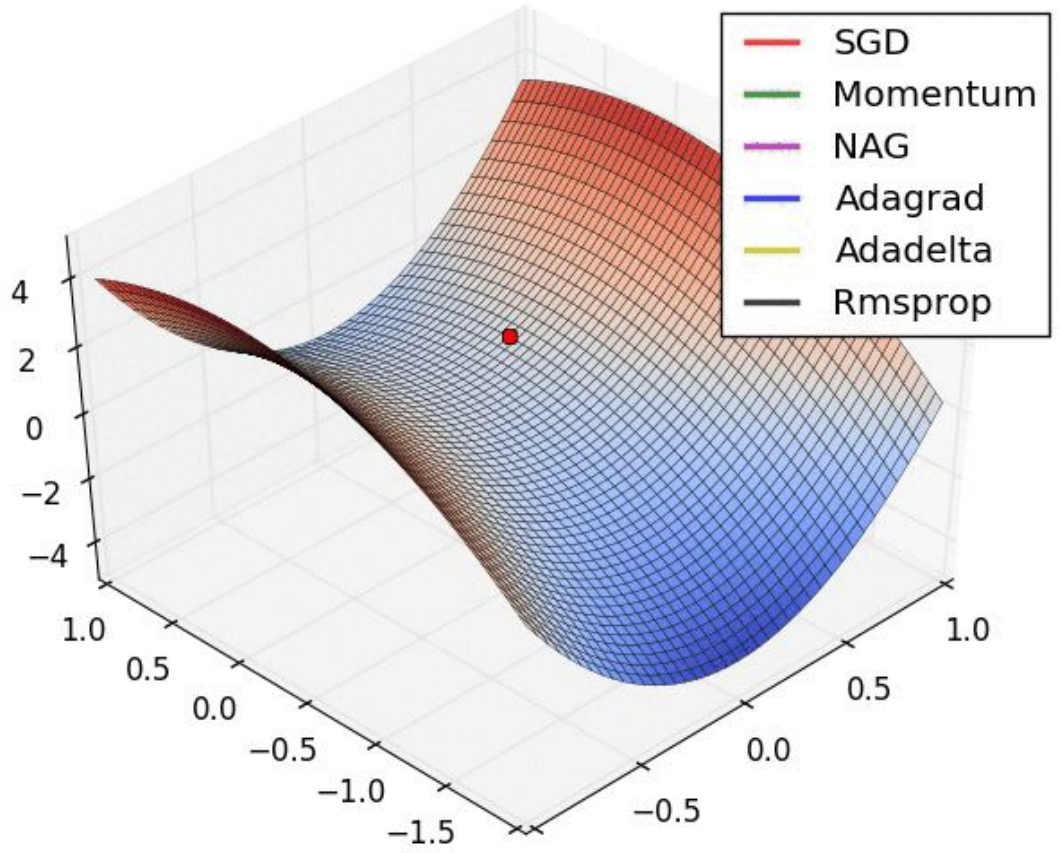
$$v_{t+1} = \gamma v_t + (1 - \gamma)\nabla f(x_t)$$

$$\text{cache}_{t+1} = \beta \text{cache}_t + (1 - \beta)(\nabla f(x_t))^2$$

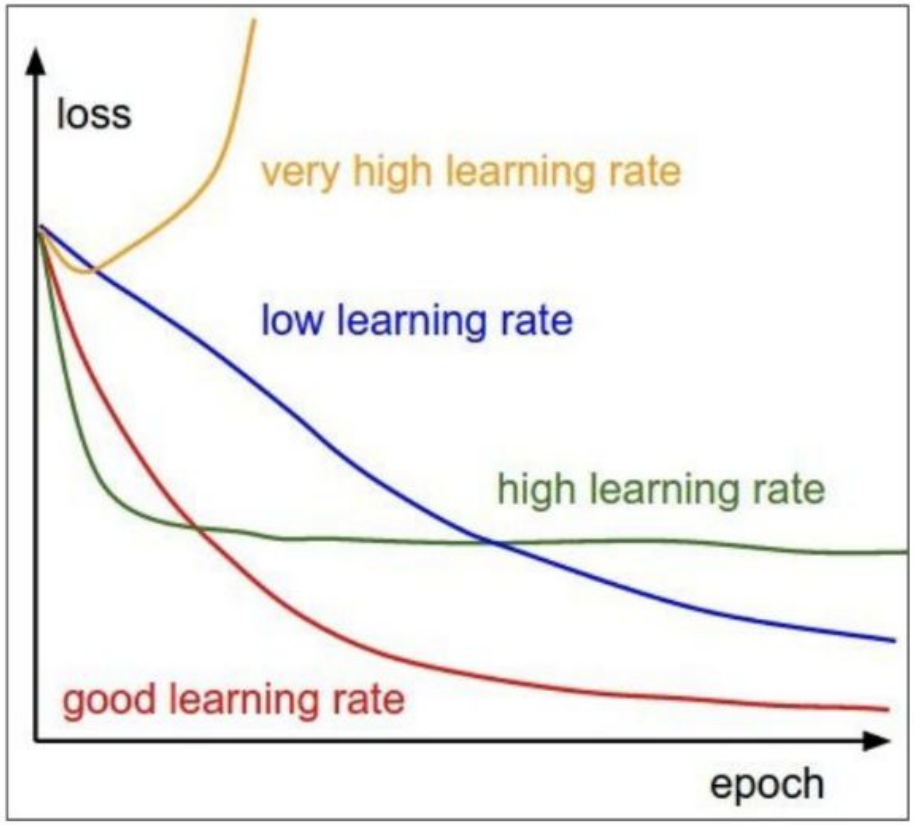
$$x_{t+1} = x_t - \alpha \frac{v_{t+1}}{\text{cache}_{t+1} + \varepsilon}$$

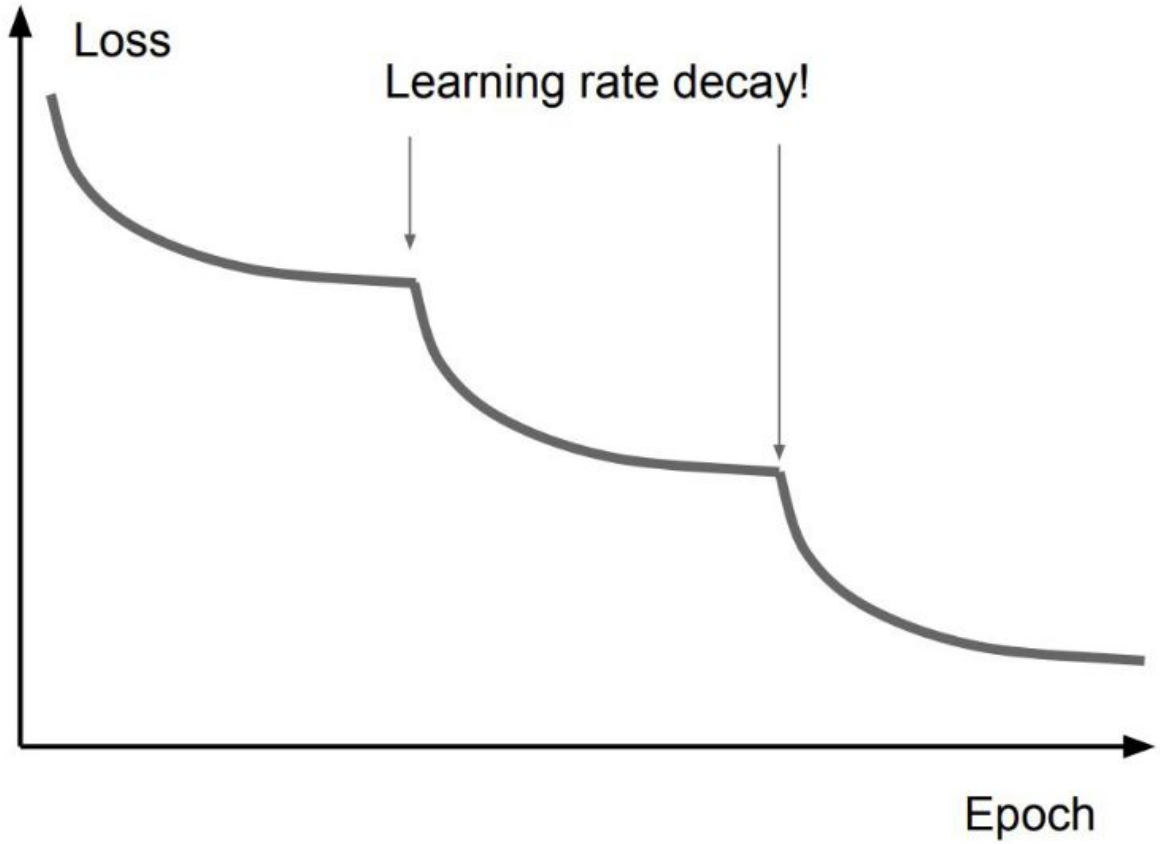
Эвристики SGD





Эвристики SGD: подбор скорости обучения





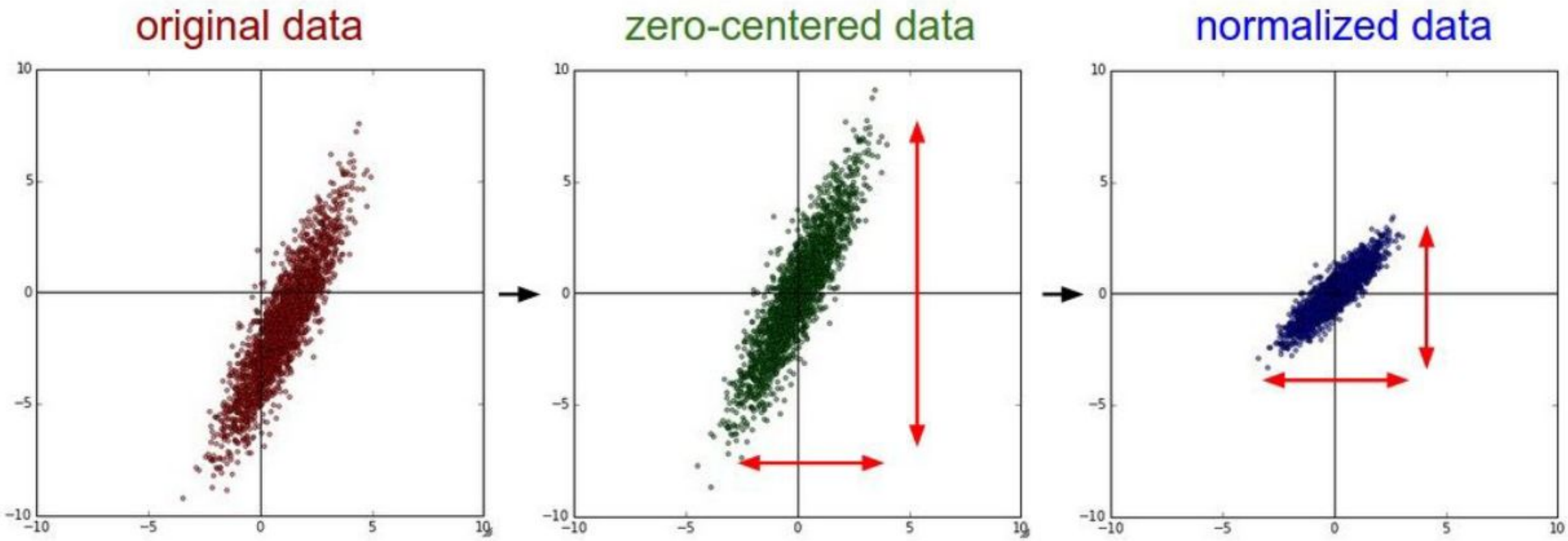
Эвристики SGD

Замечание:

- чем навороченней эвристика, тем больше требуется памяти для хранения кэшей, моментов и т.д.
- тем не менее Adam – хороший выбор для начала
  - байка про Карпатого
- уменьшайте скорость обучения по мере сходимости
- динамически проверяйте качество

Эвристики SGD

Нормировка признаков



Нормировка признаков

Замечание:

- модель, обученная на нормированных признаках, менее чувствительна к изменениям в данных
- градиентный спуск лучше сойдётся

Нормализация батча

Input: Values of x over a mini-batch: $\mathcal{B} = \{x_{1...m}\}$;
Parameters to be learned: γ, β

Output: $\{y_i = \mathrm{BN}_{\gamma,\beta}(x_i)\}$

$$\mu_{\mathcal{B}} \leftarrow \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x_i \qquad \text{// mini-batch mean}$$

$$\sigma^2_{\mathcal{B}} \leftarrow \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x_i - \mu_{\mathcal{B}})^2 \qquad \text{// mini-batch variance}$$

$$\widehat{x}_i \leftarrow \frac{x_i - \mu_{\mathcal{B}}}{\sqrt{\sigma^2_{\mathcal{B}} + \epsilon}} \qquad \text{// normalize}$$

$$y_i \leftarrow \gamma\widehat{x}_i + \beta \equiv \mathrm{BN}_{\gamma,\beta}(x_i) \qquad \text{// scale and shift}$$

Нормализация батча

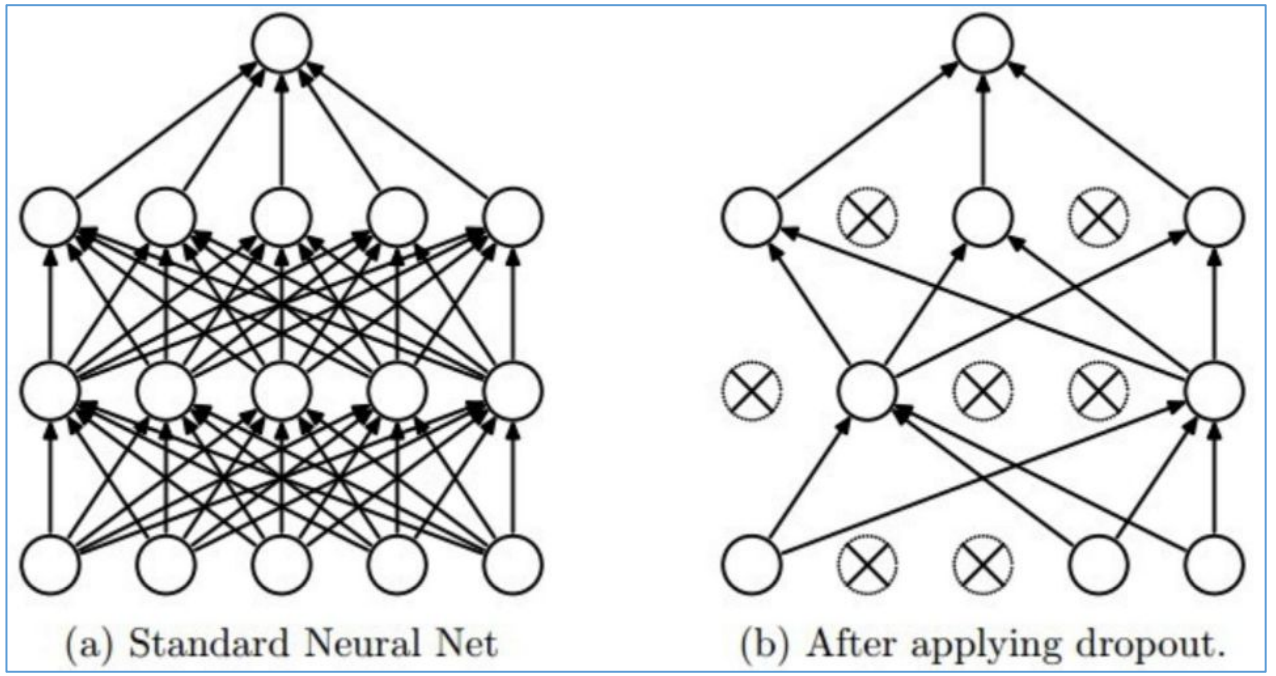
Замечание:

- позволяет решить проблему метода обратного распространения ошибки: параметры модели оптимизируются «несогласовано»
- намного ускоряет сходимость
- позволяет увеличить скорость обучения

Регуляризация

- L2 regularization: $R(W) = \|W\|_2^2$
- L1 regularization: $R(W) = \|W\|_1$
- Elastic Net (L1 + L2): $R(W) = \beta\|W\|_2^2 + \|W\|_1$

Прореживание (Dropout)



Регуляризация: прореживание

- прореживание (dropout) – приравнивание к нулю случайно выбираемых признаков на этапе обучения
- на этапе валидации используются все признаки, но выход слоя умножается на понижающий коэффициент
- позволяет предотвратить переобучение

Вывод

Улучшить сходимость позволяют:

- адаптивный градиентный шаг (Adam)
- специальная функция активации (ReLU)
- регуляризация и DropOut
- пакетная нормализация (batch normalization)
- инициализация параметров модели