Основы практического использования нейронных сетей.

Лекция 1. Функции активации. Функция ошибки.

Дмитрий Буряк.
к.ф.-м.н.
dyb04@yandex.ru

Основные темы спецкурса

- Построение и обучение НС
  - Оптимизация гиперпараметров НС
  - Выбор функции ошибки
  - Анализ, оптимизация обученной сети
- Особенности построения глубоких НС
  - Алгоритмы обучения
  - Проблемы при обучении
  - Методы регуляризации
- Обзор современных архитектур глубоких нейронных сетей.
- Программные средства проектирования и реализации НС (Python, Matlab, библиотеки).
- Практическое задание

Литература

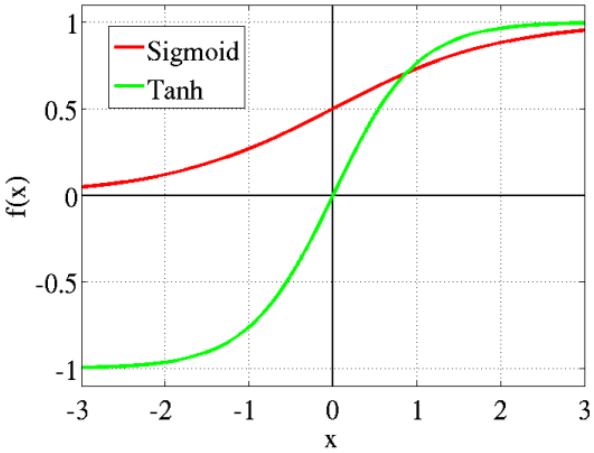
- http://www.deeplearningbook.org/
- http://cs231n.github.io/
- http://neuralnetworksanddeeplearning.com/index.html
- Франсуа Шолле. Глубокое обучение на Python, 2018.

  Francois Chollet. Deep Learning with Python, 2nd edition, 2021
- Eli Stevens, et al., Deep Learning with PyTorch, 2020.

Функция активации.

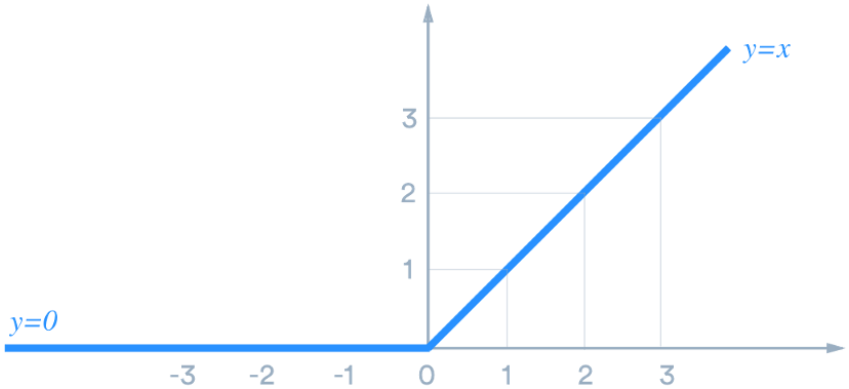
Сигмоида

- Логистическая сигмоида, гиперболический тангенс
  - большая область насыщения → падение эффективности градиентных методов обучения;
  - проблема «исчезающего градиента» (vanishing gradient)
  - предпочтение гиперболическому тангенсу
  - редкое применение на фоне ReLU для сетей прямого распространения во внутренних слоях
  - используются в выходных слоях
  - активное использование в рекуррентных сетях, вероятностных моделях и др.



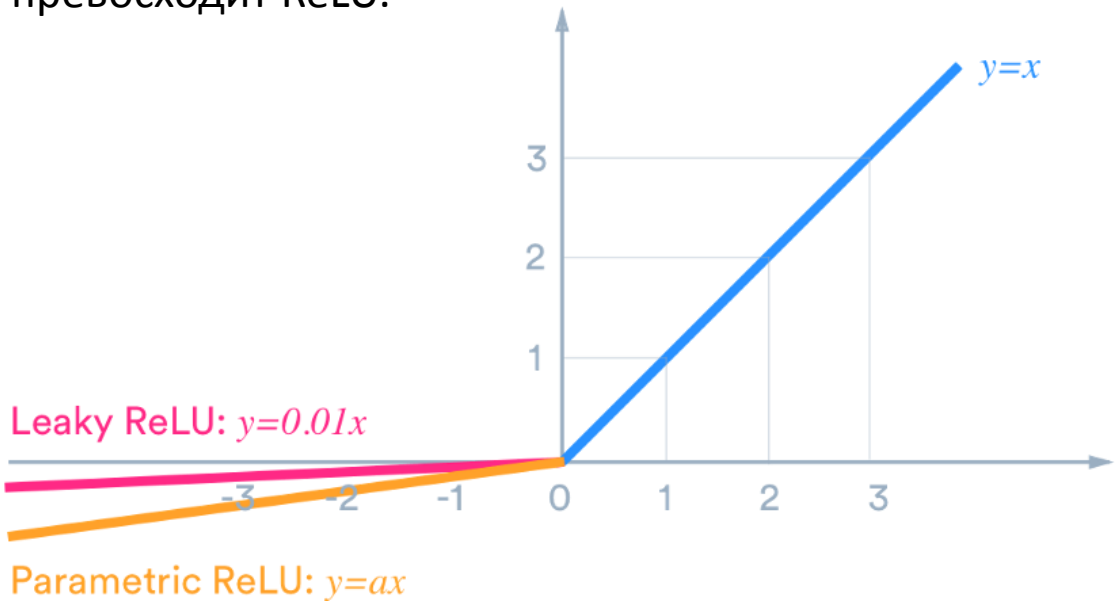
ReLU

- ReLU:
  - $g(z) = \max\{0, z\} \quad \boldsymbol{z} = \boldsymbol{W}^\top \boldsymbol{h} + \boldsymbol{b}$
  - Низкая вычислительная сложность;
  - Хорошая сходимость градиентных методов оптимизации;
  - Постоянная производная при x>0;
  - Дополнительная устойчивость к переобучению (производная равна 0 при x<0);
  - Проблема «умирающий ReLU» (решение – уменьшение коэффициента обучения)



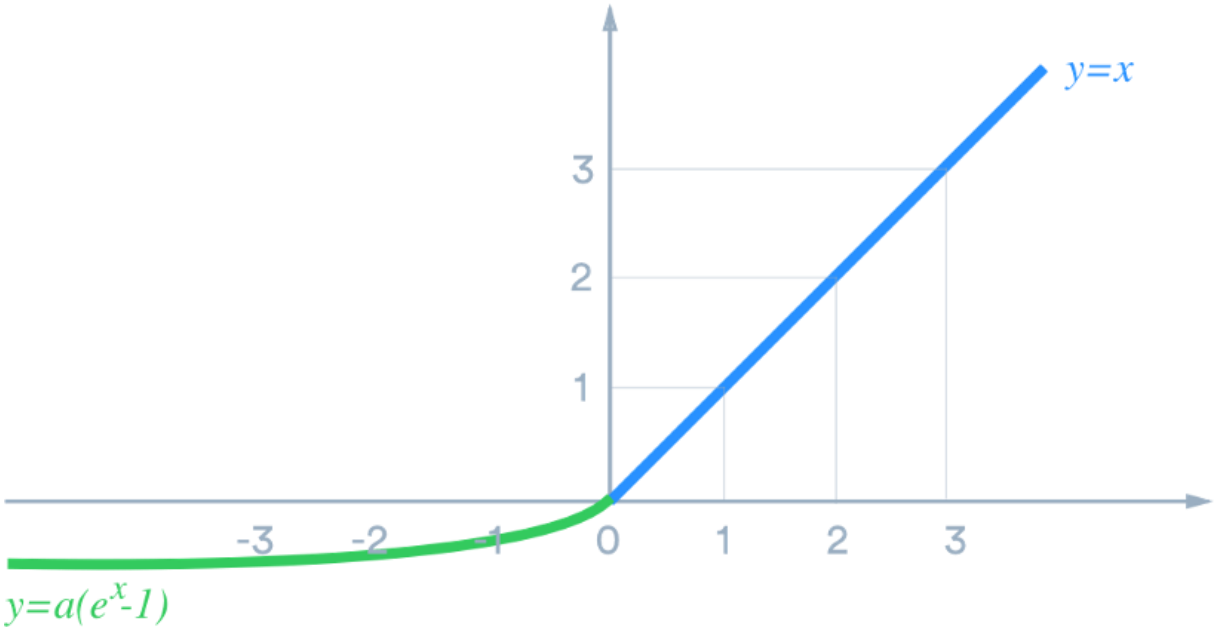
Варианты ReLU

- Варианты ReLU: leaky ReLU, parameteric ReLU
  - $h_i = g(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\alpha})_i = \max(0, z_i) + \alpha_i \min(0, z_i)$
  - Решение проблемы «умирающий ReLU»;
  - Не всегда превосходит ReLU.



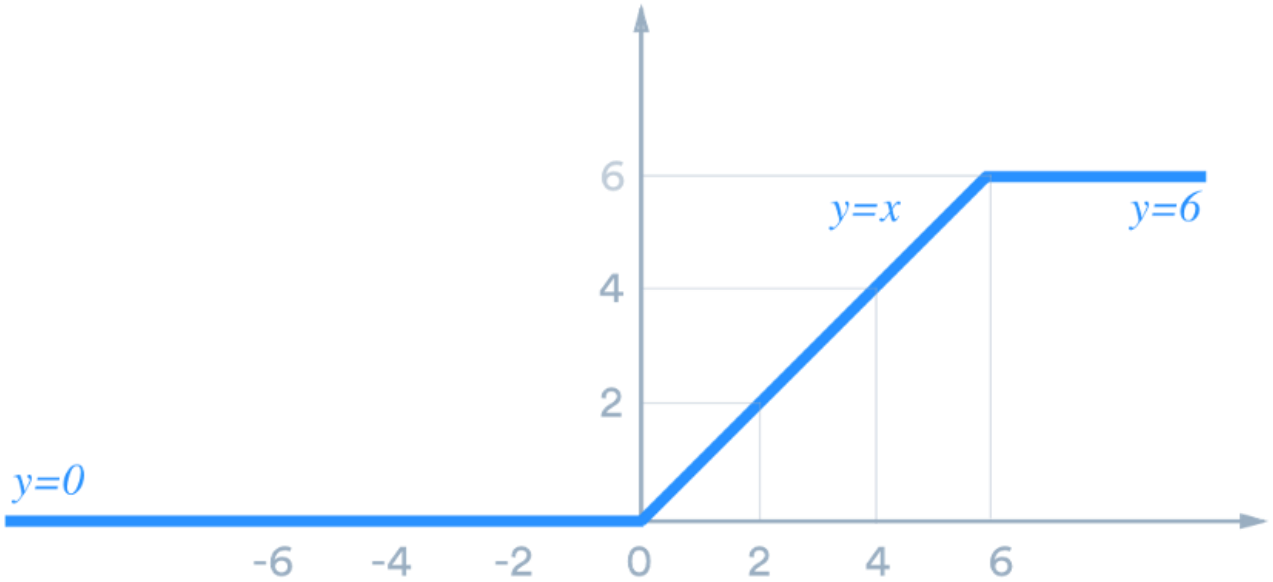
ELU

- Exponential Linear (ELU, SELU)
  - Решение проблемы «умирающий ReLU»;
  - Ограниченная снизу.



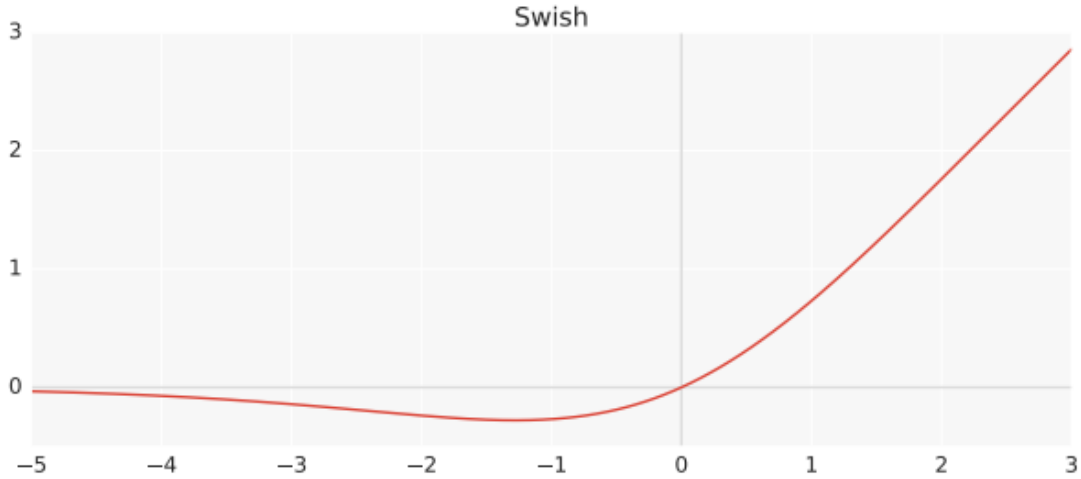
ReLU6

- ReLU6
  - Ограниченная сверху;
  - Применяется в ряде известных архитектур (MobileNet)



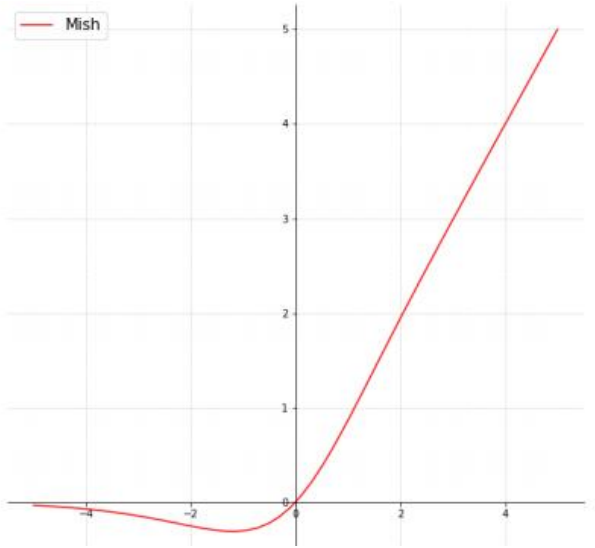
Swish

- Swish
  - $f(x) = x * \sigma(\beta x)$ β – фиксирован или обучаем
  - Аналогична ReLU при x>0;
  - Решение проблемы «умирающей ReLU»;
  - Немонотонная функция при x<0;
  - Во ряде случаев эффективнее ReLU.



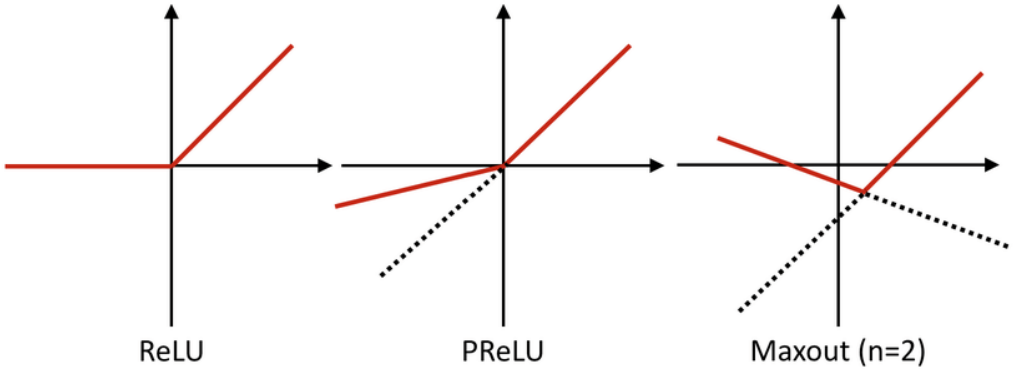
Mish

- Mish
  - $f(x) = x * \tanh(softplus(x)) \quad softplus(x) = \ln(1 + e^x)$
  - Аналогична ReLU при x>0;
  - Решение проблемы «умирающей ReLU»;
  - Немонотонная функция при x<0;
  - Во ряде случаев эффективнее ReLU и Swish.



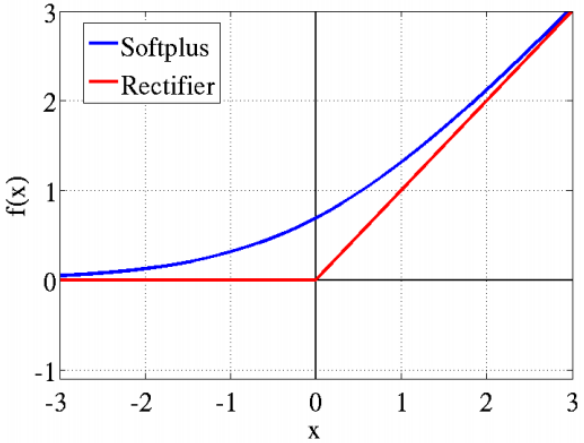
Maxout

- Maxout
  - $\max(w_1^T x + b_1, w_2^T x + b_2)$
  - Обощение ReLU и Leaky ReLU
  - Удваивает число параметров



Другие виды

- Другие виды функций активации:
  - многообразие функций имеют сходую эффективность
  - применение «неканонических» функций только при существенных отличиях от известных аналогов.
- Не использовать функцию активации
  - $\boldsymbol{h} = g(\boldsymbol{W}^\top \boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}) \rightarrow \boldsymbol{h} = g(\boldsymbol{V}^\top \boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{x} + \boldsymbol{b})$
  - уменьшение числа весов: *np* → *(n+p)q*
- Радиальные базисные функции (RBF)
  - $h_i = \exp\left(-\frac{1}{\sigma_i^2}||\boldsymbol{W}_{:,i} - \boldsymbol{x}||^2\right)$
  - Сложности при оптимизации.
- Softplus
  - $g(a) = \zeta(a) = \log(1 + e^a)$
  - Теоретически лучше ReLU, практически менее эффективен.



Функция ошибки.

Функция ошибки

$$E(X, Y, w) = C(X, Y, w) + \lambda R(w)$$

- C – функция потерь
  - X, Y – обучающее множество и желаемые выходы
  - w – настраиваемые параметры (веса, смещения)
  - C≥0
  - Вид функции потерь + функция активации в выходном слое → скорость сходимости алгоритма обучения.

- R – функция регуляризации

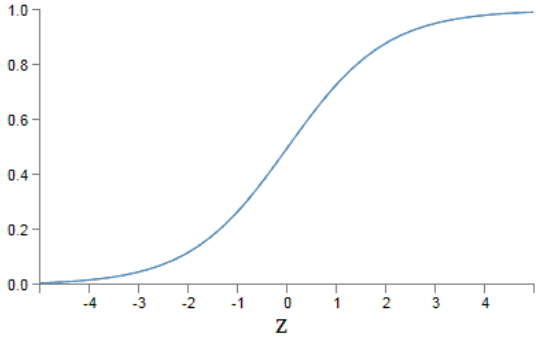
Среднеквадратичная функция (MSE)

$$C = \frac{1}{2n}\sum_i \|y_i - a_i\|^2$$

- 1 нейрон, 1 вход
- Функция активации - сигмоида

$$C = \frac{(y-a)^2}{2}$$

$$\frac{\partial C}{\partial w} = (a-y)\sigma'(z)x$$



- Зависимость от производной функции активации
- Большие ошибки (a≈0, y=1; a≈1, y=0) → область насыщения сигмоиды → замедление обучения
- MSE + сигмоида → низкая скорость сходимости алгоритма обучения

MSE + линейный нейрон

- Выходной слой – линейные нейроны

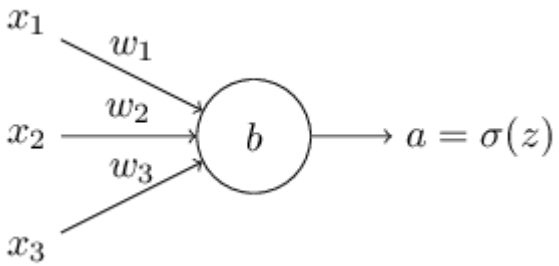
$$\frac{\partial C}{\partial w_{jk}^L} = \frac{1}{n} \sum_x a_k^{L-1} (a_j^L - y_j)$$

- Зависимость от ошибки на выходе
- MSE + линейная функция активации → высокая скорость сходимости алгоритма обучения

Cross Entropy

$$C = -\frac{1}{n}\sum_i\sum_j\left[y_{ij}\ln a_{ij} - (1-y_{ij})\ln(1-a_{ij})\right]$$

- Функция активации - сигмоида



$$C = -\frac{1}{n}\sum_x [y\ln a + (1-y)\ln(1-a)]$$

$$\frac{\partial C}{\partial w_j} = \frac{1}{n}\sum_x \frac{\sigma'(z)x_j}{\sigma(z)(1-\sigma(z))}(\sigma(z)-y)$$

$$\sigma'(z) = \sigma(z)(1-\sigma(z))$$

$$\frac{\partial C}{\partial w_j} = \frac{1}{n}\sum_x x_j(\sigma(z)-y)$$

- Зависимость от ошибки на выходе
- Cross entropy + сигмоида → высокая скорость сходимости алгоритма обучения

Функция правдоподобия

$$C \equiv -\ln a_y^L$$

- N выходов, функция активации – Softmax $a_j^L = \frac{e^{z_j^L}}{\sum_k e^{z_k^L}}$
- Входной вектор x относится к классу 1 → $a_1^L \to 1 \;\rightarrow C \to \min$
  или → $a_1^L \to 0 \;\rightarrow C \to \max$

$$\frac{\partial C}{\partial w_{jk}^L} = a_k^{L-1}(a_j^L - y_j)$$

- Зависимость от ошибки на выходе
- Функция правдоподобия + softmax → высокая скорость сходимости алгоритма обучения

Другие функции потерь

- Среднеквадратичная логарифмическая $$\mathcal{L} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\log(y^{(i)}+1) - \log(\hat{y}^{(i)}+1)\right)^2$$
- Средняя по модулю (MAE) $$\mathcal{L} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|y^{(i)} - \hat{y}^{(i)}\right|$$
- Средняя по модулю в процентах (MAPE) $$\mathcal{L} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{y^{(i)} - \hat{y}^{(i)}}{y^{(i)}}\right| . 100$$
- Расстоние KL (Kullback Leibler) $$\mathcal{L} = \underbrace{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y^{(i)} . \log(y^{(i)})\right)}_{entropy} \underbrace{- \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y^{(i)} . \log(\hat{y}^{(i)})\right)}_{cross-entropy}$$
- Hinge loss $$\mathcal{L} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\max(0, 1 - y^{(i)} . \hat{y}^{(i)})$$

Выбор типа функции потерь

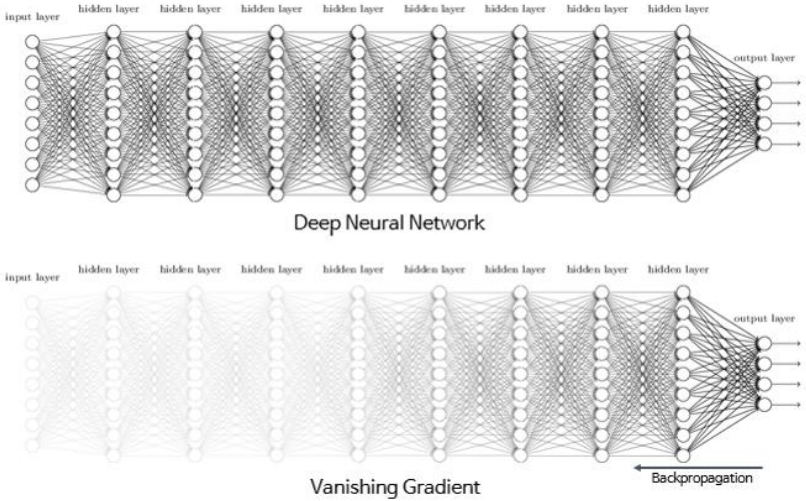
- Задача регрессии
  - функция активации в выходном слое: линейная
  - функция потерь: MSE или Cross Entropy

- Задача классификации
  - функция активации в выходном слое: сигмоида или softmax
  - функция потерь: Cross Entropy или Правдоподобие

Затухающий градиент.

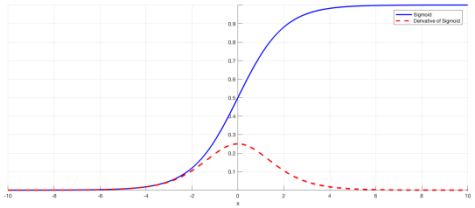
Затухающий градиент

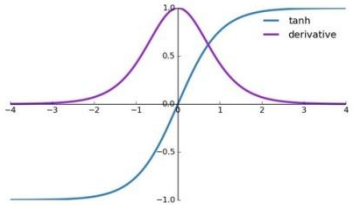
- ❑ Уменьшение величины градиента с ростом числа слоев, пройденных в ходе обратного распространения ошибки.
- ❑ Малые значения производных функции активации.
- ❑ Градиент функции ошибки в промежуточном слое зависит от произведения всех производных функций активации в прошедших слоях.
- ❑ Коррекция весов в первых слоях сети существенно меньше чем в последних.

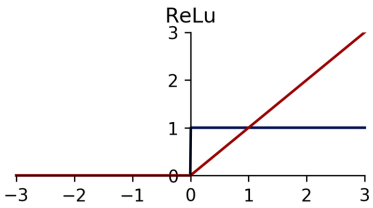


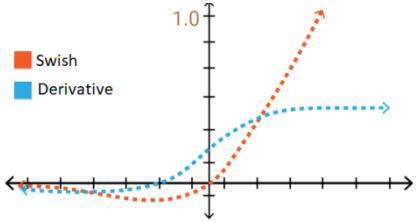
Функция активации

Activation	Function	Derivative	Min	Max
Logistic	$\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$	$\sigma(z)(1-\sigma(z))$	$y \to 0$	0.25
Hyperbolic Tangent	$\tanh(z) = \frac{e^{z}-e^{-z}}{e^{z}+e^{-z}}$	$1-(\tanh(z))^2$	$y \to 0$	1
ReLU	$\max(0, z)$	$\begin{cases} 0, & z < 0 \\ 1, & z \geq 0 \end{cases}$	0	1
Leaky ReLU	$\max(0.2z, z)$	$\begin{cases} 0.2, & z < 0 \\ 1, & z \geq 0 \end{cases}$	0	1
Swish	$f(z) = z \cdot \sigma(z)$	$f(z) + \sigma(z)(1-f(z))$	≈ -0.099	≈ 1.0998







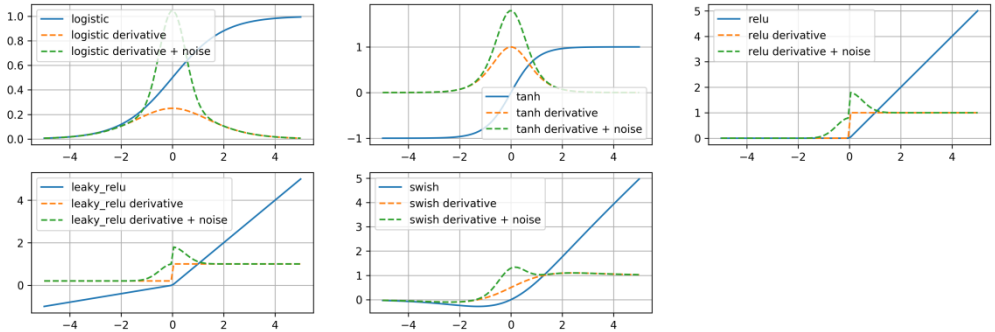


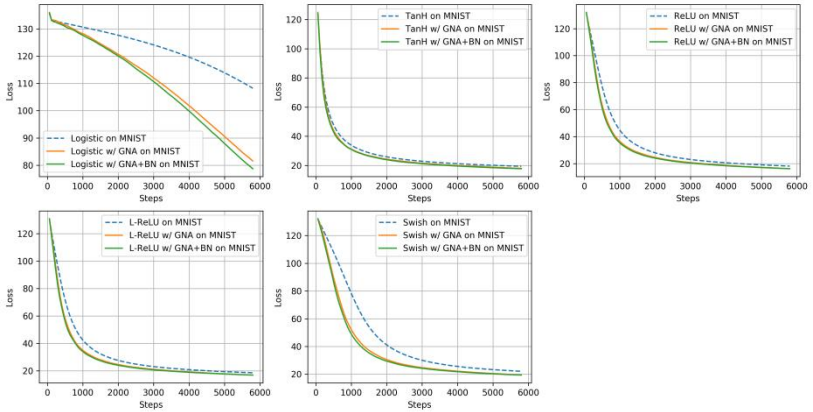
❑ Применение активационных функций с большим диапазоном значений производной (ReLU, Swish, варианты ReLU) способствует решению проблемы затухающего градиента

Добавление «шума» в значение градиента

$$\nabla_{\theta_t} J := \nabla_{\theta_t} J + \mathcal{N}(0, \sigma_t^2)$$

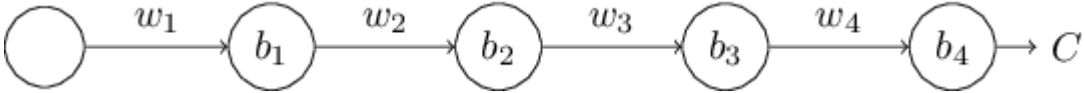
$$\sigma_t^2 := \frac{\eta = 1}{(1+t)^{\gamma=0.55}}$$





Глубина НС

- Глубокая НС → малый градиент на начальных слоях.
- 4 слоя с одним нейроном в каждом слое



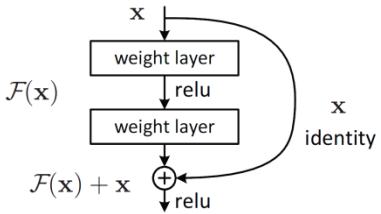
- Градиент на первом слое

$$\frac{\partial C}{\partial b_1} = \sigma'(z_1) \times w_2 \times \sigma'(z_2) \times w_3 \times \sigma'(z_3) \times w_4 \times \sigma'(z_4) \times \frac{\partial C}{\partial a_4}$$

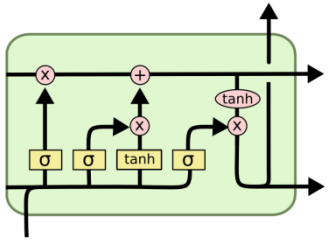
- При инициализации весов нормальным распределением с небольшим std → большинство $|w_j|<1$, $\max(\sigma'(z))=0.25$ → $|w_j \times \sigma'(z))|<0.25$ → $\partial C/\partial b_1 << \partial C/\partial b_3$

«Восстановление» затухающего градиента

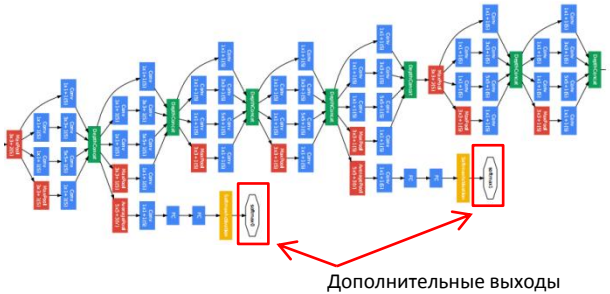
- Изменения в архитектуре НС:
  - Введение параллельных связей: обратное распространение градиента без умножения на производную функции активации: ResNet (остаточные связи), GRU и LSTM (передачи вектора состояния).
  - Использование дополнительных выходов сети на этапе обучения: GoogLeNet



Блок ResNet с остаточной связью



LSTM Нейрон



Фрагмент GoogLeNet

Вопросы

- ❑ Основное отличие сигмоидальной функции от RELU, которое влияет на процесс обучения НС.
- ❑ Какие функции потерь предпочтительнее при обучении НС, решающих задачу регрессии, и в НС для задач классификации?
- ❑ Что такое проблема «затухающего градиента»?