Машинное обучение (Machine Learning)

Нейронные сети (Neural networks)

Уткин Л.В.

ПОЛИТЕХ
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Содержание

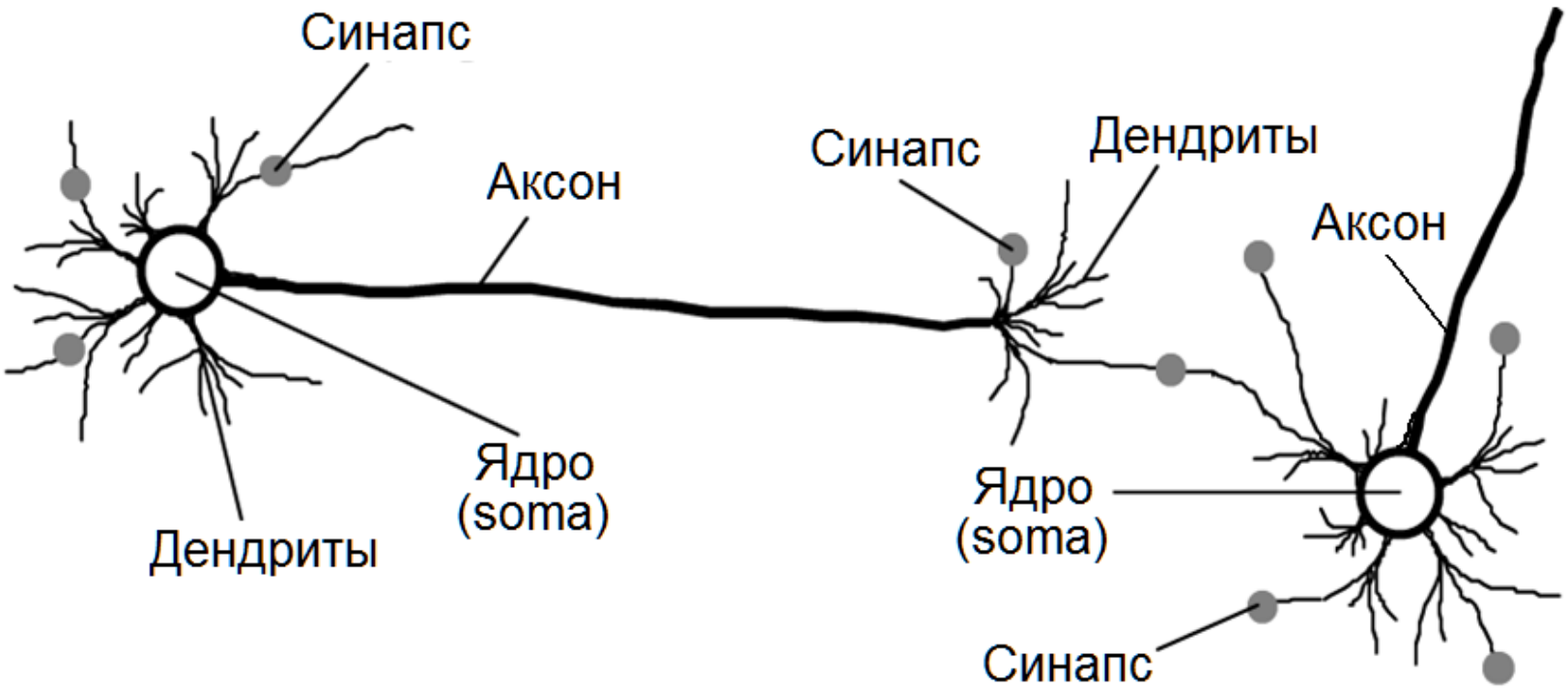
1. Понятие персептрона
2. Метод градиентного спуска
3. Многослойная сеть
4. Алгоритм обратного распространения ошибки

Презентация является компиляцией и заимствованием материалов из замечательных курсов и презентаций по машинному обучению:

К.В. Воронцова, А.Г. Дьяконова, Н.Ю. Золотых, С.И. Николенко, Andrew Moore, Lior Rokach, Rong Jin, Luis F. Teixeira, Alexander Statnikov и других.

Понятие персептрона

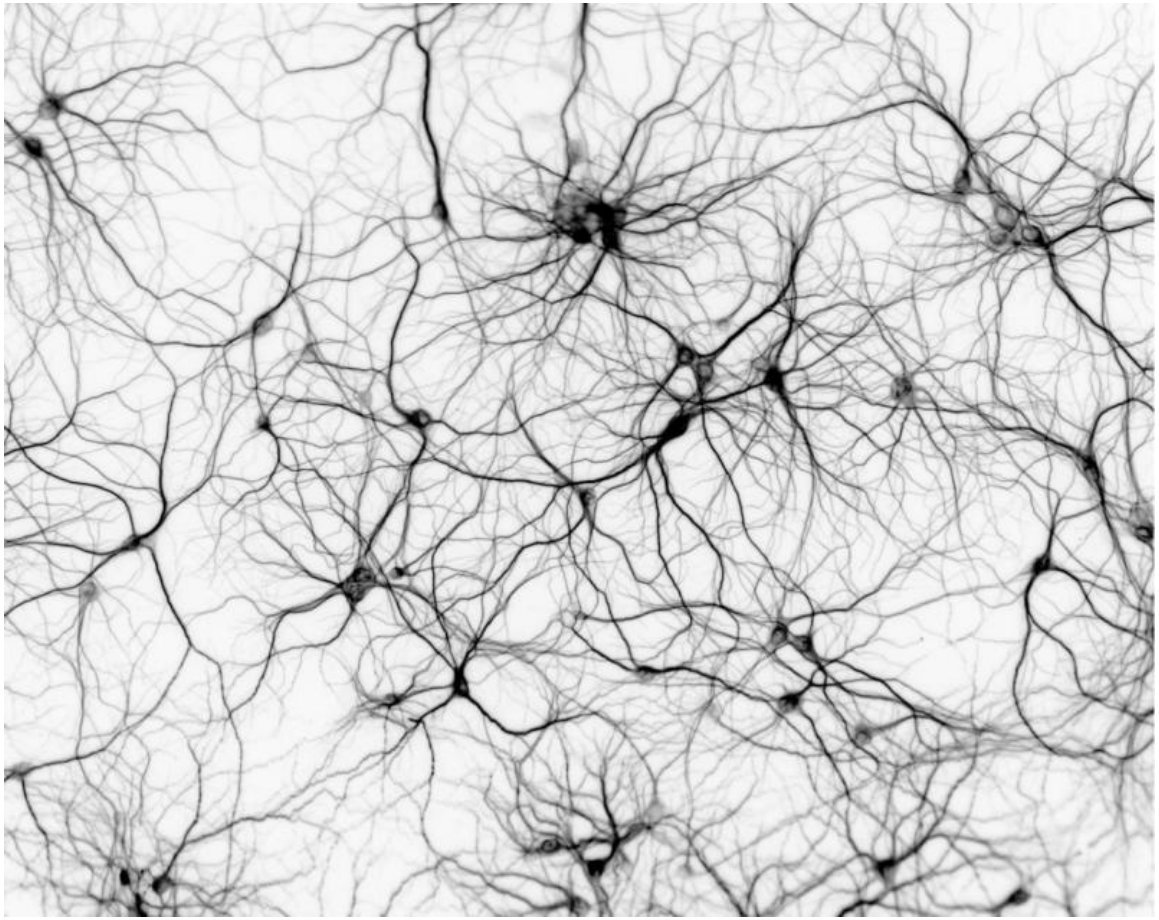
Биологический прототип



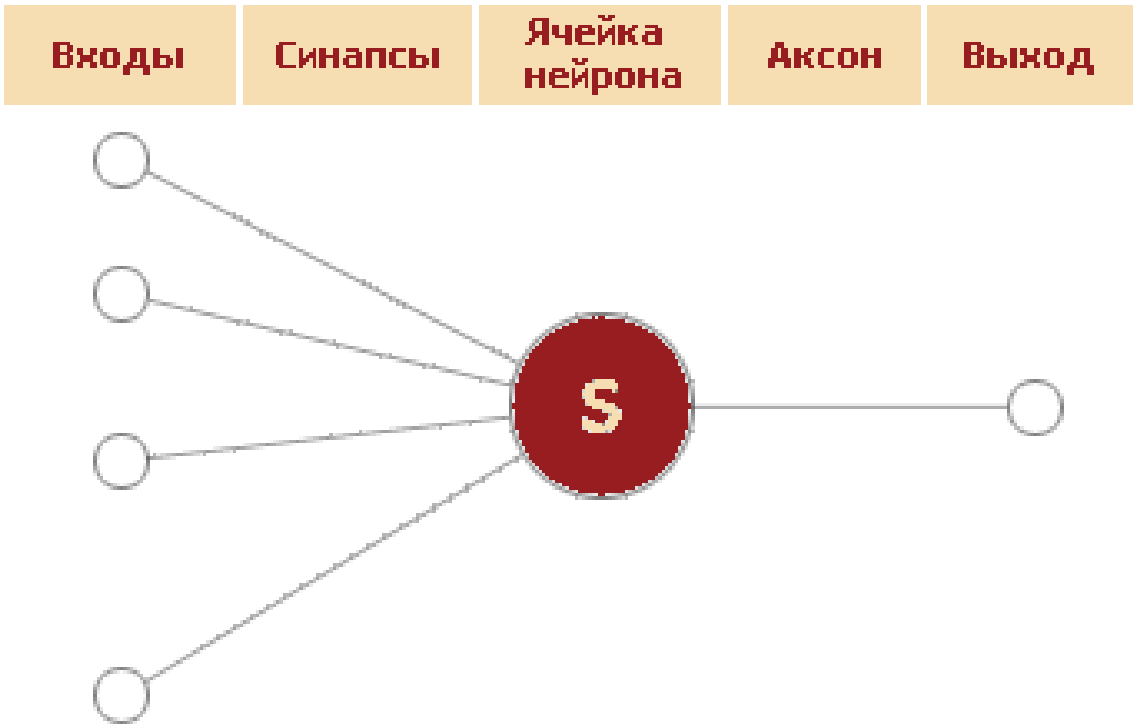
Особенности биологии

- **Нервная клетка** - это черный ящик, у которого есть **дендриты**, входы, по которым поступают сигналы (отрицательные ионы) в клетку или ее ядро.
- Если внутри накапливается большой отрицательный заряд, клетка возбуждается и генерирует импульс, который по **аксону** к дендритам следующих клеток.
- Место соединения аксона нейрона с дендритом называется **синапсом**.
- Заряды аддитивны, т.е. они накапливаются в клетках. Отсюда клетка - это элементарный **классификатор**, принимающий решение, возбудиться или нет.

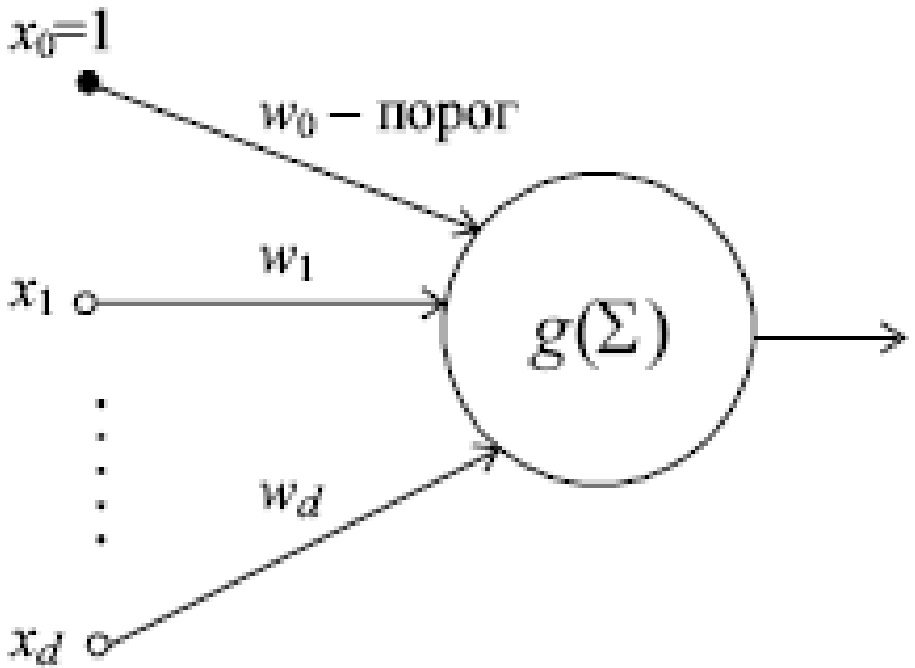
Нейронная сеть (биология)



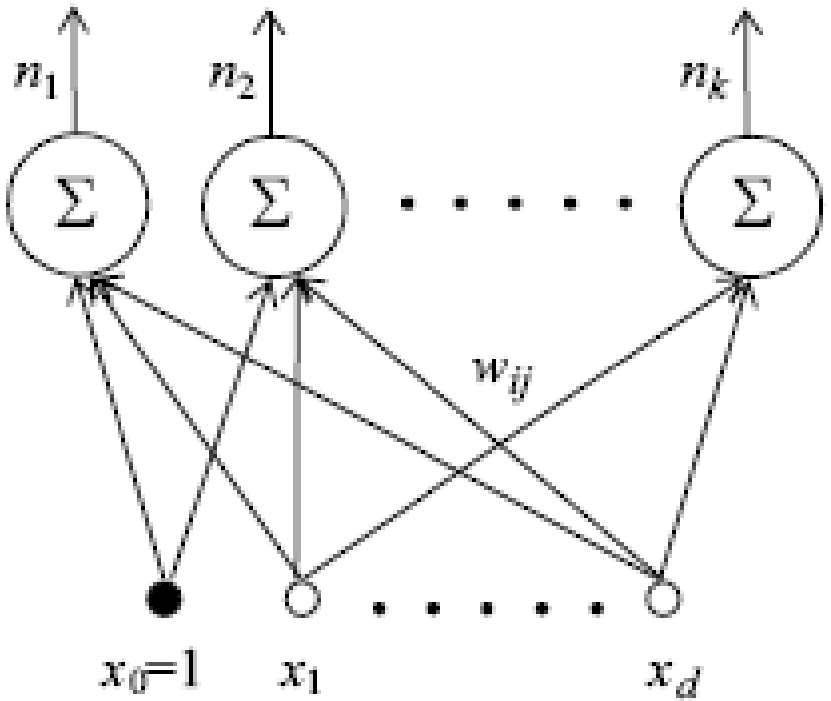
Структура нейрона



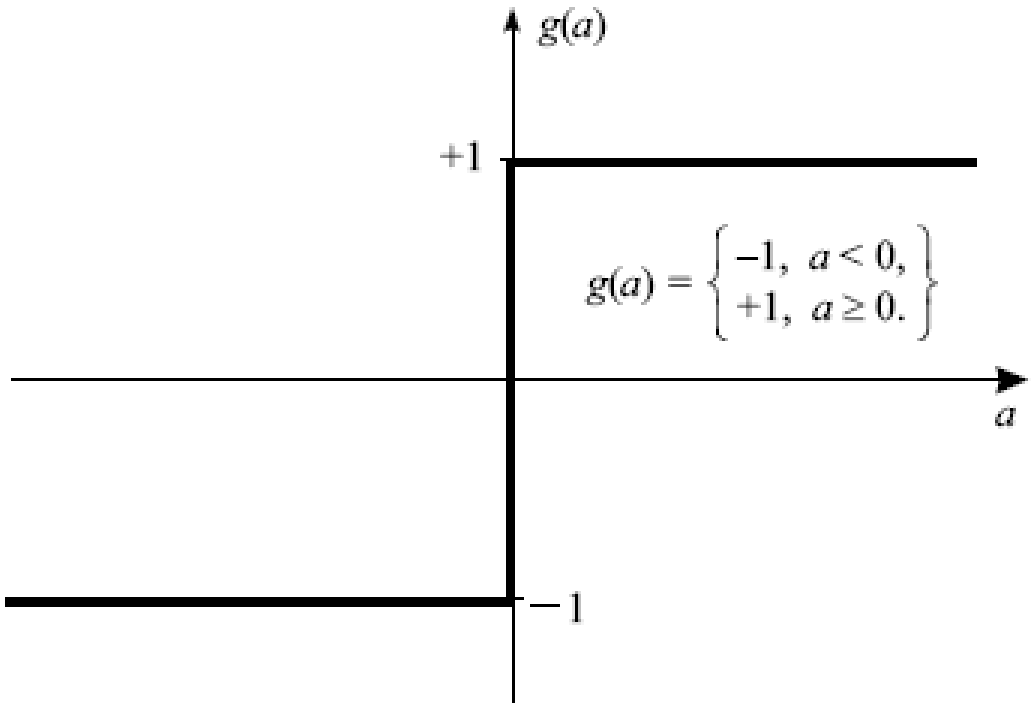
Структура нейрона



Персептрон Розенблатта



Пороговая функция



Формальный нейрон

Нейрон вычисляет взвешенную сумму своих входов:

$$y(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{d} x_i w_i + w_0$$

Для удобства входной вектор расширяется до $x = (1, x_1, \ldots, x_d)$ и порог w_0 вносится под знак суммы:

$$y(\mathbf{x}) = \sum_{i=0}^{d} x_i w_i$$

w_0 - лимит активации;

Выход персептрона

Выход y^* вычисляется как

$$y^* = \begin{cases} 1, & \text{если } w_0 + x_1 w_1 + \ldots + x_d w_d > 0 \\ -1, & \text{иначе} \end{cases}$$

Веса изначально $w_0, w_1, \ldots, w_d$ неизвестны.

Обучить нейрон - означает найти такие веса по обучающей выборке, чтобы нейрон с максимальной точностью классифицировал данные

Вопрос: как обучить нейрон или вычислить веса?

Обучение персептрона

1. Веса $\mathbf{w} = (w_1, ..., w_d)$ инициализируются случайными значениями.
2. Подаем на вход персептрона вектор $\mathbf{x}_k = (x_1, ..., x_d)$ из обучающей выборки и вычисляем выход нейрона y_k^*.
3. Правило изменения весов:

$$w_i(k+1) \leftarrow w_i(k) + \eta\,(y_k - y_k^*)\,x_i(k)$$

4. Переход к Шагу 2 для выбора следующего $\mathbf{x}_{k+1}$ из обучающей выборки.

y_k^* - выход нейрона на k-ом элементе выборки
y_k - метка класса k-го элемента обучающей выборки
$\eta > 0$ - коэффициент, задающий скорость обучения
$x_i(k)$ - значение i-го признака k-го элемента обучающей выборки

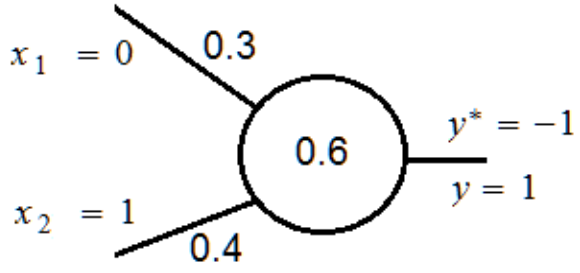
Пример дизъюнкции

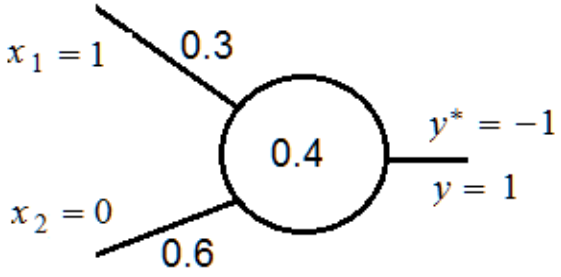
Логическая функция “или” ($y = x_1 \vee x_2$):

x_1	0	0	1	1
x_2	0	1	0	1
y	0	1	1	1

Обучающая выборка $((x_1, x_2), y)$ состоит из двух примеров: $((0, 1), 1)$ и $((1, 0), 1)$.

Пример обучения нейрона





1. Начальные веса: $w = (0.6, 0.3, 0.4)$, $\eta = 0.1$
2. Вход: $(x_1, x_2) = (0, 1)$, выход:
   $y = 1 \Rightarrow y^* = [0 \cdot 0.3 + 1 \cdot 0.4 < 0.6] = -1$ (выходы не совпадают)

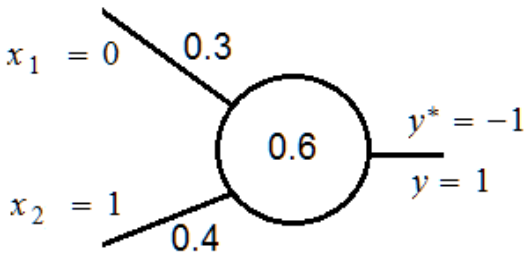
$$w_i(k+1) \leftarrow w_i(k) + \eta \left(y_k - y_k^*\right) x_i(k)$$

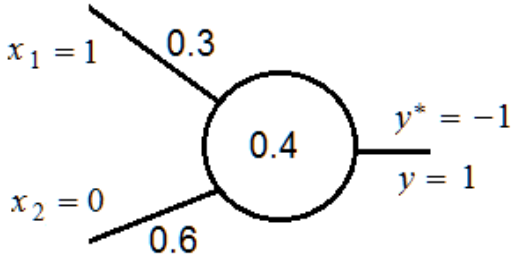
$$w_0 \leftarrow w_0 + \eta \left(y - y^*\right) \cdot x_0 = -0.6 + 0.1 \left(1 - (-1)\right) \cdot 1 = -0.4$$

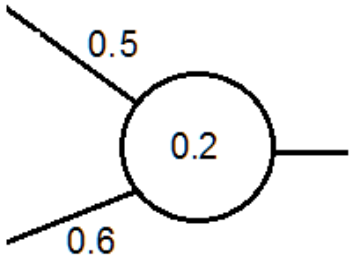
$$w_1 \leftarrow w_1 + \eta \left(y - y^*\right) \cdot x_1 = 0.3 + 0.1 \left(1 - (-1)\right) \cdot 0 = 0.3$$

$$w_2 \leftarrow w_2 + \eta \left(y - y^*\right) \cdot x_2 = 0.4 + 0.1 \left(1 - (-1)\right) \cdot 1 = 0.6$$

Пример обучения нейрона







3. Вход: $(x_1, x_2) = (1, 0)$, выход:
   $y = 1 \Rightarrow y^* = [1 \cdot 0.3 + 0 \cdot 0.6 < 0.4] = -1$ (выходы не совпадают)

$$w_i(k+1) \leftarrow w_i(k) + \eta\,(y_k - y_k^*)\,x_i(k)$$

$$w_0 \leftarrow w_0 + \eta\,(y - y^*) \cdot x_0 = -0.4 + 0.1\,(1 - (-1)) \cdot 1 = -0.2$$

$$w_1 \leftarrow w_1 + \eta\,(y - y^*) \cdot x_1 = 0.3 + 0.1\,(1 - (-1)) \cdot 1 = 0.5$$

$$w_2 \leftarrow w_2 + \eta\,(y - y^*) \cdot x_2 = 0.6 + 0.1\,(1 - (-1)) \cdot 0 = 0.6$$

4. **Нейрон обучен!**

Метод градиентного спуска

- Идея построения перцептрона - минимизация ошибки.
- Перцептронная функция $y^*(x_1, ..., x_d) = \sum_{i=0}^{d} x_i w_i$ должна быть приближена к функции, заданной примерами обучающей выборки: $y = g(x_1, ..., x_d)$.
- Мера ошибки - среднеквадратичное отклонение от целевых значений:

$$E(w_0, ..., w_d) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} (y_k - y^*(x_1(k), ..., x_d(k)))^2$$

- Цель - минимизировать $E(w_0, ..., w_d)$ по $w_0, ..., w_d$.

Метод градиентного спуска

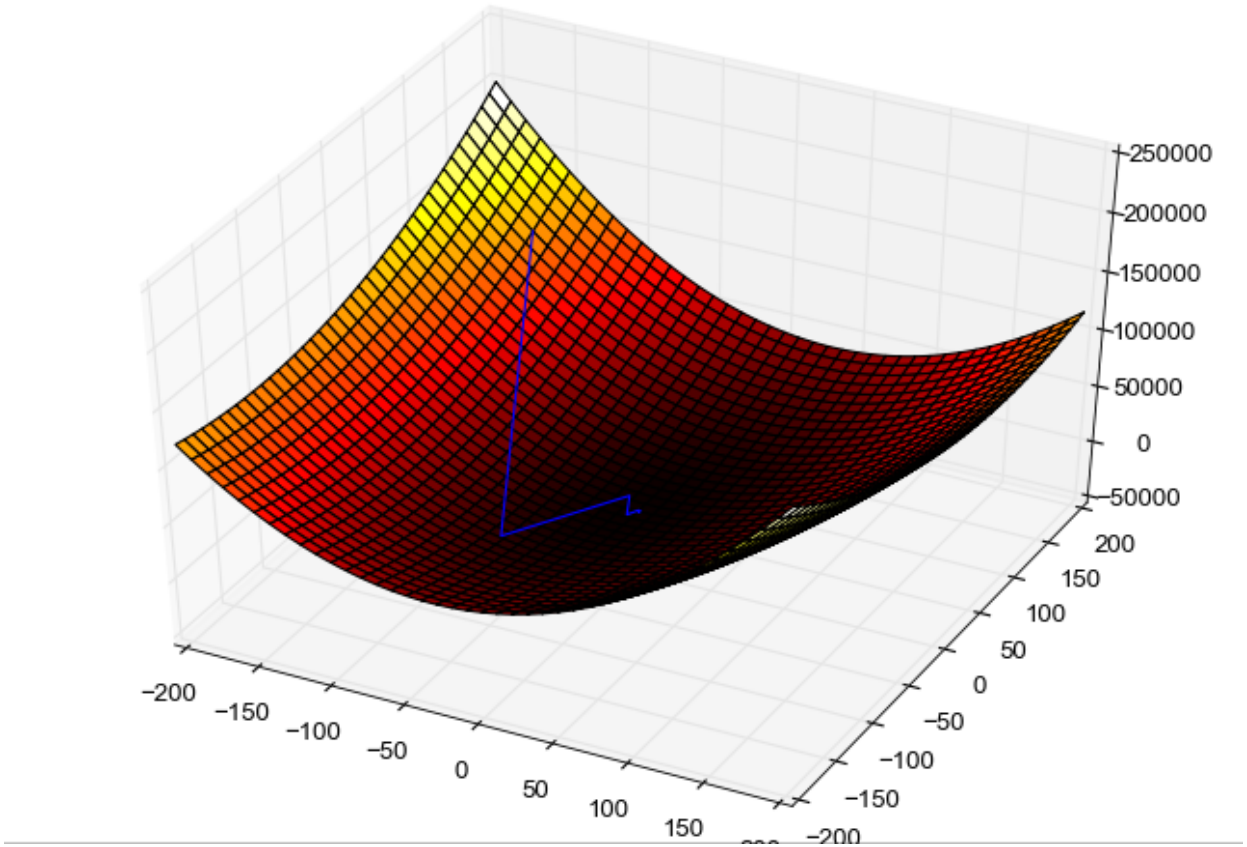
- $E(w_0, ..., w_d)$ - параболическую поверхность с единственным минимумом.
- Двигаемся в направлении, противоположном градиенту

$$-\nabla E(w_0, ..., w_d) = -\left[\frac{\partial E}{\partial w_0}, ..., \frac{\partial E}{\partial w_d}\right]$$

- Коррекция весов:

$$w_i(k+1) \leftarrow w_i(k) - \eta \frac{\partial E}{\partial w_i}$$

Движение к минимуму



Метод градиентного спуска (далее)

- Вычислим $\partial E/\partial w_i$:
- Двигаемся в направлении, противоположном градиенту

$$\frac{\partial E}{\partial w_i} = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial}{\partial w_i}\left(y_k - \sum_{i=0}^{d} x_i(k)w_i\right)^2$$
$$= \sum_{k=1}^{n}\left(y_k - \sum_{i=0}^{d} x_i(k)w_i\right)\left(-x_i(k)\right).$$

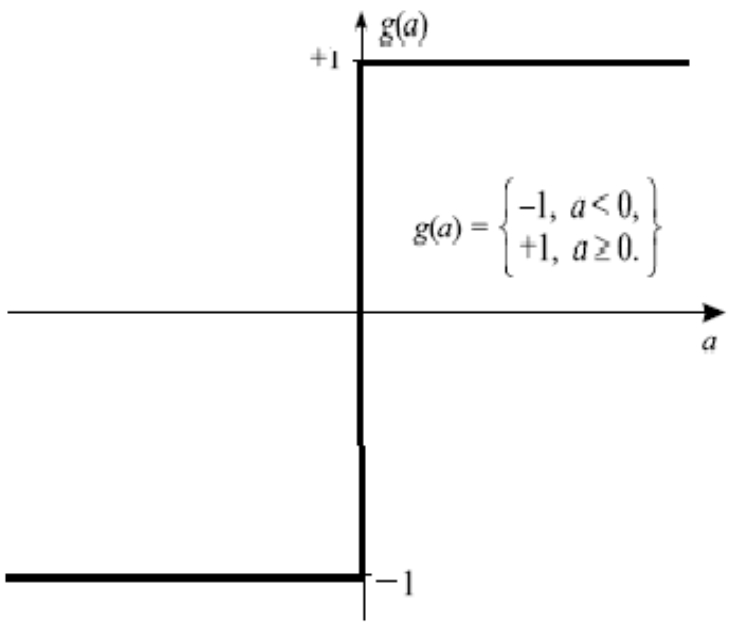
- Коррекция весов:

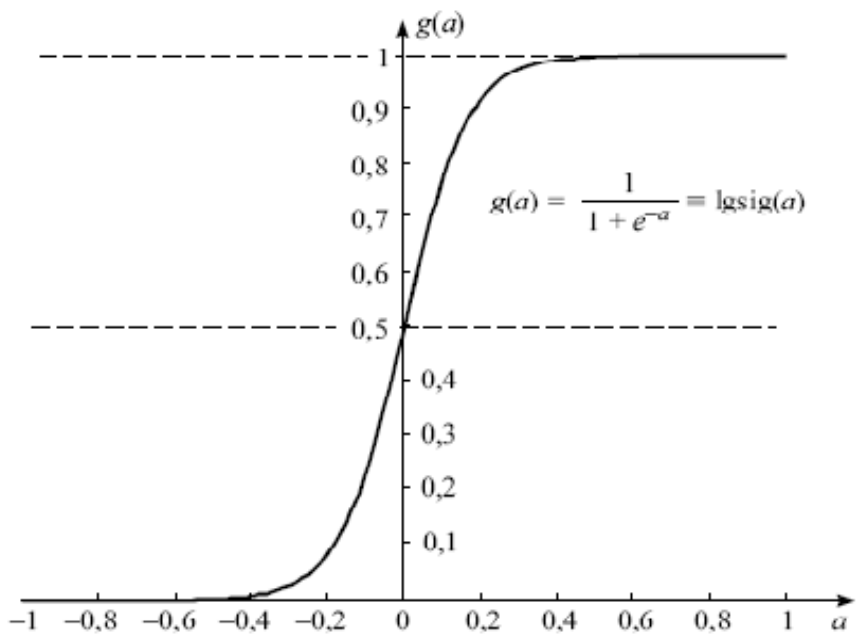
$$w_i(k+1) \leftarrow w_i(k) + \eta\sum_{k=1}^{n}\left(y_k - \sum_{i=0}^{d} x_i(k)w_i\right)x_i(k)$$

Пороговая функция или функция активации

Пороговая функция - **сигмоид**:

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





Пороговая функция или функция активации

- Еще одна пороговая функция - **бисигмоид или гиперб. тангенс**:

$$y(x) = \sigma(x) = \frac{2}{1 + e^{-x}} - 1$$
$$= \tanh(x) = \frac{e^{x} - e^{-x}}{e^{x} + e^{-x}}$$

- Изменяется от -1 до 1.

Пороговая функция и перцептрон

- Общая формула работы перцептрона с учетом пороговой функции сигмоида

$$y^*(x_1, ..., x_d) = \frac{1}{1 + e^{-\sum_{i=0}^{d} x_i w_i}}.$$

- Сигмоид обладает важным преимуществом: от него легко считать производную: $\sigma'(x) = \sigma(x)(1 - \sigma(x))$
- Гипербол. тангенс еще проще: $\sigma'(x) = 1 - \sigma^2(x)$
- Коррекция весов:

$$w_i(k+1) \leftarrow w_i(k) + \eta y^*(1 - y^*)(y_k - y^*)x_i(k)$$

Возможности перцептрона

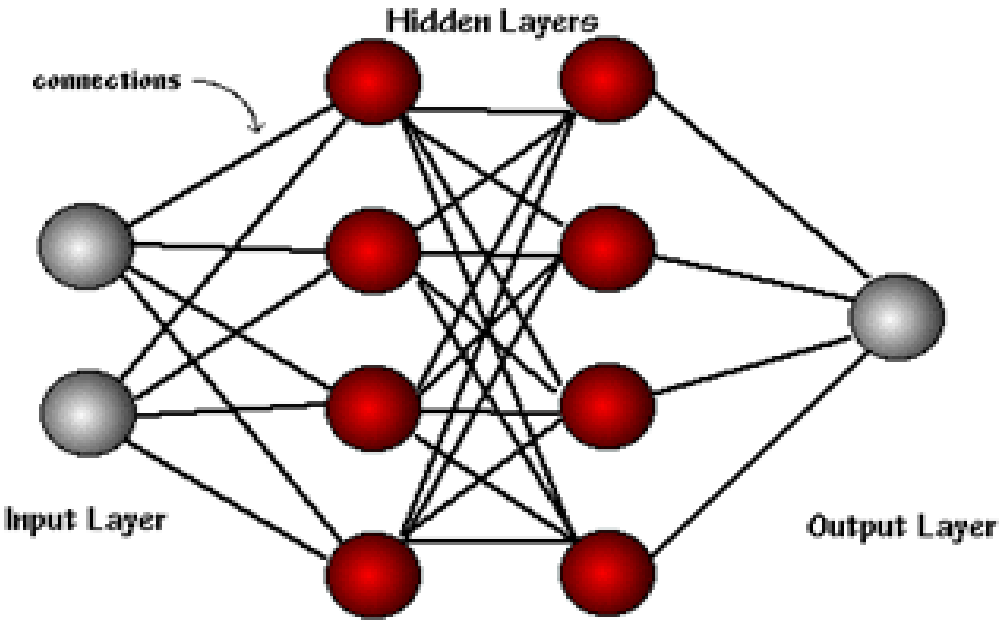
- В 1973 г. Дуда и Харт доказали теорему сходимости перцептрона: для любых **линейно разделяемых** входных данных правило обучения находит решение за конечное число шагов.
- Многие задачи не могут быть решены.
- Добавление нейронов в перцептрон не решает проблему.

Что делать?

Многослойная сеть

Многослойный перцептрон или нейронная сеть

Многослойный перцептрон



Теорема Колмогорова

Теорема Колмогорова по сути: для решения любой задачи возможно построить нейронную сеть.

Формально: *Каждая непрерывная функция d переменных, заданная на единичном кубе d-мерного пространства, представима в виде*

$$f(x_1, ..., x_d) = \sum_{i=1}^{2d+1} h_i \left(\sum_{j=1}^{n} \varphi_i^j(x_j) \right),$$

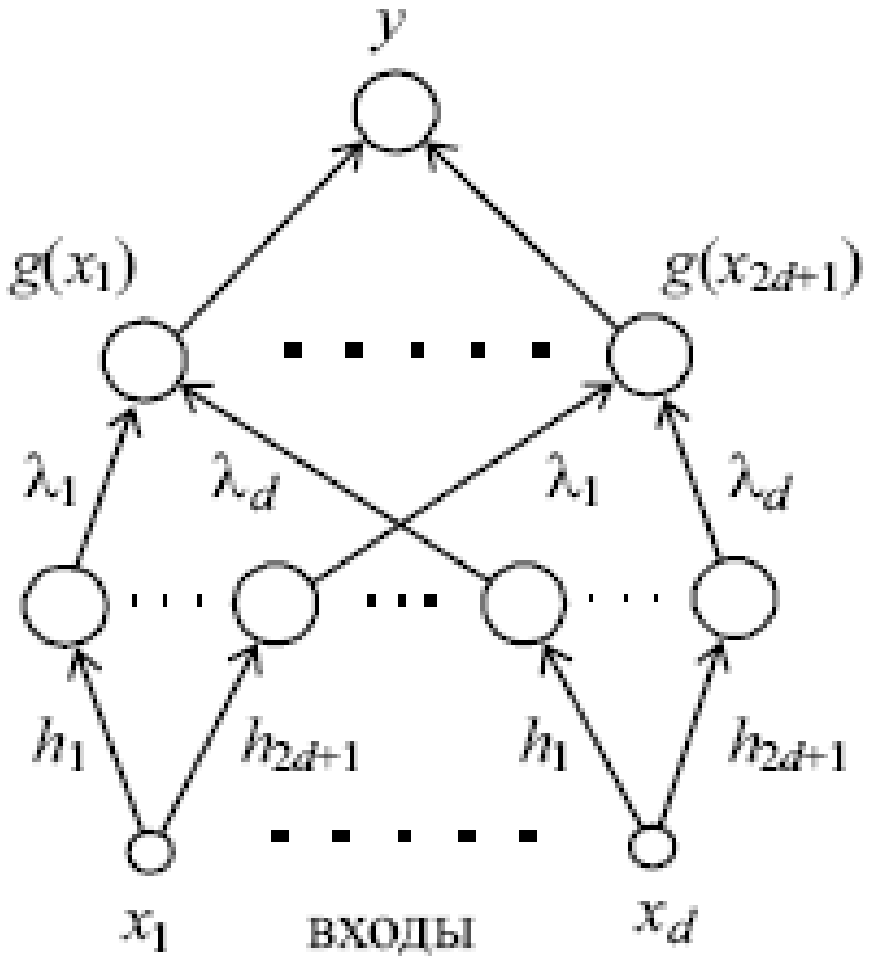
где h_i – непрерывные негладкие функции; $\varphi_i^j(x_j)$ - стандартные функции, не зависящие от вида f.

Теорема Колмогорова

Теорема Колмогорова по простому:

Любое отображение входов нейронной сети в ее выходы может быть реализовано трехслойной нейронной сетью прямого распространения с $d(2d+1)$нейронами на первом и $2d+1$на втором слое.

Теорема Колмогорова в терминах нейронных сетей



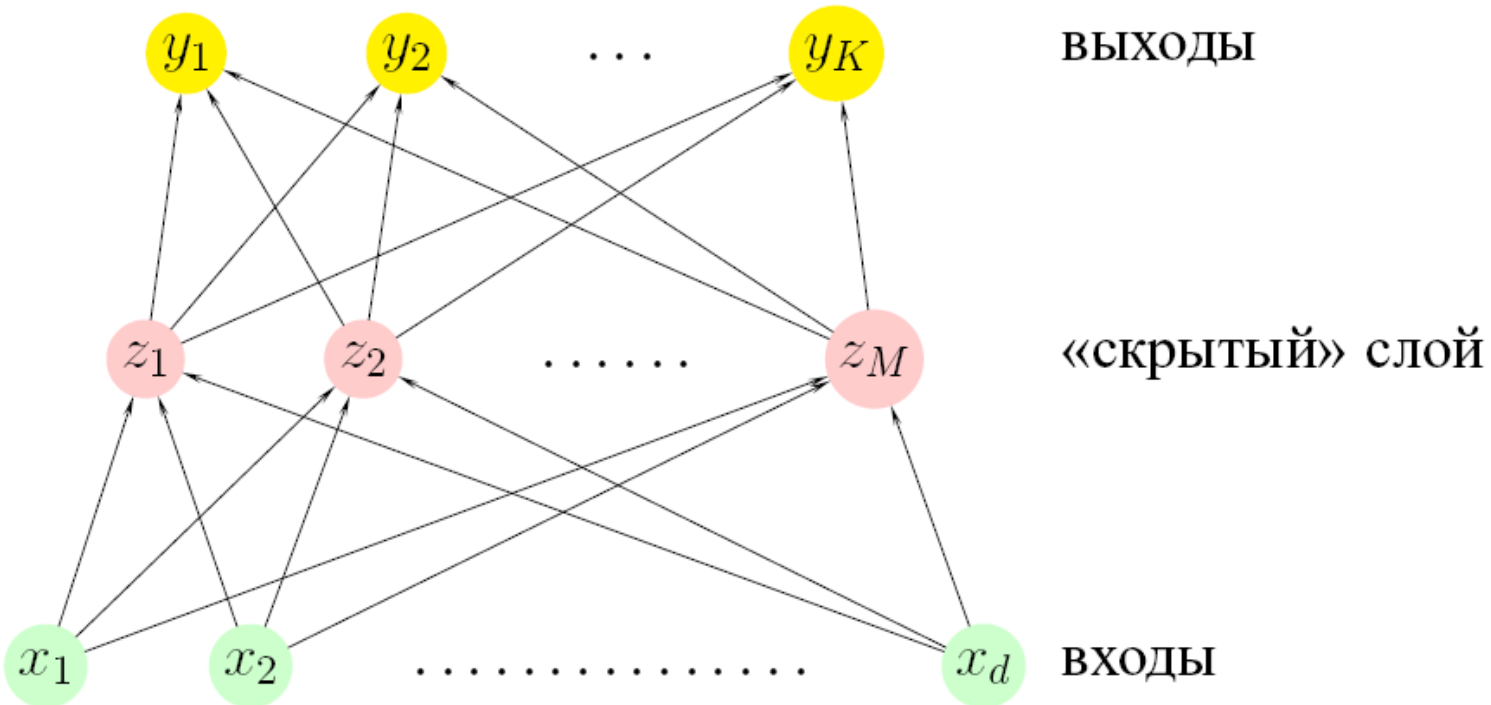
«Универсальная теорема об аппроксимации»

Пусть σ - ограниченная, не постоянная, монотонно возрастающая, непрерывная функция. Тогда для любой непрерывной функции $f^* : [0,1]^d \to \mathbb{R}$, для любого $\varepsilon > 0$ существуют M, α_m $(m = 1, 2, ..., M)$, w_{mj} $(m = 1, 2, ..., \ j = 0, 2, ..., d)$, такие, что функция

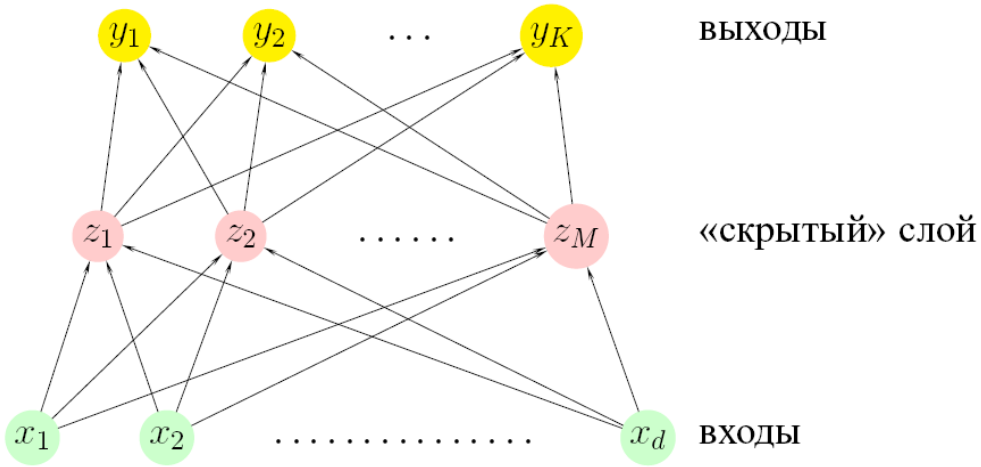
$$f(x_1, ..., x_d) = \sum_{i=1}^{M} \alpha_m \sigma \left(w_{m0} + \sum_{j=1}^{d} w_{mj} x_j \right)$$

является ε-аппроксимацией функции f, т.е. $|f(x) - f^*(x)| \leq \varepsilon$.

Как работает сеть?



Как работает сеть?



$$z_m = \sigma\left(w_{0m} + w_{1m}x_1 + ... + w_{dm}x_d\right),\ m = 1, ..., M$$
$$t_k = v_{0k} + v_{1k}z_1 + ... + v_{Mk}z_M,\ k = 1, ..., K$$
$$y_k = f_k(x_1, ..., x_d) = g_k(t_1, ..., t_K),\ k = 1, ..., K$$

Это - прямое распространение (forward propagation)

Сеть для классификации с K классами

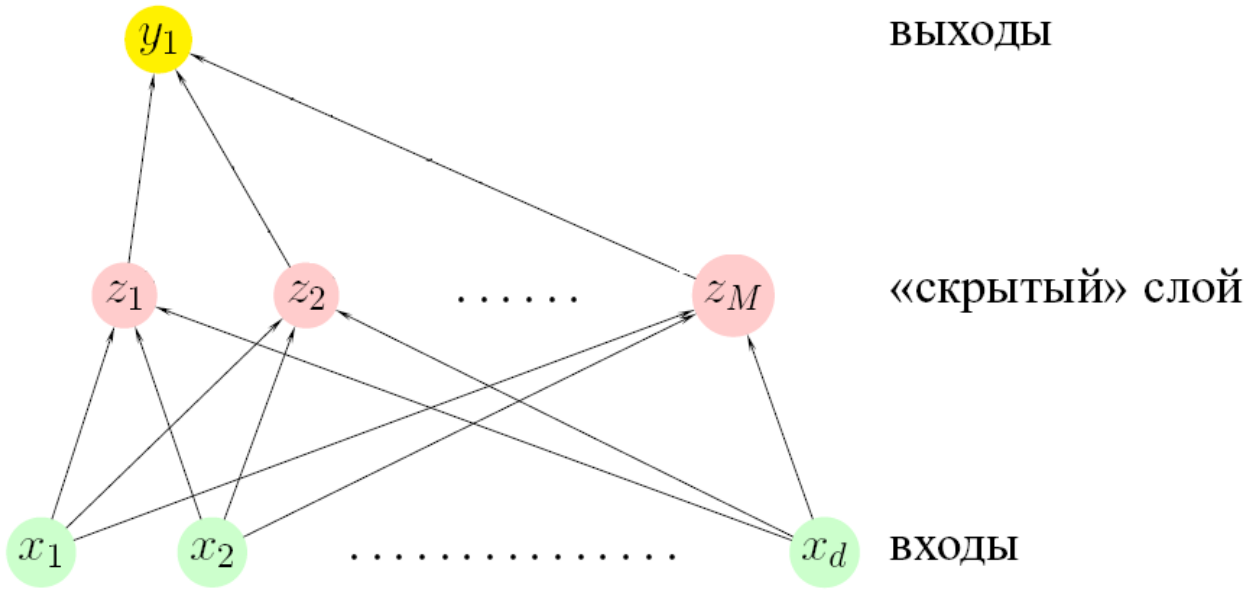
- K выходов: каждый выход моделирует вероятность данного класса
- $z_m = \sigma\left(w_{0m} + w_{1m}x_1 + ... + w_{dm}x_d\right),\ m = 1, ..., M$
- $t_k = v_{0k} + v_{1k}z_1 + ... + v_{Mk}z_M,\ k = 1, ..., K$
- g_k тождественная функция или *softmax*-функция (как в логистической регрессии)

$$g_k(t_1, ..., t_K) = \frac{\exp\left(t_k\right)}{\sum_{l=1}^{K}\exp\left(t_l\right)} = \frac{\exp\left(v_{0k} + v_{1k}z_1 + ... + v_{Mk}z_M\right)}{\sum_{l=1}^{K}\exp\left(v_{0l} + v_{1l}z_1 + ... + v_{Ml}z_M\right)}$$

- $f(x) = \arg\max_k g_k(x)$

Сеть для регрессии

Один выход



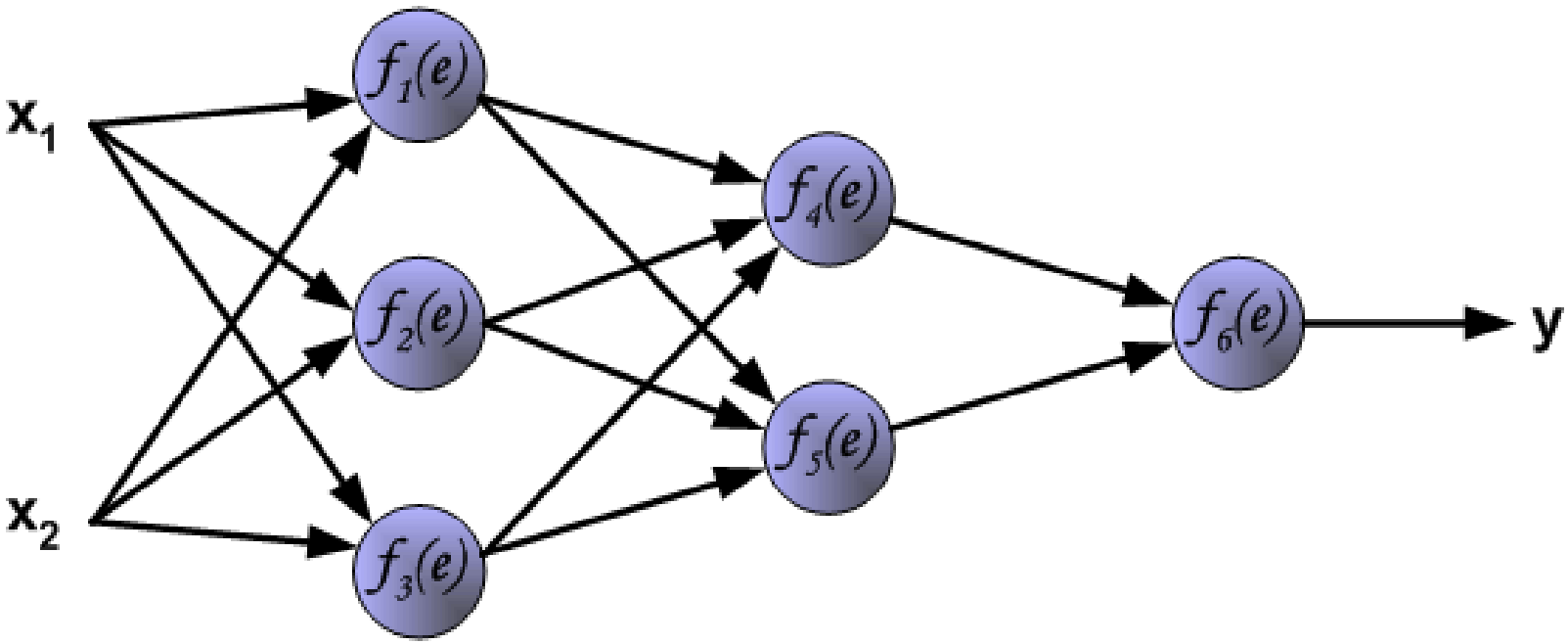
$z_m = \sigma\left(w_{0m} + w_{1m}x_1 + ... + w_{dm}x_d\right),\ m = 1, ..., M$

$t = v_{0k} + v_{1k}z_1 + ... + v_{Mk}z_M,\ k = 1, ..., K$

$y = f(x_1, ..., x_d) = g(t) = g(v_{0k} + v_{1k}z_1 + ... + v_{Mk}z_M)$

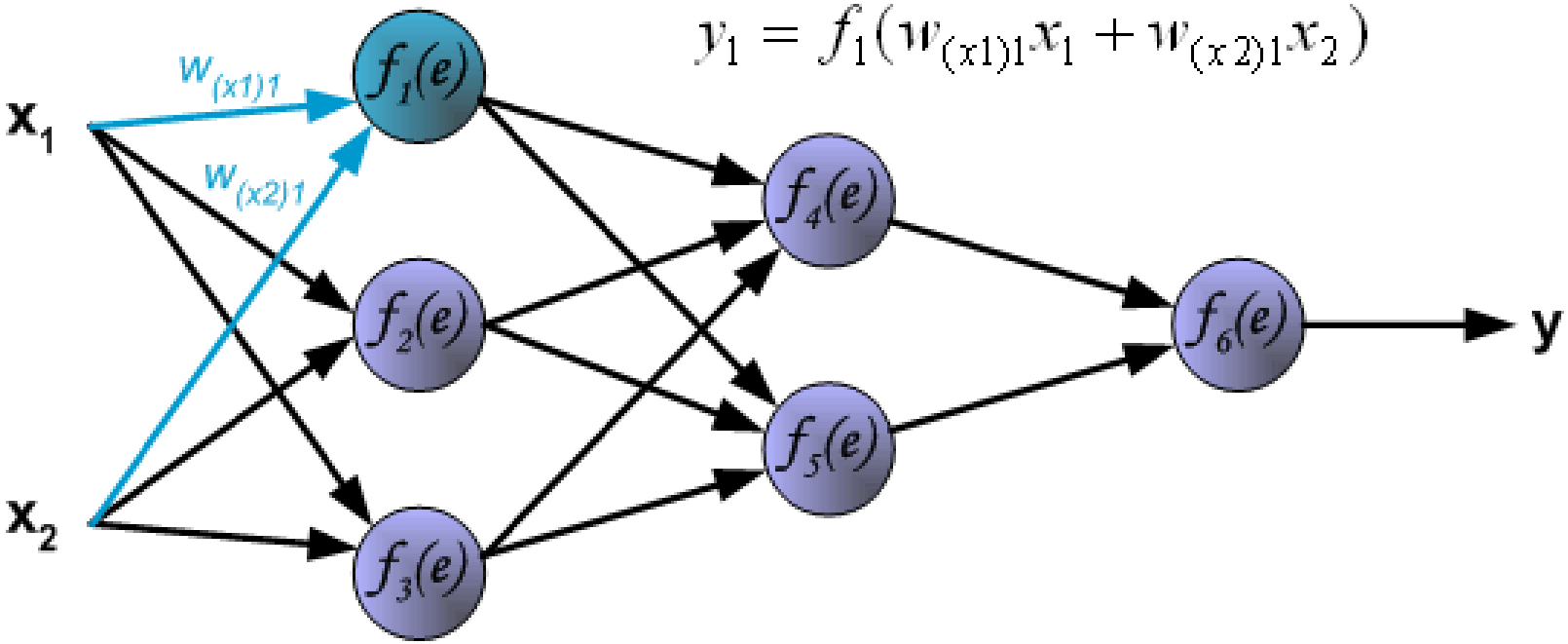
Функция g на выходе - тождественная функция

Прямое распространение

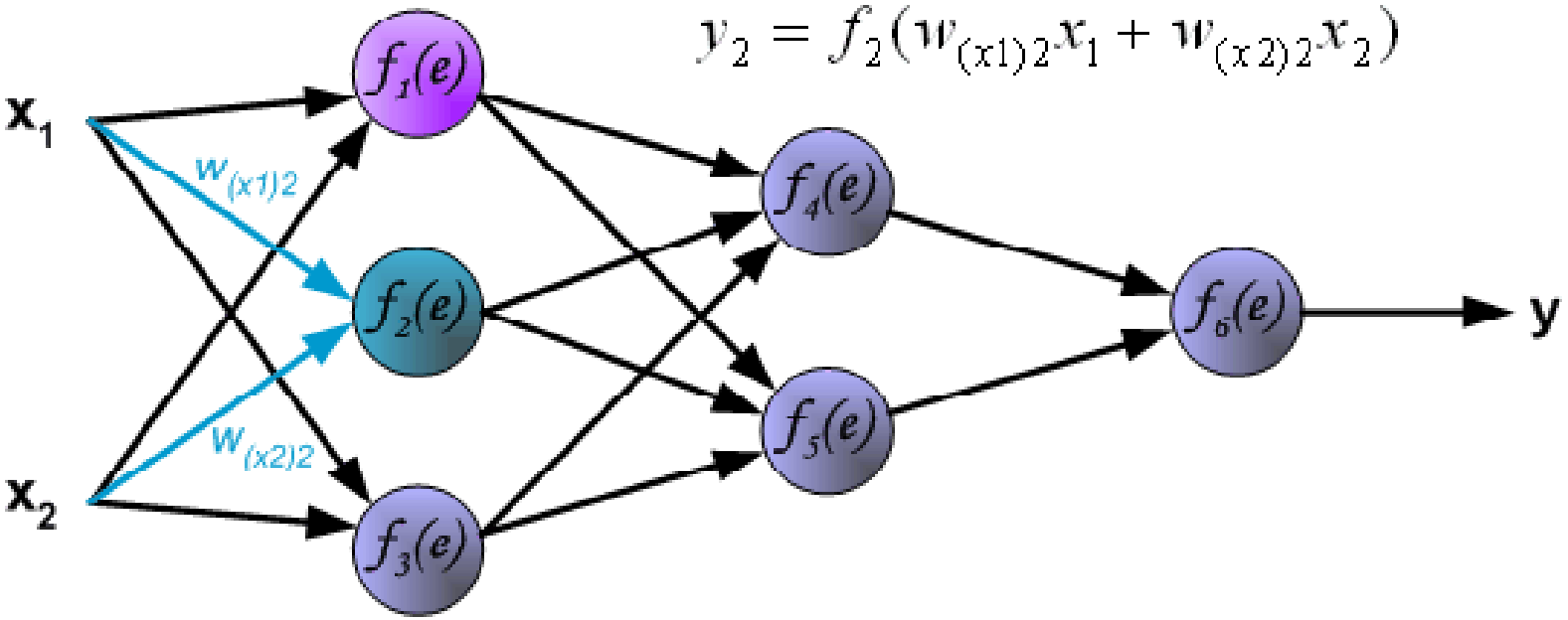


http://galaxy.agh.edu.pl/~vlsi/AI/backp_t_en/backprop.html

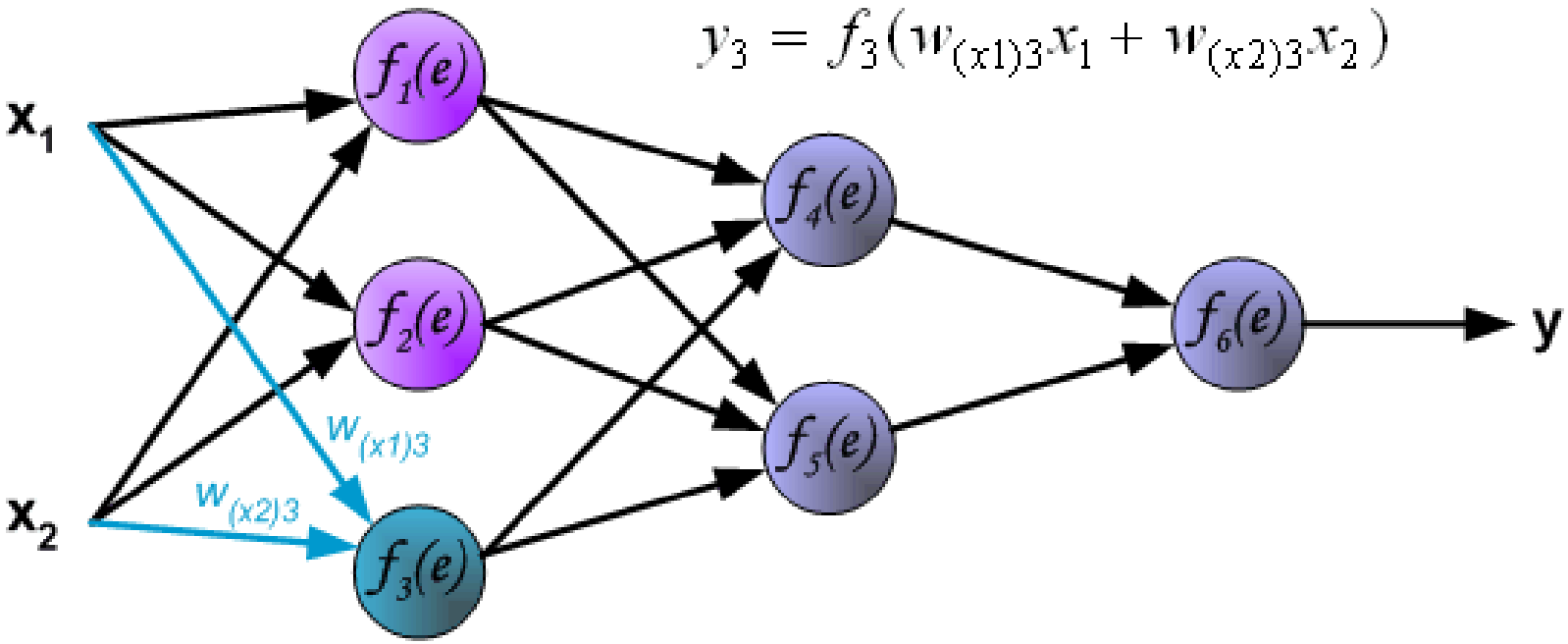
Прямое распространение



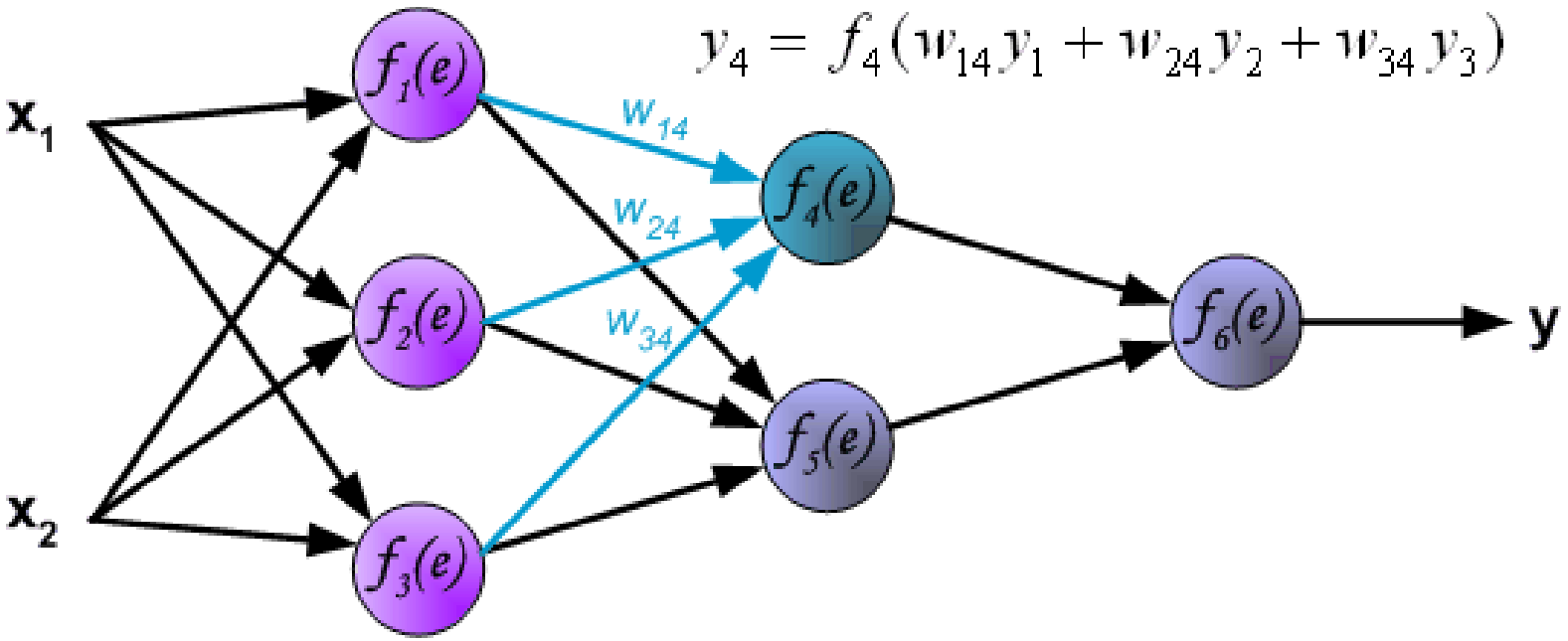
Прямое распространение



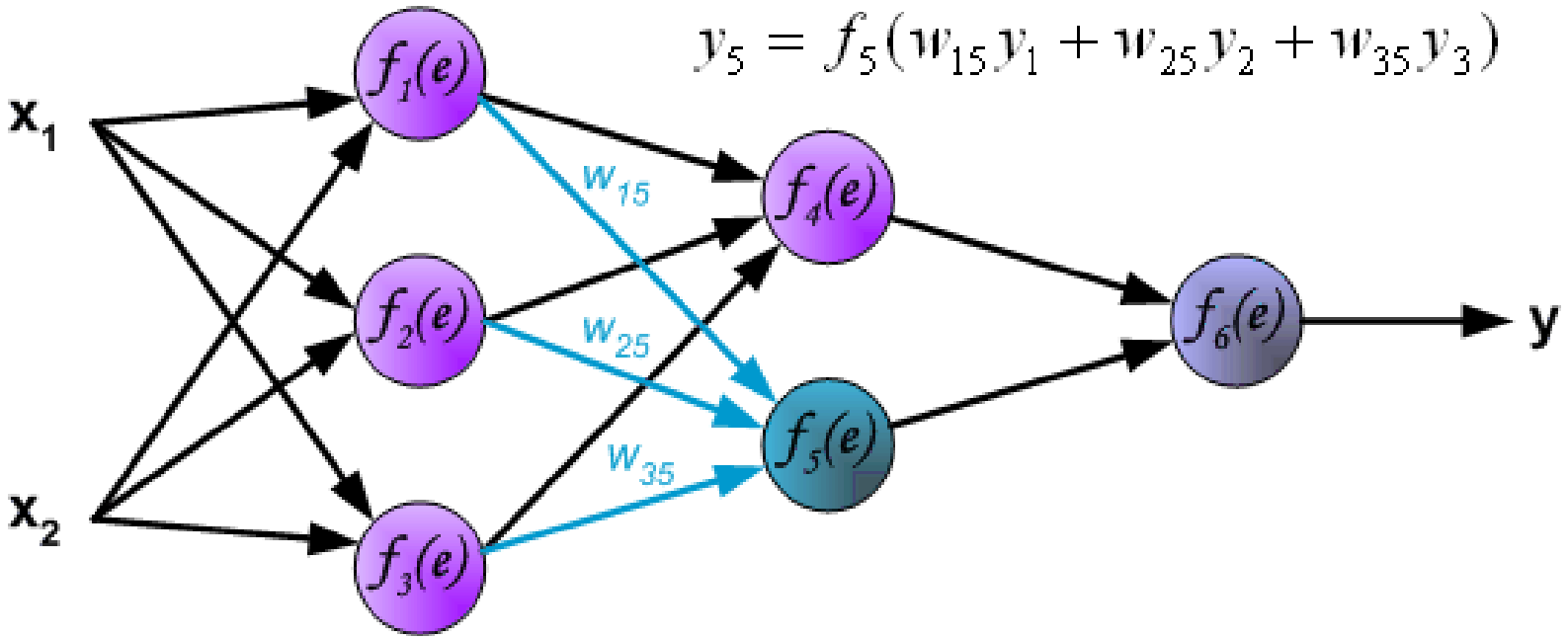
Прямое распространение



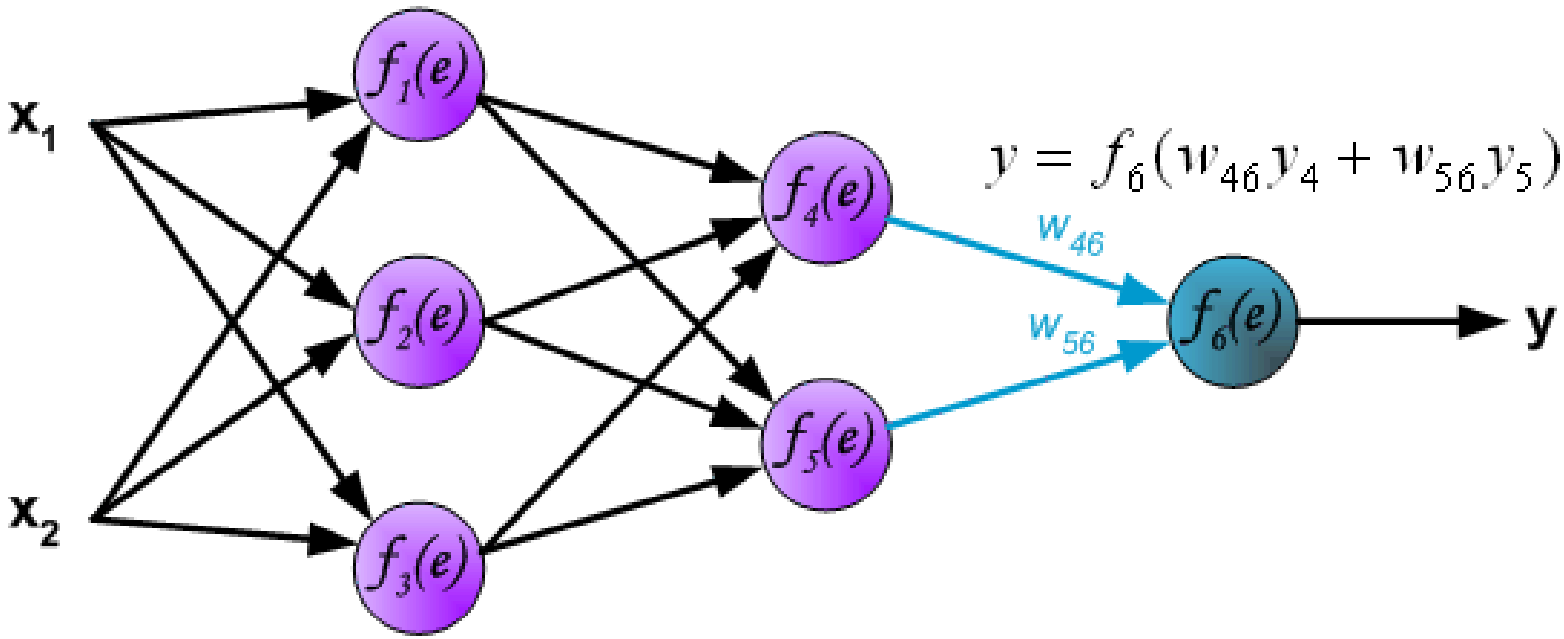
Прямое распространение



Прямое распространение



Прямое распространение



Алгоритм обратного распространения ошибки

- **Входы сети**: $x_1, \ldots, x_m$
- **Вес**, стоящий на ребре, соединяющем i-ый и j-ый узлы: w_{ij}
- **Выход** i-го узла сети: y_i^*
- **Целевые значения в обучающей выборке**: $y_1, \ldots, y_n$
- **Функция ошибки**:

$$E(\{w_{ij}\}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{k \in \text{Выходы}} \left(y_k^{(i)} - y_k^*(x_1(i), \ldots, x_m(i)) \right)^2$$

Алгоритм обратного распространения ошибки (модификация весов)

Основная идея: **градиентный метод:**

$$\triangle w_{ij} = -\eta \frac{\partial E_s(\{w_{ij}\})}{dw_{ij}},$$

где

$$E_s(\{w_{ij}\}) = \frac{1}{2} \sum_{k \in \text{Выходы}} \left(y_k^{(d)} - y_k^*(d) \right)^2$$

Как подсчитать эту производную?

Как подсчитать эту производную?

1. Сначала $j \in$Выходы: вес w_{ji} входит в перцептрон последнего (выходного) слоя.
2. Каждый нейрон расчитывает взвешенную сумму своих входов:
$$a_j = \sum_i w_{ji} z_i,$$
здесь z_i - входы нейрона и соответственно выходы предыдущего слоя нейронов.
3. Выход нейрона i – это преобразование суммы a_i пороговой функцией g: $z_i = g(a_i)$
4. $$\frac{\partial E_s}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial E_s}{\partial a_j}\frac{\partial a_j}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial E_s}{\partial a_j}\frac{\partial \sum_i w_{ji} z_i}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial E_s}{\partial a_j} z_i = \delta_j z_i.$$
δ_j - значение ошибки.

Значение ошибки (дельта) для каждого слоя

1. Для выходного слоя

$$\delta_k = \frac{\partial E_s}{\partial a_k} = \left| \begin{array}{c} a_k = \sum_j w_{jk} z_j \\ y_k = f(a_k) \end{array} \right| = \frac{\partial E_s}{\partial y_k} \frac{\partial y_k}{\partial a_k}.$$

2. $\partial y_k / \partial a_k$ - производная пороговой функции $f'(a) = f(a)(1 - f(a))$.
3. $\partial E_s / \partial y_k$ - производная от уже известной функции

$$E_s(\{w_{ij}\}) = \frac{1}{2} \sum_{k \in \text{Выходы}} \left(y_k^{(d)} - y_k^*(d) \right)^2,$$

которая равна $y_k^{(d)} - y_k^*(d)$.

4. Итог

$$\delta_k = f'(y_k^{(d)} - y_k^*(d))$$

Ошибка для промежуточного слоя

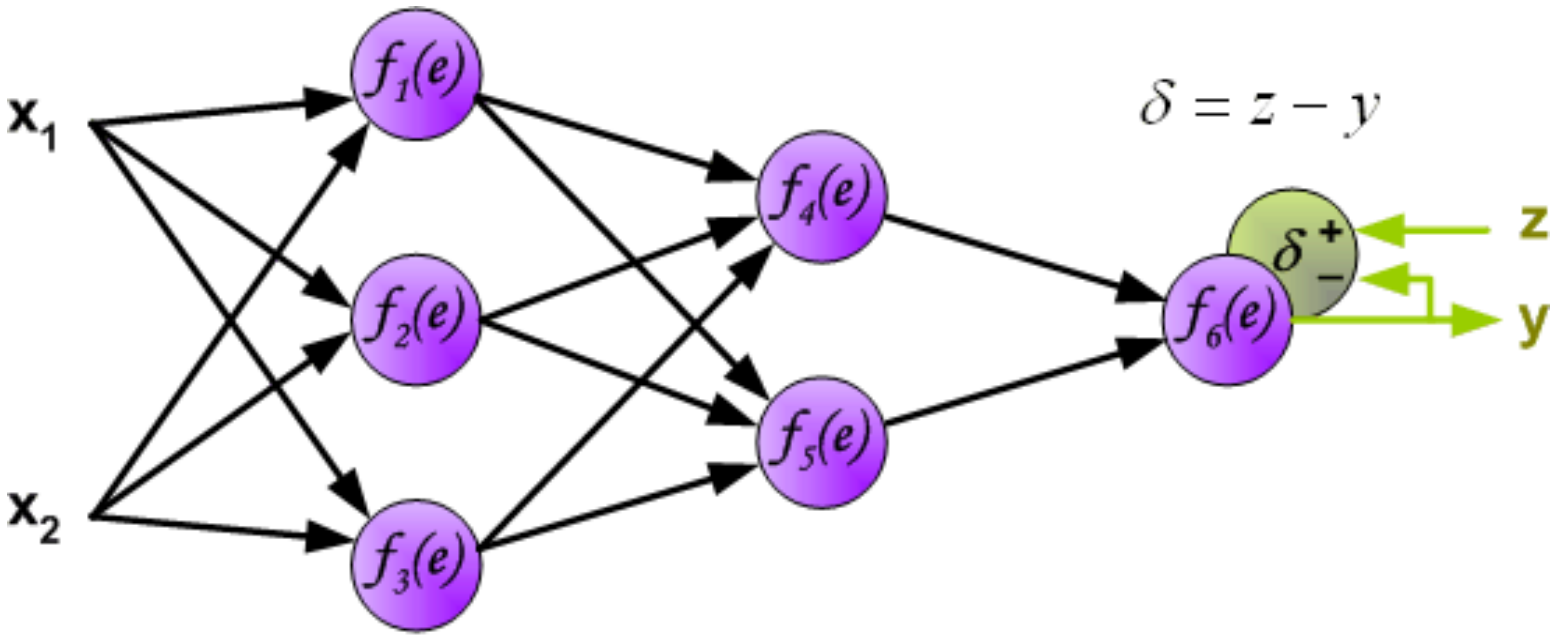
Аналогично:

$$\delta_j = f'(a_j) \sum_k \delta_k w_{jk}$$

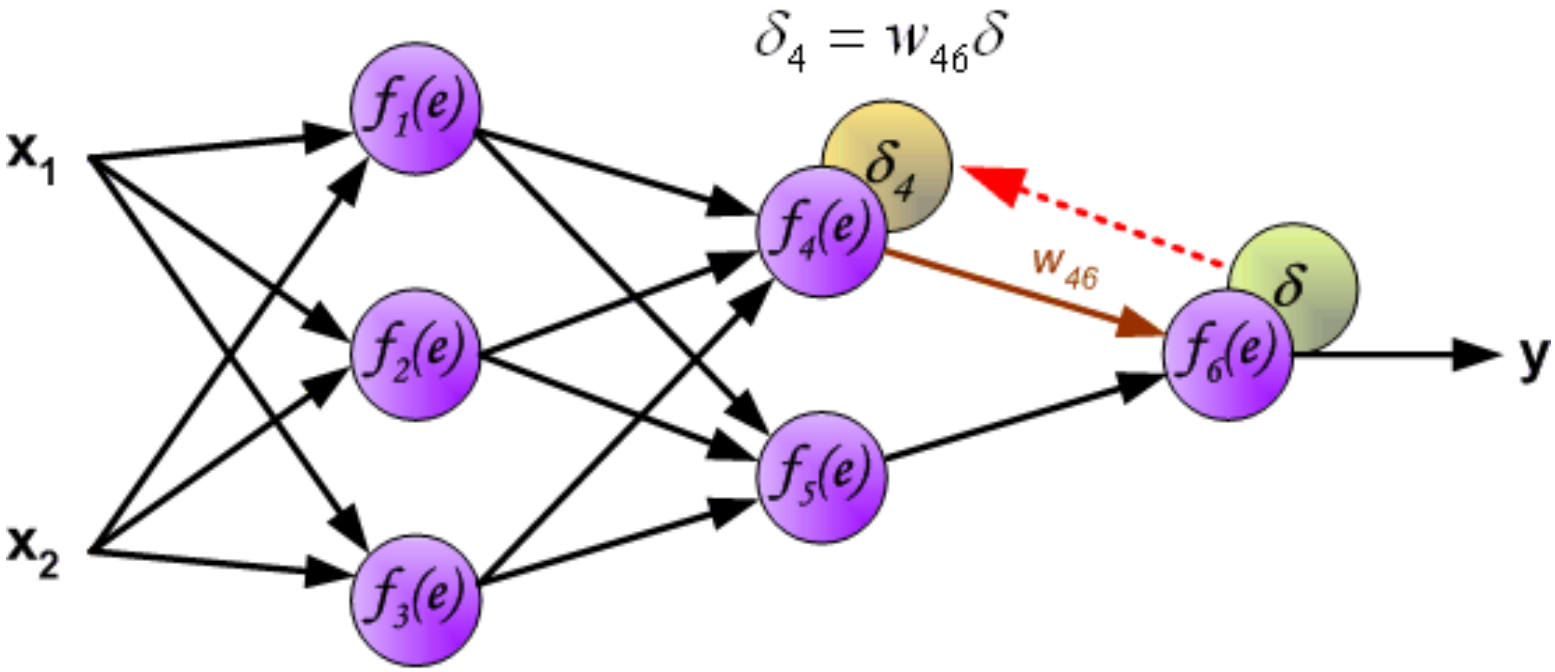
Здесь суммирование происходит по всем k, к которым нейрон j посылает сигнал

Ошибка на каждом слое вычисляется рекурсивно через значения ошибки на предыдущих слоях: коррекция ошибки распространяется обратно по нейронной сети

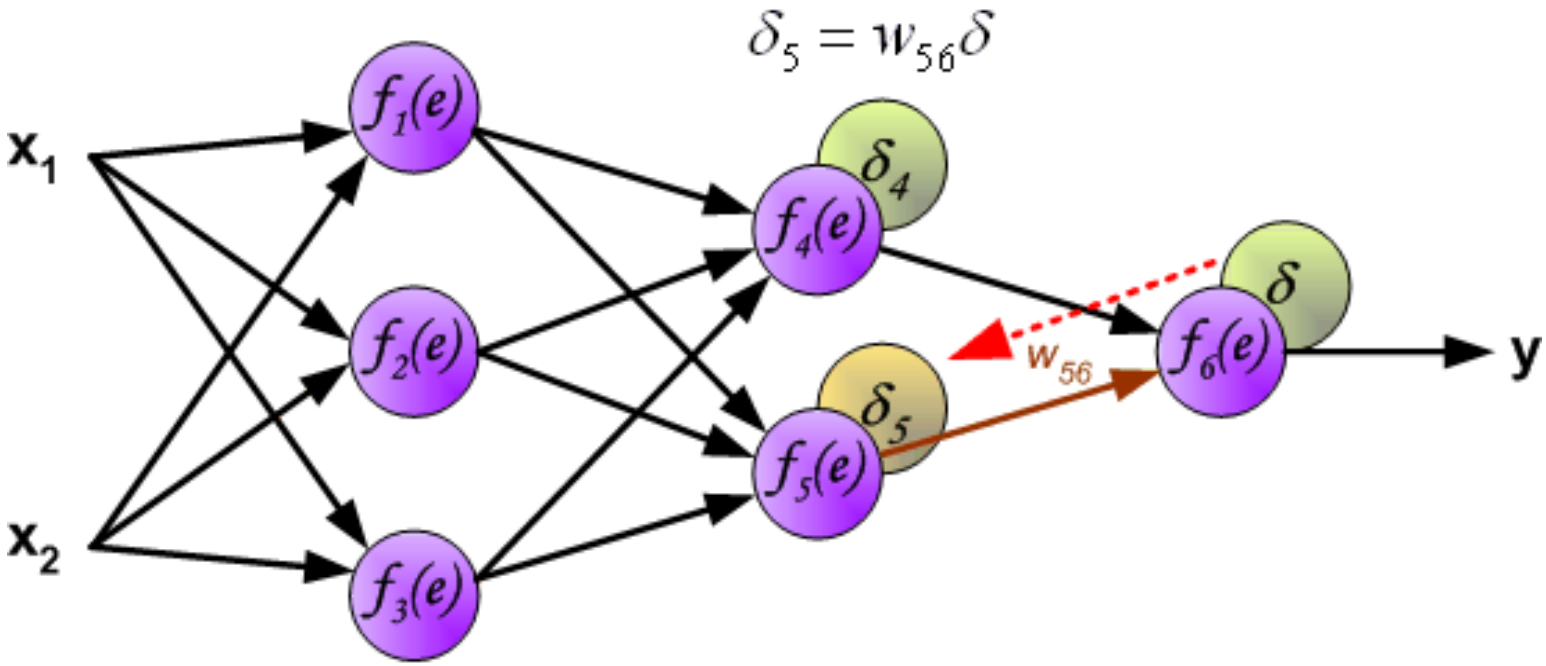
Алгоритм обратного распространения ошибки



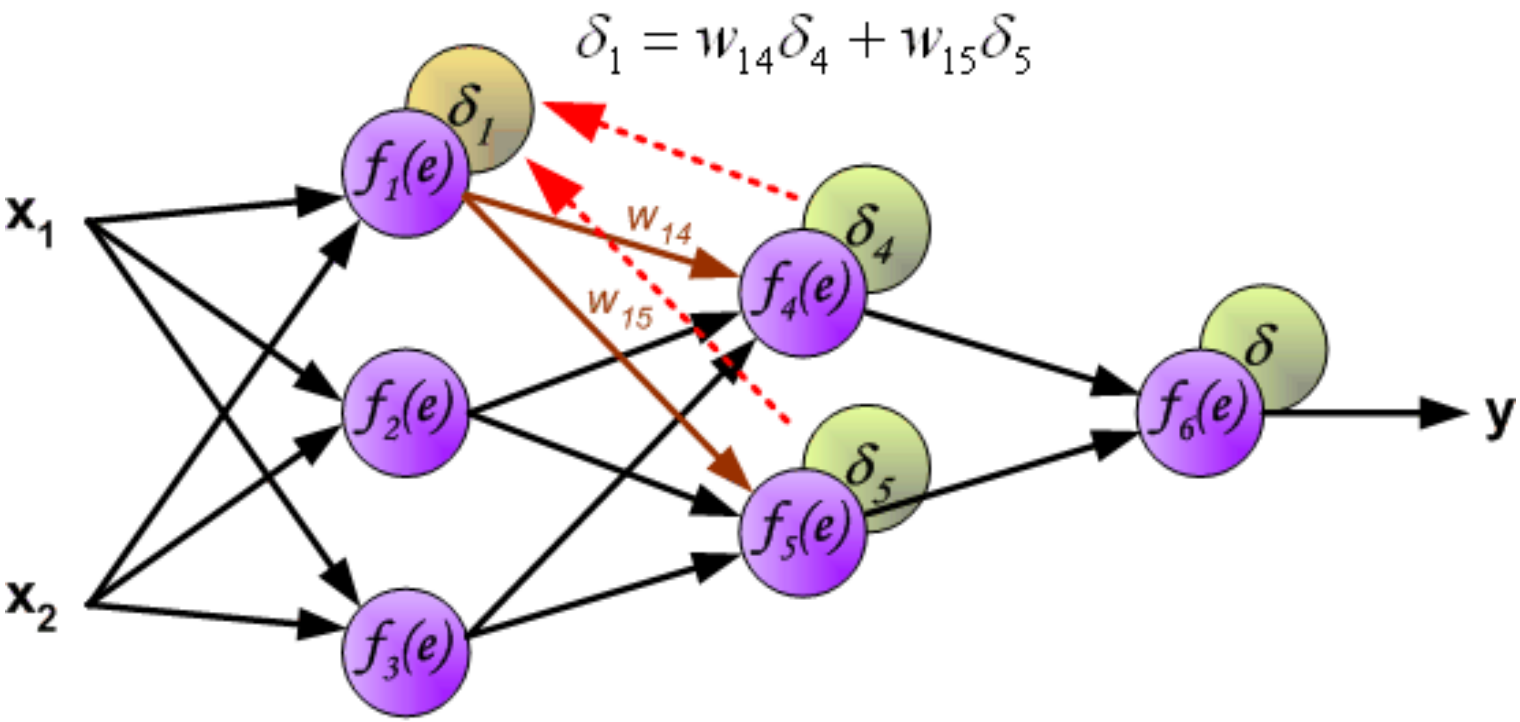
Алгоритм обратного распространения ошибки



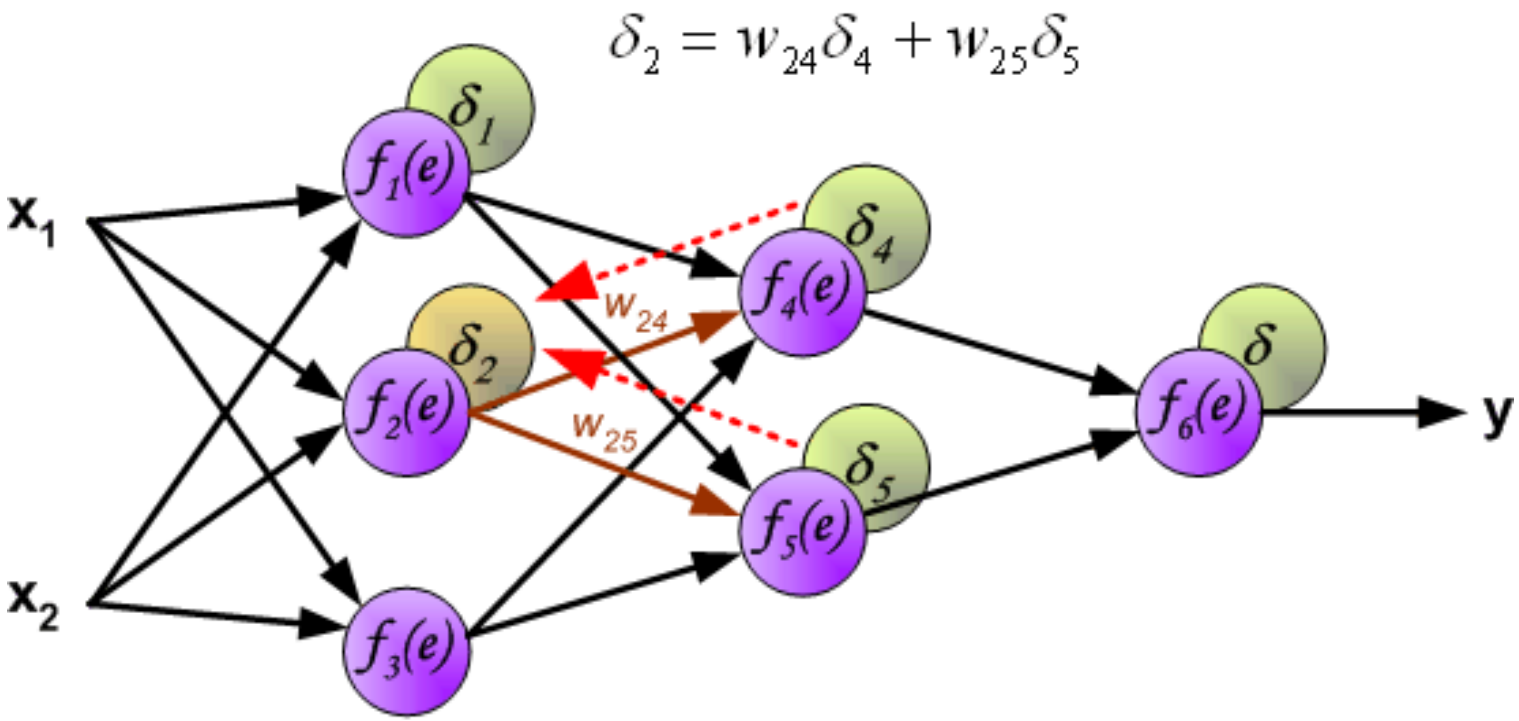
Алгоритм обратного распространения ошибки



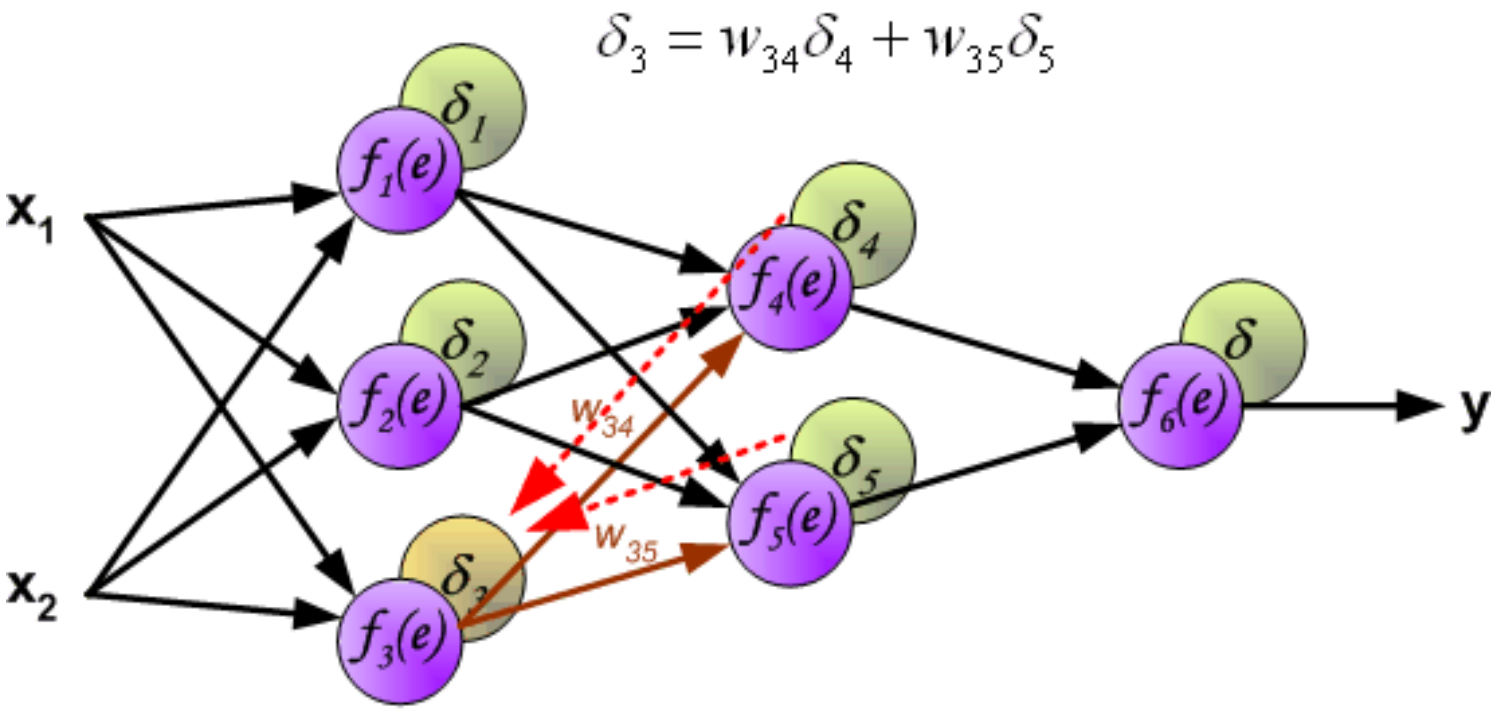
Алгоритм обратного распространения ошибки



Алгоритм обратного распространения ошибки



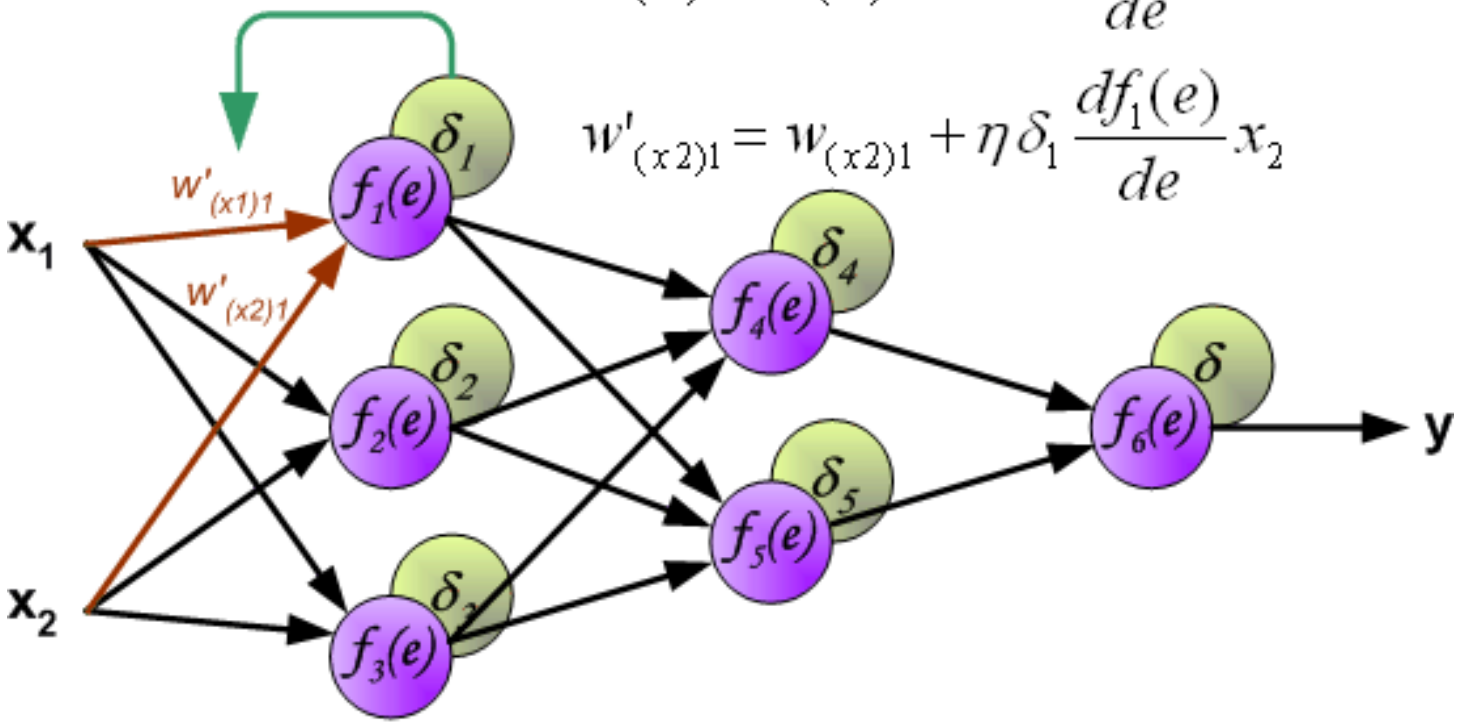
Алгоритм обратного распространения ошибки



Алгоритм обратного распространения ошибки

$$w'_{(x1)1} = w_{(x1)1} + \eta \delta_1 \frac{df_1(e)}{de} x_1$$

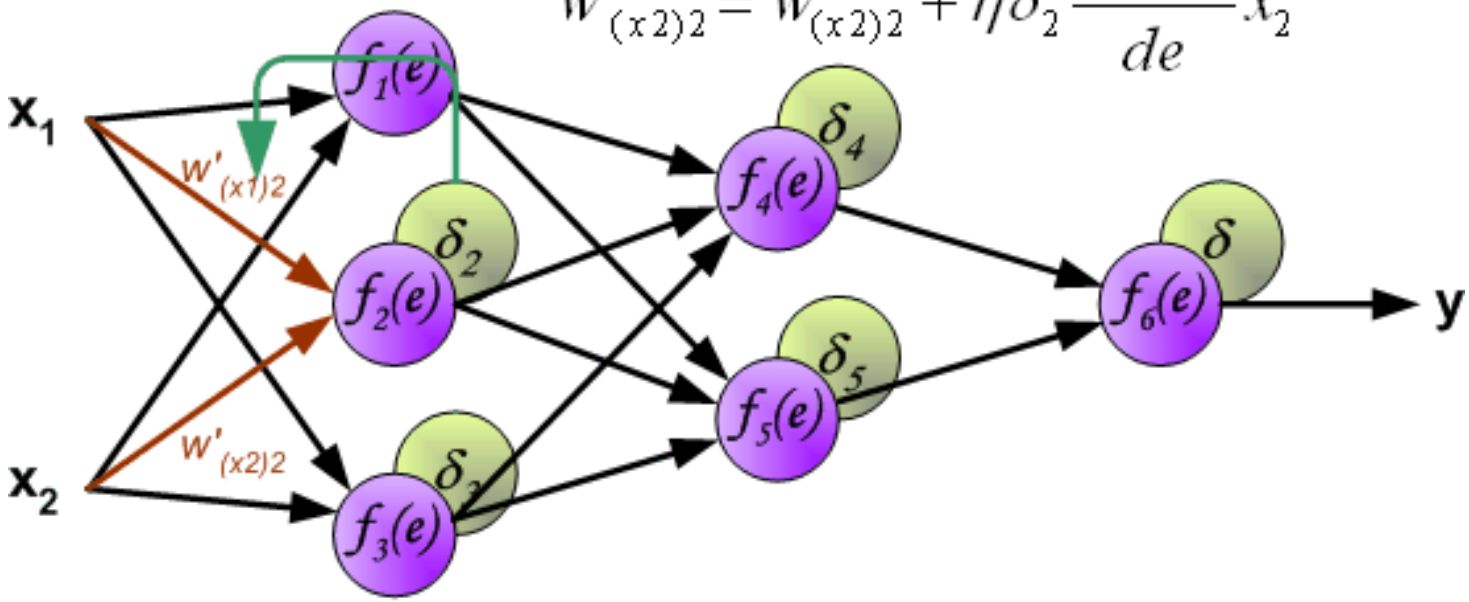
$$w'_{(x2)1} = w_{(x2)1} + \eta \delta_1 \frac{df_1(e)}{de} x_2$$



Алгоритм обратного распространения ошибки

$$w'_{(x1)2} = w_{(x1)2} + \eta \delta_2 \frac{df_2(e)}{de} x_1$$

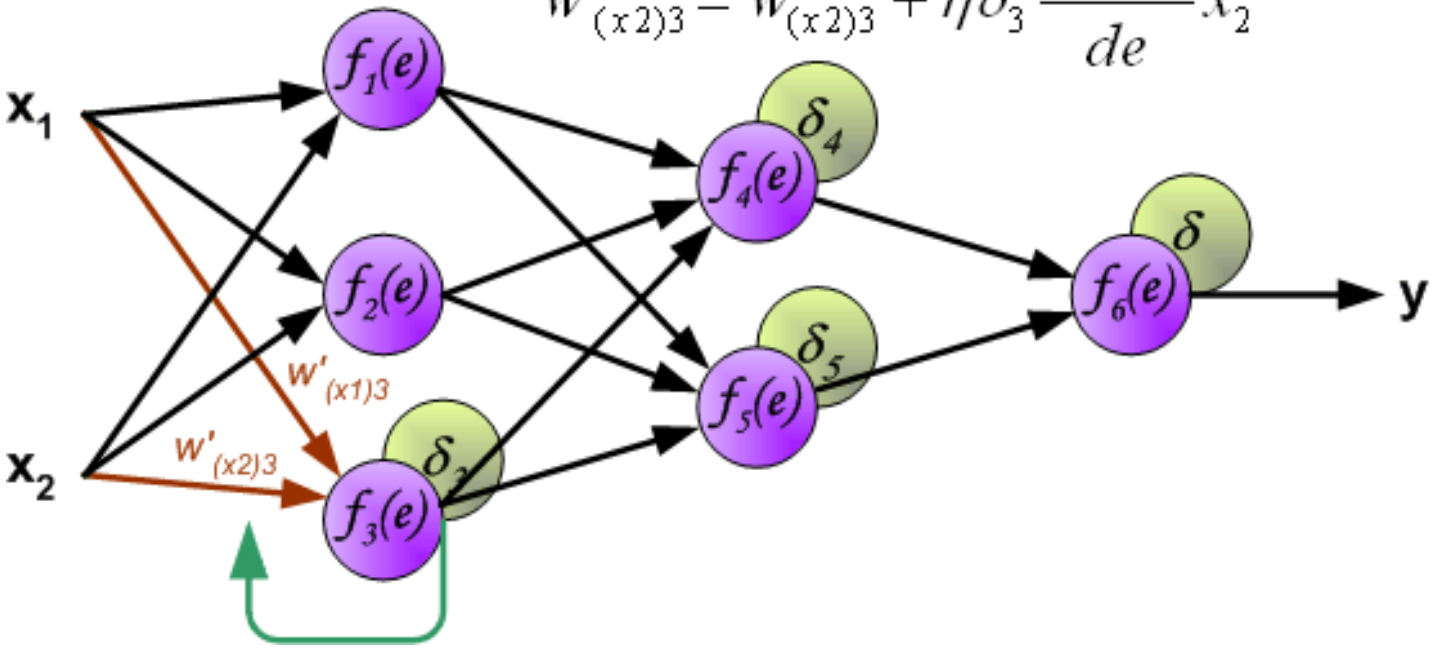
$$w'_{(x2)2} = w_{(x2)2} + \eta \delta_2 \frac{df_2(e)}{de} x_2$$



Алгоритм обратного распространения ошибки

$$w'_{(x1)3} = w_{(x1)3} + \eta \delta_3 \frac{df_3(e)}{de} x_1$$

$$w'_{(x2)3} = w_{(x2)3} + \eta \delta_3 \frac{df_3(e)}{de} x_2$$

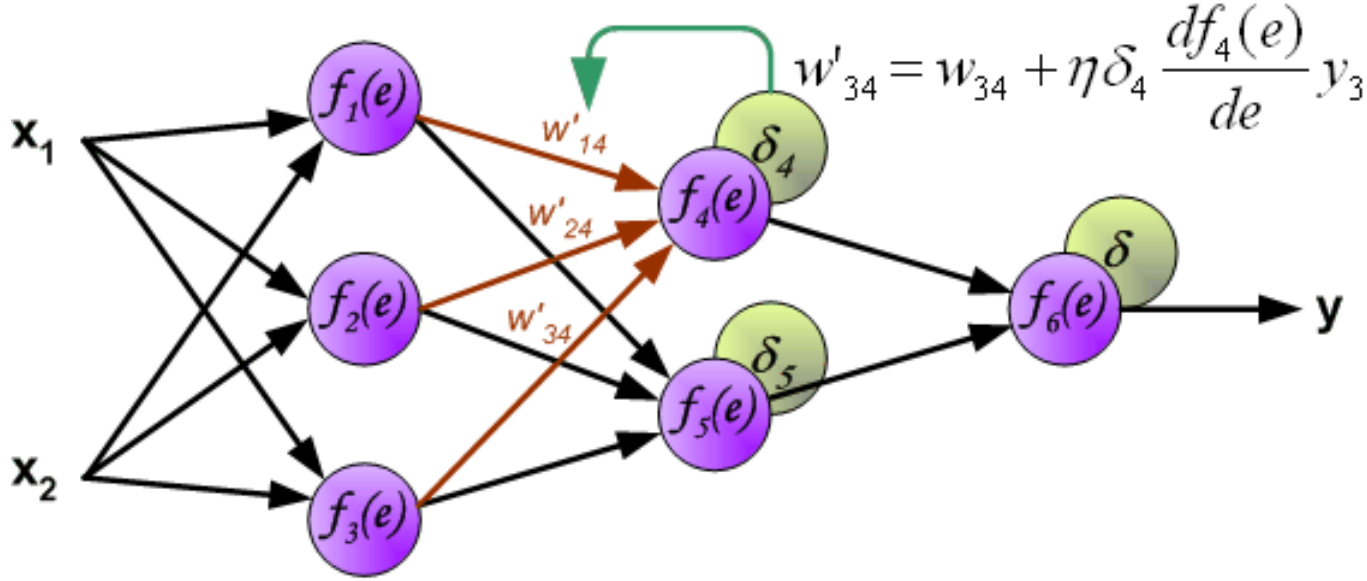


Алгоритм обратного распространения ошибки

$$w'_{14} = w_{14} + \eta\delta_4 \frac{df_4(e)}{de} y_1$$

$$w'_{24} = w_{24} + \eta\delta_4 \frac{df_4(e)}{de} y_2$$

$$w'_{34} = w_{34} + \eta\delta_4 \frac{df_4(e)}{de} y_3$$

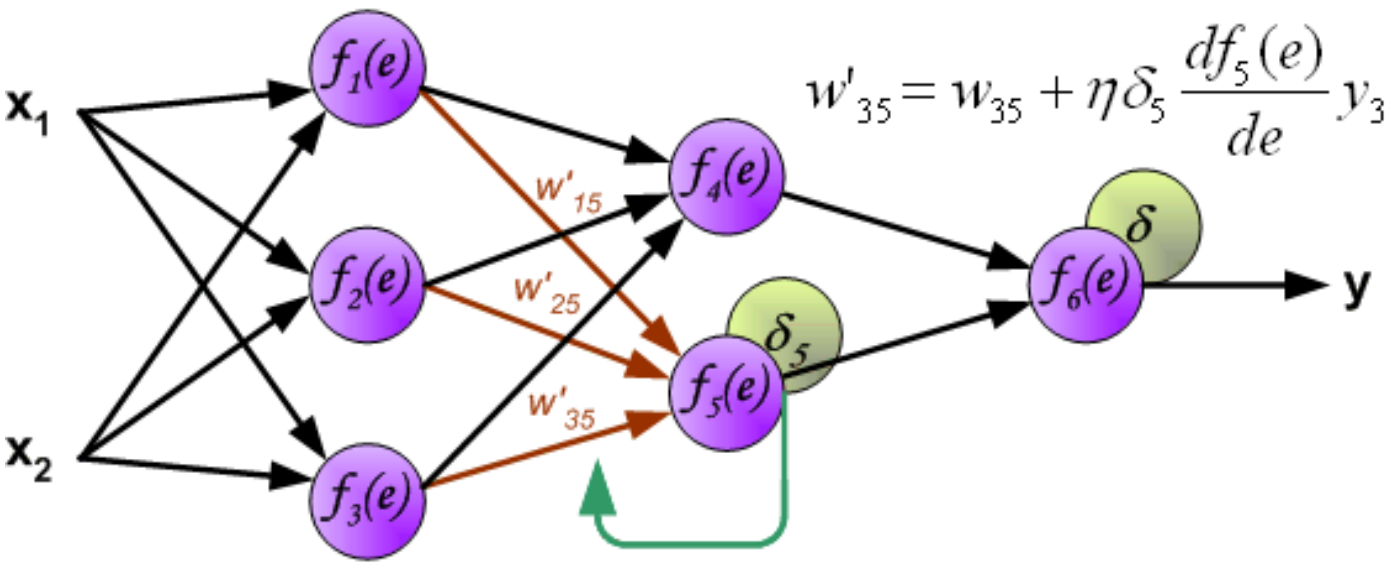


Алгоритм обратного распространения ошибки

$$w'_{15} = w_{15} + \eta\delta_5 \frac{df_5(e)}{de} y_1$$

$$w'_{25} = w_{25} + \eta\delta_5 \frac{df_5(e)}{de} y_2$$

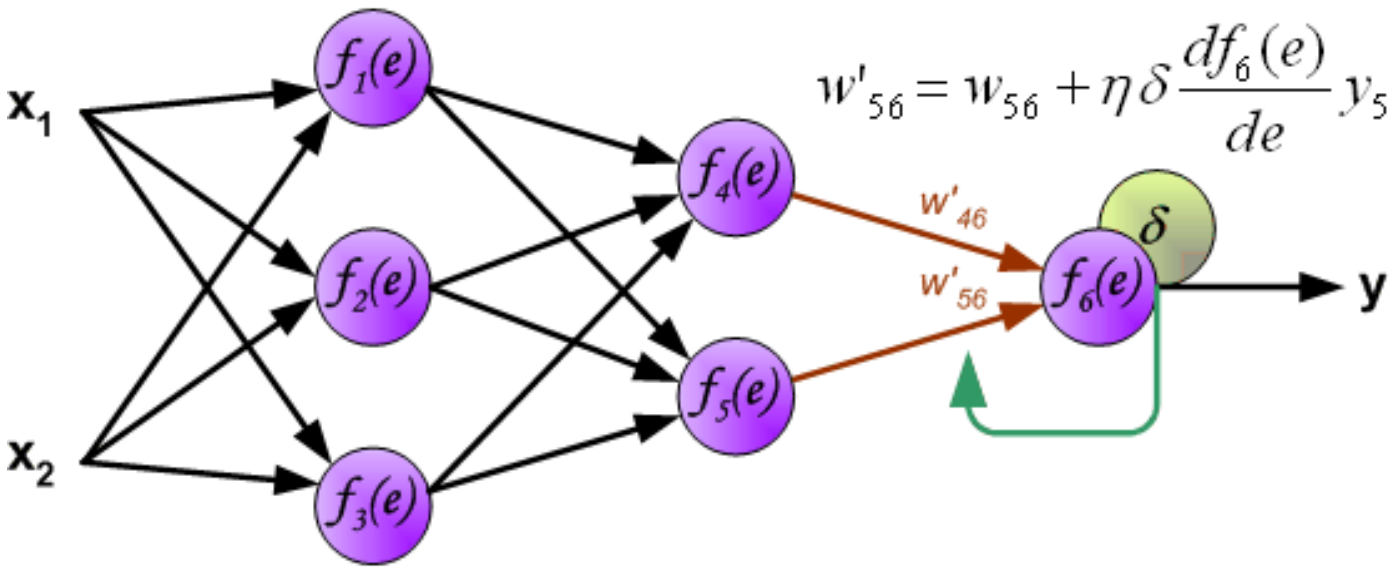
$$w'_{35} = w_{35} + \eta\delta_5 \frac{df_5(e)}{de} y_3$$



Алгоритм обратного распространения ошибки

$$w'_{46} = w_{46} + \eta\delta\frac{df_6(e)}{de}y_4$$

$$w'_{56} = w_{56} + \eta\delta\frac{df_6(e)}{de}y_5$$



Нейросетевое программное обеспечение

сайт: http://www.i-intellect.ru/neural-networks/programs.html

- EasyNN - Нейросетевое программное обеспечение для Windows с числовыми, текстовыми и графичискими функциями.
- NeuralWorks - Professional II/PLUS - среда для разработки нейронных сетей для Windows и Unix. Predict - нейросетевой инструмент как надстройка Excel для Windows
- Neuro Office - ориентирован на проектирование нейронных сетей с ядерной организацией
- Deductor — платформа для создания законченных аналитических решений.
- **neuralnet** - пакет в R

Предсказания размера пенсии в зависимости средней зарплаты на R

```
# средняя зарплата за каждый год
traininginput <- c(0.225, 690, 2313, 2931, 4061, 4937, 5809, 7096,
8803, 10095, 12229, 13572)
# средняя пенсия за каждый год
trainingoutput <- c(0.118, 274, 949, 1270, 1668, 2001, 2434, 3028,
3393, 4519, 5594, 7610)
# # данные для обучения
trainingdata <- cbind(traininginput,trainingoutput)
colnames(trainingdata) <- c("Input "Output")
# # обучение
net.pension <- neuralnet(Output~Input,trainingdata, hidden=10,
threshold=0.01)
print(net.pension)
# # тестирование
```

Вопросы

?