ИТМО

НЕЙРОННЫЕ СЕТИ

Виды обучения

- Обучение с учителем (supervised learning) – есть размеченные данные (для каждого примера есть «решение или метка класса»)
    - С частичным привлечением учителя (semi-supervised learning) – для части прецедентов задается пара «ситуация, решение», а для части - только «ситуация»
- Обучение без учителя (unsupervised learning) – есть неразмеченные данные («ситуация»), требуется сгруппировать объекты

Виды обучения

- Обучение с подкреплением (reinforcement learning) – есть размечаемые данные («ситуация, предполагаемое решение»). Алгоритм обучения работает через вознаграждение за правильное решение или наказание за неправильное.

Выборки

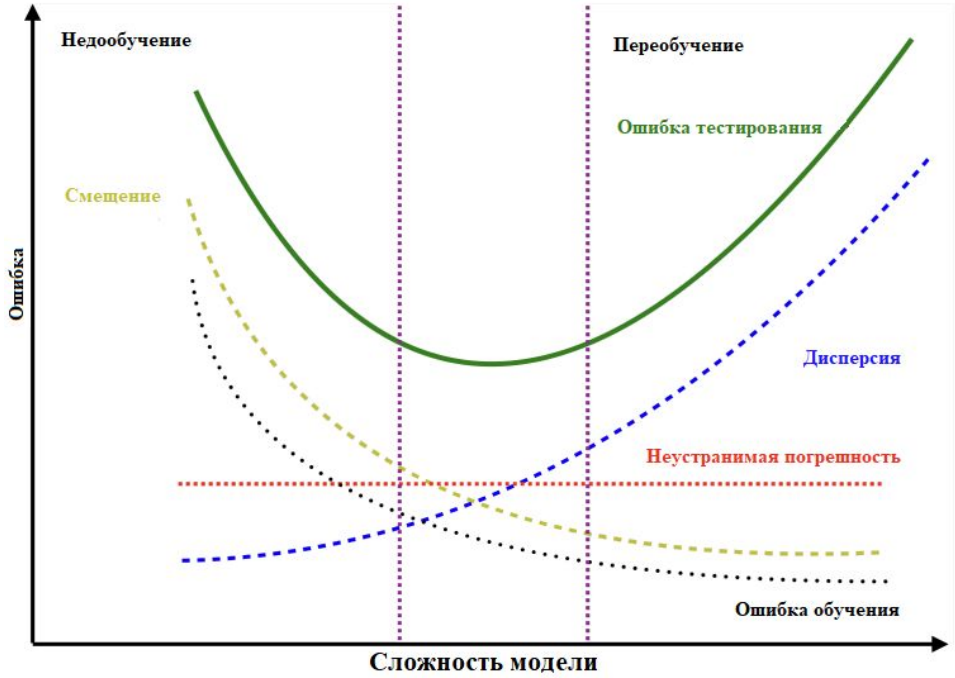
Признаки

- Исходные
- Производные
    - Агрегированные – показатели, определенные по группе (сумма, среднее, минимум, максимум)
    - Индикаторы – наличие или отсутствие характеристики
    - Отношения – взаимосвязь между двумя или более значениями данных
    - Отображения – преобразование непрерывных в категориальные

Извлечение признаков

- Тексты – это токенизация
- Изображения – извлечение краев и цветовые пятна
- Дата и время – полезно вычленить выходные и праздники, дни недели
- Местоположение (адрес или координаты) - извлечь плотность, средний доход по району
- Номер телефона – регион и оператор связи
- Лаги по времени. Окно 3-7 последовательностей

Ошибка обобщения



Ошибка обобщения – сумма смещения, дисперсии и величины, называемой неустранимой погрешностью, которая является результатом шума в самой задаче.

Сложность

количество настраиваемых параметров архитектуры модели, другими словами, сложность модели определяет ее информационную емкость. При увеличении сложности модели происходит уменьшение смещения и увеличение разброса.

Недообучение

ИТМО

- Недообучение (underfitting) – когда модель, построенная с помощью алгоритма, является слишком упрощенной, чтобы представлять базовую взаимосвязь между признаками и классом в обучающей выборке.
- Это явление можно заметить по большой ошибке на обучающей выборке (еще говорят, что «не удаётся настроиться на выборку»). Помимо простоты модели, недообучение может возникать еще и из-за малого количества эпох обучения.

Переобучение

- Переобучение (overfitting) – когда модель, построенная с помощью алгоритма, настолько сложна, что модель слишком точно приближает обучающую выборку и становится чувствительной к шуму.
- Это явление можно заметить по увеличивающейся разнице между ошибкой на обучающей выборке и тестовой выборке с каждой эпохой обучения. Поэтому при обучении строится график изменения ошибки на обучающей и тестовой выборках. Переобученная модель обладает низкой обобщающей способностью, в эксплуатации она будет часто ошибаться.

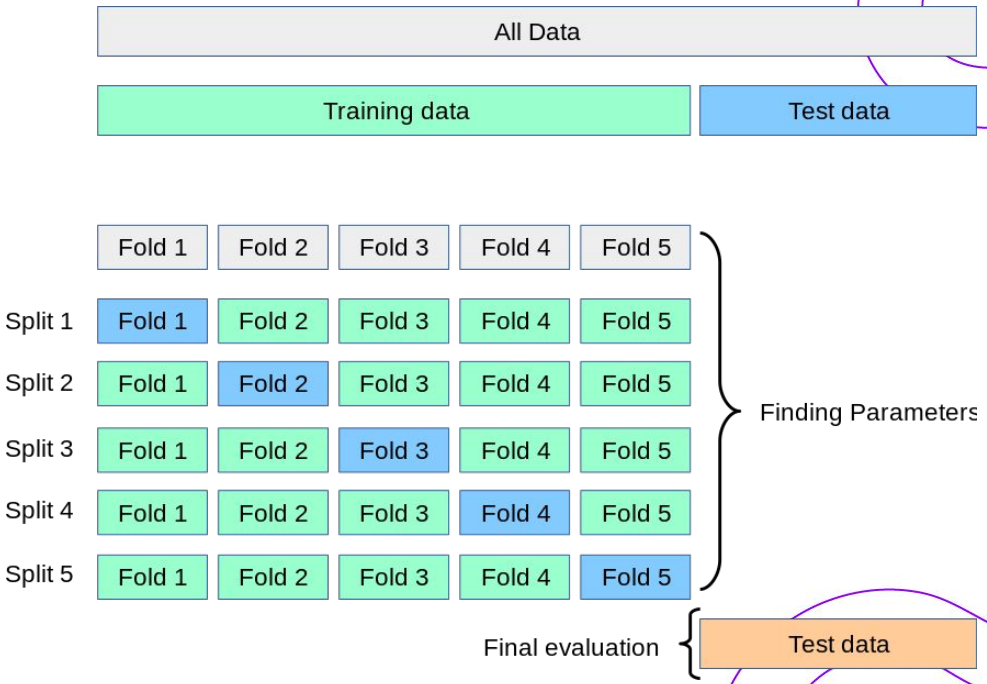
Нейросети по характеру связей

- Прямого распространения
- Обратного распространения, или рекуррентные
- Радиально-базисные функции
- Самоорганизующиеся

Кросс-валидация (скользящий контроль)

- Метод отложенных данных (holdout method) – разделение 70-30 или 60-40 или 80-20.
- Оценка ошибки близка к ошибке модели на новых данных, но сильно зашумлена.
- Для борьбы с шумом многократно случайно разделяют обучающую и тестовую выборку, параметр ошибки при этом усредняют.
- Но в процессе итераций каждая точка данных будет попадать в тестовое подмножество различное число раз, что может привести к смещению оценки.

Кросс-валидация (скользящий контроль)



Контроль по k-блокам (k-fold cross-validation) - данные случайным образом делятся на k непересекающихся подмножеств (5, 10 или 20). После циклического перебора всех k подмножеств полученная оценка усредняется.

Оценка классификации

	Y=1	Y=-1
A(x)=1	True positive	False positive
A(x)=-1	False negative	True negative

$$N = TP + FP + FN + TN$$

Полнота (способность обнаруживать данный класс, sensitivity)

$$recall = \frac{TP}{TP + FN}$$

Точность (способность отличать этот класс от других)

$$precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

Достоверность (правильность)

$$accuracy = \frac{TP + TN}{\cdot\cdot}$$

Оценка классификации

Специфичность (specificity), чаще всего применяется в медицинской статистике. Высокая специфичность позволяет отсеять людей, у которых действительно нет этого заболевания.

$$TNR = \frac{TN}{TN + FP}$$

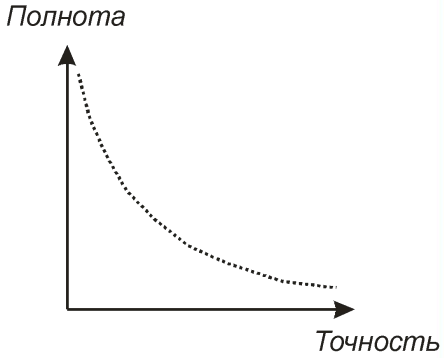
Коэффициент корреляции Мэтьюса (в статистике известен как фи-коэффициент) может применяться как мера качества для бинарной классификации при высоком дисбалансе классов. Принимает значение в диапазоне $[-1,1]$, где 1 – идеальное предсказание, 0 – случайное предсказание, -1 – полное расхождение между предсказанием и наблюдением.

$$MCC = \frac{TP * TN - FP * FN}{\sqrt{(TP + FP)(TP + FN)(TN + FP)(TN + FN)}}$$

F-мера

ИТМО

Полнота и точность противоречат друг другу. Всегда можно повысить полноту до 1 при очень низкой точности.



$$F = \frac{1}{\alpha \frac{1}{P} + (1-\alpha)\frac{1}{R}}, \qquad \alpha \in [0,1]$$

$$F = \frac{(\beta^2+1)PR}{\beta^2 P + R}, \qquad \beta^2 = \frac{(1-\alpha)}{\alpha}, \beta^2 \in [0,\infty)$$

В некоторых задачах необходимо отдавать предпочтение полноте ($\beta > 1$) или точности ($\beta < 1$).

В противном случае можно использовать **сбалансированную F-меру** ($\beta = 1$):

$$F_1 = \frac{2PR}{P+R}$$

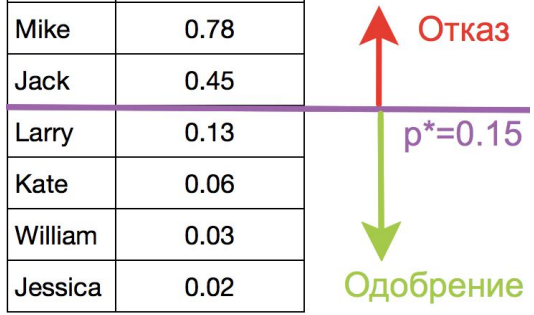
ROC-кривая

ИТМО

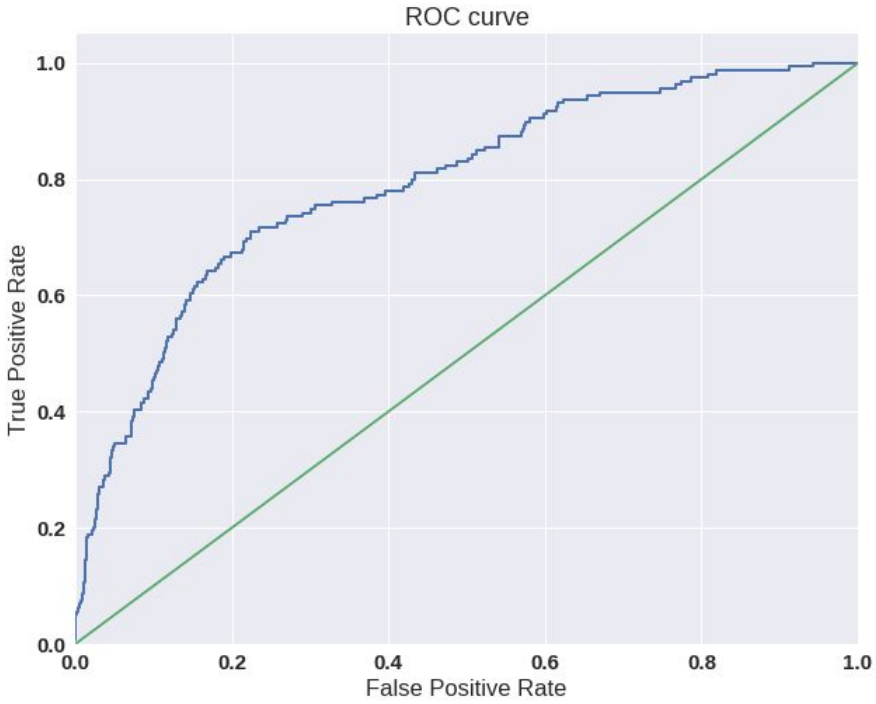
Вектора вероятностей классов, порог позволяет разделить классы, кривая строится для разных значений порога. Выбор порога обусловлен задачей, можно сдвинуть в сторону того или иного класса.

Для каждого класса своя ROC-кривая при многоклассовой классификации

Клиент	Вероятность невозврата
Mike	0.78
Jack	0.45
Larry	0.13
Kate	0.06
William	0.03
Jessica	0.02



ROC-кривая



$TPR = recall$

$FPR = \frac{FP}{FP+TN}$ - доля объектов negative класса, предсказанных неверно

Каждая точка на кривой соответствует значению порога

AUC

ИТМО

AUC эквивалентна **вероятности**, что классификатор присвоит больший вес случайно выбранной положительной сущности, чем случайно выбранной отрицательной

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} y(T)x'(T)dT = \int_{-\infty}^{\infty} TPR(T)FPR'(T)dT = \int_{-\infty}^{\infty} TPR(T)P_0(T)dT$$
$$= \langle TPR \rangle$$

В идеальном случае AUC=1

Чем она больше тем алгоритм лучше

AUC = 0.5 – случайное гадание

AUC < 0.5 - классификатор действует с точностью до наоборот

Оценка регрессии

ИТМО

Средняя абсолютная ошибка (MAE)

$$MAE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|a(x_i) - y_i|$$

Среднеквадратическая ошибка (MSE) применяется когда надо подчеркнуть большие ошибки, но поэтому она более чувствительна к выбросам, чем MAE.

Чем ошибка меньше, тем лучше, но важно учитывать масштаб данных. Чтобы MSE имел размерность исходных данных, из него извлекают корень и получают RMSE, что затрудняет сравнение на разных наборах.

$$MSE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(a(x_i) - y_i)^2$$

$$RMSE = \sqrt{MSE}$$

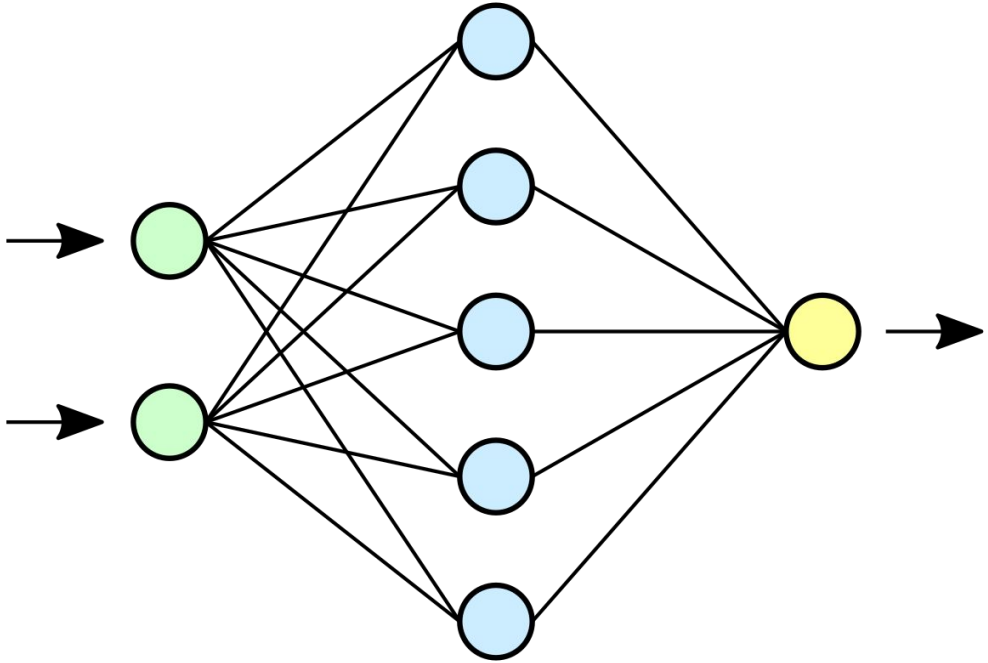
Оценка регрессии

Коэффициент детерминации (R^2) – доля дисперсии, объясненная моделью, в общей дисперсии целевой переменной. Чем ближе к 1, тем модель лучше объясняет данные. Модели с коэффициентов детерминации больше 0,8 можно считать хорошими. $\bar{y}$ – среднее арифметическое y_i.

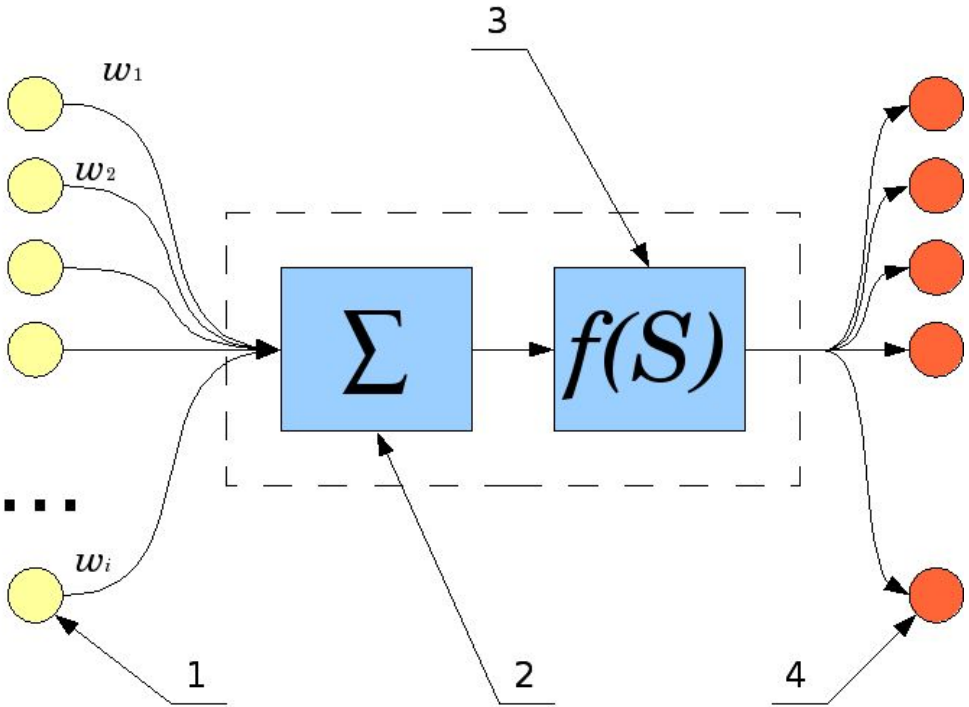
$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(a(x_i) - y_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}$$

SMAPE (Symmetric Mean Absolute Percentage Error) рассматривает не абсолютные, а относительные ошибки на примерах

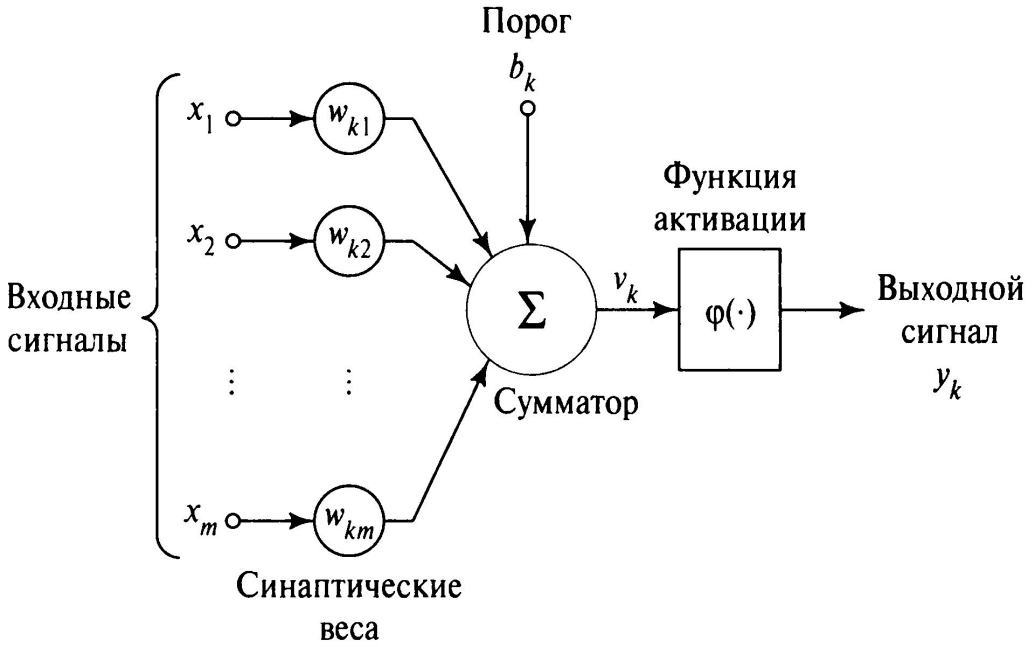
$$SMAPE = \frac{1}{n}\sum^{n} \frac{2|a(x_i) - y_i|}{y_i + a(x_i)}$$



Формальный нейрон



Формальный нейрон



$$u_k = \sum_{j=1}^{m} w_{kj} x_j$$

$$y_k = \varphi(u_k + b_k)$$

Сигмоида $f(S) = (1 + e^{-aS})^{-1}$

Гиперболический тангенс

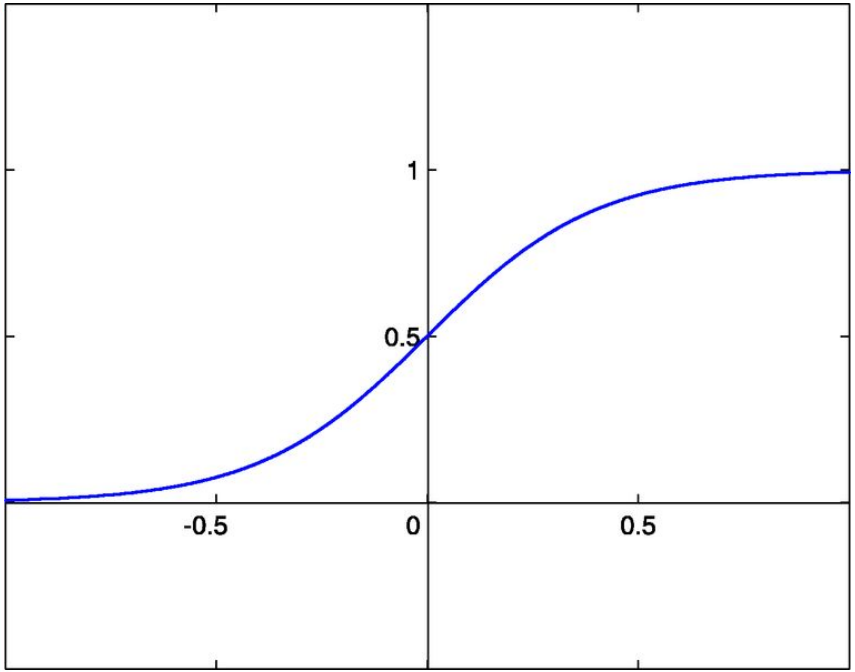
$$f(S) = \tanh(S) = \frac{e^S - e^{-S}}{e^S + e^{-S}}$$

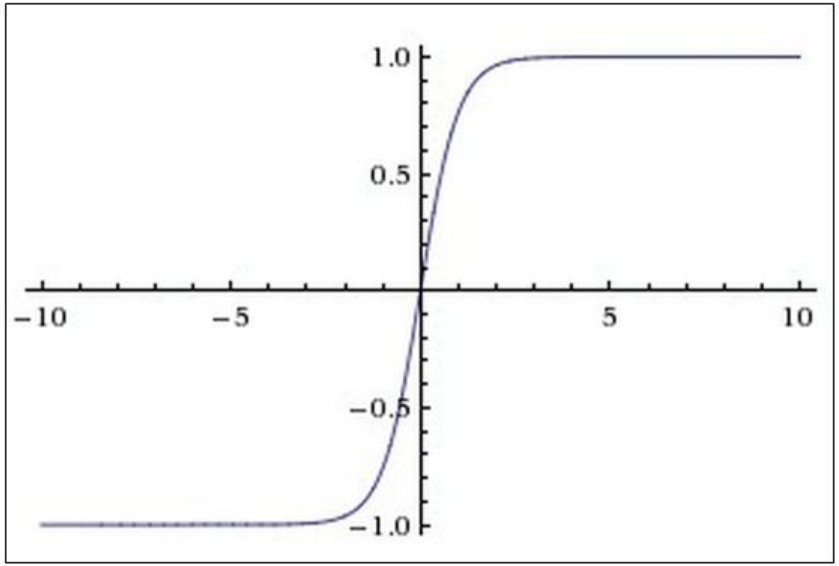
ReLU $f(S) = \max(0, S)$

Пороговая (Хевисайда)

$$f(S) = \begin{cases} 1, & S > T \\ 0, & else \end{cases}$$

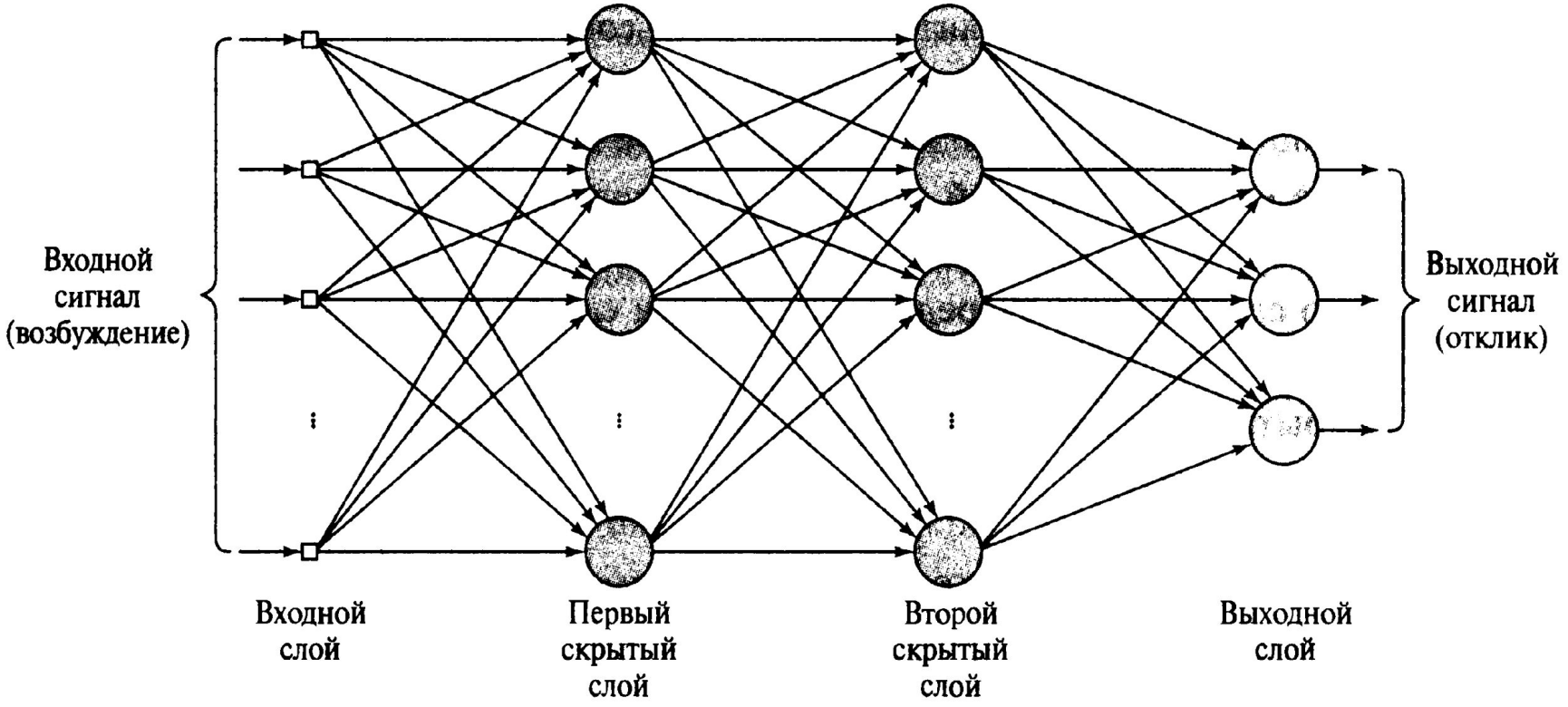
Сигмоида





Многослойный персептрон

ИТМО

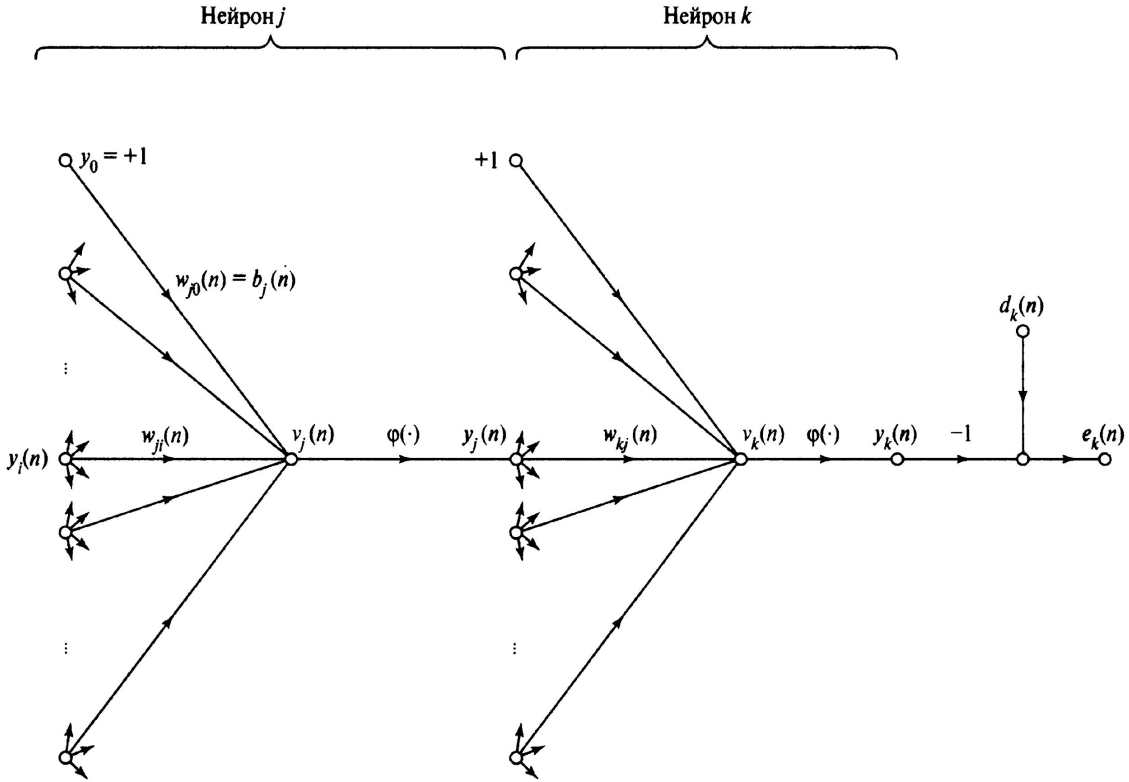


Признаки

Локальные признаки (local feature) извлекаются в первом скрытом слое.

Глобальные признаки (global feature) извлекаются во втором скрытом слое. В частности, нейрон второго скрытого слоя "обобщает" выходные сигналы нейронов первого скрытого слоя, относящихся к конкретной области входного пространства

Распространение сигнала



Ошибка обучения

$e_j(n) = d_j(n) - y_j(n)$ - сигнал ошибки

$E(n) = \frac{1}{2}\sum_{j \in C} e_j^2(n)$ - общая энергия ошибки сети (C – количество классов)

$E_{av}(n) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} E(n)$ - функция стоимости (cost function) – мера эффективности обучения (N – количество примеров)

Другая функция стоимости – перекрестная энтропия (cross-entropy):

$$H(P, Q) = -\sum_{x} P(x) \log_2 Q(x)$$

P – распределение истинных ответов

Q – распределение вероятностей прогнозов модели

$$CE = -(y \log_2(p) + (1 - y) \log_2(1 - p))$$

y – индикатор правильности присвоения метки класса для экземпляра

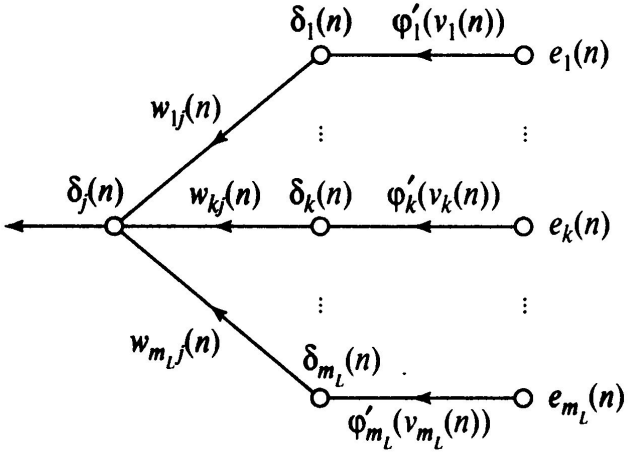
Обратное распространение ошибки

$\Delta w_{ji}(n) = \eta \delta_j(n) y_i(n)$ - дельта-правило

$\delta_j(n) = e_j(n) \varphi'_j\left(v_j(n)\right)$ - локальный градиент

$\delta_j(n) = \varphi'_j\left(v_j(n)\right) \sum_k \delta_k(n) w_{kj}(n)$

$\varphi'_j\left(v_j(n)\right) = a y_j(n)\left[1 - y_j(n)\right]$ для сигмоиды



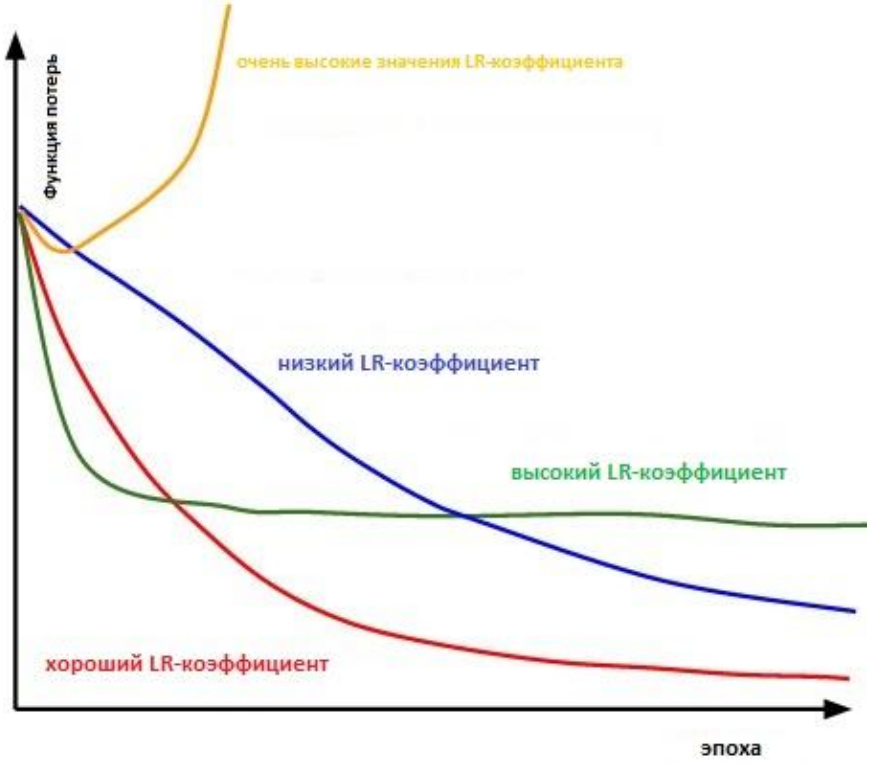
Скорость обучения

Если параметр η мал, алгоритм замедляется (overdamped), и траектория изменения $w_{ji}(n)$ соответствует гладкой кривой.

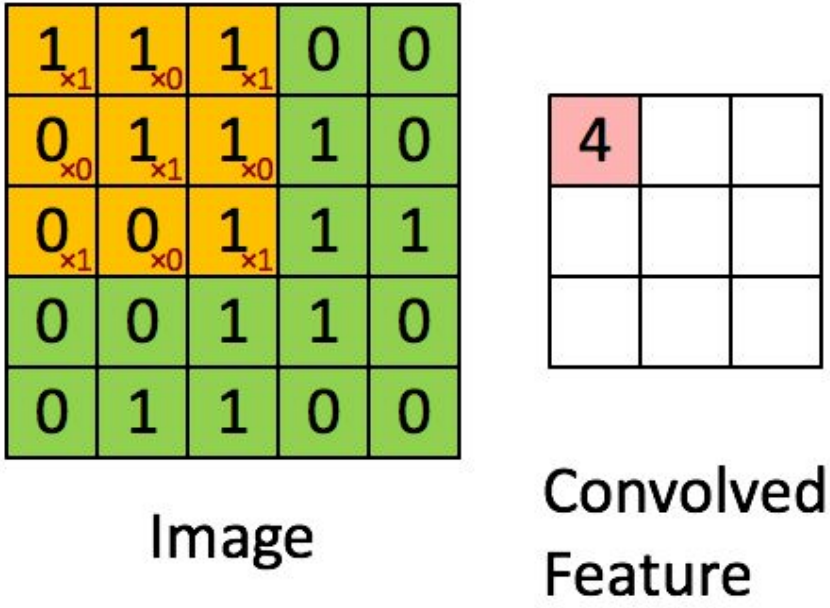
Если параметр η велик, алгоритм ускоряется (underdamped), и траектория $w_{ji}(n)$ принимает зигзагообразный вид.

Если параметр η превосходит некоторое критичное значение, алгоритм становится неустойчивым (т.е. расходящимся).

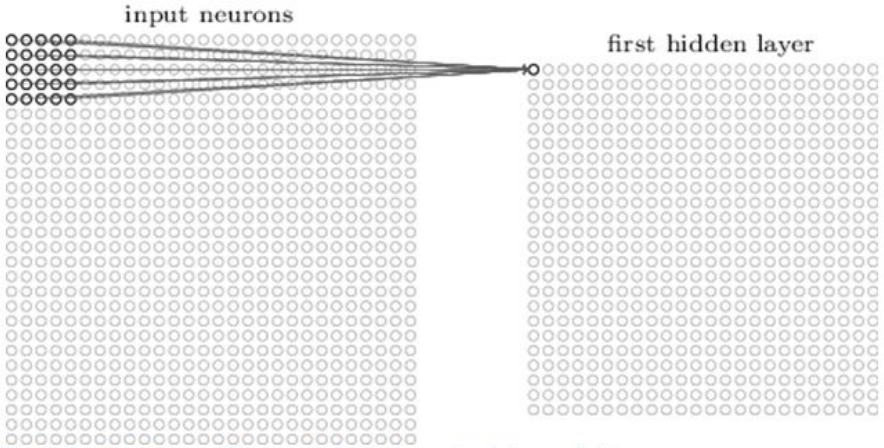
Влияние скорости на процесс обучения



Свертка


1 1 1 0 0
0 1 1 1 0
0 0 1 1 1
0 0 1 1 0
0 1 1 0 0
×1 ×0 ×1
×0 ×1 ×0
×1 ×0 ×1
4
Image
Convolved Feature

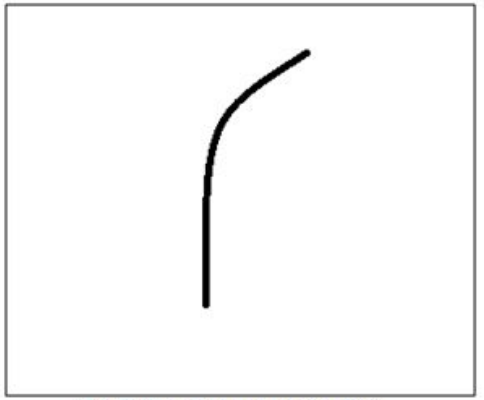
Свертка



Visualization of 5 x 5 filter convolving around an input volume and producing an activation map

0	0	0	0	0	30	0
0	0	0	0	30	0	0
0	0	0	30	0	0	0
0	0	0	30	0	0	0
0	0	0	30	0	0	0
0	0	0	30	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0

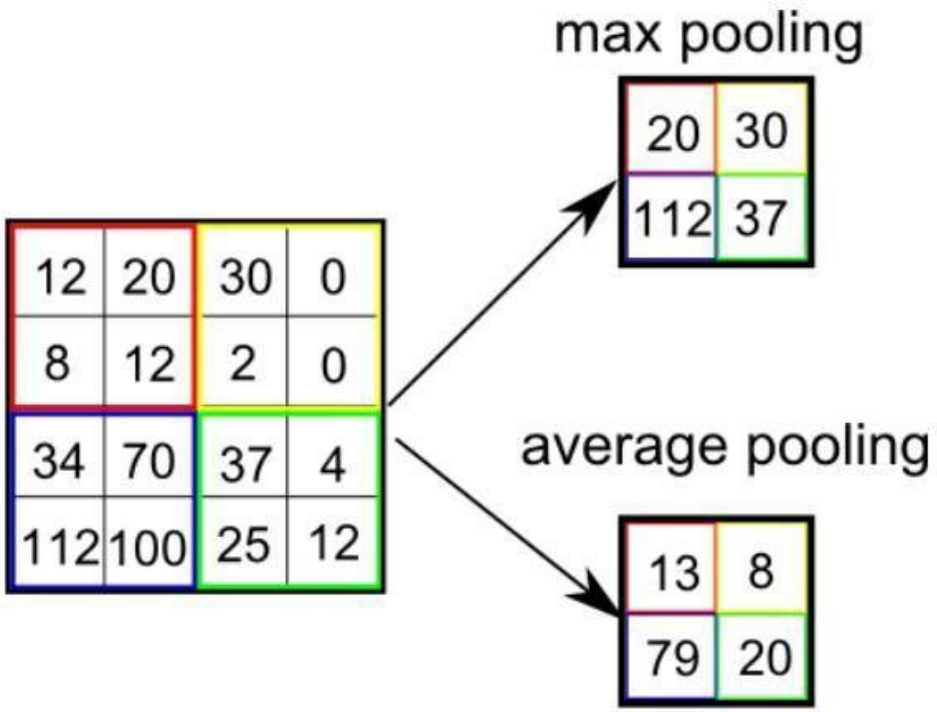
Pixel representation of filter



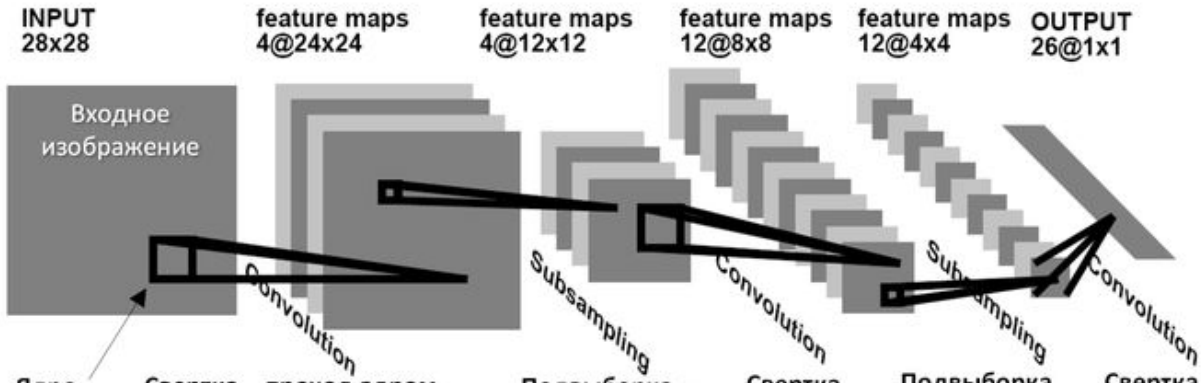
Visualization of a curve detector filter

Пулинг

ИТМО


max pooling
20 30
112 37
12 20 30 0
8 12 2 0
34 70 37 4
112 100 25 12
average pooling
13 8
79 20

Le-Net 5



Ядро свертки – матрица из весов, например, размером 5x5

Свертка – проход ядром свертки по всем нейронам нижнего слоя для активации нейронов верхнего слоя – получение карты признаков (feature maps). Для ядер разного типа получаются разные карты признаков.

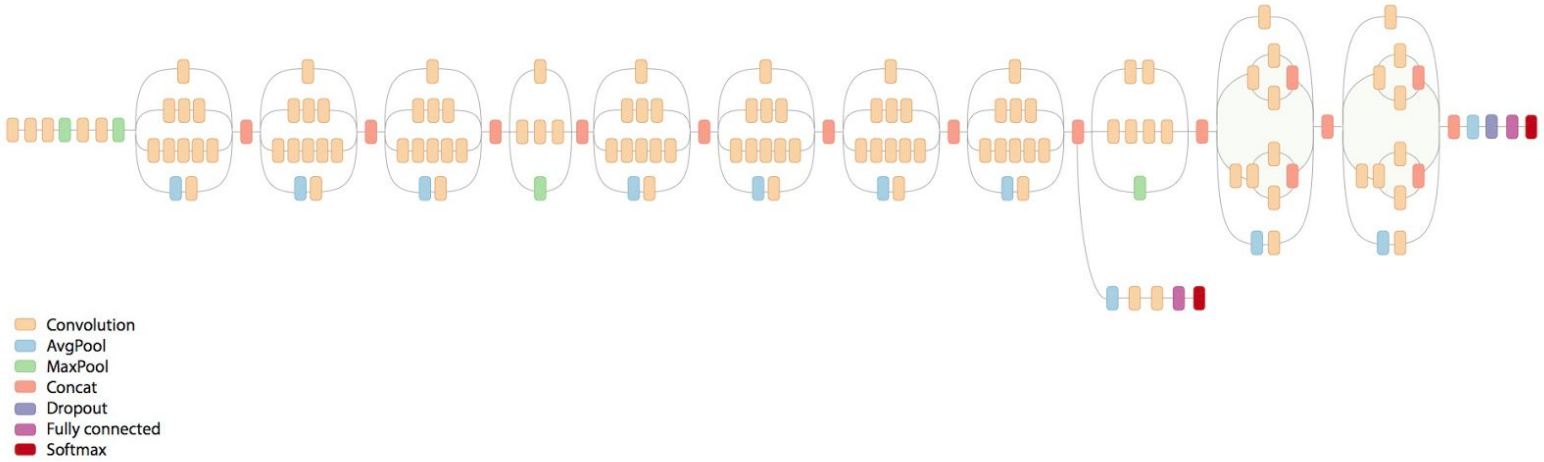
Подвыборка – операция уменьшения размерности. Чаще всего – выбор максимума или поиск среднего по нескольким соседним нейронам.

Свертка

Подвыборка

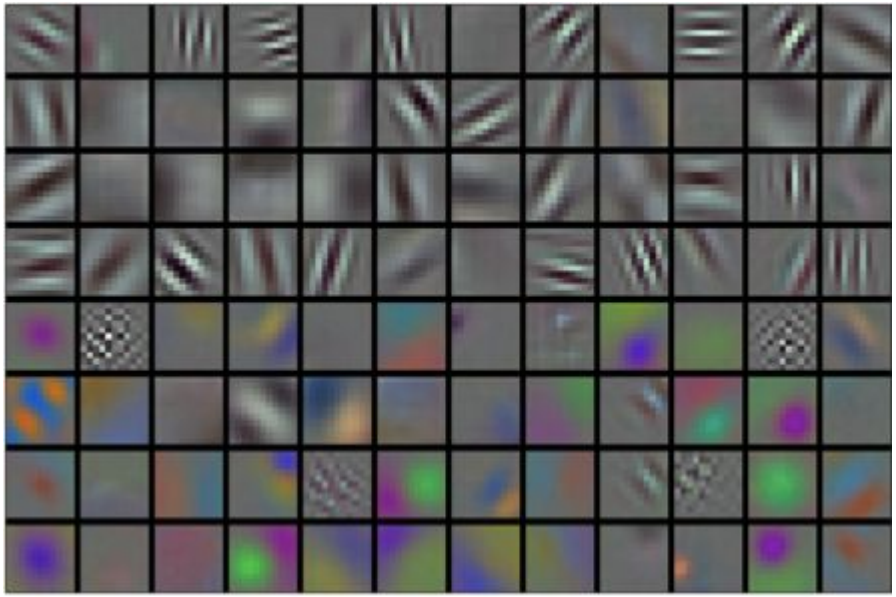
Свертка

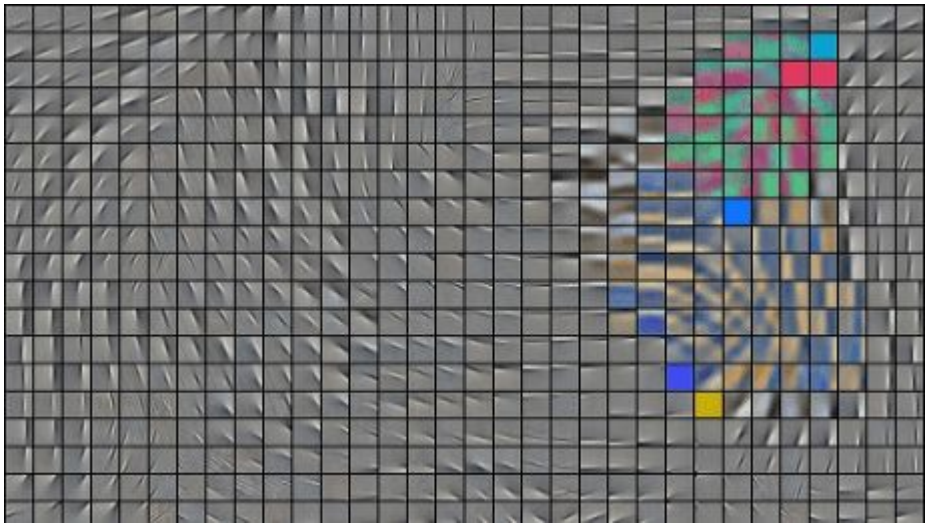
Google Inception V3



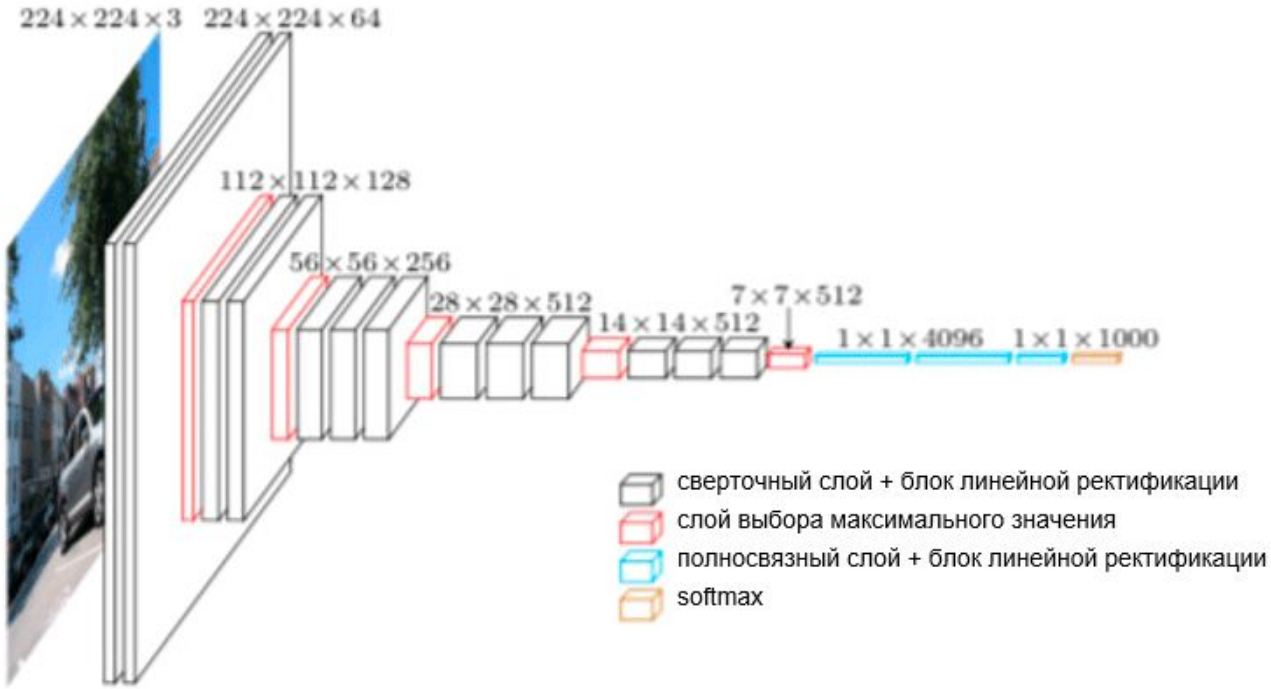
Ядра сверток

ИТМО





VGG


224 × 224 × 3
224 × 224 × 64
112 × 112 × 128
56 × 56 × 256
28 × 28 × 512
14 × 14 × 512
7 × 7 × 512
1 × 1 × 4096
1 × 1 × 1000
сверточный слой + блок линейной ректификации
слой выбора максимального значения
полносвязный слой + блок линейной ректификации
softmax

Регуляризация

Стратегии уменьшения ошибки на тестовой выборке, возможно, за счет увеличения на обучающей выборке.

Смысл регуляризационной оценки – увеличение смещения в обмен на уменьшение дисперсии

$$J(w) = MSE + \lambda$$

λ - регуляризатор

Чем больше λ, тем сильнее стремление к малым весам. При этом, при слишком больших λ может быть недообучение.

Штрафы по норме параметров

$$\tilde{J}(w) = J + \alpha\Omega(\theta)$$

α– вес

$\Omega(\theta)$ - член, штрафующий по норме

Предпочитается штрафовать веса, исключая смещения

- Регуляризация Тихонова (по норме L2)
- Регуляризация по норме L1
- Оптимизация с ограничениями

Регуляризация Тихонова

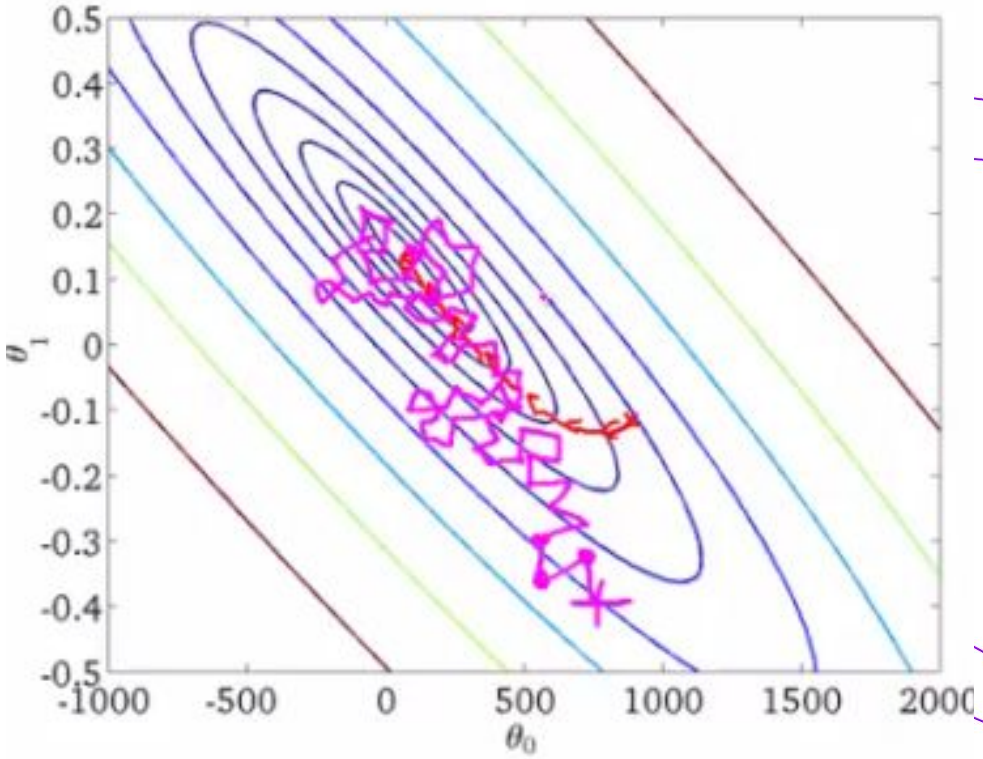
ИТМО

$$\Omega(\theta) = \frac{1}{2}\|w\|_2^2$$

$$\tilde{J}(w, X, y) = J(w, X, y) + \frac{\alpha}{2} w^T w$$

$$\nabla_w \tilde{J}(w, X, y) = \alpha \mathrm{w} + \nabla_w J(w, X, y)$$

Стохастический градиентный спуск



Суть – обновление весов по одному объекту

1 эпоха = 1 итерация

На каждой эпохе не гарантируется движение в сторону наискорейшего убывания функции

Спасибо за внимание!

ITMO more than a UNIVERSITY

a-kugaevskikh@yandex.ru