Réseaux de neurones

IFT 603-712

Réseaux de neurones multicouches

Par
Pierre-Marc Jodoin

1

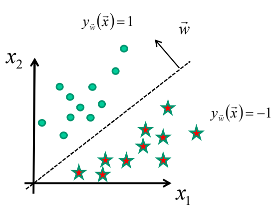
Rappel réseaux de neurones

(Perceptron, régression logistique, SVM)

2

Séparation linéaire

(2D et 2 classes)



biais poids

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2$$
$$= w_0 + \vec{w}^T\vec{x}$$
$$= \vec{w}'^T\,\vec{x}'$$

$$\boxed{y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}}$$

Par simplicité

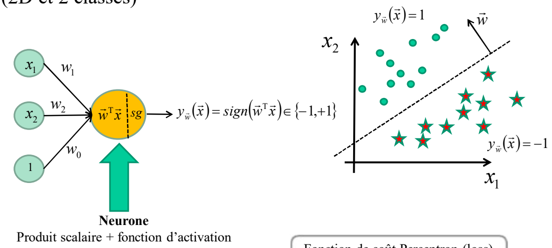
2 grands **advantages**. Une fois l'entraînement terminé,

1. Plus besoin de données d'entraînement
2. Classification est très rapide (**produit scalaire** entre 2 vecteurs)

3

Perceptron

(2D et 2 classes)



Fonction de coût Perceptron (loss) et gradient

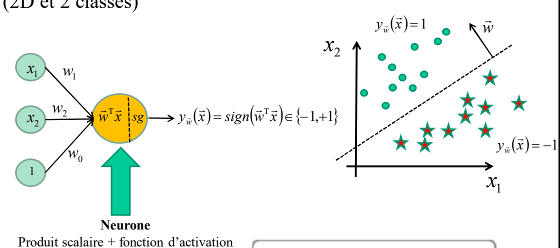
$E_D(\vec{w}) = \sum_{n=1}^{N} -t_n \vec{w}^T \vec{x}$ où M est l'ensemble des données mal classées

$\nabla E_D(\vec{w}) = \sum_{\vec{x}_n \in M} -t_n \vec{x}_n$

4

Hinge Loss

(2D et 2 classes)



Fonction de coût SVM (*hinge loss*) et gradient

$E_D(\vec{w}) = \sum_{n=1}^{N} \max\left(0, 1 - t_n \vec{w}^T \vec{x}\right)$

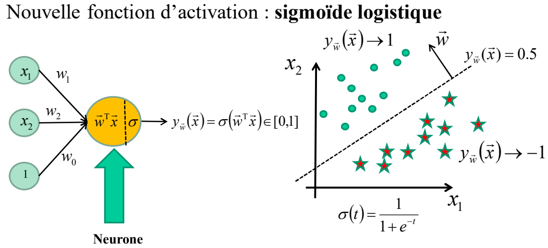
$\nabla E_D(\vec{w}) = \sum_{\vec{x}_n \in M} -t_n \vec{x}_n$

5

Régression logistique

(2D, 2 classes)

Nouvelle fonction d'activation : **sigmoïde logistique**



Fonction de coût (loss) et gradient

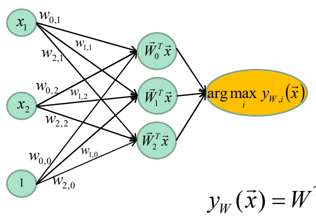
$E_D(\vec{W}) = -\sum_{n=1}^{N} t_n \ln\left(y_W(\vec{x}_n)\right) + (1-t_n)\ln\left(1 - y_W(\vec{x}_n)\right)$

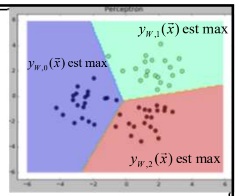
$\nabla E_D(\vec{W}) = \sum_{n=1}^{N} \left(y_W(\vec{x}_n) - t_n\right)\vec{x}_n$

6

Perceptron Multiclasse

(2D et 3 classes)





$$y_W(\vec{x}) = W^{\mathrm{T}} \vec{x}$$

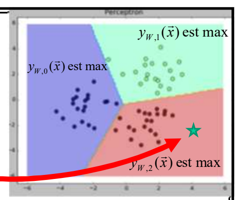
$$y_W(\vec{x}) = \begin{bmatrix} w_{0,0} & w_{0,1} & w_{0,2} \\ w_{1,0} & w_{1,1} & w_{1,2} \\ w_{2,0} & w_{2,1} & w_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

7

Perceptron Multiclasse

Exemple

★ (1.1, -2.0)



$$y_W(\vec{x}) = \begin{bmatrix} -2 & -3.6 & 0.5 \\ -4 & 2.4 & 4.1 \\ -6 & 4 & -4.9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1.1 \\ -2 \end{bmatrix} = \begin{array}{l} \begin{bmatrix} -6.9 \\ -9.6 \\ 8.2 \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{l} \text{Classe 0} \\ \text{Classe 1} \\ \text{Classe 2} \end{array}$$

8

Perceptron Multiclasse

Fonction de coût (***Perceptron loss***)

$$E_D(W) = \sum_{\vec{x}_n \in M} \left(\vec{W}_j^T \vec{x}_n - \vec{W}_{t_n}^T \vec{x}_n \right)$$

Somme sur l'ensemble des données mal classées

Score de la mauvaise classe

Score de la bonne classe

$$\nabla E_D\left(\vec{W}\right) = \sum_{\vec{x}_n \in M} \vec{x}_n$$

9

Hinge Multiclasse

Fonction de coût (***Hinge loss***)

$$E_D(\mathrm{W})=\sum_{n=1}^{N}\sum_{j}\max\left(0,1+\vec{W}_j^{\mathrm{T}}\vec{x}_n-\vec{W}_{t_n}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n\right)$$

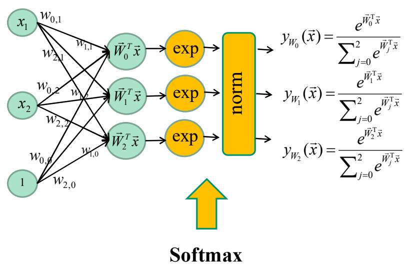
Score de la bonne classe

Score de la mauvaise classe

$$\nabla E_D\left(\vec{W}\right)=\sum_{\vec{x}_n\in M}\vec{x}_n$$

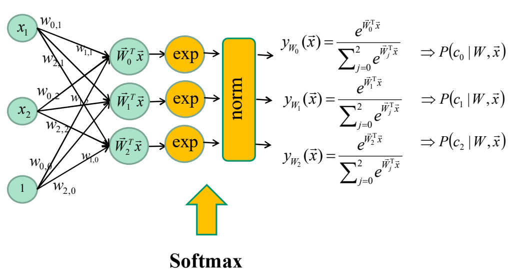
10

Régression logistique multiclasse



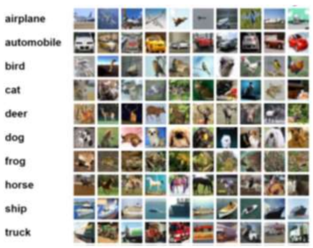
11

Régression logistique multiclasse



12

Régression logistique multiclasse



'airplane' $\Rightarrow$ t = [1000000000]
'automobile' $\Rightarrow$ t = [0100000000]
'bird' $\Rightarrow$ t = [0010000000]
'cat' $\Rightarrow$ t = [0001000000]
'deer' $\Rightarrow$ t = [0000100000]
'dog' $\Rightarrow$ t = [0000010000]
'frog' $\Rightarrow$ t = [0000001000]
'horse' $\Rightarrow$ t = [0000000100]
'ship' $\Rightarrow$ t = [0000000010]
'truck' $\Rightarrow$ t = [0000000001]

Étiquettes de classe : ***one-hot vector***

13

Régression logistique multiclasse

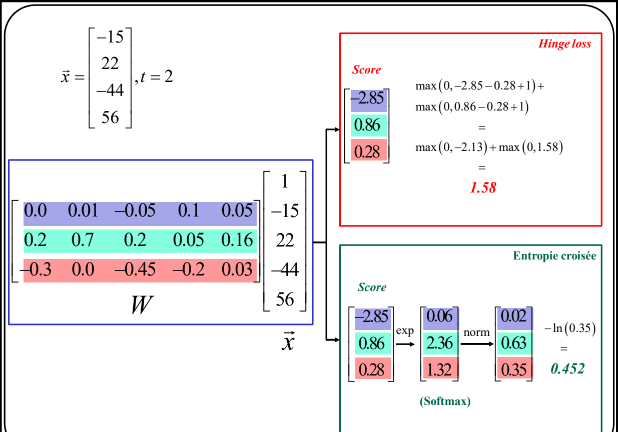
Fonction de coût est une **entropie croisée** (*cross entropy loss*)

$$E_D(\mathrm{W}) = -\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} t_{kn} \ln y_{W_k}(\vec{x}_n)$$

Devoir 4

$$\nabla E_D(\mathrm{W}) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \vec{x}_n \left(y_W(\vec{x}_n) - t_{kn} \right)$$

14



15

Maximum *a posteriori*

Régularisation

Constante

$$\arg\min_{W} = E_D(W) \; + \lambda R(W)$$

Fonction de perte

Régularisation

En général L1 ou L2 $R(\mathrm{W}) = \|\mathrm{W}\|_1$ ou $\|\mathrm{W}\|_2$

16

Optimisation

Descente de gradient

$$\mathrm{w}^{[k+1]} = \mathrm{w}^{[k]} - \eta^{[k]} \nabla_{\mathrm{w}} E$$

→ Gradient de la function de coût

→ Taux d'apprentissage ou "learning rate".

Descente de gradient stochastique

Devoir 4

Initialiser **w**
k=0
FAIRE k=k+1
FOR n = 1 to N
$\mathbf{w} = \mathbf{w} - \eta^{[k]} \nabla E(\vec{x}_n)$
JUSQU'À ce que toutes les données soient bien classées ou k==MAX_ITER

Optimisation par Batch

Initialiser **w**
k=0
FAIRE k=k+1
$\mathbf{w} = \mathbf{w} - \eta^{[k]} \sum_i \nabla E(\vec{x}_i)$
JUSQU'À ce que toutes les données sont bien classées ou k==MAX_ITER

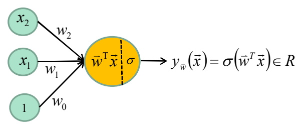
Parfois $\eta^{[k]} = cst / k$

17

Maintenant, rendons le réseau **profond**

18

2D, 2Classes, Régression logistique linéaire



Couche d'entrée
(3 « neurones »)

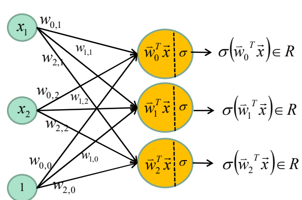
Couche de sortie
(1 neurone avec sigmoïde)

19

19

2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée

Maintenant, ajoutons arbitrairement 3 neurons



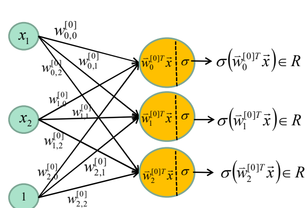
Couche d'entrée
(3 « neurones »)

1ère couche
(3 neurones)

20

2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée

Puisque les poids sont **entre la couche d'entrée** et la **première couche** on va les identifier à l'aide de **l'indice [0]**

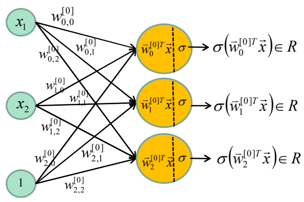


Couche d'entrée
(3 « neurones »)

1ère couche
(3 neurones)

21

2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée

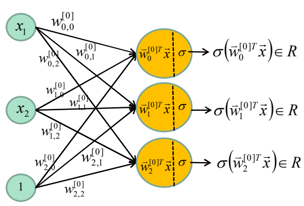


NOTE: à la sortie de la première couche, on a **3 réels** calculés ainsi

$$\sigma\left(\begin{bmatrix} w_{0,0}^{[0]} & w_{0,1}^{[0]} & w_{0,2}^{[0]} \\ w_{1,0}^{[0]} & w_{1,1}^{[0]} & w_{1,2}^{[0]} \\ w_{2,0}^{[0]} & w_{2,1}^{[0]} & w_{2,2}^{[0]} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ 1 \end{bmatrix}\right)$$

22

2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée



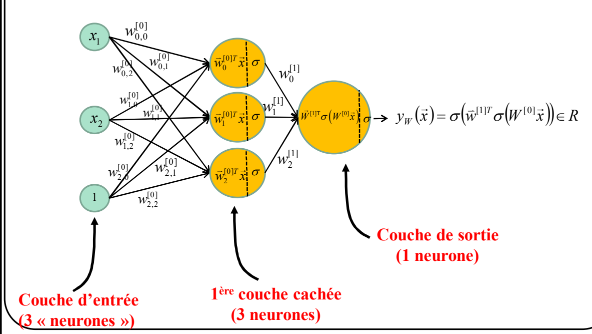
NOTE: représentation plus simple de la sortie de la 1ère couche (**3 réels**)

$$\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)$$

23

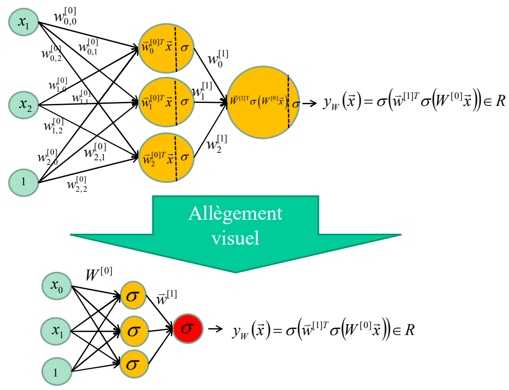
2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée

Si on veut effectuer une **classification 2 classes** via une **régression logistique** (donc **une fonction coût par « entropie croisée »**) on doit ajouter **un neurone de sortie.**



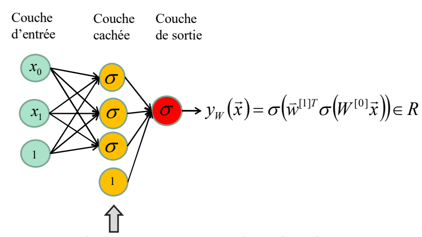
24

2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée



25

2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée



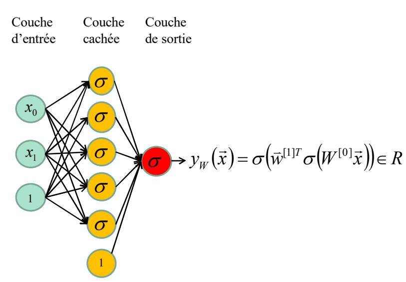
Très souvent, on ajoute un **neurone de biais** à la couche cachée.

Ce réseau possède au total **13 paramètres**

$\underbrace{3\text{x}3}_{\text{Couche entrée / Couche cachée}}$ $\underbrace{1\text{x}4}_{\text{Couche cachée / Couche de sortie}}$

26

2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée



Plus on augmente le nombre de neurones à la couche cachée, plus on **augmente la capacité du système.**

Ce réseau a 5x3+1x6=**21 paramètres**

27

27

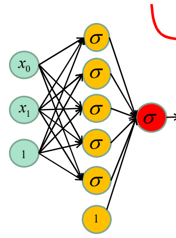
NOTE Importante

Le but de la première couche est de **projeter les données d'entrée** (ici $\vec{x} \in R^2$) vers un espace dimensionnel plus grand (ici $\sigma(W^{[0]}\vec{x}) \in R^5$) là où les **classes sont linéairement séparables**.

Car il ne faut pas oublier que la <u>**couche de sortie**</u> est une **régression logistique linéaire**.

Par conséquent, au lieu de fixer nous même la fonction de base, on laisse le **réseau l'apprendre**.

End-to-end training

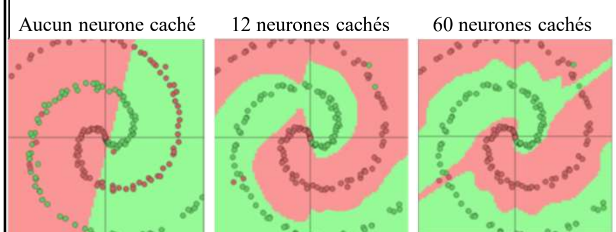


$\rightarrow y_W(\vec{x}) = \sigma\left(\vec{w}^{[1]T}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right) \in R$

28

28

Nombre de neurons VS Capacity

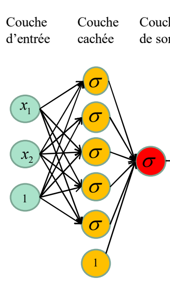


Cassification linéaire	Classification non linéaire	Classification non linéaire
Underfitting	**BON RÉSULTAT**	**Over fitting**
(pas assez de capacité)	(bonne capacité)	(trop grande capacité)

http://cs.stanford.edu/people/karpathy/convnetjs/demo/classify2d.html

29

2D, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée

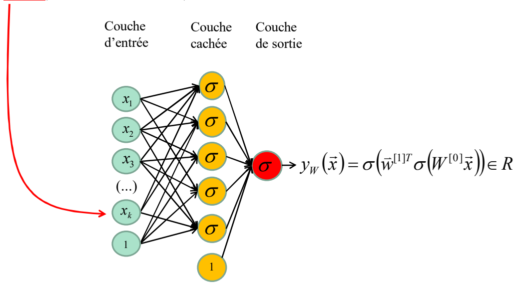


$\rightarrow y_W(\vec{x}) = \sigma\left(\vec{w}^{[1]T}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right) \in R$

30

30

kD, 2Classes, Réseau à 1 couche cachée

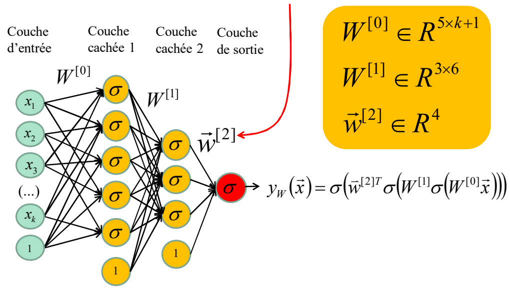


Au peut facilement augmenter la dimensionnalité des données d'entrée. Cela n'a pour effet que **d'augmenter le nombre de colonnes dans $W^{[0]}$**

Ce réseau a 5x(k+1)+1x6 **paramètres** 31

31

kD, 2Classes, Réseau à **2 couches** cachées



$W^{[0]} \in R^{5\times k+1}$

$W^{[1]} \in R^{3\times 6}$

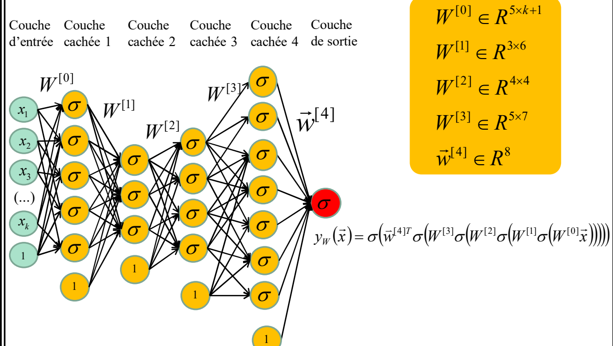
$\vec{w}^{[2]} \in R^{4}$

En ajoutant une couche cachée, on ajoute une multiplication matricielle

Ce réseau a 5x(k+1)+6x3 + 1x4 **paramètres** 32

32

kD, 2 Classes, Réseau à 4 couches cachées



$W^{[0]} \in R^{5\times k+1}$

$W^{[1]} \in R^{3\times 6}$

$W^{[2]} \in R^{4\times 4}$

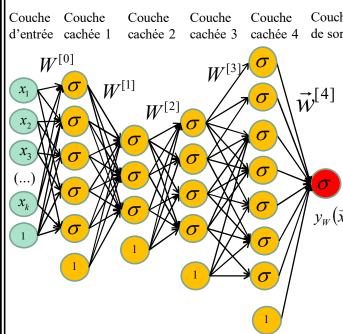
$W^{[3]} \in R^{5\times 7}$

$\vec{w}^{[4]} \in R^{8}$

Ce réseau a 5x(k+1)+6x3 + 4x4+7x5+1x8 **paramètres** 33

33

kD, 2 Classes, Réseau à 4 couches cachées



$W^{[0]} \in R^{5\times k+1}$

$W^{[1]} \in R^{3\times 6}$

$W^{[2]} \in R^{4\times 4}$

$W^{[3]} \in R^{5\times 7}$

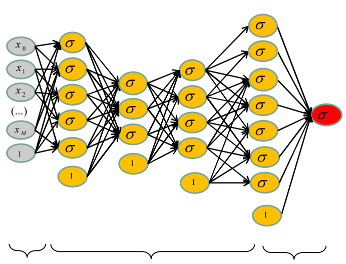
$\vec{w}^{[4]} \in R^{8}$

$$y_W(\vec{x}) = \sigma\left(\vec{w}^{[4]T}\sigma\left(W^{[3]}\sigma\left(W^{[2]}\sigma\left(W^{[1]}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right)\right)\right)\right)$$

NOTE : plus on augmente le nombre de couches, plus le réseau devient **profond** et plus on **augmente la capacité** du réseau.

34

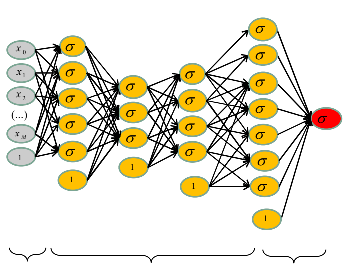
Réseau de neurones multicouches = apprendre la function de base



$\vec{x}$ $\quad \phi(\vec{x})$ $\quad y_{\vec{w}}(\phi(\vec{x}))$

35

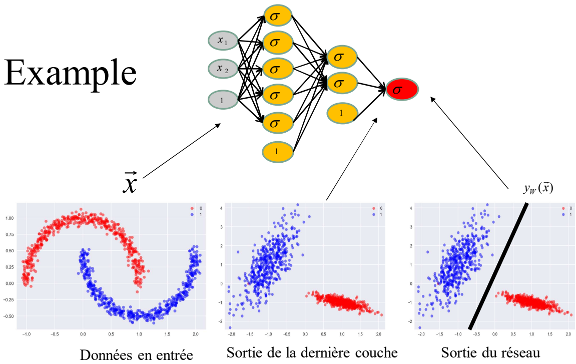
Réseau de neurones multicouches = apprendre la function de base



$\vec{x}$ $\quad \phi_W(\vec{x})$ $\quad y_{\vec{w}}(\phi_W(\vec{x}))$

36

Example



37

Augmenter le nombre de neurones par couche

Augmenter le nombre de couches

Augmenter la capacité du réseau

38

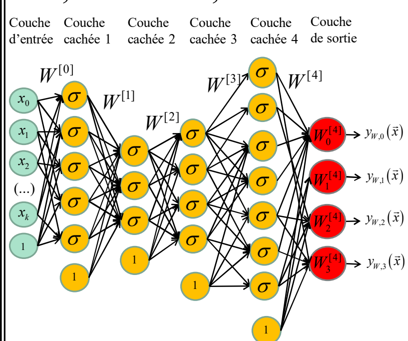
Augmenter la capacité d’un réseau peut entraîner du **sur-apprentissage**

39

Lorsqu'un réseau doit prédire **plus de 2 classes**, on lui assigne **K neurones de sortie**, une par classe.

40

kD, **4 Classes**, Réseau à 4 couches cachées



$W^{[0]} \in R^{5\times k+1}$

$W^{[1]} \in R^{3\times 6}$

$W^{[2]} \in R^{4\times 4}$

$W^{[3]} \in R^{5\times 7}$

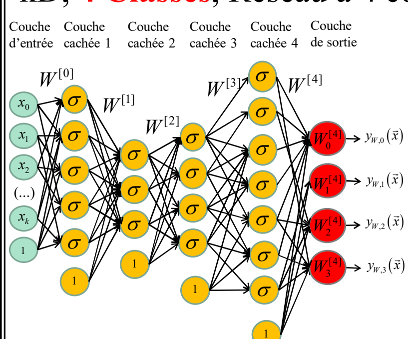
$W^{[4]} \in R^{4\times 8}$

$$y_W(\vec{x}) = W^{[4]}\sigma\left(W^{[3]}\sigma\left(W^{[2]}\sigma\left(W^{[1]}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right)\right)\right)$$

41

kD, **4 Classes**, Réseau à 4 couches cachées

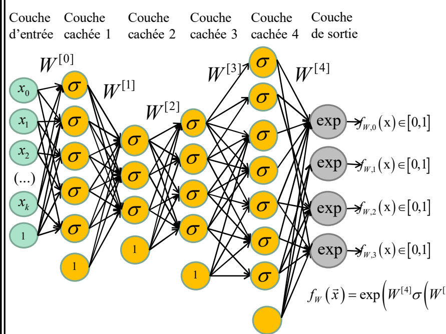
Hinge loss



$$y_W(\vec{x}) = W^{[4]}\sigma\left(W^{[3]}\sigma\left(W^{[2]}\sigma\left(W^{[1]}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right)\right)\right)$$

42

kD, **4 Classes**, Réseau à 4 couches cachées



$W^{[0]} \in R^{5 \times k+1}$

$W^{[1]} \in R^{3 \times 6}$

$W^{[2]} \in R^{4 \times 4}$

$W^{[3]} \in R^{5 \times 7}$

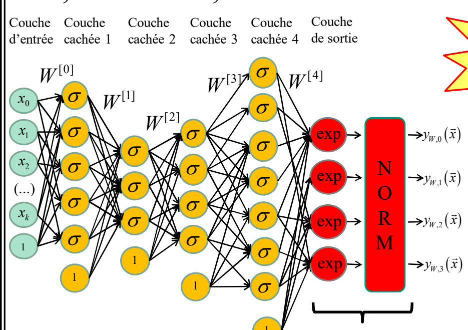
$W^{[4]} \in R^{4 \times 8}$

$$f_W(\vec{x}) = \exp\left(W^{[4]}\sigma\left(W^{[3]}\sigma\left(W^{[2]}\sigma\left(W^{[1]}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right)\right)\right)\right)$$

Softmax $y_{W,i}(\mathrm{x}) = \frac{f_{W,i}}{\sum_k f_{W,k}}$

43

kD, **4 Classes**, Réseau à 4 couches cachées



Entropie Croisée

Softmax

$$y_{W,i}(\mathrm{x}) = \frac{f_{W,i}}{\sum_k f_{W,k}}$$

$$y_W(\vec{x}) = \mathrm{softmax}\left(W^{[4]}\sigma\left(W^{[3]}\sigma\left(W^{[2]}\sigma\left(W^{[1]}\sigma\left(W^{[0]}\vec{x}\right)\right)\right)\right)\right)$$

44

Simulation

http://cs.stanford.edu/people/karpathy/convnetjs/demo/classify2d.html

45

Comment faire une prédiction?

Ex.: faire transiter un signal de **l'entrée à la sortie** d'un réseau à **3 couches cachées**

```
import numpy as np

def sigmoid(x):
    return 1.0 / (1.0+np.exp(-x))

x = np.insert(x,0,1) # Ajouter biais

H1 = sigmoid(np.dot(W0,x))
H1 = np.insert(H1,0,1) # Ajouter biais

H2 = sigmoid(np.dot(W1,H1))
H2 = np.insert(H2,0,1) # Ajouter biais

H2 = sigmoid(np.dot(W2,H1))
H2 = np.insert(H2,0,1) # Ajouter biais

y_pred = np.dot(W3,H2)
```

} Couche 1
} Couche 2
} Couche 3
} Couche sortie

Forward pass

46

Comment optimiser les paramètres?

0- Partant de

$$W = \arg\min_{W} E_D(W) + \lambda R(W)$$

Trouver une function de régularisation. En général

$$R(W) = \|W\|_1 \text{ ou } \|W\|_2$$

47

47

Comment optimiser les paramètres?

1- Trouver une loss $E_D(W)$ comme par exemple

Hinge loss
Entropie croisée (*cross entropy*)

N'oubliez pas d'ajuster la <u>sortie du réseau</u> en fonction de la <u>loss</u> que vous aurez choisi.

cross entropy* => *Softmax

48

Comment optimiser les paramètres?

2- Calculer le gradient de la loss par rapport à chaque paramètre

$$\frac{\partial\left(E_D(W)+\lambda R(W)\right)}{\partial w_{a,b}^{[c]}}$$

et lancer un algorithme de <u>descente de gradient</u> pour mettre à jour les paramètres.

$$\boxed{w_{a,b}^{[c]} = w_{a,b}^{[c]} - \eta \frac{\partial\left(E_D(W)+\lambda R(W)\right)}{\partial w_{a,b}^{[c]}}}$$

49

49

Comment optimiser les paramètres?

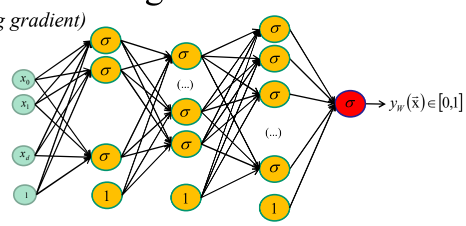
$$\frac{\partial\left(E_D(W)+\lambda R(W)\right)}{\partial w_{a,b}^{[c]}} \Rightarrow \text{calculé à l'aide d'une rétropropagation}$$

50

50

Disparition du gradient

(vanishing gradient)



Malheureusement, l'entraînement d'un **réseau profond** avec **rétro-propagation** et des fonctions d'activations **sigmoïdales** entraîne des problèmes de

<u>disparition du gradient</u>

Démonstration au tableau

51

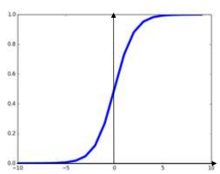
51

On résoud le problème de la disparition du gradient à l'aide **d'autres fonctions d'activations**

52

Fonction d'activation

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



Sigmoïde

- Ramène les valeurs entre 0 et 1
- Historiquement populaire

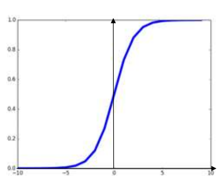
3 Problèmes :

- Un neurone saturé a pour effet de **« tuer » les gradients**

53

Fonction d'activation

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



Sigmoïde

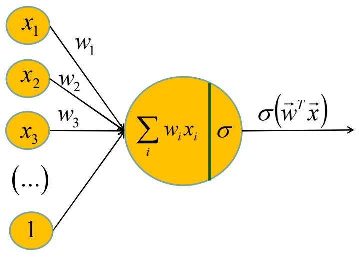
- Ramène les valeurs entre 0 et 1
- Historiquement populaire

3 Problèmes :

- Un neurone saturé a pour effet de **« tuer » les gradients**
- Sortie d'une sigmoïde n'est **pas centrée à zéro.**

54

Qu'arrive-t-il lorsque le vecteur d'entrée $\vec{x}$ d'un neurone est toujours positif?

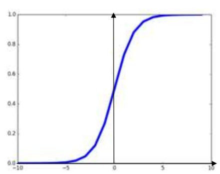


Le gradient par rapport à $\vec{w}$ est … **Positif? Négatif?**

55

Fonction d'activation

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



Sigmoïde

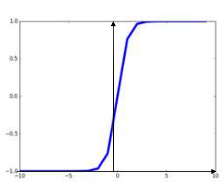
- Ramène les valeurs entre 0 et 1
- Historiquement populaire

3 Problèmes :

- Un neurone saturé a pour effet de **« tuer » les gradients**
- Sortie d'une sigmoïde n'est **pas centrée à zéro.**
- exp() est **coûteux** lorsque le nombre de neurones est élevé.

56

Fonction d'activation



Tanh(x)

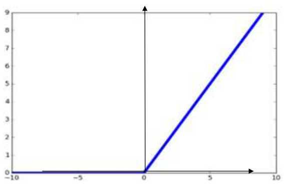
- Ramène les valeurs entre -1 et 1
- **Sortie centrée à zéro** ☺
- **Disparition du gradient** lorsque la fonction sature ☹

[LeCun et al., 1991]

57

Fonction d'activation

$$\mathrm{ReLU}(x) = \max(0, x)$$



ReLU(x)
(Rectified Linear Unit)

- Aucune **saturation** ☺
- Super **rapide** ☺
- **Converge plus rapide** que sigmoïde/tanh (5 à 10x) ☺

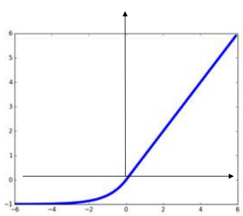
- Sortie **non centrée à zéro** ☹
- **Un inconvénient :** qu'arrive-t-il au gradient lorsque x<0? ☹

[Krizhevsky et al., 2012]

58

Fonction d'activation

$$\mathrm{ELU}(x) = \begin{cases} x & \text{si } x > 0 \\ \alpha\left(e^{x} - 1\right) & \text{sinon} \end{cases}$$



ELU(x)
(Exponential Linear Unit)

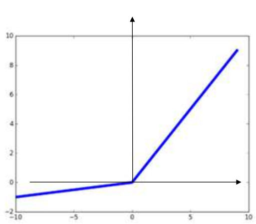
- Tous les avantages de **ReLU**☺
- Sortie plus **« centrée à zéro »** ☺
- **Converge plus rapide** que sigmoïde/tanh (5 à 10x) ☺
- **Gradients meurent plus lentement** 😐
- exp() est **coûteux** ☹

[Clevert et al., 2015]

59

Fonction d'activation

$$\mathrm{LReLU}(x) = \max(0.01x, x)$$



Leaky ReLU(x)

- Aucune **saturation** ☺
- Super **rapide** ☺
- **Converge plus rapide** que sigmoïde/tanh (5 à 10x) ☺
- **Gradients ne meurent pas** ☺

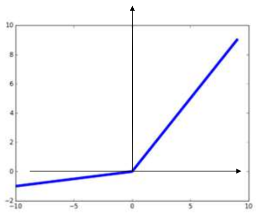
- 0.01 est un **hyperparamètre** 😐

[Mass et al., 2013]
[He et al., 2015]

60

Fonction d’activation

$$\text{PReLU}(x) = \max(\alpha x, x)$$



Parametric ReLU(x)

- Aucune **saturation** ☺
- Super **rapide** ☺
- **Converge plus rapide** que sigmoïde/tanh (5 à 10x) ☺
- **Gradients ne meurent pas** ☺
- α **appris** lors de la rétro-propagation ☺

[Mass et al., 2013]
[He et al., 2015]

61

En pratique

- Par défaut, le gens utilisent **ReLU**.
- Essayez **Leaky ReLU / PReLU / ELU**
- Essayez **tanh** mais n’attendez-vous pas à grand chose
- **Ne pas utiliser de sigmoïde** sauf à la sortie d’un réseau 2 classes.

62

Les bonnes pratiques

63

Optimisation

Descente de gradient

$$\mathbf{w}^{[k+1]} = \mathbf{w}^{[k]} - \eta^{[k]} \nabla E$$

Gradient de la function de coût

Taux d'apprentissage ou "learning rate".

Descente de gradient stochastique

Initialiser **w**
k=0
FAIRE k=k+1
FOR n = 1 to N
$\mathbf{w} = \mathbf{w} - \eta^{[k]} \nabla E(\vec{x}_n)$
JUSQU'À ce que toutes les données sont bien classées ou k== MAX_ITER

Optimisation par Batch

Initialiser **w**
k=0
FAIRE k=k+1
$\mathbf{w} = \mathbf{w} - \eta^{[k]} \sum_i \nabla E(\vec{x}_i)$
JUSQU'À ce que toutes les données sont bien classées ou k==MAX_ITER

Parfois $\eta^{[k]} = cst / k$

64

Optimisation

Descente de gradient

$$\mathbf{w}^{[k+1]} = \mathbf{w}^{[k]} - \eta^{[k]} \nabla E$$

Gradient de la function de coût

Taux d'apprentissage ou "learning rate".

Optimisation par **mini-batch**

Initialiser **w**
k=0
FAIRE k=k+1

FAIRE n=0 à N par sauts de ***MBS /*Mini-batch size*/***
$\mathrm{w} = \mathrm{w} - \eta^{[k]} \sum_{i=n}^{n+MBS} \nabla E(\vec{x}_i)$

JUSQU'À ce que toutes les données sont bien classées ou k==MAX_ITER

Itération

65

Optimisation

Descente de gradient

$$\mathbf{w}^{[k+1]} = \mathbf{w}^{[k]} - \eta^{[k]} \nabla E$$

Gradient de la function de coût

Taux d'apprentissage ou "learning rate".

Optimisation par **mini-batch**

Initialiser **w**
k=0
FAIRE k=k+1

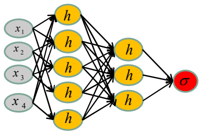
FAIRE n=0 à N par sauts de ***MBS /*Mini-batch size*/***
$\mathrm{w} = \mathrm{w} - \eta^{[k]} \sum_{i=n}^{n+MBS} \nabla E(\vec{x}_i)$

JUSQU'À ce que toutes les données sont bien classées ou k==MAX_ITER

Epoch

66

$\vec{x}$



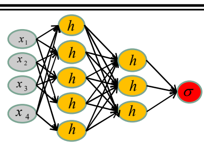
$\sigma\left(\vec{W}_3 h\left(W_2 h\left(W_1 \vec{x}\right)\right)\right)$

Propagation avant pour une donnée (7 étapes)

$\vec{x}$	$\in IR^4$
$W_1\vec{x}$	$\in IR^5$
$h(W_1\vec{x})$	$\in IR^{5+1}$
$W_2 h(W_1\vec{x})$	$\in IR^3$
$h(W_2 h(W_1\vec{x}))$	$\in IR^{3+1}$
$\vec{W}_3(h(W_2 h(W_1\vec{x})))$	$\in IR$
$\sigma(\vec{W}_3(h(\vec{W}_2 h(W_1\vec{x}))))$	$\in IR$

67

$X = \{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3\}$



$$Y = \left\{ \begin{array}{l} \sigma(\vec{W}_3 h(W_2 h(W_1\vec{x}_1))), \\ \sigma(\vec{W}_3 h(W_2 h(W_1\vec{x}_2))), \\ \sigma(\vec{W}_3 h(W_2 h(W_1\vec{x}_3))) \end{array} \right\}$$

Propagation avant pour une batch de 3 données (7 étapes)

POUR i allant de 1 à 3

$\vec{x}_i = X[i]$	$\in IR^{M+1}$
$W_1\vec{x}$	$\in IR^5$
$h(W_1\vec{x})$	$\in IR^{5+1}$
$W_2 h(W_1\vec{x})$	$\in IR^3$
$h(W_2 h(W_1\vec{x}))$	$\in IR^{3+1}$
$\vec{W}_3(h(W_2 h(W_1\vec{x})))$	$\in IR$
$Y[i] = \sigma(\vec{W}_3(h(\vec{W}_2 h(W_1\vec{x}))))$	$\in IR$

Solution naïve et peu efficace

TP4

68

Solution

Il est plus efficace d'effectuer UNE multiplication matricielle que **PLUSIEURS produits scalaires** **(exemple de la 6ᵉ étape)**

$$\begin{pmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \left(w_1 a + w_2 b + w_3 c\right)$$

$$\begin{pmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d \\ e \\ f \end{pmatrix} = \left(w_1 d + w_2 e + w_3 f\right)$$

$$\begin{pmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g \\ h \\ i \end{pmatrix} = \left(w_1 g + w_2 h + w_3 i\right)$$

$$\begin{pmatrix} w_1 a + w_2 b + w_3 c \\ w_1 d + w_2 e + w_3 f \\ w_1 g + w_2 h + w_3 i \end{pmatrix} = Y$$

TROIS produits scalaires

69

Solution

Il est plus efficace d'effectuer **UNE multiplication matricielle** que PLUSIEURS produits scalaires **(exemple de la 6ᵉ étape)**

$$\begin{bmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{bmatrix}\begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1a + w_2b + w_3c \\ w_1d + w_2e + w_3f \\ w_1g + w_2h + w_3i \end{pmatrix} = Y$$

UNE multiplication matricielle

70

Solution

Il est plus efficace d'effectuer **UNE multiplication matricielle** que **PLUSIEURS matrice-vecteur** **(exemple de la 1ᵉ étape, batch de 3)**

$$W_1\vec{x}_1 = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} & w_{14} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} & w_{24} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} & w_{34} \\ w_{41} & w_{42} & w_{43} & w_{44} \\ w_{51} & w_{52} & w_{53} & w_{54} \end{pmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix}$$

$$W_1\vec{x}_2 = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} & w_{14} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} & w_{24} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} & w_{34} \\ w_{41} & w_{42} & w_{43} & w_{44} \\ w_{51} & w_{52} & w_{53} & w_{54} \end{pmatrix}\begin{bmatrix} d \\ e \\ f \\ g \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \end{bmatrix}$$

$$W_1\vec{x}_3 = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} & w_{14} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} & w_{24} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} & w_{34} \\ w_{41} & w_{42} & w_{43} & w_{44} \\ w_{51} & w_{52} & w_{53} & w_{54} \end{pmatrix}\begin{bmatrix} h \\ i \\ j \\ k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \\ z_5 \end{bmatrix}$$

$$\begin{matrix} u_1 & v_1 & z_1 \\ u_1 & v_1 & z_1 \\ u_1 & v_1 & z_1 \\ u_1 & v_1 & z_1 \\ u_1 & v_1 & z_1 \end{matrix}$$

TROIS multi matrice-vecteur

71

Solution

Il est plus efficace d'effectuer **UNE multiplication matricielle** que **PLUSIEURS matrice-vecteur** **(exemple de la 1ᵉ étape)**

$$W_1X = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} & w_{14} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} & w_{24} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} & w_{34} \\ w_{41} & w_{42} & w_{43} & w_{44} \\ w_{51} & w_{52} & w_{53} & w_{54} \end{pmatrix}\begin{bmatrix} a & d & h \\ b & e & i \\ c & f & j \\ d & g & k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1 & v_1 & z_1 \\ u_2 & v_2 & z_2 \\ u_3 & v_3 & z_3 \\ u_4 & v_4 & z_4 \\ u_5 & v_5 & z_5 \end{bmatrix}$$

UNE multiplication matricielle

72

Vectorisation de la propagation avant

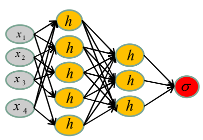
En résumé, lorsqu'on propage une « batch »

Au niveau **neuronal**	Multi. **Vecteur-Matrice**	$\vec{W}X = \begin{bmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix}$

Au niveau **de la couche**	Multi. **Matrice-Matrice**	$WX = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} & w_{14} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} & w_{24} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} & w_{34} \\ w_{41} & w_{42} & w_{43} & w_{44} \\ w_{51} & w_{52} & w_{53} & w_{54} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} a & d & h \\ b & e & i \\ c & f & j \\ d & g & k \end{bmatrix}$

73

$$X = \begin{bmatrix} | & | & | \\ \vec{x}_1 & \vec{x}_2 & \vec{x}_3 \\ | & | & | \end{bmatrix}$$



$$Y = \begin{bmatrix} \sigma\left(h\left(\vec{W}_2 h(W_1\vec{x}_1)\right)\right) \\ \sigma\left(h\left(\vec{W}_2 h(W_1\vec{x}_2)\right)\right) \\ \sigma\left(h\left(\vec{W}_2 h(W_1\vec{x}_3)\right)\right) \end{bmatrix}^T$$

Vectoriser la rétropropagation

74

Vectoriser la rétropropagation

Exemple simple pour **un neurone et une batch de 3**

$$\underset{\vec{W}}{\begin{bmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{bmatrix}} \underset{X}{\begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix}} = \underset{Y}{\begin{pmatrix} w_1 a + w_2 b + w_3 c \\ w_1 d + w_2 e + w_3 f \\ w_1 g + w_2 h + w_3 i \end{pmatrix}^T}$$

En supposant qu'on connaît le gradient pour les 3 éléments de Y provenant de sortie du réseau, comment faire pour propager le gradient vers W?

75

Vectoriser la rétropropagation

Exemple simple pour **1 neurone et une batch de 3**

$$\underset{W}{\begin{bmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{bmatrix}} \underset{X}{\begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix}} = \underset{Y}{\begin{pmatrix} w_1 a + w_2 b + w_3 c \\ w_1 d + w_2 e + w_3 f \\ w_1 g + w_2 h + w_3 i \end{pmatrix}^T}$$

Rappelons que l'objectif est de faire une **descente de gradient**, i.e.

$$w_1 \leftarrow w_1 - \eta \frac{\partial E}{w_1} \quad w_2 \leftarrow w_2 - \eta \frac{\partial E}{\partial w_2} \quad w_3 \leftarrow w_3 - \eta \frac{\partial E}{\partial w_3}$$

76

$$\underset{W}{\begin{bmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{bmatrix}} \underset{X}{\begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix}} = \underset{Y}{\begin{pmatrix} w_1 a + w_2 b + w_3 c \\ w_1 d + w_2 e + w_3 f \\ w_1 g + w_2 h + w_3 i \end{pmatrix}^T}$$

Concentrons-nous sur w_1

$$w_1 \leftarrow w_1 - \eta \frac{\partial E}{w_1}$$

$$w_1 \leftarrow w_1 - \eta \frac{\partial E}{\partial Y}^T \frac{\partial Y}{\partial w_1} \qquad \text{(par propriété de la dérivée en chaîne)}$$

$$w_1 \leftarrow w_1 - \eta \begin{bmatrix} \frac{\partial E_1}{\partial Y} & \frac{\partial E_2}{\partial Y} & \frac{\partial E_3}{\partial Y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ d \\ g \end{bmatrix}$$

(provient de la rétro-propagation)

$$w_1 \leftarrow w_1 - \eta \left(\frac{\partial E_1}{\partial Y} a + \frac{\partial E_2}{\partial Y} b + \frac{\partial E_3}{\partial Y} c \right)$$

77

$$\underset{W}{\begin{bmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{bmatrix}} \underset{X}{\begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix}} = \underset{Y}{\begin{pmatrix} w_1 a + w_2 b + w_3 c \\ w_1 d + w_2 e + w_3 f \\ w_1 g + w_2 h + w_3 i \end{pmatrix}^T}$$

Et pour tous les poids

$$\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{bmatrix}^T \leftarrow \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{bmatrix}^T - \eta \begin{bmatrix} \frac{\partial E_1}{\partial Y} & \frac{\partial E_2}{\partial Y} & \frac{\partial E_3}{\partial Y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix}$$

$$\vec{W}^T \leftarrow \vec{W}^T - \eta \frac{\partial \vec{E}}{\partial Y} \begin{bmatrix} \partial Y_1 / \partial w_1 & \partial Y_1 / \partial w_2 & \partial Y_1 / \partial w_3 \\ \partial Y_2 / \partial w_1 & \partial Y_2 / \partial w_2 & \partial Y_2 / \partial w_3 \\ \partial Y_3 / \partial w_1 & \partial Y_1 / \partial w_2 & \partial Y_3 / \partial w_3 \end{bmatrix}$$

$$\vec{W}^T \leftarrow \vec{W}^T - \eta \frac{\partial \vec{E}}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial \vec{W}}$$

Matrice jacobienne

78

$$\underbrace{\begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} & w_{14} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} & w_{24} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} & w_{34} \\ w_{41} & w_{42} & w_{43} & w_{44} \\ w_{51} & w_{52} & w_{53} & w_{54} \end{pmatrix}}_{W} \underbrace{\begin{bmatrix} a\ d\ h \\ b\ e\ i \\ c\ f\ j \\ d\ g\ k \end{bmatrix}}_{X} = \underbrace{\begin{bmatrix} u_1\ v_1\ z_1 \\ u_2\ v_2\ z_2 \\ u_3\ v_3\ z_3 \\ u_4\ v_4\ z_4 \\ u_5\ v_5\ z_5 \end{bmatrix}}_{Y}$$

Même chose pour **1 couche et une batch de 3**

$$W \leftarrow W^T - \eta \frac{\partial E}{\partial Y} \begin{bmatrix} \frac{\partial E}{\partial Y_{11}} & \frac{\partial E}{\partial Y_{12}} & \frac{\partial E}{\partial Y_{13}} \\ \frac{\partial E}{\partial Y_{21}} & \frac{\partial E}{\partial Y_{22}} & \frac{\partial E}{\partial Y_{23}} \\ \frac{\partial E}{\partial Y_{31}} & \frac{\partial E}{\partial Y_{32}} & \frac{\partial E}{\partial Y_{33}} \\ \frac{\partial E}{\partial Y_{41}} & \frac{\partial E}{\partial Y_{42}} & \frac{\partial E}{\partial Y_{43}} \\ \frac{\partial E}{\partial Y_{51}} & \frac{\partial E}{\partial Y_{52}} & \frac{\partial E}{\partial Y_{53}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b & c & d \\ d & e & f & g \\ h & i & j & k \end{bmatrix}$$

$$W^T \leftarrow W^T - \eta \frac{\partial E}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial W}$$

79

Vectorisation de la rétro-propagation

En résumé, lorsqu'on rétro-propage un gradient d'une batch

Au niveau **neuronal**	Multi. **Vecteur-Matrice**	$\vec{W}^T \leftarrow \vec{W}^T - \eta \frac{\partial \vec{E}}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial \vec{W}}$ $\vec{W}^T \leftarrow \vec{W}^T - \eta \frac{\partial \vec{E}}{\partial Y} X^T$

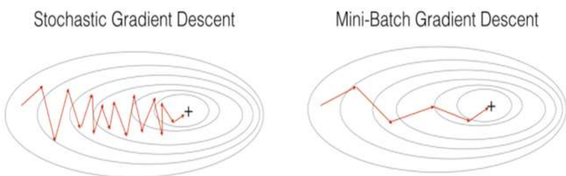
Au niveau **de la couche**	Multi. **Matrice-Matrice**	$W^T \leftarrow W^T - \eta \frac{\partial E}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial \vec{W}}$ $W^T \leftarrow W^T - \eta \frac{\partial E}{\partial Y} X^T$

80

Pour plus de détails:

https://medium.com/datathings/vectorized-implementation-of-back-propagation-1011884df84
https://peterroelants.github.io/posts/neural-network-implementation-part04/

81



82

Comment initialiser un réseau de neurones?

$$W = ?$$

83

Initialisation

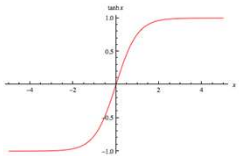
Première idée: faibles valeurs aléatoires
(Gaussienne $\mu = 0, \sigma = 0.01$)

```
W_i=0.01*np.random.randn(H_i,H_im1)
```

Fonctionne bien pour de petits réseaux mais
pas pour des réseaux profonds.

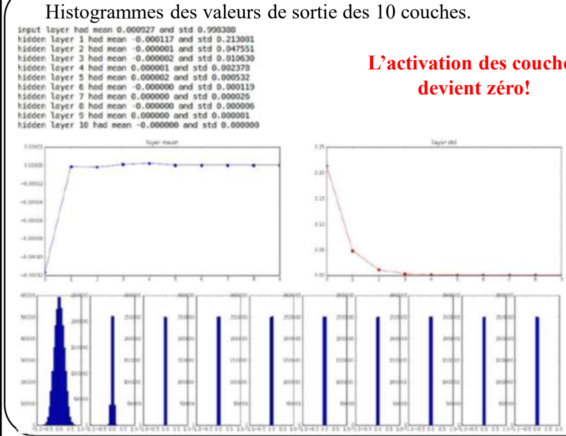
E.g. réseau à 10 couches avec 500 neurones par couche et des **tanh** comme fonctions d'activation.

84



85

Histogrammes des valeurs de sortie des 10 couches.

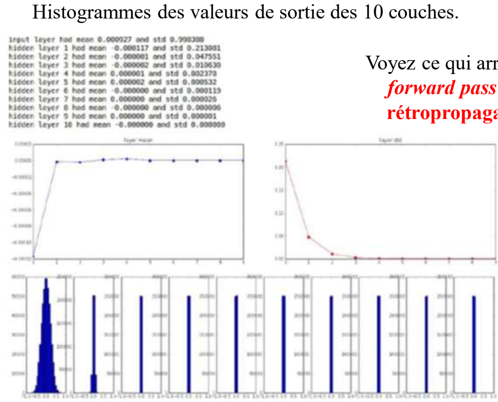


L'activation des couches devient zéro!

Crédit http://cs231n.stanford.edu/

86

Histogrammes des valeurs de sortie des 10 couches.



Voyez ce qui arrive à la ***forward pass*** et la **rétropropagation**

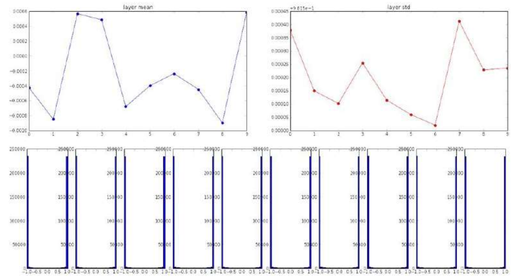
Crédit http://cs231n.stanford.edu/

87

W_i=np.random.randn(H_i,H_im1)*1

```
input layer had mean 0.001800 and std 1.001311
hidden layer 1 had mean -0.000430 and std 0.981879
hidden layer 2 had mean -0.000849 and std 0.981649
hidden layer 3 had mean 0.000566 and std 0.981601
hidden layer 4 had mean 0.000483 and std 0.981755
hidden layer 5 had mean -0.000682 and std 0.981614
hidden layer 6 had mean -0.000401 and std 0.981560
hidden layer 7 had mean -0.000237 and std 0.981520
hidden layer 8 had mean -0.000448 and std 0.981913
hidden layer 9 had mean -0.000899 and std 0.981728
hidden layer 10 had mean 0.000584 and std 0.981736
```

1 au lieu de 0.01



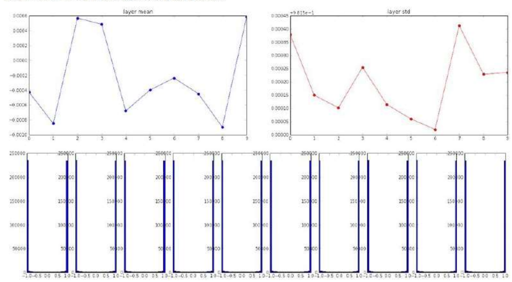
Crédit http://cs231n.stanford.edu/

88

W_i=np.random.randn(H_i,H_im1)*1

```
input layer had mean 0.001800 and std 1.001311
hidden layer 1 had mean -0.000430 and std 0.981879
hidden layer 2 had mean -0.000849 and std 0.981649
hidden layer 3 had mean 0.000566 and std 0.981601
hidden layer 4 had mean 0.000483 and std 0.981755
hidden layer 5 had mean -0.000682 and std 0.981614
hidden layer 6 had mean -0.000401 and std 0.981560
hidden layer 7 had mean -0.000237 and std 0.981520
hidden layer 8 had mean -0.000448 and std 0.981913
hidden layer 9 had mean -0.000899 and std 0.981728
hidden layer 10 had mean 0.000584 and std 0.981736
```

La sortie des neurones sature à 1 ou -1



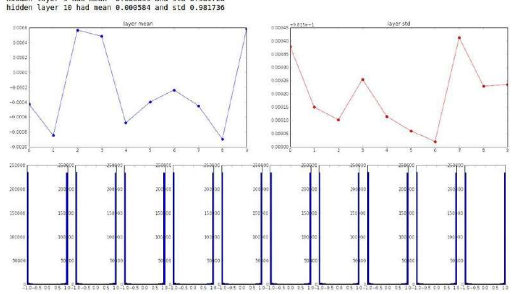
Crédit http://cs231n.stanford.edu/

89

W_i=np.random.randn(H_i,H_im1)*1

```
input layer had mean 0.001800 and std 1.001311
hidden layer 1 had mean -0.000430 and std 0.981879
hidden layer 2 had mean -0.000849 and std 0.981649
hidden layer 3 had mean 0.000566 and std 0.981601
hidden layer 4 had mean 0.000483 and std 0.981755
hidden layer 5 had mean -0.000682 and std 0.981614
hidden layer 6 had mean -0.000401 and std 0.981560
hidden layer 7 had mean -0.000237 and std 0.981520
hidden layer 8 had mean -0.000448 and std 0.981913
hidden layer 9 had mean -0.000899 and std 0.981728
hidden layer 10 had mean 0.000584 and std 0.981736
```

Voyez ce qui arrive à la ***forward pass*** et la **rétropropagation**



Crédit http://cs231n.stanford.edu/

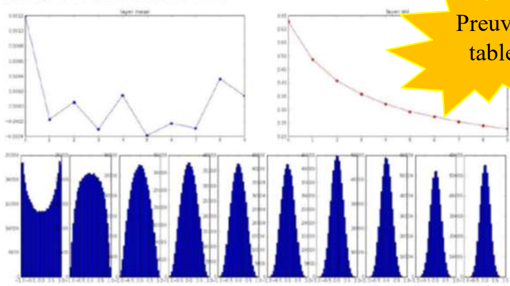
90

`W_i=np.random.randn(H_i,H_im1)/np.sqrt(H_im1)`

```
input layer had mean 0.001000 and std 1.001311
hidden layer 1 had mean 0.001198 and std 0.627953
hidden layer 2 had mean -0.000175 and std 0.486051
hidden layer 3 had mean 0.000055 and std 0.407723
hidden layer 4 had mean -0.000306 and std 0.357108
hidden layer 5 had mean 0.000142 and std 0.320917
hidden layer 6 had mean -0.000389 and std 0.292116
hidden layer 7 had mean -0.000228 and std 0.273387
hidden layer 8 had mean -0.000291 and std 0.254935
hidden layer 9 had mean 0.000361 and std 0.239266
hidden layer 10 had mean 0.000139 and std 0.220008
```

Initialization de type “Xavier”
[Glorot et al., 2010]

Preuve au tableau



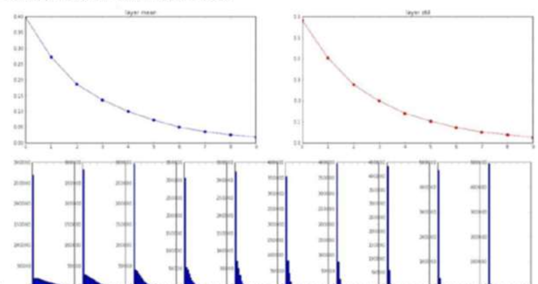
Crédit http://cs231n.stanford.edu/

91

`W_i=np.random.randn(H_i,H_im1)/np.sqrt(H_im1)`

```
input layer had mean 0.000501 and std 0.999444
hidden layer 1 had mean 0.398623 and std 0.582273
hidden layer 2 had mean 0.272352 and std 0.403795
hidden layer 3 had mean 0.186076 and std 0.276912
hidden layer 4 had mean 0.136442 and std 0.198685
hidden layer 5 had mean 0.099568 and std 0.140299
hidden layer 6 had mean 0.072234 and std 0.103280
hidden layer 7 had mean 0.049775 and std 0.072748
hidden layer 8 had mean 0.035138 and std 0.051572
hidden layer 9 had mean 0.025404 and std 0.038583
hidden layer 10 had mean 0.018408 and std 0.026076
```

Par contre en utilisant ReLU
on a encore un problème



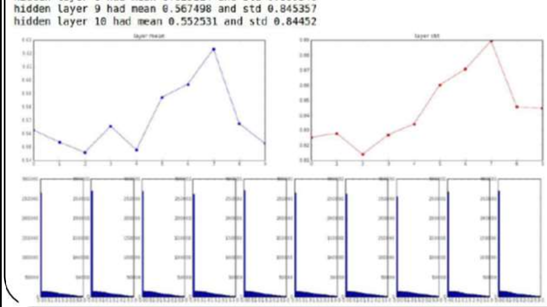
Crédit http://cs231n.stanford.edu/

92

`W_i=np.random.randn(H_i,H_im1)/np.sqrt(H_im1/2)`

```
input layer had mean 0.000501 and std 0.999444
hidden layer 1 had mean 0.562488 and std 0.825232
hidden layer 2 had mean 0.553614 and std 0.827835
hidden layer 3 had mean 0.545867 and std 0.813855
hidden layer 4 had mean 0.565396 and std 0.826902
hidden layer 5 had mean 0.547678 and std 0.834092
hidden layer 6 had mean 0.587103 and std 0.860035
hidden layer 7 had mean 0.596867 and std 0.870610
hidden layer 8 had mean 0.623214 and std 0.889348
hidden layer 9 had mean 0.567498 and std 0.845357
hidden layer 10 had mean 0.552531 and std 0.84452
```

He et al., 2015
(note additional /2)

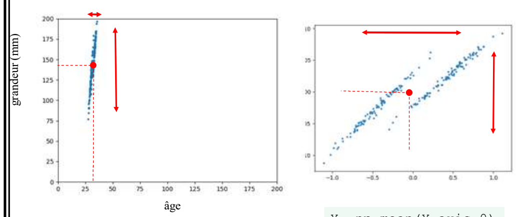


Crédit http://cs231n.stanford.edu/

93

Prétraitement des données

Centrer et **normaliser** les données d'entrée




```
X-=np.mean(X,axis=0)
X/=np.std(X,axis=0)
```

94

Sanity checks

1. Toujours s'assurer qu'une initialization aléatoire donne une **perte (*loss*) maximale**

Exemple : pour le cas ***10 classes***, une **régularisation à 0** et une ***entropie croisée***.

$$E_D(\mathrm{W}) = -\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} t_{kn} \ln y_{W,k}(\vec{x}_n)$$

Si l'initialisation est aléatoire, alors la probabilité sera égale pour chaque classe

$$\begin{aligned} E_D(\mathrm{W}) &= -\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\ln\frac{1}{10} \\ &= \ln(10) \\ &= 2.30 \end{aligned}$$

95

Sanity checks

1. Toujours s'assurer qu'une initialization aléatoire donne **une perte (*loss*) maximale**

Exemple : pour le cas ***10 classes***, une **régularisation à 0** et une ***entropie croisée***.

```
def init_two_layer_model(input_size, hidden_size, output_size):
  # initialize a model
  model = {}
  model['W1'] = 0.0001 * np.random.randn(input_size, hidden_size)
  model['b1'] = np.zeros(hidden_size)
  model['W2'] = 0.0001 * np.random.randn(hidden_size, output_size)
  model['b2'] = np.zeros(output_size)
  return model
```

```
model = init_two_layer_model(32*32*3, 50, 10) # input size, hidden size, number of classes
loss, grad = two_layer_net(X_train, model, y_train, 0.0)
print loss
```

```
2.30261216167
```

disable regularization

loss ~2.3.
"correct " for
10 classes

returns the loss and the
gradient for all parameters

Crédit http://cs231n.stanford.edu/

96

Sanity checks

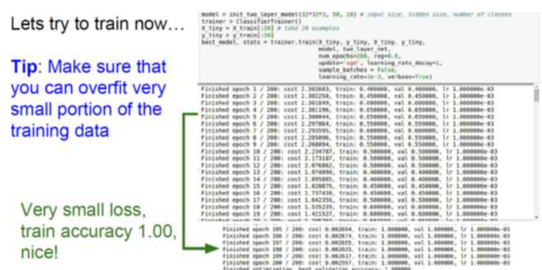
2. Et lorsqu'on **augmente la régularisation**, la perte augmente aussi

Crédit http://cs231n.stanford.edu/

97

Sanity checks

3. Toujours s'assurer qu'on peut **« over-fitter » sur un petit nombre de données**.

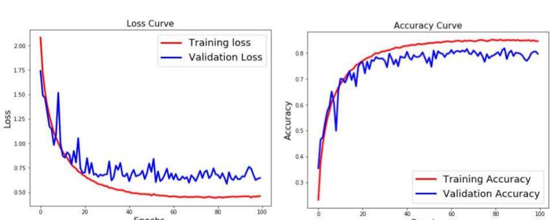


Crédit http://cs231n.stanford.edu/

98

Sanity checks

3. Toujours visualiser les courbes d'apprentissage et de validation

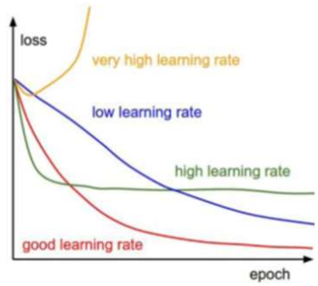


Source: https://www.learnopencv.com/wp-content/uploads/2017/11/cnn-keras-curves-without-aug.jpg

99

Sanity checks

3. Toujours visualiser les courbes d'apprentissage et de validation



Crédit http://cs231n.stanford.edu/

100

Sanity checks

3. Toujours vérifier la validité d'un gradient

Comme on l'a vu, calculer un gradient est sujet à erreur. Il faut donc s'assurer que nos gradients sont bons au fur et à mesure qu'on rédige notre code. En voici la meilleure façon

Rappel

Approximation numérique de la dérivée

$$\frac{df(x)}{dx} = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

101

Sanity checks

3. Toujours vérifier la validité d'un gradient

On peut facilement calculer un gradient à l'aide d'une approximation numérique.

Rappel

Approximation numérique du gradient

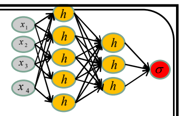
$$\nabla E(W) \approx \frac{E(W+H) - E(W)}{H}$$

En calculant

$$\frac{\partial E(W)}{\partial w_i} \approx \frac{E(w_i + h) - E(w_i)}{h} \quad \forall i$$

102

Vérification du gradient
(exemple)

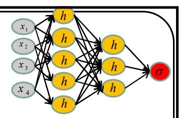


W	W+h	gradient W
$W_{00} = 0.34$	$W_{00} = 0.34$+0.0001	-2.5=(1.25322-1.25347)/0.0001
$W_{01} = -1.11$	$W_{01} = -1.11$	
$W_{02} = 0.78$	$W_{02} = 0.78$	
...	...	
$W_{20} = -3.1$	$W_{20} = -3.1$	
$W_{21} = -1.5,$	$W_{21} = -1.5,$	
$W_{22} = 0.33$	$W_{22} = 0.33$	

E(W)=1.25347 E(W+h)=1.25322

103

Vérification du gradient
(exemple)

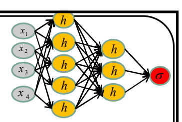


W	W+h	gradient W
$W_{00} = 0.34$	$W_{00} = 0.34$	-2.5
$W_{01} = -1.11$	$W_{01} = -1.11$+0.0001	0.6=(1.25353-125347)/0.0001
$W_{02} = 0.78$	$W_{02} = 0.78$	
...	...	
$W_{20} = -3.1$	$W_{20} = -3.1$	
$W_{21} = -1.5,$	$W_{21} = -1.5,$	
$W_{22} = 0.33$	$W_{22} = 0.33$	

E(W)=1.25347 E(W+h)=1.25353

104

Vérification du gradient
(exemple)

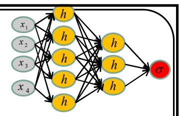


W	W+h	gradient W
$W_{00} = 0.34$	$W_{00} = 0.34$	-2.5
$W_{01} = -1.11$	$W_{01} = -1.11$	0.6
$W_{02} = 0.78$	$W_{02} = 0.78$ +0.0001	0.0=(1.25347-125347)/0.0001
...	...	
$W_{20} = -3.1$	$W_{20} = -3.1$	
$W_{21} = -1.5,$	$W_{21} = -1.5,$	
$W_{22} = 0.33$	$W_{22} = 0.33$	

E(W)=1.25347 E(W+h)=1.25347

105

Vérification du gradient
(exemple)

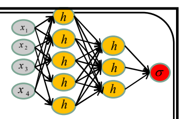


W	W+h	gradient W
$W_{00} = 0.34$	$W_{00} = 0.34$	-2.5
$W_{01} = -1.11$	$W_{01} = -1.11$	0.6
$W_{02} = 0.78$	$W_{02} = 0.78$	0.0
...	...	...
$W_{20} = -3.1$	$W_{20} = -3.1$	1.1
$W_{21} = -1.5,$	$W_{21} = -1.5,$	1.3
$W_{22} = 0.33$	$W_{22} = 0.33$	-2.1

E(W)=1.25347

106

Vérification du gradient
(exemple)

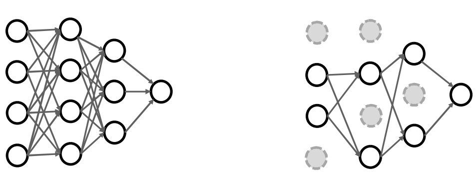


gradient W (numérique)		gradient W (retro-propagation)
-2.5		-2.5
0.6		0.6
0.0	=	0.0
...		...
1.1		1.1
1.3		1.3
-2.1		-2.1

107

Autre bonne pratique : *Dropout*

Forcer à zéro certains neurones de façon aléatoire à chaque itération



108

Autre bonne pratique : *Dropout*

Idée : s'assurer que **chaque neurone apprend pas lui-même**
en brisant au hasard des chemins.

Crédit http://cs231n.stanford.edu/

109

Autre bonne pratique : *Dropout*

```
p = 0.5 # probability of keeping a unit active. higher = less dropout

def train_step(X):
  """ X contains the data """

  # forward pass for example 3-layer neural network
  H1 = np.maximum(0, np.dot(W1, X) + b1)
  U1 = np.random.rand(*H1.shape) < p # first dropout mask
  H1 *= U1 # drop!
  H2 = np.maximum(0, np.dot(W2, H1) + b2)
  U2 = np.random.rand(*H2.shape) < p # second dropout mask
  H2 *= U2 # drop!
  out = np.dot(W3, H2) + b3

  # backward pass: compute gradients... (not shown)
  # perform parameter update... (not shown)
```

Crédit http://cs231n.stanford.edu/

110

Autre bonne pratique : *Dropout*

Le problème avec ***Dropout*** est en **prédiction (« test time »)**

car *dropout* **ajoute du bruit** à la prédiction

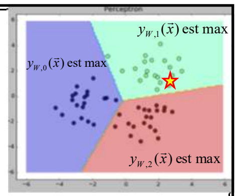
$$pred = y_W(\vec{x}, Z)$$

masque aléatoire

111

dropout **ajoute du bruit** à la prédiction.

Exemple simple : $\vec{x} = \begin{pmatrix} 2.2 \\ 1.3 \end{pmatrix}, t = 1$



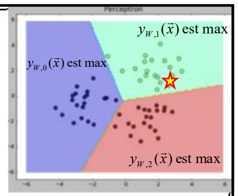
Si on lance le modèle 10 fois, on aura 10 réponses différentes

```
[ 0.09378555  0.76511644  0.141098  ]
[ 0.13982909  0.62885327  0.23131764]
[ 0.23658253  0.61960162  0.14381585]
[ 0.23779425  0.51357115  0.24863461]
[ 0.16005442  0.68060227  0.1593433 ]
[ 0.16303195  0.50583392  0.33113413]
[ 0.24183069  0.51319834  0.24497097]
[ 0.14521815  0.52006858  0.33471327]
[ 0.09952161  0.66276146  0.23771692]
[ 0.16172851  0.6044877   0.23378379]
```

112

dropout **ajoute du bruit** à la prédiction.

Exemple simple : $\vec{x} = \begin{pmatrix} 2.2 \\ 1.3 \end{pmatrix}, t = 1$



Solution, exécuter le modèle un grand nombre de fois et **prendre la moyenne**.

```
[ 0.09378555  0.76511644  0.141098  ]
[ 0.13982909  0.62885327  0.23131764]
[ 0.23658253  0.61960162  0.14381585]
[ 0.23779425  0.51357115  0.24863461]
[ 0.16005442  0.68060227  0.1593433 ]
[ 0.16303195  0.50583392  0.33113413]
[ 0.24183069  0.51319834  0.24497097]
[ 0.14521815  0.52006858  0.33471327]
[ 0.09952161  0.66276146  0.23771692]
[ 0.16172851  0.6044877   0.23378379]
                (…)
[ 0.15933813,  0.65957005,  0.18109183]
```

113

Exécuter le modèle un grand nombre de fois et **prendre la moyenne** revient à calculer **l'espérance mathématique**

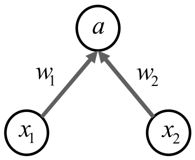
$$pred = E_z\left[y_W\left(\vec{x},\vec{z}\right)\right] = \sum_i P(\vec{z}) y_W\left(\vec{x},\vec{z}\right)$$

Bonne nouvelle, on peut faire plus simple en approximant cette l'expérance mathématique!

114

Regardons pour un neurone

Avec une probabilité de *dropout* de 50%, en prédiction w_1 et w_2 seront **nuls 1 fois sur 2**



$$E[a] = \frac{1}{4}(w_1x_1 + w_2x_2) + \frac{1}{4}(w_1x_1 + 0x_2)$$
$$+ \frac{1}{4}(0x_1 + w_2x_2) + \frac{1}{4}(0x_1 + 0x_2)$$
$$= \frac{1}{2}(w_1x_1 + w_2x_2)$$

En prédiction, on a qu'à multiplier par la prob. de *dropout*.

115

```python
""" Vanilla Dropout: Not recommended implementation (see notes below) """

p = 0.5 # probability of keeping a unit active. higher = less dropout

def train_step(X):
  """ X contains the data """

  # forward pass for example 3-layer neural network
  H1 = np.maximum(0, np.dot(W1, X) + b1)
  U1 = np.random.rand(*H1.shape) < p # first dropout mask
  H1 *= U1 # drop!
  H2 = np.maximum(0, np.dot(W2, H1) + b2)
  U2 = np.random.rand(*H2.shape) < p # second dropout mask
  H2 *= U2 # drop!
  out = np.dot(W3, H2) + b3

  # backward pass: compute gradients... (not shown)
  # perform parameter update... (not shown)

def predict(X):
  # ensembled forward pass
  H1 = np.maximum(0, np.dot(W1, X) + b1) * p # NOTE: scale the activations
  H2 = np.maximum(0, np.dot(W2, H1) + b2) * p # NOTE: scale the activations
  out = np.dot(W3, H2) + b3
```

En prédiction, tous les neurones sont actifs
➔ tout ce qu'il faut faire est de **multiplier la sortie de chaque couche par la probabilité de dropout**

Crédit http://cs231n.stanford.edu/

116

Descente de gradient
version améliorée

117

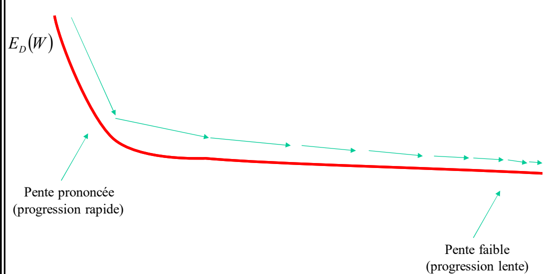
Descente de gradient

$$W^{[t+1]} = W^{[t]} - \eta \nabla E_D\left(W^{[t]}\right)$$

118

Descente de gradient : **problème**

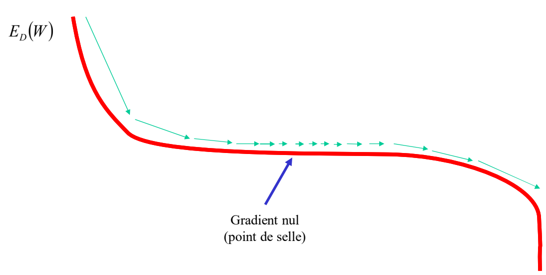
Progrès quasi nul lorsque la pente est très faible



119

Descente de gradient : **problème**

Les points de selles sont fréquents en haute dimension



120

Descente de gradient : **problème**

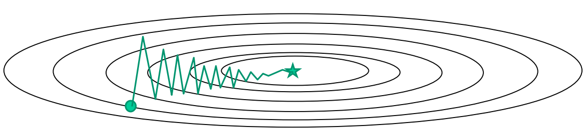
Qu’arrive-t-il si la fonction de coût (loss) a une pente prononcée dans une direction et moins prononcée dans une autre direction?

121

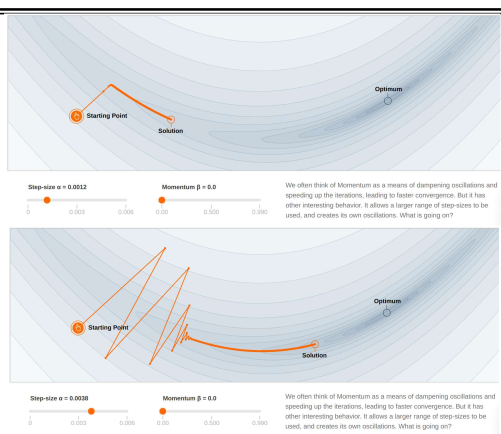
Descente de gradient : **problème**

Qu’arrive-t-il si la fonction de coût (loss) a une pente prononcée dans une direction et moins prononcée dans une autre direction?

Progrès très lent le long de la pente la plus faible et oscillation le long de l’autre direction.



122



https://distill.pub/2017/momentum/

123

Descente de gradient + Momentum

Descente de gradient stochastique

$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta \nabla E_{\vec{x}_n}\left(\mathrm{w}_t\right)$$

Descente de gradient stochastique + **Momentum**

$$v_{t+1} = \rho v_t + \nabla E_{\vec{x}_n}\left(\mathrm{w}_t\right)$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta v_{t+1}$$

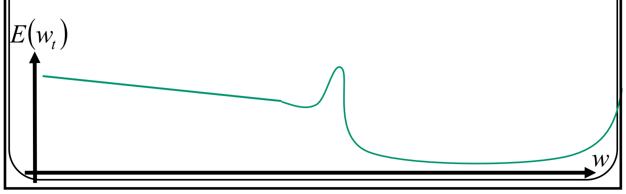
Provient de l'équation de la vitesse
(à démontrer en devoir ou en exercice)

ρ exprime la « friction », en général $\in [0.5, 1[$

124

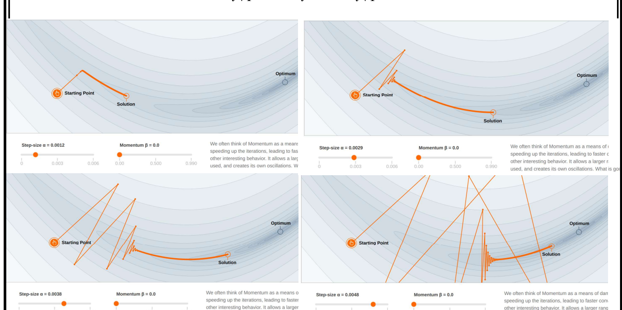
	v_t	$\nabla E_x(w_t)$
$t=1$		
$t=2$		
$t=3$		
$t=4$		
$t=5$		
$t=6$		
$t=7$		
$t=8$		

$$v_{t+1} = \rho v_t + \nabla E_{\vec{x}_n}\left(\mathrm{w}_t\right)$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta v_{t+1}$$



125

$$v_{t+1} = \rho v_t + \nabla E_{\vec{x}_n}\left(\mathrm{w}_t\right)$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta v_{t+1}$$



https://distill.pub/2017/momentum/

126

$$v_{t+1} = \rho v_t + \nabla E_{\vec{x}_n}\left(\mathrm{w}_t\right)$$

$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta v_{t+1}$$

127

AdaGrad (décroissance automatique de η)

Descente de gradient stochastique

$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta \nabla E_{\vec{x}_n}\left(\mathrm{w}_t\right)$$

AdaGrad

$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}\left(\mathrm{w}_t\right)$$

$$m_{t+1} = m_t + \left|dE_t\right|$$

$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1} + \varepsilon} dE_t$$

128

AdaGrad (décroissance automatique de η)

Descente de gradient stochastique

$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta \nabla E_{\vec{x}_n}\left(\mathrm{w}_t\right)$$

AdaGrad

$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}\left(\mathrm{w}_t\right)$$

$$m_{t+1} = m_t + \left|dE_t\right|$$

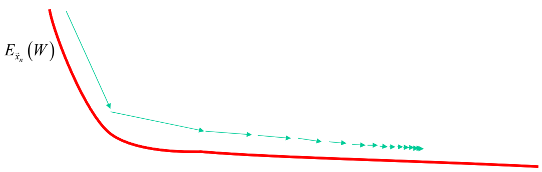
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1} + \varepsilon} dE_t$$

η décroit sans cesse au fur et à mesure de l'optimisation

129

AdaGrad (décroissance automatique de η)

Qu'arrive-t-il à long terme?



$$\frac{\eta}{m_{t+1}+\varepsilon} \to 0$$

130

RMSProp (AdaGrad amélioré)

AdaGrad

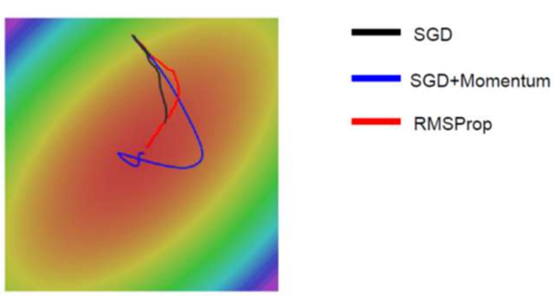
$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$
$$m_{t+1} = m_t + |dE_t|$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1}+\varepsilon} dE_t$$

RMSProp

$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$
$$m_{t+1} = \gamma m_t + (1-\gamma)|dE_t|$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1}+\varepsilon} dE_t$$

η décroit lorsque le gradient est élevé
η augmente lorsque le gradient est faible

131



132

Adam (Combo entre Momentum et RMSProp)

Momentum

$$v_{t+1} = \rho v_t + \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta v_{t+1}$$

Adam

$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$
$$v_{t+1} = \alpha v_t + (1-\alpha) dE_t$$
$$m_{t+1} = \gamma m_t + (1-\gamma)|dE_t|$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1}+\varepsilon} v_{t+1}$$

133

Adam (Combo entre Momentum et RMSProp)

Momentum

$$v_{t+1} = \rho v_t + \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \eta v_{t+1}$$

Adam

Momentum

$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$
$$\boxed{v_{t+1} = \alpha v_t + (1-\alpha) dE_t}$$
$$m_{t+1} = \gamma m_t + (1-\gamma)|dE_t|$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1}+\varepsilon} v_{t+1}$$

134

Adam (Combo entre Momentum et RMSProp)

RMSProp

$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$
$$m_{t+1} = \gamma m_t + (1-\gamma)|dE_t|$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1}+\varepsilon} dE_t$$

Adam

RMSProp

$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}(\mathrm{w}_t)$$
$$v_{t+1} = \alpha v_t + (1-\alpha) dE_t$$
$$\boxed{m_{t+1} = \gamma m_t + (1-\gamma)|dE_t|}$$
$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1}+\varepsilon} v_{t+1}$$

135

Adam (Version complète)

$$v_{t=0} = 0$$

$$m_{t=0} = 0$$

```
for t=1 à num_iterations
     for n=0 à N
```

$$dE_t = \nabla E_{\vec{x}_n}\left(\mathrm{w}_t\right)$$

$$v_{t+1} = \alpha v_t + (1-\alpha) dE_t$$

$$m_{t+1} = \gamma m_t + (1-\gamma)\left|dE_t\right|$$

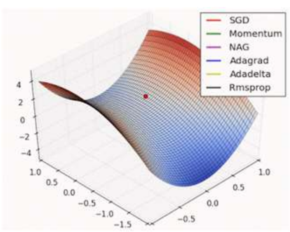
$$v_{t+1} = \frac{v_{t+1}}{1-\beta_1^t}, m_{t+1} = \frac{m_{t+1}}{1-\beta_2^t}$$

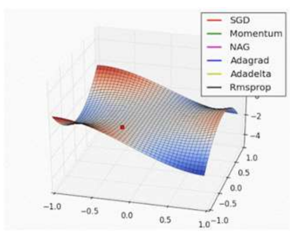
$\beta_1 = 0.9, \beta_2 = 0.99$

$$\mathrm{w}_{t+1} = \mathrm{w}_t - \frac{\eta}{m_{t+1}+\varepsilon} v_{t+1}$$

136

Illustrations



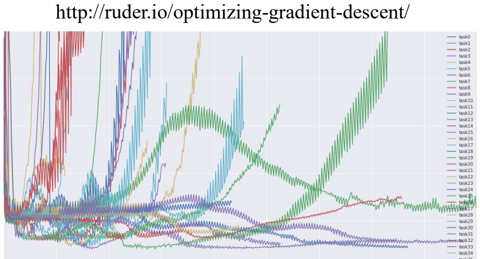


À voir sur :
www.denizyuret.com/2015/03/alec-radfords-animations-for.html

137

Autre excellent survol

http://ruder.io/optimizing-gradient-descent/



138