Лекция 4:
Нейронные сети и обратное распространение ошибки

Напомним...

$$s = f(x; W) = Wx$$

Оценки линейного классификатора

$$L_i = \sum_{j \neq y_i} \max(0, s_j - s_{y_i} + 1)$$

SVM loss (или softmax)

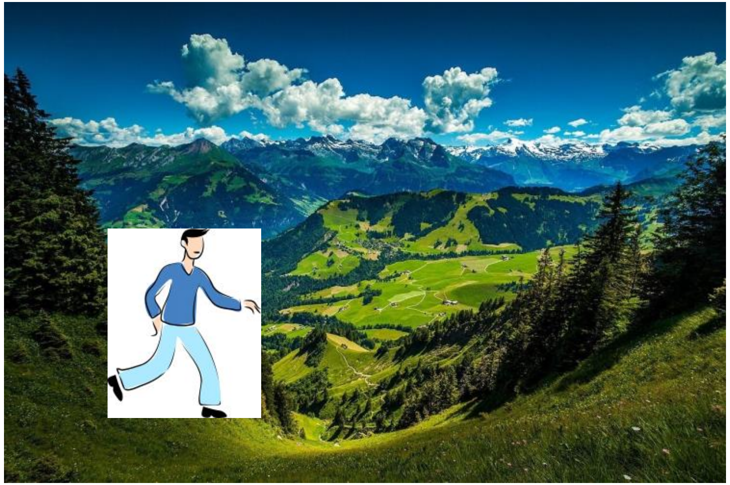
$$L = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} L_i + \lambda \sum_k W_k^2$$

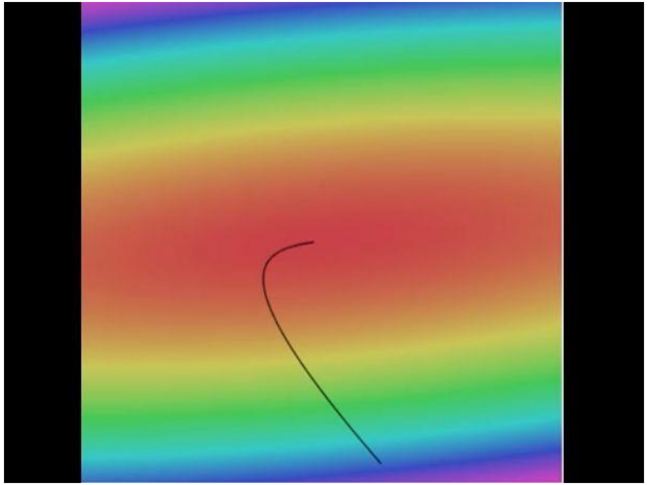
data loss + regularization

Как найти W?

$$\boxed{\nabla_W L}$$

Поиск W: градиентный спуск






```
# Vanilla Gradient Descent

while True:
  weights_grad = evaluate_gradient(loss_fun, data, weights)
  weights += - step_size * weights_grad # perform parameter update
```

Градиентный спуск

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

- Численный градиент медленный, приближенный, но простой в реализации

- Аналитический градиент: точный, быстрый, можно ошибиться!

=>

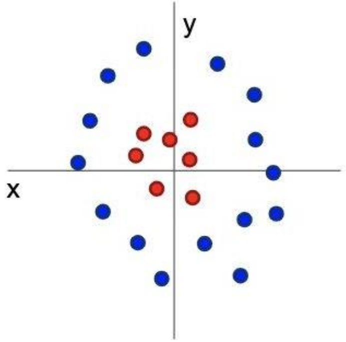
<u>На практике:</u> Используем аналитический градиент но сверяем с численным - **gradient check.**

Проблема: Линейная классификация не очень хороша…

Visual Viewpoint

Линейный классификатор делает по одному шаблону на класс

Geometric Viewpoint



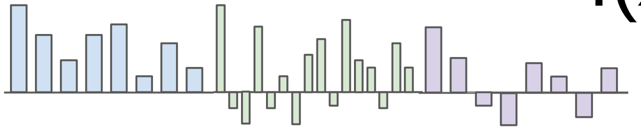
Линейный классификатор требует линейной разделимости классов

Сопоставление с шаблоном – плохо
Признаками выступают пикселы…

$$f(x) = Wx$$

Оценки
для
классов

Выделение признаков из изображения – лучше!

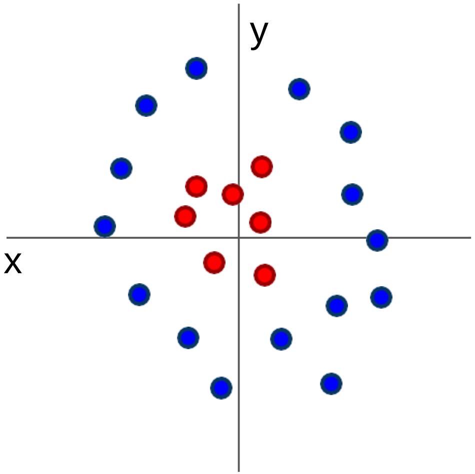


Пространство признаков

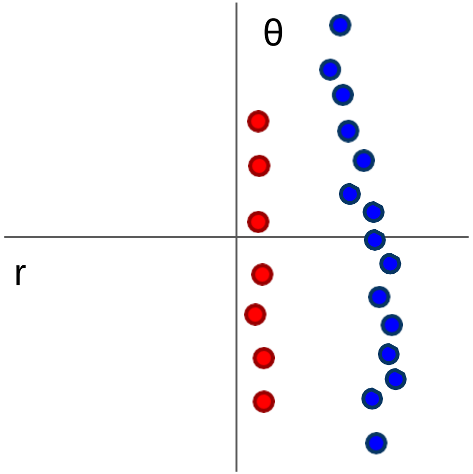
$f(x) = Wx$

Class scores

Признаковое представление



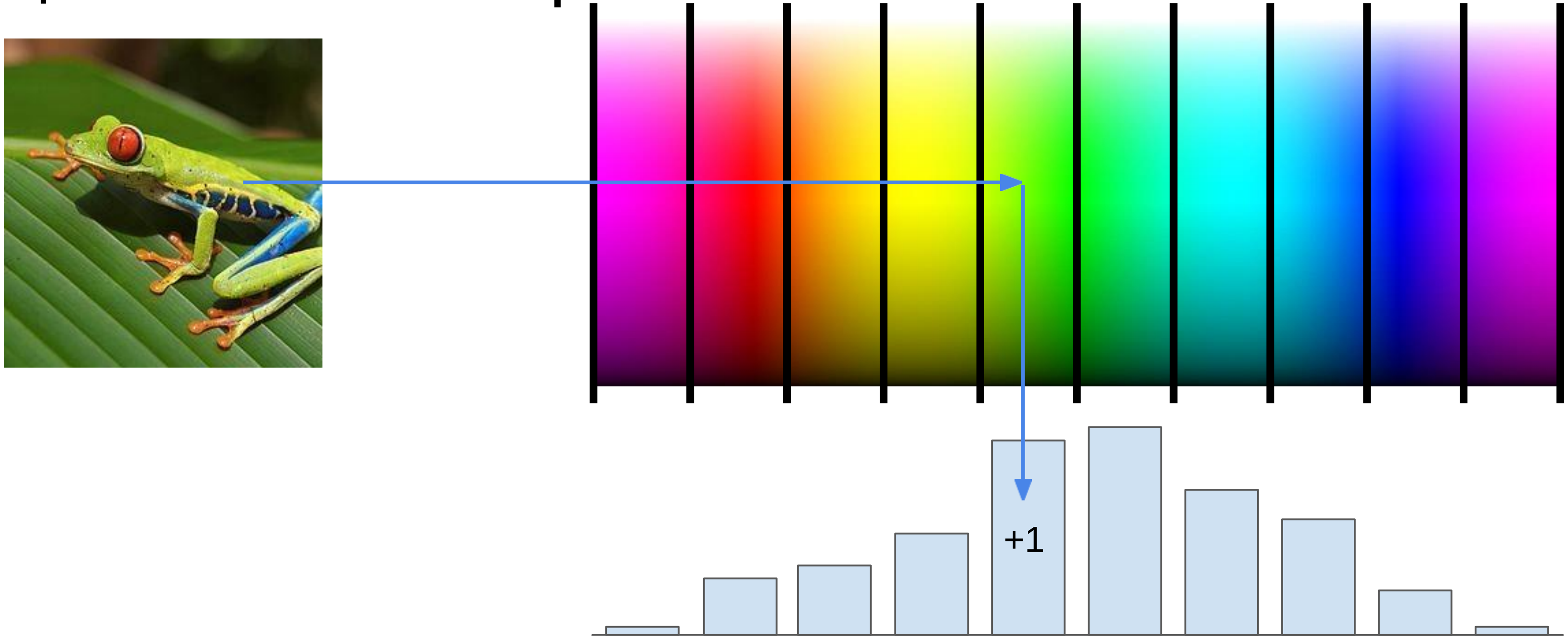
$$f(x, y) = (r(x, y), \theta(x, y))$$



Линейно неразделимые классы

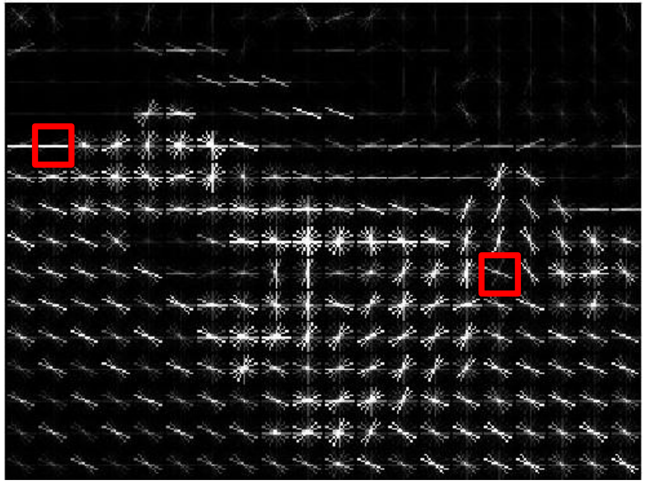
Становятся разделимыми после выделения признаков

Пример выделения признаков: цветовые гистограммы



Пример: Histogram of Oriented Gradients (HoG)

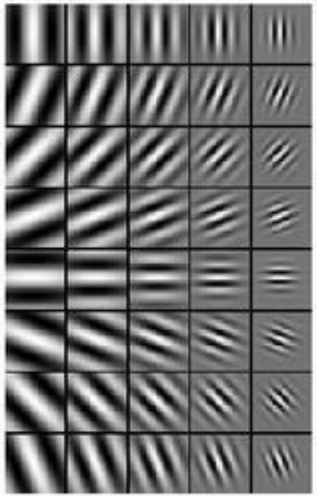
Разобьем на области 8x8 пикселов
В каждом регионе подсчитаем 9 направлений градиента



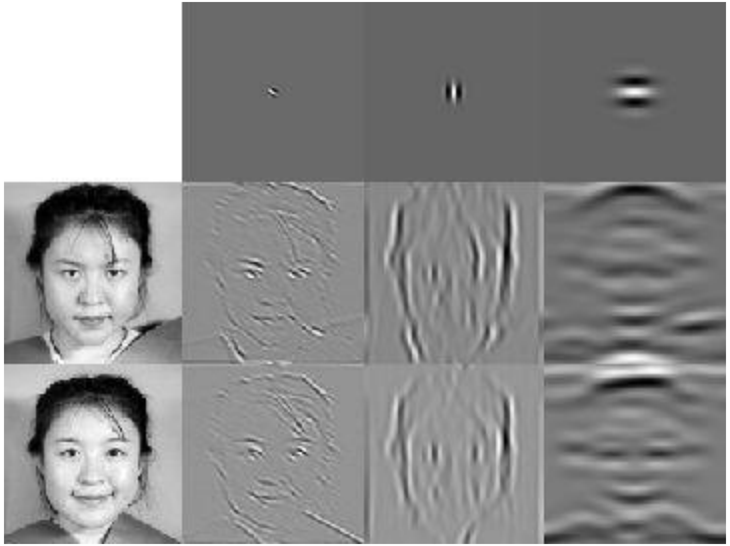
Пример: 320x240 пикселов поделили на 40x30 областей; в каждой области 9 значений градиента размер вектора признаков 30*40*9 = 10 800 вместо 320*240*3 = 230 400

Lowe, “Object recognition from local scale-invariant features”, ICCV 1999
Dalal and Triggs, "Histograms of oriented gradients for human detection," CVPR 2005

Пример: Фильтры Габора



Примеры фильтров Габора
разных размеров и ориентаций



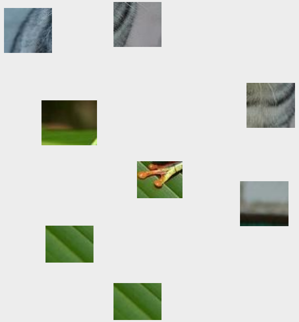
Применение фильтров Габора

Gabor, D. 1946. Theory of communication. J. Inst. Electr. Eng., 93:429–457

Пример: визуальное кодирование (bag of words)

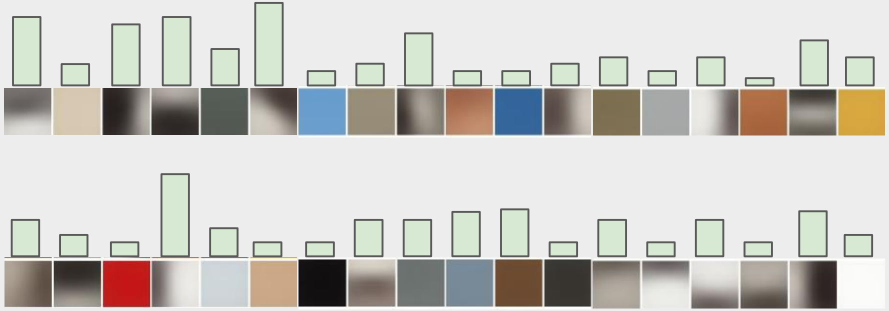
1: Формируем словарь

Выделяем случайные фрагменты (патчи)



Кластеризуем патчи чтобы построить «словарь»

2: Кодируем картинку по словарю



Fei-Fei and Perona, “A bayesian hierarchical model for learning natural scene categories”, CVPR 2005

Image Features

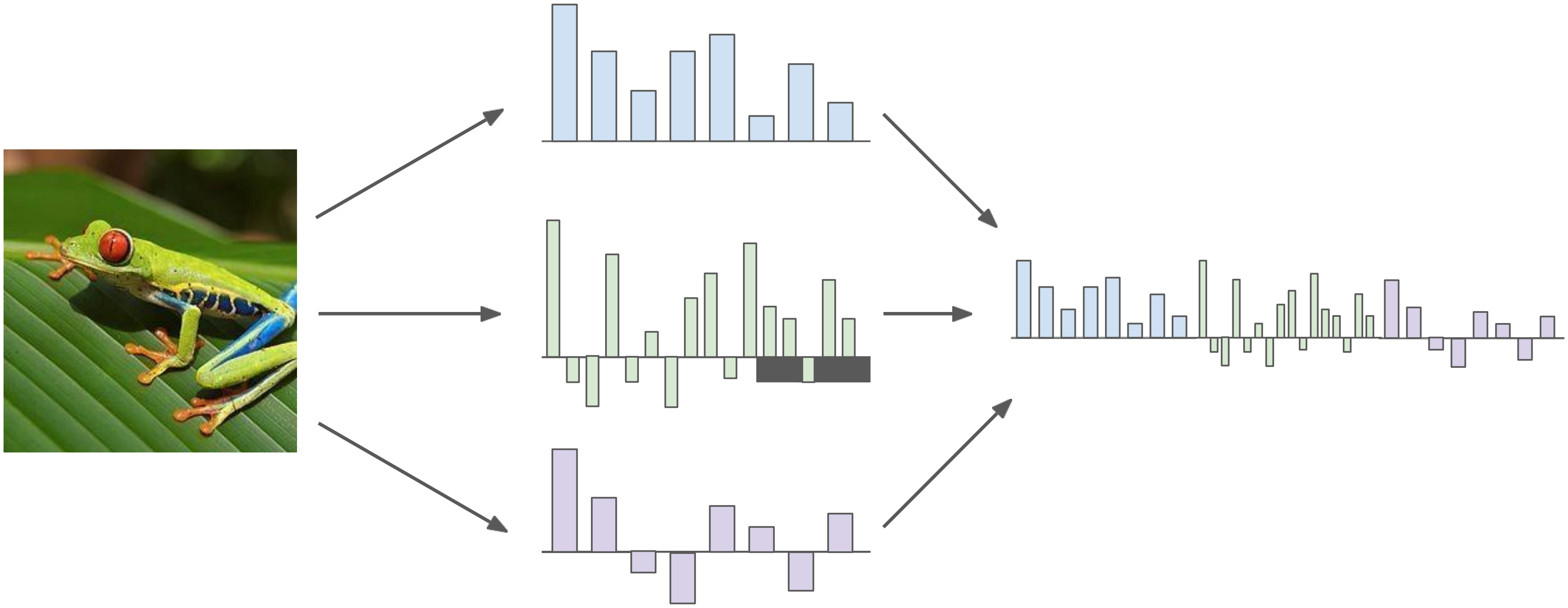
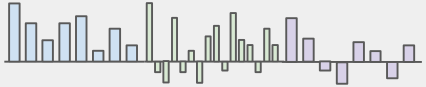


Image features vs ConvNets

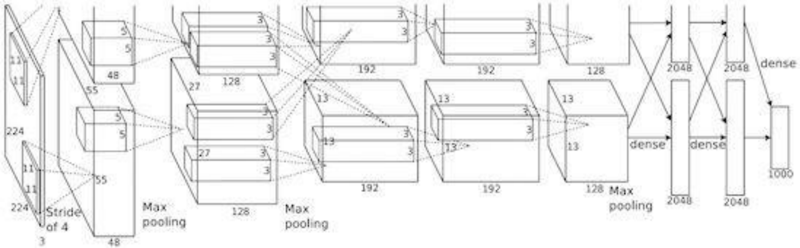
Feature Extraction



f

10 оценок для классов

training

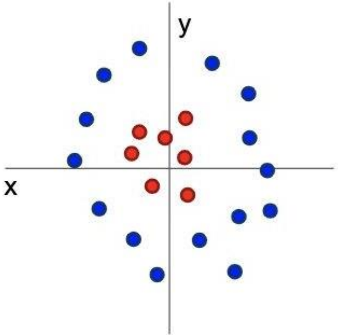


Krizhevsky, Sutskever, and Hinton, “Imagenet classification with deep convolutional neural networks”, NIPS 2012.
Figure copyright Krizhevsky, Sutskever, and Hinton, 2012. Reproduced with permission.

10 оценок для классов

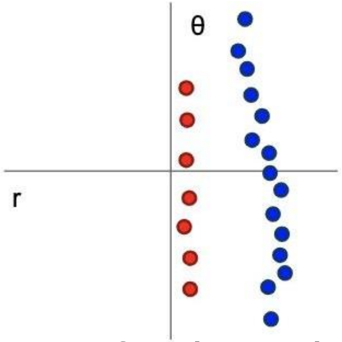
training

One Solution: Feature Transformation

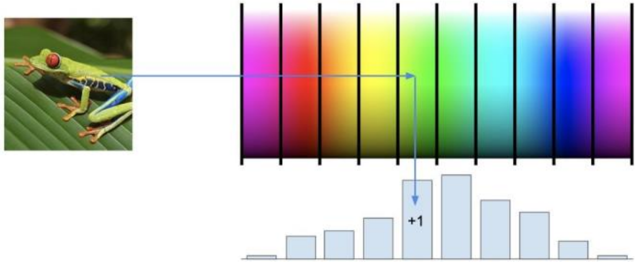


$f(x, y) = (r(x, y), \theta(x, y))$

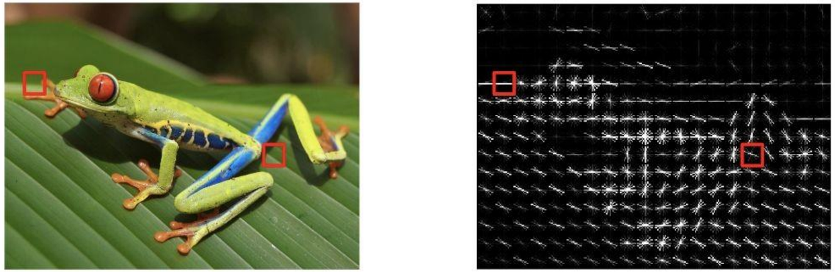
Выделяем признаки, потом выполняем классификацию



Color Histogram



Histogram of Oriented Gradients (HoG)



Нейронные сети

Нейронные сети

(**Было**) линейная оценка: $f = Wx$

(**Стало**) 2-слоя НС $f = W_2 \max(0, W_1 x)$

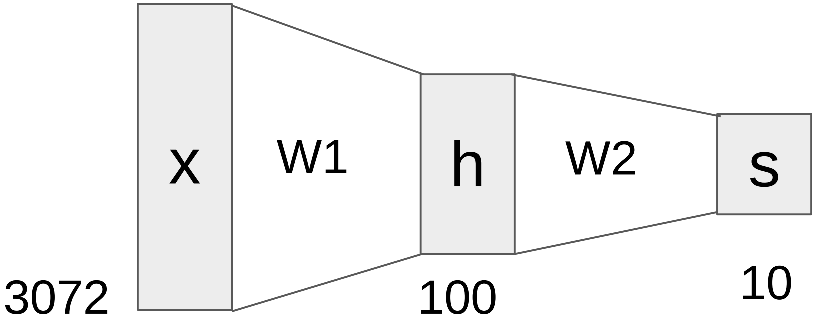
$$x \in \mathbb{R}^D, W_1 \in \mathbb{R}^{H \times D}, W_2 \in \mathbb{R}^{C \times H}$$

“Нейронные сети” общий термин; эти сети называют полносвязными “fully-connected networks” или “multi-layer perceptrons” (MLP)

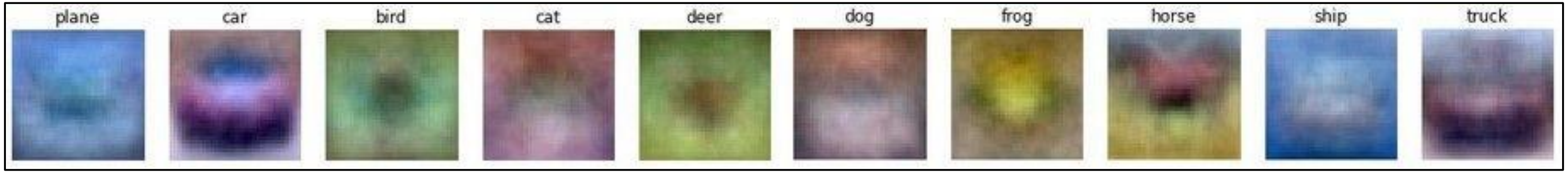
Нейронные сети

(**Было**) линейная оценка: $f = Wx$

(**Стало**) 2-слоя НС $f = W_2 \max(0, W_1 x)$



$$x \in \mathbb{R}^D, W_1 \in \mathbb{R}^{H \times D}, W_2 \in \mathbb{R}^{C \times H}$$



100 шаблонов вместо 10

Общие шаблоны для классов

Нейронные сети

(**Было**) линейная оценка: $$f = Wx$$

(**Стало**) 2-слоя НС $$f = W_2 \boxed{\max(0,} W_1 x)$$

Функция *max*(0,*z*) называется **функция активации.**

Q: что будет если ее убрать?

Нейронные сети

(**Было**) линейная оценка: $$f = Wx$$

(**Стало**) 2-слоя НС $$f = W_2 \boxed{\max(0,} W_1 x)$$

Функция *max*(0,*z*) называется **функция активации.**

Q: что будет если ее убрать?

$$f = W_2 W_1 x \qquad W_3 = W_2 W_1 \in \mathbb{R}^{C \times H}, \underline{f = W_3 x}$$

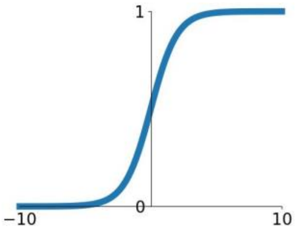
A: опять получим линейный классификатор!

Функции активации

ReLU выбор по умолчанию

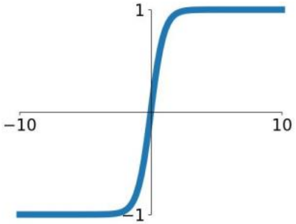
Sigmoid

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



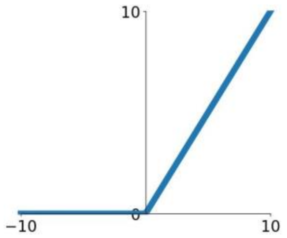
tanh

$$\tanh(x)$$



ReLU

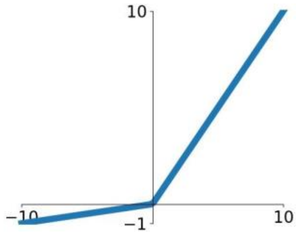
$$\max(0, x)$$



Rectified Linear Unit

Leaky ReLU

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

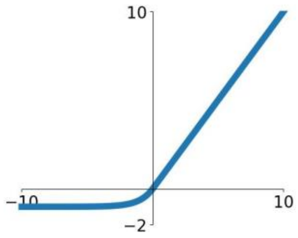


Maxout

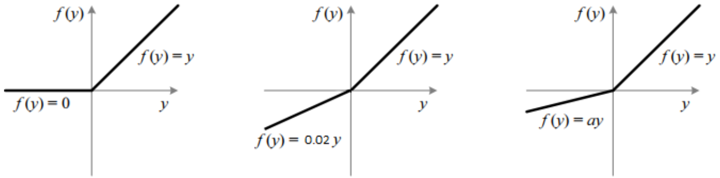
$$\max(w_1^T x + b_1, w_2^T x + b_2)$$

ELU

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



PReLU - Parametric ReLU



www.cv-foundation.org › He_... PDF Перевести эту страницу

Delving Deep into Rectifiers: Surpassing Human-Level ...

Delving Deep into Rectifiers: **Surpassing Human-Level Performance on ImageNet Classification**. Kaiming He. Xiangyu Zhang. Shaoqing Ren. Jian Sun.

автор: K He - 2015 - Цитируется: 9211 - Похожие статьи

Сравните с цитируемостью работ Колмогорова и Цибенко

link.springer.com › article - Перевести эту страницу

Approximation by superpositions of a sigmoidal function ...

Jones, Constructive **approximations** for neural networks by **sigmoidal functions**, Technical Report Series, No. 7, Department of Mathematics, University of Lowell, ...

автор: G Cybenko - 1989 - Цитируется: 13151 - Похожие статьи

www.mathnet.ru › dan22050 - Перевести эту страницу

A. N. Kolmogorov, “On the representation of continuous ...

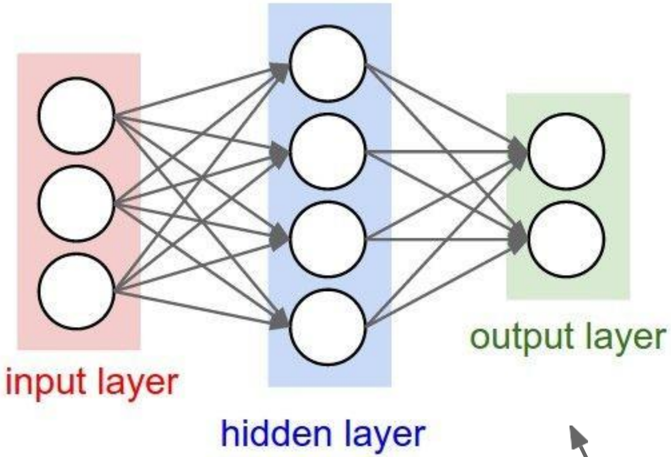
On the representation of continuous functions of many variables by superposition of continuous functions of one variable and addition A. N. Kolmogorov Full text: ...

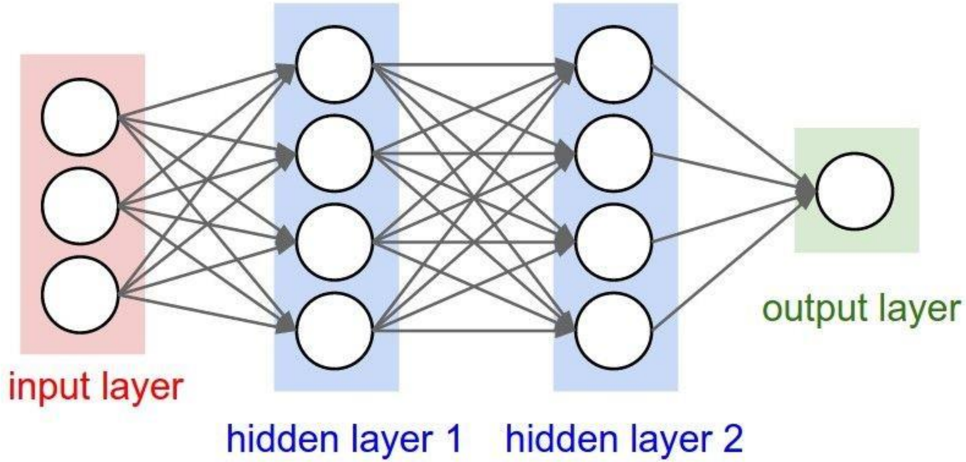
автор: AN Kolmogorov - 1957 - Цитируется: 1194 - Похожие статьи

$$f(x_1, \cdots, x_n) = \sum_{i=1}^{2n+1} g_i \left(\sum_{j=1}^{n} \phi_{ji}(x_j) \right)$$

Kolmogorov's Theorem (1957)

Нейронные сети: архитектура



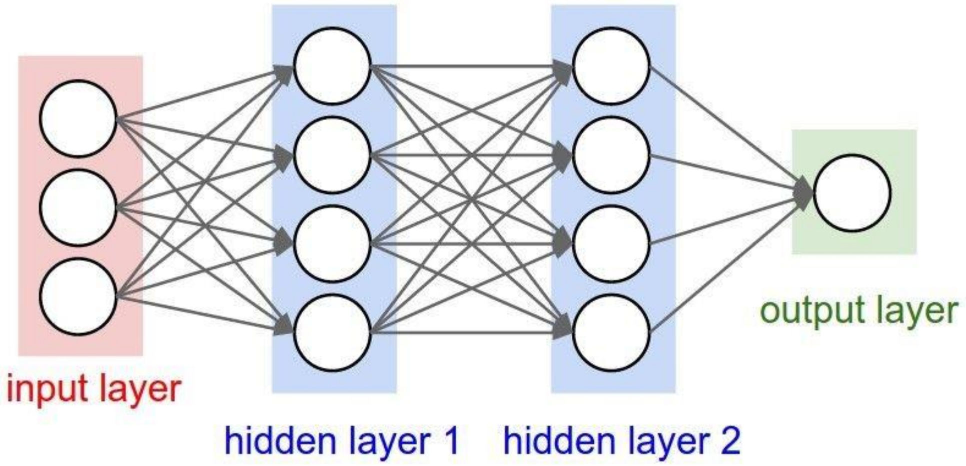


“2-layer Neural Net”, or
“1-hidden-layer Neural Net”
Двухслойная сеть,
Сеть с одним скрытым
слоем

“3-layer Neural Net”, or
“2-hidden-layer Neural Net”

“Fully-connected” layers – полносвязные слои

Пример: прямой проход НС (forward pass)




```python
# forward-pass of a 3-layer neural network:
f = lambda x: 1.0/(1.0 + np.exp(-x)) # activation function (use sigmoid)
x = np.random.randn(3, 1) # random input vector of three numbers (3x1)
h1 = f(np.dot(W1, x) + b1) # calculate first hidden layer activations (4x1)
h2 = f(np.dot(W2, h1) + b2) # calculate second hidden layer activations (4x1)
out = np.dot(W3, h2) + b3 # output neuron (1x1)
```

Реализация обучения двухслойной сети ~20 строчек:

```python
import numpy as np
from numpy.random import randn

N, D_in, H, D_out = 64, 1000, 100, 10
x, y = randn(N, D_in), randn(N, D_out)
w1, w2 = randn(D_in, H), randn(H, D_out)

for t in range(2000):
  h = 1 / (1 + np.exp(-x.dot(w1)))
  y_pred = h.dot(w2)
  loss = np.square(y_pred - y).sum()
  print(t, loss)

  grad_y_pred = 2.0 * (y_pred - y)
  grad_w2 = h.T.dot(grad_y_pred)
  grad_h = grad_y_pred.dot(w2.T)
  grad_w1 = x.T.dot(grad_h * h * (1 - h))

  w1 -= 1e-4 * grad_w1
  w2 -= 1e-4 * grad_w2
```

Прямой проход

Расчет градиента
(обратный проход)

Обновление весов

Реализация обучения двухслойной сети ~20 строчек:

```python
import numpy as np
from numpy.random import randn

N, D_in, H, D_out = 64, 1000, 100, 10
x, y = randn(N, D_in), randn(N, D_out)
w1, w2 = randn(D_in, H), randn(H, D_out)

for t in range(2000):
  h = 1 / (1 + np.exp(-x.dot(w1)))
  y_pred = h.dot(w2)
  loss = np.square(y_pred - y).sum()
  print(t, loss)

  grad_y_pred = 2.0 * (y_pred - y)
  grad_w2 = h.T.dot(grad_y_pred)
  grad_h = grad_y_pred.dot(w2.T)
  grad_w1 = x.T.dot(grad_h * h * (1 - h))

  w1 -= 1e-4 * grad_w1
  w2 -= 1e-4 * grad_w2
```

Определим сеть.

x, y – вход и выход

w1, w2 – матрицы весов

Реализация обучения двухслойной сети ~20 строчек:

```python
import numpy as np
from numpy.random import randn

N, D_in, H, D_out = 64, 1000, 100, 10
x, y = randn(N, D_in), randn(N, D_out)
w1, w2 = randn(D_in, H), randn(H, D_out)

for t in range(2000):
  h = 1 / (1 + np.exp(-x.dot(w1)))
  y_pred = h.dot(w2)
  loss = np.square(y_pred - y).sum()
  print(t, loss)

  grad_y_pred = 2.0 * (y_pred - y)
  grad_w2 = h.T.dot(grad_y_pred)
  grad_h = grad_y_pred.dot(w2.T)
  grad_w1 = x.T.dot(grad_h * h * (1 - h))

  w1 -= 1e-4 * grad_w1
  w2 -= 1e-4 * grad_w2
```

Определение сети

Прямой проход (forward pass)

Сигмоидальная активация
sigmoid activation function

$$\frac{1}{1+e^{-x}}$$

Реализация обучения двухслойной сети ~20 строчек:

```
import numpy as np
from numpy.random import randn

N, D_in, H, D_out = 64, 1000, 100, 10
x, y = randn(N, D_in), randn(N, D_out)
w1, w2 = randn(D_in, H), randn(H, D_out)

for t in range(2000):
  h = 1 / (1 + np.exp(-x.dot(w1)))
  y_pred = h.dot(w2)
  loss = np.square(y_pred - y).sum()
  print(t, loss)

  grad_y_pred = 2.0 * (y_pred - y)
  grad_w2 = h.T.dot(grad_y_pred)
  grad_h = grad_y_pred.dot(w2.T)
  grad_w1 = x.T.dot(grad_h * h * (1 - h))

  w1 -= 1e-4 * grad_w1
  w2 -= 1e-4 * grad_w2
```

Определение сети

Forward pass

Аналитический расчет градиента

$$\frac{d\sigma(x)}{dx} = \frac{e^{-x}}{(1+e^{-x})^2} = \left(\frac{1+e^{-x}-1}{1+e^{-x}}\right)\left(\frac{1}{1+e^{-x}}\right) = (1-\sigma(x))\sigma(x)$$

Реализация обучения двухслойной сети ~20 строчек:

```python
import numpy as np
from numpy.random import randn

N, D_in, H, D_out = 64, 1000, 100, 10
x, y = randn(N, D_in), randn(N, D_out)
w1, w2 = randn(D_in, H), randn(H, D_out)

for t in range(2000):
  h = 1 / (1 + np.exp(-x.dot(w1)))
  y_pred = h.dot(w2)
  loss = np.square(y_pred - y).sum()
  print(t, loss)

  grad_y_pred = 2.0 * (y_pred - y)
  grad_w2 = h.T.dot(grad_y_pred)
  grad_h = grad_y_pred.dot(w2.T)
  grad_w1 = x.T.dot(grad_h * h * (1 - h))

  w1 -= 1e-4 * grad_w1
  w2 -= 1e-4 * grad_w2
```

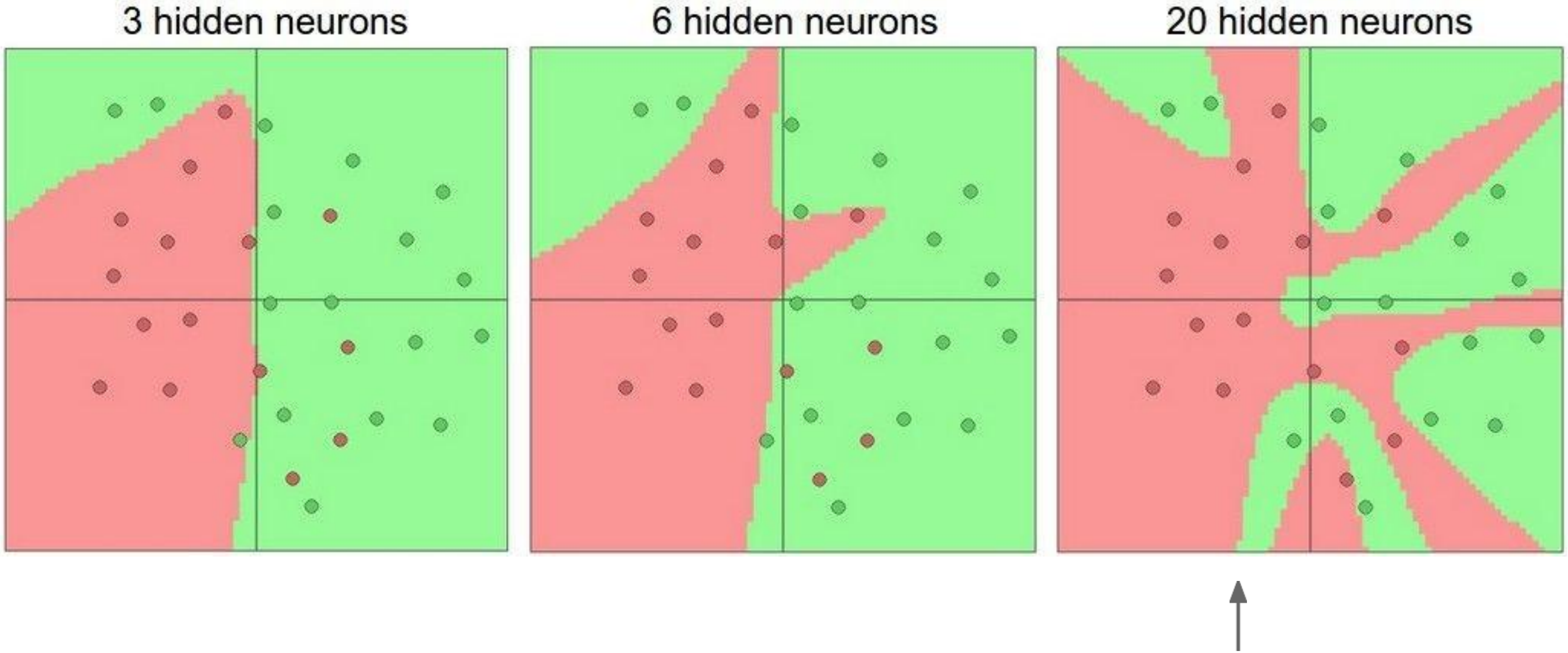
Определение сети

Forward pass

Аналитический расчет градиента

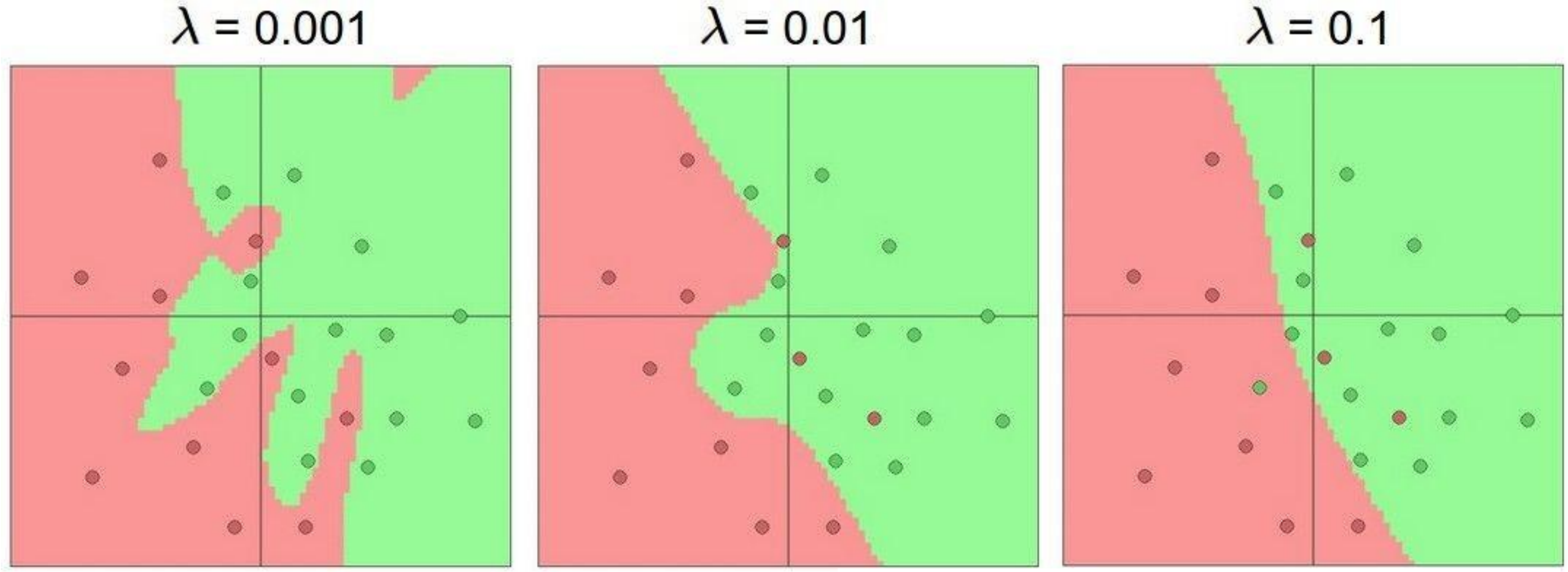
Градиентный спуск
Gradient descent

Размер и число слоев



Больше нейронов точнее

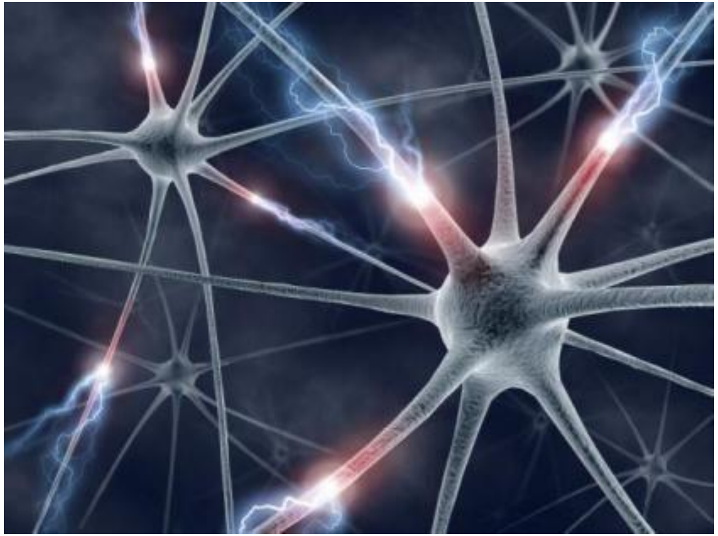
Регуляризация:

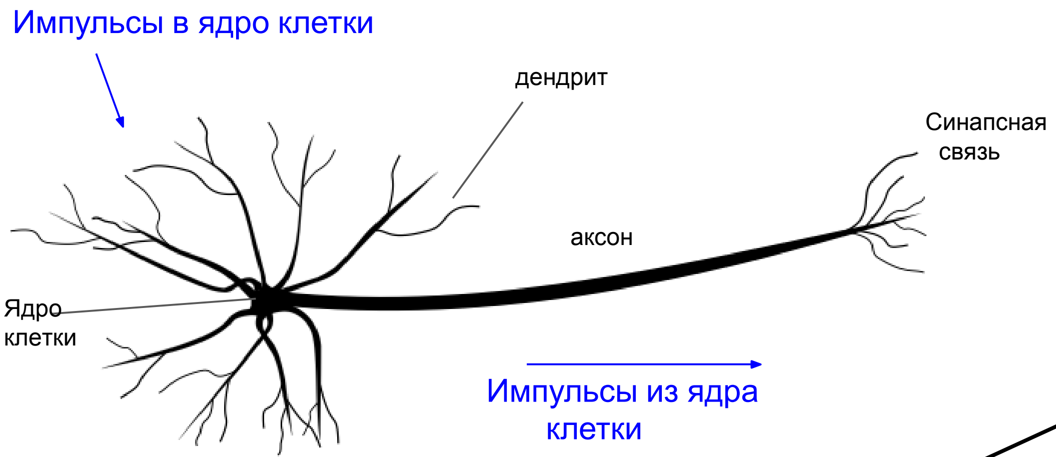


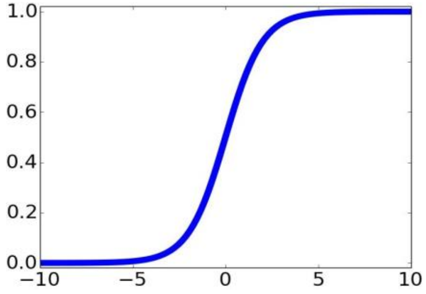
(Демо ConvNetJS: http://cs.stanford.edu/people/karpathy/convnetjs/demo/classify2d.html)

$$L(W) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} L_i(f(x_i, W), y_i) + \lambda R(W)$$

Аналогия с мозгом

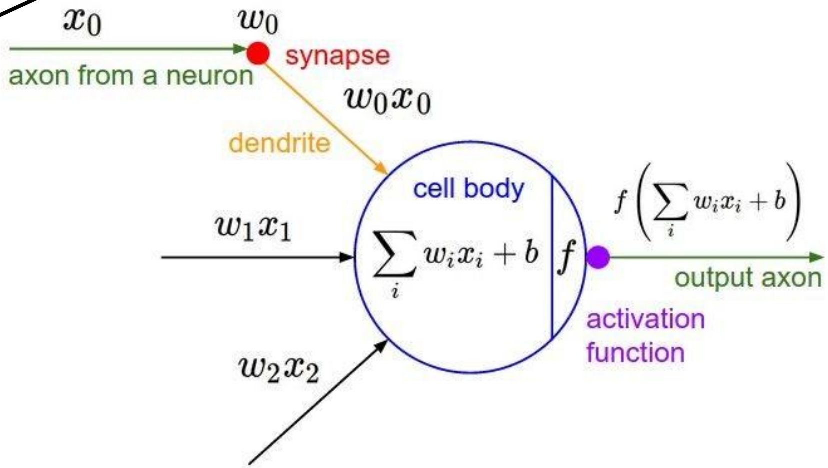




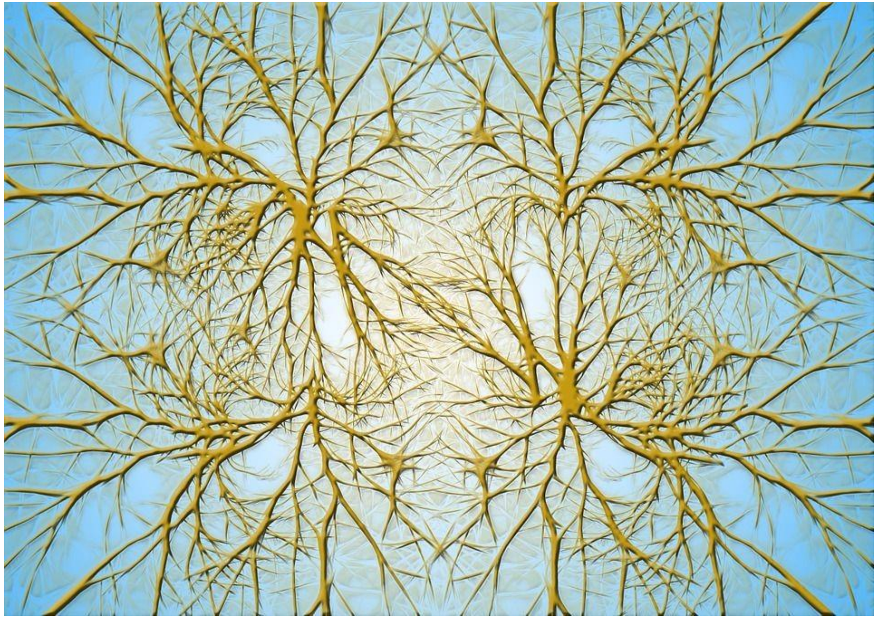


Сигмоидальная активация

$$\frac{1}{1+e^{-x}}$$

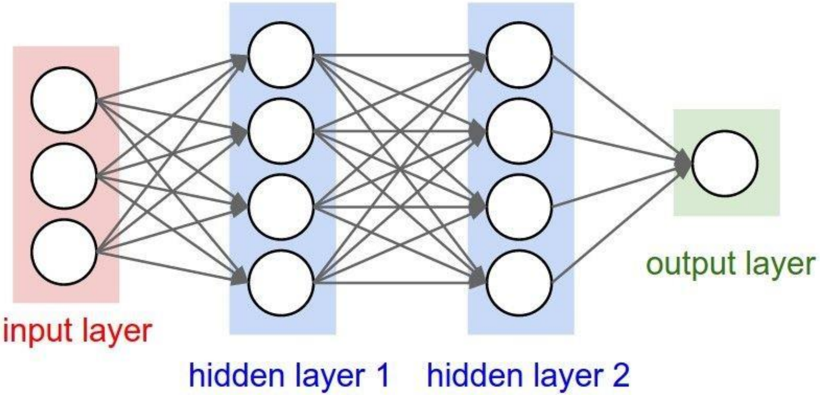


Биологические нейроны: Сложная связность



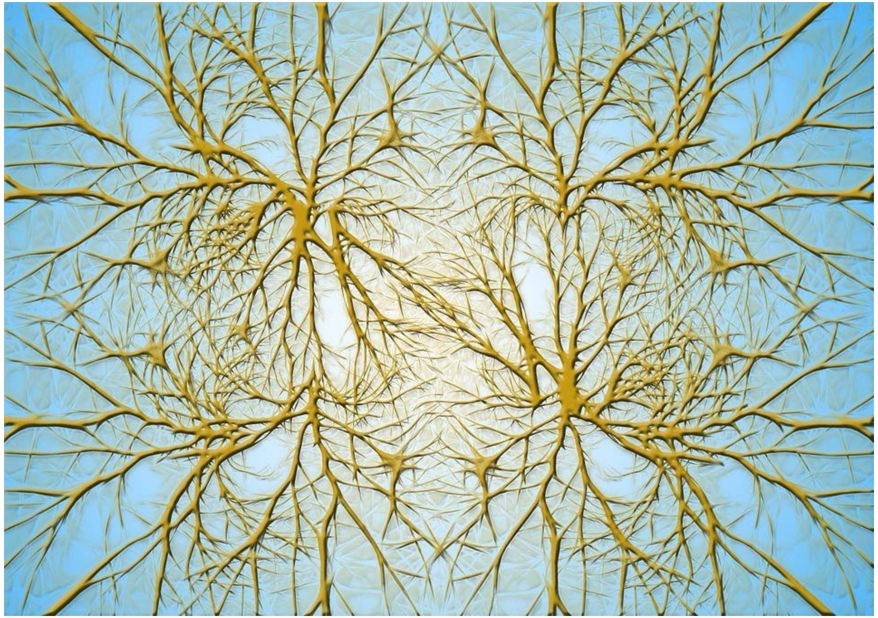
This image is CC0 Public Domain

Искусственная НС: слоистая организация

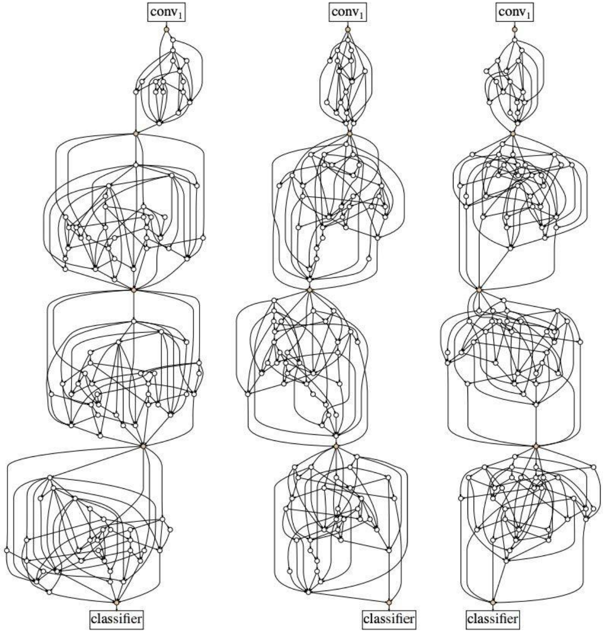


Биологические нейроны:
Сложная связность

Искусственная НС:
Случайная связность тоже работает!



This image is CC0 Public Domain



Xie et al, “Exploring Randomly Wired Neural Networks for Image Recognition”, arXiv 2019

Нейробиологические аналогии не работают!

Биологические нейроны:

- Разные типы нейронов, импульсная активация!
- Возможна нелинейная связность в дендритах
- Синапсы не просто вес, а сложная нелинейность

[Dendritic Computation. London and Hausser]

Michael Jordan: Well, I want to be a little careful here. I think it's important to distinguish two areas where the word *neural* is currently being used.

One of them is in deep learning. And there, each "neuron" is really a cartoon.

https://spectrum.ieee.org/artificial-intelligence/machine-learning/machinelearning-maestro-michael-jordan-on-the-delusions-of-big-data-and-other-huge-engineering-efforts

Главный вопрос: как считать градиенты?

$$s = f(x; W_1, W_2) = W_2 \max(0, W_1 x)$$ Нелинейная оценка

$$L_i = \sum_{j \neq y_i} \max(0, s_j - s_{y_i} + 1)$$ Функция потерь: SVM Loss

$$R(W) = \sum_k W_k^2$$ Регуляризация

$$L = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} L_i + \lambda R(W_1) + \lambda R(W_2)$$ Итого: функция потерь+регуляризация

Если можем посчитать $\frac{\partial L}{\partial W_1}, \frac{\partial L}{\partial W_2}$ то можем найти W_1 и W_2

(Плохое) решение: вывести на бумаге $\nabla_W L$

$$s = f(x; W) = Wx$$

$$L_i = \sum_{j \neq y_i} \max(0, s_j - s_{y_i} + 1)$$

$$= \sum_{j \neq y_i} \max(0, W_{j,:} \cdot x + W_{y_i,:} \cdot x + 1)$$

$$L = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} L_i + \lambda \sum_k W_k^2$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq y_i} \max(0, W_{j,:} \cdot x + W_{y_i,:} \cdot x + 1) + \lambda \sum_k W_k^2$$

$$\nabla_W L = \nabla_W \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq y_i} \max(0, W_{j,:} \cdot x + W_{y_i,:} \cdot x + 1) + \lambda \sum_k W_k^2 \right)$$

Проблема: Можно ошибиться

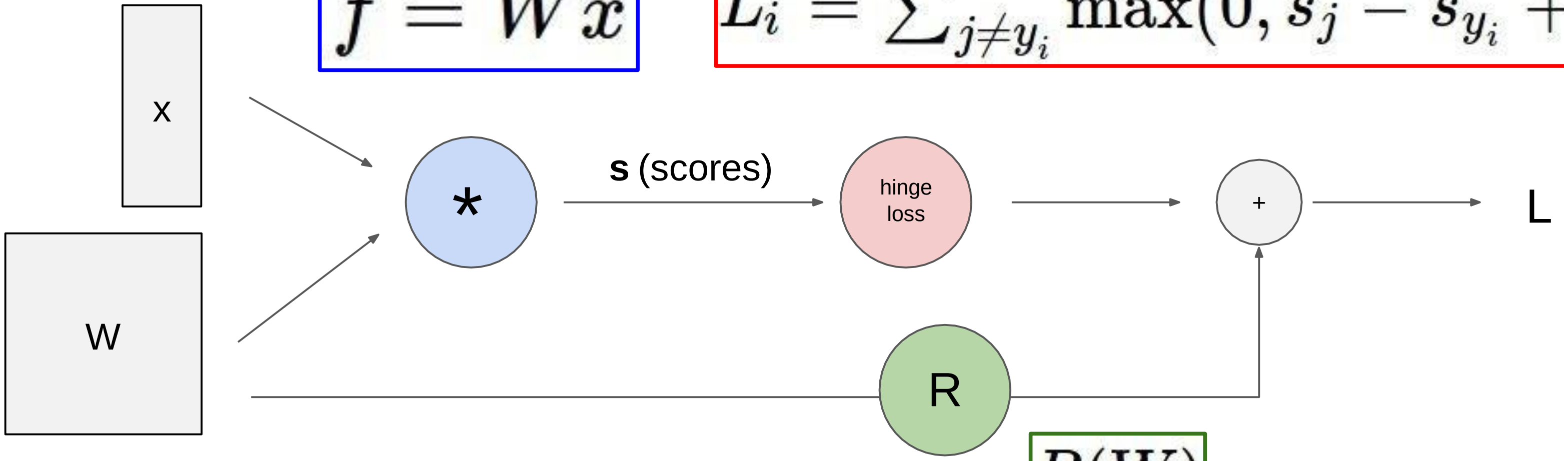
Проблема: а что если что то поменяется? Например мы захотели софтмакс? Все пересчитывать? А если еще один слой?

Проблема: не реализуемо для больших моделей с динамическим определением!

Решение: Вычислительные графы + Backpropagation

$$f = Wx$$

$$L_i = \sum_{j \neq y_i} \max(0, s_j - s_{y_i} + 1)$$



$$R(W)$$

Convolutional network (AlexNet)

input image

weights

loss

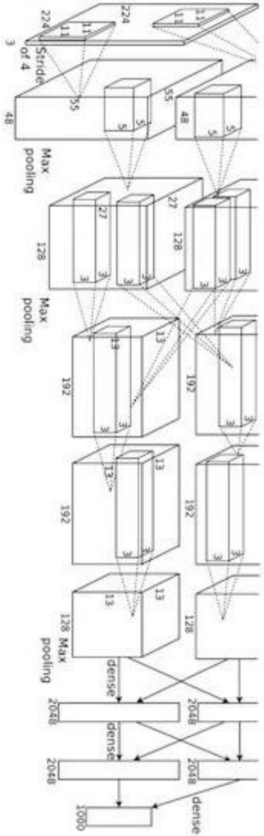


Figure copyright Alex Krizhevsky, Ilya Sutskever, and Geoffrey Hinton, 2012. Reproduced with permission.

Neural Turing Machine

input image

loss

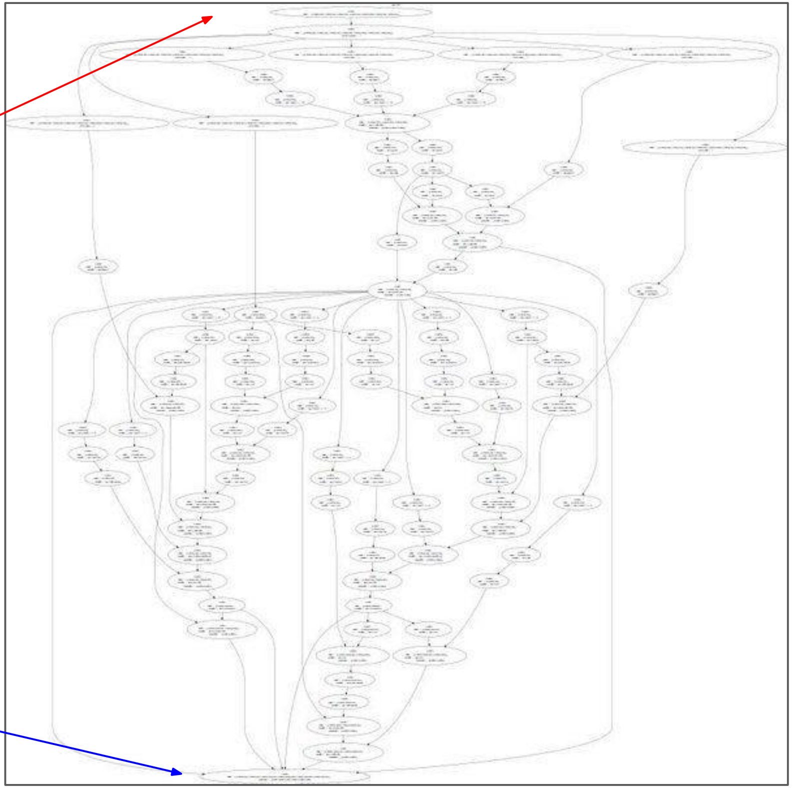


Figure reproduced with permission from a Twitter post by Andrej Karpathy.

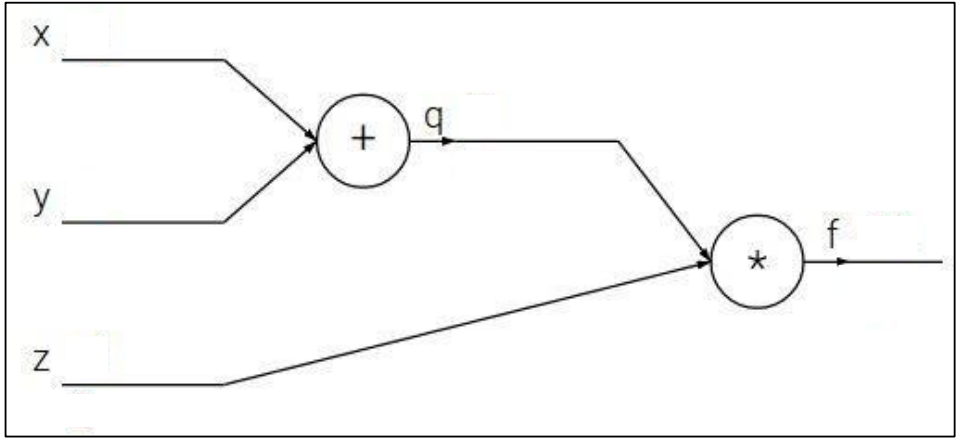
Решение: Backpropagation
Обратное распространение ошибки

Backpropagation: пример

$$f(x, y, z) = (x + y)z$$

Backpropagation: пример

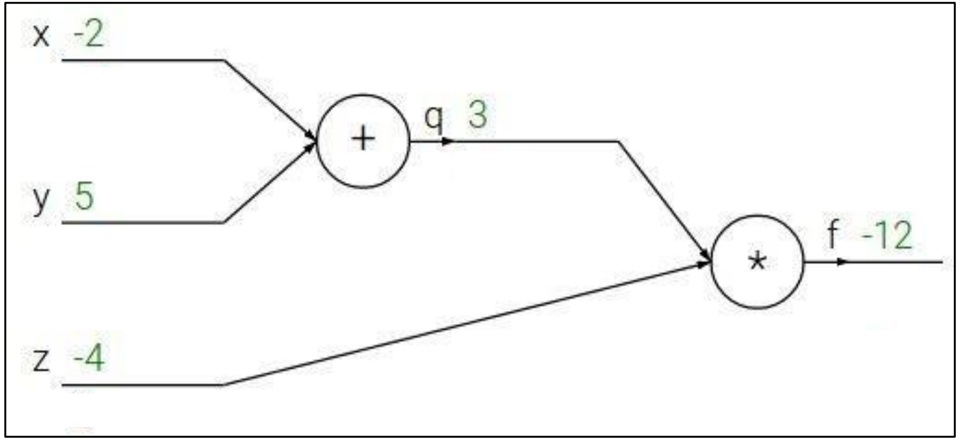
$$f(x, y, z) = (x + y)z$$



Backpropagation: пример

$$f(x, y, z) = (x + y)z$$

Пусть x = -2, y = 5, z = -4

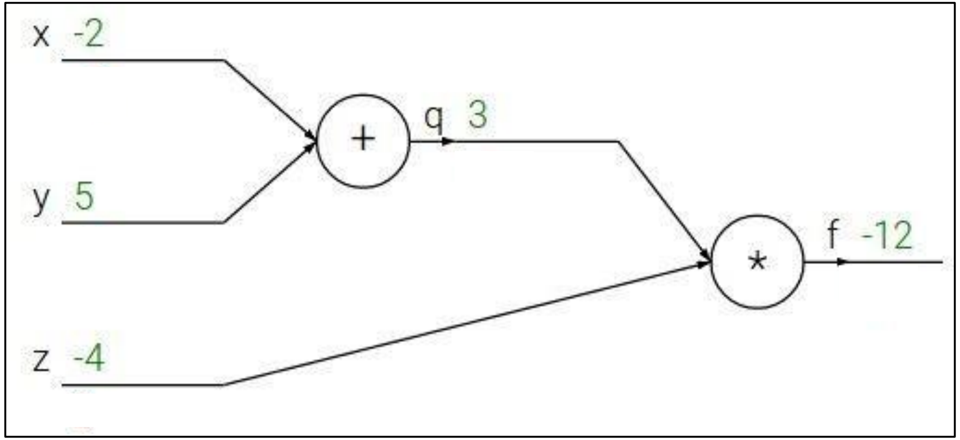


Backpropagation: пример

$$f(x, y, z) = (x + y)z$$

e.g. x = -2, y = 5, z = -4

$$q = x + y \qquad \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \frac{\partial q}{\partial y} = 1$$



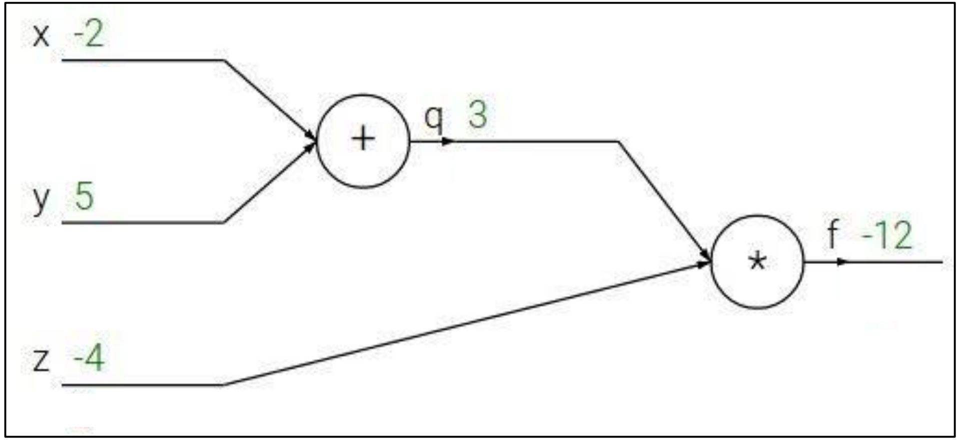
Backpropagation: пример

$$f(x, y, z) = (x + y)z$$

Пусть x = -2, y = 5, z = -4

$$q = x + y \qquad \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \frac{\partial q}{\partial y} = 1$$

$$f = qz \qquad \frac{\partial f}{\partial q} = z, \frac{\partial f}{\partial z} = q$$



Backpropagation: пример

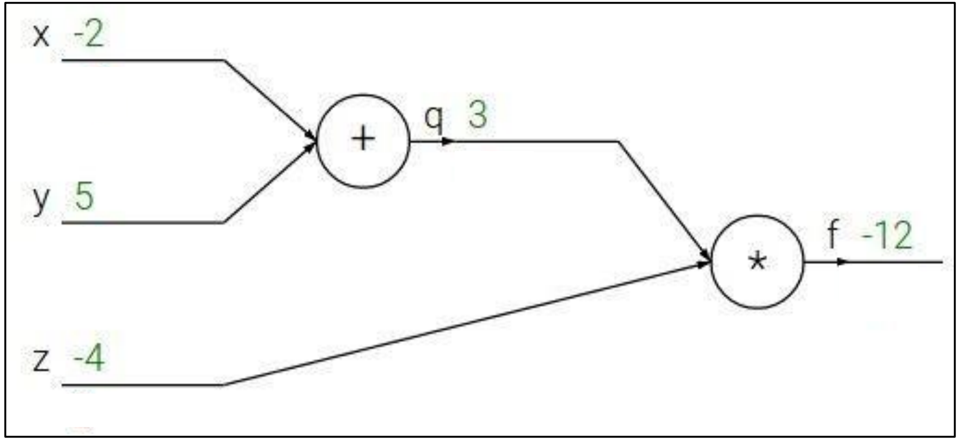
$$f(x, y, z) = (x + y)z$$

Пусть x = -2, y = 5, z = -4

$$q = x + y \qquad \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \frac{\partial q}{\partial y} = 1$$

$$f = qz \qquad \frac{\partial f}{\partial q} = z, \frac{\partial f}{\partial z} = q$$

Ищем: $\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}$



Backpropagation: пример

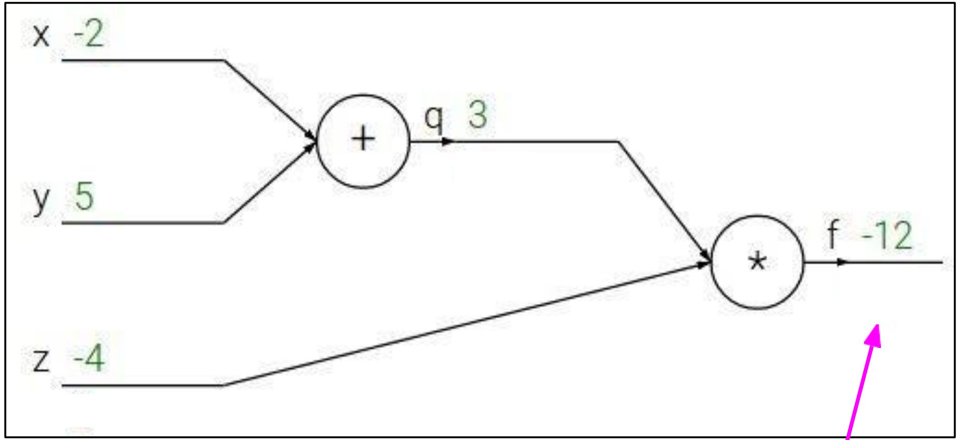
$$f(x, y, z) = (x + y)z$$

Пусть x = -2, y = 5, z = -4

$$q = x + y \qquad \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \frac{\partial q}{\partial y} = 1$$

$$f = qz \qquad \frac{\partial f}{\partial q} = z, \frac{\partial f}{\partial z} = q$$

Ищем: $\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}$

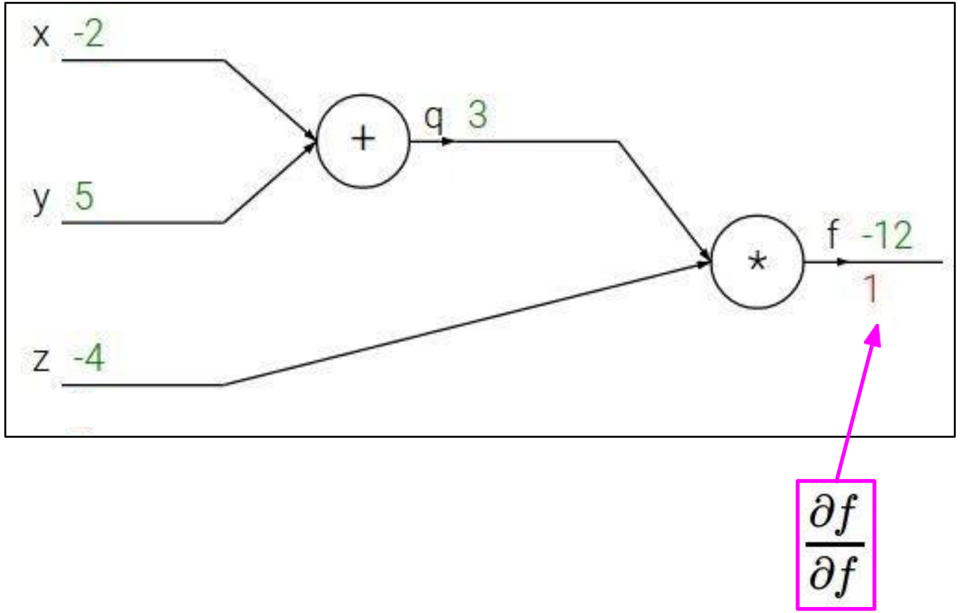


$\boxed{\frac{\partial f}{\partial f}}$

Backpropagation: пример

$$f(x,y,z) = (x+y)z$$

e.g. x = -2, y = 5, z = -4



$$q = x + y \qquad \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \frac{\partial q}{\partial y} = 1$$

$$f = qz \qquad \frac{\partial f}{\partial q} = z, \frac{\partial f}{\partial z} = q$$

Want: $\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}$

Backpropagation: пример

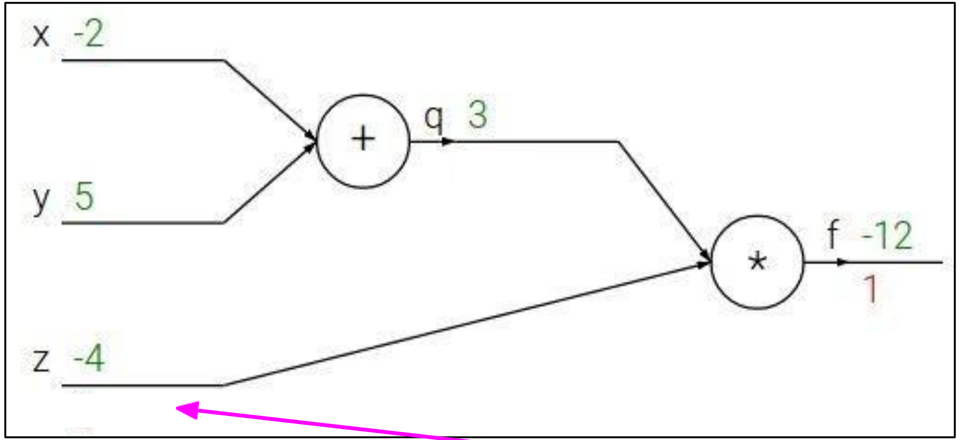
$$f(x, y, z) = (x + y)z$$

Пусть x = -2, y = 5, z = -4

$$q = x + y \qquad \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \frac{\partial q}{\partial y} = 1$$

$$f = qz \qquad \frac{\partial f}{\partial q} = z, \frac{\partial f}{\partial z} = q$$

Ищем: $\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}$



$$\frac{\partial f}{\partial z}$$

Backpropagation: пример

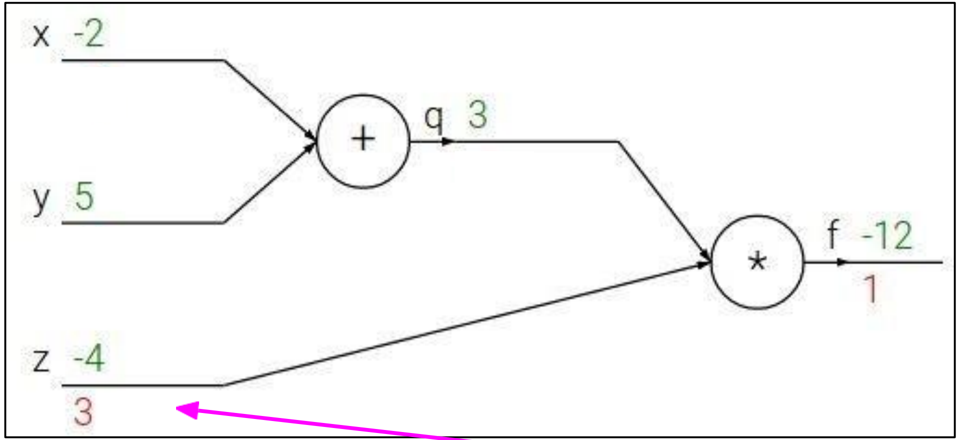
$$f(x,y,z) = (x+y)z$$

Пусть x = -2, y = 5, z = -4

$$q = x + y \qquad \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \frac{\partial q}{\partial y} = 1$$

$$f = qz \qquad \frac{\partial f}{\partial q} = z, \frac{\partial f}{\partial z} = q$$

Ищем: $\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}$

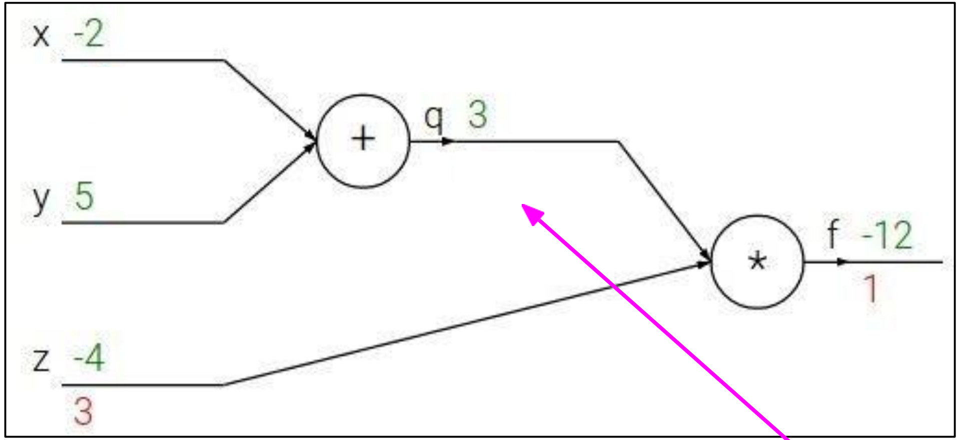


$\frac{\partial f}{\partial z}$

Backpropagation: пример

$$f(x, y, z) = (x + y)z$$

Пусть x = -2, y = 5, z = -4



$$q = x + y \qquad \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \frac{\partial q}{\partial y} = 1$$

$$f = qz \qquad \frac{\partial f}{\partial q} = z, \frac{\partial f}{\partial z} = q$$

$$\frac{\partial f}{\partial q}$$

Ищем: $\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}$

Backpropagation: пример

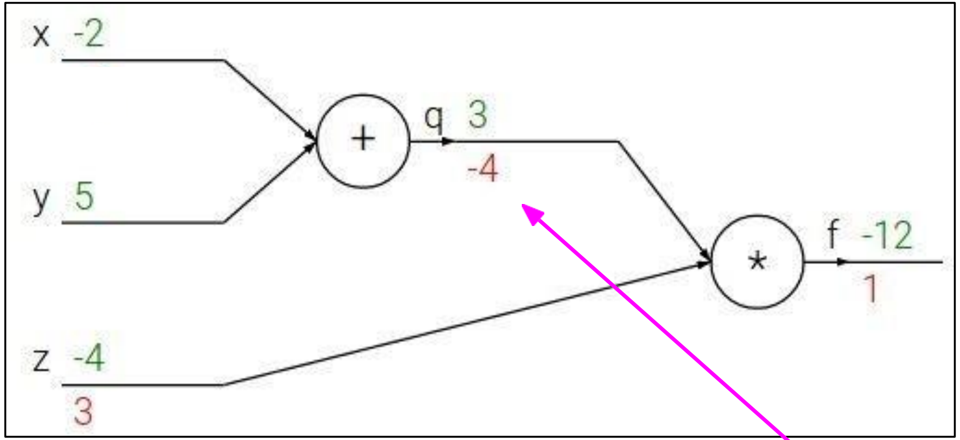
$$f(x, y, z) = (x + y)z$$

Пусть x = -2, y = 5, z = -4

$$q = x + y \qquad \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \frac{\partial q}{\partial y} = 1$$

$$f = qz \qquad \frac{\partial f}{\partial q} = z, \frac{\partial f}{\partial z} = q$$

Ищем: $\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}$



$$\frac{\partial f}{\partial q}$$

Backpropagation: пример

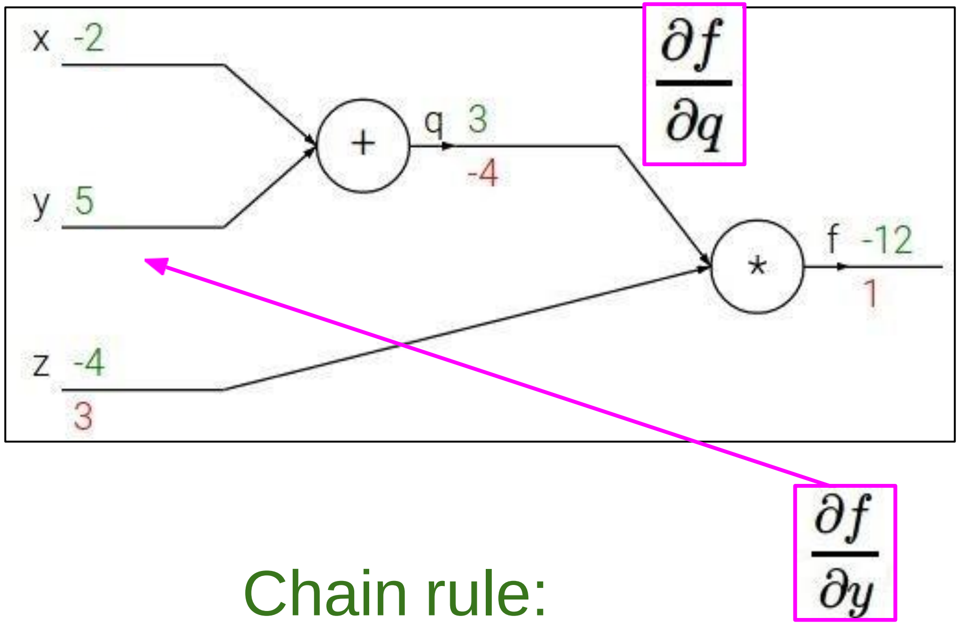
$$f(x, y, z) = (x + y)z$$

Пусть x = -2, y = 5, z = -4

$$q = x + y \qquad \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \frac{\partial q}{\partial y} = 1$$

$$f = qz \qquad \frac{\partial f}{\partial q} = z, \frac{\partial f}{\partial z} = q$$

Ищем: $\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}$



Chain rule:

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial y}$$

Upstream gradient

Local gradient

Производная сложной функции

Локальные и восходящие градиенты

Backpropagation: пример

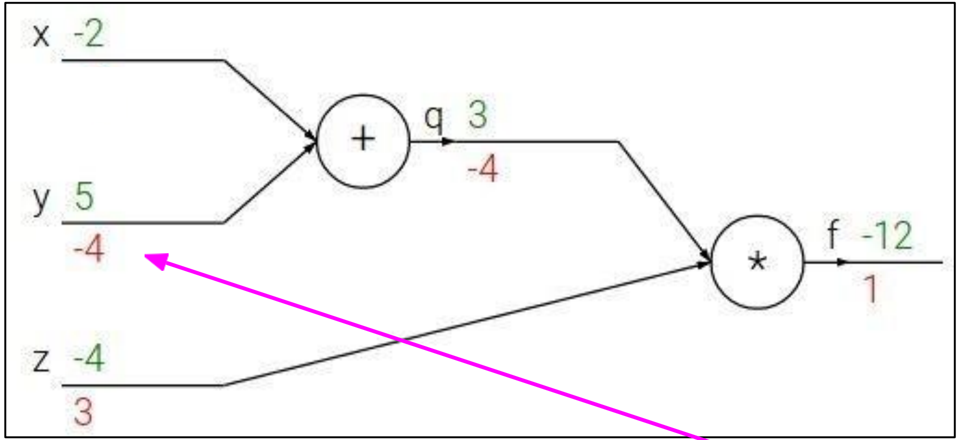
$$f(x, y, z) = (x + y)z$$

Пусть x = -2, y = 5, z = -4

$$q = x + y \qquad \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \frac{\partial q}{\partial y} = 1$$

$$f = qz \qquad \frac{\partial f}{\partial q} = z, \frac{\partial f}{\partial z} = q$$

Ищем: $\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}$



$\frac{\partial f}{\partial y}$

Chain rule:

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial y}}$$

Upstream gradient

Local gradient

Производная сложной функции
Локальные и восходящие градиенты

Backpropagation: пример

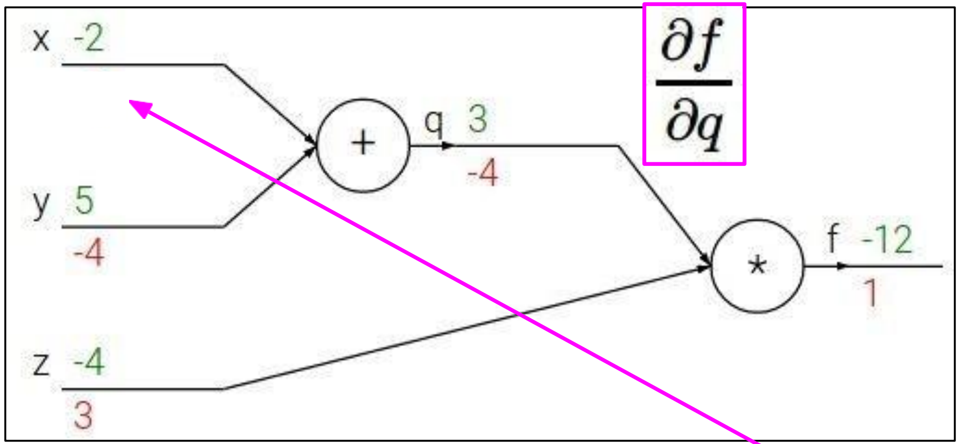
$$f(x,y,z) = (x+y)z$$

Пусть x = -2, y = 5, z = -4

$$q = x + y \qquad \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \frac{\partial q}{\partial y} = 1$$

$$f = qz \qquad \frac{\partial f}{\partial q} = z, \frac{\partial f}{\partial z} = q$$

Ищем: $\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}$



$$\frac{\partial f}{\partial q}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x}$$

Chain rule:

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial x}}$$

Upstream gradient

Local gradient

Производная сложной функции
Локальные и восходящие градиенты

Backpropagation: пример

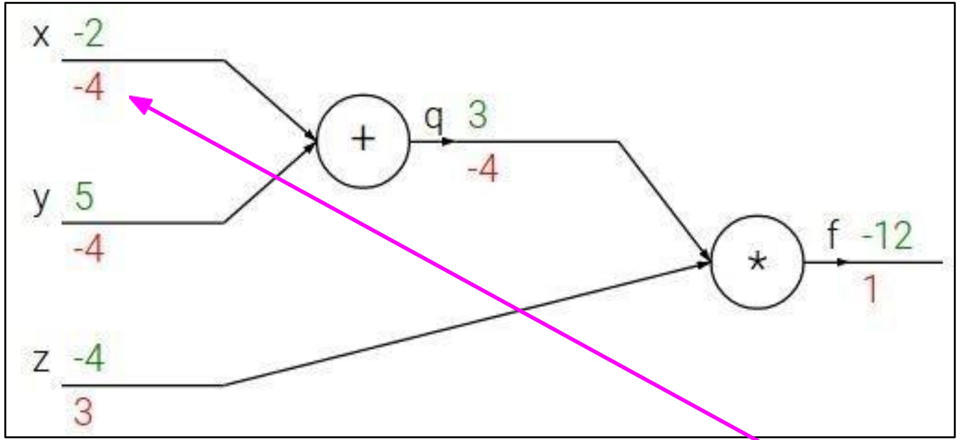
$$f(x, y, z) = (x + y)z$$

Пусть x = -2, y = 5, z = -4

$$q = x + y \qquad \frac{\partial q}{\partial x} = 1, \frac{\partial q}{\partial y} = 1$$

$$f = qz \qquad \frac{\partial f}{\partial q} = z, \frac{\partial f}{\partial z} = q$$

Ищем: $\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}$



$$\frac{\partial f}{\partial x}$$

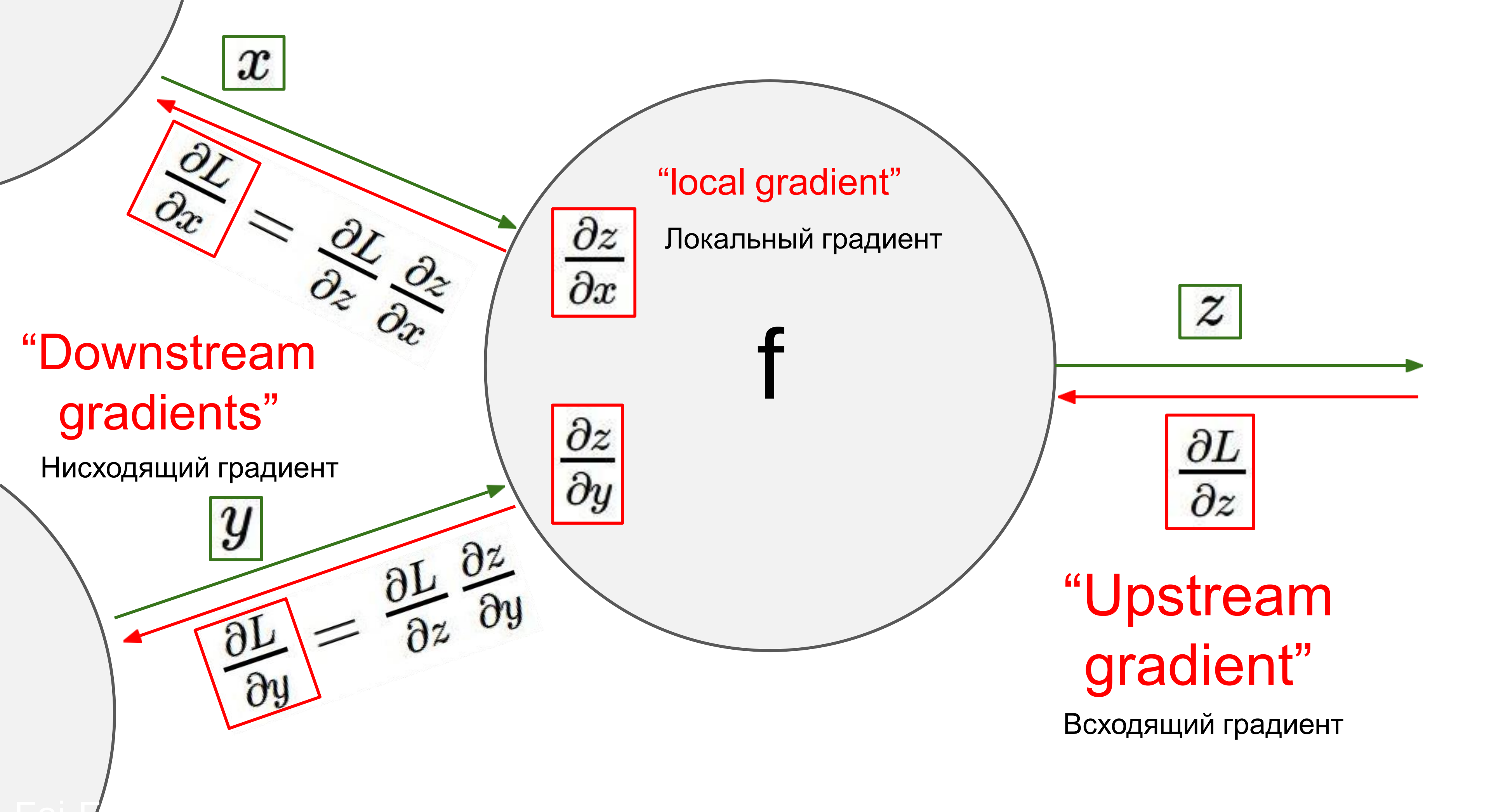
Chain rule:

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial x}}$$

Upstream gradient

Local gradient

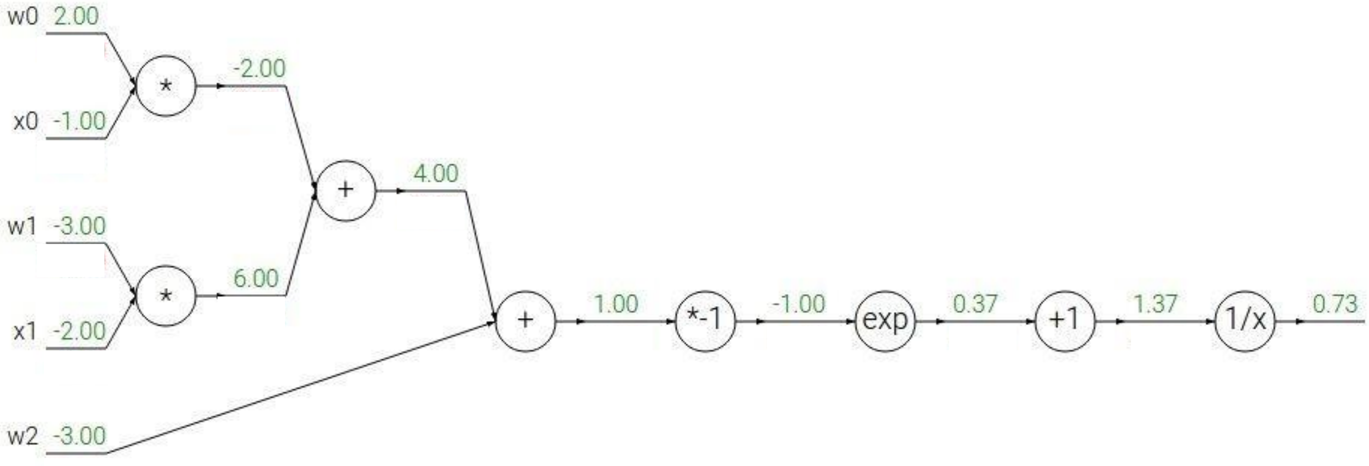
Производная сложной функции
Локальные и восходящие градиенты



x
$\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{\partial L}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial x}$
"Downstream gradients"
Нисходящий градиент
y
$\frac{\partial L}{\partial y} = \frac{\partial L}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial y}$
"local gradient"
Локальный градиент
$\frac{\partial z}{\partial x}$
$\frac{\partial z}{\partial y}$
f
z
$\frac{\partial L}{\partial z}$
"Upstream gradient"
Всходящий градиент

Another example:

$$f(w,x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0x_0+w_1x_1+w_2)}}$$



$$f(x) = e^x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = e^x$$

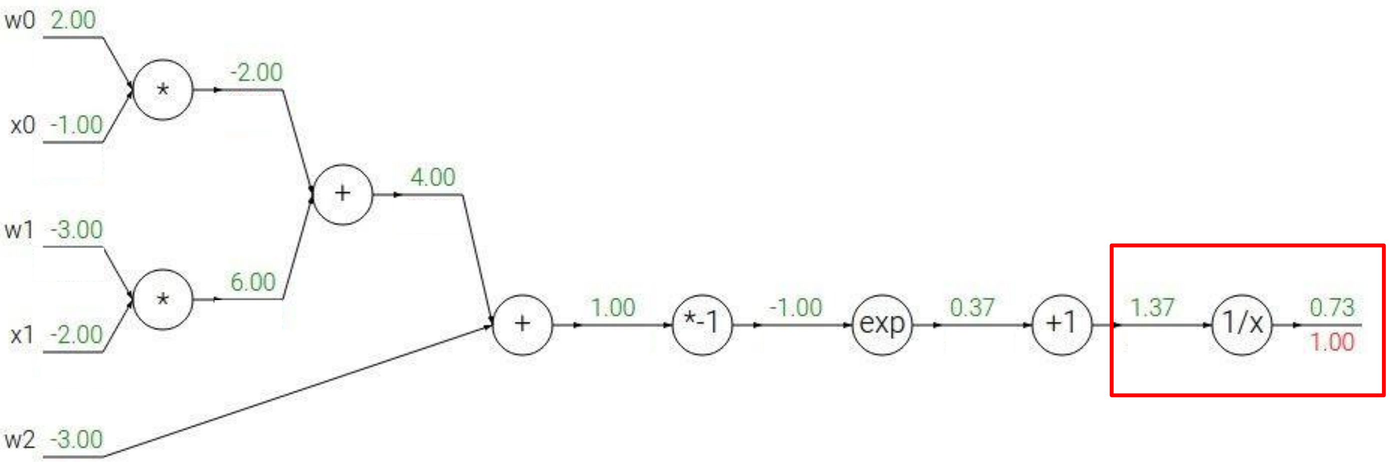
$$f_a(x) = ax \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = a$$

$$f(x) = \frac{1}{x} \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = -1/x^2$$

$$f_c(x) = c + x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = 1$$

Another example:

$$f(w,x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0x_0+w_1x_1+w_2)}}$$



$$f(x) = e^x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = e^x$$

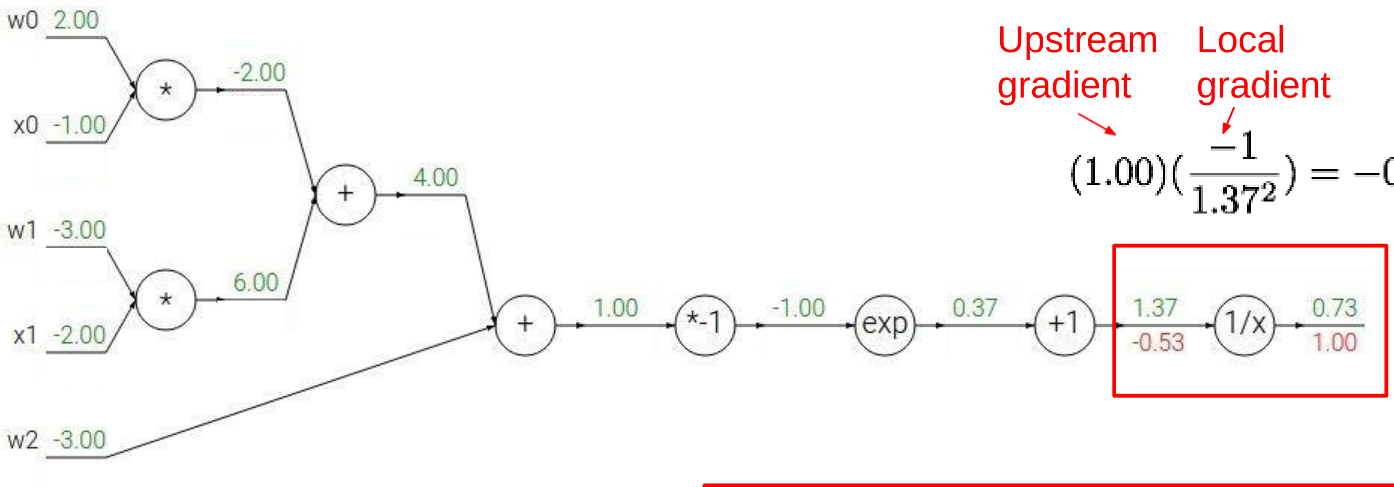
$$f_a(x) = ax \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = a$$

$$\boxed{f(x) = \frac{1}{x} \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = -1/x^2}$$

$$f_c(x) = c + x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = 1$$

Another example:

$$f(w,x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0x_0+w_1x_1+w_2)}}$$



$$(1.00)\left(\frac{-1}{1.37^2}\right) = -0.53$$

$$f(x) = e^x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = e^x$$

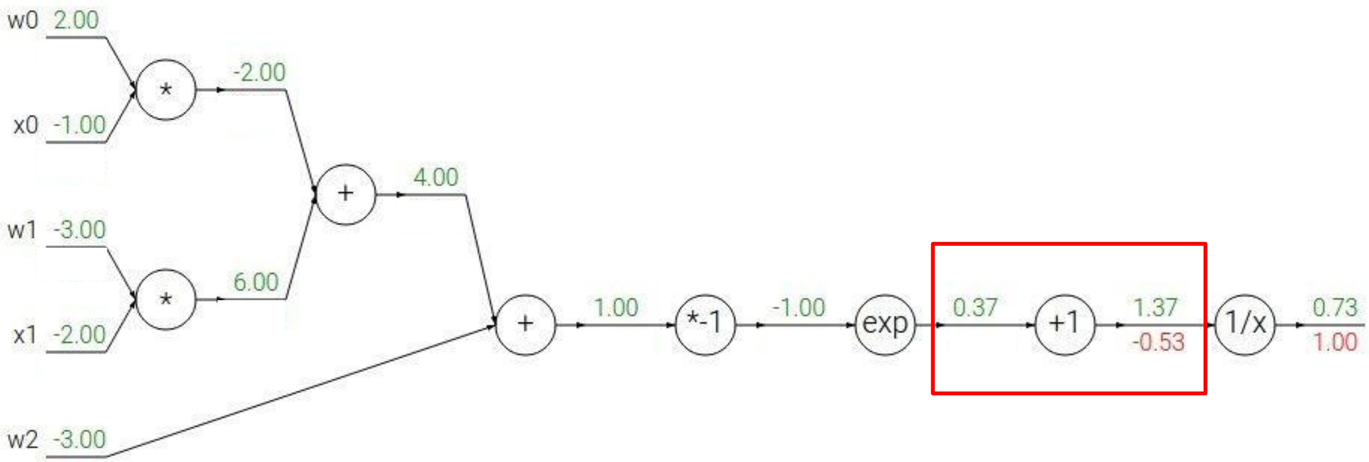
$$f_a(x) = ax \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = a$$

$$\boxed{f(x) = \frac{1}{x} \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = -1/x^2}$$

$$f_c(x) = c + x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = 1$$

Another example:

$$f(w,x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0x_0+w_1x_1+w_2)}}$$



$$f(x) = e^x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = e^x$$

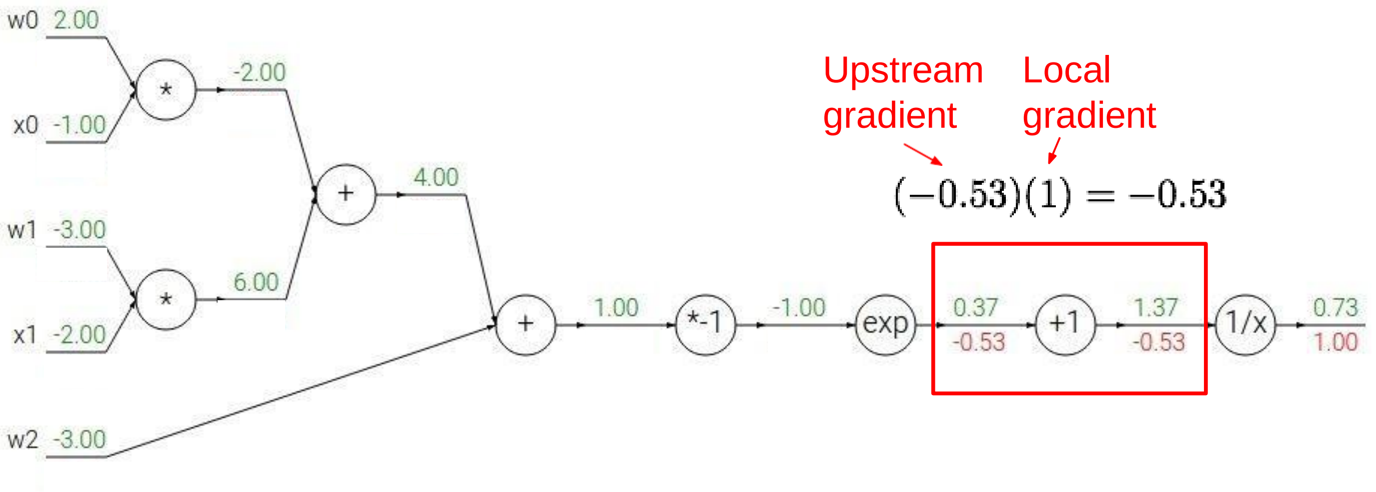
$$f_a(x) = ax \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = a$$

$$f(x) = \frac{1}{x} \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = -1/x^2$$

$$f_c(x) = c + x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = 1$$

Another example:

$$f(w,x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0x_0+w_1x_1+w_2)}}$$



$$f(x) = e^x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = e^x$$

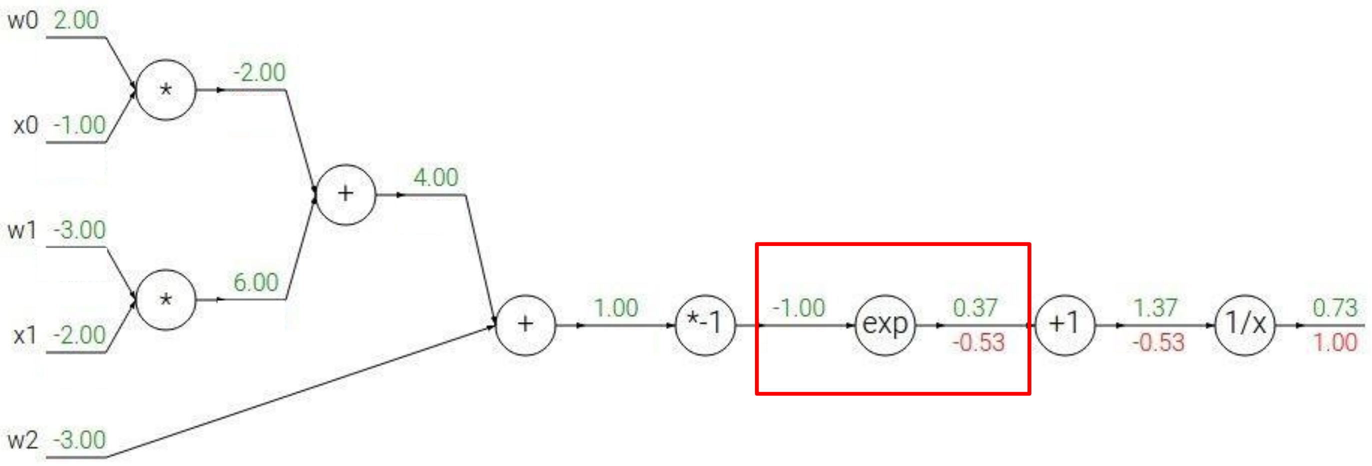
$$f_a(x) = ax \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = a$$

$$f(x) = \frac{1}{x} \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = -1/x^2$$

$$\boxed{f_c(x) = c + x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = 1}$$

Another example:

$$f(w,x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0x_0+w_1x_1+w_2)}}$$



$$\boxed{f(x) = e^x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = e^x}$$

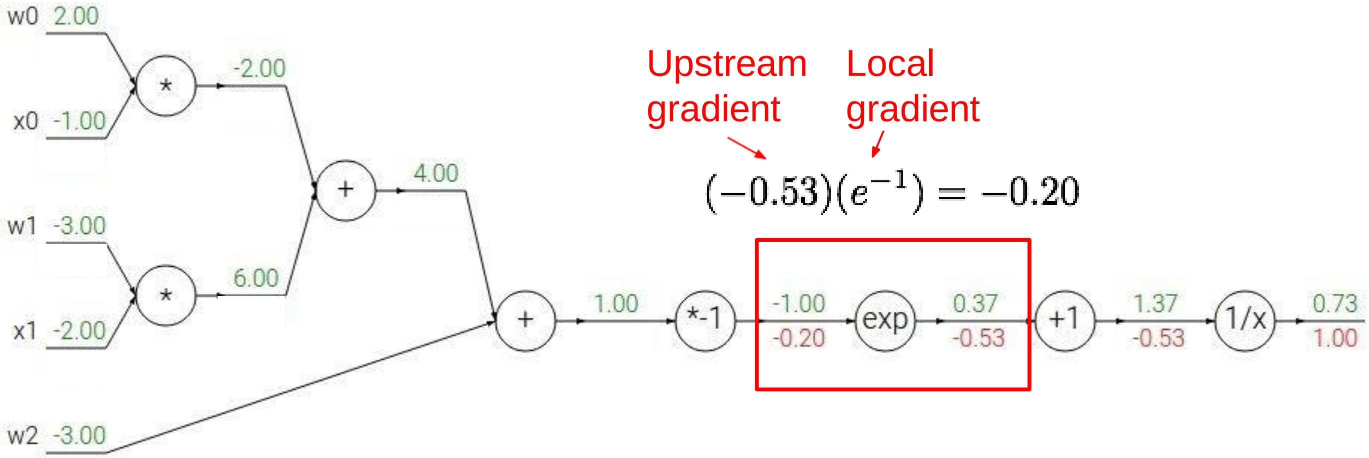
$$f_a(x) = ax \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = a$$

$$f(x) = \frac{1}{x} \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = -1/x^2$$

$$f_c(x) = c + x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = 1$$

Another example:

$$f(w,x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0x_0+w_1x_1+w_2)}}$$



$$(-0.53)(e^{-1}) = -0.20$$

$$\boxed{f(x) = e^x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = e^x}$$

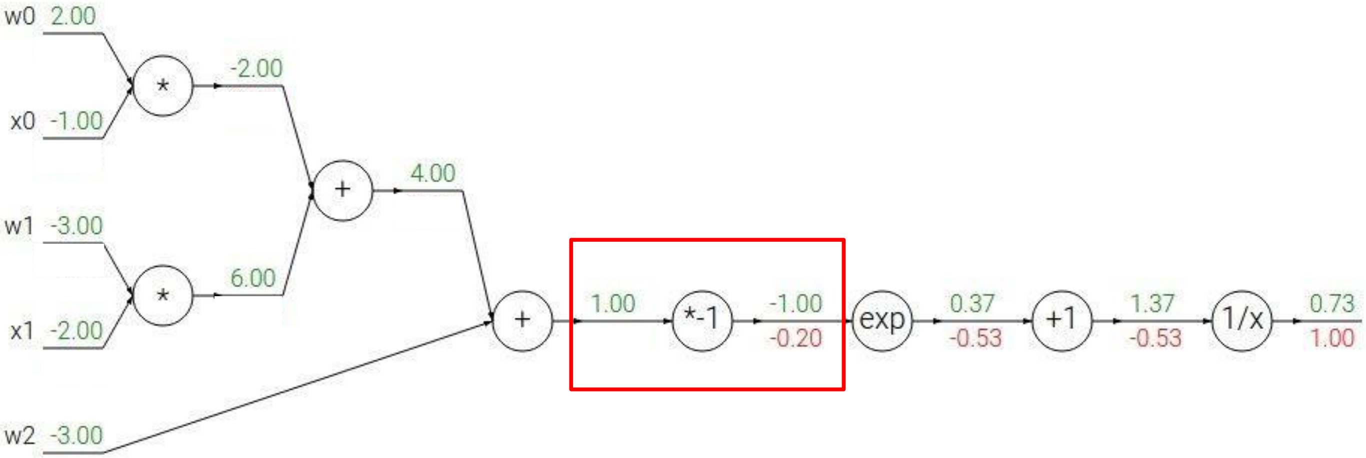
$$f_a(x) = ax \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = a$$

$$f(x) = \frac{1}{x} \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = -1/x^2$$

$$f_c(x) = c + x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = 1$$

Another example:

$$f(w,x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0x_0+w_1x_1+w_2)}}$$



$$f(x) = e^x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = e^x$$

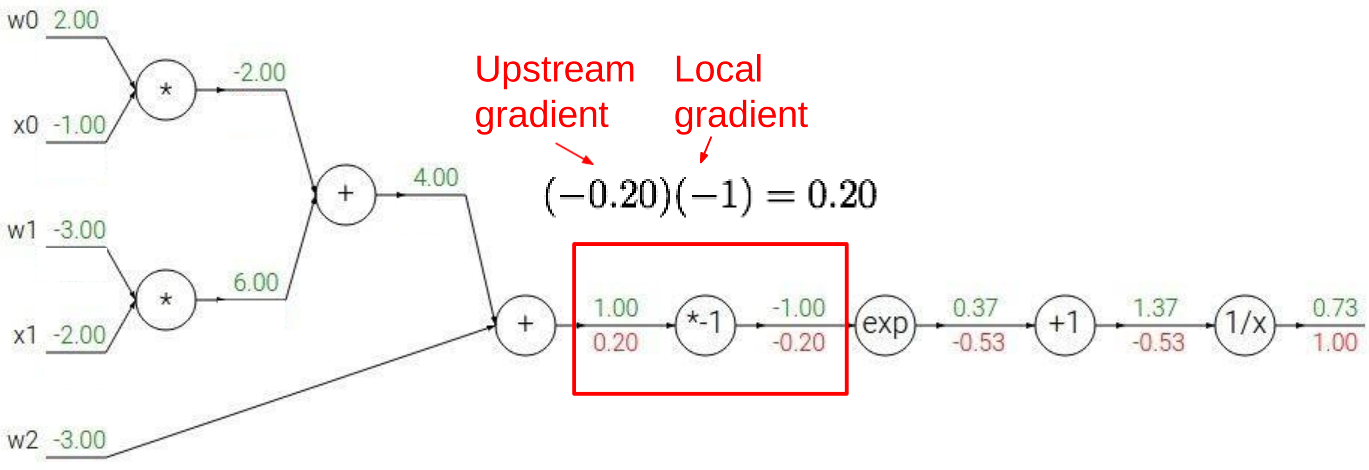
$$\boxed{f_a(x) = ax \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = a}$$

$$f(x) = \frac{1}{x} \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = -1/x^2$$

$$f_c(x) = c + x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = 1$$

Another example:

$$f(w,x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0x_0+w_1x_1+w_2)}}$$



$$f(x) = e^x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = e^x$$

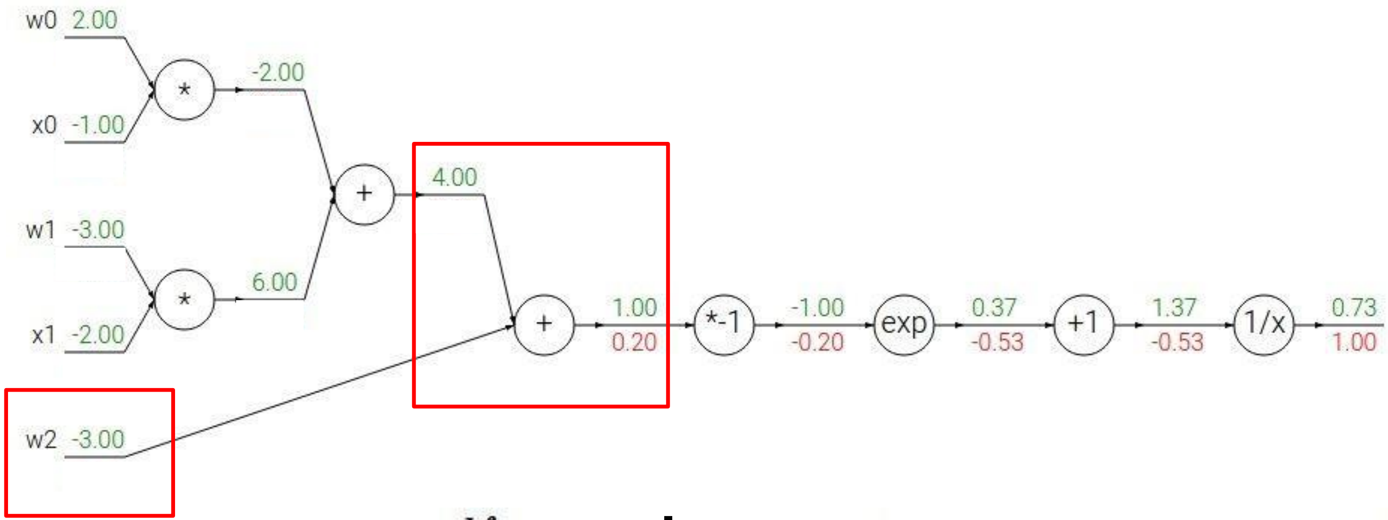
$$\boxed{f_a(x) = ax \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = a}$$

$$f(x) = \frac{1}{x} \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = -1/x^2$$

$$f_c(x) = c + x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = 1$$

Another example:

$$f(w,x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0x_0+w_1x_1+w_2)}}$$



$$f(x) = e^x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = e^x$$

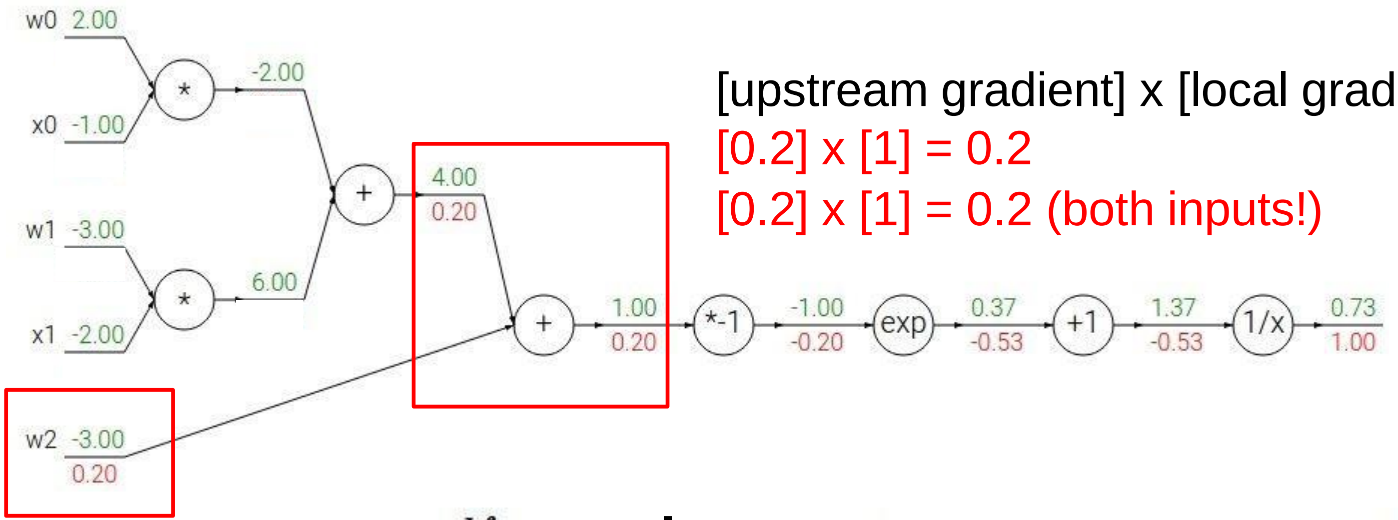
$$f_a(x) = ax \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = a$$

$$f(x) = \frac{1}{x} \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = -1/x^2$$

$$f_c(x) = c + x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = 1$$

Another example:

$$f(w,x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0x_0+w_1x_1+w_2)}}$$



[upstream gradient] x [local gradient]

[0.2] x [1] = 0.2

[0.2] x [1] = 0.2 (both inputs!)

$$f(x) = e^x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = e^x$$

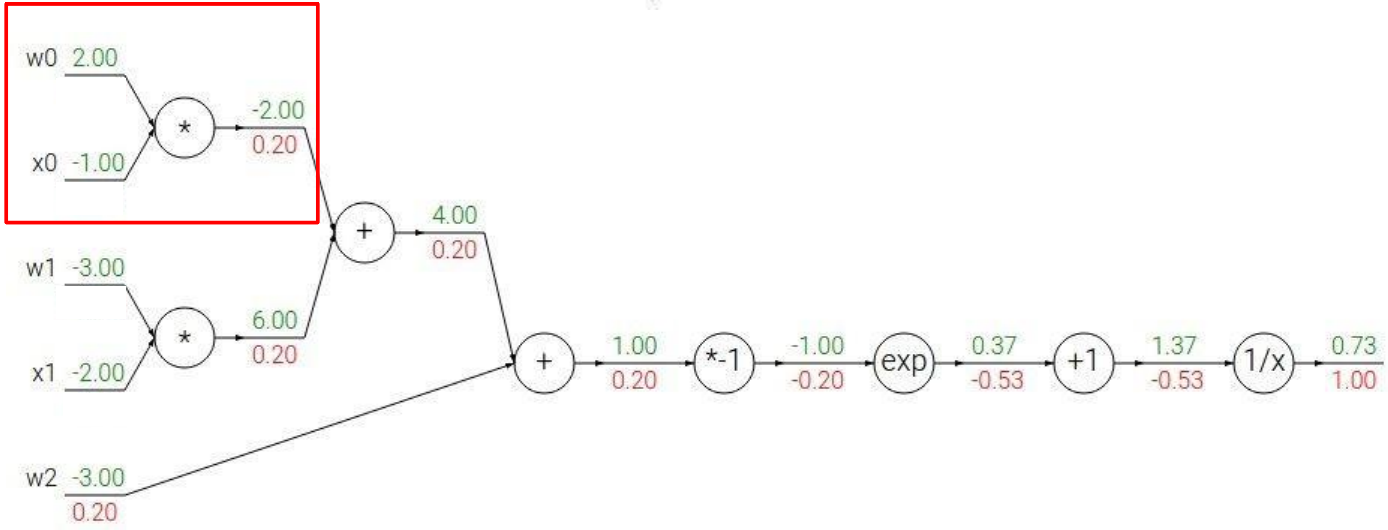
$$f_a(x) = ax \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = a$$

$$f(x) = \frac{1}{x} \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = -1/x^2$$

$$f_c(x) = c + x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = 1$$

Another example:

$$f(w,x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0x_0+w_1x_1+w_2)}}$$



$$f(x) = e^x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = e^x$$

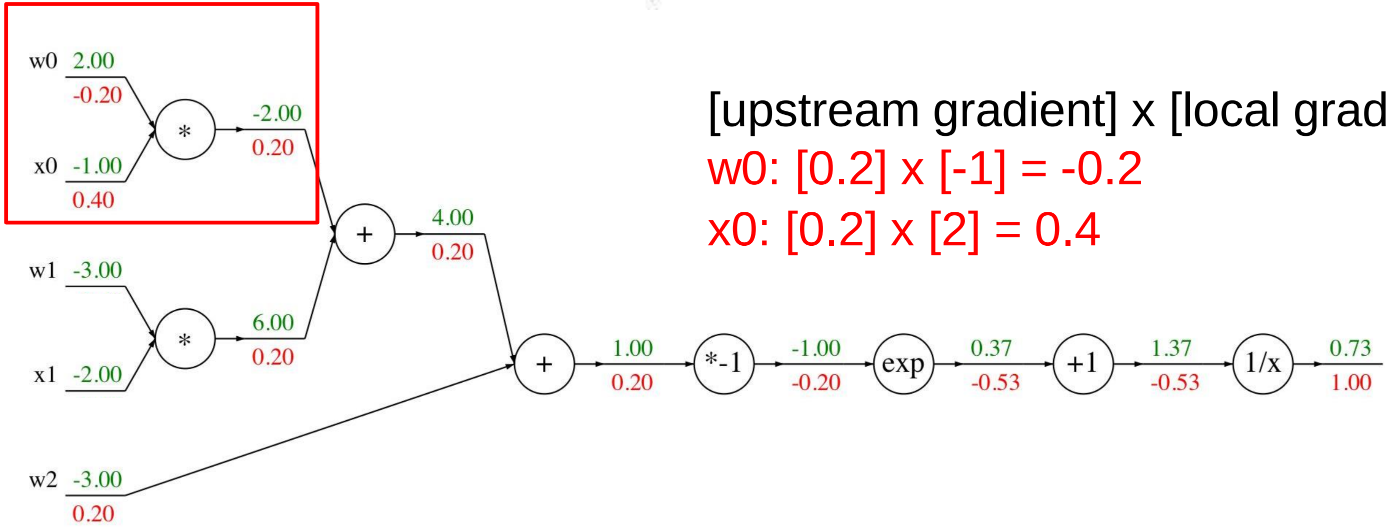
$$f_a(x) = ax \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = a$$

$$f(x) = \frac{1}{x} \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = -1/x^2$$

$$f_c(x) = c + x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = 1$$

Another example:

$$f(w,x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0x_0+w_1x_1+w_2)}}$$



[upstream gradient] x [local gradient]

w0: [0.2] x [-1] = -0.2

x0: [0.2] x [2] = 0.4

$$f(x) = e^x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = e^x \qquad\qquad f(x) = \frac{1}{x} \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = -1/x^2$$

$$f_a(x) = ax \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = a \qquad\qquad f_c(x) = c + x \quad \rightarrow \quad \frac{df}{dx} = 1$$

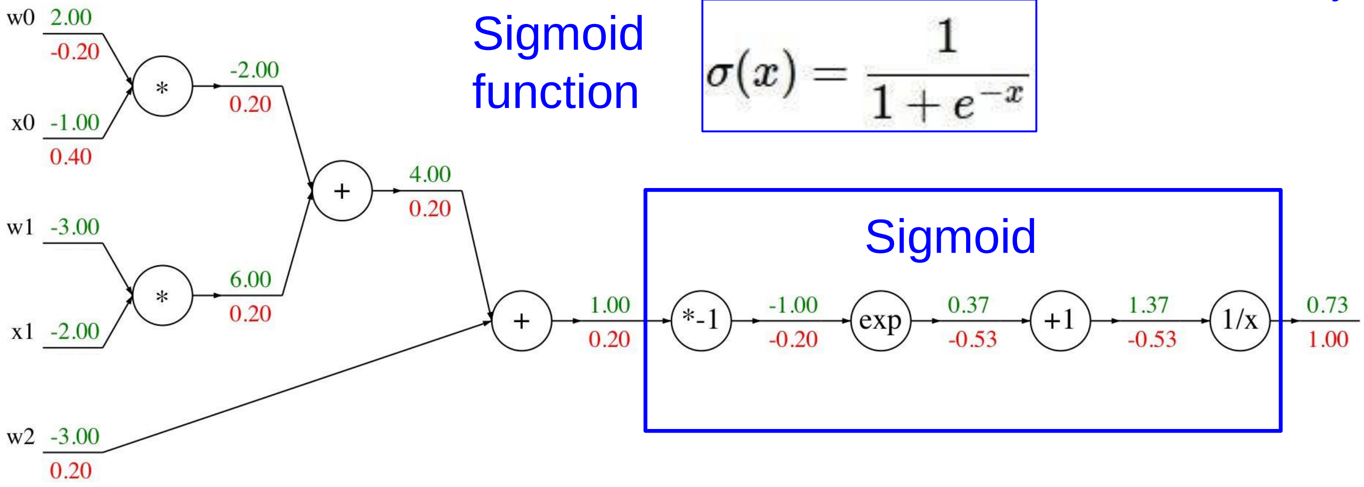
Another example:

$$f(w,x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0x_0+w_1x_1+w_2)}}$$

Вычислительный граф не единственный, и может быть упрощен!

Sigmoid function

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



Sigmoid local gradient:

$$\frac{d\sigma(x)}{dx} = \frac{e^{-x}}{(1+e^{-x})^2} = \left(\frac{1+e^{-x}-1}{1+e^{-x}}\right)\left(\frac{1}{1+e^{-x}}\right) = (1-\sigma(x))\,\sigma(x)$$

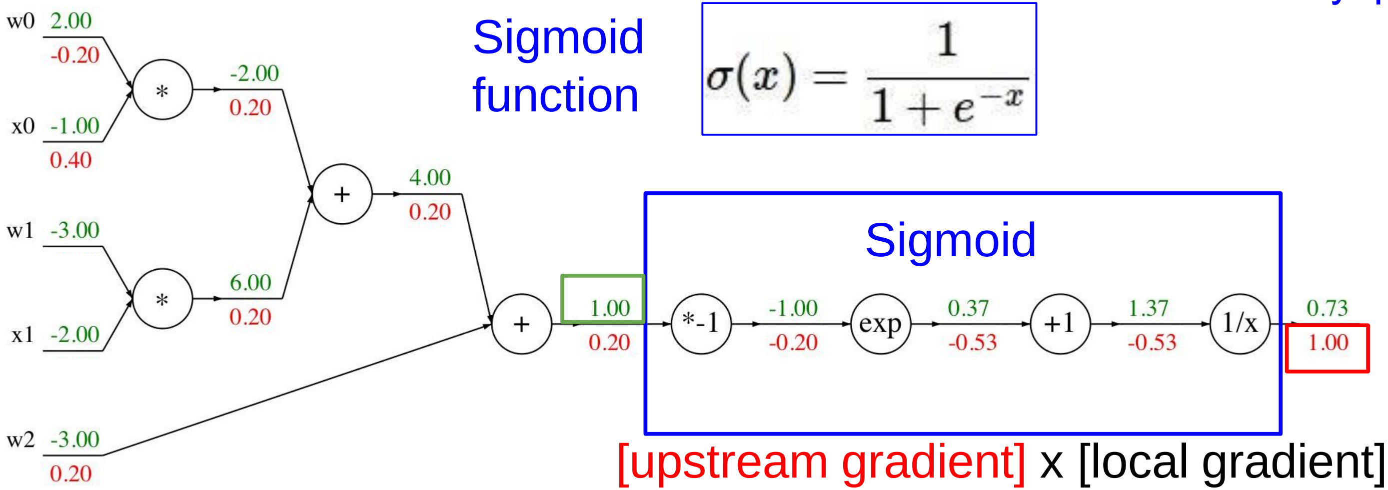
Another example:

$$f(w,x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0x_0+w_1x_1+w_2)}}$$

Вычислительный граф не единственный, и может быть упрощен!

Sigmoid function

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



[upstream gradient] x [local gradient]

[1.00] x [(1 - 1/(1+e^{1})) (1/(1+e^{1}))] = 0.2

Sigmoid local gradient:

$$\frac{d\sigma(x)}{dx} = \frac{e^{-x}}{(1+e^{-x})^2} = \left(\frac{1+e^{-x}-1}{1+e^{-x}}\right)\left(\frac{1}{1+e^{-x}}\right) = (1-\sigma(x))\,\sigma(x)$$

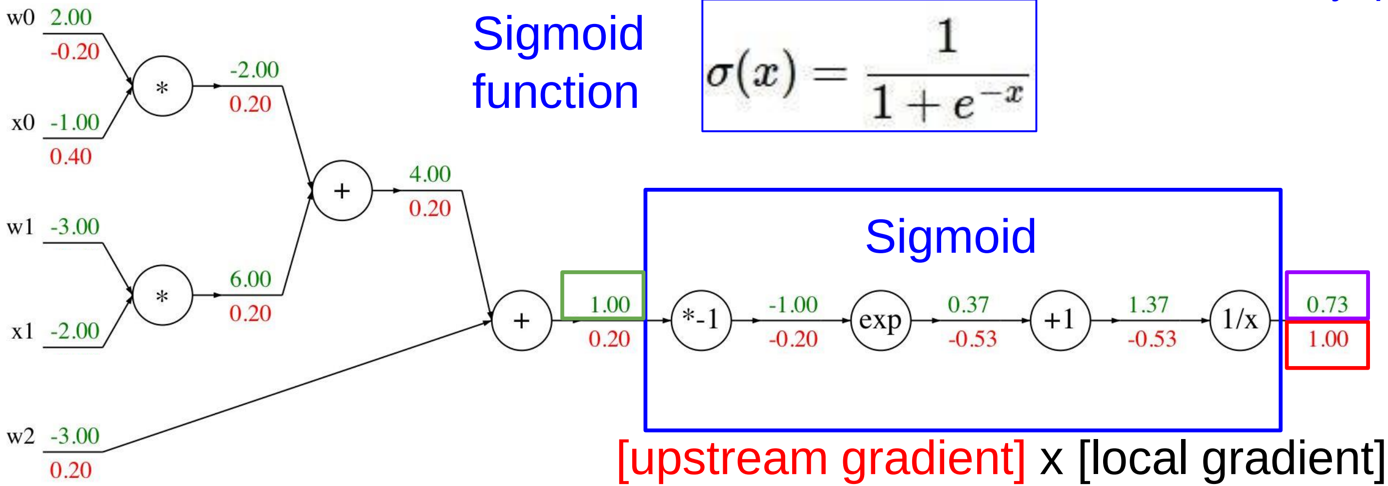
Another example:

$$f(w,x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0x_0+w_1x_1+w_2)}}$$

Вычислительный граф не единственный, и может быть упрощен!

Sigmoid function

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



[upstream gradient] x [local gradient]

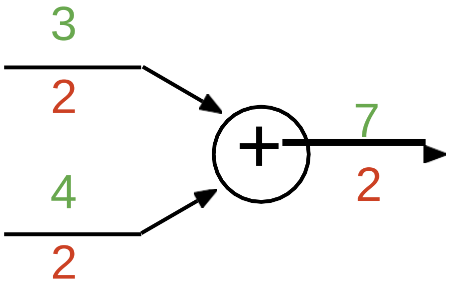
[1.00] x [(1 - 0.73) (0.73)] = 0.2

Sigmoid local gradient:

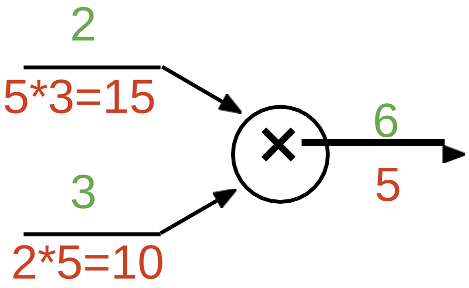
$$\frac{d\sigma(x)}{dx} = \frac{e^{-x}}{(1+e^{-x})^2} = \left(\frac{1+e^{-x}-1}{1+e^{-x}}\right)\left(\frac{1}{1+e^{-x}}\right) = (1-\sigma(x))\sigma(x)$$

Правила вычисления градиентов

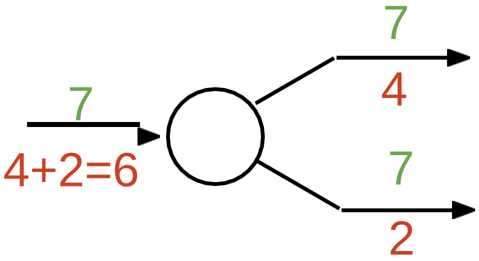
add gate: gradient distributor



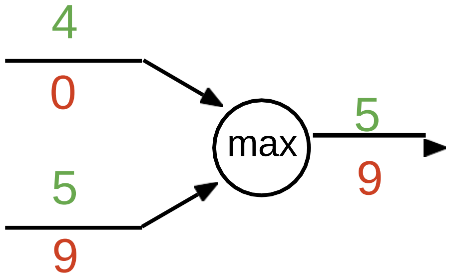
mul gate: “swap multiplier”



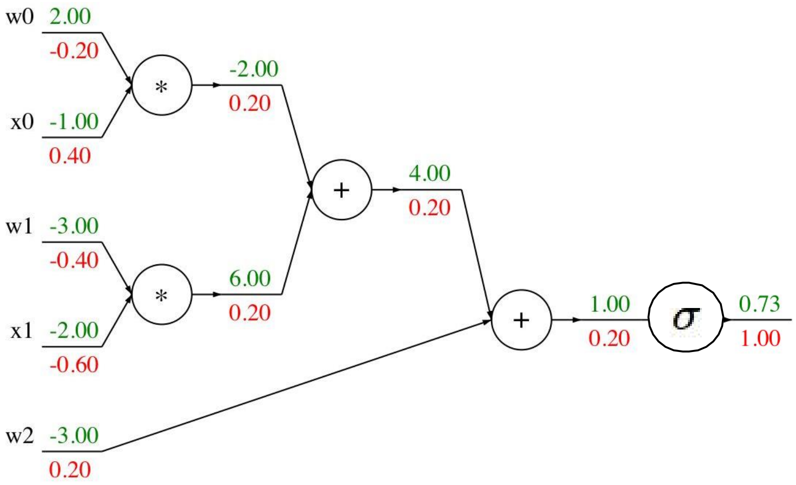
copy gate: gradient adder



max gate: gradient router



Реализация backprop: “в лоб”



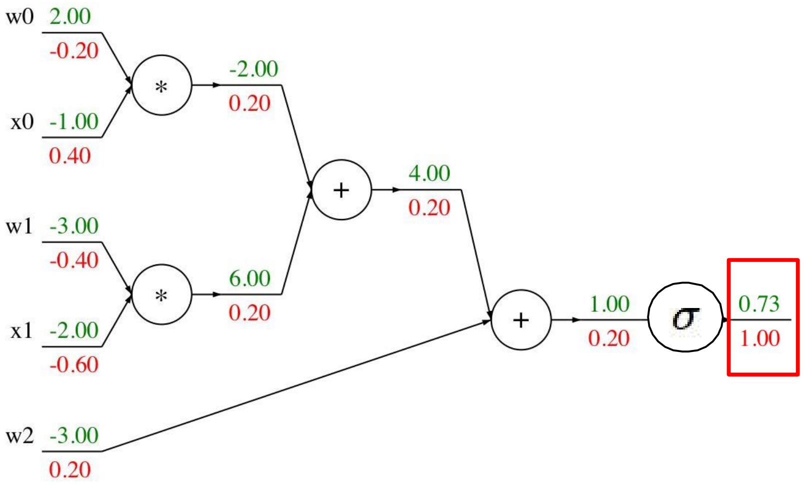
Прямой проход: Считаем выход

```
def f(w0, x0, w1, x1, w2):
    s0 = w0 * x0
    s1 = w1 * x1
    s2 = s0 + s1
    s3 = s2 + w2
    L = sigmoid(s3)
```

Обратный проход: Считаем градиенты

```
    grad_L = 1.0
    grad_s3 = grad_L * (1 - L) * L
    grad_w2 = grad_s3
    grad_s2 = grad_s3
    grad_s0 = grad_s2
    grad_s1 = grad_s2
    grad_w1 = grad_s1 * x1
    grad_x1 = grad_s1 * w1
    grad_w0 = grad_s0 * x0
    grad_x0 = grad_s0 * w0
```

Реализация backprop: “в лоб”



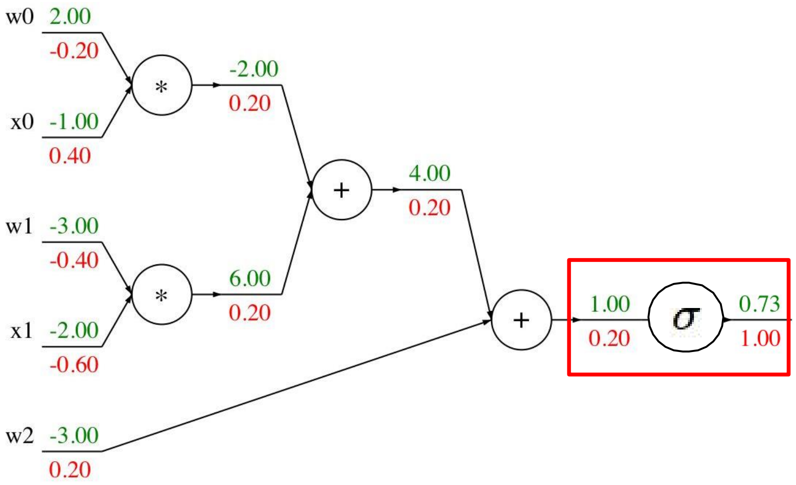
Прямой проход:
Считаем выход

Инициализация

```
def f(w0, x0, w1, x1, w2):
    s0 = w0 * x0
    s1 = w1 * x1
    s2 = s0 + s1
    s3 = s2 + w2
    L = sigmoid(s3)

    grad_L = 1.0
    grad_s3 = grad_L * (1 - L) * L
    grad_w2 = grad_s3
    grad_s2 = grad_s3
    grad_s0 = grad_s2
    grad_s1 = grad_s2
    grad_w1 = grad_s1 * x1
    grad_x1 = grad_s1 * w1
    grad_w0 = grad_s0 * x0
    grad_x0 = grad_s0 * w0
```

Реализация backprop: “в лоб”



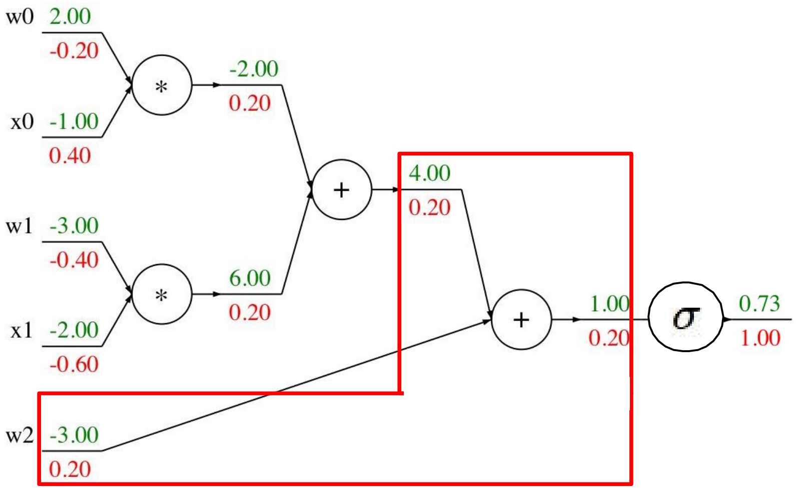
Прямой проход:
Считаем выход

```
def f(w0, x0, w1, x1, w2):
  s0 = w0 * x0
  s1 = w1 * x1
  s2 = s0 + s1
  s3 = s2 + w2
  L = sigmoid(s3)
```

Sigmoid

```
  grad_L = 1.0
  grad_s3 = grad_L * (1 - L) * L
  grad_w2 = grad_s3
  grad_s2 = grad_s3
  grad_s0 = grad_s2
  grad_s1 = grad_s2
  grad_w1 = grad_s1 * x1
  grad_x1 = grad_s1 * w1
  grad_w0 = grad_s0 * x0
  grad_x0 = grad_s0 * w0
```

Реализация backprop: “в лоб”



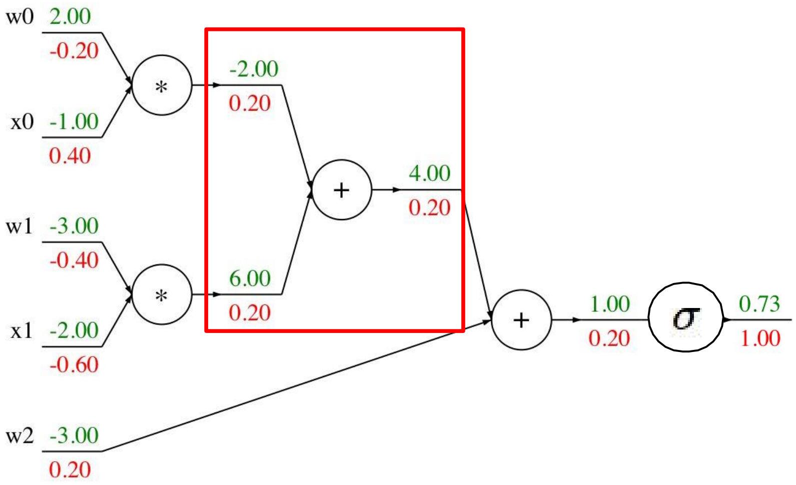
Прямой проход:
Считаем выход

```
def f(w0, x0, w1, x1, w2):
    s0 = w0 * x0
    s1 = w1 * x1
    s2 = s0 + s1
    s3 = s2 + w2
    L = sigmoid(s3)
```

Add gate

```
    grad_L = 1.0
    grad_s3 = grad_L * (1 - L) * L
    grad_w2 = grad_s3
    grad_s2 = grad_s3
    grad_s0 = grad_s2
    grad_s1 = grad_s2
    grad_w1 = grad_s1 * x1
    grad_x1 = grad_s1 * w1
    grad_w0 = grad_s0 * x0
    grad_x0 = grad_s0 * w0
```

Реализация backprop: “в лоб”



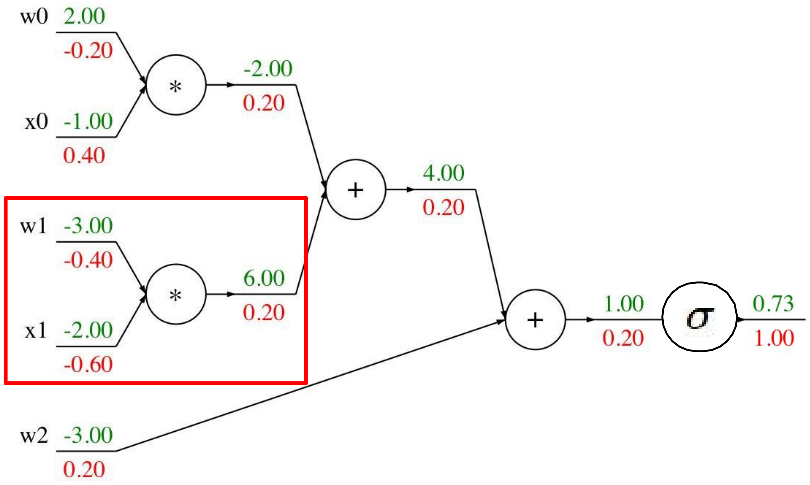
Прямой проход:
Считаем выход

```
def f(w0, x0, w1, x1, w2):
    s0 = w0 * x0
    s1 = w1 * x1
    s2 = s0 + s1
    s3 = s2 + w2
    L = sigmoid(s3)
```

Add gate

```
    grad_L = 1.0
    grad_s3 = grad_L * (1 - L) * L
    grad_w2 = grad_s3
    grad_s2 = grad_s3
    grad_s0 = grad_s2
    grad_s1 = grad_s2
    grad_w1 = grad_s1 * x1
    grad_x1 = grad_s1 * w1
    grad_w0 = grad_s0 * x0
    grad_x0 = grad_s0 * w0
```

Реализация backprop: “в лоб”



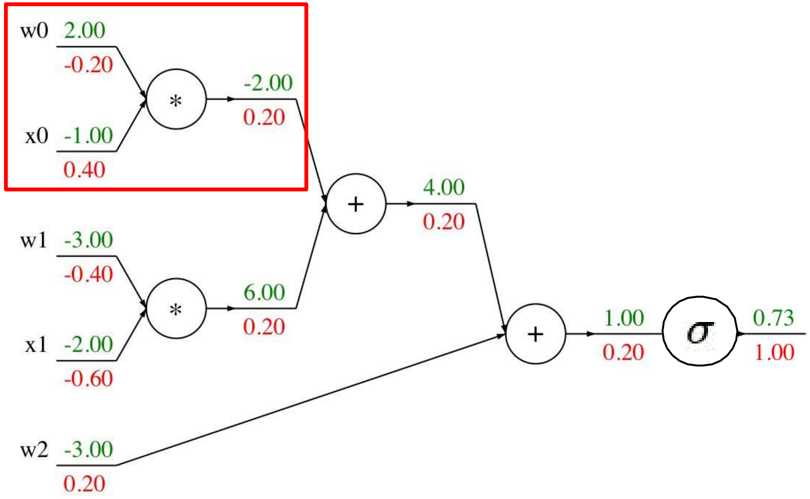
Прямой проход:
Считаем выход

```
def f(w0, x0, w1, x1, w2):
  s0 = w0 * x0
  s1 = w1 * x1
  s2 = s0 + s1
  s3 = s2 + w2
  L = sigmoid(s3)

  grad_L = 1.0
  grad_s3 = grad_L * (1 - L) * L
  grad_w2 = grad_s3
  grad_s2 = grad_s3
  grad_s0 = grad_s2
  grad_s1 = grad_s2
  grad_w1 = grad_s1 * x1
  grad_x1 = grad_s1 * w1
  grad_w0 = grad_s0 * x0
  grad_x0 = grad_s0 * w0
```

Multiply gate

Реализация backprop: “в лоб”



Прямой проход:
Считаем выход

```
def f(w0, x0, w1, x1, w2):
    s0 = w0 * x0
    s1 = w1 * x1
    s2 = s0 + s1
    s3 = s2 + w2
    L = sigmoid(s3)
```

```
    grad_L = 1.0
    grad_s3 = grad_L * (1 - L) * L
    grad_w2 = grad_s3
    grad_s2 = grad_s3
    grad_s0 = grad_s2
    grad_s1 = grad_s2
    grad_w1 = grad_s1 * x1
    grad_x1 = grad_s1 * w1
    grad_w0 = grad_s0 * x0
    grad_x0 = grad_s0 * w0
```

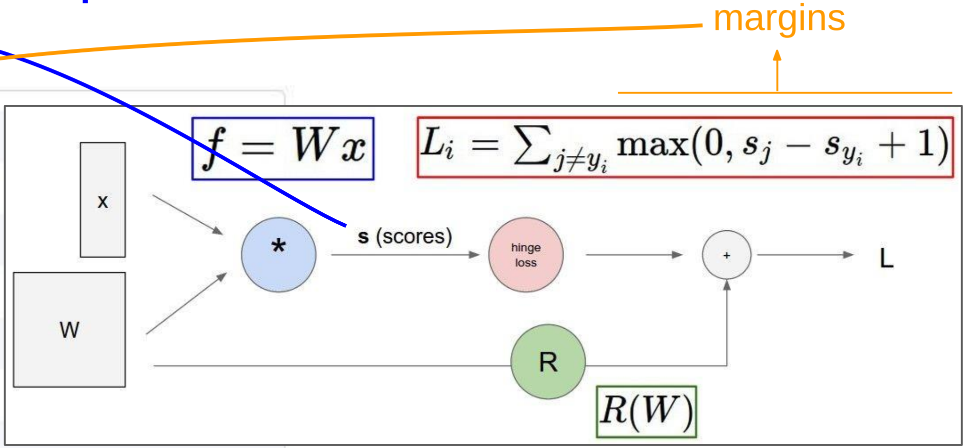
Multiply gate

“Плоский” Backprop

Можно подставить ваши лабораторки!

Например для SVM:

```
# receive W (weights), X (data)
# forward pass (we have 8 lines)
scores = #...
margins = #...
data_loss = #...
reg_loss = #...
loss = data_loss + reg_loss
# backward pass (we have 5 lines)
dmargins = # ... (optionally, we go direct to dscores)
dscores = #...
dW = #...
```

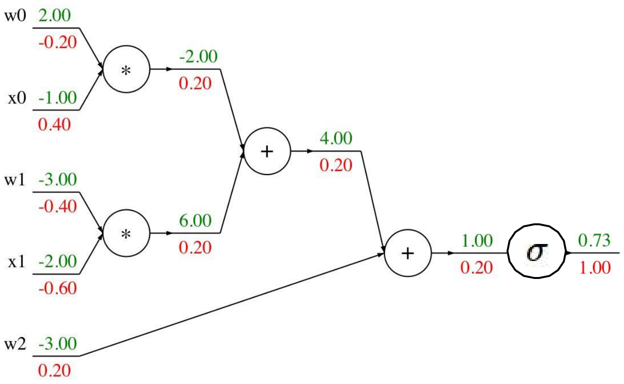


“Плоский” Backprop

Двуслойная сеть:

```
# receive W1,W2,b1,b2 (weights/biases), X (data)
# forward pass:
h1 = #... function of X,W1,b1
scores = #... function of h1,W2,b2
loss = #... (several lines of code to evaluate Softmax loss)
# backward pass:
dscores = #...
dh1,dW2,db2 = #...
dW1,db1 = #...
```

Модульное API для Backprop



Graph (Net) object *(псевдокод)*

```
class ComputationalGraph(object):
    #...
    def forward(inputs):
        # 1. [pass inputs to input gates...]
        # 2. forward the computational graph:
        for gate in self.graph.nodes_topologically_sorted():
            gate.forward()
        return loss # the final gate in the graph outputs the loss
    def backward():
        for gate in reversed(self.graph.nodes_topologically_sorted()):
            gate.backward() # little piece of backprop (chain rule applied)
        return inputs_gradients
```

Далее: векторный backprop

Вспомним векторные производные

Скаляр на скаляр

$$x \in \mathbb{R}, y \in \mathbb{R}$$

Производная:

$$\frac{\partial y}{\partial x} \in \mathbb{R}$$

Как изменится y при малом изменении x?

Вектор на скаляр

$$x \in \mathbb{R}^N, y \in \mathbb{R}$$

Производная стала **градиентом**:

$$\frac{\partial y}{\partial x} \in \mathbb{R}^N \quad \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_n = \frac{\partial y}{\partial x_n}$$

Как изменится y при малом изменении каждого элемента x?

Вектор на вектор

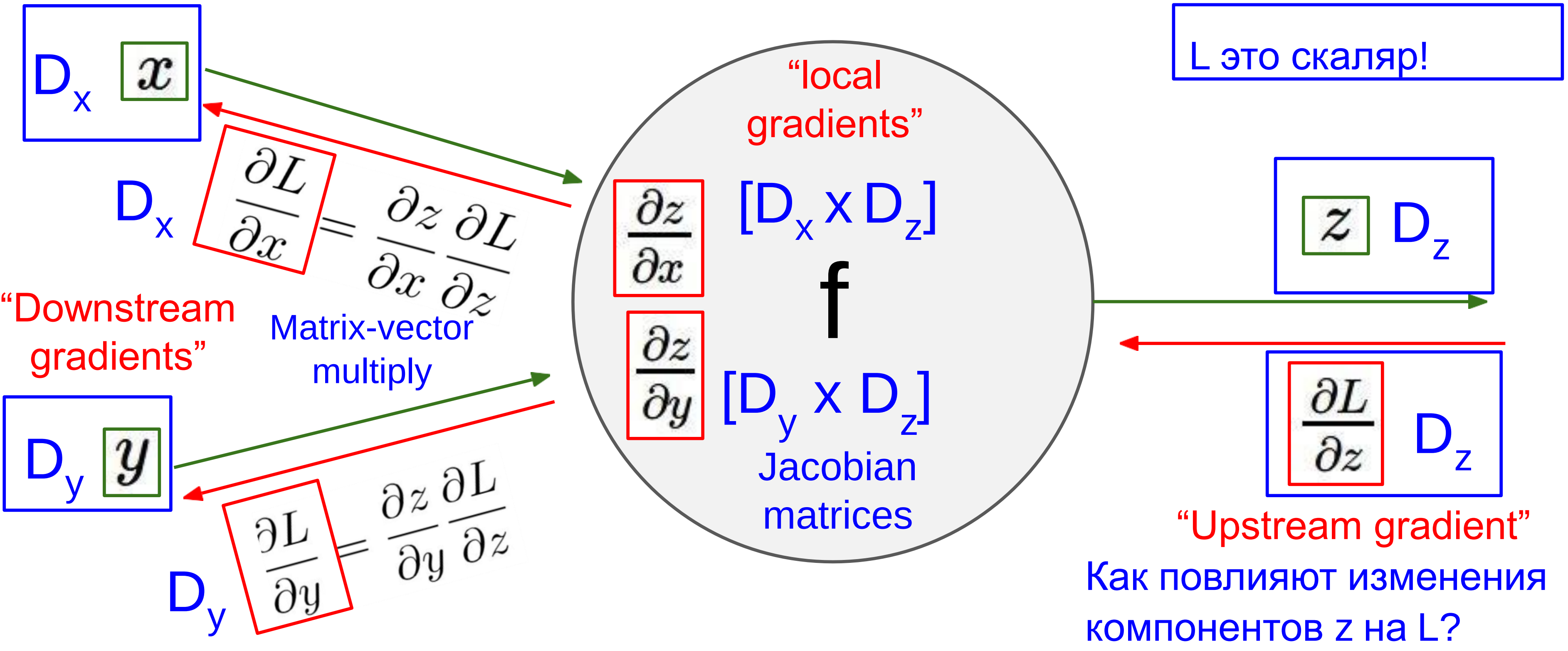
$$x \in \mathbb{R}^N, y \in \mathbb{R}^M$$

Производная стала **якобианом**:

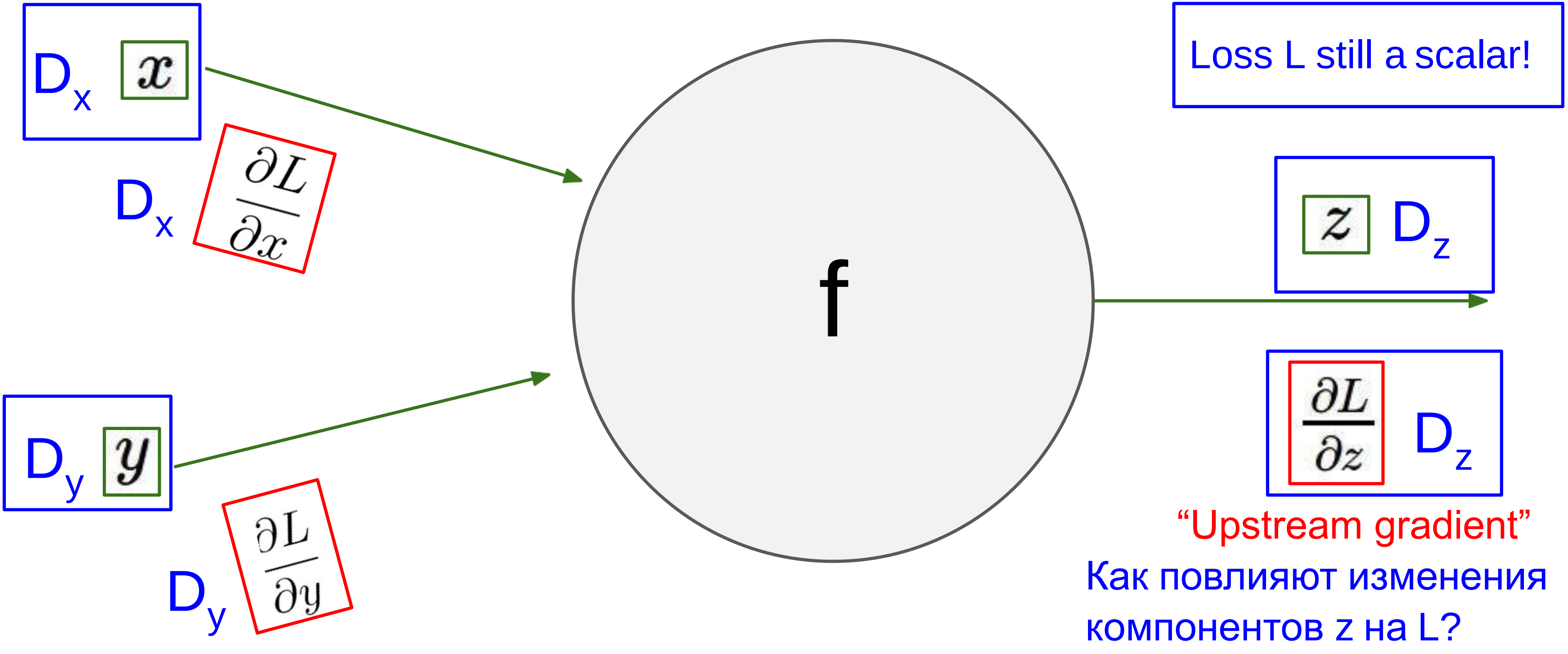
$$\frac{\partial y}{\partial x} \in \mathbb{R}^{N \times M} \quad \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_{n,m} = \frac{\partial y_m}{\partial x_n}$$

Как изменится каждый элемент y при малом изменении каждого элемента x?

Векторный Backprop



Градиенты переменных имеют ту же размерность что и сами переменные



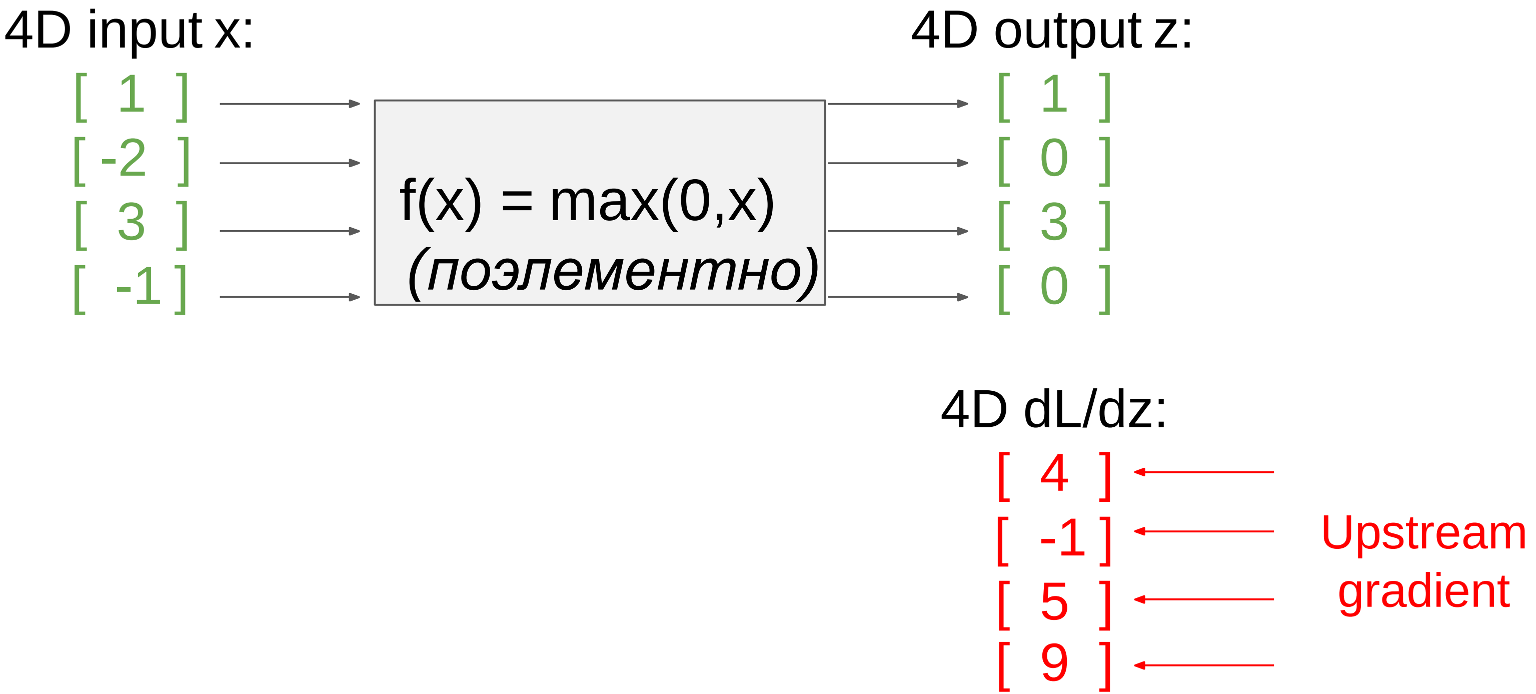
Векторный Backprop

4D input x:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 3 \\ -1 \end{bmatrix} \rightarrow \boxed{\begin{array}{c} f(x) = \max(0,x) \\ \textit{(поэлементно)} \end{array}} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \\ 0 \end{bmatrix}$$

4D output z:

Векторный Backprop



Векторный Backprop

4D input x:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 3 \\ -1 \end{bmatrix}$$

f(x) = max(0,x)
(поэлементно)

4D output z:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Jacobian dz/dx

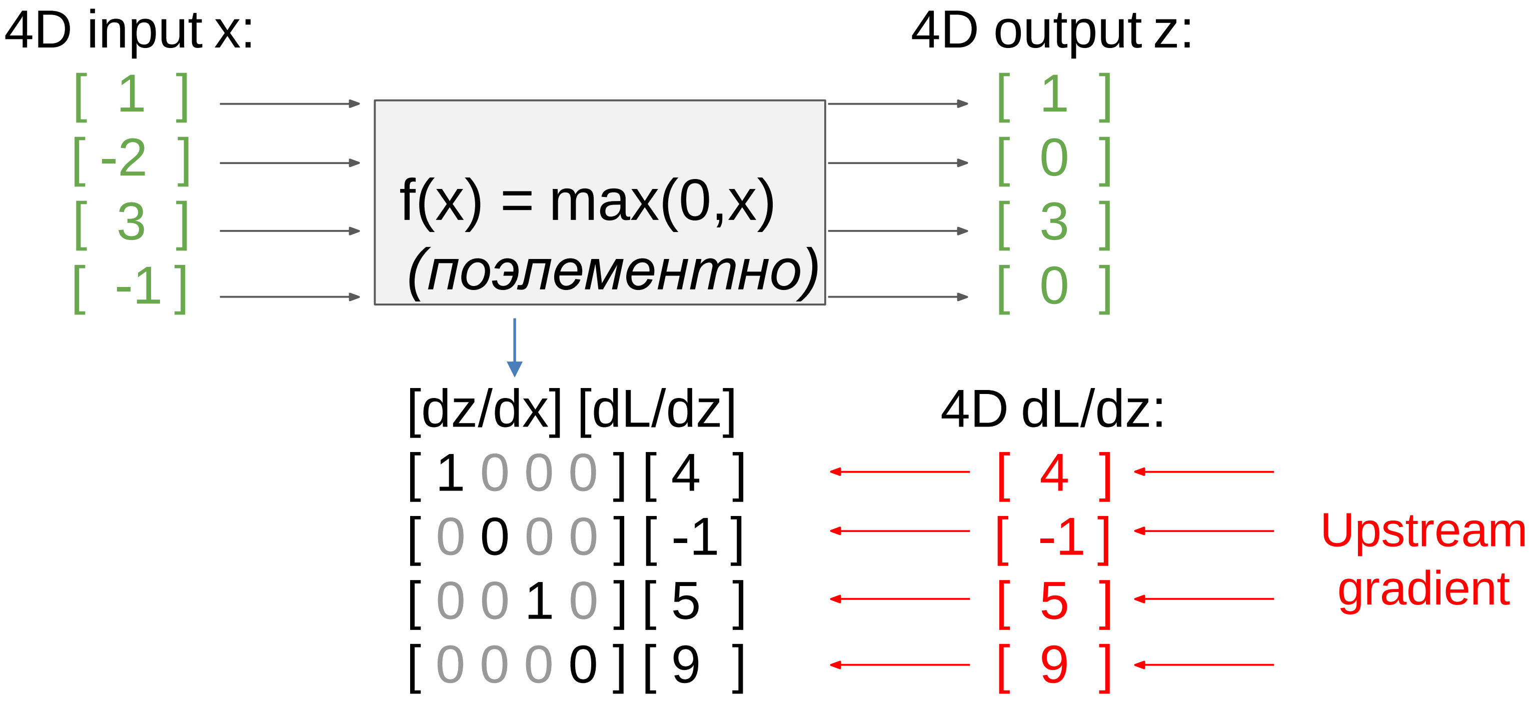
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

4D dL/dz:

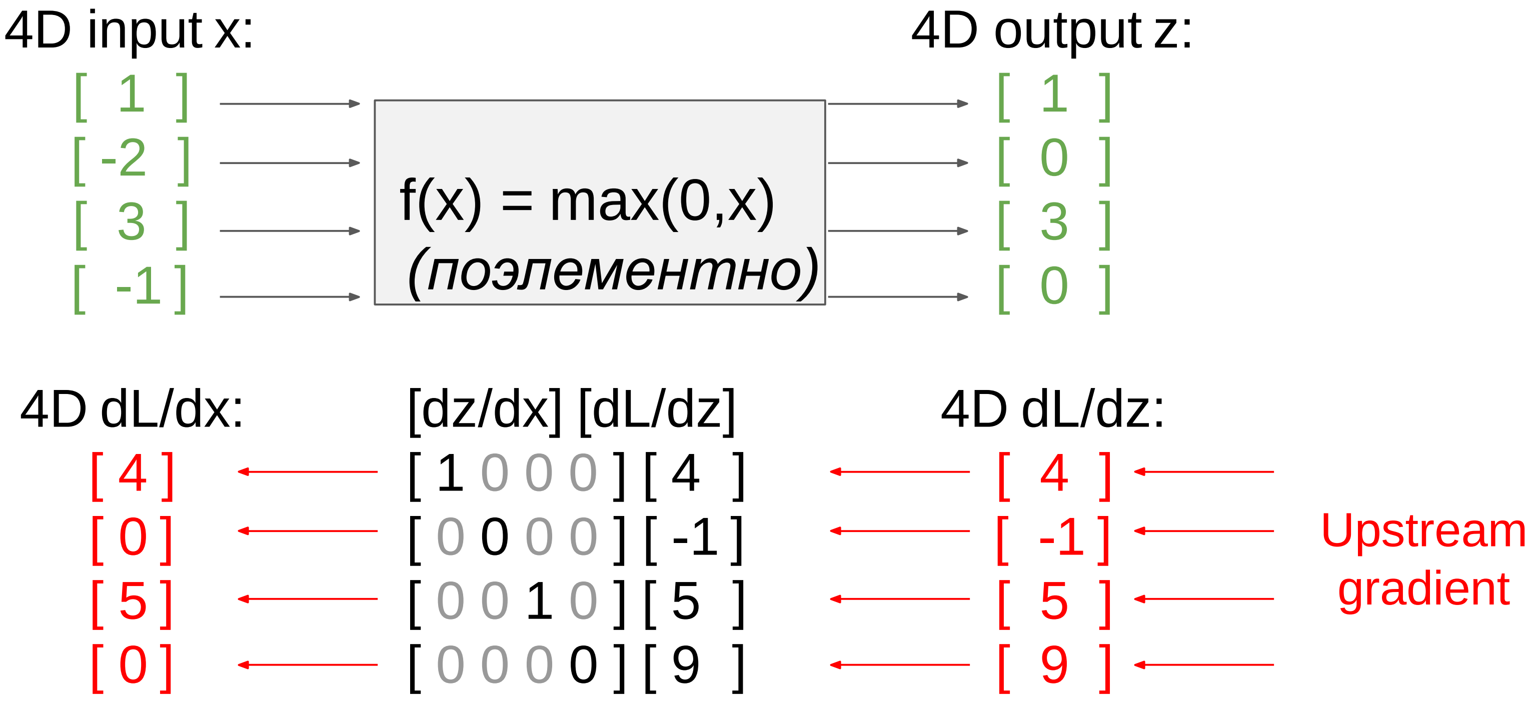
$$\begin{bmatrix} 4 \\ -1 \\ 5 \\ 9 \end{bmatrix}$$

Upstream gradient

Векторный Backprop



Backprop with Vectors



Векторный Backprop

4D input x:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 3 \\ -1 \end{bmatrix} \rightarrow \boxed{\begin{array}{c} f(x) = \max(0,x) \\ \textit{(поэлементно)} \end{array}} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \\ 0 \end{bmatrix}$$

4D output z:

4D dL/dx: [dz/dx] [dL/dz] 4D dL/dz:

$$\begin{bmatrix} 4 \\ 0 \\ 5 \\ 0 \end{bmatrix} \leftarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ -1 \\ 5 \\ 9 \end{bmatrix} \leftarrow \begin{bmatrix} 4 \\ -1 \\ 5 \\ 9 \end{bmatrix} \leftarrow$$

Upstream gradient

Якобиан всегда **разряженный**: внедиагональные элементы нулевые! Матрицу якобиана никогда не формируется **явно** – всегда используется **неявное умножение**

Векторный Backprop

4D input x:

[1]
[-2]
[3]
[-1]

f(x) = max(0,x)
(elementwise)

4D output z:

[1]
[0]
[3]
[0]

4D dL/dx:

[4]
[0]
[5]
[0]

[dz/dx] [dL/dz]

$$\left(\frac{\partial L}{\partial x}\right)_i = \begin{cases} \left(\frac{\partial L}{\partial z}\right)_i & \text{if } x_i > 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

4D dL/dz:

[4]
[-1]
[5]
[9]

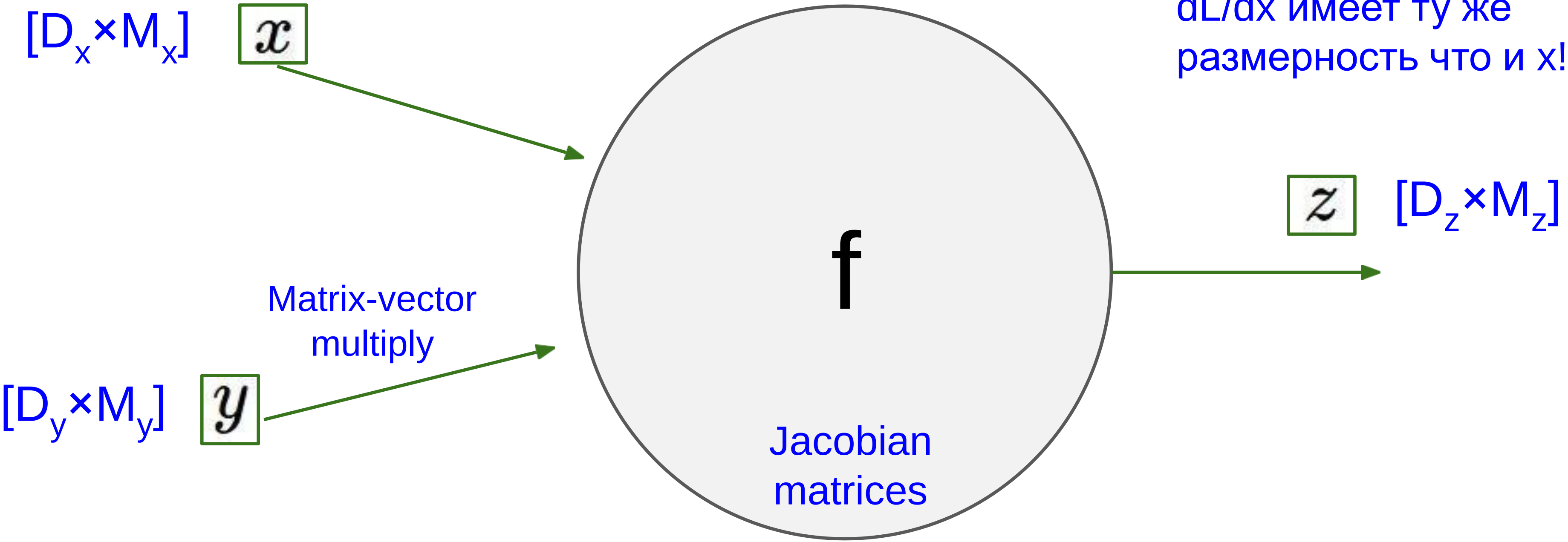
Upstream gradient

Якобиан всегда **разряженный**: внедиагональные элементы нулевые! Матрицу якобиана никогда не формируется **явно** – всегда используется **неявное умножение**

Матричный (тензорный) Backprop

L скаляр!

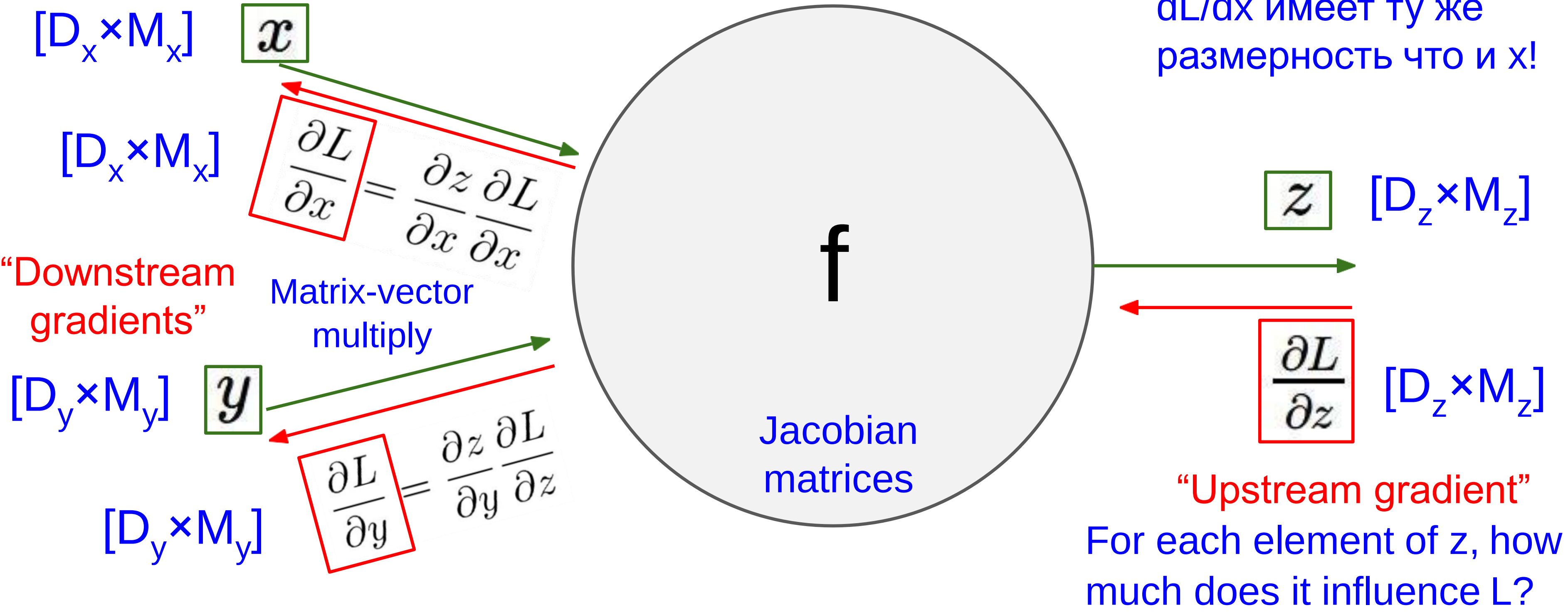
dL/dx имеет ту же размерность что и x!



Матричный (тензорный) Backprop

L скаляр!

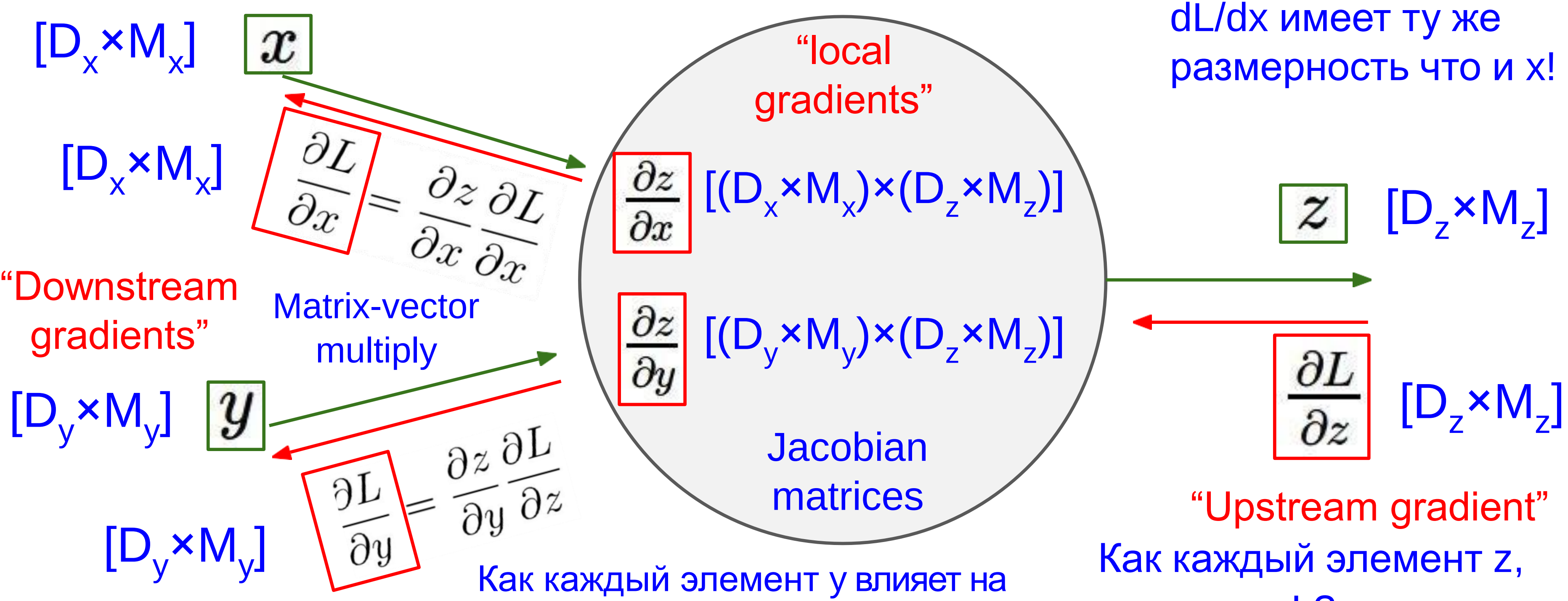
dL/dx имеет ту же размерность что и x!



Матричный (тензорный) Backprop

L скаляр!

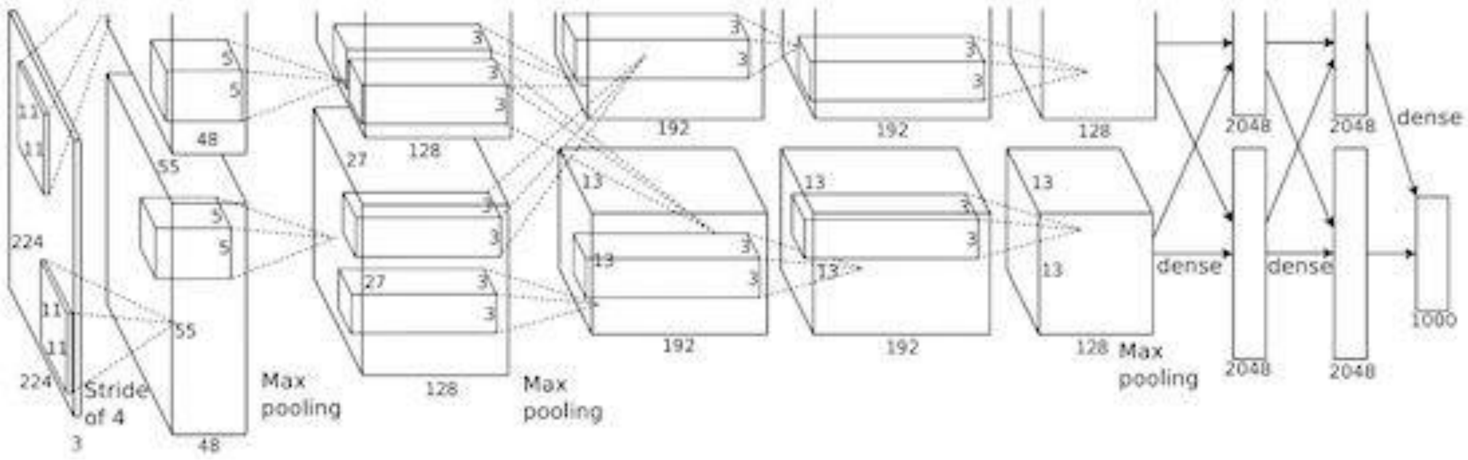
dL/dx имеет ту же размерность что и x!



Как каждый элемент y влияет на каждый элемент z?

Как каждый элемент z, влияет на L?

Далее сверточные сетки!



Backprop with Matrices

x: [N×D]

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 3 \\ -3 & 4 & 2 \end{bmatrix}$$

w: [D×M]

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & -1 \\ 2 & 1 & 3 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

Matrix Multiply

$$y_{n,m} = \sum_d x_{n,d} w_{d,m}$$

y: [N×M]

$$\begin{bmatrix} 13 & 9 & 2 & -10 \\ 5 & 2 & 17 & 1 \end{bmatrix}$$

dL/dy: [N×M]

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 & -3 & 9 \\ -8 & 1 & 4 & 6 \end{bmatrix}$$

Полезно посмотреть:
http://cs231n.stanford.edu/handouts/linear-backprop.pdf

Backprop with Matrices

x: [N×D]

$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 3 \\ -3 & 4 & 2 \end{bmatrix}$

w: [D×M]

$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & -1 \\ 2 & 1 & 3 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & -2 \end{bmatrix}$

Matrix Multiply

$$y_{n,m} = \sum_d x_{n,d} w_{d,m}$$

y: [N×M]

$\begin{bmatrix} 13 & 9 & 2 & -10 \\ 5 & 2 & 17 & 1 \end{bmatrix}$

dL/dy: [N×M]

$\begin{bmatrix} 2 & 3 & -3 & 9 \\ -8 & 1 & 4 & 6 \end{bmatrix}$

Jacobians: dy/dx: [(N×D)×(N×M)]

dy/dw: [(D×M)×(N×M)]

Для нейронной сети может быть
N=64, D=M=4096

Каждый якобиан требует 256 GB!

Только неявное умножение!

Backprop with Matrices

x: [N×D]

$$\begin{bmatrix} 2 & \boxed{-1} & 3 \\ -3 & 4 & 2 \end{bmatrix}$$

w: [D×M]

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & -1 \\ 2 & 1 & 3 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

Matrix Multiply

$$y_{n,m} = \sum_d x_{n,d} w_{d,m}$$

y: [N×M]

$$\begin{bmatrix} \mathbf{13} & \mathbf{9} & \mathbf{2} & \mathbf{-10} \\ 5 & 2 & 17 & 1 \end{bmatrix}$$

dL/dy: [N×M]

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 & -3 & 9 \\ -8 & 1 & 4 & 6 \end{bmatrix}$$

Q: на какую часть y влияет один элемент x?

Backprop with Matrices

x: [N×D]

$$\begin{bmatrix} 2 & \boxed{-1} & 3 \\ -3 & 4 & 2 \end{bmatrix}$$

w: [D×M]

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & -1 \\ 2 & 1 & 3 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

Matrix Multiply

$$y_{n,m} = \sum_d x_{n,d} w_{d,m}$$

y: [N×M]

$$\begin{bmatrix} \boxed{13 \quad 9 \quad 2 \quad -10} \\ 5 \quad 2 \quad 17 \quad 1 \end{bmatrix}$$

dL/dy: [N×M]

$$\begin{bmatrix} \boxed{2 \quad 3 \quad -3 \quad 9} \\ -8 \quad 1 \quad 4 \quad 6 \end{bmatrix}$$

Q: на какую часть y влияет один элемент x?

A: $\boxed{x_{n,d}}$ влияет на всю строку $y_{n,\cdot}$

$$\frac{\partial L}{\partial x_{n,d}} = \sum_m \frac{\partial L}{\partial y_{n,m}} \frac{\partial y_{n,m}}{\partial x_{n,d}}$$

Backprop with Matrices

x: [N×D]

$$\begin{bmatrix} 2 & \boxed{1} & -3 \\ -3 & 4 & 2 \end{bmatrix}$$

w: [D×M]

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & -1 \\ 2 & 1 & 3 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

Matrix Multiply

$$y_{n,m} = \sum_d x_{n,d} w_{d,m}$$

y: [N×M]

$$\begin{bmatrix} 13 & 9 & \boxed{-2} & -6 \\ 5 & 2 & 17 & 1 \end{bmatrix}$$

dL/dy: [N×M]

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 & -3 & 9 \\ -8 & 1 & 4 & 6 \end{bmatrix}$$

Q: на какую часть y влияет один элемент x?

A: $\boxed{x_{n,d}}$ влияет на всю строку $y_{n,\cdot}$

$$\frac{\partial L}{\partial x_{n,d}} = \sum_m \frac{\partial L}{\partial y_{n,m}} \frac{\partial y_{n,m}}{\partial x_{n,d}}$$

Q: Как влияет $\boxed{x_{n,d}}$ на $\boxed{y_{n,m}}$

Backprop with Matrices

x: [N×D]

$$\begin{bmatrix} 2 & \boxed{-1} & 3 \\ -3 & 4 & 2 \end{bmatrix}$$

w: [D×M]

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & -1 \\ 2 & 1 & \boxed{3} & 2 \\ 3 & 2 & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

Matrix Multiply

$$y_{n,m} = \sum_d x_{n,d} w_{d,m}$$

y: [N×M]

$$\begin{bmatrix} \boxed{13 \quad 9 \quad \boxed{2} \quad -10} \\ 5 \quad 2 \quad 17 \quad 1 \end{bmatrix}$$

dL/dy: [N×M]

$$\begin{bmatrix} \boxed{2 \quad 3 \quad -3 \quad 9} \\ -8 \quad 1 \quad 4 \quad 6 \end{bmatrix}$$

Q: на какую часть у влияет один элемент x?

A: $\boxed{x_{n,d}}$ влияет на всю строку $y_{n,\cdot}$

Q: Как влияет $\boxed{x_{n,d}}$ на $\boxed{y_{n,m}}$

A: $\boxed{w_{d,m}}$

[N×D] [N×M] [M×D]

$$\boxed{\frac{\partial L}{\partial x} = \left(\frac{\partial L}{\partial y}\right) w^T}$$

$$\frac{\partial L}{\partial x_{n,d}} = \sum_m \frac{\partial L}{\partial y_{n,m}} \frac{\partial y_{n,m}}{\partial x_{n,d}} = \sum_m \frac{\partial L}{\partial y_{n,m}} w_{d,m}$$

Backprop with Matrices

x: [N×D]

$$\begin{bmatrix} 2 & \boxed{-1} & 3 \\ -3 & 4 & 2 \end{bmatrix}$$

w: [D×M]

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & -1 \\ 2 & 1 & \boxed{3} & 2 \\ 3 & 2 & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

Matrix Multiply

$$y_{n,m} = \sum_d x_{n,d} w_{d,m}$$

y: [N×M]

$$\begin{bmatrix} \boxed{13 & 9 & \boxed{2} & -10} \\ 5 & 2 & 17 & 1 \end{bmatrix}$$

dL/dy: [N×M]

$$\begin{bmatrix} \boxed{2 & 3 & -3 & 9} \\ -8 & 1 & 4 & 6 \end{bmatrix}$$

Аналогично:

[N×D] [N×M] [M×D]

$$\frac{\partial L}{\partial x} = \left(\frac{\partial L}{\partial y}\right) w^T$$

[D×M] [D×N] [N×M]

$$\frac{\partial L}{\partial w} = x^T \left(\frac{\partial L}{\partial y}\right)$$

Тут все просто – главное чтобы совпадали размерности!

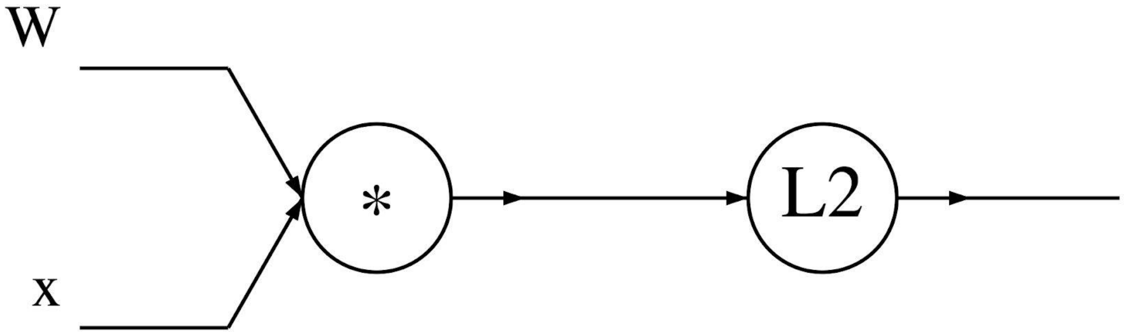
Итоги:

- **Полносвязные (fully-connected, dense)** это последовательность линейных классификаторов с нелинейными активационными функциями; они обеспечивают лучшие результаты чем линейные классификаторы
- **backpropagation** = рекурсивное применение цепного правила к вычислительному графу при обратном распространении позволяет получить значение градиента функции потерб по параметрам
- Граф может быть реализован универсальным API с функциями **forward**() / **backward**()
- **forward**: вычисляем результат прямого распространения с сохранением всех промежуточных значений, необходимых для обратного распространения
- **backward**: применяя цепное правило вычисляем значения градиента функции потерь по параметрам

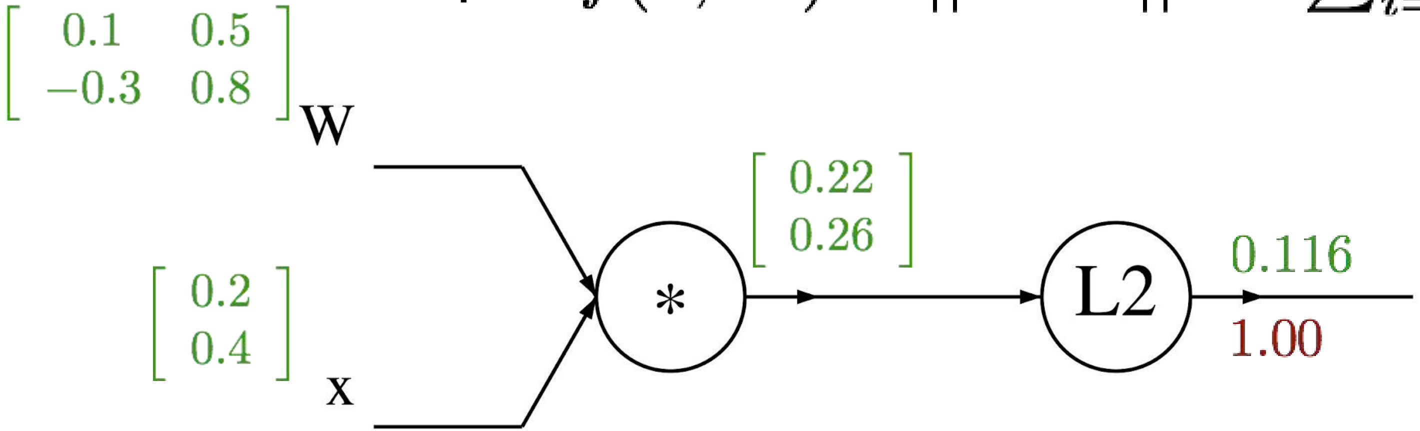
A vectorized example: $f(x, W) = ||W \cdot x||^2 = \sum_{i=1}^{n} (W \cdot x)_i^2$

$\in \mathbb{R}^n \quad \in \mathbb{R}^{n \times n}$

A vectorized example: $f(x, W) = ||W \cdot x||^2 = \sum_{i=1}^{n} (W \cdot x)_i^2$



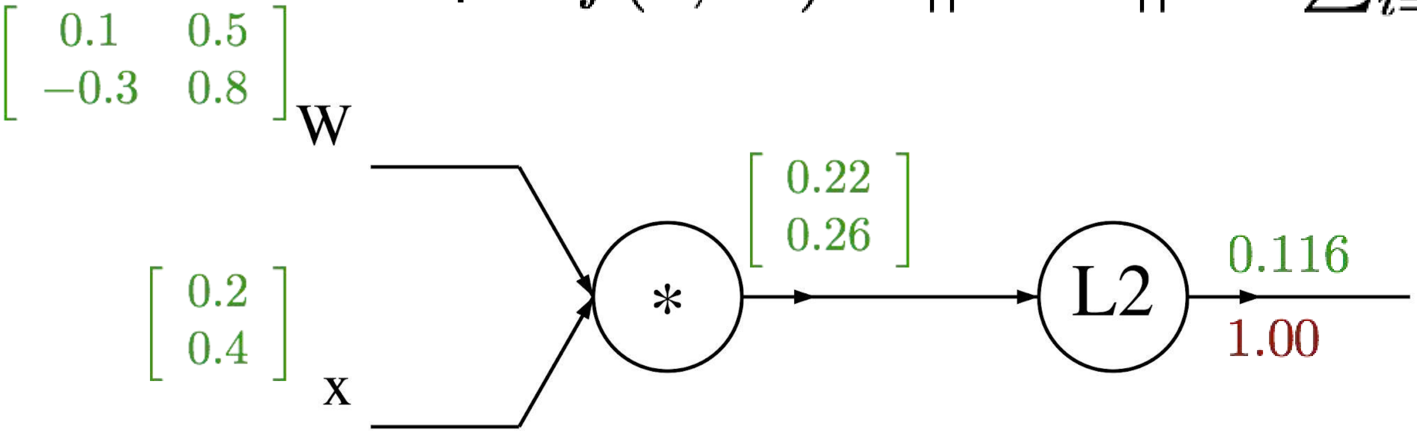
A vectorized example: $f(x, W) = ||W \cdot x||^2 = \sum_{i=1}^{n}(W \cdot x)_i^2$



$$q = W \cdot x = \begin{pmatrix} W_{1,1}x_1 + \cdots + W_{1,n}x_n \\ \vdots \\ W_{n,1}x_1 + \cdots + W_{n,n}x_n \end{pmatrix}$$

$$f(q) = ||q||^2 = q_1^2 + \cdots + q_n^2$$

A vectorized example: $f(x,W) = ||W \cdot x||^2 = \sum_{i=1}^{n} (W \cdot x)_i^2$



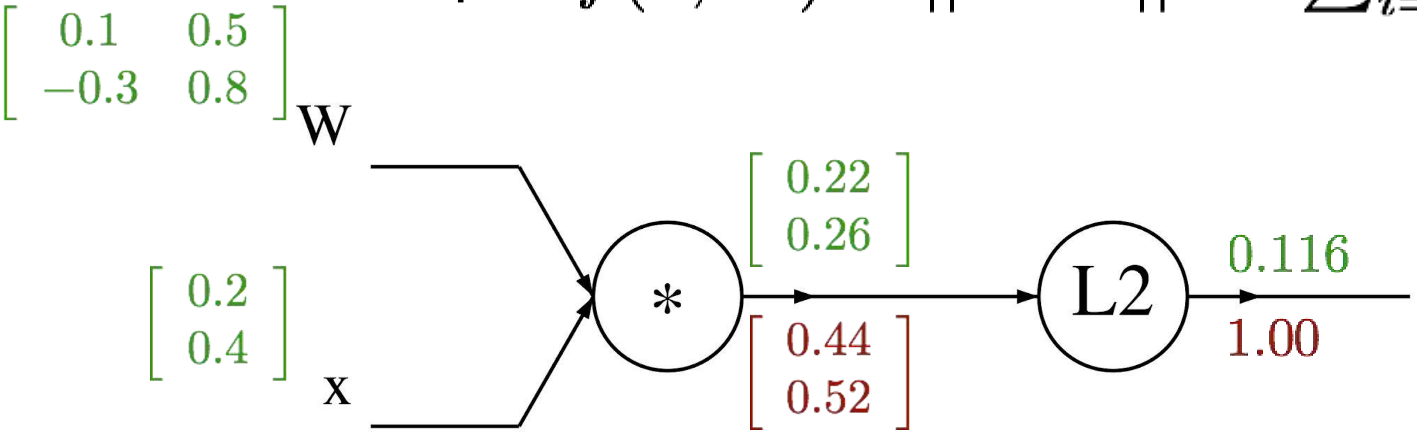
$$q = W \cdot x = \begin{pmatrix} W_{1,1}x_1 + \cdots + W_{1,n}x_n \\ \vdots \\ W_{n,1}x_1 + \cdots + W_{n,n}x_n \end{pmatrix}$$

$$f(q) = ||q||^2 = q_1^2 + \cdots + q_n^2$$

$$\frac{\partial f}{\partial q_i} = 2q_i$$

$$\boxed{\nabla_q f = 2q}$$

A vectorized example: $f(x, W) = ||W \cdot x||^2 = \sum_{i=1}^{n} (W \cdot x)_i^2$



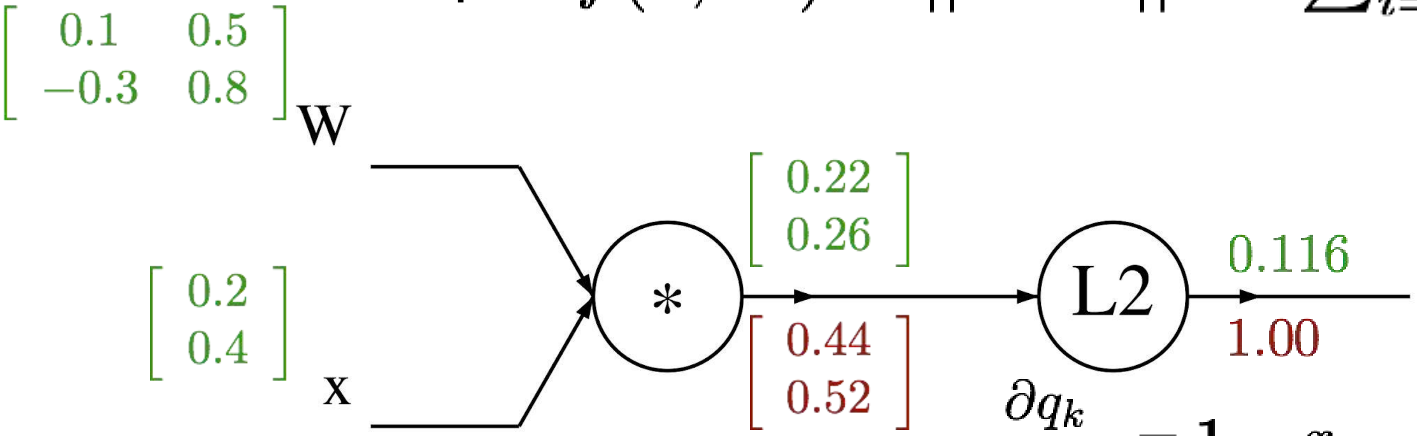
$$q = W \cdot x = \begin{pmatrix} W_{1,1}x_1 + \cdots + W_{1,n}x_n \\ \vdots \\ W_{n,1}x_1 + \cdots + W_{n,n}x_n \end{pmatrix}$$

$$f(q) = ||q||^2 = q_1^2 + \cdots + q_n^2$$

$$\frac{\partial f}{\partial q_i} = 2q_i$$

$$\boxed{\nabla_q f = 2q}$$

A vectorized example: $f(x, W) = ||W \cdot x||^2 = \sum_{i=1}^{n} (W \cdot x)_i^2$

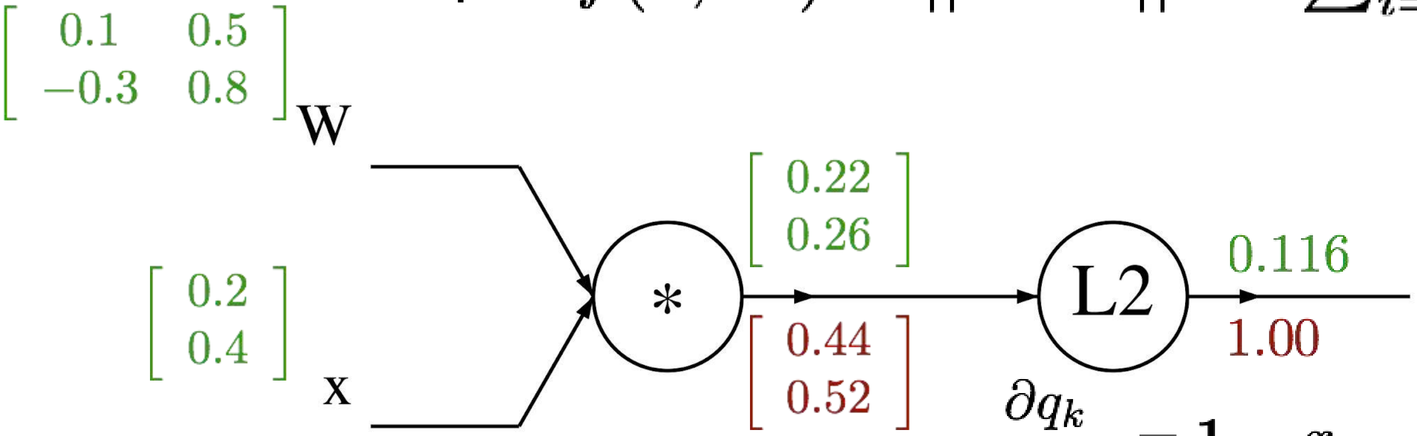


$$\frac{\partial q_k}{\partial W_{i,j}} = \mathbf{1}_{k=i} x_j$$

$$q = W \cdot x = \begin{pmatrix} W_{1,1} x_1 + \cdots + W_{1,n} x_n \\ \vdots \\ W_{n,1} x_1 + \cdots + W_{n,n} x_n \end{pmatrix}$$

$$f(q) = ||q||^2 = q_1^2 + \cdots + q_n^2$$

A vectorized example: $f(x, W) = ||W \cdot x||^2 = \sum_{i=1}^{n} (W \cdot x)_i^2$



$$\frac{\partial q_k}{\partial W_{i,j}} = \mathbf{1}_{k=i} x_j$$

$$\frac{\partial f}{\partial W_{i,j}} = \sum_k \frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial q_k}{\partial W_{i,j}}$$

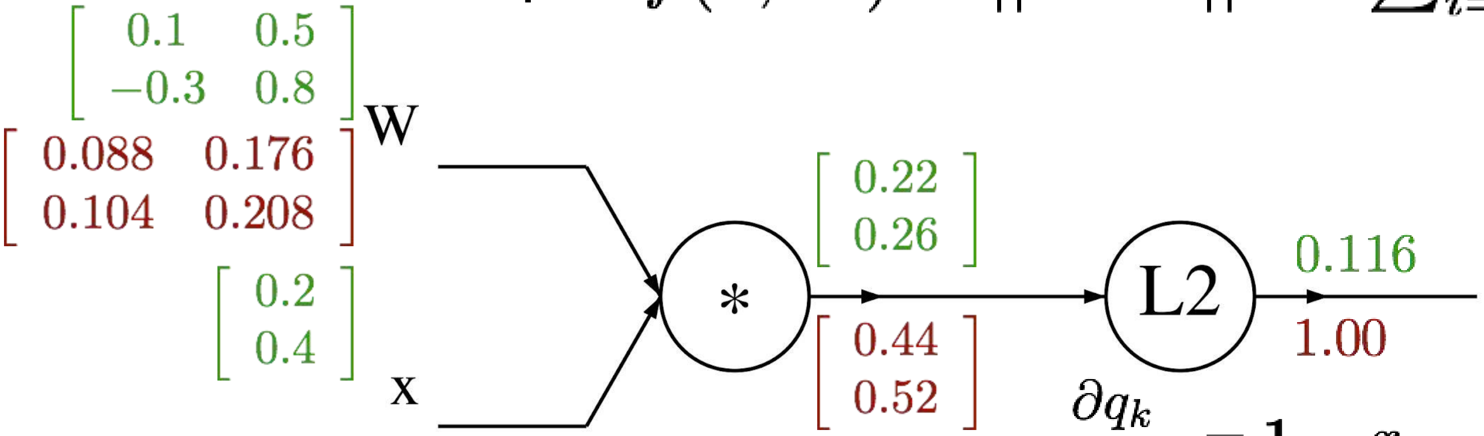
$$= \sum_k (2q_k)(\mathbf{1}_{k=i} x_j)$$

$$= 2 q_i x_j$$

$$q = W \cdot x = \begin{pmatrix} W_{1,1}x_1 + \cdots + W_{1,n}x_n \\ \vdots \\ W_{n,1}x_1 + \cdots + W_{n,n}x_n \end{pmatrix}$$

$$f(q) = ||q||^2 = q_1^2 + \cdots + q_n^2$$

A vectorized example: $f(x, W) = ||W \cdot x||^2 = \sum_{i=1}^{n} (W \cdot x)_i^2$



$$\frac{\partial q_k}{\partial W_{i,j}} = \mathbf{1}_{k=i} x_j$$

$$\frac{\partial f}{\partial W_{i,j}} = \sum_k \frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial q_k}{\partial W_{i,j}}$$

$$= \sum_k (2q_k)(\mathbf{1}_{k=i} x_j)$$

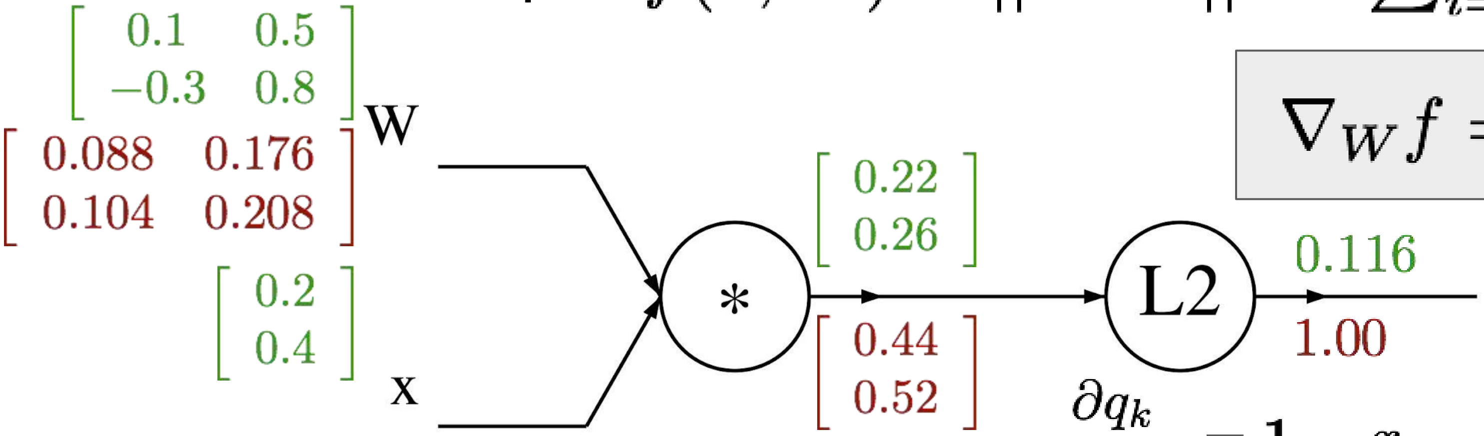
$$= 2q_i x_j$$

$$q = W \cdot x = \begin{pmatrix} W_{1,1}x_1 + \cdots + W_{1,n}x_n \\ \vdots \\ W_{n,1}x_1 + \cdots + W_{n,n}x_n \end{pmatrix}$$

$$f(q) = ||q||^2 = q_1^2 + \cdots + q_n^2$$

A vectorized example: $f(x,W) = ||W \cdot x||^2 = \sum_{i=1}^{n} (W \cdot x)_i^2$

$$\boxed{\nabla_W f = 2q \cdot x^T}$$



$$\frac{\partial q_k}{\partial W_{i,j}} = \mathbf{1}_{k=i} x_j$$

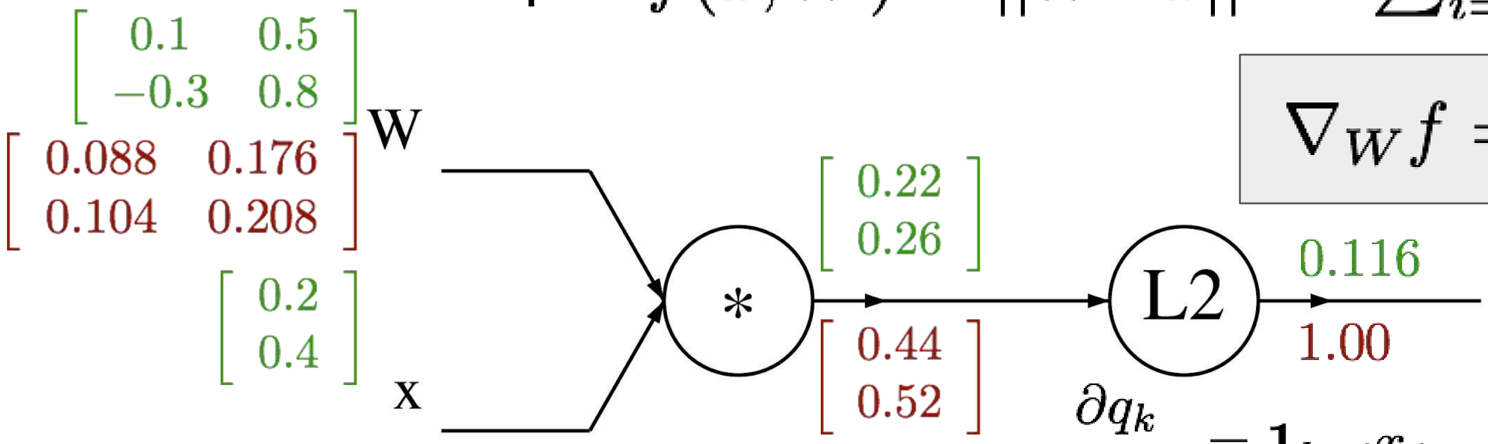
$$\frac{\partial f}{\partial W_{i,j}} = \sum_k \frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial q_k}{\partial W_{i,j}} = \sum_k (2q_k)(\mathbf{1}_{k=i} x_j) = 2q_i x_j$$

$$q = W \cdot x = \begin{pmatrix} W_{1,1}x_1 + \cdots + W_{1,n}x_n \\ \vdots \\ W_{n,1}x_1 + \cdots + W_{n,n}x_n \end{pmatrix}$$

$$f(q) = ||q||^2 = q_1^2 + \cdots + q_n^2$$

A vectorized example: $f(x, W) = ||W \cdot x||^2 = \sum_{i=1}^{n} (W \cdot x)_i^2$

$$\boxed{\nabla_W f = 2q \cdot x^T}$$



Всегда проверяем совпадение размерностей

$$\frac{\partial q_k}{\partial W_{i,j}} = \mathbf{1}_{k=i} x_j$$

$$\frac{\partial f}{\partial W_{i,j}} = \sum_k \frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial q_k}{\partial W_{i,j}}$$

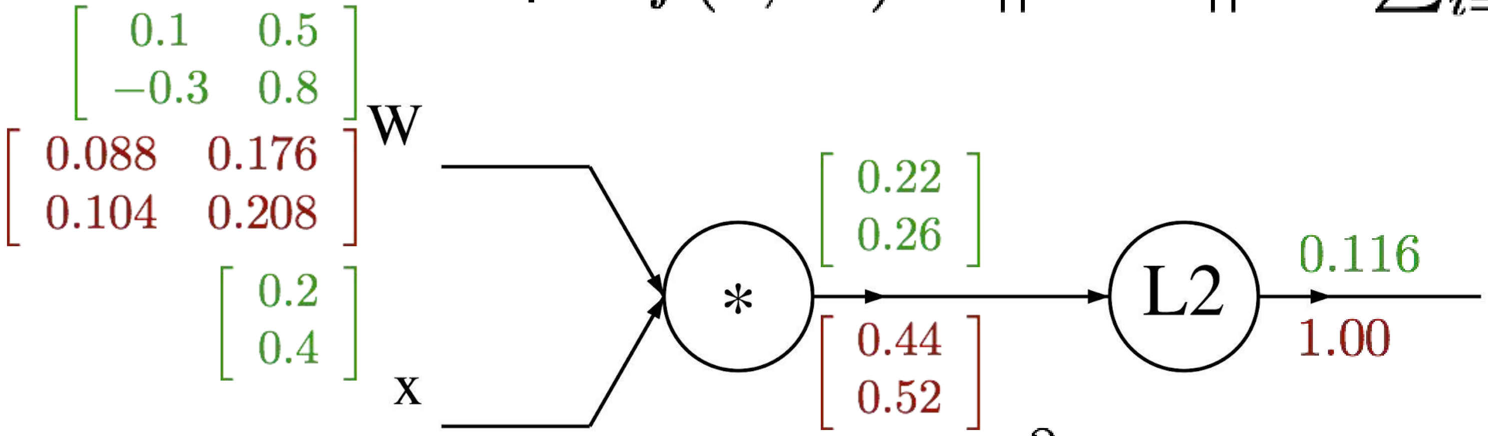
$$= \sum_k (2q_k)(\mathbf{1}_{k=i} x_j)$$

$$= 2q_i x_j$$

$$q = W \cdot x = \begin{pmatrix} W_{1,1}x_1 + \cdots + W_{1,n}x_n \\ \vdots \\ W_{n,1}x_1 + \cdots + W_{n,n}x_n \end{pmatrix}$$

$$f(q) = ||q||^2 = q_1^2 + \cdots + q_n^2$$

A vectorized example: $f(x,W) = ||W \cdot x||^2 = \sum_{i=1}^{n} (W \cdot x)_i^2$

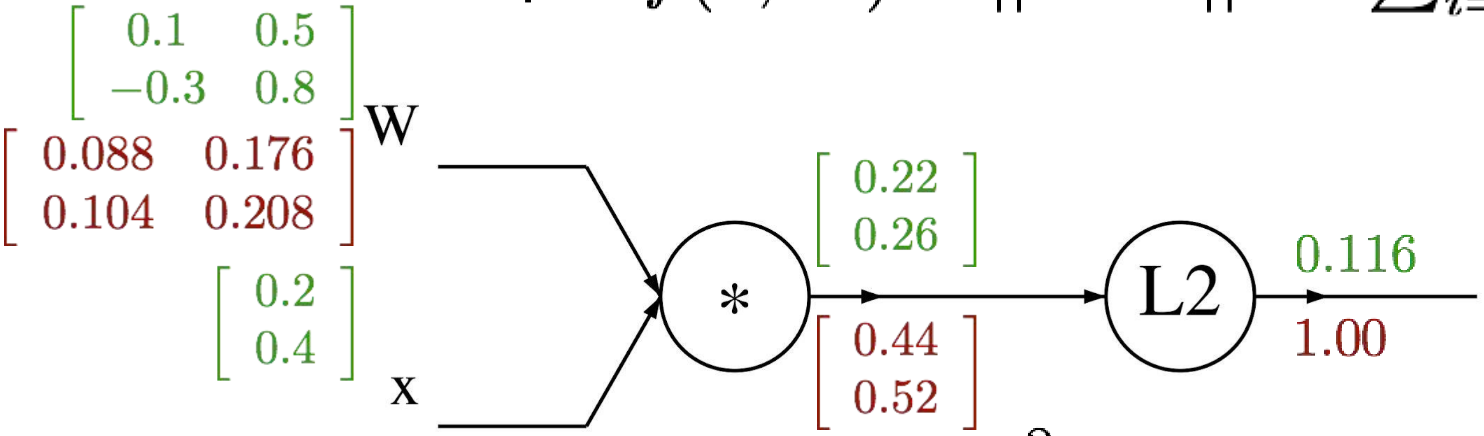


$$\frac{\partial q_k}{\partial x_i} = W_{k,i}$$

$$q = W \cdot x = \begin{pmatrix} W_{1,1}x_1 + \cdots + W_{1,n}x_n \\ \vdots \\ W_{n,1}x_1 + \cdots + W_{n,n}x_n \end{pmatrix}$$

$$f(q) = ||q||^2 = q_1^2 + \cdots + q_n^2$$

A vectorized example: $f(x,W) = ||W \cdot x||^2 = \sum_{i=1}^{n}(W \cdot x)_i^2$



$$\frac{\partial q_k}{\partial x_i} = W_{k,i}$$

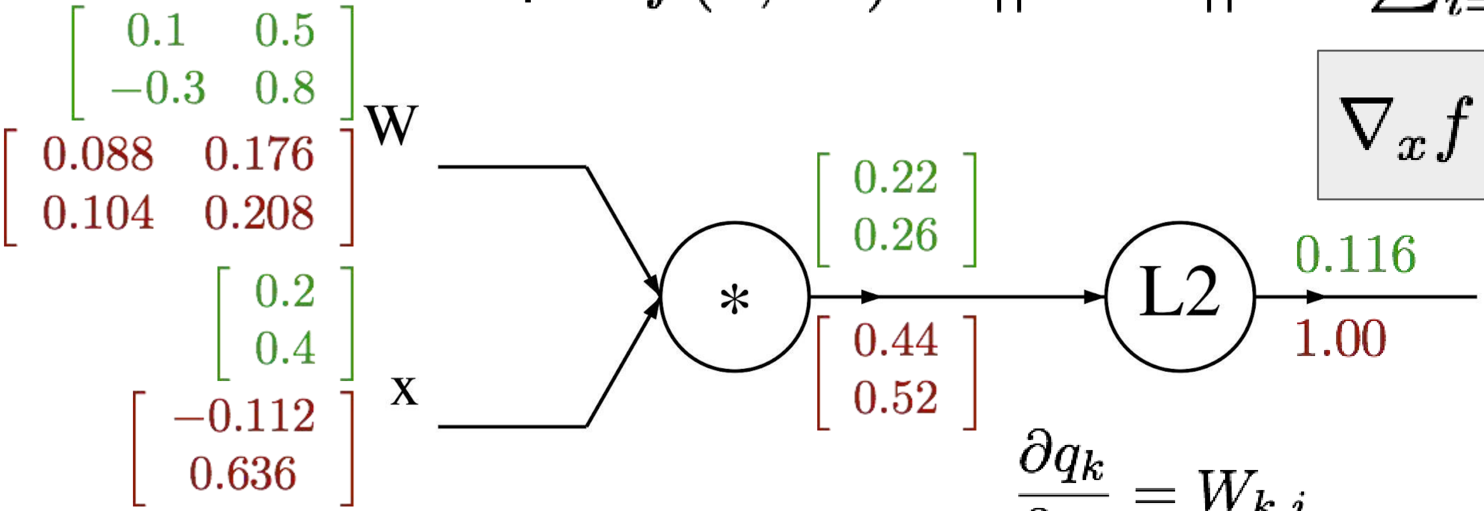
$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \sum_k \frac{\partial f}{\partial q_k}\frac{\partial q_k}{\partial x_i}$$

$$= \sum_k 2q_k W_{k,i}$$

$$q = W \cdot x = \begin{pmatrix} W_{1,1}x_1 + \cdots + W_{1,n}x_n \\ \vdots \\ W_{n,1}x_1 + \cdots + W_{n,n}x_n \end{pmatrix}$$

$$f(q) = ||q||^2 = q_1^2 + \cdots + q_n^2$$

A vectorized example: $f(x, W) = ||W \cdot x||^2 = \sum_{i=1}^{n} (W \cdot x)_i^2$



$$\boxed{\nabla_x f = 2W^T \cdot q}$$

$$q = W \cdot x = \begin{pmatrix} W_{1,1}x_1 + \cdots + W_{1,n}x_n \\ \vdots \\ W_{n,1}x_1 + \cdots + W_{n,n}x_n \end{pmatrix}$$

$$f(q) = ||q||^2 = q_1^2 + \cdots + q_n^2$$

$$\frac{\partial q_k}{\partial x_i} = W_{k,i}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \sum_k \frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial q_k}{\partial x_i} = \sum_k 2q_k W_{k,i}$$