Perceptrón multicapa

Retroalimentación

Verónica E. Arriola-Rios

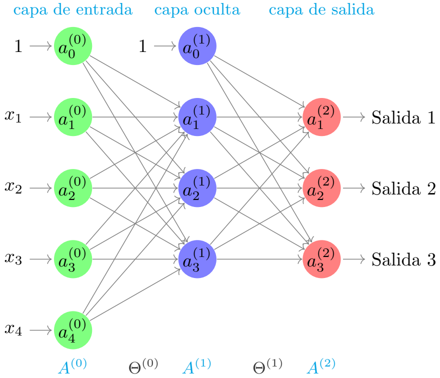
Facultad de Ciencias, UNAM

18 de febrero de 2023

Entrenamiento

Problema de aprendizaje

- Dada una arquitectura de red neuronal, encontrar los pesos tales que la función definida por la red neuronal $h\Theta(\vec{x})$ aproxime, hasta cierta tolerancia, la función de interés $f(\vec{x})$.



Entrenamiento

La estrategia de entrenamiento para encontrar un conjunto de pesos que satisfaga este requerimiento consiste en lo siguiente:

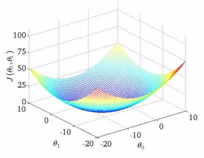
- Definir una función de error o pérdida J que mida la distancia entre los valores deseados y los valores obtenidos con un conjunto de pesos dados Θ.
- Utilizar alguna técnica de optimización de funciones que minimize este error.
- Tanto la arquitectura a considerar, como la función de error y la técnica de optimización dependerán del tipo de función que se desee aproximar.

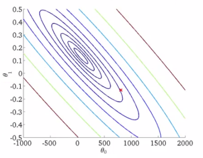
Retropropagación

La primer técnica altamente efectiva para entrenar redes neuronales se le conoce como *Retropropagación*, *Propagación hacia atrás* o en inglés *Retropropagation* consistió en la combinación siguiente:

- Utilizar la regla de la cadena para obtener el gradiente de la función de error con respecto al conjunto de **pesos**, dado un conjunto de datos de entrenamiento $\mathbf{X}$ con sus etiquetas $\mathbf{Y}$.
- Utilizar descenso por el gradiente para encontrar un mínimo, lo suficientemente bueno, de la función de error.

$$\mathbf{\Theta}' = \mathbf{\Theta} - \alpha \nabla_{\mathbf{\Theta}} J \tag{1}$$





- Actualmente se puede cambiar la técnica de optimización por algún otro método más avanzado, también depende del gradiente.
- La derivación original utilizaba *diferencias al cuadrado* como función de error. Sin embargo se ha comprobado que esa función es adecuada para problemas de regresión, pero para problemas de clasificación es mejor utilizar entropía cruzada.
- Se puede consultar la derivación del gradiente para diferencias al cuadrado en Russell y Norving 2010

Función de error

Entropía cruzada

- Para problemas de clasificación se recomienda utilizar a la entropía cruzada como función de error. NG 2017
- Esta mide la cantidad de bits necesarios para identificar una clase dada la hipótesis de la red $h_\Theta(\vec{x})$, siendo que éstas provienen de la función $y(\vec{x})$. [1]

$$J(\Theta) = -\frac{1}{m}\left[\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{s_L} y_k^{(i)} \log(h_\Theta(x^{(i)}))_k + (1 - y_k^{(i)}) \log(1 - h_\Theta(x^{(i)}))_k\right] \quad (2)$$

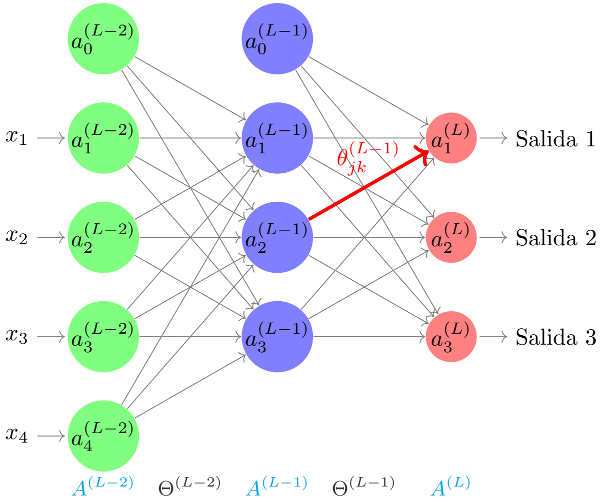
donde:

- m es el número de ejemplares de entrenamiento.
- s_L es el número de neuronas en la capa L.
- y_k es el valor para la k-ésima neurona de salida y toma valores en $\{0,1\}$.

[1] **WikiEntropia**

Cálculo del gradiente

Red neuronal (entrenamiento)



Derivada de la función sigmoide

$$\sigma_\Theta(X) = \frac{1}{1+e^{-X\Theta}}$$

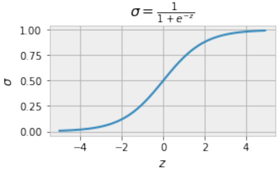
$$\frac{\partial\sigma}{\partial\theta_i} = -\frac{1}{(1+e^{-X\Theta})^2}e^{-X\Theta}(-x_i) = \frac{1}{1+e^{-X\Theta}}\frac{e^{-X\Theta}}{1+e^{X\Theta}}x_i$$

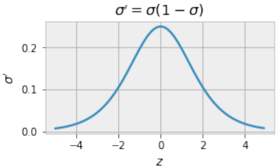
$$= \sigma_\Theta(X)\frac{e^{-X\Theta}}{1+e^{-X\Theta}}x_i$$

$$= \sigma_\Theta(X)\frac{-1+1+e^{-X\Theta}}{1+e^{-X\Theta}}x_i$$

$$= \sigma_\Theta(X)\left(\frac{1+e^{-X\Theta}}{1+e^{-X\Theta}} - \frac{1}{1+e^{-X\Theta}}\right)x_i$$

$$\frac{\partial\sigma}{\partial\theta_i} = \sigma_\Theta(X)(1-\sigma_\Theta(X))x_i$$





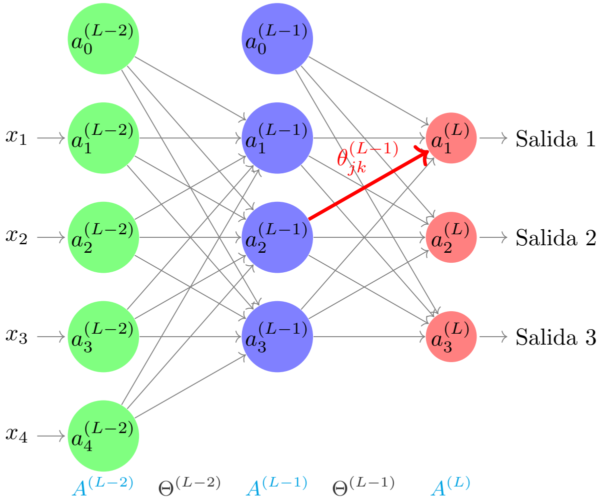
$$\sigma = \frac{1}{1+e^{-z}}$$

$$\frac{\partial\sigma}{\partial z} = \sigma(1-\sigma)$$

Temas

3. Cálculo del gradiente
   - Derivada para un solo ejemplar

Red neuronal (entrenamiento última capa)



Entrenamiento para un ejemplar

$$J(\Theta) = -\left[\sum_{k=1}^{s_L} y_k^{(i)} \log(a_k^{(L)}) + (1 - y_k^{(i)}) \log(1 - a_k^{(L)})\right] \tag{3}$$

Capa de salida:

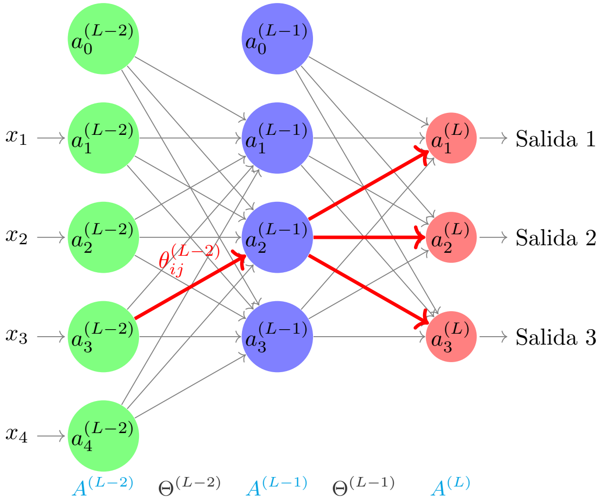
$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{jk}^{L-1}} = -\left[\frac{y_k}{a_k^{(L)}} \frac{\partial}{\partial \theta_{jk}^{(L-1)}} g\left(\overbrace{\sum_{j'=0}^{s_{L-1}} \theta_{j'k} a_{j'}^{(L-1)}}^{z_k}\right) - \left(\frac{1-y_k}{1-a_k^{(L)}}\right) \frac{\partial}{\partial \theta_{jk}^{(L-1)}} g(z_k)\right] \tag{4}$$

De la derivada de la suma sólo queda $a_{j'}$ con $j' = j$.

$$= -\left[\frac{y_k}{a_k^{(L)}} \overbrace{g'(z_k)}^{g'=g(1-g)} - \left(\frac{1-y_k}{1-a_k^{(L)}}\right) g'(z_k)\right] a_j^{(L)} = -\left[\frac{y_k(1-a_k^{(L)}) - a_k^{(L)}(1-y_k)}{a_k^{(L)}(1-a_k^{(L)})}\right] \overbrace{g'(z_k)}^{a_k^{(L)}(1-a_k^{(L)})} a_j^{(L)} \tag{5}$$

$$= -a_j^{(L-1)} \underbrace{(y_k - a_k^{(L)})}_{\delta_k} \tag{6}$$

Red neuronal (entrenamiento penúltima capa)



Entrenamiento 2

$$J(\Theta) = -\left[\sum_{k=1}^{s_L} y_k^{(i)} \log(a_k^{(L)}) + (1 - y_k^{(i)}) \log(1 - a_k^{(L)})\right] \tag{7}$$

Capa de anterior:

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{ij}^{L-2}} = -\sum_{k=1}^{s_L}\left[\frac{y_k}{a_k^{(L)}} \frac{\partial}{\partial \theta_{jk}^{(L-2)}} g\left(\overbrace{\sum_{j'=0}^{s_{L-1}} \theta_{j'k} a_{j'}^{(L-1)}}^{z_k}\right) - \left(\frac{1 - y_k}{1 - a_k^{(L)}}\right) \frac{\partial}{\partial \theta_{jk}^{(L-2)}} g(z_k)\right] \tag{8}$$

$$= -\sum_{k=1}^{s_L} \underbrace{(y_k - a_k^{(L)})}_{\delta_k} \theta_{jk} \frac{\delta}{\delta \theta_{ij}^{(L-2)}} a_j^{(L-1)} \tag{9}$$

$$= -\sum_{k=1}^{s_L} \underbrace{(y_k - a_k^{(L)})}_{\delta_k} \theta_{jk} \frac{\delta}{\delta \theta_{ij}^{(L-2)}} g\left(\overbrace{\sum_{i'=0}^{s_{L-2}} \theta_{i'j}^{(L-2)} a_{i'}^{(L-2)}}^{z_j}\right) \tag{10}$$

Entrenamiento 3

$$= -\underbrace{\sum_{k=1}^{s_L} \delta_k \theta_{jk} g'(z_j)}_{\delta_j} a_i^{(L-2)} \tag{11}$$

Resumiendo:

$$\delta_k^{(L)} = (y_k - a_k^{(L)}) \qquad \frac{\partial J}{\partial \theta_{jk}^{(L-1)}} = -a_j^{(L-1)} \delta_k^{(L)} \tag{12}$$

$$\delta_j^{(L-1)} = \left(\sum_{k=1}^{s_L} \delta_k^{(L)} \theta_{jk} \right) g'(z_j) \qquad \frac{\partial J}{\partial \theta_{ij}^{(L-2)}} = -a_i^{(L-2)} \delta_j^{(L-1)} \tag{13}$$

Vectorización

Consideremos todos los datos involucrados durante el entrenamiento:

- Hay s_L neuronas de salida, para las cuales se calculará el error.
- Se puede calcular el promedio del gradiente para m ejemplares simultáneamente.
- Si escribimos los datos en forma matricial, es posible paralelizar estos cálculos utilizando operaciones de matrices.

$$J(\Theta) = -\frac{1}{m}\left[\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{s_L} y_k^{(i)} \log(h_\Theta(x^{(i)}))_k + (1-y_k^{(i)})\log(1-h_\Theta(x^{(i)}))_k\right] \tag{14}$$

Con:

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_0^{(1)} & \dots & x_n^{(1)} \\ & \ddots & \\ x_0^{(m)} & \dots & x_n^{(m)} \end{bmatrix} \quad \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_0^{(1)} & \dots & y_{s_L}^{(1)} \\ & \ddots & \\ y_0^{(m)} & \dots & y_{s_L}^{(m)} \end{bmatrix} \quad \mathbf{\Theta}^{(l)} = \begin{bmatrix} \theta_{(01)} & \dots & \theta_{(0s_l)} \\ & \ddots & \\ \theta_{(s_{(l-1)}1)} & \dots & \theta_{(s_{(l-1)}s_l)} \end{bmatrix} \tag{15}$$

Vectorización 2

Podemos reescribir:

$$\delta_k^{(L)} = (y_k - a_k^{(L)}) \qquad \Delta^{(L)} = Y - A^{(L)}$$

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{jk}^{(L-1)}} = -\frac{1}{m}\sum_{(i=1)}^{m} a_j^{(L-1)(i)}\delta_k^{(L)(i)} \qquad \nabla^{(L-1)} = -\frac{1}{m}\left(A^{(L-1)}\right)^T \Delta^{(L)}$$

$$\delta_j^{(L-1)} = \left(\sum_{k=1}^{s_L}\delta_k^{(L)}\theta_{jk}\right) g'(z_j) \qquad \Delta^{(L-1)} = \Delta^{(L)}\left(\Theta_{[1:,:]}^{(L-1)}\right)^T \circ g'(Z^{(L-1)})$$

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{ij}^{(L-2)}} = -a_i^{(L-2)}\delta_j^{(L-1)} \qquad \nabla^{(L-2)} = -\frac{1}{m}\left(A^{(L-2)}\right)^T \Delta^{(L-1)}$$

Vectorización 3

Las fórmulas vectorizadas se pueden escribir en forma general con:

Error cometido por la última capa L

$$\Delta^{(L)} = Y - A^{(L)} \tag{16}$$

Error cometido por cualquier capa $l-1$

$$\Delta^{(l-1)} = \Delta^{(l)} \left(\Theta^{(l-1)}_{[1:,:]}\right)^T \circ g'(Z^{(l-1)}) \tag{17}$$

$$g'(Z^{(l-1)}) = A^{(l-1)} \circ (1 - A^{(l-1)}) \tag{18}$$

Componentes del gradiente con respecto a los pesos en Θ^{l-1}

$$\nabla^{(l-1)} = -\frac{1}{m}\left(A^{(l-1)}\right)^T \Delta^{(l)} \tag{19}$$

Algorithm Propagación hacia atrás.

$X \leftarrow$ ejemplares de entrenamiento.
$Y \leftarrow$ respuestas correctas.
$L \leftarrow$ número de capas.
Sean las matrices $\Delta^{(l)}_{s_{l+1} \times s_l} \leftarrow 0$ con $l \in [1, L-1]$.
$A^{(1)} \leftarrow X$
for all $l \in [2, L]$ **do**
    $A^{(l)} \leftarrow \mathrm{sigmoide}(A^{(l-1)}\Theta^{(l-1)})$ (propagación hacia adelante).
for all $l \in [L-1, 1]$ **do**
    Calcular $\Delta^{(l)}$
    Calcular $\nabla^{(l)}$
for all $l \in L-1$ **do**
    $\Theta^{(l)} \leftarrow \Theta^{(l)} - \alpha\nabla^{(l)}$ ▷ Descenso por el gradiente

Referencias I

NG, Andrew (2017). *Machine Learning*. Coursera. URL: https://www.coursera.org/learn/machine-learning.

Russell, Stuart y Peter Norving (2010). *Artificial Intelligence, A Modern Approach*. Ed. por Michael Hirsch. 3a. Pearson Prentice Hall.

Entropía cruzada, Wikipedia, https://es.wikipedia.org/wiki/Entrop%C3%ADa_cruzada

Licencia