Perceptron multicouche

Introduction à l'apprentissage automatique – GIF-4101 / GIF-7005

Professeur : Christian Gagné

Semaine 7

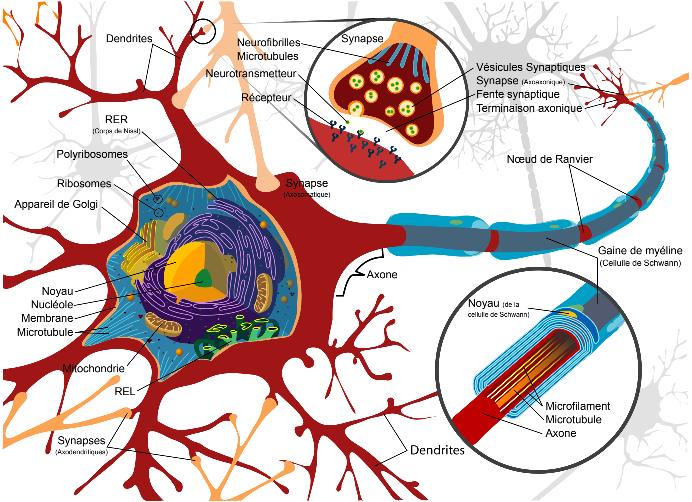
UNIVERSITÉ LAVAL

7.1 Modèle du perceptron multicouche

Intelligence naturelle

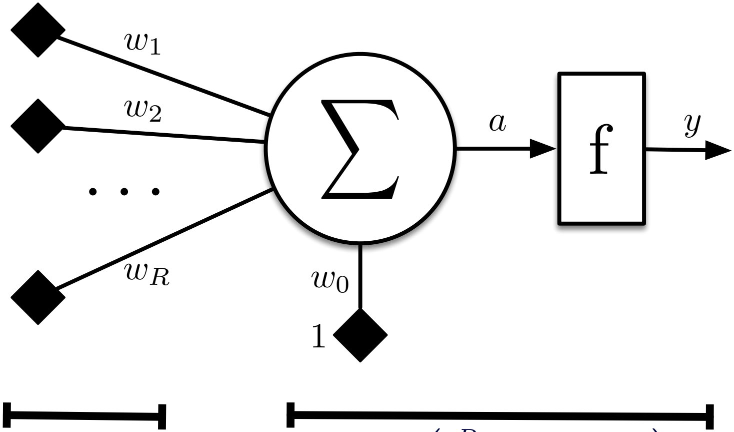
- Cerveau : siège de l'intelligence naturelle
    - Calculs parallèles et distribués
    - Apprentissage et généralisation
    - Adaption et contexte
    - Tolérant aux fautes
    - Faible consommation d'énergie
- Machine computationnelle biologique !

Neurone biologique



Par LadyofHats, domaine public, `https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Complete_neuron_cell_diagram_fr.svg`

Modèle de neurone artificiel



R entrées

$$y = \mathrm{f}\left(\sum_{i=1}^{R} w_i x_i + w_0\right)$$

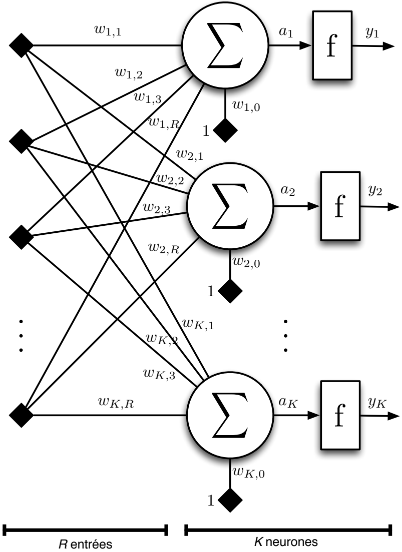
Réseau de neurones

- Chaque neurone est un discriminant linéaire avec une fonction de transfert f

$$y = \mathrm{f}\left(\sum_i w_i x_i + w_0\right) = \mathrm{f}(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + w_0)$$

- Exemples de fonctions de transfert
  - Fonction linéaire : $\mathrm{f}_{lin}(a) = a$
  - Fonction sigmoïde : $\mathrm{f}_{sig}(a) = \frac{1}{1+\exp(-a)}$
  - Fonction seuil : $\mathrm{f}_{seuil}(a) = 1$ si $a \geq 0$ et $\mathrm{f}_{seuil}(a) = 0$ autrement
- Plusieurs neurones connectés ensembles forment un réseau de neurones
  - Réseau à une couche : neurones connectés sur les entrées
  - Réseau à plusieurs couches : certains neurones sont connectés sur les sorties d'autres neurones

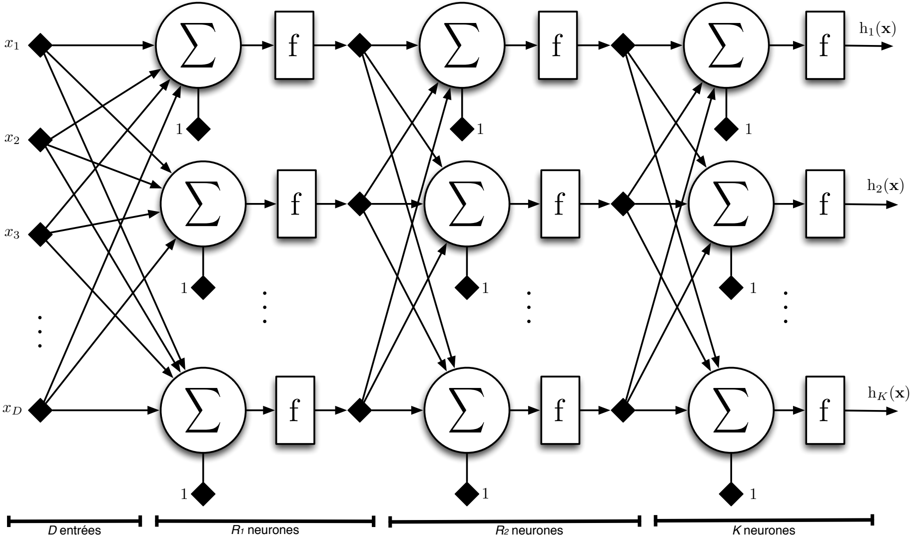
Réseau de neurones (une couche)



Perceptron multicouche

- Réseau à une couche : ensemble de discriminants linéaires
  - Incapable de classer correctement des données non linéairement séparables
- Réseau à plusieurs couches (perceptron multicouche)
  - Discriminants linéaires (neurones) cascadés à la sortie d'autres discriminants linéaires
  - Capable de classer des données non linéairement séparables
  - Ensemble de classifieurs simples
  - Chaque couche fait une projection dans un nouvel espace
- Lors du traitement de données, l'information se propage des entrées vers les sorties

Perceptron multicouche



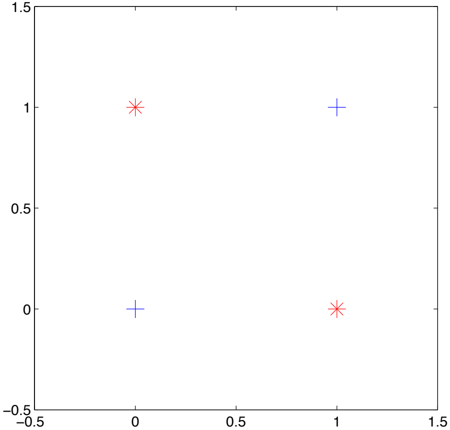
7.2 Topologie et capacité des réseaux

Problème du XOR

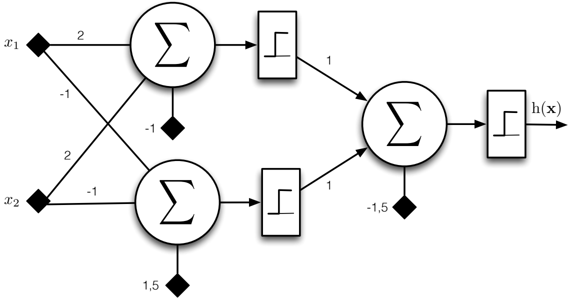
- Problème du XOR

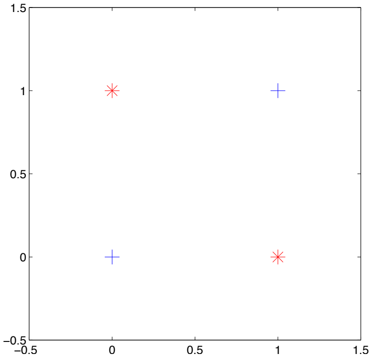
$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1 &= [0\ 0]^\top & r_1 &= 0 \\ \mathbf{x}_2 &= [0\ 1]^\top & r_2 &= 1 \\ \mathbf{x}_3 &= [1\ 0]^\top & r_3 &= 1 \\ \mathbf{x}_4 &= [1\ 1]^\top & r_4 &= 0 \end{aligned}$$

- Exemple de données non linéairement séparables



Réseau pour le problème du XOR

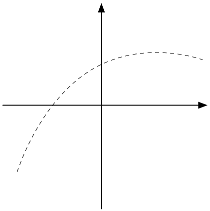




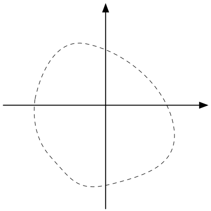
Topologies de réseaux

- Selon la topologie de réseau utilisé, différentes frontières de décisions sont possibles
  - Réseau avec une couche cachée et une couche de sortie : frontières convexes
  - Deux couches cachées ou plus : frontières concaves
    - Le réseau de neurones est alors un approximateur universel
- Nombre de poids (donc de neurones) détermine directement la complexité du classifieur
  - Détermination de la bonne topologie est souvent *ad hoc*, par essais et erreurs

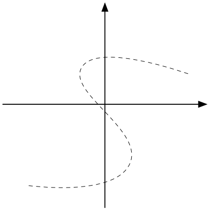
Formes de frontières de décision



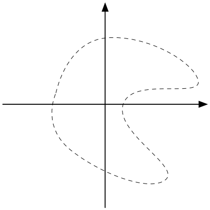
Convexe ouverte



Convexe fermée

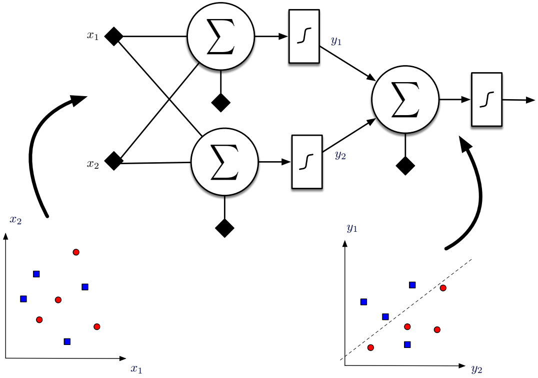


Concave ouverte



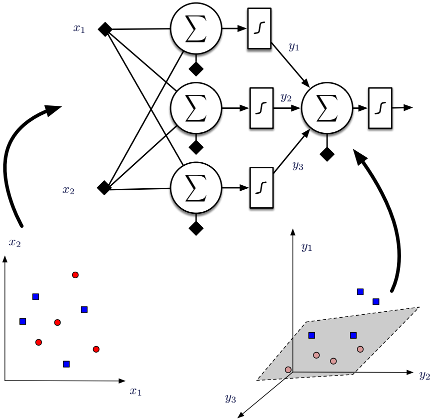
Concave fermée

Nombre de neurones sur la couche cachée (classement)



2 neurones sur la couche cachée : non-optimal

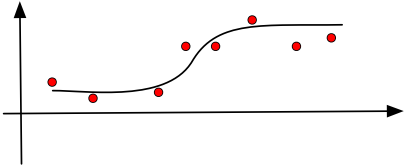
Nombre de neurones sur la couche cachée (classement)



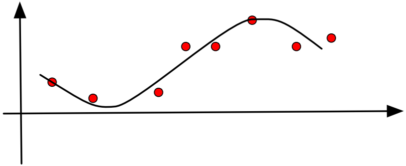
3 neurones sur la couche cachée : aucune erreur

Nombre de neurones sur la couche cachée (régression)

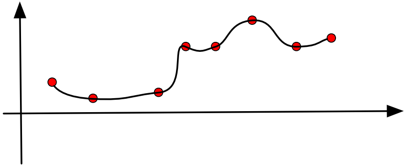
1 neurone



3 neurones



9 neurones

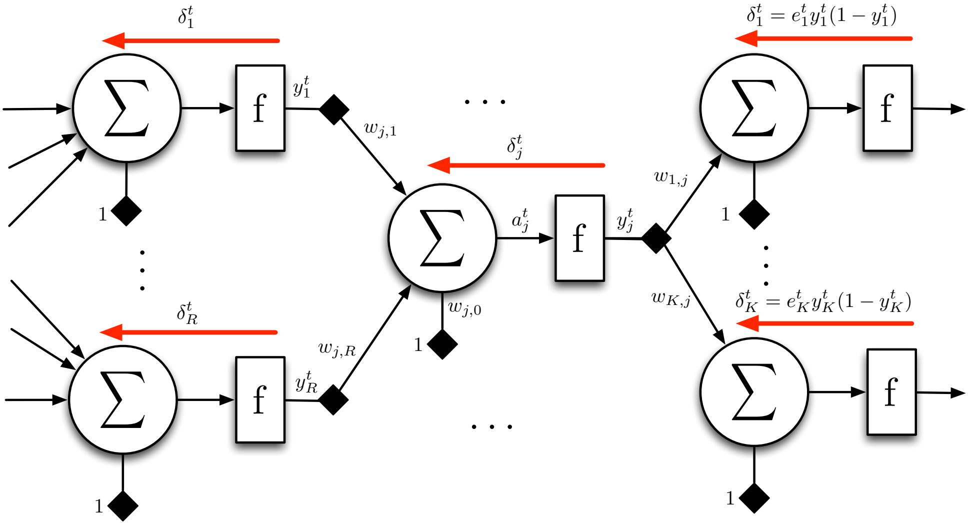


7.3 Rétropropagation des erreurs

Rétropropagation des erreurs

- Apprentissage avec le perceptron multicouche : déterminer les poids $\mathbf{w}, w_0$ de tous les neurones
- Rétropropagation des erreurs
  - Apprentissage par descente du gradient
  - Couche de sortie : correction guidée par l'erreur entre les sorties désirées et obtenues
  - Couches cachées : correction selon les sensibilités (influence du neurone sur l'erreur dans la couche de sortie)

Rétropropagation des erreurs



Valeurs de sortie des neurones

- Valeur y_j^t du neurone j pour la donnée $\mathbf{x}^t$

$$y_j^t = \mathrm{f}(a_j^t) = \mathrm{f}\left(\sum_{i=1}^{R} w_{j,i} y_i^t + w_{j,0}\right)$$

  - f : fonction d'activation du neurone
  - $a_j^t = \sum_{i=1}^{R} w_{j,i} y_i^t + w_{j,0}$: sommation pondérée des entrées du neurone
  - $w_{j,i}$: poids du lien connectant le neurone j au neurone i de la couche précédente
  - $w_{j,0}$: biais du neurone j
  - y_i^t : sortie du neurone i de la couche précédente pour la donnée $\mathbf{x}^t$
  - R : nombre de neurones sur la couche précédente

Erreur de la couche de sortie

- Un ensemble de données $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}^t, \mathbf{r}^t\}_{t=1}^N$, avec $\mathbf{r}^t = [r_1^t \; r_2^t \; \ldots \; r_K^t]^\top$, où $r_j^t = 1$ si $\mathbf{x}^t \in C_j$, autrement $r_j^t = 0$
- Erreur observée pour donnée $\mathbf{x}^t$ sur neurone j de la couche de sortie

$$e_j^t = r_j^t - y_j^t$$

- Erreur quadratique observée pour donnée $\mathbf{x}^t$ sur les K neurones de la couche de sortie (un neurone par classe)

$$E^t = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{K} (e_j^t)^2$$

- Erreur quadratique moyenne observée pour les données du jeu $\mathcal{X}$

$$E = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N} E^t$$

Correction de l'erreur pour la couche de sortie

- Correction des poids par descente du gradient de l'erreur quadratique moyenne

$$\Delta w_{j,i} = -\eta \frac{\partial E}{\partial w_{j,i}} = -\frac{\eta}{N} \sum_{t=1}^{N} \frac{\partial E^t}{\partial w_{j,i}}$$

- L'erreur du neurone j dépend des neurones de la couche précédente
    - Développement en utilisant la règle du chaînage des dérivées ($\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}$)

$$\begin{aligned} \frac{\partial E^t}{\partial w_{j,i}} &= \frac{\partial E^t}{\partial e_j^t} \frac{\partial e_j^t}{\partial y_j^t} \frac{\partial y_j^t}{\partial a_j^t} \frac{\partial a_j^t}{\partial w_{j,i}} \\ \frac{\partial E^t}{\partial w_{j,0}} &= \frac{\partial E^t}{\partial e_j^t} \frac{\partial e_j^t}{\partial y_j^t} \frac{\partial y_j^t}{\partial a_j^t} \frac{\partial a_j^t}{\partial w_{j,0}} \end{aligned}$$

Calcul des dérivées partielles

- Développement avec fonction d'activation sigmoïde ($y_j^t = \frac{1}{1+\exp(-a_j^t)}$)

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial E^t}{\partial e_j^t} &= \frac{\partial}{\partial e_j^t} \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{K} (e_l^t)^2 = e_j^t \\
\frac{\partial e_j^t}{\partial y_j^t} &= \frac{\partial}{\partial y_j^t} r_j^t - y_j^t = -1 \\
\frac{\partial y_j^t}{\partial a_j^t} &= \frac{\partial}{\partial a_j^t} \frac{1}{1+\exp(-a_j^t)} = \frac{exp(-a_j^t)}{[1+exp(-a_j^t)]^2} \\
&= \frac{1}{1+exp(-a_j^t)} \frac{exp(-a_j^t)+1-1}{1+exp(-a_j^t)} = y_j^t(1-y_j^t) \\
\frac{\partial a_j^t}{\partial w_{j,i}} &= \frac{\partial}{\partial w_{j,i}} \sum_{l=1}^{R} w_{j,l} y_l^t + w_{j,0} = y_i^t \\
\frac{\partial a_j^t}{\partial w_{j,0}} &= \frac{\partial}{\partial w_{j,0}} \sum_{l=1}^{R} w_{j,l} y_l^t + w_{j,0} = 1
\end{aligned}
$$

Apprentissage pour la couche de sortie

- Apprentissage des poids de la couche de sortie

$$\begin{aligned}\Delta w_{j,i} &= -\frac{\eta}{N}\sum_{t=1}^{N}\frac{\partial E^t}{\partial w_{j,i}} = -\frac{\eta}{N}\sum_{t=1}^{N}\frac{\partial E^t}{\partial e_j^t}\frac{\partial e_j^t}{\partial y_j^t}\frac{\partial y_j^t}{\partial a_j^t}\frac{\partial a_j^t}{\partial w_{j,i}}\\ &= \frac{\eta}{N}\sum_{t=1}^{N} e_j^t y_j^t (1-y_j^t) y_i^t\end{aligned}$$

- Apprentissage des biais de la couche de sortie

$$\begin{aligned}\Delta w_{j,0} &= -\frac{\eta}{N}\sum_{t=1}^{N}\frac{\partial E^t}{\partial w_{j,0}} = -\frac{\eta}{N}\sum_{t=1}^{N}\frac{\partial E^t}{\partial e_j^t}\frac{\partial e_j^t}{\partial y_j^t}\frac{\partial y_j^t}{\partial a_j^t}\frac{\partial a_j^t}{\partial w_{j,0}}\\ &= \frac{\eta}{N}\sum_{t=1}^{N} e_j^t y_j^t (1-y_j^t)\end{aligned}$$

7.4 Règle du delta

Règle du delta

- Poser un delta δ_j^t, qui corresponds au *gradient local* du neurone j pour la donnée $\mathbf{x}^t$

$$
\begin{aligned}
\delta_j^t &= e_j^t y_j^t (1 - y_j^t) \\
\Delta w_{j,i} &= \frac{\eta}{N} \sum_{t=1}^{N} \delta_j^t y_i^t \\
\Delta w_{j,0} &= \frac{\eta}{N} \sum_{t=1}^{N} \delta_j^t
\end{aligned}
$$

- Formulation utile pour correction de l'erreur sur les couches cachées

Correction de l'erreur pour les couches cachées

- Gradient de l'erreur pour les couches cachées

$$\frac{\partial E^t}{\partial w_{j,i}} = \frac{\partial E^t}{\partial y_j^t}\frac{\partial y_j^t}{\partial a_j^t}\frac{\partial a_j^t}{\partial w_{j,i}}$$

- Seul $\frac{\partial E^t}{\partial y_j^t}$ change, $\frac{\partial y_j^t}{\partial a_j^t}$ et $\frac{\partial a_j^t}{\partial w_{j,i}}$ sont les mêmes que sur la couche de sortie
    - Erreur pour un neurone de la couche cachée dépend de l'erreur des neurones k de la couche suivante (rétropropagation des erreurs)

$$E^t = \frac{1}{2}\sum_k (e_k^t)^2$$

$$\frac{\partial E^t}{\partial y_j^t} = \frac{\partial}{\partial y_j^t}\frac{1}{2}\sum_k (e_k^t)^2 = \sum_k e_k^t \frac{\partial e_k^t}{\partial y_j^t}$$

Correction de l'erreur pour les couches cachées

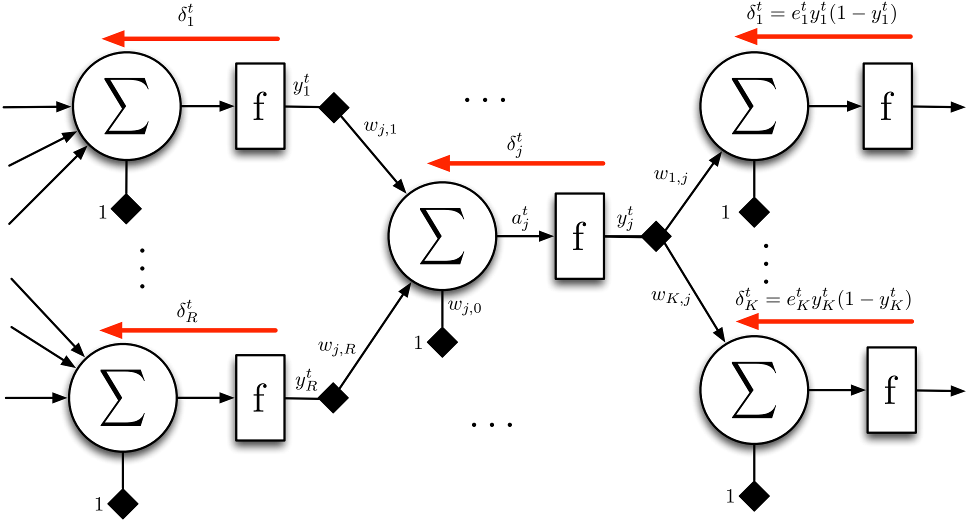
$$
\begin{aligned}
\frac{\partial E^t}{\partial y_j^t} &= \frac{\partial}{\partial y_j^t} \frac{1}{2} \sum_k (e_k^t)^2 = \sum_k e_k^t \frac{\partial e_k^t}{\partial y_j^t} \\
&= \sum_k e_k^t \frac{\partial e_k^t}{\partial a_k^t} \frac{\partial a_k^t}{\partial y_j^t} \\
&= \sum_k e_k^t \frac{\partial (r_k^t - y_k^t)}{\partial a_k^t} \frac{\partial \left(\sum_l w_{k,l} y_l^t + w_{k,0} \right)}{\partial y_j^t} \\
&= \sum_k e_k^t [-y_k^t (1 - y_k^t)] w_{k,j} \\
\delta_k^t &= e_k^t [y_k^t (1 - y_k^t)] \\
\frac{\partial E^t}{\partial y_j^t} &= -\sum_k \delta_k^t w_{k,j}
\end{aligned}
$$

Correction de l'erreur pour les couches cachées

- Correction de l'erreur correspondante

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial E^t}{\partial w_{j,i}} &= \frac{\partial E^t}{\partial y_j^t}\frac{\partial y_j^t}{\partial a_j^t}\frac{\partial a_j^t}{\partial w_{j,i}} \\
&= -\left[\sum_k \delta_k^t w_{k,j}\right] y_j^t(1-y_j^t)y_i^t \\
\delta_j^t &= y_j^t(1-y_j^t)\sum_k \delta_k^t w_{k,j} \\
\Delta w_{j,i} &= -\eta\frac{\partial E}{\partial w_{j,i}} = -\frac{\eta}{N}\sum_{t=1}^{N}\frac{\partial E^t}{\partial w_{j,i}} = \frac{\eta}{N}\sum_{t=1}^{N}\delta_j^t y_i^t \\
\Delta w_{j,0} &= -\eta\frac{\partial E}{\partial w_{j,0}} = -\frac{\eta}{N}\sum_{t=1}^{N}\frac{\partial E^t}{\partial w_{j,0}} = \frac{\eta}{N}\sum_{t=1}^{N}\delta_j^t
\end{aligned}
$$

Rétropropagation des erreurs



7.5 Algorithme de rétropropagation

Apprentissage par lots et en ligne

- Apprentissage par lots
  - Guidé par l'erreur quadratique moyenne ($E = \frac{1}{N}\sum_t E^t$)
  - Correction des poids une fois à chaque époque, en calculant l'erreur pour tout le jeu de données
  - Relative stabilité de l'apprentissage
- Apprentissage en ligne
  - Correction des poids pour chaque présentation de données, donc N corrections de poids par époque
  - Guidé par l'erreur quadratique de chaque donnée (E^t)
  - Requiert la permutation de l'ordre de traitement à chaque époque pour éviter les mauvaises séquences
  - Apprentissage en ligne plus rapide que par lots, mais avec de plus grandes instabilités
- Apprentissage par mini-lots
  - Compromis entre apprentissage en ligne et par lot, en utilisant des mini-lots d'une taille prédéfinie

Saturation des neurones

- Plage opératoire des neurones avec fonction sigmoïde autour de 0
  - Pour valeurs de a faibles $\mathrm{f}_{sig}(a) \rightarrow 0$, et pour valeurs de a élevée, $\mathrm{f}_{sig}(a) \rightarrow 1$

$$\mathrm{f}_{sig}(1) = 0{,}7311, \quad \mathrm{f}_{sig}(5) = 0{,}9933, \quad \mathrm{f}_{sig}(10) \approx 1$$

- Pour valeurs grandes/petites, disons $x < -10$ ou $x > 10$, gradient pratiquement nul
  - Apprentissage extrêmement lent
- Valeurs d'entrées, les $\mathbf{x}^t$, doivent être normalisées au préalable dans $[-1, 1]$
  - Typiquement, normalisation selon valeurs min et max du jeu de données pour chaque dimension
  - Appliquer la même normalisation aux données évaluées (ne pas recalculer la normalisation)

Valeurs désirées en sortie

- En classement, valeurs désirées $r_i^t \in \{0, 1\}$
  - Souffre également du problème de saturation des neurones avec fonction sigmoïde
  - On vise à approximer les r_i^t avec les neurones de la couche de sortie

$$\mathrm{f}_{sig}(a) = 0 \;\Rightarrow\; a \rightarrow -\infty, \quad \mathrm{f}_{sig}(a) = 1 \;\Rightarrow\; a \rightarrow \infty$$

- Solution : transformer les valeurs désirées en valeurs $\tilde{r}_i^t \in \{0{,}05, 0{,}95\}$
  - Si $\mathbf{x}^t \in C_i$ alors $\tilde{r}_i^t = 0{,}95$
  - Autrement $\tilde{r}_i^t = 0{,}05$

Initialisation des poids

- Les poids et biais d'un perceptron multicouche sont initialisés aléatoirement
  - Typiquement, on initialise les poids et biais uniformément dans $[-0{,}5, 0{,}5]$

$$w_{j,i} \sim \mathcal{U}(-0{,}5,\ 0{,}5),\ \forall i,j$$

- Perceptron multicouche est donc un algorithme stochastique
  - D'une exécution à l'autre, on n'obtient pas nécessairement les mêmes résultats

Algorithme de rétropropagation

1. Normaliser données $x_i^t \in [-1{,}1]$ et sorties désirées $\tilde{r}_j^t \in \{0{,}05, 0{,}95\}$
2. Initialiser les poids et biais aléatoirement, $w_{i,j} \in [-0{,}5, 0{,}5]$
3. Tant que le critère d'arrêt n'est pas atteint, répéter :
   3.1 Calculer les sorties observées en propageant les données vers l'avant
   3.2 Calculer les erreurs observées sur la couche de sortie

$$e_j^t = \tilde{r}_j^t - y_j^t, \quad j = 1, \ldots, K, \quad t = 1, \ldots, N$$

   3.3 Ajuster les poids et biais en rétropropageant l'erreur observée

$$\begin{aligned} w_{j,i} &= w_{j,i} + \Delta w_{j,i} = w_{j,i} + \frac{\eta}{N} \sum_t \delta_j^t y_i^t \\ w_{j,0} &= w_{j,0} + \Delta w_{j,0} = w_{j,0} + \frac{\eta}{N} \sum_t \delta_j^t \end{aligned}$$

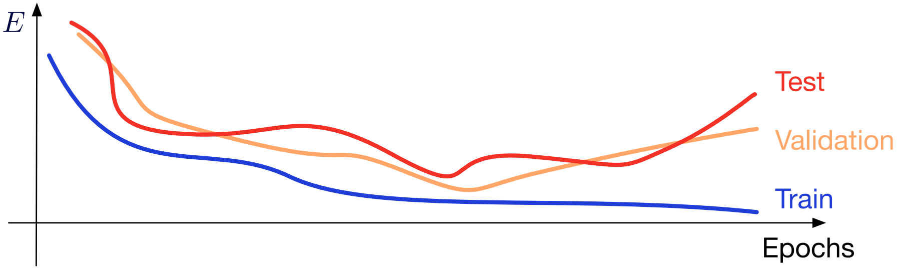
où le gradient local est défini par :

$$\delta_j^t = \begin{cases} e_j^t y_j^t (1 - y_j^t) & \text{si } j \in \text{couche de sortie} \\ y_j^t (1 - y_j^t) \sum_k \delta_k^t w_{k,j} & \text{si } j \in \text{couche cachée} \end{cases}$$

7.6 Techniques et astuces pour l’entraînement

Surapprentissage et critère d'arrêt

- Nombre d'époques : facteur déterminant pour le surapprentissage
- Critère d'arrêt : lorsque l'erreur sur l'ensemble de validation augmente (généralisation)
- Requiert utilisation d'une partie des données de l'ensemble pour la validation



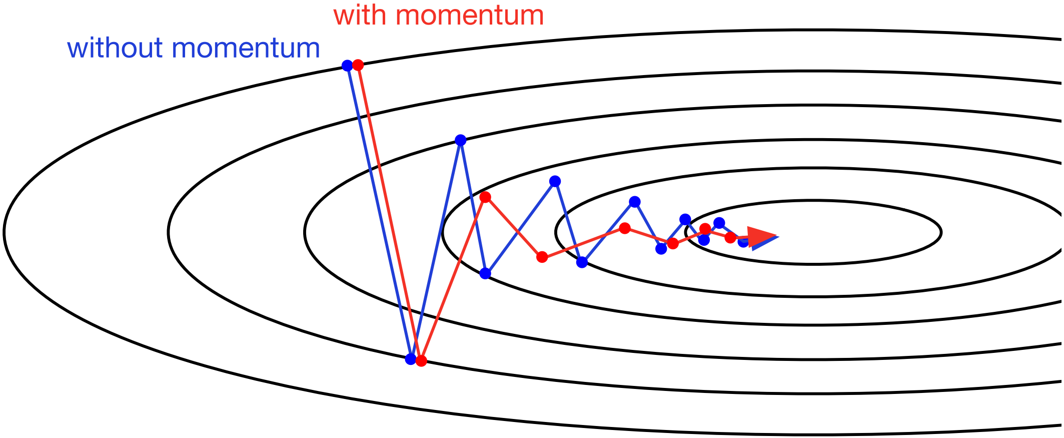
Momentum

- Règle du delta généralisée

$$
\begin{aligned}
w_{j,i}(n) &= w_{j,i}(n-1) + \frac{\eta}{N}\sum_t \delta_j^t y_i^t + \alpha \Delta w_{j,i}(n-1) \\
w_{j,0}(n) &= w_{j,0}(n-1) + \frac{\eta}{N}\sum_t \delta_j^t + \alpha \Delta w_{j,0}(n-1)
\end{aligned}
$$

- Facteur $\Delta w_{j,i}(n-1)$ est la correction effectuée au poids/biais à l'époque précédente
- Paramètre $\alpha \in [0{,}5, 1]$ est nommé *momentum*
- Donne une « inertie » à la descente du gradient, en incluant une correction provenant des itérations précédentes
- Avec momentum, le facteur $\Delta w_{j,i}(n-1)$ dépend lui-même de la correction de l'itération précédente $\Delta w_{j,i}(n-2)$, et ainsi de suite

Momentum



Régression avec perceptron multicouche

- Algorithme de rétropropagation développé ici pour fonction de transfert sigmoïde, pour le classement
  - D'autres fonctions de transfert peuvent être utilisées
    - Fonction linéaire : $f_{lin}(a) = a$
    - Fonction tangente hyperbolique : $f_{tanh}(a) = \tanh(a)$
    - Fonction ReLU (*rectified linear unit*) : $f_{ReLU}(a) = \max(0,a)$
  - En fait, toutes fonctions continues dérivables sur $\mathbb{R}$ peuvent être utilisées
- Perceptron multicouche approprié pour de la régression
  - Topologie conseillée : une couche cachée avec fonction sigmoïde et une couche de sortie avec fonction linéaire
  - Critère de l'erreur quadratique moyenne approprié pour la régression

Méthode du deuxième ordre

- La descente du gradient est une méthode du premier ordre (dérivées premières)
- Possibilité de faire mieux avec des méthodes du deuxième ordre
- Méthode de Newton
  - Basée sur l'expansion de la série de Taylor du deuxième ordre, $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}$ un point dans le voisinage de $\mathbf{x}$

$$F(\mathbf{x}') = F(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) \approx F(\mathbf{x}) + \nabla F(\mathbf{x})^\top \Delta\mathbf{x} + \frac{1}{2}\Delta\mathbf{x}^\top \nabla^2 F(\mathbf{x}) \Delta\mathbf{x} = \hat{F}(\mathbf{x})$$

  - Recherche un plateau dans l'erreur quadratique $\hat{F}(\mathbf{x})$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{F}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} &= \nabla F(\mathbf{x}) + \nabla^2 F(\mathbf{x}) \Delta\mathbf{x} = 0 \\ \Delta\mathbf{x} &= -(\nabla^2 F(\mathbf{x}))^{-1} \nabla F(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

  - Calcul de l'inverse de la matrice Hessienne ($(\nabla^2 F(\mathbf{x}))^{-1}$) coûteux en calculs
  - Méthode du gradient conjugué évite le calcul de l'inverse de la matrice Hessienne

7.7 Perceptron multicouche dans scikit-learn

Scikit-learn

- Perceptron multicouche est disponible dans scikit-learn
  - Scikit-learn utilise certaines avancées des réseaux profonds (mais pas toutes)
  - Pas d'accélération GPU pour les calculs, rigidité des modèles utilisables
- `neural_network.MLPClassifier` : perceptron multicouche pour le classement
  - Minimise entropie croisée pour du classement avec des méthodes basées sur le gradient

$$E_{entr} = -\sum_t r^t \log y^t + (1 - r^t) \log(1 - y^t)$$

- `neural_network.MLPRegressor` : perceptron multicouche pour la régression
  - Minimise l'erreur quadratique avec des méthodes basées sur le gradient

Paramètres de `MLPClassifier` et `MLPRegressor`

- `hidden_layer_sizes` (tuple) : nombre de neurones sur chaque couche cachée (défaut : (100,))
- `activation` (string) : 'identity' (linéaire), 'logistic' (sigmoïde), 'tanh' et 'relu' (défaut : 'relu')
- `solver` (string) : 'lbfgs' (quasi-Newton), 'sgd' (descente du gradient stochastique), 'adam' (sgd avec détermination automatique du taux d'apprentissage) (défaut : 'adam')
- `alpha` (float) : paramètre de la régularisation L_2 des poids (défaut : 0,0001)
- `batch_size` (int) : taille des lots pour chaque mise à jour (défaut : min(200,N))
- `learning_rate_init` (float) : taux d'apprentissage initial (défaut : 0,001)
- `learning_rate` (string) : 'constant', 'invscaling' (learning_rate_init / pow(t, power_t)), 'adaptive' (taux actuel réduit lorsque apprentissage stagne) (défaut : 'constant')
- `max_iter` (int) : nombre maximal d'époques (défaut : 200)
- `tol` (float) : tolérance, arrêt de l'apprentissage si gain $<$ tolérance pour plus de deux époques (défaut : 10^{-4})
- `momentum` (float) : momentum pour la descente du gradient (défaut : 0,9)
- `early_stopping` (bool) : arrêt lorsque erreur sur ensemble de validation ne baisse plus (défaut : False)
- `validation_fraction` (float) : portion des données utilisées pour la validation avec l'*early stopping* (défaut : 0,1)