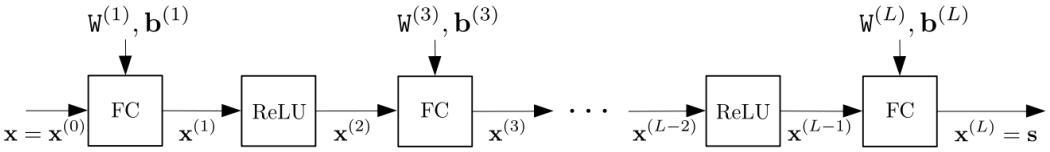
# TD : Implémentation d'un réseau de neurones de type Perceptron multicouche pour un problème de classification

Guillaume Bourmaud

28/01/24

## 1 Introduction

Un réseau de neurones de type Perceptron multicouche (MLP) est composé d'une succession de couches, alternant une transformation affine (FC) et une fonction non-linéaire (historiquement la fonction sigmoïde mais ici nous utiliserons la fonction ReLU : $z = \max(0, x)$). Un tel réseau est illustré graphiquement ci-après :




Remarquons que selon les notations utilisées dans le schéma précédent, le nombre de couches $L$ est nécessairement impair et supérieur ou égal à 3 (car les couches d'entrée et de sortie sont des transformations affines). Ainsi un MLP s'écrit comme une composition de fonctions :

$$\mathbf{s} = \text{MLP}\left(\mathbf{x}; \left\{\mathtt{W}^{(2j-1)}, \mathbf{b}^{(2j-1)}\right\}_{j=1,\dots,\lceil L/2 \rceil}\right) \tag{1}$$

$$= \text{FC}\left(\text{ReLU}\left(...\text{FC}\left(\text{ReLU}\left(\text{FC}\left(\mathbf{x}; \mathtt{W}^{(1)}, \mathbf{b}^{(1)}\right)\right); \mathtt{W}^{(3)}, \mathbf{b}^{(3)}\right)...\right); \mathtt{W}^{(L)}, \mathbf{b}^{(L)}\right). \tag{2}$$

Nous considérons le cas où les vecteurs $(\mathbf{x}^{(1)}, ..., \mathbf{x}^{(L-1)})$ sont tous de taille $H$ et sont des vecteurs ligne, donc de taille $1 \times H$. Le MLP que nous considérons a donc deux hyper-paramètres : $L$ (le nombre de couches) et $H$. Nous nous intéressons ici à un problème de classification à $C$ classes, donc $\mathbf{x}^{(L)} = \mathbf{s}$ est de taille $1 \times C$. L'espace de départ est de dimension $D$ donc $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(0)}$ est de taille $1 \times D$. La fonction de coût utilisée est l'entropie croisée Multinoulli :

$$l(y, \mathbf{s}) = -\ln(\mathbf{p}_y) \tag{3}$$

où $\mathbf{p} = \text{softmax}(\mathbf{s})$ est un vecteur de probabilités (scores positifs qui se somment à 1) de taille $1 \times C$ et $y \in \{0, ..., C-1\}$ est l'étiquette (donc un scalaire $1 \times 1$). Par exemple, si $y = 2$, alors la notation $\mathbf{p}_y$ correspond à récupérer le 3ème élément du vecteur $\mathbf{p}$. Minimiser la fonction de coût revient donc à maximiser le score de probabilité $\mathbf{p}_y$. La fonction softmax est définie de la manière suivante :

$$\mathbf{p}_i = \frac{\exp(\mathbf{s}_i)}{\sum_{j=0}^{C-1} \exp(\mathbf{s}_j)}. \tag{4}$$

Les paramètres du réseau seront optimisés en minimisant la fonction de coût suivante sur la base d'apprentissage $\left\{\mathbf{x}_{[i]}, y_{[i]}\right\}_{i=0...N-1}$ :

$$\arg \min_{\left\{\mathtt{W}^{(2j-1)}, \mathbf{b}^{(2j-1)}\right\}_{j=1,\dots,\lceil L/2 \rceil}} \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} l\left(y_{[i]}, \text{MLP}\left(\mathbf{x}_{[i]}; \left\{\mathtt{W}^{(2j-1)}, \mathbf{b}^{(2j-1)}\right\}_{j=1,\dots,\lceil L/2 \rceil}\right)\right) \tag{5}$$

Nous utiliserons pour cela une méthode de descente de gradient. Comme vu en cours, le gradient, c'est-à-dire la dérivée de la fonction de coût par rapport aux paramètres du réseau, est obtenu en utilisant le théorème de dérivation des fonctions composées.

## 2 Théorème de dérivation d'une fonction composée

Prenons le cas d'une fonction composée de deux fonctions ($f : \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^H$ et $g : \mathbb{R}^H \to \mathbb{R}$) :

$$a = g\left(f\left(\mathbf{x}\right)\right). \tag{6}$$

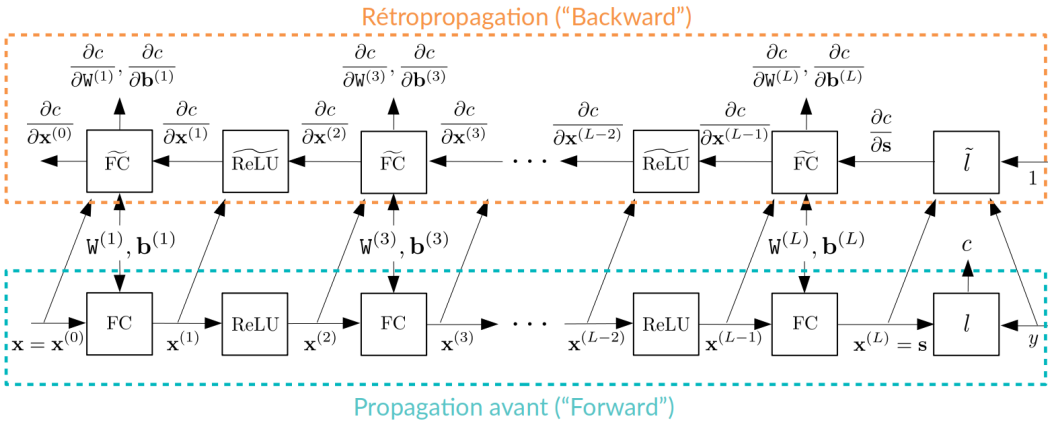
En définissant $\mathbf{z} = f(\mathbf{x})$, le théorème de dérivation d'une fonction composée nous indique que la dérivée de $a \in \mathbb{R}$ par rapport au i-ème élément du vecteur $\mathbf{x}$ s'exprime de la manière suivante :

$$\frac{\partial a}{\partial \mathbf{x}_i} = \sum_{j=0}^{H-1} \frac{\partial a}{\partial \mathbf{z}_j}\Big|_{\mathbf{z}=f(\mathbf{x})} \frac{\partial \mathbf{z}_j}{\partial \mathbf{x}_i}. \tag{7}$$

Ainsi nous pouvons introduire la notation suivante :

$$\frac{\partial a}{\partial \mathbf{x}} = \tilde{f}\left(\frac{\partial a}{\partial \mathbf{z}}\Big|_{\mathbf{z}=f(\mathbf{x})}, \mathbf{x}\right), \tag{8}$$

où $\tilde{f}$ est la fonction qui implémente l'équation (7) (c'est-à-dire qui « rétropropage » $\frac{\partial a}{\partial \mathbf{z}}\Big|_{\mathbf{z}=f(\mathbf{x})}$ pour obtenir $\frac{\partial a}{\partial \mathbf{x}}$), $\frac{\partial a}{\partial \mathbf{x}} = \left[\frac{\partial a}{\partial \mathbf{x}_0}, \frac{\partial a}{\partial \mathbf{x}_1}, ..., \frac{\partial a}{\partial \mathbf{x}_{D-1}}\right]$ et $\frac{\partial a}{\partial \mathbf{z}}\Big|_{\mathbf{z}=f(\mathbf{x})} = \left[\frac{\partial a}{\partial \mathbf{z}_0}, \frac{\partial a}{\partial \mathbf{z}_1}, ..., \frac{\partial a}{\partial \mathbf{z}_{H-1}}\right]$. En appliquant ce théorème à un MLP dans le but de calculer la dérivée de la fonction de coût par rapport aux paramètres du MLP, nous obtenons l'étape de rétropropagation du gradient, sous la forme d'un **graphe de calcul**, illustrée dans la figure ci-après.




**Travail : écrire sur le graphe de calcul ci-dessus la taille de chacune des variables puis calculer le nombre de paramètres du MLP**

Ainsi, pour mettre en œuvre une méthode de descente de gradient dans le but d'optimiser les paramètres d'un MLP, nous aurons uniquement besoin de connaître les expressions des fonctions $\tilde{l}\,(1, \mathbf{s})$, $\widetilde{\mathrm{FC}}\left(\frac{\partial l}{\partial \mathbf{x}^{(i)}}\Big|_{\mathbf{x}^{(i)}=\mathrm{FC}(\mathbf{x}^{(i-1)})}, \mathbf{x}^{(i-1)}, \mathbf{W}^{(i)}, \mathbf{b}^{(i)}\right)$ et $\widetilde{\mathrm{ReLU}}\left(\frac{\partial l}{\partial \mathbf{x}^{(i)}}\Big|_{\mathbf{x}^{(i)}=\mathrm{ReLU}(\mathbf{x}^{(i-1)})}, \mathbf{x}^{(i-1)}\right)$. C'est le travail qui sera réalisé dans la suite de ce TD. Les expressions obtenues seront codées ultérieurement lors d'un TP en Python utilisant la bibliothèque Numpy.

## 3 Obtention des expressions de $\widetilde{\mathrm{FC}}$, $\widetilde{\mathrm{ReLU}}$ et $\tilde{l}$

### 3.1 Dérivée transformation affine : $\widetilde{\mathrm{FC}}$

En utilisant les notations précédemment introduites, une transformation affine s'écrit :

$$\mathbf{z}_l = \sum_{j=0}^{D-1} \mathbf{x}_j \mathbf{W}_{jl} + \mathbf{b}_l \tag{9}$$

où $\underbrace{\mathbf{z}}_{1\times H} = \begin{bmatrix} \mathbf{z}_0 & \mathbf{z}_1 & \dots & \mathbf{z}_{H-1} \end{bmatrix}$, $\underbrace{\mathtt{W}}_{D\times H} = \begin{bmatrix} \mathtt{W}_{00} & \mathtt{W}_{01} & \dots & \mathtt{W}_{0(H-1)} \\ \mathtt{W}_{10} & \mathtt{W}_{11} & \dots & \mathtt{W}_{1(H-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathtt{W}_{(D-1)0} & \mathtt{W}_{(D-1)1} & \dots & \mathtt{W}_{(D-1)(H-1)} \end{bmatrix}$ et $\underbrace{\mathbf{b}}_{1\times H} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_0 \\ \mathbf{b}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{b}_{(H-1)} \end{bmatrix}^\top$.
En utilisant le produit matrice/vecteur, l'équation devient :

$$\mathbf{z} = \mathrm{FC}(\mathbf{x}, \mathtt{W}, \mathbf{b}) = \mathbf{x}\mathtt{W} + \mathbf{b}. \tag{10}$$

La sortie $\mathtt{Z}$ de cette transformation affine est passée dans une fonction $g$ dont la sortie $c$ est scalaire (car en pratique on dérive toujours par rapport à un coût qui par définition est scalaire) :

$$c = g(\mathbf{z}). \tag{11}$$

En supposant le gradient $\underbrace{\partial c/\partial \mathbf{z}}_{1\times H} = \begin{bmatrix} \partial c/\partial \mathbf{z}_0 & \partial c/\partial \mathbf{z}_1 & \dots & \partial c/\partial \mathbf{z}_{H-1} \end{bmatrix}$ **connu**, l'objectif est de calculer la dérivée de $c$ par rapport à $\mathbf{x}$ et aux paramètres $\mathtt{W}$ et $\mathbf{b}$.

**Travail : dessiner le graphe de calcul correspondant aux deux équations précédentes, en faisant apparaître $c$, $g$, $\mathbf{z}$, FC, $\mathbf{x}$, $\mathtt{W}$, $\mathbf{b}$, $\tilde{g}$, $\partial c/\partial \mathbf{z}$, $\widetilde{\mathrm{FC}}$, $\partial c/\partial \mathbf{x}$, $\partial c/\partial \mathtt{W}$ et $\partial c/\partial \mathbf{b}$.**

L'objectif de cette partie est d'obtenir des expressions permettant d'implémenter la fonction $\widetilde{\mathrm{FC}}$. Il faut donc calculer les expressions de $\partial c/\partial \mathbf{x}$, $\partial c/\partial \mathtt{W}$ et $\partial c/\partial \mathbf{b}$ en les simplifiant au maximum pour faire apparaître des opérations permettant une implémentation efficace en Python (par exemple des produits de matrices).

### 3.1.1 Calcul de $\partial c/\partial \mathbf{x}$

Le théorème de dérivation d'une fonction composée nous dit que :

$$\partial c/\partial \mathbf{x}_i = \sum_{l=0}^{H-1} \partial c/\partial \mathbf{z}_l . \partial \mathbf{z}_l/\partial \mathbf{x}_i \tag{12}$$

**Travail : expliciter $\partial \mathbf{z}_l/\partial \mathbf{x}_i$ puis montrer que $\underbrace{\partial c/\partial \mathbf{x}}_{1\times D} = \underbrace{\partial c/\partial \mathbf{z}}_{1\times H} \underbrace{\mathtt{W}^\top}_{H\times D}$**

### 3.1.2 Calcul de $\partial c/\partial \mathtt{W}$

Le théorème de dérivation d'une fonction composée nous dit que :

$$\partial c/\partial \mathtt{W}_{mn} = \sum_{l=0}^{H-1} \partial c/\partial \mathbf{z}_l . \partial \mathbf{z}_l/\partial \mathtt{W}_{mn} \tag{13}$$

**Travail :**
- **expliciter $\partial \mathbf{z}_l/\partial \mathtt{W}_{mn}$**
- **montrer que l'équation (13) se simplifie en $\partial c/\partial \mathtt{W}_{mn} = \partial c/\partial \mathbf{z}_n . \mathbf{x}_m$**
- **en posant $\underbrace{\partial c/\partial \mathtt{W}}_{D\times H} = \begin{bmatrix} \partial c/\partial \mathtt{W}_{00} & \partial c/\partial \mathtt{W}_{01} & \dots & \partial c/\partial \mathtt{W}_{0(H-1)} \\ \partial c/\partial \mathtt{W}_{10} & \partial c/\partial \mathtt{W}_{11} & \dots & \partial c/\partial \mathtt{W}_{1(H-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial c/\partial \mathtt{W}_{(D-1)0} & \partial c/\partial \mathtt{W}_{(D-1)1} & \dots & \partial c/\partial \mathtt{W}_{(D-1)(H-1)} \end{bmatrix}$, montrer que $\underbrace{\partial c/\partial \mathtt{W}}_{D\times H} = \underbrace{\mathbf{x}^\top}_{D\times 1} \underbrace{\partial c/\partial \mathbf{z}}_{1\times H}$**

### 3.1.3 Calcul de $\partial c/\partial \mathbf{b}$

**Travail : montrer que $\underbrace{\partial c/\partial \mathbf{b}}_{1\times H} = \underbrace{\partial c/\partial \mathbf{z}}_{1\times H}$**

### 3.2 Dérivée ReLU : $\widetilde{\text{ReLU}}$

De manière générale, en utilisant les notations précédemment introduites, la fonction ReLU peut s'écrire :

$$\mathbf{z}_l = \max\left(0, \mathbf{x}_l\right) \tag{14}$$

La sortie $\mathtt{Z}$ de cette transformation affine est passée dans une fonction $g$ dont la sortie $c$ est scalaire (car en pratique on dérive toujours par rapport à un coût qui par définition est scalaire) :

$$c = g\left(\mathbf{z}\right) \tag{15}$$

En supposant le gradient $\underbrace{\partial c/\partial \mathbf{z}}_{1\times H} = \begin{bmatrix} \partial c/\partial \mathbf{z}_0 & \partial c/\partial \mathbf{z}_1 & \dots & \partial c/\partial \mathbf{z}_{H-1} \end{bmatrix}$ connu, l'objectif est de calculer la dérivée de $c$ par rapport aux entrées $\mathbf{x}$.

**Travail : dessiner le graphe de calcul correspondant aux deux équations précédentes, en faisant apparaître $c$, $g$, $\mathbf{z}$, ReLU, $\mathbf{x}$ $\tilde{g}$, $\partial c/\partial \mathbf{z}$, $\widetilde{\text{ReLU}}$ et $\partial c/\partial \mathbf{x}$.**

**Travail :**

- **montrer que** $\partial c/\partial \mathbf{x}_k = \begin{cases} \partial c/\partial \mathbf{z}_k & \textbf{si } \mathbf{x}_k > 0 \\ 0 & \textbf{si } \mathbf{x}_k < 0 \end{cases}$
- **la dérivée est-elle définie en 0 ?**

### 3.3 Dérivée de la fonction de coût : $\tilde{l}$

De manière générale, en utilisant les notations précédemment introduites, la fonction de coût $l$ peut s'écrire :

$$c = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} -\ln\left(\frac{\exp\left(\mathbf{s}_y\right)}{\sum_{j=0}^{C-1}\exp\left(\mathbf{s}_j\right)}\right) \tag{16}$$

**Travail : dessiner le graphe de calcul correspondant à l'équation précédente, en faisant apparaître $c$, $l$, $\mathbf{s}$, $\tilde{l}$, $\partial c/\partial \mathbf{s}$ et $y$.**

**Travail :**

- **montrer que** $\partial c/\partial \mathbf{s}_k = \begin{cases} \frac{1}{N}\left(\mathbf{p}_k - 1\right) & \textbf{si } k = y \\ \frac{\mathbf{p}_k}{N} & \textbf{sinon} \end{cases}$
- **interpréter ce résultat (Rappel : l'objectif était d'avoir une fonction de coût dont l'opposé du gradient permettrait d'augmenter le score de l'étiquette vérité terrain et de baisser les autres scores).**

## 4 Parallélisation des calculs

Dans le but de paralléliser les calculs des gradients, **et ainsi d'obtenir une implémentation en Python efficace**, nous considérons le cas où les $N$ vecteurs de taille $D$ $\left\{\mathbf{x}_{[i]}\right\}_{i=0\dots N-1}$ de la base d'apprentissage sont organisés en une matrice (en deep learning, on parle de « tenseur ») :

$$\underbrace{\mathtt{X}}_{N\times D} = \begin{bmatrix} \mathtt{X}_{00} & \mathtt{X}_{01} & \dots & \mathtt{X}_{0(D-1)} \\ \mathtt{X}_{10} & \mathtt{X}_{11} & \dots & \mathtt{X}_{1(D-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathtt{X}_{(N-1)0} & \mathtt{X}_{(N-1)1} & \dots & \mathtt{X}_{(N-1)(D-1)} \end{bmatrix}. \tag{17}$$

Les étiquettes $\left\{y_{[i]}\right\}_{i=0\dots N-1}$ sont organisées sous la forme d'un vecteur :

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_{(N-1)} \end{bmatrix}^\top \tag{18}$$

Ainsi le MLP s'appliquera directement sur ce tenseur $\mathtt{X}$ et produira un tenseur de scores $\mathtt{S}$ :

$$\mathtt{S} = \text{MLP}\left(\mathtt{X}; \boldsymbol{\theta}\right) = \text{FC}\left(\text{ReLU}\left(...\text{FC}\left(\text{ReLU}\left(\text{FC}\left(\mathtt{X}; \mathtt{W}^{(1)}, \mathbf{b}^{(1)}\right)\right); \mathtt{W}^{(3)}, \mathbf{b}^{(3)}\right)...\right); \mathtt{W}^{(L)}, \mathbf{b}^{(L)}\right) \tag{19}$$

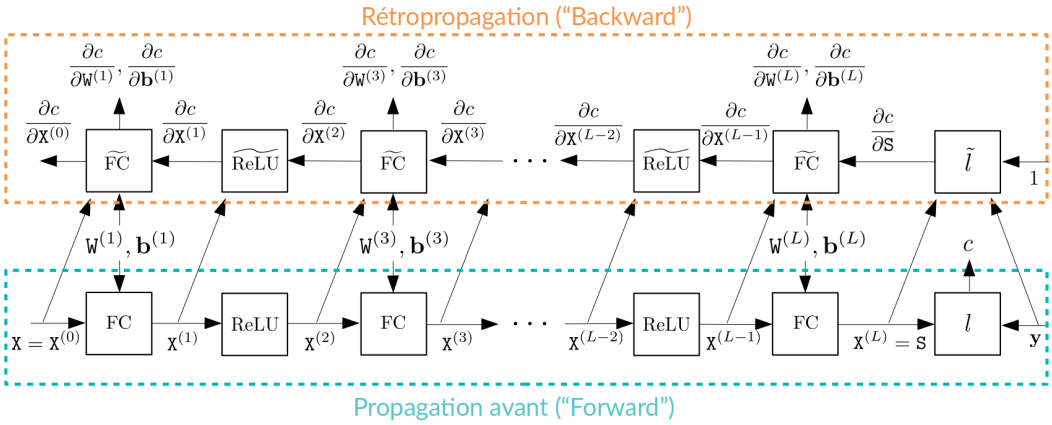
où

$$\underbrace{\mathtt{S}}_{N\times C} = \begin{bmatrix} \mathtt{S}_{00} & \mathtt{S}_{01} & \cdots & \mathtt{S}_{0(C-1)} \\ \mathtt{S}_{10} & \mathtt{S}_{11} & \cdots & \mathtt{S}_{1(C-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathtt{S}_{(N-1)0} & \mathtt{S}_{(N-1)1} & \cdots & \mathtt{S}_{(N-1)(C-1)} \end{bmatrix}. \tag{20}$$

Après softmax, les vecteurs de probabilité peuvent également être rangés dans une matrice :

$$\underbrace{\mathtt{P}}_{N\times C} = \begin{bmatrix} \mathtt{P}_{00} & \mathtt{P}_{01} & \cdots & \mathtt{P}_{0(C-1)} \\ \mathtt{P}_{10} & \mathtt{P}_{11} & \cdots & \mathtt{P}_{1(C-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathtt{P}_{(N-1)0} & \mathtt{P}_{(N-1)1} & \cdots & \mathtt{P}_{(N-1)(C-1)} \end{bmatrix}. \tag{21}$$

Par définition, les matrices $(\mathtt{X}^{(1)}, ..., \mathtt{X}^{(L-1)})$ sont donc de taille $N \times H$.




**Travail : écrire sur le graphe de calcul ci-dessus la taille de chacune des variables**

Les expressions précédemment obtenues qui s'appliquent à un seul vecteur $\mathbf{x}$ se généralisent trivialement au cas d'un tenseur $\mathtt{X}$. Ainsi la transformation affine se réécrit

$$\mathtt{Z} = \text{FC}\left(\mathtt{X}, \mathtt{W}, \mathbf{b}\right) = \mathtt{X}\mathtt{W} + \mathtt{1}_N \mathbf{b}, \tag{22}$$

où $\underbrace{\mathtt{1}_N}_{N\times 1} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$, et les 3 rétropropagations de $\widetilde{\text{FC}}$ se réécrivent :

$$\underbrace{\partial c/\partial \mathtt{X}}_{N\times D} = \underbrace{\partial c/\partial \mathtt{Z}}_{N\times H} \underbrace{\mathtt{W}^\top}_{H\times D}, \tag{23}$$

qui pourra être codée en Python par un simple appel à une fonction réalisant un produit matriciel (@ en Numpy),

$$\underbrace{\partial c/\partial \mathtt{W}}_{D\times H} = \underbrace{\mathtt{X}^\top}_{D\times N} \underbrace{\partial c/\partial \mathtt{Z}}_{N\times H}, \tag{24}$$

qui pourra être codée en Python par un simple appel à une fonction réalisant un produit matriciel (@ en Numpy), et

$$\underbrace{\partial c/\partial \mathbf{b}}_{1\times H} = \underbrace{\mathtt{1}_N^\top}_{1\times N} \underbrace{\partial c/\partial \mathtt{Z}}_{N\times H}, \tag{25}$$

qui pourra être codée en Python par un simple appel à une fonction sommant les lignes de $\partial c/\partial \mathtt{Z}$ (.sum() en Numpy).

**Les différentes expressions obtenues au cours de ce TD seront utilisées au prochain TP pour implémenter un MLP en Python (à l'aide de la bibliothèque Numpy) .**