Introducción a los modelos computacionales Práctica 1. Implementación del perceptrón multicapa

<u>Pedro Antonio Gutiérrez</u> pagutierrez@uco.es

Asignatura "Introducción a los modelos computacionales"

4º Curso Grado en Ingeniería Informática
Especialidad Computación
Escuela Politécnica Superior
(Universidad de Córdoba)

25 de septiembre de 2017





Contenidos

2 Notación y arquitectura

Pseudocódigo





Objetivos de la práctica

- Familiarizar al alumno con los modelos computacionales de redes neuronales, en concreto, con el perceptrón multicapa.
- Implementar el algoritmo de retropropagación básico para el perceptrón multicapa.
- Comprobar el efecto de distintos parámetros:
 - Arquitectura de la red.
 - Factor de momento.
 - Uso de parada rápida mediante conjunto de validación
 - etc.





- Notación:
 - Patrones de entrenamiento:
 - Vector de entradas: $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k)$.
 - Vector de salidas deseadas: $\mathbf{d} = (d_1, \dots, d_J)$.
 - Arquitectura de la red: $\{n_0 : n_1 : \ldots : n_H\}$
 - n_h es el número de neuronas de la capa h.
 - $n_0 = k$, $n_H = J$.
 - H-1 capas ocultas.
 - Pesos de la red. Para cada capa h, sin contar la capa de entrada:
 - Matriz con un vector de pesos de entrada por cada neurona: $\mathbf{W}^h = (\mathbf{w}_1^h, \dots, \mathbf{w}_n^h)$.
 - Vector de pesos de la neurona j de la capa h (incluye sesgo): $\mathbf{w}_{i}^{h} = (w_{i0}^{h}, w_{i1}^{h}, \dots, w_{in_{i+1}}^{h}, \dots)$.
 - Salida de la red: $\mathbf{o} = (o_1, \dots, o_J)$.





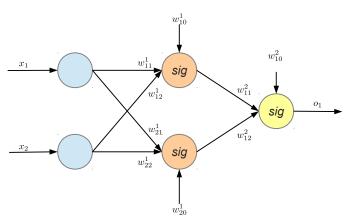
- Vamos a considerar problemas de predicción (regresión) con una o más variables a predecir.
- Vamos a considerar que todas las neuronas, salvo las de la capa de entrada, serán de tipo sigmoide.

$$out_{j}^{h} = \frac{1}{1 + \exp(-w_{j0}^{h} - \sum_{i=1}^{n_{h-1}} w_{ji}^{h} out_{i}^{h-1})}$$





• Vamos a calcular las derivadas para un ejemplo simple y luego veremos como se calculan de forma general.







Fase 1: Propagación hacia delante.

- Llamamos out_j^h a la salida de la neurona j en la capa h.
- Dados dos valores x₁ y x₂ de entrada, calcular la salida de cada neurona.
 - Primera capa:

$$out_1^0 = x_1; out_2^0 = x_2$$

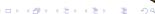
Segunda capa:

$$\begin{aligned} & out_{1}^{1} = \sigma(w_{10}^{1} + w_{11}^{1} out_{1}^{0} + w_{12}^{1} out_{2}^{0}) = \sigma(w_{10}^{1} + w_{11}^{1} x_{1} + w_{12}^{1} x_{2}); \\ & out_{2}^{1} = \sigma(w_{20}^{1} + w_{21}^{1} out_{2}^{0} + w_{11}^{1} out_{2}^{0}) = \sigma(w_{20}^{1} + w_{21}^{1} x_{1} + w_{22}^{1} x_{2}); \end{aligned}$$

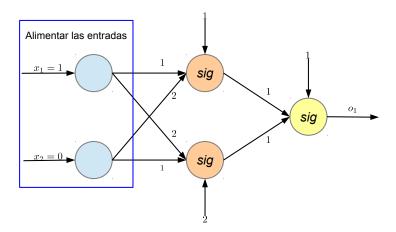
• Tercera capa:

$$out_1^2 = o_1 = \sigma(w_{10}^2 + w_{11}^2 out_1^1 + w_{12}^2 out_2^1)$$





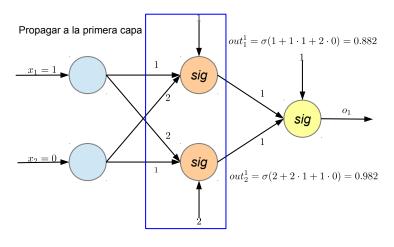
Fase 1: Propagación hacia delante.







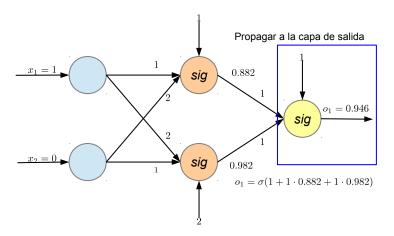
Fase 1: Propagación hacia delante.







Fase 1: Propagación hacia delante.







Fase 2: Cálculo del error y de las derivadas.

Obtenemos el valor de error cometido por la red:

$$E=(d_1-o_1)^2$$

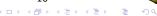
Ahora derivamos ese error respecto a cada uno de los pesos:

$$\nabla E = \left\{ \frac{\partial E}{\partial w_{10}^1}, \frac{\partial E}{\partial w_{11}^1}, \frac{\partial E}{\partial w_{12}^1}, \frac{\partial E}{\partial w_{20}^1}, \frac{\partial E}{\partial w_{21}^1}, \frac{\partial E}{\partial w_{22}^1}, \frac{\partial E}{\partial w_{10}^2}, \frac{\partial E}{\partial w_{11}^2}, \frac{\partial E}{\partial w_{12}^2} \right\}$$

• De la expresión $(d_1 - o_1)^2$, los pesos solo influyen en o_1 (o_1 es una función de cada uno de los pesos). En estos casos, la regla de la cadena nos permite realizar estas derivadas de forma recursiva (lo siguiente se cumple para todos los pesos):

$$\frac{\partial E}{\partial w_{10}^2} = \frac{\partial E}{\partial o_1} \frac{\partial o_1}{\partial w_{10}^2} = -2(d_1 - o_1) \frac{\partial o_1}{\partial w_{10}^2}$$





 Llamamos net^h_j a la suma ponderada de las entradas de la neurona j en la capa h, es decir, a la salida antes de aplicar la función de activación sigmoide:

$$\mathit{out}_j^h = \sigma(\mathit{net}_j^h)$$





Recordamos:

$$o_1 = \sigma(net_1^2)$$

$$\sigma(x)' = \sigma(x)(1 - \sigma(x))$$

Continuamos derivando con respecto a o₁:

$$\begin{split} \frac{\partial E}{\partial w_{10}^2} &= -2(d_1 - o_1) \frac{\partial o_1}{\partial w_{10}^2} = -2(d_1 - o_1) \cdot o_1(1 - o_1) \frac{\partial net_1^2}{\partial w_{10}^2} \\ \frac{\partial E}{\partial w_{11}^2} &= -2(d_1 - o_1) \frac{\partial o_1}{\partial w_{11}^2} = -2(d_1 - o_1) \cdot o_1(1 - o_1) \frac{\partial net_1^2}{\partial w_{11}^2} \\ \frac{\partial E}{\partial w_{12}^2} &= -2(d_1 - o_1) \frac{\partial o_1}{\partial w_{12}^2} = -2(d_1 - o_1) \cdot o_1(1 - o_1) \frac{\partial net_1^2}{\partial w_{12}^2} \end{split}$$





• Y ahora ya podemos escribir las derivadas completas para los pesos de la capa de salida (w_{1i}^2) :

$$\begin{array}{ll} {\it net}_1^2 = & w_{10}^2 + w_{11}^2 out_1^1 + w_{12}^2 out_2^1 \\ \frac{\partial E}{\partial w_{10}^2} = & -2(d_1 - o_1)o_1(1 - o_1)\frac{\partial {\it net}_1^2}{\partial w_{10}^2} = \\ & = & -2(d_1 - o_1)o_1(1 - o_1)1 \\ \frac{\partial E}{\partial w_{11}^2} = & -2(d_1 - o_1)o_1(1 - o_1)\frac{\partial {\it net}_1^2}{\partial w_{11}^2} = \\ & = & -2(d_1 - o_1)o_1(1 - o_1)out_1^1 \\ \frac{\partial E}{\partial w_{12}^2} = & -2(d_1 - o_1)o_1(1 - o_1)\frac{\partial {\it net}_1^2}{\partial w_{12}^2} = \\ & = & -2(d_1 - o_1)o_1(1 - o_1)out_2^1 \end{array}$$





- Pasamos a analizar las derivadas de los pesos de la capa oculta $(w_{1i}^1 \ y \ w_{2i}^1)$:
 - Los pesos w_{1i}^1 influyen en out_1^1 .
 - Los pesos w_{2i}^1 influyen en out_2^1 .
- Por tanto, su derivada será similar a las otras derivadas, pero cuando lleguemos a $\frac{\partial net_1^2}{\partial w_{ii}^1}$ tendremos que continuar derivando.
- Para el peso w_{10}^1 (sesgo de la primera neurona en la primera capa):

$$\begin{array}{ll} \textit{net}_{1}^{2} = & \textit{w}_{10}^{2} + \textit{w}_{11}^{2} \textit{out}_{1}^{1} + \textit{w}_{12}^{2} \textit{out}_{2}^{1} \\ \frac{\partial \textit{E}}{\partial \textit{w}_{10}^{1}} = & -2(\textit{d}_{1} - \textit{o}_{1}) \textit{o}_{1} (1 - \textit{o}_{1}) \frac{\partial \textit{net}_{1}^{2}}{\partial \textit{w}_{10}^{2}} = \\ = & -2(\textit{d}_{1} - \textit{o}_{1}) \textit{o}_{1} (1 - \textit{o}_{1}) \textit{w}_{11}^{2} \frac{\partial \textit{out}_{1}^{1}}{\partial \textit{w}_{10}^{2}} \end{array}$$





Recordamos:

$$out_1^1 = \sigma(net_1^1)$$
 $net_1^1 = w_{10}^1 + w_{11}^1 x_1 + w_{12}^1 x_2$
 $\sigma(x)' = \sigma(x)(1 - \sigma(x))$

Continuamos derivando con respecto a out₁¹:

$$\begin{split} \frac{\partial E}{\partial w_{10}^1} &= -2(d_1 - o_1)o_1(1 - o_1)w_{11}^2 \frac{\partial out_1^1}{\partial w_{10}^2} = \\ &= -2(d_1 - o_1)o_1(1 - o_1)w_{11}^2 out_1^1(1 - out_1^1) \frac{\partial net_1^1}{\partial w_{10}^1} = \\ &= -2(d_1 - o_1)o_1(1 - o_1)w_{11}^2 out_1^1(1 - out_1^1)1 \end{split}$$





Repetimos este proceso para todos los pesos de capa oculta:

$$\frac{\partial E}{\partial w_{10}^{1}} = -2(d_{1} - o_{1})o_{1}(1 - o_{1})w_{11}^{2}out_{1}^{1}(1 - out_{1}^{1})1$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_{11}^{1}} = -2(d_{1} - o_{1})o_{1}(1 - o_{1})w_{11}^{2}out_{1}^{1}(1 - out_{1}^{1})x_{1}$$

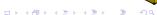
$$\frac{\partial E}{\partial w_{12}^{1}} = -2(d_{1} - o_{1})o_{1}(1 - o_{1})w_{11}^{2}out_{1}^{1}(1 - out_{1}^{1})x_{2}$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_{20}^{1}} = -2(d_{1} - o_{1})o_{1}(1 - o_{1})w_{12}^{2}out_{2}^{1}(1 - out_{2}^{1})1$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_{21}^{1}} = -2(d_{1} - o_{1})o_{1}(1 - o_{1})w_{12}^{2}out_{2}^{1}(1 - out_{2}^{1})x_{1}$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_{22}^{1}} = -2(d_{1} - o_{1})o_{1}(1 - o_{1})w_{12}^{2}out_{2}^{1}(1 - out_{2}^{1})x_{2}$$





- Recapitulando:
 - Capa de salida:

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ji}^2} = \begin{cases} -2(d_1 - o_1)o_1(1 - o_1)1, & \text{si } i = 0, \\ -2(d_1 - o_1)o_1(1 - o_1)out_i^1, & \text{si } i \neq 0. \end{cases}$$

Capa oculta:

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ji}^{1}} = \begin{cases} -2(d_{1} - o_{1})o_{1}(1 - o_{1})w_{1j}^{2}out_{j}^{1}(1 - out_{j}^{1})1, & \text{si } i = 0, \\ -2(d_{1} - o_{1})o_{1}(1 - o_{1})w_{1j}^{2}out_{j}^{1}(1 - out_{j}^{1})x_{i}, & \text{si } i \neq 0. \end{cases}$$





- Ojo, hay partes comunes:
 - Capa de salida:

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ji}^2} = \begin{cases} -2(d_1 - o_1)o_1(1 - o_1)1, & \text{si } i = 0, \\ -2(d_1 - o_1)o_1(1 - o_1)out_i^1, & \text{si } i \neq 0. \end{cases}$$

Capa oculta:

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ji}^{1}} = \begin{cases} -2(d_{1} - o_{1})o_{1}(1 - o_{1})w_{1j}^{2}out_{j}^{1}(1 - out_{j}^{1})1, & \text{si } i = 0, \\ -2(d_{1} - o_{1})o_{1}(1 - o_{1})w_{1j}^{2}out_{j}^{1}(1 - out_{j}^{1})x_{i}, & \text{si } i \neq 0. \end{cases}$$





- Muchas partes son comunes, el cálculo de derivadas se puede realizar de manera recursiva.
- Llamamos δ_j^h a la derivada de la neurona j de la capa oculta h con respecto al error ("cuánta culpa tiene sobre el error esa neurona").

$$\delta_1^2 = -2(d_1 - o_1)o_1(1 - o_1)$$

$$\delta_1^1 = w_{11}^2 \delta_1^2 out_1^1 (1 - out_1^1)$$

$$\delta_2^1 = w_{12}^2 \delta_1^2 out_2^1 (1 - out_2^1)$$

 A efectos de la actualización de pesos, la constante (2) puede obviarse.





- Redefinimos las derivadas en función de estos valores δ_i^h :
 - Capa de salida:

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ji}^2} = \begin{cases} \delta_j^2 1, & \text{si } i = 0, \\ \delta_j^2 \text{out}_i^1, & \text{si } i \neq 0. \end{cases}$$

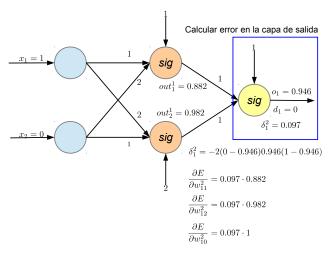
• Capa oculta:

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ji}^{1}} = \begin{cases} \delta_{j}^{1}1, & \text{si } i = 0, \\ \delta_{j}^{1}x_{i}, & \text{si } i \neq 0. \end{cases}$$



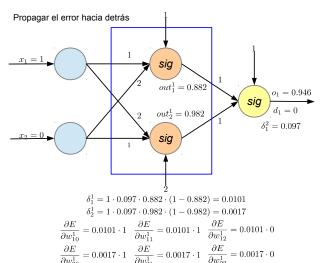


Fase 2: Propagación hacia detrás.





Fase 2: Propagación hacia detrás.

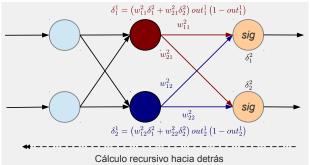




Fase 2: Propagación hacia detrás.

Si hay varias neuronas en la siguiente capa, cada δ_j^h recibe su valor a partir de las neuronas con las que esté conectado:

$$\delta_j^h \leftarrow \left(\sum_{i=1}^{n_{h+1}} w_{ij}^{h+1} \delta_i^{h+1}\right) \cdot out_j^h \cdot (1 - out_j^h)$$





Fase 3: Actualización de pesos.

- Una vez hemos obtenido el vector gradiente, debemos actualizar los pesos.
- Se utiliza el propio valor de la derivada (sobre todo por su signo), multiplicado por una constante eta (η) que controla que los pasos que se van dando no sean muy pequeños o muy grandes (tasa de aprendizaje).
- Fórmula general:

$$w_{ji}^{h} = w_{ji}^{h} - \eta \Delta w_{ji}^{h}$$

$$\Delta w_{ji}^{h} = \frac{\partial E}{\partial w_{ji}^{h}} = \begin{cases} \delta_{j}^{h} \cdot 1, & \text{si } i = 0\\ \delta_{j}^{h} \cdot out_{i}^{h-1}, & \text{si } i \neq 0 \end{cases}$$





Fase 3: Actualización de pesos.

- Ajustar el valor de η es difícil:
 - Si es demasiado grande, podemos provocar oscilaciones.
 - Si es demasiado pequeño, necesitaremos muchas iteraciones.
- Utilizaremos el concepto de momento, para mejorar la convergencia:
 - Los cambios anteriores deberían influir en la dirección de movimiento actual:

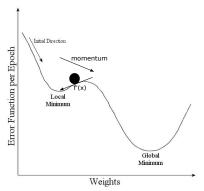
$$w_{ii}^h = w_{ii}^h - \eta \Delta w_{ii}^h - \mu \left(\eta \Delta w_{ii}^h (t-1) \right)$$

- Así, los pesos que empiezan a moverse en una determinada dirección, tienden a moverse en ese dirección.
- La constante mu (μ) controla el efecto del momento.





- La idea es que en un ejemplo como el siguiente, el momento haga que se pueda escapar del óptimo local.
- Pese a que la derivada te diga que vayas a la izquierda, la "inercia" puede llevarte a seguir para la derecha:







- Hasta ahora, hemos visto como ajustar los pesos según el error cometido en un solo patrón.
- Existen diferentes formas de adaptar la red de acuerdo con la forma en que se use la información de entrenamiento (patrones).
 - Aprendizaje Off-line (batch):
 - Cada vez que actualizamos los parámetros, consideramos todos los patrones de entrenamiento.
 - Usualmente llamado época (epoch).
 - Costoso si hay muchos datos
 - Aprendizaje On-line:
 - Por cada patrón de entrenamiento, realizamos una actualización de pesos.
 - Problema de "olvido" de patrones "viejos".
 - Métodos intermedios ⇒ adaptación cada p patrones (mini batches).





Algoritmo de retropropagación on-line

Inicio

- $w_{ii}^h \leftarrow U[-1,1]$ // Aleatorios entre -1 y+1
- Repetir
 - Para cada patrón con entradas x, y salidas d
 - **1** $\Delta w_{ii}^h \leftarrow 0$ // Se aplicarán cambios por cada patrón
 - 2 out $i \leftarrow x_i // A limentar entradas$
 - propagarEntradas() // Propagar las entradas (⇒⇒)
 - retropropagarError() // Retropropagar el error (⇐⇐)
 - acumularCambio() // Calcular ajuste de pesos
 - a justarPesos() // Aplicar el ajuste calculado

Fin Para

Hasta (CondicionParada)

3 Devolver matrices de pesos.



Algoritmo de retropropagación off-line

Inicio

- $w_{ii}^h \leftarrow U[-1,1]$ // Aleatorios entre -1 y+1
- Repetir
 - **1** $\Delta w_{ii}^h \leftarrow 0$ // Se aplicarán cambios al final
 - Para cada patrón con entradas x, y salidas d
 - **1** $out_i^0 \leftarrow x_i$ // Alimentar entradas
 - ② propagarEntradas() // Propagar las entradas (⇒⇒)

 - acumularCambio() // Acumular ajuste de pesos

Fin Para

ajustarPesos() // Aplicar el ajuste calculado

Hasta (CondicionParada)

Devolver matrices de pesos.



Pseudocódigo del algoritmo a implementar en la práctica:

Algoritmo de retropropagación on-line

Inicio

•
$$w_{ii}^h \leftarrow U[-1,1]$$
 // Aleatorios entre -1 $y+1$

- Repetir
 - Para cada patrón con entradas x, y salidas d
 - **1** $\Delta w_{ii}^h \leftarrow 0$ // Se aplicarán cambios por cada patrón
 - **2** $out_i^0 \leftarrow x_i$ // Alimentar entradas
 - propagarEntradas() // Propagar las entradas (⇒⇒)
 - TetropropagarError() // Retropropagar el error (⇐⇐)
 - acumularCambio() // Calcular ajuste de pesos
 - ajustarPesos() // Aplicar el ajuste calculado

Fin Para

Hasta (CondicionParada)

Oevolver matrices de pesos.



Pseudocódigo de la versión off-line (no se pide):

Algoritmo de retropropagación off-line

Inicio

- $w_{ii}^h \leftarrow U[-1,1]$ // Aleatorios entre -1 y+1
- Repetir
 - $\Delta w_{ii}^h \leftarrow 0$ // Se aplicarán cambios al final
 - Para cada patrón con entradas x, y salidas d
 - **1** $out_i^0 \leftarrow x_j$ // Alimentar entradas
 - propagarEntradas() // Propagar las entradas (⇒⇒)
 - retropropagarError() // Retropropagar el error (⇐⇐)
 - acumularCambio() // Acumular ajuste de pesos

Fin Para

ajustarPesos() // Aplicar el ajuste calculado

Hasta (CondicionParada)

Oevolver matrices de pesos.



propagarEntradas()

Inicio

- **1** Para h de 1 a H // Para cada capa ($\Rightarrow \Rightarrow$)
 - Para j de 1 a n_h // Para cada neurona de la capa h

1
$$net_i^h \leftarrow w_{i0}^h + \sum_{i=1}^{n_{h-1}} w_{ii}^h out_i^{h-1}$$

$$out_i^h \leftarrow \sigma\left(net_i^h\right)$$

Fin Para

Fin Para





retropropagarError()

Inicio

- Para j de 1 a n_H // Para cada neurona de salida
 - $\delta_j^H \leftarrow -(d_j out_j^H) \cdot out_j^H \cdot (1 out_j^H)$ // Hemos obviado la constante (2), ya que el resultado será el mismo

Fin Para

- 2 Para h de H-1 a 1 // Para cada capa ($\Leftarrow \Leftarrow$)
 - **1** Para j de 1 a n_h // Para cada neurona de la capa h
 - $\delta_j^h \leftarrow \left(\sum_{i=1}^{n_{h+1}} w_{ij}^{h+1} \delta_i^{h+1}\right) \cdot out_j^h \cdot \left(1 out_j^h\right) // \textit{Pasa por todas las neuronas de la capa } h + 1 \textit{ conectadas con } j$

Fin Para

Fin Para





acumularCambio()

Inicio

- **1** Para h de 1 a H // Para cada capa ($\Rightarrow \Rightarrow$)
 - **1** Para j de 1 a n_h // Para cada neurona de la capa h
 - Para i de 1 a n_{h-1} // Para cada neurona de la capa h-1 $\Delta w_{ji}^h \leftarrow \Delta w_{ji}^h + \delta_j^h \cdot out_i^{h-1}$ Fin Para

Fin Para

Fin Para





ajustarPesos()

Inicio

- **1** Para h de 1 a H // Para cada capa ($\Rightarrow \Rightarrow$)
 - **1** Para i de 1 a n_h // Para cada neurona de la capa h
 - **9** Para i de 1 a n_{h-1} // Para cada neurona de la capa h-1 $w_{ji}^h \leftarrow w_{ji}^h \eta \Delta w_{ji}^h \mu \left(\eta \Delta w_{ji}^h (t-1) \right)$ Fin Para

Fin Para

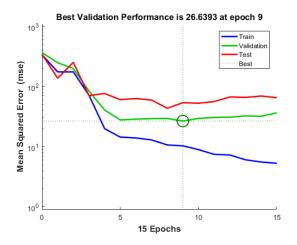
Fin Para





Condición de parada

Early stopping: mecanismo para detectar cuando se sobre-entrena.







Condición de parada

Early stopping: mecanismo para detectar cuando se sobre-entrena.

- Dividimos los datos en tres partes: entrenamiento (p.ej. 60 %), validación (p.ej. 20 %) y test (p.ej. 20 %).
- Ajustamos los pesos con el conjunto de entrenamiento.
- 3 Evaluamos la red en el conjunto de validación.
- Si el error de validación baja en un valor mayor que t (tolerancia), volvemos al paso 2. En caso contrario, paramos el entrenamiento.
- 5 Evaluar el modelo final sobre el conjunto de test.





Condición de parada

- Versión estándar, el algoritmo para si:
 - El error de entrenamiento no baja más de 0,00001 o sube, durante 50 iteraciones (bucle externo).
- Versión con validación, el algoritmo para si:
 - El error de entrenamiento no baja más de 0,00001 o sube, durante 50 iteraciones (bucle externo).
 - El error de validación no baja más de 0,00001 o sube, durante 50 iteraciones (bucle externo).





Decremento de tasa de aprendizaje por capas

- Es interesante incorporar una tasa de aprendizaje distinta para cada capa.
- Por ser más sensibles, la tasa de aprendizaje puede ser más pequeña conforme la capa es más cercana a la capa de entrada.
- Se puede hacer con la siguiente ecuación:

$$\eta_i = F^{-(H-i)}\eta, i \in \{1, \dots, H\}$$

siendo F un factor de decremento establecido por el usuario y η la tasa de aprendizaje original.





Decremento de tasa de aprendizaje por capas

• Para H = 2 y F = 2:

$$\eta_1 = 2^{-(2-1)}\eta = 2^{(-1)}\eta = \frac{\eta}{2}$$

$$\eta_2 = 2^{-(2-2)}\eta = 2^{(0)}\eta = \eta$$

• Para H = 3 y F = 2:

$$\eta_1 = 2^{-(3-1)}\eta = 2^{(-2)}\eta = \frac{\eta}{4}$$

$$\eta_2 = 2^{-(3-2)}\eta = 2^{(-1)}\eta = \frac{\eta}{2}$$

$$\eta_3 = 2^{-(3-3)}\eta = 2^{(0)}\eta = \eta$$





Introducción a los modelos computacionales Práctica 1. Implementación del perceptrón multicapa

<u>Pedro Antonio Gutiérrez</u> pagutierrez@uco.es

Asignatura "Introducción a los modelos computacionales"

4º Curso Grado en Ingeniería Informática
Especialidad Computación
Escuela Politécnica Superior
(Universidad de Córdoba)

25 de septiembre de 2017



