Multi Layer Perceptron MLP

Junior R. Ribeiro jrodrib@usp.br

24 de setembro de 2020

Conteúdo

1	Multicamadas	1
	1.1 Esboço do fluxo	2
2	Gradiente	3
	2.1 Direção de descida	5
3	Função de ativação	6
4	Modo cíclico	6
5	Modo batch	7
R	eferências	7

1 Multicamadas

Considere as camadas $\ell=0,...,L$ em que os neurônios de uma camada somente se comunicam com os neurônios em camadas vizinhas. Quando isso acontece, dizemos que o MLP é sem atalhos.

Considere os padrões de entrada $\bar{x}(n) \in \mathbb{R}^{m_0-1}$ para cada n=0,...,N-1 (um total de N padrões de entrada), com suas respectivas saídas desejadas $d(n) \in \Omega^{m_L}$ em que $\Omega = [0,1]$ ou $\Omega = [-1,1]$, dependendo do problema. As camadas $\ell = 0$ e $\ell = L$ são as camadas de entrada e saída da rede, e todas as camadas $0 < \ell < L$ são camadas ocultas.

As dimensões das variáveis usadas para cômputo do fluxo da rede são $m_0, m_1, ..., m_L$. Por causa dos *biases* as variáveis do fluxo principal entre os neurônios (exceto os *biases*) têm dimensões $m_0 - 1, m_1 - 1, ..., m_{L-1} - 1, m_L$, pois na camada de saída não há *bias* (note a dimensão de d(n))

As variáveis que efetuam o fluxo da rede são y^{ℓ} para cada camada $\ell = 0, ..., L$ (os superíndices indicam a camada em questão). Essas variáveis representam o valor de saída de cada nó.

1.1 Esboço do fluxo

Todos os índices neste texto foram pensados como iniciando em zero. Destacamos em roxo as principais partes para implementação.

$$y^{0}(n) = \begin{bmatrix} 1 \\ \bar{x}_{0}(n) \\ \vdots \\ \bar{x}_{m_{0}-2}(n) \end{bmatrix} =: \begin{bmatrix} 1 \\ v_{0}^{0}(n) \\ \vdots \\ v_{m_{0}-2}^{0}(n) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m_{0}}$$

e para as diversas camadas $\ell = 0, ..., L - 1$, temos

$$w^{\ell} = \begin{bmatrix} b_0^{\ell} & W_{0,0}^{\ell} & \dots & W_{0,m_{\ell}-2}^{\ell} \\ \vdots & & & \\ b_{m_{\ell+1}-2}^{\ell} & W_{m_{\ell+1}-2,0}^{\ell} & \dots & W_{m_{\ell+1}-2,m_{\ell}-2}^{\ell} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(m_{\ell+1}-1)\times m_{\ell}};$$

$$v^{\ell+1}(n) = \begin{bmatrix} v_0^{\ell+1}(n) \\ \vdots \\ v_{m_{\ell+1}-2}^{\ell+1}(n) \end{bmatrix} = w^{\ell} y^{\ell}(n) = \begin{bmatrix} b_0^{\ell} & W_{0,0}^{\ell} & \dots & W_{0,m_{\ell}-2}^{\ell} \\ \vdots & & & \\ b_{m_{\ell+1}-2}^{\ell} & W_{m_{\ell+1}-2,0}^{\ell} & \dots & W_{m_{\ell+1}-2,m_{\ell}-2}^{\ell} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ v_0^{\ell}(n) \\ \vdots \\ v_{m_{\ell}-2}^{\ell}(n) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(m_{\ell+1}-1)},$$

$$y^{\ell}(n) = \begin{bmatrix} 1 \\ \text{logistic}(v_0^{\ell}(n)) \\ \vdots \\ \text{logistic}(v_{m_{\ell}-2}^{\ell}(n)) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m_{\ell+1}};$$

e por fim (não tem bias na camada de saída)

$$y^{L}(n) = \begin{bmatrix} \varphi(v_0^{L}(n)) \\ \vdots \\ \varphi(v_{m_{L}-1}^{L}(n)) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m_{L}}$$

Para cada problema (classificação, regressão), usamos uma função $\varphi(\cdot)$ diferenciada. As variáveis $w^{\ell} = [b^{\ell} \ W^{\ell}]$ são os pesos da rede entre as camadas $\ell = 0, ..., L - 1$.

Temos o erro

$$e_k(n) = d_k(n) - y_k^L(n), \qquad k = 0, ..., m_L - 1.$$

ou vetorialmente,

$$e(n) = d(n) - y(n) \in \mathbb{R}^{m_L}$$

e o erro quadrático acumulado

$$E(n) = 0.5 \sum_{k=0}^{m_L - 1} e_k^2(n).$$

ou vetorialmente

$$E(n) = 0.5e(n)^T e(n) \in \mathbb{R}$$

2 Gradiente

Considere os nós i na camada L-2, j na camada L-1 e k na camada L. Vamos derivar o erro quadrático acumulado em relação aos pesos ajustáveis w^{L-1} . Como a dependência entre essa svariáveis não é direta, aplicamos a regra da cadeia.

A Figura 2 ilustra em laranjado w_{kj}^{L-1} para k=0 e j=2. Note que o erro E depende de w_{02}^{L-1} apenas através de uma única parcela que consta no nó k=0.

Esquema:

camada
$$\rightarrow \begin{pmatrix} L-1 & L-1 & L & L & d_k \downarrow \\ y_j & \xrightarrow{w_{kj}} & v_k & \xrightarrow{\varphi} & y_k & \xrightarrow{-1} & e_k \end{pmatrix}$$

Conforme visto no esquema acima, fazemos

$$\frac{\partial E(n)}{\partial w_{kj}^{L-1}} = \frac{\partial E(n)}{\partial e_k(n)} \frac{\partial e_k(n)}{\partial y_k^L(n)} \frac{\partial y_k^L(n)}{\partial v_k^L(n)} \frac{\partial v_k^L(n)}{\partial w_{kj}^{L-1}} = e_k(n) \cdot (-1) \cdot \varphi'(v_k^L(n)) \cdot y_j^{L-1}(n)$$

Vamos definir o produto "ponto-a-ponto" entre matrizes de mesma dimensão, como sendo

$$[A \bullet B]_{ii} = A_{ii}B_{ii}$$
.

Defina

$$\delta_k^{L-1}(n) = -\frac{\partial E(n)}{\partial v_k^L(n)} = e_k(n)\varphi'(v_k^L(n)), \quad k = 0, ..., m_L - 1,$$
(1)

ou vetorialmente

• quando $\varphi(z) = \operatorname{logistic}(z)$,

$$\delta^{L-1}(n) = e(n) \bullet \operatorname{logistic}(v^{L}(n)) \bullet (1 - \operatorname{logistic}(v^{L}(n)));$$

• quando $\varphi(z) = z$,

$$\delta^{L-1}(n) = e(n);$$

• quando $\varphi(z) = \tanh(z)$,

$$\delta^{L-1}(n) = e(n) \bullet \left(\mathbf{1} - \tanh(v^L(n)) \bullet \tanh(v^L(n)) \right).$$

Com essa definição, podemos escrever

$$\frac{\partial E(n)}{\partial w_{kj}^{L-1}} = -\delta_k^{L-1}(n)y_j^{L-1}(n), \quad k = 0, ..., m_L - 1.$$
 (2)

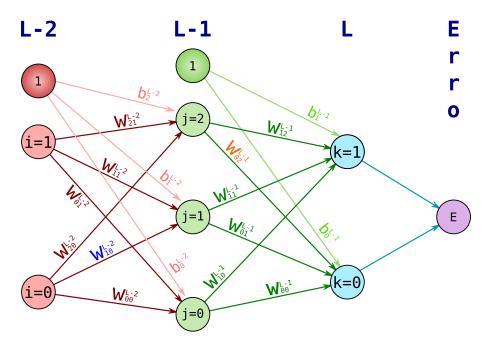


Figura 1: Camadas $\ell = L - 2, L - 1, L$ e o erro E(n). Os pesos w_{10}^{L-2} e w_{02}^{L-1} foram destacados.

Para calcular a taxa de variação de E(n) em relação a w_{ji}^{L-2} , precisamos seguir o fluxo na rede no sentido "do final para o começo" ou *backward*. Portanto, note que precisamos fazer um somatório, pois as parcelas de todos os nós k são alteradas quando alteramos w_{ji}^{L-2} , o que não acontecia na situação anterior.

$$\begin{split} \frac{\partial E(n)}{\partial w_{ji}^{L-2}} &= \sum_{k=0}^{m_L-1} \frac{\partial E(n)}{\partial e_k(n)} \frac{\partial e_k(n)}{\partial y_k^L(n)} \frac{\partial y_k^L(n)}{\partial v_k^L(n)} \frac{\partial v_k^L(n)}{\partial y_j^{L-1}(n)} \frac{\partial y_j^{L-1}(n)}{\partial v_j^{L-1}(n)} \frac{\partial v_j^{L-1}(n)}{\partial w_{ji}^{L-2}} \\ &= \sum_{k=0}^{m_L-1} e_k(n) \cdot (-1) \cdot \varphi'(v_k^L(n)) \cdot w_{kj}^{L-1} \cdot \text{logistic}'(v_j^{L-1}(n)) \cdot y_i^{L-2}(n) \\ &= -\text{logistic}'(v_j^{L-1}(n)) \cdot y_i^{L-2}(n) \sum_{k=0}^{m_L-1} \underbrace{e_k(n) \cdot \varphi'(v_k^L(n))}_{\delta_k^{L-1}(n)} \cdot w_{kj}^{L-1} \\ &= -\text{logistic}'(v_j^{L-1}(n)) y_i^{L-2}(n) \sum_{k=0}^{m_L-1} \delta_k^{L-1}(n) w_{kj}^{L-1}. \end{split}$$

Defina

$$\delta_j^{L-2}(n) = -\frac{\partial E(n)}{\partial v_j^{L-1}(n)} = \text{logistic'}(v_j^{L-1}(n)) \sum_{k=0}^{m_L-1} \delta_k^{L-1}(n) w_{kj}^{L-1}, \quad j = 0, ..., m_{L-1} - 1,$$
 (3)

ou vetorialmente, para a camada $\ell = 0, ..., L - 2$,

$$\delta^{\ell}(n) = \left[\operatorname{logistic}(v^{\ell+1}(n)) \bullet \left(\mathbf{1} - \operatorname{logistic}(v^{\ell+1}(n)) \right) \right] \bullet \left[(w^{\ell+1})^T \delta^{\ell+1}(n) \right].$$

Com essa definição, escrevemos

$$\frac{\partial E(n)}{\partial w_{ji}^{L-2}} = -\delta_j^{L-2}(n)y_i^{L-2}(n), \quad j = 0, ..., m_{L-1} - 1.$$
(4)

O gradiente do erro em relação aos pesos, ou seja, a derivada de primeira ordem da função erro E(n) em relação a cada w_{rs}^{ℓ} de cada camada $\ell = 0, ..., L-1$ é a coleção de matrizes w^{ℓ} . Perceba que não é um vetor, nem uma matriz, mas uma coleção de matrizes.

2.1 Direção de descida

Em um método de minimização de primeira ordem, a ideia principal é caminhar na direção oposta à do gradiente. Portanto, o incremento $\Delta w_{\rho}(n)$ da iteração/ciclo ρ que atualiza cada um dos pesos w, na forma $w_{\rho+1}^{\ell} \leftarrow w_{\rho}^{\ell} + \Delta w_{\rho}^{\ell}(n)$, com tamanho de passo $0 < \eta \le 1$ é dado por

$$\Delta w_{sr}^{\ell}(n) = \eta \delta_{s}^{\ell}(n) y_{r}^{\ell}(n), \quad r = 0, ..., m_{\ell} - 1 \quad s = 0, ..., m_{\ell+1} - 1, \quad \ell = 0, ..., L - 1,$$
 (5)

ou vetorialmente, para $\ell = 0, ..., L - 1$

$$\Delta w_{\rho}^{\ell}(n) = \eta \delta^{\ell}(n) (y^{\ell}(n))^{T}.$$

Se quisermos adicionar Momentum, precisamos armazenar $\Delta w^{\ell}_{\rho-1}(n)$ da iteração $\rho-1$ e dar uma constante $0<\alpha<1$ com

$$\Delta w_\rho^\ell(n) = \eta \delta^\ell(n) (y^\ell(n))^T + \alpha \Delta w_{\rho-1}^\ell(n).$$

O termo Momentum nada mais é do que o gradiente da iteração anterior. Para inicializar o termo Momentum, comece-o em zero.

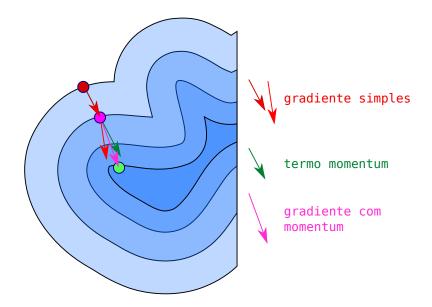


Figura 2: Ilustração do termo Momentum afetando a direção de descida.

3 Função de ativação

Em problemas de regressão segundo [1], usamos uma função linear, $\varphi(z) = z$ e portanto a derivada é a função constante $\varphi'(z) = 1$, vide equação (1).

Em problemas de classificação, usamos $\varphi(z) = \text{logistic}(z)$, uma função com imagem (0, 1):

$$logistic(z) = \frac{1}{1 + exp(-z)}$$

logistic'(z) = logistic(z)(1 - logistic(z)), vide equações (1) e (3).

Uma alternativa à função logística é usar $\varphi(z) = \tanh(z)$, uma função com imagem (-1, 1):

$$tanh(z) = \frac{\exp(2z) - 1}{\exp(2z) + 1}$$

 $tanh'(z) = 1 - tanh^2(z)$, vide equações (1) e (3).

4 Modo cíclico

Agora que já sabemos como calcular o erro E e as taxas de variação de E em função de W em todas as camadas, podemos aplicar qualquer método de minimização de primeira ordem. Na seção "Direção de descida" é dado um método com tamanho de passo fixo η , mas podemos fazer inúmeras variações de algoritmo de forma a torná-lo adaptativo, ou mesmo estocástico. Escrevendo o problema de otimização, temos

$$\min \min_{W} \max E(W, n),$$

$$W = \{w_{i,j}^{\ell} \quad i = 0, ..., m_{\ell+1} - 1, \quad j = 0, ..., m_{\ell} - 1, \quad \ell = 0, ..., L - 1\}$$

W é a coleção de todos os parâmetros ajustáveis da rede, ou seja, os pesos. O erro E(W, n) depende dos pesos da W rede e do padrão n apresentado.

5 Modo batch

Defina o erro quadrático total

$$\mathbf{E} = \sum_{n=0}^{N-1} E(n).$$

Assim, o gradiente total é

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial w_{sr}^{\ell}} = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial E(n)}{\partial w_{sr}^{\ell}}.$$

A direção de descida global é então a soma das direções de descida para cada padrão. Com isso, podemos aplicar a otimização nessa direção.

O problema de otimização agora é

$$\min_{W} \operatorname{\mathbf{E}}(W),$$

$$W = \{ w_{i,j}^{\ell} \quad i = 0, ..., m_{\ell+1} - 1, \quad j = 0, ..., m_{\ell} - 1, \quad \ell = 0, ..., L - 1 \}.$$

Perceba que a função $\mathbf{E}(W)$ depende apenas dos pesos W da rede e não depende do padrão n, pois já leva em consideração todos os padrões (ou parte deles).

Referências

- [1] Riedmiller, Martin. Machine learning: multi layer perceptrons. Disponível aqui.
- [2] Haykin, Simon. *Neural networks: a comprehensive fondation*. 2a.ed. Singapore: Prentice Hall, 1999. Disponível aqui.
- [3] Haykin, Simon. *Neural networks and learning machines*. 3a.ed. New Jersey: Prentice Hall, 2008. Disponível aqui.