**Παύλος Σπανουδάκης (sdi1800184)**
**Εργασία 2 στο μάθημα Τεχνητή Νοημοσύνη ΙΙ**

## Πρόβλημα 1

Να υπολογιστεί η κλίση της συνάρτησης Cross Entropy, ως προς τις εισόδους της συνάρτησης κανονικοποίησης SoftMax.

## Λύση

Θα χρησιμοποιήσουμε τους εξής όρους, με βάση και την ορολογία από τις σημειώσεις του Stanford:

- $C$: ο αριθμός των κλάσεων που έχουμε.
- $\boldsymbol{y}$: Ο πίνακας που περιέχει τα πραγματικά labels για κάθε δείγμα. Για το δείγμα $i$, έχουμε ένα vector $y_i$, $C$ στοιχείων, ένα για κάθε κλάση, όπου για την σωστή κλάση η τιμή είναι 1, και για τις υπόλοιπες 0.
- $\boldsymbol{\theta}$: Ο πίνακας που δίνεται σαν είσοδος στην SoftMax.
- $\hat{\boldsymbol{y}}$: Ο πίνακας που παράγει η SoftMax($\boldsymbol{\theta}$).
- $J = CE(\boldsymbol{y}, \hat{\boldsymbol{y}}) = -\sum_{i=1}^{C} y_i \log \hat{y}_i$, η συνάρτηση Cross Entropy.

Θέλουμε να βρούμε τον πίνακα $\dfrac{\partial J}{\partial \boldsymbol{\theta}}$ όπου κάθε στοιχείο του είναι το $\dfrac{\partial J}{\partial \theta_j}$:

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_j} = \frac{\partial(-\sum_{k=1}^{C} y_k \log \hat{y}_k)}{\partial \theta_j} = -\sum_{k=1}^{C} y_k \frac{\partial \log \hat{y}_k}{\partial \theta_j} = -\sum_{k=1}^{C} \frac{y_k}{\hat{y}_k} \frac{\partial \hat{y}_k}{\partial \theta_j} \tag{1}$$

Χρειαζόμαστε το $\dfrac{\partial \hat{y}_k}{\partial \theta_j}$, οπου $\hat{y}_k = SoftMax(\theta_k)$

$$\frac{\partial \hat{y}_k}{\partial \theta_j} = \frac{\partial}{\partial \theta_j}\left(\frac{e^{\theta_k}}{\sum_{i=1}^{C} e^{\theta_i}}\right) = \frac{\left(\frac{\partial e^{\theta_k}}{\partial \theta_j} \sum_{i=1}^{C} e^{\theta_i}\right) - \left(\frac{\partial \sum_{i=1}^{C} e^{\theta_i}}{\partial \theta_j} e^{\theta_k}\right)}{(\sum_{i=1}^{C} e^{\theta_i})^2}$$

Αν $k = j$

$$\frac{(e^{\theta_j}\sum_{i=1}^{C} e^{\theta_i}) - (e^{\theta_j} e^{\theta_j})}{(\sum_{i=1}^{C} e^{\theta_i})^2} = \frac{e^{\theta_j}}{\sum_{i=1}^{C} e^{\theta_i}} \frac{\sum_{i=1}^{C}(e^{\theta_i}) - e^{\theta_j}}{\sum_{i=1}^{C} e^{\theta_i}} = \frac{e^{\theta_j}}{\sum_{i=1}^{C} e^{\theta_i}}(1 - \frac{e^{\theta_j}}{\sum_{i=1}^{C} e^{\theta_i}})$$
$$= \hat{y}_j(1 - \hat{y}_j) \tag{2}$$

Αν $k \neq j$, το $\dfrac{\partial e^{\theta_k}}{\partial \theta_j}$ μηδενίζεται, συνεπώς:

$$\frac{0 - (\dfrac{\partial \sum_{i=1}^{C} e^{\theta_i}}{\partial \theta_j} e^{\theta_k})}{(\sum_{i=1}^{C} e^{\theta_i})^2} = \frac{-e^{\theta_j} e^{\theta_k}}{(\sum_{i=1}^{C} e^{\theta_i})^2}$$
$$= -\hat{y}_k \hat{y}_j \tag{3}$$

Από (2), (3) έχουμε:

$$\frac{\partial \hat{y}_k}{\partial \theta_j} = \hat{y}_k(\delta_{kj} - \hat{y}_j) \tag{4}$$

Όπου

$$\delta_{kj} = \begin{cases} 0, & k \neq j \\ 1, & k = j \end{cases} \quad \text{το Δέλτα του Kronecker.}$$

Από (1), (4) έχουμε:

$$-\sum_{k=1}^{C} \frac{y_k}{\hat{y}_k} \hat{y}_k(\delta_{kj} - \hat{y}_j) = -\sum_{k=1}^{C} y_k(\delta_{kj} - \hat{y}_j) = \sum_{k=1}^{C} y_k(\hat{y}_j - \delta_{kj})$$
$$= \sum_{k=1}^{C} y_k\hat{y}_j - y_k\delta_{kj} = \sum_{k=1}^{C}(y_k\hat{y}_j) - y_j$$

$\sum_{k=1}^{C} y_k = 1$, συνεπώς:

$$\hat{y}_j \sum_{k=1}^{C}(y_k) - y_j = \hat{y}_j - y_j$$

Τελικά, $\dfrac{\partial J}{\partial \theta_j} = \hat{y}_j - y_j$, συνεπώς

$$\frac{\partial J}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{y}$$

## Πρόβλημα 2

Η συνάρτηση εξόδου του δικτύου είναι:

$$MSE(y, y^*) = (y - y^*)^2, \text{ όπου } y = ReLU(xm + b)$$

Θέλουμε να βρούμε τη μερική παράγωγο για κάθε input μεταβλητή $(x, m, b, y^*)$:

## Λύση

- Για το $x$:

$$\frac{\partial MSE(y, y*)}{\partial x} = \frac{\partial (y - y^*)^2}{\partial y} \cdot \frac{\partial ReLU(xm + b)}{\partial (xm + b)} \cdot \frac{\partial (xm + b)}{\partial x}$$

  Και έχουμε:

$$\frac{\partial (y - y^*)^2}{\partial y} = 2y - 2y^* \tag{5}$$

$$\frac{\partial ReLU(xm + b)}{\partial (xm + b)} = 1, \text{ αν } xm + b \geq 0, \text{ αλλιώς } 0 \tag{6}$$

$$\frac{\partial (xm + b)}{\partial x} = m$$

  Συνεπώς

$$\frac{\partial MSE(y, y*)}{\partial x} = (2y - 2y^*) \cdot 1\{xm + b \geq 0\} \cdot m$$

  - Αν $m = 0$, τότε $\dfrac{\partial MSE(y, y*)}{\partial x} = 0$
  - Αλλιώς, αν $m > 0$, τότε πρέπει $x \geq -b/m$
  - Αλλιώς, αν $m < 0$, τότε πρέπει $x \leq -b/m$

  Συνεπώς, αν $m \neq 0$, τότε για κάθε $x$, ισχύει $xm + b \geq 0$.
  Συνοψίζοντας:

$$\frac{\partial MSE(y, y*)}{\partial x} = \begin{cases} 0 & m = 0 \\ (2y - 2y^*) \cdot m, & m \neq 0 \end{cases}$$

- Για το $m$, ομοίως:

$$\frac{\partial MSE(y,y*)}{\partial m}=\frac{\partial(y-y^*)^2}{\partial y}\cdot\frac{\partial ReLU(xm+b)}{\partial(xm+b)}\cdot\frac{\partial(xm+b)}{\partial m}$$

Έχουμε

$$\frac{\partial(xm+b)}{\partial m}=x$$

Άρα από (5), (6):

$$\frac{\partial MSE(y,y*)}{\partial m}=(2y-2y^*)\cdot 1\{xm+b\geq 0\}\cdot x$$

  - Αν $x=0$, τότε $\frac{\partial MSE(y,y*)}{\partial m}=0$
  - Αλλιώς, αν $x>0$, τότε πρέπει $m\geq -b/x$
  - Αλλιώς, αν $x<0$, τότε πρέπει $m\leq -b/x$

  Συνεπώς, αν $x\neq 0$, τότε για κάθε $m$, ισχύει $xm+b\geq 0$.
  Επομένως:

$$\frac{\partial MSE(y,y*)}{\partial m}=\begin{cases}0 & x=0\\ (2y-2y^*)\cdot x, & x\neq 0\end{cases}$$

- Για το $b$, ομοίως:

$$\frac{\partial MSE(y,y*)}{\partial b}=\frac{\partial(y-y^*)^2}{\partial y}\cdot\frac{\partial ReLU(xm+b)}{\partial(xm+b)}\cdot\frac{\partial(xm+b)}{\partial b}$$

Έχουμε

$$\frac{\partial(xm+b)}{\partial b}=1$$

Άρα από (5), (6):

$$\frac{\partial MSE(y,y*)}{\partial b}=(2y-2y^*)\cdot 1\{xm+b\geq 0\}\cdot 1$$

  - Αν $b\geq -xm$, τότε $\frac{\partial MSE(y,y*)}{\partial b}=(2y-2y^*)\cdot 1\cdot 1$
  - Αλλιώς, αν $b<-xm$, τότε $\frac{\partial MSE(y,y*)}{\partial b}=0$

Συνεπώς:

$$\frac{\partial MSE(y, y*)}{\partial b} = \begin{cases} 0 & b < -xm \\ (2y - 2y^*), & b \geq -xm \end{cases}$$

- Τέλος, για το $y^*$:

$$\frac{\partial MSE(y, y*)}{\partial y^*} = -2y + 1 = -2ReLU(xm + b) + 1$$