Homework 1 – Question 3

3.4

Quer se calcular o Jacobiano do relumax, ou seja, a matriz com entradas $\frac{\partial \operatorname{relumax}_b(z)_i}{\partial z_j}$, assumindo todos os z diferentes e $K \geq 2$.

R:

Sabendo que,

$$\operatorname{relumax}_b(z)_i := \frac{\operatorname{relu}(z_i - \max(z) + b)}{\sum_k \operatorname{relu}(z_k - \max(z) + b)}.$$

E fazendo-se $\alpha_i = z_i - \max(z) + b$ e $\alpha_k = z_k - \max(z) + b$, ao se derivar relativamente a z_j, temos:

$$\frac{\partial \operatorname{relumax}_b(z)_i}{\partial z_j} = \frac{\frac{\partial \operatorname{relu}(\alpha_i)}{\partial z_j} \sum_k \operatorname{relu}(\alpha_k) - \frac{\partial \sum_k \operatorname{relu}(\alpha_k)}{\partial z_j} \operatorname{relu}(\alpha_i)}{\left(\sum_k \operatorname{relu}(\alpha_k)\right)^2}.$$

Primeiramente vamos determinar $\frac{\partial \operatorname{relu}(\alpha_i)}{\partial z_j}$:

Como $\operatorname{relu}(\alpha_i)$ é igual a 0 se $\alpha_i < 0$ e igual a α_i se $\alpha_i > 0$, a derivada é dada por:

$$\frac{\partial \operatorname{relu}(\alpha_i)}{\partial z_j} = \begin{cases} \frac{\partial \alpha_i}{\partial z_j} & \text{se } \alpha_i > 0 \\ 0 & \text{se } \alpha_i < 0. \end{cases}$$

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial z_j} = \frac{\partial z_i - \max(z) + b}{\partial z_j}$$

Considerando $\max(z) = z_{max}$, sendo max o índice correspondente:

$$\frac{\partial z_i - z_{max} + b}{\partial z_j} = \begin{cases} 1 & \text{se } j = i \ \wedge \ i \neq max \\ 0 & \text{se } j = i \ \wedge \ i = max \\ -1 & \text{se } j = max \ \wedge \ i \neq max \\ 0 & \text{se } j \neq i \ \wedge \ j \neq max. \end{cases}$$

Agora quanto a $\frac{\partial \sum_k \operatorname{relu}(\alpha_k)}{\partial z_j}$, sendo α_k linear, é trivial verificar que $\frac{\partial \sum_k \operatorname{relu}(\alpha_k)}{\partial z_j} = \sum_k \frac{\partial \operatorname{relu}(\alpha_k)}{\partial z_j}$, e como tal, sabendo também que todos o z são diferentes e um índice k está ativo se $\alpha_k > 0$:

$$\frac{\partial \sum_k \mathrm{relu}(\alpha_k)}{\partial z_j} = \begin{cases} 1 \quad \text{se } \alpha_j > 0,\ j \neq max \\ 0 \quad \text{se } \alpha_j < 0,\ j \neq max \\ 1 - N_{ativos} \quad \text{se } j = max \end{cases}$$

De facto, para visualizar-se isto melhor, pode-se determinar para o caso com $K = 4$, e sendo z_2 o valor máximo, pode-se determinar os a_k:

$$a_1 = z_1 - z_2 + b \qquad a_2 = z_2 - z_2 + b \qquad a_3 = z_3 - z_2 + b \qquad a_4 = z_4 - z_2 + b$$

Para além disto, $a_1 > 0$, $a_2 > 0$, $a_3 < 0$ e $a_4 > 0$.

Agora, se $j \neq max$, ou seja, $j \neq 2$:

$$\frac{\partial \sum_{k=1}^{4} \mathrm{relu}(\alpha_k)}{\partial z_1} = \sum_{k=1}^{4} \frac{\partial \,\mathrm{relu}(\alpha_k)}{\partial z_1} = \frac{\partial \,\mathrm{relu}(\alpha_1)}{\partial z_1} + \frac{\partial \,\mathrm{relu}(\alpha_2)}{\partial z_1} + \frac{\partial \,\mathrm{relu}(\alpha_3)}{\partial z_1} + \frac{\partial \,\mathrm{relu}(\alpha_4)}{\partial z_1} =$$

$$= \frac{\partial \alpha_1}{\partial z_1} + \frac{\partial \alpha_2}{\partial z_1} + 0 + \frac{\partial \alpha_4}{\partial z_1} = 1 + 0 + 0 + 0 = 1$$

$$\frac{\partial \sum_{k=1}^{4} \mathrm{relu}(\alpha_k)}{\partial z_3} = \frac{\partial \alpha_1}{\partial z_3} + \frac{\partial \alpha_2}{\partial z_3} + 0 + \frac{\partial \alpha_4}{\partial z_3} = 0 + 0 + 0 + 0 = 0$$

$$\frac{\partial \sum_{k=1}^{4} \mathrm{relu}(\alpha_k)}{\partial z_4} = \frac{\partial \alpha_1}{\partial z_4} + \frac{\partial \alpha_2}{\partial z_4} + 0 + \frac{\partial \alpha_4}{\partial z_4} = 0 + 0 + 0 + 1 = 1$$

Ou seja, a partir disto é possível verificar exatamente as duas primeiras condições indicadas, em que se $j \neq max$ e j for um índice cujo valor de $a_j < 0$ (inativo), o valor da derivada $\frac{\partial \sum_k \mathrm{relu}(\alpha_k)}{\partial z_j}$ é nula. Enquanto que, se o índice corresponder a um $a_j > 0$, o valor desta será igual a 1.

Agora falta mostrar a última premissa, em que $j = max$:

$$\frac{\partial \sum_{k=1}^{4} \mathrm{relu}(\alpha_k)}{\partial z_2} = \frac{\partial \alpha_1}{\partial z_2} + \frac{\partial \alpha_2}{\partial z_2} + 0 + \frac{\partial \alpha_4}{\partial z_2} = (-1) + 0 + 0 + (-1) = 1 - N_{ativos} = -2$$

Agora que já se tem $\frac{\partial \,\mathrm{relu}(\alpha_i)}{\partial z_j}$ e $\frac{\partial \sum_k \mathrm{relu}(\alpha_k)}{\partial z_j}$, pode-se determinar $\frac{\partial \,\mathrm{relumax}_b(z)_i}{\partial z_j}$:

Para um $j \neq max$ e se j for um índice cujo valor de $a_j < 0$:

$$\frac{\partial \, \text{relumax}_b(z)_i}{\partial z_j} = \frac{0}{\left(\sum_k \text{relu}(\alpha_k)\right)^2} = 0$$

Para um $j \neq max$, se i for um índice cujo valor de $a_i > 0$ e $j = i$:

$$\frac{\partial \, \text{relumax}_b(z)_i}{\partial z_j} = \frac{1 \times \sum_k \text{relu}(\alpha_k) - 1 \times \text{relu}(\alpha_i)}{\left(\sum_k \text{relu}(\alpha_k)\right)^2} = \frac{1}{\sum_k \text{relu}(\alpha_k)} - \frac{\text{relumax}_b(z)_i}{\sum_k \text{relu}(\alpha_k)}$$

Para um $j \neq max$, se i for um índice cujo valor de $a_i > 0$ e $j \neq i$:

$$\frac{\partial \, \text{relumax}_b(z)_i}{\partial z_j} = \frac{0 - 1 \times \text{relu}(\alpha_i)}{\left(\sum_k \text{relu}(\alpha_k)\right)^2} = -\frac{\text{relumax}_b(z)_i}{\sum_k \text{relu}(\alpha_k)}$$

Para um $j = max$ e $j = i$:

$$\frac{\partial \, \text{relumax}_b(z)_i}{\partial z_j} = \frac{0 \times \sum_k \text{relu}(\alpha_k) - (1 - N_{ativos}) \times \text{relu}(\alpha_i)}{\left(\sum_k \text{relu}(\alpha_k)\right)^2} = -\frac{\text{relumax}_b(z)_i(1 - N_{ativos})}{\sum_k \text{relu}(\alpha_k)}$$

Para um $j = max$ e $j \neq i$:

$$\frac{\partial \, \text{relumax}_b(z)_i}{\partial z_j} = \frac{-1 \times \sum_k \text{relu}(\alpha_k) - (1 - N_{ativos}) \times \text{relu}(\alpha_i)}{\left(\sum_k \text{relu}(\alpha_k)\right)^2} =$$

$$= -\frac{1}{\sum_k \text{relu}(\alpha_k)} - \frac{\text{relumax}_b(z)_i(1 - N_{ativos})}{\sum_k \text{relu}(\alpha_k)}$$

E para um índice i, cujo valor $a_i < 0$:

$$\frac{\partial \, \text{relumax}_b(z)_i}{\partial z_j} = 0$$

Por fim, podemos determinar a matriz Jacobiana, J_{ij}, para o exemplo que se apresentou anteriormente, em que max=2, $a_1 > 0$, $a_2 > 0$, $a_3 < 0$ e $a_4 > 0$:

$$J = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & x_{14} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & x_{24} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} & x_{34} \\ x_{41} & x_{42} & x_{43} & x_{44} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sum_k \text{relu}(\alpha_k)} \begin{bmatrix} 1 - p_1 & 2p_1 - 1 & 0 & -p_1 \\ -p_2 & 2p_2 & 0 & -p_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -p_4 & 2p_4 - 1 & 0 & 1 - p_4 \end{bmatrix}$$

onde $p_i = \text{relumax}_b(z)_i$.