Többrétegű Kerceptron*

Szabó Zoltán, Lőrincz András

Információs Rendszerek Tanszék, Informatika Kar
Eötvös Loránd Tudományegyetem
Pázmány Péter sétány 1/C
Budapest, 1117
e-mail: `szzoli@cs.elte.hu`, `andras.lorincz@elte.hu`

Kivonat

Többrétegű Perceptronokba (MLP) Támasztó Vektor Gépeket (SVM) ágyazva többrétegű SVM hálókat konstruálunk. Az összekapcsolt approximációs forma az SVM-ek általánosító képességét és az MLP-k rejtett rétegéből adódó kombinatórikus tulajdonságot egyaránt kihasználhatja. A hálózatot Többrétegű Kerceptron (MLK) hálózatnak nevezzük. Az MLK rendelkezik hibavisszaterjesztésen alapuló hangolási eljárással, amit jelen munkában bemutatunk. Négyzetes költségfüggvényre – regularizációs lehetőségekkel – hangolási szabályt származtatunk. Megközelítésünk egy további tulajdonsága, hogy az ún. *kernel trükk* segítségével az MLK-hoz tartozó számítások a duális térben kivitelezhetők.

1. Bevezetés

A Többrétegű Perceptronokat (MLP) és a Támasztó Vektor Gépeket (SVM) széles körben tanulmányozták az irodalomban. Kiváló áttekintést ad a témában [3, 2]. Munkánkban az SVM-eket többrétegű formára terjesztjük ki, és a kapott rendszerre hibavisszaterjesztésen alapuló hangolási szabályt vezetünk le. Az ún. kernel trükk alkalmazásával, a problémát skaláris szorzat segítségével tárgyaljuk. Más, ugyanezt a trükköt használó eljárások leírása megtalálható a [4, 6, 7] hivatkozásokban.

2. A hálózat felépítése

2.1. Jelölések

Különböző betűtípussal jelöljük a számokat (a), a vektorokat ($\mathbf{a}$), és a mátrixokat ($\mathbf{A}$). $\mathbf{A}^T$ az $\mathbf{A}$ mátrix transzponáltja. Az $\mathbf{a}$ vektor egy a komponenssel való

*Alkalmazott Matematikai Lapok, 24:209-222, 2007.

kibővítését $[\mathbf{a}; a]$-ként írjuk. $\mathbb{R}$ szimbolizálja a valós számokat. $\|\cdot\|_2$ jelöli az E Euklideszi térbeli $\langle \cdot, \cdot \rangle$ skaláris szorzat által indukált L_2 normát, azaz $\|\mathbf{e}\|_2 = \sqrt{\langle \mathbf{e}, \mathbf{e} \rangle} \quad (\mathbf{e} \in E)$.

2.2. Építőelemek

2.2.1. SVM

Az SVM-ek gyakran használt approximációs eszközök [9, 10, 8, 6, 5]. $\{\mathbf{x}(t), d(t)\}_{t=1..T}$ mintapárokat közelítenek, ahol az $\mathbf{x}(t)$ input az $\mathcal{X}$ *input térből* származik és $d(t) \in \mathbb{R}$. A közelítés lineáris, egy alkalmas $\mathcal{H}$ térben. Ebbe a térbe a

$$\boldsymbol{\varphi} : \mathbf{x} \in \mathcal{X} \to \mathcal{H} \tag{1}$$

hozzárendelés képezi le az $\mathbf{x}(t)$ inputokat. $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$-et az $\mathbf{x}$ input *reprezentációjaként* interpretálhatjuk. Az SVM közelítés a

$$f_{\mathbf{w}} : \mathbf{x} \in \mathcal{X} \mapsto \langle \mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}} \quad (\mathbf{w} \in \mathcal{H}) \tag{2}$$

formájú. Formálisan, az SVM feladat

$$\min_{\mathbf{w}} H[\mathbf{w}] := C \cdot \sum_{t=1}^{T} V[d(t), f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}(t))] + \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|_{\mathcal{H}}^2 \quad (C > 0), \tag{3}$$

ahol $V[\cdot, \cdot]$ az ún. *veszteségfüggény*, amely lehet kvadratikus, ϵ-érzéketlen, de más formákat is szoktak használni [4]. Röviden, az SVM-ek regularizált lineáris approximátorok [2].

Az explicit $\boldsymbol{\varphi}$ leképezés helyett, a $\mathcal{H}$ tér egy k kernel segítségével is leírható, $\mathcal{H} = \mathcal{H}(k)$ [11], ahol $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) = k(\cdot, \mathbf{x})$. A k kernel a

$$\langle f(\cdot), k(\cdot, \mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}} = f(\mathbf{x}) \quad (\mathbf{x} \in \mathcal{X}, \forall f \in \mathcal{H}), \tag{4}$$

reprodukáló tulajdonsággal rendelkezik [1, 11] és $\mathcal{H}$-t Reprodukáló Kernel Hilbert Térnek (RKHS) nevezzük. Tehát, tetszőleges $f \in \mathcal{H}$ RKHS-beli függvény $k(\cdot, \mathbf{x})$ kernellel való skaláris szorzata az $\mathbf{x}$ pontbeli kiértékelésnek felel meg. A skaláris szorzat a $\mathcal{H}$ térben implicit módon számolható a kernel segítségével

$$k(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \langle \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{u}), \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{v}) \rangle_{\mathcal{H}} \quad (\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathcal{X}). \tag{5}$$

Így, a $\mathbf{w} = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \cdot \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{z}_j) \quad (\alpha_j \in \mathbb{R}, \mathbf{z}_j \in \mathcal{X})$ választással

$$f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}} = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \cdot \langle \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{z}_j), \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}} = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \cdot k(\mathbf{z}_j, \mathbf{x}). \tag{6}$$

Tehát, az $f_{\mathbf{w}}$ függvény az α_j együtthatók, a $\mathbf{z}_j$ minták és a k kernel segítégével a $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$ reprezentáció explicit felhasználása nélkül kiértékelhető. Ez a fogás a *kernel trükk*.

2.2.2. MLP

Az MLP neurális hálózat többrétegű, minden réteg egy

$$\mathbf{x} \mapsto \mathbf{g}(\mathbf{W} \cdot \mathbf{x}) \tag{7}$$

formájú nem-lineáris leképezést valósít meg. Itt $\mathbf{g}$ egy differenciálható nem-lineáris függvény. Az MLP feladatban úgy hangoljuk az egyes rétegek $\mathbf{W}$ mátrixait, hogy a hálózat az $\{\mathbf{x}(t), \mathbf{d}(t)\}$ input-output minta pároknak megfelelő leképezést közelítse. Formálisan, célunk a

$$\varepsilon^2(t) := \|\mathbf{d}(t) - \mathbf{y}(t)\|_2^2 \to \min_{\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, \ldots}, \tag{8}$$

kvadratikus hiba minimalizálása, ahol $\mathbf{y}(t)$ jelöli a hálózat t időpontbeli kimenetét. Az MLP feladatot oldja meg a jól-ismert *visszaterjesztési algoritmus*.

2.3. Az MLK hálózat

Egy általános MLP réteg által megvalósított leképezés [lásd a (7) egyenletet] a

$$\mathbf{x} \mapsto \mathbf{g}\left(\begin{bmatrix} \vdots \\ \langle \mathbf{w}_i, \mathbf{x} \rangle \\ \vdots \end{bmatrix}\right), \tag{9}$$

formájú, ahol $\mathbf{w}_i^T$ a $\mathbf{W}$ mátrix i. sorát jelöli. SVM illeszthető az MLP-be, ha a hálózat egy általános rétege a

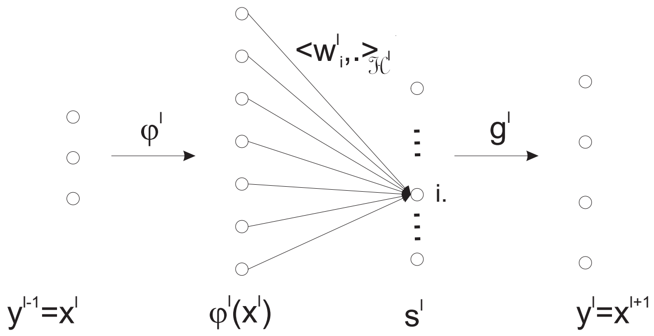
$$\mathbf{x} \mapsto \mathbf{g}\left(\begin{bmatrix} \langle \mathbf{w}_1, \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}} \\ \vdots \\ \langle \mathbf{w}_N, \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}} \end{bmatrix}\right) \tag{10}$$

hozzárendelést valósítja meg.[1]

Egy ilyen rétegekből felépített hálózatot Többrétegű Kerceptronnak (MLK) fogunk hívni, lásd az 1. ábrát. Minden egyes réteg ($\mathbf{x}^l$) inputját az előző réteg ($\mathbf{y}^{l-1}$) outputja szolgáltatja. A 0-adik réteg a külvilág, ami az MLK első rétege számára szolgáltatja a bemenetet. $\mathbf{x}^l = \mathbf{y}^{l-1} \in \mathbb{R}^{N_{\mathrm{I}}^l}$, ahol N_{I}^l az l-edik réteg dimenziója. Az l-edik réteg $\mathbf{x}^l$ inputja a $\boldsymbol{\varphi}^l$ leképezésen átesve a $\mathbf{w}_i^l$ súlyokkal szorzódik. Ez a két lépcsős eljárás implicit módon elvégezhető a k^l kerneleket és a $\mathbf{w}_i^l$-k kifejtéseit használva. Az adódó $\mathbf{s}^l \in \mathbb{R}^{N_{\mathrm{S}}^l}$ vektorra hat a $\mathbf{g}^l$ nem-lineáris, differenciálható függvény. Ennek a nem-lineáris függvénynek a kimenete a következő réteg bemenete, azaz $\mathbf{x}^{l+1}$. Az utolsó (L.) réteg outputját – azaz a hálózat outputját – $\mathbf{y}$ jelöli. $\mathbf{y}^l = \mathbf{x}^{l+1} \in \mathbb{R}^{N_{\mathrm{O}}^l}$, és az l-edik réteg kimenetének dimenziója N_{O}^l.

A következőkben megmutatjuk, hogy (i) az MLK-k is rendelkeznek visszaterjesztési szabállyal, ami (ii) csak kernelek segítségével is megadható, és így a számítások a duális térben kivitelezhetőek.

[1] Az egyszerűség kedvvéért válasszuk az $\mathcal{X}$ input teret a véges dimenziós Euklideszi térnek, azaz $\mathbb{R}^n$-nek.



1. ábra. Az MLK hálózat l-edik rétege, $l = 1, 2, \ldots, L$. Minden egyes réteg inputját ($\mathbf{x}^l$) az előző réteg outputja adja ($\mathbf{y}^{l-1}$). A 0-adik réteg a külvilág, ami az MLK első réteg számára szolgáltatja a bemenetet. Az l-edik réteg $\mathbf{x}^l$ inputja a $\boldsymbol{\varphi}^l$ leképezésen esik át, majd a réteg $\mathbf{w}_i^l$ súlyaival szorzódik skalárisan a $\mathcal{H}^l = \mathcal{H}^l(k^l)$ RKHS-ben. Az adódó $\mathbf{s}^l$ vektorra hat a $\mathbf{g}^l$ differenciálható nemlinearitás. Ezen nem-lineáris függvény kimenete a következő réteg bemenete, $\mathbf{x}^{l+1}$. A hálózat kimenete az utolsó réteg kimenete.

3. Az MLK visszaterjesztési eljárás

Egy kicsit általánosabb, regularizációs tagokat is tartalmazó feladat a

$$c(t) := \varepsilon^2(t) + r(t) \longrightarrow \min_{\{\mathcal{H}^l \ni \mathbf{w}_i^l:\ l=1,\ldots,L;\ i=1,\ldots,N_S^l\}}, \tag{11}$$

probléma, ahol $\varepsilon^2(t) = \|\mathbf{d}(t) - \mathbf{y}(t)\|_2^2$ és $r(t) = \sum_{l=1}^{L} \sum_{i=1}^{N_S^l} \lambda_i^l \cdot \left\|\mathbf{w}_i^l(t)\right\|_{\mathcal{H}^l}^2$ $\quad(\lambda_i^l \geq 0)$ a költségfüggvény approximációs és regularizációs tagjai, és $\mathbf{y}(t)$ jelöli a hálózat t-edik inputra adott kimenetét. A λ_i^l paraméterek szabályozzák az approximáció és regularizáció közötti arányt. $\lambda_i^l = 0$-ra a legjobb közelítést keressük, mint az MLP feladatban [(8) egyenlet]. λ_i^l értékeket növelve, az approximáció simasága nő.

A fenti jelölésekkel a következő állítások igazolhatók.

1. Tétel (explicit eset)**.** *Tegyük fel, hogy az* $\mathbf{x} \mapsto \left\langle \mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}^l(\mathbf{x}) \right\rangle_{\mathcal{H}^l}$ *és a* $\mathbf{g}^l$ *függvények differenciálhatók* ($l = 1, \ldots, L$)*. Ekkor visszaterjesztési szabály származtatható az MLK-ra, ha a költségfüggvény*

$$c(t) = \varepsilon^2(t) + \sum_{l=1}^{L} \sum_{i=1}^{N_S^l} \lambda_i^l \cdot \left\|\mathbf{w}_i^l(t)\right\|_{\mathcal{H}^l}^2 \quad (\lambda_i^l \geq 0) \tag{12}$$

alakú.

2. Tétel (implicit eset)**.** *Tegyük fel, hogy az alábbiak teljesülnek:*

1. *Differenciálhatósági megkötés: A* k^l *kernelek mindkét változójukban, illetve a* $\mathbf{g}^l$ *függvények differenciálhatók* ($l = 1, \ldots, L$)*.*

2. Kifejtési tulajdonság: A hálózat kezdeti $\mathbf{w}_i^l(1)$ súlyai egy adott

$$\mathcal{H}^l \ni \mathbf{w}_i^l(1) = \sum_{j=1}^{N_i^l(1)} \alpha_{i,j}^l(1) \cdot \boldsymbol{\varphi}^l(\mathbf{z}_{i,j}^l(1)) \quad (l = 1, \ldots, L; i = 1, \ldots, N_{\mathrm{S}}^l) \tag{13}$$

típusú kifejtéssel, duális reprezentációval rendelkeznek.

Ekkor létezik visszaterjesztési eljárás az MLK hálózatra, feltéve, hogy a költségfüggvény

$$c(t) = \varepsilon^2(t) + \sum_{l=1}^{L} \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{S}}^l} \lambda_i^l \cdot \left\| \mathbf{w}_i^l(t) \right\|_{\mathcal{H}^l}^2 \quad (\lambda_i^l \geq 0) \tag{14}$$

formájú. Az eljárás megőrzi a (13) tulajdonságot, ami így a behangolt hálózatra is fennáll. Az algoritmus implicit, abban az értelemben, hogy a duális térben realizálható.

Az MLK visszaterjesztési eljárások pszeudokódjai az 1. és a 2. táblázatban találhatók. Az algoritmusok levezetését, mind az explicit mind az implicit esetre, a következő alfejezetben megadjuk.

Az MLK visszaterjesztési eljárások szemléletesen (párhuzamosan lásd az 1 és a 2. táblázatokat):

1. a $\boldsymbol{\delta}^l(t)$ visszaterjesztett hiba $\boldsymbol{\delta}^L(t)$-ből indulva egy hátráló rekurzióval fejlődik a $\frac{d[\mathbf{s}^{l+1}(t)]}{d[\mathbf{s}^l(t)]}$ deriválton keresztül.

2. a $\frac{d[\mathbf{s}^{l+1}(t)]}{d[\mathbf{s}^l(t)]}$ kifejezés a $\boldsymbol{\varphi}^{l+1}$ leképezés, vagy implicit módon a k^{l+1} kernel segítségével határozható meg.

3. $\mathbf{w}$-k hangolásában két tényező játszik szerepet:

   (a) *felejtés* valósul meg a $\mathbf{w}_i^l$ súlyok $\left(1 - 2\mu_i^l(t) \cdot \lambda_i^l\right)$-szeres szorzása által, ahol λ_i^l a regularizációs együttható.

   (b) *adaptáció* jelenik meg a visszaterjesztett hibán keresztül. Az l-edik réteg súlyait az $\mathbf{x}^l(t)$ reprezentáció, azaz az aktuális inputnak az l-edik rétegre leképezett értéke állítja úgy, hogy a hangolást a visszaterjesztett hiba súlyozza.

3.1. Az MLK visszaterjesztési eljárások levezetése

Először a $\frac{d[c(t)]}{d[\mathbf{w}_i^l(t)]}$ gradienst származtatjuk. Utána a gradienst a legmeredekebb lejtő módszerbe ágyazzuk.[2] A $c(t)$ hiba két tagból áll, approximációs és regularizációs tagból:

$$c(t) = \varepsilon^2(t) + r(t). \tag{15}$$

[2] A legmeredekebb lejtő módszerét használjuk ötletünk bemutatásához. Más, ettől eltérő gradiens alapú technikák szintén szóba jöhetnének. Például, a momentum módszer illetve a konjugált gradiens eljárások is rendelkeznek előnyös tulajdonságokkal.

1. táblázat. Az explicit MLK visszaterjesztési algoritmus pszeudokódja

Algoritmus bemenete
mintapontok: $\{\mathbf{x}(t), \mathbf{d}(t)\}_{t=1,\ldots,T}, T$
költségfüggvény: $\lambda_i^l \geq 0$ $(l = 1, \ldots, L; i = 1, \ldots, N_\mathrm{S}^l)$
tanulási ráták: $\mu_i^l(t) > 0$ $(l = 1, \ldots, L; i = 1, \ldots, N_\mathrm{S}^l; t = 1, \ldots, T)$
Hálózat inicializációja
méretek: L (rétegek száma), N_I^l, N_S^l, N_o^l $(l = 1, \ldots, L)$
súlyok: $\mathbf{w}_i^l(1)$ $(l = 1, \ldots, L; i = 1, \ldots, N_\mathrm{S}^l)$
Számítás kezdete
Aktuális input $\mathbf{x}(t)$
Előreterjesztés
$\mathbf{x}^l(t)$ $(l = 2, \ldots, L+1)$, $\mathbf{s}^l(t)$ $(l = 2, \ldots, L)$[a]
Hiba visszaterjesztése
$l = L$
while $l \geq 1$
if $(l = L)$
$$\boldsymbol{\delta}^L(t) = 2 \cdot [\mathbf{y}(t) - \mathbf{d}(t)]^T \cdot \left(\mathbf{g}^L\right)' (\mathbf{s}^L(t))$$
else
$$\frac{d[\mathbf{s}^{l+1}(t)]}{d[\mathbf{s}^l(t)]} = \begin{bmatrix} \vdots \\ \left.\frac{d\left[\left\langle \mathbf{w}_i^{l+1}(t), \boldsymbol{\varphi}^{l+1}(\mathbf{u})\right\rangle_{\mathcal{H}^{l+1}}\right]}{d[\mathbf{u}]}\right|_{\mathbf{u}=\mathbf{x}^{l+1}(t)} \\ \vdots \end{bmatrix} \cdot \left[\left(\mathbf{g}^l\right)' (\mathbf{s}^l(t))\right]$$ [b]
$$\boldsymbol{\delta}^l(t) = \boldsymbol{\delta}^{l+1}(t) \cdot \frac{d[\mathbf{s}^{l+1}(t)]}{d[\mathbf{s}^l(t)]}$$
Súlyok frissítése
for $\forall\, i$: $1 \leq i \leq N_S^l$
$$\mathbf{w}_i^l(t+1) = (1 - 2\mu_i^l(t) \cdot \lambda_i^l) \cdot \mathbf{w}_i^l(t) - \mu_i^l(t) \cdot \delta_i^l(t) \cdot \boldsymbol{\varphi}^l(\mathbf{x}^l(t))$$
$l = l - 1$
Számítás vége

---
[a] Így a hálózat kimenete, azaz $\mathbf{y}(t) = \mathbf{x}^{L+1}(t)$ is kiszámítódik.
[b] Itt: $i = 1, \ldots, N_\mathrm{S}^{l+1}$.

2. táblázat. Az implicit MLK visszaterjesztési algoritmus pszeudokódja

Algoritmus bemenete

mintapontok: $\{\mathbf{x}(t), \mathbf{d}(t)\}_{t=1,\ldots,T}, T$

költségfüggvény: $\lambda_i^l \geq 0$ $(l = 1,\ldots,L; i = 1,\ldots,N_{\mathrm{S}}^l)$

tanulási ráták: $\mu_i^l(t) > 0$ $(l = 1,\ldots,L; i = 1,\ldots,N_{\mathrm{S}}^l; t = 1,\ldots,T)$

Hálózat inicializációja

méretek: L (rétegek száma), N_{I}^l, N_{S}^l, N_{o}^l $(l = 1,\ldots,L)$

súlyok: $\mathbf{w}_i^l(1)$-kifejtések $(l = 1,\ldots,L; i = 1,\ldots,N_{\mathrm{S}}^l)$

együtthatók: $\boldsymbol{\alpha}_i^l(1) \in \mathbb{R}^{N_i^l(1)}$

ősök: $\mathbf{z}_{i,j}^l(1)$, ahol $j = 1,\ldots,N_i^l(1)$

Számítás kezdete

Aktuális input $\mathbf{x}(t)$

Előreterjesztés

$\mathbf{x}^l(t)$ $(l = 2,\ldots,L+1)$, $\mathbf{s}^l(t)$ $(l = 2,\ldots,L)$[a]

Hiba visszaterjesztése

$l = L$

while $l \geq 1$

if $(l = L)$

$$\boldsymbol{\delta}^L(t) = 2 \cdot [\mathbf{y}(t) - \mathbf{d}(t)]^T \cdot \left(\mathbf{g}^L\right)' (\mathbf{s}^L(t))$$

else

$$\frac{d[\mathbf{s}^{l+1}(t)]}{d[\mathbf{s}^l(t)]} = \begin{bmatrix} \vdots \\ \sum_{j=1}^{N_i^{l+1}(t)} \alpha_{ij}^{l+1}(t) \cdot [k^{l+1}]_y'(\mathbf{z}_{ij}^{l+1}(t), \mathbf{x}^{l+1}(t)) \\ \vdots \end{bmatrix} \cdot \left[\left(\mathbf{g}^l\right)' (\mathbf{s}^l(t))\right]^b$$

$$\boldsymbol{\delta}^l(t) = \boldsymbol{\delta}^{l+1}(t) \cdot \frac{d[\mathbf{s}^{l+1}(t)]}{d[\mathbf{s}^l(t)]}$$

Súlyok frissítése

for $\forall$ i: $1 \leq i \leq N_S^l$

$N_i^l(t+1) = N_i^l(t) + 1$

$\boldsymbol{\alpha}_i^l(t+1) = \left[\left(1 - 2\mu_i^l(t) \cdot \lambda_i^l\right) \cdot \boldsymbol{\alpha}_i^l(t); -\mu_i^l(t) \cdot \delta_i^l(t)\right]$

$\mathbf{z}_{i,j}^l(t+1) = \mathbf{z}_{i,j}^l(t) \quad (j = 1,\ldots,N_i^l(t))$

$\mathbf{z}_{i,j}^l(t+1) = \mathbf{x}^l(t) \quad (j = N_i^l(t+1))$

$l = l - 1$

Számítás vége

[a] Így a hálózat kimenete, azaz $\mathbf{y}(t) = \mathbf{x}^{L+1}(t)$ is kiszámítódik.

[b] $i = 1,\ldots,N_{\mathrm{S}}^{l+1}$. $(k^l)_y'$ jelöli a k^l kernel második argumentuma szerint vett deriváltját.

3.1.1. Az approximációs tag gradiense

Először néhány MLK felépítéséből adódó alapösszefüggést sorolunk fel. Az egyszerűség kedvéért a továbbiakban a t indexet elhagyjuk [precízen: $\mathbf{x}^l = \mathbf{x}^l(t)$, $\mathbf{y}^l = \mathbf{y}^l(t)$, $\mathbf{s}^l = \mathbf{s}^l(t)$,$\mathbf{w}_i^l = \mathbf{w}_i^l(t)$].

$$\mathbf{x}^l = \mathbf{y}^{l-1} \in \mathbb{R}^{N_{\mathrm{I}}^l} \quad (l = 1, \dots, L+1) \tag{16}$$

$$\mathbf{x}^{l+1} = \mathbf{g}^l(\mathbf{s}^l) \quad (l = 1, \dots, L) \tag{17}$$

$$\mathbf{s}^l = \begin{bmatrix} \langle \mathbf{w}_1^l, \boldsymbol{\varphi}^l(\mathbf{x}^l) \rangle_{\mathcal{H}^l} \\ \vdots \\ \langle \mathbf{w}_i^l, \boldsymbol{\varphi}^l(\mathbf{x}^l) \rangle_{\mathcal{H}^l} \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (l = 1, \dots, L; i = 1, \dots, N_{\mathrm{S}}^l) \tag{18}$$

$$= \begin{bmatrix} \langle \mathbf{w}_1^l, \boldsymbol{\varphi}^l(\mathbf{g}^{l-1}(\mathbf{s}^{l-1})) \rangle_{\mathcal{H}^l} \\ \vdots \\ \langle \mathbf{w}_i^l, \boldsymbol{\varphi}^l(\mathbf{g}^{l-1}(\mathbf{s}^{l-1})) \rangle_{\mathcal{H}^l} \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (l = 2, \dots, L; i = 1, \dots, N_{\mathrm{S}}^l) \tag{19}$$

$$\mathbf{s}^{l+1} = \begin{bmatrix} \langle \mathbf{w}_1^{l+1}, \boldsymbol{\varphi}^{l+1}(\mathbf{g}^l(\mathbf{s}^l)) \rangle_{\mathcal{H}^{l+1}} \\ \vdots \\ \langle \mathbf{w}_i^{l+1}, \boldsymbol{\varphi}^{l+1}(\mathbf{g}^l(\mathbf{s}^l)) \rangle_{\mathcal{H}^{l+1}} \\ \vdots \end{bmatrix} \tag{20}$$

$$(l = 1, \dots, L-1; i = 1, \dots, N_{\mathrm{S}}^{l+1})$$

Az l-edik réteg visszaterjesztett hibáját definiáljuk a

$$\boldsymbol{\delta}^l(t) := \frac{d[\varepsilon^2(t)]}{d[\mathbf{s}^l(t)]} \quad (l = 1, \dots, L) \tag{21}$$

módon. Speciálisan, az utolsó rétegre:

$$\boldsymbol{\delta}^L(t) = \frac{d[\varepsilon^2(t)]}{d[\mathbf{s}^L(t)]} = \frac{d\left[\left\|\mathbf{d}(t) - \mathbf{g}^L(\mathbf{s}^L(t))\right\|_2^2\right]}{d[\mathbf{s}^L(t)]} \tag{22}$$

$$= 2 \cdot \left[\mathbf{g}^L\left(\mathbf{s}^L(t)\right) - \mathbf{d}(t)\right]^T \cdot \left(\mathbf{g}^L\right)' \left(\mathbf{s}^L(t)\right) \tag{23}$$

$$= 2 \cdot [\mathbf{y}(t) - \mathbf{d}(t)]^T \cdot \left(\mathbf{g}^L\right)' (\mathbf{s}^L(t)). \tag{24}$$

Itt először a láncszabályt, majd a vektorokra érvényes

$$\frac{d[\|\mathbf{d} - \mathbf{y}\|_2^2]}{d\mathbf{y}} = 2(\mathbf{y} - \mathbf{d})^T \tag{25}$$

összefüggést használtuk ki, végül beillesztettük az MLK szerkezetéből adódó

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{g}^L\left(\mathbf{s}^L(t)\right) \tag{26}$$

azonosságot.

A

$$\frac{d[\mathbf{s}^{l+1}(t)]}{d[\mathbf{s}^{l}(t)]} \quad (l = 1, \ldots, L-1) \tag{27}$$

kifejezés a (20) egyenlet segítségével számolható. Elégséges a

$$\frac{d[\langle \mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{g}(\mathbf{s}))\rangle_{\mathcal{H}}]}{d[\mathbf{s}]} \tag{28}$$

alakú kifejezéseket tekintenünk, abból a teljes derivált „kirakható”. (28) értéke az alábbi lemma alkalmazásával megadható.

1. Lemma. *Legyen* $\mathbf{w} \in \mathcal{H} = \mathcal{H}(k)$ *egy RKHS-beli pont. Tegyük fel, hogy*

1. *A* k *kernel mindkét argumentuma szerint differenciálható és jelölje* k'_y *a kernel második argumentuma szerint vett deriváltját.*
2. *Implicit esetben feltételezzük még, hogy* $\mathbf{w}$ *véges sok* $\mathbf{z}_i$ *pont* $\mathcal{H}$*-beli reprezentációjának képterében fekszik. Azaz*

$$\mathbf{w} \in Im\left(\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{z}_1), \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{z}_2), \ldots, \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{z}_N)\right) \subseteq \mathcal{H}. \tag{29}$$

Legyen ez a kifejtés $\mathbf{w} = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \cdot \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{z}_j)$*, ahol* $\alpha_j \in \mathbb{R}$*.*

Ekkor:

1. *Explicit eset:*

$$\frac{d[\langle \mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{g}(\mathbf{s}))\rangle_{\mathcal{H}}]}{d[\mathbf{s}]} = \left.\frac{d\left[\langle \mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{u})\rangle_{\mathcal{H}}\right]}{d[\mathbf{u}]}\right|_{\mathbf{u}=\mathbf{g}(\mathbf{s})} \cdot \mathbf{g}'(\mathbf{s}) \tag{30}$$

2. *Implicit eset:*

$$\frac{d[\langle \mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{g}(\mathbf{s}))\rangle_{\mathcal{H}}]}{d[\mathbf{s}]} = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \cdot k'_y(\mathbf{z}_j, \mathbf{g}(\mathbf{s})) \cdot \mathbf{g}'(\mathbf{s}) \tag{31}$$

Bizonyítás.

1. Explicit eset: az állítás adódik a láncszabályból.
2. Implicit eset:

$$\frac{d[\langle \mathbf{w}, \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{g}(\mathbf{s}))\rangle_{\mathcal{H}}]}{d[\mathbf{s}]} = \frac{d\left[\left\langle \sum_j \alpha_j \cdot \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{z}_j), \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{g}(\mathbf{s}))\right\rangle_{\mathcal{H}}\right]}{d[\mathbf{s}]} \tag{32}$$

$$= \frac{d\left[\sum_j \alpha_j \cdot \langle \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{z}_j), \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{g}(\mathbf{s}))\rangle_{\mathcal{H}}\right]}{d[\mathbf{s}]} \tag{33}$$

$$= \frac{d\left[\sum_j \alpha_j \cdot k\left(\mathbf{z}_j, \mathbf{g}(\mathbf{s})\right)\right]}{d[\mathbf{s}]} \tag{34}$$

$$= \sum_j \alpha_j \cdot k'_y(\mathbf{z}_j, \mathbf{g}(\mathbf{s})) \cdot \mathbf{g}'(\mathbf{s}). \tag{35}$$

Az első egyenletben beírtuk $\mathbf{w}$ kifejtését, majd kihasználtuk a skaláris szorzat linearitását. Ezután a

$$k(\mathbf{u},\mathbf{v}) = \langle \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{u}), \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{v})\rangle_{\mathcal{H}} \tag{36}$$

reprezentáció és kernel közti összefüggést alkalmaztuk. Az utolsó lépés a láncszabályból adódik.

□

Folytatjuk (27) kiszámítását:

1. Explicit eset: Az előző lemma szerint

$$\frac{d[\mathbf{s}^{l+1}(t)]}{d[\mathbf{s}^{l}(t)]} = \begin{bmatrix} \vdots \\ \left.\frac{d\left[\left\langle \mathbf{w}_i^{l+1}(t), \boldsymbol{\varphi}^{l+1}(\mathbf{u})\right\rangle_{\mathcal{H}^{l+1}}\right]}{d[\mathbf{u}]}\right|_{\mathbf{u}=\mathbf{g}^l(\mathbf{s}^l(t))} \cdot \left(\mathbf{g}^l\right)'\left(\mathbf{s}^l(t)\right) \\ \vdots \end{bmatrix} \tag{37}$$

$$= \begin{bmatrix} \vdots \\ \left.\frac{d\left[\left\langle \mathbf{w}_i^{l+1}(t), \boldsymbol{\varphi}^{l+1}(\mathbf{u})\right\rangle_{\mathcal{H}^{l+1}}\right]}{d[\mathbf{u}]}\right|_{\mathbf{u}=\mathbf{x}^{l+1}(t)} \\ \vdots \end{bmatrix} \cdot \left[\left(\mathbf{g}^l\right)'\left(\mathbf{s}^l(t)\right)\right] \tag{38}$$

$$(l=1,\ldots,L-1; i=1,\ldots,N_{\mathrm{S}}^{l+1}).$$

A második egyenlőségnél (i) kihasználtuk a (17) azonosságot és (ii) kiemeltük a $\left(\mathbf{g}^l\right)'\left(\mathbf{s}^l(t)\right)$ tagot mátrixok szorzásának megfelelően.

2. Implicit eset: $\mathbf{w}_i^{l+1}(t)$-kre fennáll a (13) kifejtési tulajdonság. Ez kezdetben feltevésünk volt. A 3.1.3 alfejezetben, látni fogjuk, hogy ez a tulajdonság az iterációk során „öröklődik". Így

$$\mathbf{w}_i^{l+1}(t) = \sum_{j=1}^{N_i^{l+1}(t)} \alpha_{ij}^{l+1}(t) \cdot \boldsymbol{\varphi}^{l+1}(\mathbf{z}_{ij}^{l+1}(t)) \quad (l=1,\ldots,L-1; i=1,\ldots,N_{\mathrm{S}}^{l+1}) \tag{39}$$

és a kívánt (27) derivált a lemma alkalmazásával

$$
\begin{aligned}
\frac{d[\mathbf{s}^{l+1}(t)]}{d[\mathbf{s}^l(t)]} &= \\
&= \begin{bmatrix} \vdots \\ \sum_{j=1}^{N_i^{l+1}(t)} \alpha_{ij}^{l+1}(t) \cdot [k^{l+1}]'_y(\mathbf{z}_{ij}^{l+1}(t), \mathbf{g}^l(\mathbf{s}^l(t))) \cdot \left(\mathbf{g}^l\right)'(\mathbf{s}^l(t)) \\ \vdots \end{bmatrix} && (40) \\
&= \begin{bmatrix} \vdots \\ \sum_{j=1}^{N_i^{l+1}(t)} \alpha_{ij}^{l+1}(t) \cdot [k^{l+1}]'_y(\mathbf{z}_{ij}^{l+1}(t), \mathbf{x}^{l+1}(t)) \\ \vdots \end{bmatrix} \cdot \left[\left(\mathbf{g}^l\right)'(\mathbf{s}^l(t))\right] && (41) \\
&(l = 1, \ldots, L-1; i = 1, \ldots, N_{\mathrm{S}}^{l+1}).
\end{aligned}
$$

A második egyenlőségnél kihasználtuk a (17) azonosságot. A $\left(\mathbf{g}^l\right)'\left(\mathbf{s}^l(t)\right)$ mátrix tagot mátrixok szorzásának megfelelően kiemeltük.

Láncszabály és $\boldsymbol{\delta}^{l+1}(t)$ definíciója alapján

$$\boldsymbol{\delta}^l(t) = \frac{d[\varepsilon^2(t)]}{d[\mathbf{s}^l(t)]} = \frac{d[\varepsilon^2(t)]}{d[\mathbf{s}^{l+1}(t)]} \cdot \frac{d[\mathbf{s}^{l+1}(t)]}{d[\mathbf{s}^l(t)]} = \boldsymbol{\delta}^{l+1}(t) \cdot \frac{d[\mathbf{s}^{l+1}(t)]}{d[\mathbf{s}^l(t)]} \quad (l = 1, \ldots, L-1). \tag{42}$$

Ismét alkalmazva a láncszabályt, $\boldsymbol{\delta}^l(t)$ és $\mathbf{s}^l(t)$ definíciója szerint

$$\frac{d[\varepsilon^2(t)]}{d[\mathbf{w}_i^l(t)]} = \frac{d[\varepsilon^2(t)]}{d[s_i^l(t)]} \cdot \frac{d[s_i^l(t)]}{d[\mathbf{w}_i^l(t)]} = \delta_i^l(t) \cdot \boldsymbol{\varphi}^l(\mathbf{x}^l(t)) \quad (l = 1, \ldots, L; i = 1, \ldots, N_{\mathrm{S}}^l), \tag{43}$$

ami a kívánt derivált. Figyeljük meg, hogy a derivált a $\delta_i^l(t)$ szám és az aktuális $\mathbf{x}(t)$ input l. rétegére eső $\mathbf{x}^l(t)$ lenyomatának $\boldsymbol{\varphi}^l(\mathbf{x}^l(t))$ reprezentációjával kifejezhető.

3.1.2. Regularizációs tag

Ez a tag egyszerűen megadható:

$$\frac{d[r(t)]}{d[\mathbf{w}_i^l(t)]} = \frac{d\left[\sum_{l=1}^{L} \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{S}}^l} \lambda_i^l \cdot \left\|\mathbf{w}_i^l(t)\right\|_{\mathcal{H}^l}^2\right]}{d[\mathbf{w}_i^l(t)]} = 2\lambda_i^l \cdot \mathbf{w}_i^l(t) \quad (l = 1, \ldots, L; i = 1, \ldots, N_{\mathrm{S}}^l). \tag{44}$$

Vegyük észre, hogy a derivált az aktuális $\mathbf{w}_i^l(t)$ súlyok skalárszorosa. Ezen forma szerint implicit hangolási szabály adható.

3.1.3. Költség tag

Használva a

$$\frac{d[c(t)]}{d[\mathbf{w}_i^l(t)]} = \frac{d[\varepsilon^2(t)]}{d[\mathbf{w}_i^l(t)]} + \frac{d[r(t)]}{d[\mathbf{w}_i^l(t)]} \quad (l = 1, \ldots, L; i = 1, \ldots, N_\mathrm{S}^l) \tag{45}$$

összefüggést, és az approximációs illetve regularizációs tagokra kapott eredményeinket [(43) és (44) egyenlet] a

$$\mathbf{w}_i^l(t+1) = \mathbf{w}_i^l(t) - \mu_i^l(t) \cdot \frac{d[c(t)]}{d[\mathbf{w}_i^l(t)]} \quad (l = 1, \ldots, L; i = 1, \ldots, N_\mathrm{S}^l) \tag{46}$$

legmeredekebb lejtő szabályban adódik, hogy

$$\mathbf{w}_i^l(t+1) = \mathbf{w}_i^l(t) - \mu_i^l(t) \cdot \left(\delta_i^l(t) \cdot \boldsymbol{\varphi}^l(\mathbf{x}^l(t)) + 2\lambda_i^l \cdot \mathbf{w}_i^l(t)\right) \tag{47}$$

$$= (1 - 2\mu_i^l(t) \cdot \lambda_i^l) \cdot \mathbf{w}_i^l(t) - \mu_i^l(t) \cdot \delta_i^l(t) \cdot \boldsymbol{\varphi}^l(\mathbf{x}^l(t)) \tag{48}$$

$$(l = 1, \ldots, L; i = 1, \ldots, N_\mathrm{S}^l).$$

Ugyanez duális formában

$$\boldsymbol{\alpha}_i^l(t+1) = \left[\left(1 - 2\mu_i^l(t) \cdot \lambda_i^l\right) \cdot \boldsymbol{\alpha}_i^l(t); -\mu_i^l(t) \cdot \delta_i^l(t)\right] \quad (l = 1, \ldots, L; i = 1, \ldots, N_\mathrm{S}^l). \tag{49}$$

Így a hálózat súlyvektorainak kifejtési tuladjonsága [(13) egyenlet] az iterációk során öröklődik. Speciálisan, a számítás végeztével kapott $\mathbf{w}_i^l$ paraméterekre is fennáll. Összefoglalva, MLK-ra létezik visszaterjesztési eljárás. A levezetett explicit és implicit eljárásokat az 1. és a 2. táblázat foglalja össze.

4. Konklúziók

Új többrétegű modell, a Többrétegű Kerceptron (MLK) elméleti leírásával foglalkoztunk. Ez a hálózat egyesítheti a Többrétegű Perceptron (MLP) és a Támasztó Vektor Gépek (SVM) előnyeit: (i) Súlyai hangolhatók és a hangolás regularizációs elvek mentén is megtehető. (ii) MLK-ban kernelek használata lehetséges. (iii) Az MLK hálózat behangolt súlyai segítségével a hálózat kimenete gyorsan számolható. (iv) Az MLK *rejtett rétegekkel* rendelkezik és így képes lehet az SVM-ek adta partícionálásokat kombinálni. A megközelítés különböző adatbázisokon adódó előnyei és hátrányai jövőbeni kutatásaink tárgyát képezi.

Hivatkozások

[1] N. Aronszajn: Theory of Reproducing Kernels. 68. évf. (1950), *Trans. of Am. Math. Soc.*, 337–404. p.

[2] T. Evgeniou – M. Pontil – T. Poggio: Regularization Networks and Support Vector Machines. 13. évf. (2000) 1. sz., *Advances in Computational Mathematics*, 1–50. p.

[3] S. Haykin: *Neural Networks.* New Jersey, USA, 1999, Prentice Hall.

[4] R. Herbrich: *Learning Kernel Classifiers.* 2002, MIT Press.

[5] K.-R. Müller – A. Smola – G. Rätsch – B. Schölkopf – J. Kohlmorgen – V. Vapnik: Predicting Time Series with Support Vector Machines. In *Advances in Kernel Methods* (konferenciaanyag). 1999, MIT Press, 243–254. p.

[6] B. Schölkopf – A.J. Smola: *Learning with Kernels.* Cambridge, MA, 2002, MIT Press.

[7] J. Shawe-Taylor – N. Cristianini: *Kernel Methods for Pattern Analysis.* 2004, Cambridge University Press.

[8] V. Vapnik – S. Golowich – A. Smola: *Support Vector Method for Function Estimation, Regression Estimation and Signal Processing.* Vol. 9. köt. Neural information processing systems. kiad. 1997, MIT Press, Cambridge, MA.

[9] V.N. Vapnik: *The Nature of Statistical Learning Theory.* 1995, Springer-Verlag New York, Inc.

[10] V.N. Vapnik: *Statistical Learning Theory.* 1998, Wiley, Chichester, GB.

[11] G. Wahba: Support Vector Machines, Reproducing Kernel Hilbert Spaces, and Randomized GACV. In *Advances in Kernel Methods* (konferenciaanyag). 1999, MIT Press, 69–88. p.