UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO CURSO DE ENGENHARIA DE COMPUTAÇÃO

Bruno Fernandes de Lima Santos

Relatório de atividade prática 5: Classificação de imagens com Redes Neurais Artificiais

Bruno Fernandes de Lima Santos

Relatório de atividade prática 5: Classificação de imagens com Redes Neurais Artificiais

Relatório de projeto referente à atividade prática 5, da disciplina de Inteligência Artificial, curso de Engenharia de Computação, na Universidade Federal do Mato Grosso.

Prof. Dr. Raoni F. S. Teixeira

RESUMO

O documento descrição detalhada sobre apresenta uma projeto,

desenvolvimento, treinamento e teste de uma Rede Neural Artificial para a

classificação de imagens contendo dígitos manuscritos de 0 a 9. Treinamento e teste

foram executados com uma amostra contendo 5000 destas imagens e utilizando-se da

técnica de validação cruzada. Experimentos utilizando a rede também foram

executados, de forma a testar sua funcionalidade.

Palavras-chave: RNA. Redes. Neurais. Classificação.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
2	MÉTODOS EMPREGADOS	3
2.1	Implementação e arquitetura da RNA	3
2.1.1	Função de limiar (threshold)	4
2.1.2	Predição e hipótese (feed forwarding)	5
2.1.3	Função de custo J e regularização	6
2.1.4	Backpropagation: obtendo o vetor gradiente de J	7
2.2	Experimentos com a RNA	10
2.2.1	Teste de implementação	10
2.2.2	Treinamento e avaliação de acurácia	10
2.2.3	Obtendo o melhor parâmetro lambda	11
3	RESULTADOS E DISCUSSÃO	12
3.1	Experimentos com a RNA	12
3.1.1	Teste de implementação	12
3.1.2	Treinamento e avaliação de acurácia	13
3.1.3	Obtendo o melhor parâmetro lambda	15
4	CONCLUSÃO	17

1 INTRODUÇÃO

Redes neurais artificiais (RNAs) são um tipo de classificador paramétrico nãolinear, isto é, tratam de problemas de classificação onde os dados não necessariamente são linearmente separáveis. Atualmente são o tipo de classificador mais utilizados no mundo, sendo amplamente utilizadas na constituição de modelos de classificação multiclasse (não-binário).

A problemática deste trabalho é o desenvolvimento, treinamento e teste de uma RNA capaz de analisar dígitos manuscritos, armazenados em pequenas imagens de dimensão 20×20 pixels, e mapeá-los corretamente ao seu respectivo valor numérico. Por exemplo, na Figura 1.1 a RNA elaborada deve classificar tal imagem como o dígito "6".



Figura 1.1: Exemplo de dígito manuscrito classificado pela RNA.

A base de dados contendo tais imagens, como as exibidas nas Figura 1.1 e Figura 1.2, é uma pequena amostra proveniente da base de dados do MNIST ¹ de dígitos manuscrito. Ao todo 5000 imagens são utilizadas para treinamento e teste da rede neural desenvolvida neste experimento.

Naturalmente, como em qualquer modelo de classificação, erros ocorrerão. Sendo assim, o objetivo deste projeto é treinar a rede tal que a mesma possua uma acurácia de classificação relativamente alta (considere como alta uma acurácia superior a 90%). Mais detalhes sobre o treinamento da rede e os métodos de otimização utilizados estão contidos na seção 2.

MNIST. Disponível em: http://yann.lecun.com/exdb/mnist/. Acesso em: 11 abr 2017.

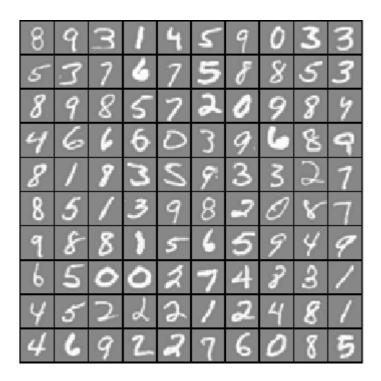


Figura 1.2: Cem imagens de exemplo de dígitos manuscritos.

Em seguida alguns experimentos são realizados com a RNA implementada, onde alguns parâmetros são alterados e testados. Os experimentos são descritos na seção 2 deste documento e os resultados são discutidos na seção 3.

2 MÉTODOS EMPREGADOS

Foi utilizado o software Matlab[™] (versão R2017a) como plataforma de desenvolvimento da RNA, junto ao pacote de ferramentas Statistics and Machine Learning Toolbox, que pode ser baixado da central de downloads do Matlab[™]. Foi também utilizada a função de otimização fmincg ², que utiliza a função de custo e seu vetor gradiente para obter o mínimo global do custo, similar ao Algoritmo do Gradient Descent.

2.1 Implementação e arquitetura da RNA

A arquitetura da RNA aqui implementada constitui-se de três camadas e, consequentemente, tem-se duas matrizes de parâmetros entre as camadas.

Sejam $A^{(l)}$ a matriz que denota os valores de saída da l-ésima camada e $\Theta^{(l)}$ a matriz dos parâmetros da rede, e que faz a conversão de valores entre as camadas l e l+1. A camada de entrada $A^{(1)}=X$ recebe cada um dos pixels de uma determinada imagem mais o valor de viés 1, totalizando 401 valores de entrada, isto é, $X=(1,x_1,x_2,...,x_{400})$ é o vetor contendo os valores da entrada. A segunda camada $A^{(2)}$ possui 25 unidades mais o viés 1, e recebe os dados "filtrados" da camada de entrada através da multiplicação com a matriz de parâmetros $\Theta^{(1)} \in \mathbb{R}^{401 \times 26}$. A terceira e camada final da rede, $A^{(3)}$, possui 10 unidades (cada uma representando um dígito na faixa de 0 a 9) e recebe os dados da camada anterior pelo parâmetro $\Theta^{(2)} \in \mathbb{R}^{26 \times 10}$. A tabela a seguir resume a arquitetura utilizada na implementação desta RNA.

Componente	Notação(ões)	Dimensão
Camada de entrada	$A^{(1)}, X$	401
Camada intermediária	$A^{(2)}$	26
Camada final	$A^{(3)}, h_{\Theta}$	10
Parâmetros de pesos 1	$\Theta^{(1)}$	25×401
Parâmetros de pesos 2	$\Theta^{(2)}$	10×26

Tabela 2.1: Arquitetura da RNA.

Note que a entrada é um vetor de 401 unidades e a saída da rede é um outro vetor de 10 unidades. Dado que as operações da rede são apenas multiplicações de matrizes, é possível receber como entrada uma amostra de imagens em formato matricial $X \in \mathbb{R}^{N \times 401}$, onde N é o número de imagens da amostra (uma imagem em cada vetor linha da matriz). Assim, a rede pode processar de uma vez uma amostra contendo N imagens e devolver uma matriz $h_{\Theta} \in \mathbb{R}^{N \times 10}$ contendo as respectivas N respostas. Consequentemente, a dimensão da camada intermediária também muda, sendo agora $N \times 26$.

2.1.1 Função de limiar (threshold)

Uma função de soft threshold foi utilizada na saída de cada neurônio da rede. Trata-se da função sigmoide σ , definida como:

$$\sigma(Z) = \left\{ \frac{1}{1 + e^{-z_{i,j}}} \right\}_{i,j}, \forall z_{i,j} \in Z$$

$$(2.1)$$

Observe pela notação acima que, caso Z seja uma matriz (ou mesmo um vetor), a função sigmoide é aplicada em cada um de seus elementos, logo, $\dim(\sigma(Z)) = \dim(Z)$.

```
function g = sigmoid(z)
g = 1.0 ./ (1.0 + exp(-z));
end
```

Código 2.1: Função sigmoid.

2.1.2 Predição e hipótese (feed forwarding)

A função de predição é trivial em qualquer RNA. É o resultado de fato da classificação de um determinado exemplo X, com base no cálculo realizado pela função de hipótese.

$$\operatorname{pred}(X) = k \mid X_k = \max(h_{\Theta}(X)) \tag{2.2}$$

Temos que $h_{\Theta}(X)$ (a.k.a. hipótese) é o resultado da última camada da rede. Assim, a função devolve um escalar que corresponde ao índice do vetor $h_{\Theta}(X)$ com a maior probabilidade de ser igual a 1. Esta probabilidade é o resultado da aplicação do soft thresholding, que é o último passo realizado pela rede (ver Código 2.3).

```
function p = predict(Theta1, Theta2, X)
[~, p] = max(hyp(Theta1, Theta2, X), [], 1);
p = p';
end
```

Código 2.2: Função predict.

A transposição do vetor p ao final da função serve para corrigir o resultado da operação anterior, onde o vetor resultante acaba sendo um vetor linha (lembre-se que cada linha de X contém um exemplo, logo, $\operatorname{pred}(X)$ deve ser um vetor coluna onde cada uma de suas linhas classifica uma linha de exemplo de X).

O cálculo da hipótese $h_{\Theta}(X)$ é obtido através das seguintes operações, levando em conta a arquitetura desta RNA: $h_{\Theta}(X) = A^{(3)}$, onde cada camada $A^{(l)}$ tem seus valores calculados através da seguinte recorrência.

$$A^{(l)} = \begin{cases} \sigma(\Theta^{(l-1)}A^{(l-1)}) & \text{se } l \neq 1\\ X & \text{se } l = 1 \end{cases}$$
 (2.3)

Vale ressaltar que a equação acima presume que os respectivos valores de viés já estão inclusos nos $\Theta^{(l)}$ (sendo assim, a primeira coluna de $A^{(l)}$ é constituída de

valores 1, exceto quando esta é a camada de saída $A^{(3)}$ da rede). Com base nesta definição temos o algoritmo para obtenção da hipótese.

```
function [ A3, A2, A1, Z3, Z2 ] = hyp( Theta1, Theta2, X )
A1 = [ones(1, size(X, 1)) ; X'];
Z2 = Theta1*A1;
A2 = [ones(1, size(Z2, 2)) ; sigmoid(Z2)];
Z3 = Theta2*A2;
A3 = sigmoid(Z3);
end
```

Código 2.3: Função de hipótese.

Note que valores de viés (ou bias) já estão incluídos nas matrizes de $\Theta^{(1)}$ (Theta1) e $\Theta^{(2)}$ (Theta2) e, por isso, há a inclusão das colunas de 1 nas camadas inicial e intermediária da rede. As múltiplas saídas da função de hipótese acima são utilizadas posteriormente durante a otimização do custo (erro) da RNA com o Algoritmo Backpropagation.

2.1.3 Função de custo J e regularização

A função de custo calcula o erro total da rede dado o parâmetro Θ . A seguir tem-se a definição de uma função de custo J com regularização.

$$J(\Theta) = (C + R)(\Theta) \tag{2.4}$$

Onde C é o custo bruto da rede e R é a regularização da rede (prevenindo sobreajuste, ou *overfitting*, dos dados). Ambos são definidos como:

$$C(\Theta) = \frac{1}{m} \sum_{i} \sum_{k} \left(-y_i^k \log(h_{\Theta}(X_i)_k) - (1 - y_i^k) \log(1 - h_{\Theta}(X_i)_k) \right)$$
 (2.5)

$$R(\Theta) = \frac{\lambda}{2m} \left(\sum_{i} \sum_{j} (\theta_{i,j}^{(1)})^2 + \sum_{i} \sum_{j} (\theta_{i,j}^{(2)})^2 \right), \forall \theta_{i,j}^{(l)} \in \Theta^{(l)}$$
 (2.6)

Onde λ (lambda) é o peso atribuído à regularização da RNA, m é a quantidade de exemplos da amostra e X_i é o i-ésimo exemplo. A seguir temos um pedaço de código da função de custo, que calcula o custo J definido na equação 2.4.

Código 2.4: Parte da função de custo (com a regularização).

A variável num_label acima é igual à quantidade de rótulos (ou classes) possíveis que, neste caso, vale 10. Note que, na regularização, a primeira coluna de $\Theta^{(1)}$ e $\Theta^{(2)}$ são descartadas. Isto porque tais colunas correspondem aos valores de viés de cada vetor linha de $\Theta^{(l)}$ e não devem ser incluídos nos cálculos da regularização.

2.1.4 Backpropagation: obtendo o vetor gradiente de J

Para a otimização da acurácia da rede, é necessário obter o vetor gradiente do custo, ∇J , de forma a minimizar o erro. O algoritmo responsável pela obtenção de ∇J é o Algoritmo *Backpropagation*, que foi empregado aqui com base na arquitetura descrita pela Tabela 2.1.

Para o Algoritmo Backpropagation, os exemplos são preditos pela rede (método de *feed forwarding*). A partir daí o erro da predição é calculado na última camada e propagado para trás nos cálculos dos erros das camadas anteriores.

Sejam $\delta^{(l)}$ o erro acumulado na $l\text{-}\acute{\text{e}}\text{sima}$ camada. Temos então que:

$$\delta^{(3)} = A^{(3)} - Y \tag{2.7}$$

Onde Y é o resultado de fato do(s) exemplo(s) e $A^{(3)}$ contém os respectivos valores preditos. Então, os erros das camadas anteriores são calculados da seguinte forma:

$$\delta^{(2)} = \left(\left(\Theta^{(2)} \right)^{\top} \delta^{(3)} \right) \cdot * \left(\sigma'(Z^{(2)}) \right)$$
 (2.8)

Onde σ' é a derivada da função sigmoide e $Z^{(2)}$ é o resultado de entrada da camada $A^{(2)}$ sem o viés e sem aplicação da sigmoide, isto é, $Z^{(2)} = \Theta^{(1)}A^{(1)}$. O operador .* indica multiplicação elemento a elemento das matrizes, onde, para isto, suas dimensões devem ser iguais. A derivada da sigmoide foi implementada utilizando o seguinte pedaço de código.

```
function g = sigmoidGradient(z)
s = sigmoid(z);
g = s.*(1 - s);
end
```

Código 2.5: Função de derivada (gradiente) da sigmoide.

Os erros para $\Theta^{(1)}$ e $\Theta^{(2)}$ são então acumulados e as derivadas parciais constituintes de ∇J são obtidas:

$$\Delta^{(l)} = \delta^{(l+1)} \left(A^{(l)} \right)^{\top} \tag{2.9}$$

$$\frac{\partial J}{\partial \Theta^{(l)}} = \frac{1}{m} \Delta^{(l)} \tag{2.10}$$

O algoritmo descrito pelas equações acima são implementados pelo seguinte pedaço de código.

Código 2.6: Algoritmo Backpropagation (sem regularização).

A seguir temos o código que implementa a regularização de $\frac{\partial J}{\partial \Theta^{(1)}}$ e $\frac{\partial J}{\partial \Theta^{(2)}}$.

```
if lambda ~= 0,
   R1 = (lambda/m)*Theta1;
   R2 = (lambda/m)*Theta2;
   R1(:, 1) = zeros(size(R1, 1), 1);  % Descarta o viés de Theta1
   R2(:, 1) = zeros(size(R2, 1), 1);  % Descarta o viés de Theta2
   Theta1_grad = Theta1_grad + R1;
   Theta2_grad = Theta2_grad + R2;
end
```

Código 2.7: Regularização do grad J.

Note que as colunas de viés foram substituídas por zeros. Assim, as somas que ocorrem em seguida não levam em conta a regularização do viés.

Por fim, ∇J é acumulado pela seguinte linha de código, resultante em um enorme vetor coluna. Este gradiente é utilizado pela função fminc
g para obter o mínimo da função de custo.

```
grad = [Theta1_grad(:) ; Theta2_grad(:)];
```

Código 2.8: Obtenção de grad J após Backpropagation.

2.2 Experimentos com a RNA

Alguns experimentos com a RNA foram realizados a fim de testar sua funcionalidade e sua acurácia. Os resultados de todos os experimentos são listados e discutidos em subseções da seção 3 de respectivo nome.

2.2.1 Teste de implementação

Um pequeno teste foi executado para testar a implementação dos algoritmos de predição, custo e gradiente do custo. Para isto, foi fornecido pelo professor da disciplina um script que realiza esse teste. Devido ao tamanho do código de tal script, a exibição deste será omitida aqui. Uma amostra de valores de $\Theta^{(1)}$ e $\Theta^{(2)}$ também foi fornecida para testar a implementação do custo J.

Um algoritmo para obtenção de ∇J de forma analítica também foi fornecido e executado, e os resultados de ambos algoritmos (analítico e o Backpropagation) foram comparados. Para que a implementação do Backpropagation esteja correta, foi definido que a diferença relativa entre os dois algoritmos (isto é, a diferença entre os resultados) deveria ser inferior a 10^{-9} .

2.2.2 Treinamento e avaliação de acurácia

O treinamento da rede ocorre da seguinte forma: Inicia-se com valores aleatórios para $\Theta^{(1)}$ e $\Theta^{(2)}$. Em seguida, um ponteiro da função de custo é passado como parâmetro para a função fmincg, chamada para a otimização do custo (note que, para que isto ocorra, a função de custo deve devolver tanto o valor do custo como seu vetor gradiente). Um dos parâmetros de fmincg é o número de iterações que a função fará para aproximar J do mínimo global. A fim de se evitar o overfitting, o método de validação cruzada (k-fold) foi empregado no conjunto de dados X, cujo parâmetro k=3 foi escolhido (k é o número de separações entre treinamento e teste que a validação cruzada faz). Além disso, foi escolhido neste experimento $\lambda=2$ para a regularização.

2.2.3 Obtendo o melhor parâmetro lambda

Durante o treinamento da rede deve-se levar em conta qual o valor do parâmetro λ na regularização do modelo (equação 2.6). Um λ muito pequeno significa pequeno peso para a regularização, o que pode acarretar em *overfitting*, enquanto um λ muito grande pode implicar em *underfitting*. Para isto, a seguinte amostra Λ , contendo diversos valores de λ escolhidos arbitrariamente, foi testada e os resultados foram analisados, também utilizando validação cruzada.

$$\Lambda = \left\{0, 10^{-6}, 1, 2, 3, 4, 10, 10^{3}, 10^{6}\right\} \tag{2.11}$$

O que ocorre quando o modelo não é regularizado ($\lambda=0$)? E quando o peso atribuído à regularização é exageradamente alto? Os resultados serão discutidos na próxima seção.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 Experimentos com a RNA

Os resultados de cada experimento serão exibidos aqui da melhor forma encontrada.

3.1.1 Teste de implementação

O script fornecido, bem como a amostra contendo os parâmetros $\Theta^{(l)}$, foi executado e parte de seu resultado é exibido na imagem a seguir, em impressão da tela de terminal de comandos do Matlab.

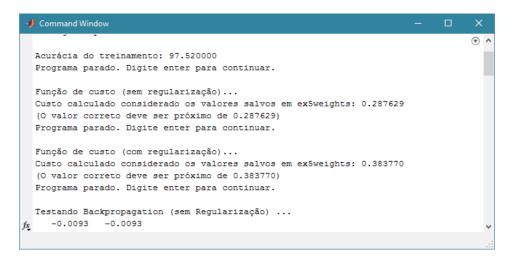


Figura 3.1: Parte da saída do script de testes, exibida no terminal do Matlab.

Observa-se que os valores de custo (com ou sem regularização) são idênticos aos seus valores calculados de forma teórica, o que mostra que a implementação do custo J está correta.

Em seguida é testado a implementação do Algoritmo Backpropagation. Dois testes foram executados: um desconsiderando a regularização ($\lambda = 0$) e outro considerando a regularização $\lambda = 3$. Os resultados são resumidos na tabela a seguir.

Algoritmo testado	Diferença relativa	
Backpropagation sem reg.	$2.3671\mathrm{e}{-11}$	
Backpropagation com reg.	$2.2768 \mathrm{e}{-11}$	

Tabela 3.1: Resultados do teste de validação do Backpropagation.

Como o objetivo era obter uma diferença relativa inferior a 10^{-9} , vemos que, de acordo com os resultados deste experimento, a implementação do Backpropagation também está correta.

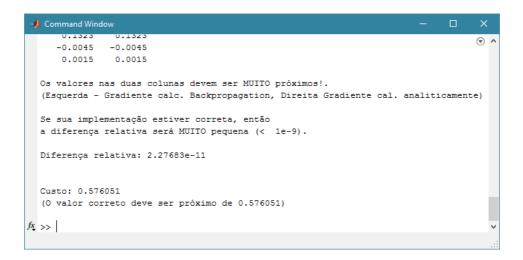


Figura 3.2: Parte da saída do script de testes, com o comparativo entre os algoritmos.

Com isto, concluímos que a implementação desta RNA está correta e podemos então prosseguir com os outros experimentos.

3.1.2 Treinamento e avaliação de acurácia

Aqui foi utilizada a função fmincg para o treinamento da rede (otimização do custo). Um dos parâmetros desta função é o número máximo de iterações, isto é, o número máximo de aproximações sucessivas do valor mínimo da função na qual se quer otimizar. Neste experimento, foi definido o valor de 500 iterações para a fmincg. Em seguida, executou-se a validação cruzada com 3 subdivisões, e obtidos os respectivos custos. Alguns valores de custo e iteração estão contidos na tabela abaixo.

Iteração	Custo 1	Custo 2	Custo 3
1	$3.323328\mathrm{e}{+00}$	$3.317392\mathrm{e}{+00}$	$3.314868\mathrm{e}{+00}$
10	$1.580734\mathrm{e}{+00}$	$1.869649\mathrm{e}{+00}$	$1.916741\mathrm{e}{+00}$
50	7.292524 e-01	$7.354726\mathrm{e}{-01}$	$7.737697\mathrm{e}{-01}$
100	$6.925289 \mathrm{e}\text{-}01$	$6.876965\mathrm{e}{-01}$	$7.161133\mathrm{e}{-01}$
500	6.594349 e-01	$6.505961\mathrm{e}{-01}$	$6.731439\mathrm{e}{-01}$

Tabela 3.2: Alguns valores de custo \times iteração na otimização do custo.

Com isto, os parâmetros $\Theta^{(1)}$ e $\Theta^{(2)}$ foram otimizados e testados em cada iteração da validação cruzada, resultando nos respectivos valores de acurácia. Em seguida a acurácia média foi calculada, resultando em 93.159879 %.

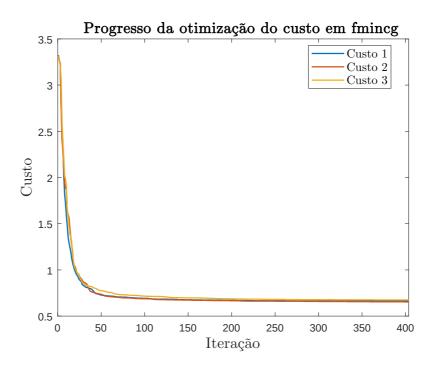


Figura 3.3: Otimização do custo.

Pelo gráfico acima vemos que não são necessárias muitas iterações para alcançar um custo relativamente baixo. Note também que as curvas convergem a um determinado valor de custo, sendo este o mínimo da função. Valores ainda menores de custo podem ser obtidos alterando-se a arquitetura da RNA, inserindo mais camadas intermediárias, por exemplo.

3.1.3 Obtendo o melhor parâmetro lambda

Neste experimento utilizamos 50 iterações da função fminc
g para cada $\lambda \in \Lambda$ (equação 2.11). A acurácia média para cada valor de λ foi então analisada.

Valor de lambda	Acurácia média (%)	
0	92.0599	
1e-6	91.9599	
1	92.3000	
2	91.9599	
3	91.5198	
4	91.5599	
10	90.7999	
$1\mathrm{e}{+3}$	9.9600	
$1\mathrm{e}{+6}$	9.9600	

Tabela 3.3: Acurácia do modelo em função do lambda.

Pelos resultados da tabela acima podemos inferir que não houve overfitting quando desconsideramos a regularização do modelo. Contudo, para valores de λ muito grandes, ocorreu underfitting, comprometendo sua acurácia. Note também que a acurácia para $\lambda=3$ foi ligeiramente inferior à acurácia medida no experimento anterior (seção 3.1.2) devido ao número reduzido de iterações neste experimento. Conclui-se então que o valor ótimo, para este experimento e para esta faixa de valores para λ (amostra Λ), é $\lambda=1$.

Algo interessante ocorre quando visualizamos o gráfico do custo médio do modelo a cada iteração e a cada valor de λ . O underfitting do modelo é visível quando aumentamos demasiadamente o valor de λ (ver Figura 3.4).

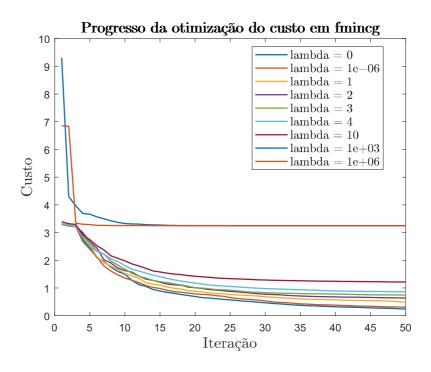


Figura 3.4: Otimização do custo para diversos valores de lambda.

Analisando os dados contidos na Tabela 3.3 e na Figura 3.4, vemos que a função de custo possui melhores resultados quando $\lambda=0$ ou $\lambda=10^{-6}$ mas a melhor acurácia ocorre quando $\lambda=1$, possivelmente sendo indício de um leve overfitting (lembre-se que o cálculo do custo ocorre durante a etapa de treinamento da rede). Note também que o overfitting do modelo não é tão grande possivelmente devido ao pequeno conjunto de dados disponível (5000 imagens). Na validação cruzada, a cada k-ésima iteração temos $\frac{5000}{k}$ imagens para testarmos o modelo e $\frac{5000(k-1)}{k}$ imagens para seu treinamento. Com k=3 temos um equilíbrio entre um conjunto de testes não muito reduzido e uma quantidade suficiente de validações. Contudo, a quantidade de dados brutos de 5000 imagens continua sendo um conjunto pequeno para visualização de sobreajustes.

4 CONCLUSÃO

A construção de uma RNA com uma acurácia suficiente para um dado problema depende de alguns fatores: sua arquitetura, contendo um número suficiente de camadas intermediária e parâmetros $\Theta^{(l)}$ para "filtrarmos" mais os dados, o número de passos de otimização (neste trabalho, o número de iterações da função de otimização fmincg) e a quantidade de dados disponíveis para treinamento e teste, onde uma maior quantidade de dados privilegia a acurácia final do modelo.

Com todo o material disponível, foi possível construir uma RNA com acurácia superior a 90 % conforme proposto, e com os experimentos realizados foi possível obter parâmetros otimizados para a regularização do modelo. Foi escolhido a técnica de validação cruzada para avaliação do modelo, embora a técnica de bootstrap também poderia ser utilizada sem prejuízos de avaliação.