Introdução às Redes Neuronais

Um Percurso da Teoria à Prática

Diogo Nuno Freitas diogo.freitas@staff.uma.pt

Inteligência Artificial

11 de janeiro de 2022



Motivação













O que é uma porta? (cont.)

Vamos **desenvolver um algoritmo** para detectar o objecto *porta*.

```
def is_door(object):
    if object.has_handle():
        if object.has_keyhole():
            if object.shape == 'square':
                 if object.height >= 2 and object.width >= 0.8:
                 return True
    return False
```

Este algoritmo segue o paradigma da programação tradicional:











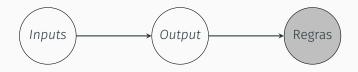




O que é uma porta? (cont.)

Nesses exemplos, o nosso algoritmo **não vai retornar a resposta** correcta.

Uma solução (a mais recomendada) passa por utilizar aprendizagem automática:



Permite um sistema aprender com a experiência, i.e., o sistema escreve automaticamente as regras.

As **redes neuronais artificiais** podem ser usadas para **atingir a aprendizagem automática** de um sistema.

Agenda

- 1. Introdução
- 2. Redes Neuronais Artificiais
- 3. Forward Propagation
- 4. Backpropagation
- 5. Classificação vs. Regressão
- 6. Overfitting vs. Underfitting
- 7. Algumas Regras de Polegar
- 8. Unsupervised Learning
- 9. Pipeline Geral

Introdução

Introdução

Onde estamos no panorama da Inteligência Artificial?



As **Redes Neuronais Artificiais (RNAs)** foram criadas para **permitir que as máquinas** se comportem como **agentes inteligentes**.

Elas *imitam* a forma de como os nossos **neurónios se interconectam**, bem como **forma de como nós aprendemos—inferência indutiva**.



Figura 1: Rede neuronal biológica (esquerda) e rede neuronal artificial (direita).

McCulloch e Pitts são considerados os pais das RNAs.

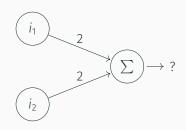
De acordo com este autores, os neurónios faziam **uma soma ponderada (w) das suas entradas (i)** para implementar qualquer função lógica.

Nos finais dos anos 50 e começo dos anos 60, **Rosenblatt introduziu** o perceptrão.

Os perceptrões faziam uma **soma ponderada** das suas entradas, mas o *output* (ŷ) era binário, de tal forma que:

$$\hat{y} = \begin{cases} 0, \text{ se } \sum_{j} w_{j} i_{j} \leq \text{limiar,} \\ 1, \text{ caso contrário.} \end{cases}$$
 (1)

Exemplo (Calcular o output de um perceptrão:)



Primeiro caso:
$$i_1 = i_2 = 4$$

$$\sum_{j=1}^{2} w_j i_j = w_1 i_1 + w_2 i_2$$
$$= 2 \times 1 + 2 \times 1 = 4.$$

Se considerarmos um limiar de 2, os *outputs* vêm:

Segundo caso: $i_1 = 1$ e $i_2 = 0$, obtemos 2. Terceiro caso: $i_1 = 0$ e $i_2 = 1$, obtemos 2. Quarto caso: $i_1 = i_2 = 0$, obtemos 0.

Caso	i ₁	i ₂	Output
1	1	1	1
2	1	0	0
3	0	1	0
4	0	0	0

Vamos, agora, alterar um pouco a notação, e considerar b=-limiar. Desta forma, o *output* de um perceptrão vem:

$$\hat{y} = \begin{cases} 0, \text{ se } \sum_{j} w_{j} i_{j} + b \leq 0, \\ 1, \text{ caso contrário.} \end{cases}$$
 (2)

O termo b é conhecido como bias.

Se considerarmos $\mathbf{W} = [w_1, w_2, \cdots, w_j]$ e $\mathbf{I} = [i_1, i_2, \cdots, i_j]$, a Equação (2) pode ser reescrita, de tal forma que:

$$\hat{\mathbf{y}} = \begin{cases} 0, \text{ se } \mathbf{W} \cdot \mathbf{I} + b \le 0, \\ 1, \text{ caso contrário,} \end{cases}$$
 (3)

onde · denota o produto interno.

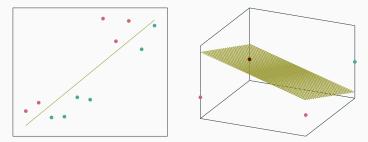


Figura 2: Recta (esquerda) e plano (direita) de regressão que se podem obter de um perceptrão.

Contudo, nós só sabemos as entradas e os outputs esperados.

É necessário ajustar automaticamente os pesos e os bias de um perceptrão—algoritmos de aprendizagem.

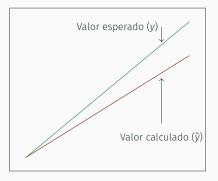


Figura 3: Visualização gráfica do cálculo do erro (E).

O erro (E) é dado por $E = y - \hat{y}$.

Este **erro é depois usado pelo algoritmo de aprendizagem** para ajustar a linha de modo a **minimizar** o erro.

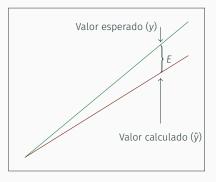


Figura 3: Visualização gráfica do cálculo do erro (E).

O erro (E) é dado por $E = y - \hat{y}$.

Este **erro é depois usado pelo algoritmo de aprendizagem** para ajustar a linha de modo a **minimizar** o erro.

Podemos escrever o output do percepção da seguinte forma:

$$y = (W + \Delta W) \cdot I, \tag{4}$$

onde Δ denota um factor de mudança.

Assim,

$$E = y - \hat{y}$$

$$= (W + \Delta W) \cdot I - W \cdot I$$

$$= (\Delta W) \cdot I,$$
(5)

e, desta forma,

$$\Delta W = \frac{E}{I}.$$
 (6)

Contudo, o mais comum é considerar a seguinte equação, onde α é conhecido como *learning rate* (ou **tamanho do passo**):

$$\Delta W = \alpha \left(\frac{E}{I}\right). \tag{7}$$

Quando foram propostos, os perceptrões despertaram um interesse significativo na comunidade científica. Isto porque:

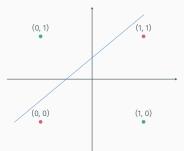
- Eram muito **semelhantes aos neurónios reais**, que só disparam quando a quantidade de excitação é alta;
- Existia um algoritmo de aprendizagem simples para ajustar os pesos.

Contudo, os perceptrões só podem ser usados em **problemas** linearmente separáveis, uma vez que a **soma ponderada é uma** função linear.

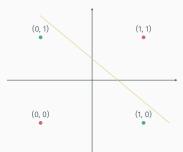
<i>i</i> ₁	i ₂	Output
1	1	0
1	0	1
0	1	1
0	0	0



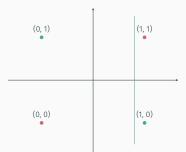
i ₁	i ₂	Output
1	1	0
1	0	1
0	1	1
0	0	0



i ₁	i ₂	Output
1	1	0
1	0	1
0	1	1
0	0	0

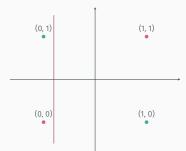


i ₁	i ₂	Output
1	1	0
1	0	1
0	1	1
0	0	0



Para exemplificar este problema, vejamos, agora, a porta lógica XOR:

	i ₂	Output
1	1	0
1	0	1
0	1	1
0	0	0



Por esta razão, **surgem as RNAs** como **modelos computacionais que resultam da conexão de neurónios simples**.

Redes Neuronais Artificiais

Redes Neuronais Artificiais

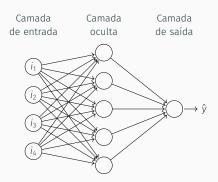


Figura 4: Arquitectura de uma rede neuronal artificial.

Numa RNA, os neurónios não têm um limiar rígido, mas gradual.

Isso significa que **pequenas mudanças nas entradas ou nos pesos de conexão levam a pequenas mudanças na saída**.

Redes Neuronais Artificiais (cont.)

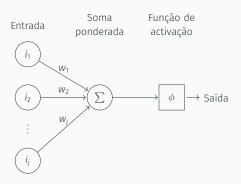


Figura 5: Arquitectura de um neurónio de uma RNA.

Os neurónios numa RNA têm duas funções:

- · Função de transferência (T = $W \cdot I$);
- Função de activação (ϕ) .

Redes Neuronais Artificiais (cont.)

(c) Unidade Linear Retificada (ReLU).

Assim, a saída de um neurónio é calculada da seguinte forma:

$$O_{j} = \phi(T_{j}). \tag{8}$$
(a) Sigmóide. (b) Tangente hiperbólica.

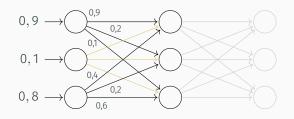
(d) Identidade.

Figura 6: Exemplos de funções de activação.

Forward Propagation

Forward Propagation

Agora que já sabemos a função de cada neurónio na rede, vamos estudar o conceito de *forward propagation*.



$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 0,9\\0,1\\0,8 \end{bmatrix}. \qquad \qquad \mathbf{W}_{\text{in_oc}} = \begin{bmatrix} 0,9&0,3&0,4\\0,2&0,8&0,2\\0,1&0,5&0,6 \end{bmatrix}.$$

Forward Propagation (cont.)

Agora, procedemos com o **produto interno** entre as matrizes **W** e **I**. Ou seja,

$$\mathbf{T}_{oc} = \mathbf{W}_{in_oc} \cdot \mathbf{I} = \begin{bmatrix} 0,9 & 0,3 & 0,4 \\ 0,2 & 0,8 & 0,2 \\ 0,1 & 0,5 & 0,6 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0,9 \\ 0,1 \\ 0,8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1,16 \\ 0,42 \\ 0,62 \end{bmatrix},$$

e, desta forma, obtém-se o valor da função de transferência.

Forward Propagation (cont.)

Contudo, não nos podemos esquecer da função de activação.

Para este exemplo, vamos considerar a função sigmóide, dada por:

$$\phi(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}. (9)$$

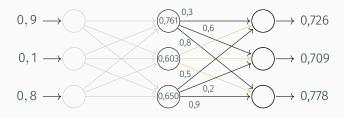
Finalmente, obtêm-se os valores de entrada da próxima camada:

$$\mathbf{O}_{\text{oc}} = \phi(\mathbf{T}_{\text{oc}}) = \frac{1}{1 + exp\left(-\begin{bmatrix} 1, 16\\ 0, 42\\ 0, 62 \end{bmatrix}\right)} = \begin{bmatrix} 0, 761\\ 0, 603\\ 0, 650 \end{bmatrix}. \tag{10}$$

$$1 O_{oc} = 1/(1 + np.exp(-T_{oc}))$$

Forward Propagation (cont.)

Este procedimento repete-se para a camada seguinte:



$$\mathbf{T}_{\text{ou}} = \begin{bmatrix} 0, 3 & 0, 7 & 0, 5 \\ 0, 6 & 0, 5 & 0, 2 \\ 0, 8 & 0, 1 & 0, 9 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0, 761 \\ 0, 603 \\ 0, 650 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0, 978 \\ 0, 889 \\ 1, 255 \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{O}_{\text{ou}} = \phi(\mathbf{T}_{\text{ou}}) = \begin{bmatrix} 0, 726 \\ 0, 709 \\ 0, 778 \end{bmatrix}.$$

Backpropagation

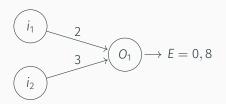
Backpropagation

O algoritmo de *backpropagation*, ou em português *retropropagação*, consiste em dois aspectos fundamentais:

- Cálculo do erro de saída e retropropagação até aos neurónios de entrada;
- Actualização dos pesos por meio de um algoritmo de optimização.

Esta abordagem treina uma RNA para problemas simples.

Como se procede com a retropropagação do erro de saída?



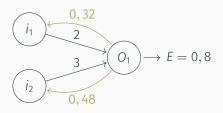
A ideia é **distribuir proporcionalmente o erro** de acordo com a contribuição de cada peso.

Neste caso,

$$e_{i_1} = \frac{w_1}{w_1 + w_2} \times E = \frac{2}{2+3} \times 0, 8 = 0,32,$$

$$e_{i_2} = \frac{w_2}{w_1 + w_2} \times E = \frac{3}{2+3} \times 0, 8 = 0,48.$$
(11)

Como se procede com a retropropagação do erro de saída?



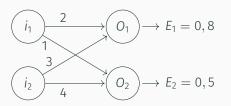
A ideia é **distribuir proporcionalmente o erro** de acordo com a contribuição de cada peso.

Neste caso,

$$e_{i_1} = \frac{w_1}{w_1 + w_2} \times E = \frac{2}{2+3} \times 0, 8 = 0,32,$$

$$e_{i_2} = \frac{w_2}{w_1 + w_2} \times E = \frac{3}{2+3} \times 0, 8 = 0,48.$$
(11)

Vejamos, agora, como fazemos quando temos mais do que um neurónio de saída:

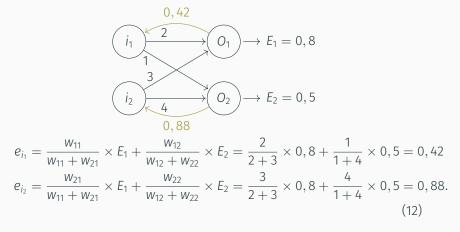


$$e_{i_1} = \frac{w_{11}}{w_{11} + w_{21}} \times E_1 + \frac{w_{12}}{w_{12} + w_{22}} \times E_2 = \frac{2}{2+3} \times 0, 8 + \frac{1}{1+4} \times 0, 5 = 0, 42$$

$$e_{i_2} = \frac{w_{21}}{w_{11} + w_{21}} \times E_1 + \frac{w_{22}}{w_{12} + w_{22}} \times E_2 = \frac{3}{2+3} \times 0, 8 + \frac{4}{1+4} \times 0, 5 = 0, 88.$$
(12)

Esta abordagem repete-se até chegarmos aos neurónios de entrada.

Vejamos, agora, como fazemos quando temos mais do que um neurónio de saída:



Esta abordagem repete-se até chegarmos aos neurónios de entrada.

Como pode uma rede aprender com os erros?

Introduzimos, agora, o conceito de gradiente de uma função.

O gradiente de uma função $f(x, y, \dots)$ é dado por:

$$\nabla f(x, y, \dots) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \\ \vdots \end{bmatrix}. \tag{13}$$

Em termos simples, o gradiente indica-nos em que **direcção devemos** *andar* **para aumentar** *f*.

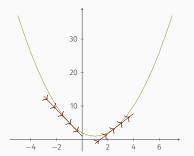
Exemplo (Cálculo do gradiente e interpretação gráfica:)

Vamos considerar

$$f(x) = (x-1)^2 + 1.$$

O gradiente dessa função é, assim, dado por:

$$\nabla f(x) = \frac{\partial f}{\partial x} = 2(x-1).$$



O gradiente é usado num algoritmo de aprendizagem chamado método da descida mais rápida.

Neste algoritmo, o gradiente é usado para determinar a direcção da descida mais rápida da função.

É necessário, contudo, ter em consideração o **tamanho do passo a adoptar** (*i.e.*, o *learning rate*).



Figura 7: Função a minimizar (esquerda) e passos do método da descida mais rápida em 2-d e em 3-d (direita).

O gradiente do erro para um determinado peso entre a última camada oculta e a camada de saída é dado por:

$$\frac{\partial E}{\partial W_{jk}} = -E_k \times O_k \times (1 - O_k) \times O_j, \tag{14}$$

onde $E_k = (y_k - \hat{y}_k)^2$, $O_k = \text{sigm\'oide}(\mathbf{w} \cdot \mathbf{i})$ e o_j é o valor de saída do neurónio anterior.

O peso é, assim, actualizado da seguinte forma:

$$w'_{jk} = w_{jk} - \alpha \times \frac{\partial E}{\partial w_{jk}},\tag{15}$$

onde α é o learning rate, tal como vimos anteriormente.

O learning rate mede a deslocação (passo) ao longo da direcção $\frac{\partial E}{\partial W_{jk}}$.

Esta técnica é considerada um técnica de supervised learning.

Exemplo (Actualizar um peso de uma RNA:)



Vamos considerar $E_1 = 1,5$ e actualizar o peso w_{11} .

O somatório vem:

$$\sum_{j=1}^{2} w_{j1} i_1 = w_{11} \times i_1 + w_{21} \times i_1 = (2 \times 0, 4) + (3 \times 0, 5) = 2, 3.$$

Aplicando a função sigmóide, sigmóide $(2,3) = 0,909 = 0_1$.

Exemplo (Actualizar um peso de uma RNA—continuação:)



Desta forma,

$$\frac{\partial E}{\partial w_{11}} = -E_1 \times O_1 \times (1 - O_1) \times o_{1 \text{ (anterior)}}$$
$$= -1, 5 \times 0,909 \times (1 - 0,909) \times 0, 4 = -0,049.$$

Juntando tudo na equação final, e considerando um *learning rate* de 0,1, temos

$$W'_{11} = W_{11} - \alpha \times \frac{\partial E}{\partial W_{11}} = 2 - 0, 1 \times (-0, 049) = 2,005.$$

Para os restantes pesos, a expressão é semelhante, e é dada por

$$\frac{\partial E}{\partial W_{jk}} = -e_k \times O_k \times (1 - O_k) \times O_j,$$

onde e_k é o erro que vem da retro-propagação.

Contudo, no caso genérico, têm-se

$$\frac{\partial E}{\partial w_{jk}} = -e_k \times \frac{\partial}{\partial w_{jk}} \phi \left(\sum_j w_{jk} \cdot o_j \right) \times o_j,$$

onde ϕ é, tal como vimos, uma qualquer função de activação diferenciável.

Na prática, o método da descida mais rápida **não é utilizado** directamente para o treino de uma RNA.

Como alternativa, podemos usar o método do **gradiente descendente estocástico** (SGD).

O SGD utiliza uma **aproximação do gradiente** da função calculado a partir de um **subconjunto de dados (***batch***) seleccionado aleatoriamente** (*mini-batch*).

Uma passagem por todos os *mini-batches* de um conjunto de dados designa-se por *época*.

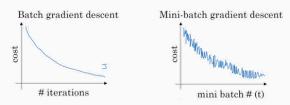


Figura 8: Diferença entre o método da descida e o gradiente descendente estocástico.

É preciso ter em atenção que:

- mini-batches com um menor número de elementos faz com que o algoritmo precise de mais iterações para convergir.
- mini-batches com um maior número de elementos faz com que o cálculo do gradiente seja mais exacto, contudo mais lento.

É, ainda, possível **obter os pesos quase-óptimos** de uma RNA **sem recorrer ao cálculo de derivadas**.

Estes métodos constituem **técnicas tradicionais de optimização**, tais como:

- · Enxame de partículas;
- · Algoritmos genéticos;
- · Arrefecimento simulado.

A vantagem destes algoritmos é que podemos **optimizar a** arquitectura de uma RNA e os seus pesos.

Forward e Backpropagation

Vamos rever:

- 1. Os neurónios de entrada recebem os valores de entrada e os transmitem para a camada oculta seguinte.
- Com base numa função matemática, cada neurónio oculto produz um valor e passa esse valor para a próxima camada oculta (se existir) ou para a camada de saída.
- 3. A camada de saída recebe as saídas da última camada oculta e calcula o valor previsto pelo modelo.
- 4. Este valor previsto é, então, comparado com o valor esperado, e o erro é usado para actualizar os pesos das conexões sinápticas, com base num algoritmo de optimização.

Classificação vs. Regressão

Classificação vs. Regressão

Classificação e regressão são problemas semelhantes.

Em termos gerais, a classificação tenta **rotular** uma combinação de características. Por outro lado, a regressão tenta estimar uma **quantidade**.

Exemplos:

- Regressão: previsão do preço de uma casa, da altura de uma pessoa, do preço de acções...
- Classificação: detecção de correio electrónico não solicitado, reconhecimento de algarismos, reconhecimento de espécies...

Apesar de problemas de classificação lidarem com varáveis discretas, a saída da rede neuronal é contínua.

Esta saída é vista como uma **probabilidade de uma dada combinação de características pertencer a uma dada classe**.

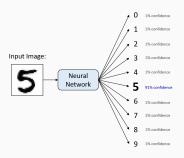
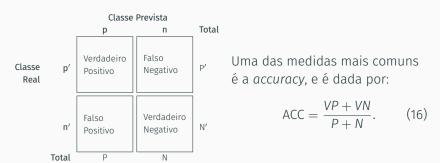


Figura 9: Exemplo de um problema de classificação.

Como podemos estimar a capacidade do nosso modelo de classificação?



Como podemos estimar a capacidade do nosso modelo de regressão?

Existem várias métricas, mas as mais comuns são o erro quadrático médio (MSE) e a raiz do erro quadrático médio (RMSE).

Estas métricas são definas da seguinte forma:

MSE =
$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} (y_k - \hat{y}_k)^2$$
 e
RMSE = $\sqrt{\text{MSE}} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} (y_k - \hat{y}_k)^2}$, (17)

onde n é o número de amostras.

Um vez que os modelos de classificação têm como valor de saída uma probabilidade, a função de activação da camada de saída tem de estar no intervalo [0,1].

Para esse caso, um exemplo de função de activação a usar é a função sigmóide.

Para o caso da **regressão**, a última camada tem de possuir a **função de activação de identidade**, de modo a não restringir a **saída da rede ao domínio da função de activação**.

Na maioria dos casos, para as camadas ocultas, qualquer função de activação poderá ser usada.

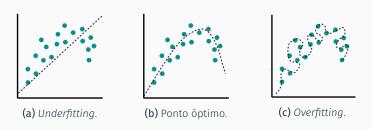
Overfitting vs. Underfitting

Overfitting vs. Underfitting

O objectivo de qualquer modelo de *machine learning* é **ter uma boa** capacidade de generalização.

Assim, surge o conceito de overfitting e de underfitting:

- Overfitting—quando o modelo ajusta-se muito bem ao conjunto de dados de treino
- Underfitting—quando o modelo n\u00e3o se ajusta ao conjunto de dados de treino, nem de teste (modelo inadequado).



Overfitting vs. Underfitting (cont.)

O ponto ótimo é ter um equilíbrio entre overfitting e underfitting.

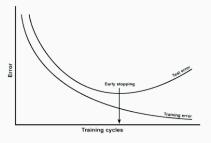


Figura 11: Ponto óptimo para paragem (antecipada) do treino.

Algumas Regras de Polegar

Algumas Regras de Polegar

O número de neurónios na camada oculta e o número de camadas não é sabido.

Existem várias **regras de polegar para escolher o número de neurónios na camada oculta**, tais como:

- $\cdot \frac{2}{3}$ do número de neurónios de entrada;
- Menos do que o dobro do número de neurónios na camada de entrada;
- $\cdot \frac{1}{10}$ do número de exemplos usados para treinar a rede.

Unsupervised Learning

Unsupervised Learning

Anteriormente, disponibilizámos à rede exemplos de mapeamento entre as entradas e as saídas.

No caso do *unsupervised learning*, esse mapeamento **não é fornecido à rede**. A rede é, assim, obrigada **a aprender a classificar os dados com base nos padrões ou nos** *clusters* **que encontrar.**

Exemplos de tarefas com unsupervised learning:

- *Clustering*: quando os dados são agrupados com base na sua semelhança. Por exemplo, as redes *self-organizing map*.
- Redução de dimensionalidade: quando, de todas as características dos dados, apenas são mantidas algumas. Por exemplo, autoencoder.

Pipeline Geral

Pipeline Geral



Vamos avançar para a parte prática!	

O https://github.com/Dntfreitas/ Dntfreitas.github.io

Bibliografia



I. Goodfellow, Y. Bengio, and A. Courville.

Deep Learning.

MIT Press, Cambridge, MA, EUA, 2016. ISBN:978-026-203-561-3.



M. A. Nielsen

Neural Networks and Deep Learning.

Determination Press, San Francisco, CA, USA, 2015. ISBN:978-026-203-561-3



A. Oliveira.

Mentes Digitais: A Ciência Redefinindo a Humanidade.

IST Press, Lisboa, Portugal, 2016. ISBN:978-989-848-160-3.



T. Rashid

Make Your Own Neural Network.

CreateSpace Independent Publishing Platform, Scotts Valley, CA, USA. 2016.

ISBN:978-153-082-660-5.

Introdução às Redes Neuronais

Um Percurso da Teoria à Prática

Diogo Nuno Freitas diogo.freitas@staff.uma.pt

Inteligência Artificial

11 de janeiro de 2022

