Introdução a Redes Neurais Artificiais T10077 – Inteligência Computacional Aplicada





Redes Neurais Artificiais: Uma Introdução Prática

Prof. Dr. Guilherme de Alencar Barreto

Depto. Engenharia de Teleinformática (DETI/UFC)

URL: <u>www.deti.ufc.br/~guilherme</u>

Email: gbarreto@ufc.br

Março/2014

Ementa





- 1. Funcionalidades do neurônio biológico
- 2. Neurônio artificial de McCulloch-Pitts (MP)
- 3. Análise geométrica do neurônio MP
- 4. Portas lógicas AND, OR e NOT
- 5. Rede Perceptron Simples (PS) e aplicações
- 6. Problemas não-linearmente separáveis e a porta lógica XOR
- 7. Implementação da porta lógica XOR via redes multicamadas
- 8. Rede Perceptron Multicamadas (MLP)
- 9. Algoritmo de retropropagação do erro (error backpropagation)
- 10. Dicas de treinamento, teste e validação da rede MLP

Material Didático





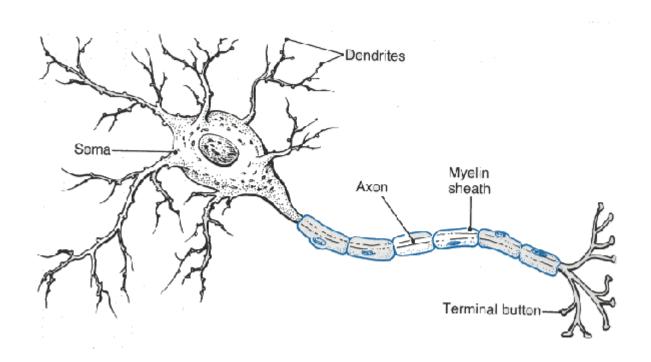
- 1. Notas de aula em PDF.
- 2. Principe, J. C., Euliano, N. R. & Levebvre, W. C. (2000). **Neural and Adaptive Systems: Fundamentals through Simulations**, 1a. Edição, John Wiley and Sons.
- 3. Apostila de Redes Neurais, PPGETI-DETI-UFC.
- 4. Tutorial do Software *NeuroSolutions*.







O neurônio é antes de tudo uma célula, mas uma célula especial. Partes: (i) dendritos, (ii) sinapses, (iii) corpo celular e (iv) axônio









- (i) dendritos Ramificações correspondentes aos canais de entrada de informação (sinais elétricos, escala mVolts).
- (*ii*) **sinapses** Pontos de contato entre neurônios onde há passagem de neurotransmissores do axônio de um neurônio para os dendritos de outro neurônio.
- (iii) corpo celular Local onde é feito o balanço energético da célula nervosa (soma das contribuições de energia).
- (*iv*) **Axônio** Canal de saída do neurônio, ou seja, caminho de propagação dos impulsos nervosos em direção a outros neurônios ou músculos.

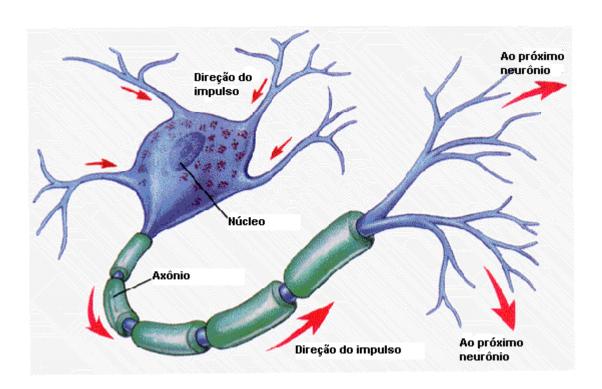






O fluxo da informação ocorre sempre no sentido:

Dendritos → Corpo Celular s → Axônio





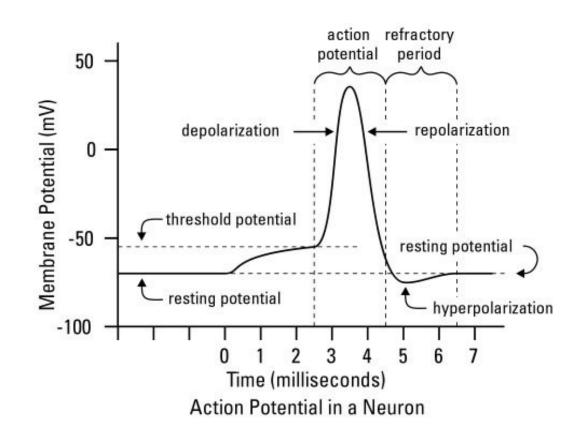




O axônio emite um impulso elétrico (potencial de ação) apenas se o balanço energético realizado no corpo celular for maior que um certo limiar. Neste caso, diz-se que o neurônio **disparou** ou está **ativado**.

Potencial de repouso: -70mV

Limiar de disparo: -55 mV



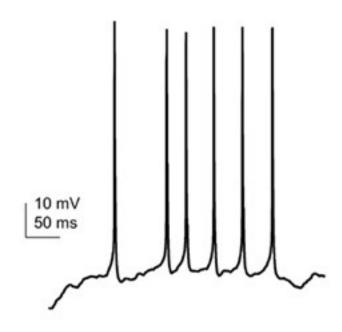






Um neurônio devidamente estimulado emite um trem de potenciais de ação ao longo de seu axônio.

A informação é então codificada na frequência dos potenciais de ação!

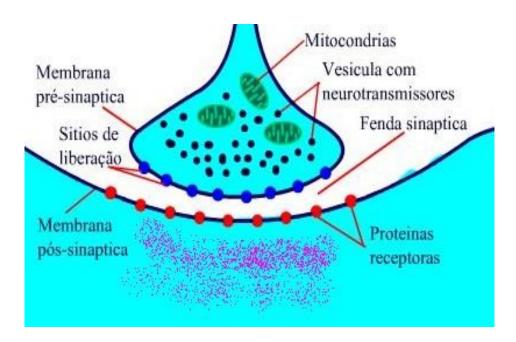








A chegada de um trem de pulso no botão sináptico localizado na região terminal do axônio provoca a liberação de transmissores na fenda sináptica.



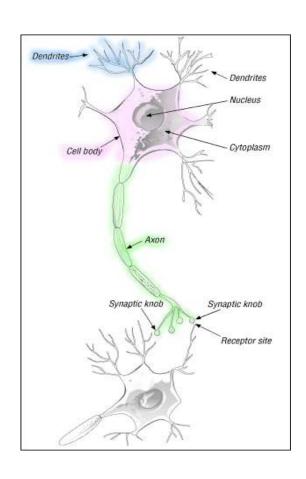
Sinapses podem ser *excitatórias* (facilitam a passagem do potencial de ação) ou inibitórias (inibem a passagem do potencial de ação).

1. O Neurônio Biológico





Neurônios podem se conectar com outros neurônios ...





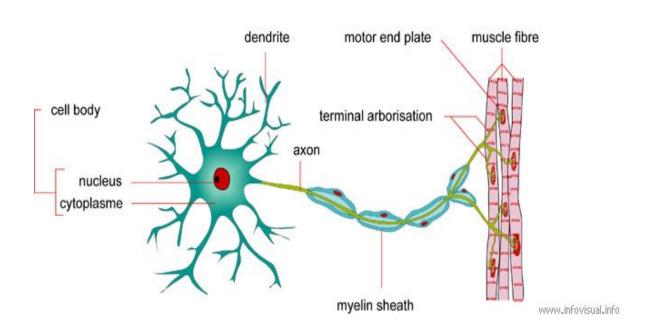
1. O Neurônio Biológico





... com os músculos diretamente ...

NEURON

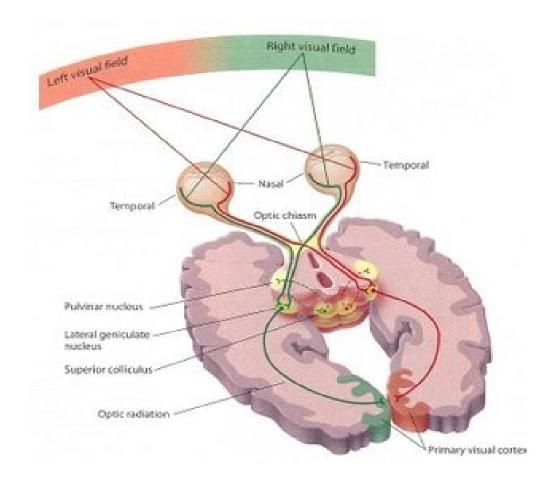


1. O Neurônio Biológico





... ou com orgãos sensoriais (e.g. visão).









Fatos Curiosos

Há cerca de 100 bilhões deles no cérebro e na coluna vertebral.

Cada neurônio tem cerca de 10.000 sinapses com outros neurônios.

A maioria deles está localizado no córtex cerebral.

O córtex existe apenas nos cérebros de mamíferos.

O córtex é identificado popularmente como massa cinzenta.

O córtex é a estrutura responsável pelas habilidades cognitivas superiores, tais como memória, raciocínio lógico, linguagem, consciência, dentre outras.







Mais Fatos Curiosos

O cérebro produz sim **novos** neurônios (e.g. hipocampo).

O tempo de propagação de um impulso no axônio é da ordem de milissegundos!

milissegundos????

Logo, a frequência de disparo de um neurônio é da ordem de kHz!

Como pode um elemento tão lento, executar tarefas tão rápido???







Consumo Energético do Cérebro Humano

O peso do cérebro é aprox. 2% do peso de uma pessoa.

Mesmo em repouso, o cérebro consome 20% de sua energia.

Assim, se o consumo médio de energia de um adulto típico é de 100W. Então o cérebro consome em média 20W.

O cérebro consome 10 vezes mais energia que o resto do corpo por grama de tecido.

Ementa





- 1. Funcionalidades do neurônio biológico
- 2. Neurônio artificial de McCulloch-Pitts (MP)
- 3. Análise geométrica do neurônio MP
- 4. Portas lógicas AND, OR e NOT
- 5. Rede Perceptron Simples (PS) e aplicações
- 6. Problemas não-linearmente separáveis e a porta lógica XOR
- 7. Implementação da porta lógica XOR via redes multicamadas
- 8. Rede Perceptron Multicamadas (MLP)
- 9. Algoritmo de retropropagação do erro (error backpropagation)
- 10. Dicas de treinamento, teste e validação da rede MLP





Modelo matemático de um neurônio biológico proposto em

W. S. McCullogh and W. Pitts (1943). "A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity", *Bulletin of Mathematical Biophysics*, vol. 5, p. 115-133.

É bom lembrar que todo modelo é apenas uma aproximação do fenômeno ou objeto real cujas funcionalidades se pretende estudar.

"All models are wrong, but some are useful."

George E. P. Box

Assim, o neurônio M-P é uma aproximação útil do neurônio real, pois serve até hoje como bloco construtivo básico de algoritmos de redes neurais.





Na construção do neurônio M-P se está interessado em modelar aspectos ligados ao **Processamento da Informação** em um neurônio biológico.

Entende-se por processamento da informação os caminhos e etapas pelas quais passam os potenciais de ação que trafegam de

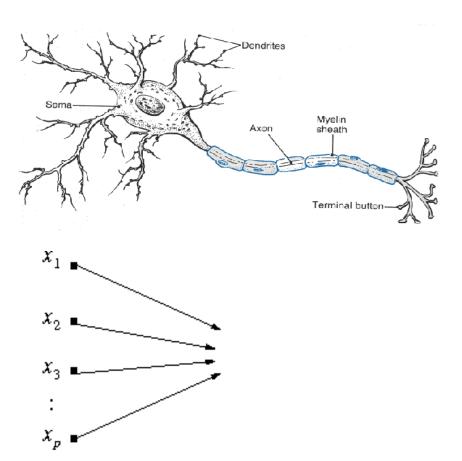
- (i) um neurônio a outro neurônio,
- (ii) receptores sensoriais a um neurônio, ou
- (iii) de um neurônio a um atuador (e.g. músculo).

Assim, devemos desenvolver modelos matemáticos que representem os dendritos, as sinapses, o corpo celular e o axônio.



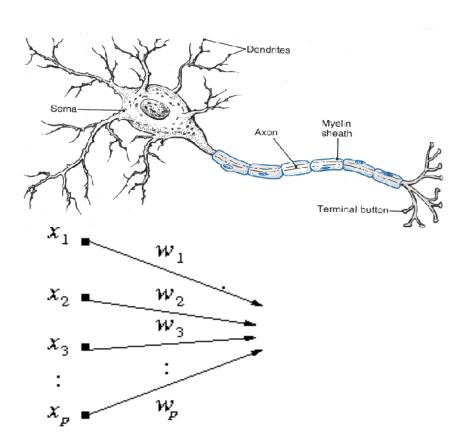


Passo 1: Cada ramo da árvore dendrítica é modelado como uma <u>linha</u> ou canal de transmissão por onde flui a informação de entrada $(x_i, j=1, ..., p)$.





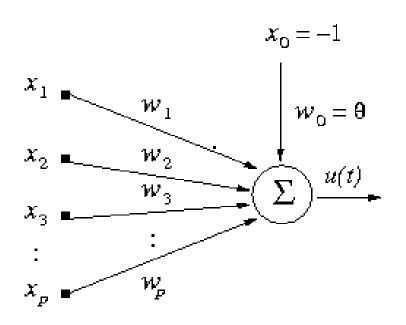
Passo 2: A força (ou eficiência) das conexões sinápticas de uma certa árvore dendrítica é modelada como um fator (peso sináptico), cujo papel é modular o fluxo de sinais passando por uma certa árvore dendrítica.







Passo 3: A função do corpo celular de realizar o balanço ou acúmulo energético é modelada por uma operação de somatório sobre as entradas moduladas pelos pesos sinápticos.



$$u = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_p x_p - \theta$$

 x_1, x_2 : entradas

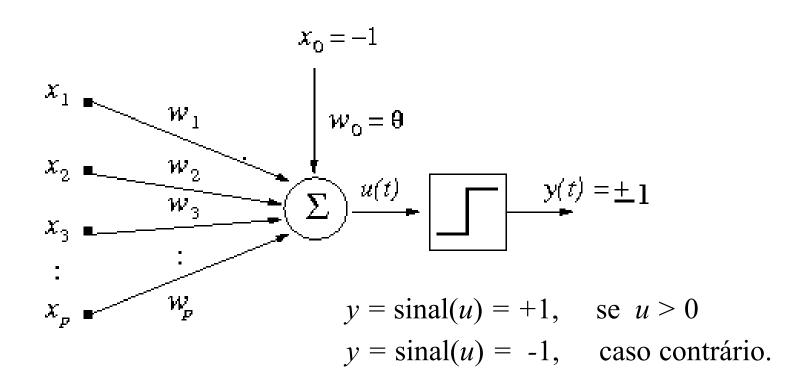
 w_1 , w_2 : pesos sinápticos

θ: limiar (bias)

u: ativação



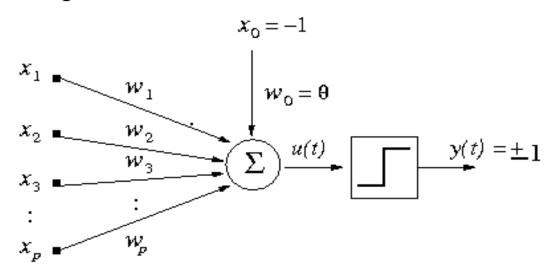
Passo 4: O axônio é modelado como uma chave ON-OFF, que indica se o neurônio respondeu ao estímulo atual. Em outras palavras, se houve ou não o envio de um potencial de ação.

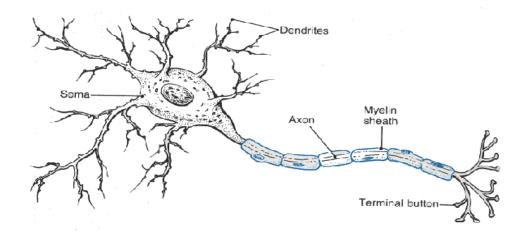






Modelo Completo do Neurônio Artificial de McCulloch-Pitts





Ementa





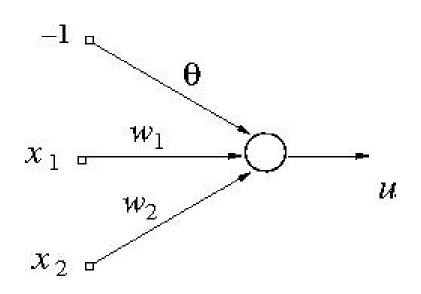
- 1. Funcionalidades do neurônio biológico
- 2. Neurônio artificial de McCulloch-Pitts (MP)
- 3. Análise geométrica do neurônio MP
- 4. Portas lógicas AND, OR e NOT
- 5. Rede Perceptron Simples (PS) e aplicações
- 6. Problemas não-linearmente separáveis e a porta lógica XOR
- 7. Implementação da porta lógica XOR via redes multicamadas
- 8. Rede Perceptron Multicamadas (MLP)
- 9. Algoritmo de retropropagação do erro (error backpropagation)
- 10. Dicas de treinamento, teste e validação da rede MLP

3. Análise Geométrica





Seja o neurônio artificial mostrado na figura abaixo.



 x_1, x_2 : entradas

 w_1 , w_2 : pesos sinápticos

θ: limiar (bias)

u: ativação

A ativação (u) do neurônio é dada por:

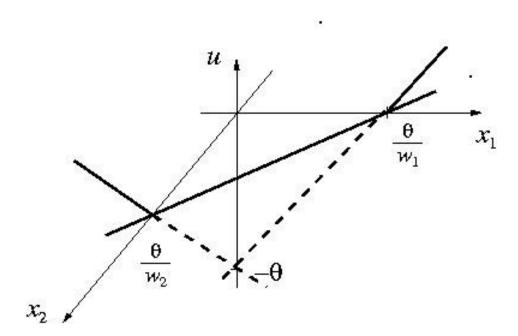
$$u = w_1 x_1 + w_2 x_2 - \theta$$
 (1)

3. Análise Geométrica





A Eq. (1) define um plano em (x_1, x_2, u) .



Obs: O tracejado indica onde o plano está abaixo do plano (x_1, x_2) .







Para fins de classificação basta trabalhar no plano (x_1, x_2) .

Isto equivale a fazer u=0 na equação do plano, ou seja:

$$u = w_1 x_1 + w_2 x_2 - \theta = 0$$

Assim, a equação da reta no plano (x_1, x_2) é dada por:

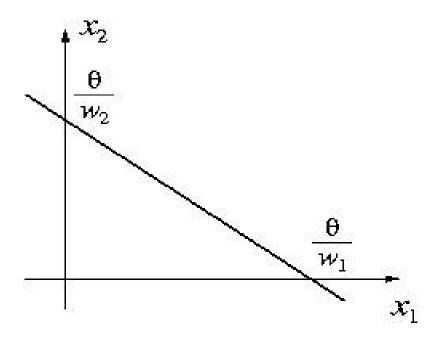
$$x_2 = -(w_1/w_2)x_1 + \theta/w_2 \tag{2}$$







A Eq. (2) define a seguinte reta em (x_1, x_2) .

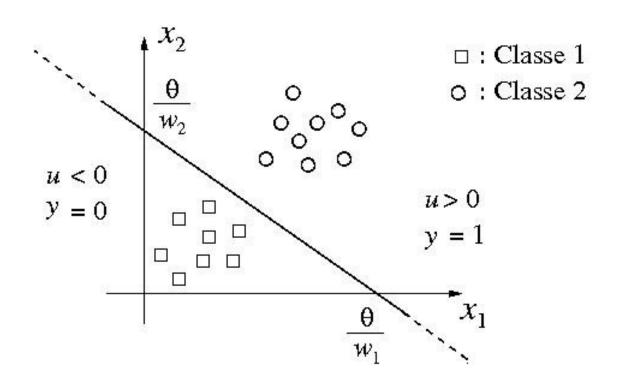








Assim, um neurônio pode ser usado para separar com eficiência duas classes que estejam bem isoladas uma da outra.



Ementa





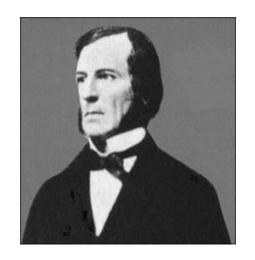
- 1. Funcionalidades do neurônio biológico
- 2. Neurônio artificial de McCulloch-Pitts (MP)
- 3. Análise geométrica do neurônio MP
- 4. Portas lógicas AND, OR e NOT
- 5. Rede Perceptron Simples (PS) e aplicações
- 6. Problemas não-linearmente separáveis e a porta lógica XOR
- 7. Implementação da porta lógica XOR via redes multicamadas
- 8. Rede Perceptron Multicamadas (MLP)
- 9. Algoritmo de retropropagação do erro (error backpropagation)
- 10. Dicas de treinamento, teste e validação da rede MLP





Qual a relação entre portas lógicas e Inteligência Artificial?

George Boole (1854). "An investigation into the Laws of Thought, on Which are Founded the Mathematical Theories of Logic and Probabilities".



George Boole (02/11/1815 - 08/12/1864). Matemático e filósofo britânico. É o criador da Álgebra Booleana, base da atual aritmética computacional.

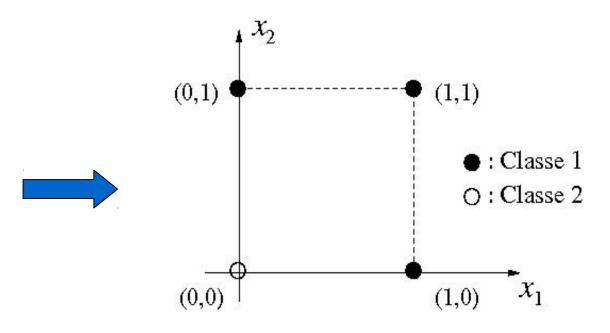




Exemplo 1: Implementando funções lógicas (AND, OR, NOT).

Representação do Problema (Função OR)

Porta OR		
x_1	x_2	у
0	0	0
0	1	1_
1	0	1
1	1	1



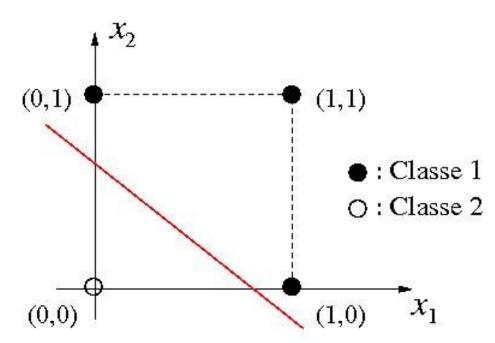




Exemplo 1 (cont.): É possível encontrar uma reta que separe os pontos da Classe 1 (y=1) dos da Classe 2 (y=0)?

Resposta:

SIM!

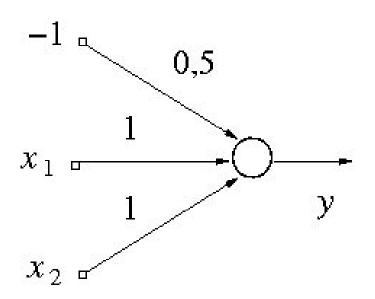


Obs: Na verdade, é possível encontrar *infinitas* retas que separam as duas classes!





Exemplo 2 : O seguinte neurônio implementa a porta OR.



$$w_1 = w_2 = 1$$
 e $\theta = 0.5$

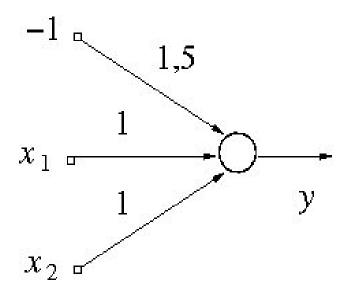
$$y = 1$$
, se $u \ge 0$.

$$y = 0$$
, se $u < 0$.





Exemplo 3 : O seguinte neurônio implementa a porta AND.



$$w_1 = w_2 = 1$$
 e $\theta = 1,5$

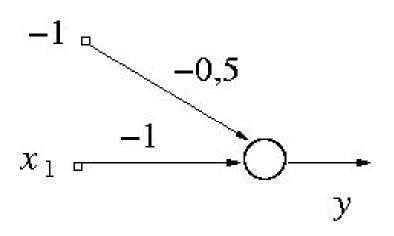
$$y = 1$$
, se $u \ge 0$.

$$y = 0$$
, se $u < 0$.





Exemplo 4 : O seguinte neurônio implementa a porta NOT.



$$w_1 = -1$$
 e $\theta = -0.5$

$$y = 1$$
, se $u \ge 0$.

$$y = 0$$
, se $u < 0$.





IMPORTANTE 1

O neurônio MP pode ser usado para implementar as portas lógicas AND, OR e NOT porque estas, do ponto de vista geométrico, podem ser interpretadas como um problema de classificação binária (duas categorias).





IMPORTANTE 2

O neurônio MP, do ponto de vista geométrico, pode ser intepretado como uma <u>reta</u> (2D), ou um <u>plano</u> (3D) ou ainda um <u>hiperplano</u> (> 3D), que é usado para separar duas categorias de dados distintas.





IMPORTANTE 3

Na implementação das portas lógicas AND, OR e NOT, os valores dos pesos e do limiar foram determinados pelo projetista com base na análise geométrica do problema.

Como fazer com que o neurônio M-P determine de forma automática os valores dos pesos e do limiar para um problema específico?





IMPORTANTE 4

Para que o neurônio M-P seja capaz de aprender sozinho a resolver um problema de classificação é necessário dotá-lo de uma <u>regra de aprendizagem</u>.

Uma regra de aprendizagem nada mais é do que uma equação que altera os valores dos pesos e do limiar em função dos erros cometidos durante a execução da tarefa de classificação.





Memorex 1

O neurônio M-P é um modelo simplificado do neurônio real.

O neurônio M-P possui p variáveis de entrada: $x_1, x_2, ..., x_p$

O neurônio M-P possui p pesos sinápticos: $w_1, w_2, ..., w_p$

O neurônio M-P possui um limiar de ativação: θ

O neurônio M-P possui uma variável de ativação: u

$$u = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_p x_p - \theta$$

O neurônio M-P possui uma variável de saída: y

$$y = \sin(u) = +1 \text{ (se } u > 0) \text{ ou -1 (se } u \le 0)$$





Memorex 2

O neurônio M-P nada mais é do que uma chave ON/OFF.

O neurônio M-P pode ser utilizado para implementar portas lógicas AND, OR e NOT.

As condições que definem a ativação (y=1) ou não (y=0 ou -1) do neurônio depende dos valores dos pesos e do limiar.

Assim, pode ser utilizado em problemas de reconhecimento de padrões que envolvam duas categorias (binários).

Ementa





- 1. Funcionalidades do neurônio biológico
- 2. Neurônio artificial de McCulloch-Pitts (MP)
- 3. Análise geométrica do neurônio MP
- 4. Portas lógicas AND, OR e NOT
- 5. Rede Perceptron Simples (PS) e aplicações
- 6. Problemas não-linearmente separáveis e a porta lógica XOR
- 7. Implementação da porta lógica XOR via redes multicamadas
- 8. Rede Perceptron Multicamadas (MLP)
- 9. Algoritmo de retropropagação do erro (error backpropagation)
- 10. Dicas de treinamento, teste e validação da rede MLP







A rede Perceptron Simples (PS) é considerada o primeiro algoritmo de redes neurais artificiais.

A rede PS foi proposta por Frank Rosenblatt em 1958.

F. Rosenblatt (1958). "The Perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain", *Psychological Review*, vol. 65, p. 386-408.

Perceptron Simples = Neurônio de M-P + Regra de Aprendizagem

A regra de aprendizagem é o mecanismo que torna a rede Perceptron Simples um dispositivo inteligente!







Para facilitar a análise as variáveis de entrada e os pesos vão ser representados como vetores de agora em diante.

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_p \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \vdots \\ w_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \theta \\ w_1 \\ \vdots \\ w_p \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \vdots \\ w_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \theta \\ w_1 \\ \vdots \\ w_p \end{pmatrix}$$

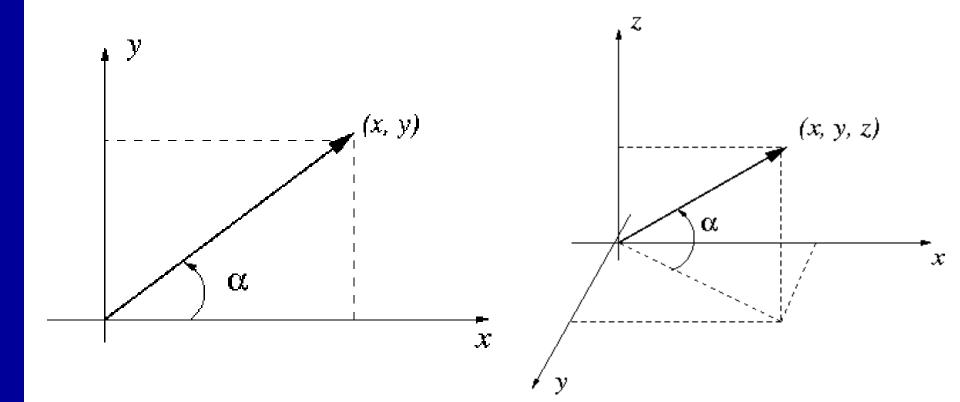






Métodos Geométricos

Um vetor é uma coordenada (ponto) em um espaço de dimensão p.

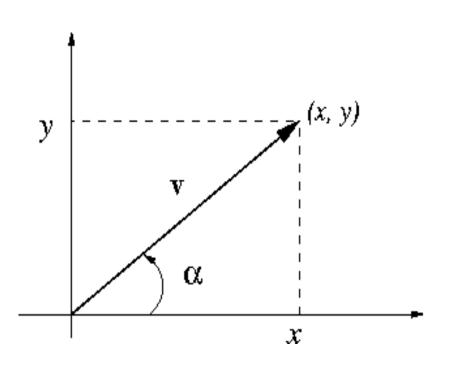








Comprimento de um Vetor em 2D



$$\|\mathbf{v}\| = \sqrt{x^2 + y^2}$$

$$x = ||\mathbf{v}|| \cdot \cos(\alpha)$$

$$y = ||\mathbf{v}|| \cdot \sin(\alpha)$$

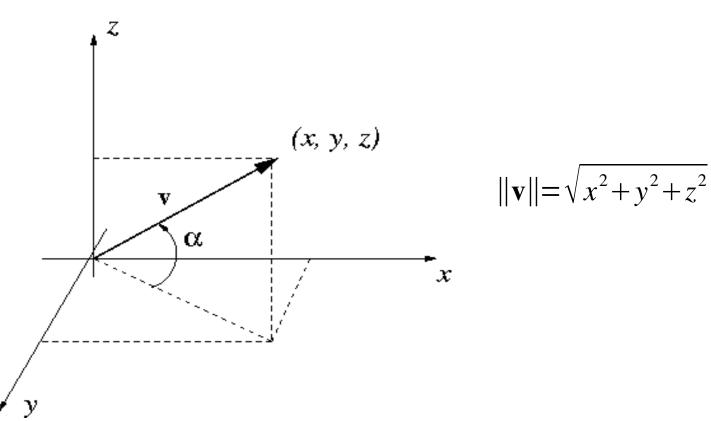
OBS: Usar teorema de Pitágoras!







Comprimento de um Vetor em 3D



OBS: Usar teorema de Pitágoras duas vezes!







Definição 1:

$$u = \mathbf{w}^T \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{w}$$

$$= w_0 x_0 + w_1 x_1 + \dots + w_p x_p$$

O produto escalar é definido como o produto de um vetor-linha por um vetor-coluna, o que equivale a multiplicar cada componente de um vetor pelo seu correpondente no outro vetor e depois somar cada produto.







Definição 2:

$$u = ||\mathbf{w}|| \cdot ||\mathbf{x}|| \cdot \cos(\alpha)$$

Alternativamente, o produto escalar pode ser definido como o produto dos comprimentos dos vetores com o cosseno do menor ângulo entre eles.

OBS: As duas definições são equivalentes! Prove!







Exemplo: Calcule o produto escalar dos 2 vetores abaixo usando as duas definições anteriores.

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Definição 1:

$$u = w_0 x_0 + w_1 x_1 = (0)(1) + (1)(1) = 1$$

Definição 2:

$$u = ||\mathbf{w}|| . ||\mathbf{x}|| . \cos(\alpha) = (1) . (\sqrt{2}) . \cos(45) = (1) . (\sqrt{2}) . (\frac{\sqrt{2}}{2}) = 1$$



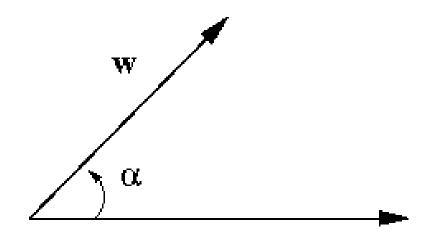




O produto escalar é uma medida de similaridade entr e vetores.

"Para vetores de comprimento fixo, quanto menor o ângulo entre eles, maior é o valor resultante do produto escalar".

Exxemplo: $0 \le \alpha \le 90^{\circ}$









Vimos que o produto escalar é uma medida de similaridade entr e vetores.

"Para vetores de comprimento fixo, quanto menor o ângulo entre eles, maior é o valor resultante do produto escalar".

O sinal do produto escalar também é um item importante na análise da orinetação entre os dois vetores.

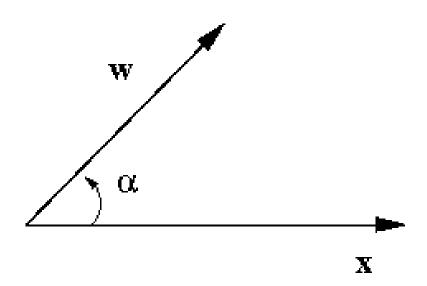
O sinal depende basicamente do ângulo entre os vetores.







Caso 1: $0 \le \alpha < 90^{\circ}$



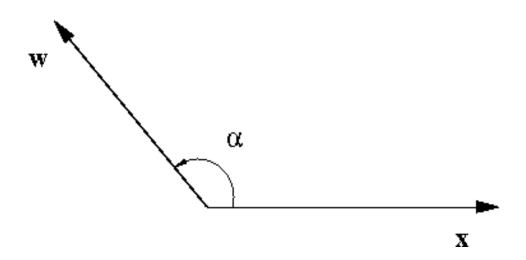
$$cos(\alpha) > 0 \implies u > 0$$
 (positivo)







Caso 2: $90^{\circ} < \alpha \le 180^{\circ}$



$$cos(\alpha) < 0 \implies u < 0 \text{ (negativo)}$$







Ativação do Neurônio M-P na Forma Vetorial

$$u = \mathbf{w}^T \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{w}$$

$$= w_0 x_0 + w_1 x_1 + \dots + w_p x_p$$

$$= w_1 x_1 + \dots + w_p x_p - \theta$$

Podemos entender a equação da ativação do neurônio M-P como:

- (i) uma reta (ou plano) que separa o espaço de entrada em dois semi-planos.
- (ii) o produto escalar do vetor de entrada (x) com o vetor de pesos (w).





Regra de Aprendizagem do Perceptron Simples

A forma vetorial da ativação (*u*) nos ajudará no processo de obtenção de uma regra de aprendizagem para o neurônio M-P.

O processo de aprendizagem consiste na modificação dos pesos e do limiar do neurônio M-P até que ele resolva o problema de interesse ou que o período de aprendizagem tenha finalizado.

A regra de aprendizagem é uma função de 2 fatores:

(i) Erro entre a saída desejada (d) e a saída gerada pela rede (y):

$$e = d$$
- y

(ii) Informação fornecida pelo vetor de entrada (x).

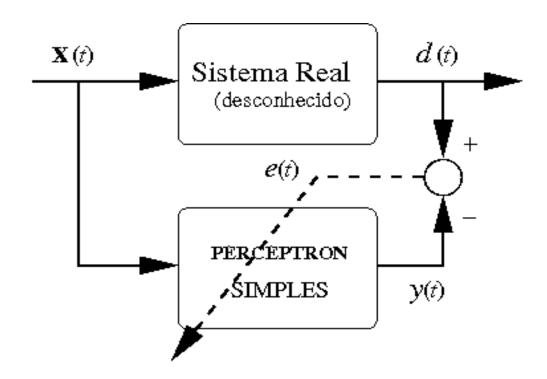






Regra de Aprendizagem do Perceptron Simples

O processo de aprendizagem, ou seja, de modificação dos parâmetros do neurônio M-P é guiado pelo erro (e) e pelo vetor de entrada (\mathbf{x}) !







Como projetar então uma regra de aprendizagem?

Uma regra de aprendizagem pode ser projetada com base em

- (i) Argumentos geométricos ou empíricos.
- (ii) Critérios de otimização de função-custo.

Em geral, uma regra de aprendizagem tem a seguinte forma:

$$\mathbf{w}(t+1) = \mathbf{w}(t) + \Delta \mathbf{w}(t)$$

 $\mathbf{w}(t) = \text{mem\'oria}$ (conhecimento atual).

 $\Delta \mathbf{w}(t)$ = incremento na memória (informação adquirida)

 $\mathbf{w}(t+1)$ = memória modificada com acrécimo de nova informação.







Do exposto em slides anteriores, podemos escrever que:

$$\Delta \mathbf{w}(t) = \mathbf{F}(e(t), \mathbf{x}(t))$$

onde *t* indica o instante de apresentação do vetor de entrada.

Vamos utilizar argumentos geométricos para obter a regra de aprendizagem do neurônio M-P.

Para isso, vamos analisar os possíveis valores que a variável erro (e) pode assumir.

Caso 1:
$$e = d - y = +1 (d = +1 e y = 0)$$

Caso 2:
$$e = d - y = -1$$
 ($d=0$ e $y=+1$)

Caso 3:
$$e = d - y = 0$$
 $(d=+1 \text{ e } y=+1)$ ou $(d=0 \text{ e } y=0)$

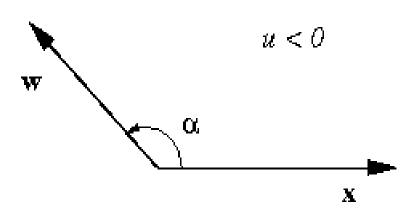


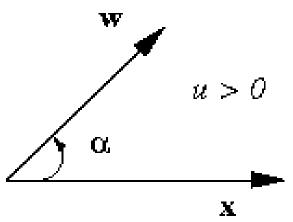


Caso 1:
$$e = d - y = +1 (d = +1 e y = 0)$$

Situação ocorrida (*u*<0, *y*=0):

Situação desejada (u>0, y=1):





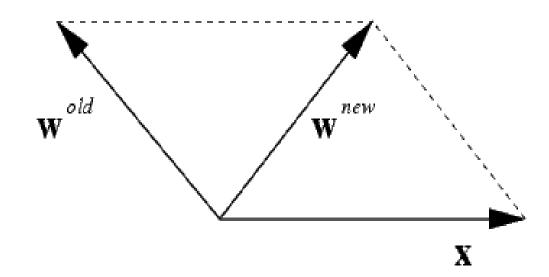






Caso 1 [e(t) = +1]: O vetor w deve ser modificado para se aproximar de x.

$$\mathbf{w}(t+1) = \mathbf{w}(t) + \mathbf{x}(t)$$



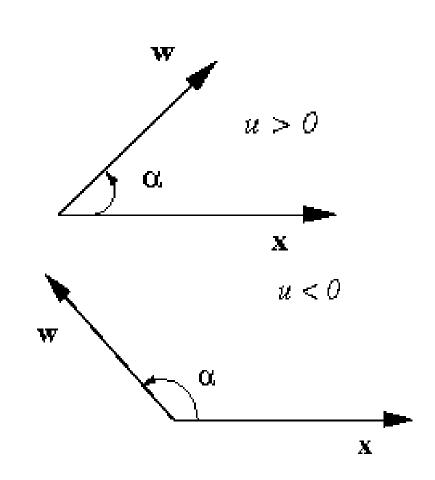




Caso 2:
$$e = d - y = -1$$
 ($d=0$ e $y=+1$)

Situação ocorrida (*u*>0, *y*=+1):

Situação desejada (u<0, y=0):



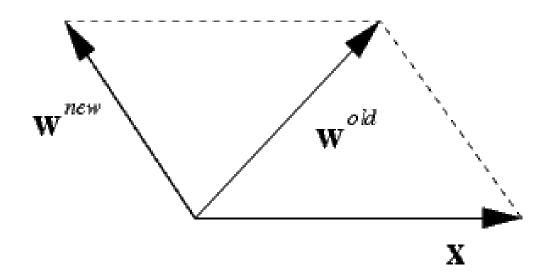






Caso 2 [e(t) = -1]: O vetor **w** deve ser modificado para se afastar de **x**.

$$\mathbf{w}(t+1) = \mathbf{w}(t) - \mathbf{x}(t)$$

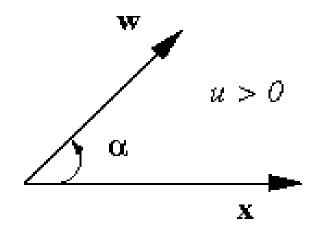






Caso 3a:
$$e = d - y = 0$$
 $(d=+1 \text{ e } y=+1)$

Situação ocorrida = Situação desejada (u>0, y=+1)



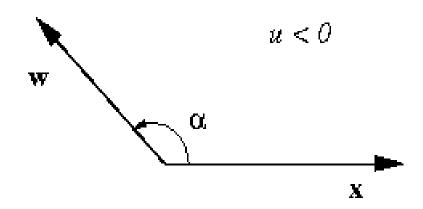
Como houve um acerto, não é preciso modificar o vetor w.





Caso 3b:
$$e = d - y = 0$$
 ($d=0$ e $y=0$)

Situação ocorrida = Situação desejada (u<0, y=0)



Como houve um acerto, não é preciso modificar o vetor w.

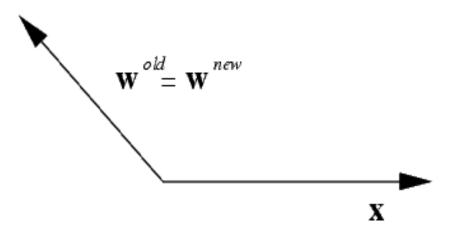




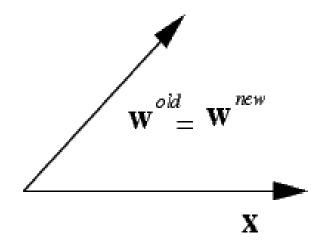
Caso 3 [e(t) = 0]: O vetor w não deve ser modificado.

$$\mathbf{w}(t+1) = \mathbf{w}(t)$$

Caso 3a



Caso 3b







Regra de Aprendizagem do Perceptron

As três equações dos slides anteriores podem ser combinadas em uma única equação que depende do er ro e do vetor de entrada x:

$$\mathbf{w}(t+1) = \mathbf{w}(t) + e(t)\mathbf{x}(t)$$

A fim de tornar o processo de ajuste do vetor w mais estável, é comum introduzir na equação anterior um fator η, chamado de <u>passo de aprendizagem:</u>

$$\mathbf{w}(t+1) = \mathbf{w}(t) + \eta e(t)\mathbf{x}(t)$$

Em que $0 < \eta << 1$.

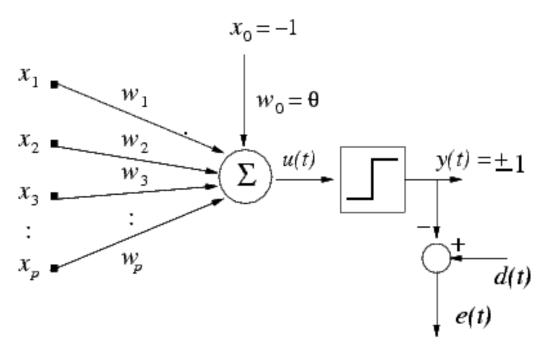






Resumo do Algoritmo do Percepron Simples

Perceptron Simples = Neurônio de M-P + Regra de Aprendizagem



$$\mathbf{w}(t+1) = \mathbf{w}(t) + \eta e(t)\mathbf{x}(t)$$







Resumo do Algoritmo do Percepron Simples

- 1. <u>Início</u> (*t*=0)
- 1.1 Definir valor de η entre 0 e 1.
- 1.2 Iniciar $\mathbf{w}(0)$ com valores nulos ou aleatórios.
- 2. Funcionamento
- 2.1 Selecionar vetor de entrada $\mathbf{x}(t)$.
- 2.2 Calcular ativação u(t).
- 2.3 Calcular saída y(t).
- 3. Treinamento
- 3.1 Calcular erro: e(t) = d(t) y(t)
- 3.2 Ajustar pesos via regra de aprendizagem.
- 3.3 Verificar critério de parada.
 - 3.3.1 Se atendido, finalizar treinamento.
 - 3.3.2 Caso contrário, fazer t=t+1 e ir para Passo 2.







Exemplo Passo-a-Passo: Aprendendo a Porta Lógica OR.

Porta OR

x_1	x_2	d
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	1

t = 0: Iniciar com zeros os pesos e o limiar.

$$w_1(0) = w_2(0) = \theta(0) = 0$$

Logo:

$$\mathbf{w}(0) = \begin{bmatrix} \theta(0) \\ w_1(0) \\ w_2(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} -1 \\ x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix}$$

Passo de aprendizagem escolhido: $\eta = 0.5$;







t=1: Calcular saída para $\mathbf{w}(1) = [0 \ 0 \ 0] \ \mathbf{e} \ \mathbf{x}(1) = [-1 \ 0 \ 0].$

$$u(1) = (0)(-1) + (0)(0) + (0)(0) = 0 => y(1) = 0, e(1) = 0.$$

$$\mathbf{w}(2) = \mathbf{w}(1) + \eta e(1)\mathbf{x}(1) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + (0,5)(0) \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{w}(1)$$

t=2: Calcular saída para $\mathbf{w}(2) = [0 \ 0 \ 0]$ e $\mathbf{x}(2) = [-1 \ 0 \ 1]$.

$$u(2) = (0)(-1) + (0)(0) + (0)(1) = 0 \Rightarrow y(2) = 0, e(2)=1$$

$$\mathbf{w}(3) = \mathbf{w}(2) + \eta e(2) \mathbf{x}(2) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + (0,5)(1) \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0,5 \\ 0 \\ 0,5 \end{bmatrix}$$

5. Rede Perceptron Simples





$$t=3$$
: Calcular saída para $\mathbf{w}(3) = [-0.5 \ 0 \ 0.5]$ e $\mathbf{x}(3) = [-1 \ 1 \ 0]$.

$$u(3)=(-0,5)(-1)+(0)(1)+(0,5)(0)=0,5=>y(3)=1, e(1)=0.$$

$$\mathbf{w}(4) = \mathbf{w}(3)$$

$$t=4$$
: Calcular saída para $\mathbf{w}(4) = [-0,5 \ 0 \ 0,5]$ e $\mathbf{x}(4) = [-1 \ 1 \ 1]$.

$$u(4) = (-0.5)(-1) + (0)(1) + (0.5)(1) = 1 => y(4) = 1, e(4) = 0.$$

$$\mathbf{w}(5) = \mathbf{w}(4)$$

t=5: Calcular saída para $\mathbf{w}(5) = [-0.5 \ 0 \ 0.5]$ e $\mathbf{x}(5) = [-1 \ 0 \ 0]$.

$$u(5) = (-0.5)(-1) + (0)(0) + (0.5)(0) = 0.5 \Rightarrow y(5) = 1,$$

$$e(5)=-1$$
.

$$\mathbf{w}(6) = \mathbf{w}(5) + \eta \, e(5) \, \mathbf{x}(5) = \begin{bmatrix} -0.5 \\ 0 \\ 0.5 \end{bmatrix} + (0.5)(-1) \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

5. Rede Perceptron Simples





$$t$$
=6: Calcular saída para $\mathbf{w}(6) = [0 \ 0 \ 0,5]$ e $\mathbf{x}(6) = [-1 \ 0 \ 1]$.

$$u(6)=(0)(-1)+(0)(0)+(0,5)(1)=0,5 \Longrightarrow y(6)=1, e(6)=0.$$

$$\mathbf{w}(7) = \mathbf{w}(6)$$

t=7: Calcular saída para $\mathbf{w}(7) = [0 \ 0 \ 0,5]$ e $\mathbf{x}(7) = [-1 \ 1 \ 0]$.

$$u(7) = (0)(-1) + (0)(1) + (0,5)(0) = 0 \Rightarrow y(7) = 0, e(7)=1.$$

$$\mathbf{w}(8) = \mathbf{w}(7) + \eta e(7) \mathbf{x}(7) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0,5 \end{bmatrix} + (0,5)(1) \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0,5 \\ 0,5 \\ 0,5 \end{bmatrix}$$

t=8: Calcular saída para $\mathbf{w}(8) = [-0.5 \ 0.5 \ 0.5]$ e $\mathbf{x}(8) = [-1 \ 1 \ 1]$.

$$u(8) = (-0.5)(-1)+(0.5)(1)+(0.5)(1) = 0.5 => y(8) = 1, e(8)=0.$$

$$w(9) = w(8)$$







$$t$$
=9: Calcular saída para $\mathbf{w}(9) = [-0.5 \ 0.5 \ 0.5]$ e $\mathbf{x}(9) = [-1 \ 0 \ 0]$.

$$u(9)=(-0.5)(-1)+(0.5)(0)+(0.5)(0)=0.5 \Rightarrow y(9)=1, e(9)=-1.$$

$$\mathbf{w}(10) = \mathbf{w}(9) + \eta e(9) \mathbf{x}(9) = \begin{bmatrix} -0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \end{bmatrix} + (0.5)(-1) \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.5 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

$$t=10$$
: Calcular saída para $\mathbf{w}(10) = [0 \ 0.5 \ 0.5]$ e $\mathbf{x}(10) = [-1 \ 0 \ 1]$.

$$u(7) = (0)(-1) + (0,5)(0) + (0,5)(1) = 0,5 \Rightarrow y(10) = 1, e(10) = 0.$$

$$\mathbf{w}(11) = \mathbf{w}(10)$$

$$t=11$$
: Calcular saída para $\mathbf{w}(11) = [0 \ 0.5 \ 0.5]$ e $\mathbf{x}(11) = [-1 \ 1 \ 0]$.

$$u(11) = (0)(-1)+(0,5)(1)+(0,5)(0) = 0,5 \Rightarrow y(11) = 1, e(11)=0.$$

$$w(12) = w(11)$$







t=12: Calcular saída para
$$\mathbf{w}(12) = [0 \ 0.5 \ 0.5]$$
 e $\mathbf{x}(12) = [-1 \ 1 \ 1]$.
 $u(12) = (0)(-1) + (0.5)(1) + (0.5)(1) = 1 => y \ (12) = 1, \ e(12) = 0.$
 $\mathbf{w}(13) = \mathbf{w}(12)$

t=13: Calcular saída para
$$\mathbf{w}(13) = [0 \ 0.5 \ 0.5]$$
 e $\mathbf{x}(13) = [-1 \ 0 \ 0]$.
 $u(13) = (0)(-1) + (0.5)(0) + (0.5)(0) = 0 \Rightarrow y(13) = 0, e(13) = 0.$
 $\mathbf{w}(14) = \mathbf{w}(13)$

FIM do treinamento!

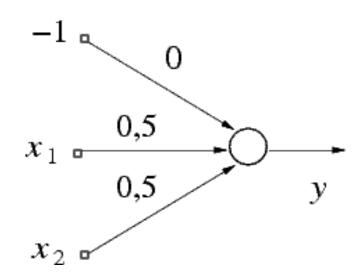






Solução Encontrada:

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} \theta \\ w_1 \\ w_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0,5 \\ 0,5 \end{bmatrix}$$



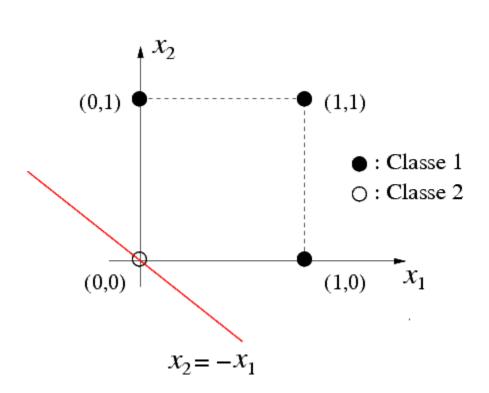






Solução Encontrada:

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} \theta \\ w_1 \\ w_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0,5 \\ 0,5 \end{bmatrix}$$



Note que esta não é a melhor das soluções, porque a reta passa bem em cima do ponto (0,0). Se os pesos tivessem sido iniciados aleatoriamente, dificilmente uma situação como essa ocorreria.

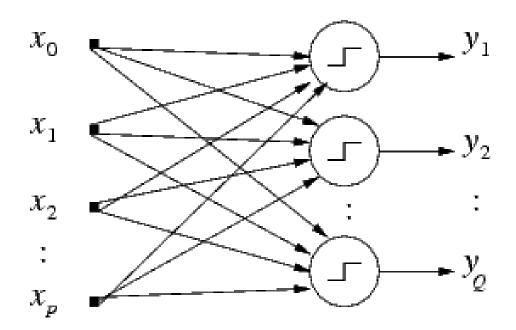






Um único neurônio M-P categoriza apenas duas classes de dados.

Em problemas com múltiplas classes, deve-se utilizar vários neurônios <u>em paralelo</u>.

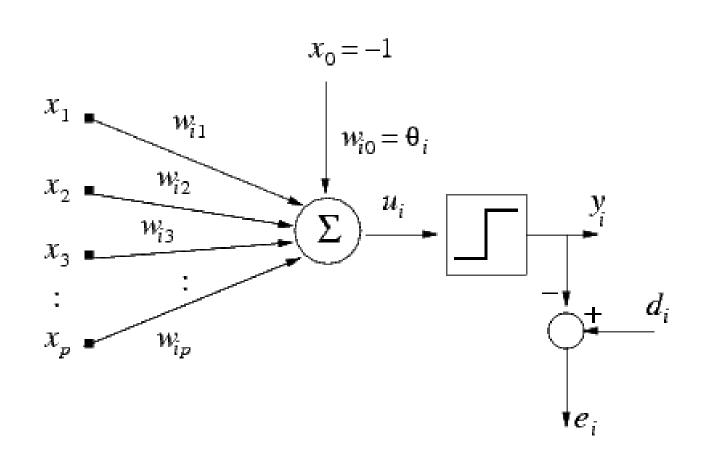








O i-ésimo neurônio da rede PS é representado na figura abaixo.



5. Rede Perceptron Simples





O funcionamento de cada neurônio individualmente é o mesmo.

Assim, a ativação do *i*-ésimo neurônio da rede PS é dada por:

$$u_i = \mathbf{w}_i^T \mathbf{x} = w_{i1} x_1 + w_{i2} x_2 + \dots + w_{ip} x_p$$

A saída do *i*-ésimo neurônio é dada por:

$$y_i = \text{sinal}(u_i) = \text{sinal}(\mathbf{w}_i^T \mathbf{x})$$

O erro do *i*-ésimo neurônio é dado por:

$$e_i = d_i - y_i$$

onde d_i é a saída desejada do *i*-ésimo neurônio.

$$i = 1, ..., Q$$
 ($Q \ge 1$ é o número de neurônios de saída).







Como cada neurônio tem seu próprio vetor de pesos \mathbf{w}_i , i=1, 2,, Q, então teremos agora Q regras de aprendizagem!

Ou seja, uma regra de aprendizagem para cada vetor \mathbf{w}_i .

Assim, a regra de aprendizagem do *i*-ésimo neurônio é dada por:

$$\mathbf{w}_{i}(t+1) = \mathbf{w}_{i}(t) + \eta e_{i}(t) \mathbf{x}(t)$$

Em que $0 < \eta << 1$ e i=1, 2, ..., Q.







Resumo da Rede Percepron Simples (Q neurônios)

- 1. <u>Início</u> (*t*=0)
- 1.1 Definir valor de η entre 0 e 1.
- 1.2 Iniciar $\mathbf{w}_{i}(0)$ com valores aleatórios.
- 2. Funcionamento
- 2.1 Selecionar o vetor de entrada $\mathbf{x}(t)$.
- 2.2 Calcular as Q ativações $u_i(t)$.
- 2.3 Calcular as Q saídas $y_i(t)$.
- 3. Treinamento
- 3.1 Calcular os Q erros: $e_i(t) = d_i(t) y_i(t)$
- 3.2 Ajustar os Q vetores de pesos $\mathbf{w}_{i}(t)$.
- 3.3 Verificar critério de parada.
 - 3.3.1 Se atendido, finalizar treinamento.
 - 3.3.2 Caso contrário, fazer t=t+1 e ir para Passo 2.







Para o PS, existem basicamente 2 métodos para especificar Q.

Método 1: Codificação binária simples.

Se tenho C classes, então Q é o maior inteiro igual a ou menor que \sqrt{C} .

Exemplo: Se C = 6 classes, então Q > 2,45 = 3.

Os vetores de saídas desejadas são construídos do seguinte modo:

Classe 1:
$$\mathbf{d} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$
 Classe 2: $\mathbf{d} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ Classe 3: $\mathbf{d} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$

E assim por diante até a Classe 6: $\mathbf{d} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$.







Método 2: Codificação 1-out-of-Q.

Se tenho C classes, então Q = C.

Exemplo: Se C = 4 classes, então Q = 4.

Neste método apenas uma das componentes do vetor de saídas desejadas tem valor igual a 1, i.e. Os vetores **d** são ortogonais.

Classe 1:
$$\mathbf{d} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{Classe 2:} \qquad \mathbf{d} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{d} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

E assim por diante até a Classe 4: $\mathbf{d} = [0 \ 0 \ 0 \ 1]^T$.







Dicas para Projetar uma Rede PS

- (1) Usar uma taxa de aprendizagem pequena (e.g. η = 0,1 ou 0,01).
- (2) Usar valores de saída $y_i \in \{-1,+1\}$, em vez de $y_i \in \{0,+1\}$.
- (3) Mudar a ordem de apresentação dos vetores de treinamento a cada época de treinamento, tornando-a aleatória.
- (4) Usar o método dois para determinar o número de neurônios (Q) e a representação dos vetores de saídas desejadas (d).







Dicas para Projetar uma Rede PS

(5) Normalizar os vetores de entrada se as variáveis apresentarem ordens de grandeza muito díspares.

Recomenda-se deixar toda variável com valores

dentro da faixa [0,+1]:

$$x_{j}^{\text{norm}} = \frac{x_{j} - x_{j}^{\text{min}}}{x_{j}^{\text{max}} - x_{j}^{\text{min}}}$$

ou dentro da faixa [-1,+1]:

$$x_j^{\text{norm}} = 2 \cdot \left(\frac{x_j - x_j^{\text{min}}}{x_j^{\text{max}} - x_j^{\text{min}}} \right) - 1$$







Exemplo Prático

- (1) Problema de auxílio ao diagnóstico em dermatologia.
- (2) Número de classes igual a C = 6.

Classe	Patologia	No. de casos
1	psoriasis	112
2	seboreic dermatitis	61
3	lichen planus	72
4	pityriasis rosea	49
5	cronic dermatitis	52
6	pityriasis rubra pilaris	20

5. Rede Perceptron Simples





- (3) Número total de casos clínicos N = 366 (8 com informação faltante).
- (4) Porcentagem de casos usados para treinamento = 80%.
- (5) Representação da saída via Método 2, logo Q = 6.
- (6) Doadores dos Dados
 - -- 1. Nilsel Ilter, M.D., Ph.D., Gazi University, School of Medicine 06510 Ankara, Turkey
- -- 2. H. Altay Guvenir, PhD., Bilkent University, Dept. Computer Engineering 06533 Ankara, Turkey

5. Rede Perceptron Simples





(7) No. de variáveis de entrada (p=34)

Atributos Clínicos (assumem valores 0, 1, 2, 3, salvo indicação contrária)

- 1: erythema
- 2: scaling
- 3: definite borders
- 4: itching
- 5: koebner phenomenon
- 6: polygonal papules
- 7: follicular papules
- 8: oral mucosal involvement
- 9: knee and elbow involvement
- 10: scalp involvement
- 11: family history, (0 or 1)
- 34: Age (linear)







Atributos Histopatológicos 1 (assumem valores 0, 1, 2, 3, 4)

12: melanin incontinence

13: eosinophils in the infiltrate

14: PNL infiltrate

15: fibrosis of the papillary dermis

16: exocytosis

17: acanthosis

18: hyperkeratosis

19: parakeratosis

20: clubbing of the rete ridges

21: elongation of the rete ridges

Ementa





- 1. Funcionalidades do neurônio biológico
- 2. Neurônio artificial de McCulloch-Pitts (MP)
- 3. Análise geométrica do neurônio MP
- 4. Portas lógicas AND, OR e NOT
- 5. Rede Perceptron Simples (PS) e aplicações
- 6. Problemas não-linearmente separáveis (porta XOR)
- 7. Implementação da porta XOR via redes multicamadas
- 8. Rede Perceptron Multicamadas (MLP)
- 9. Algoritmo de retropropagação do erro (error backpropagation)
- 10. Dicas de treinamento, teste e validação da rede MLP





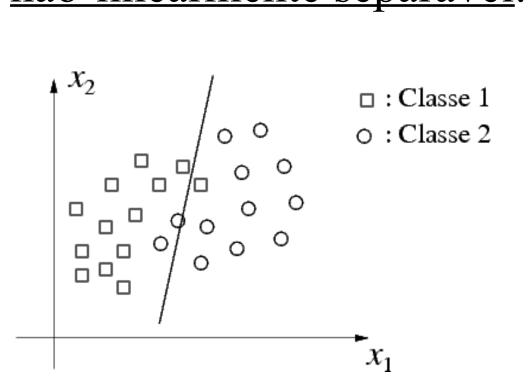
Exemplo: É possível implementar a porta XOR com 1 neurônio? Representação do Problema (Função XOR)

Por	ta XOI	R	* X ₂
x_1	x_2	у	$(0,1) \bullet (1,1)$
0	0	0	• : Classe 1
0	1	1	O: Classe 2
1	0	1	
1	1	0	$(0,0) \qquad (1,0) \qquad x_1$





Exemplo (cont.): Não, porque a função lógica XOR é não-linearmente separável.

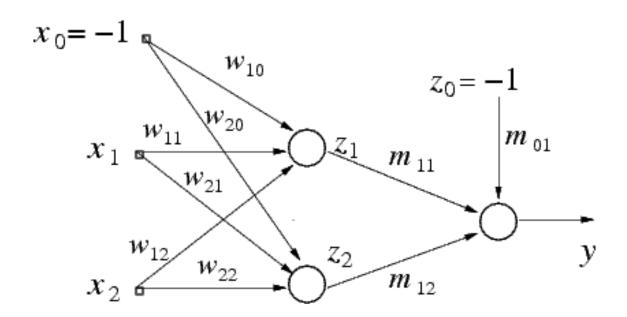


Ou seja, não é possível separar as classes por uma única reta.





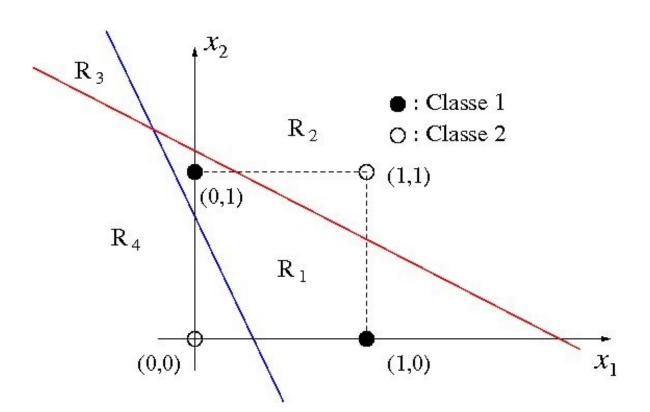
Exemplo (cont.): São necessários pelo menos TRÊS neurônios!!







Exemplo (cont.): Dois neurônios são necessários para separar o espaço (x_1, x_2) em 4 regiões (R_1, R_2, R_3, R_4) .







Exemplo (cont.): Note que a reta em vermelho corresponde a um neurônio que implementa a porta AND, enquanto a reta em azul corresponde a um neurônio que implementa a porta OR.

Sejam z_1 e z_2 , as saídas dos neurônios responsáveis pelas retas em vermelho e azul, respectivamente. Assim, temos que:

Em
$$R_1$$
, $z_1 = 0$ e $z_2 = 1$.

Em R₂,
$$z_1 = 1$$
 e $z_2 = 1$.

Em R₃,
$$z_1 = 1$$
 e $z_2 = 0$.

Em
$$R_4$$
, $z_1 = 0$ e $z_2 = 0$.





Exemplo (cont.) : Precisa-se ainda de um terceiro neurônio para combinar os valores de z_1 e z_2 , a fim de gerar o valor de y correto.

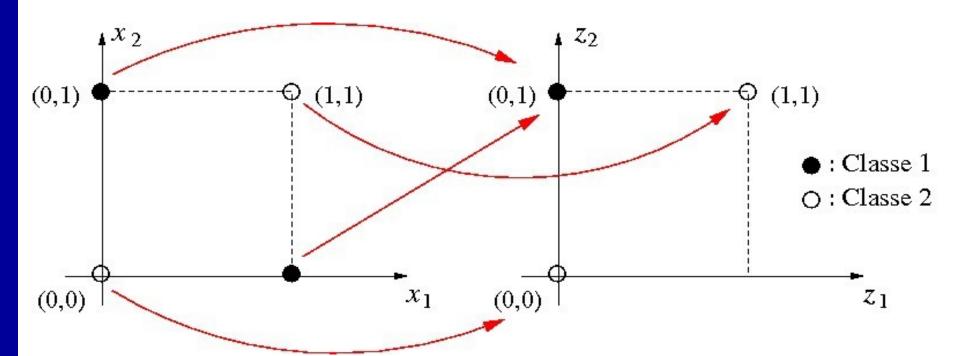
Quando um ponto da função que cair em qualquer uma das regiões R_2 , R_3 e R_4 , deve gerar uma saída igual a y = 0.

Quando um ponto da função que cair em na região R_1 , o terceiro neurônio deve gerar uma saída igual a y = 1.





Exemplo (cont.) : Representação da função XOR no espaço (z_1, z_2) .



No espaço (z_1, z_2) a função XOR passa a ser linearmente separável, pois o ponto $(x_1, x_2) = (1,0)$ é mapeado no ponto $(z_1, z_2) = (0,1)!$

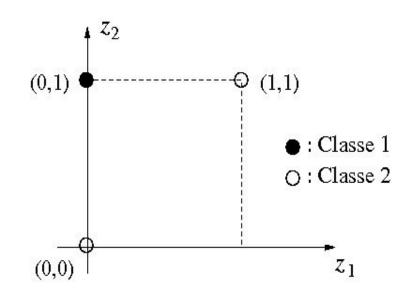




Exemplo (cont.): Assim, devemos projetar um neurônio que implemente a seguinte função lógica no espaço (z_1, z_2) .

Porta logica

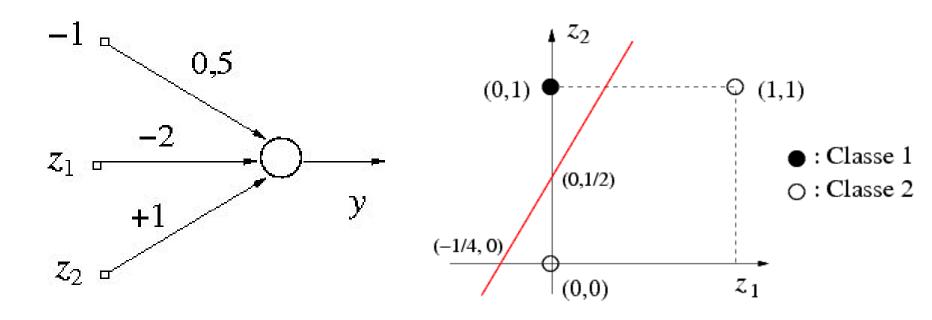
$z_{ m l}$	z_2	у
0	0	0
0	1	1
1	1	0







Exemplo (cont.): O neurônio de saída tem a seguinte configuração.



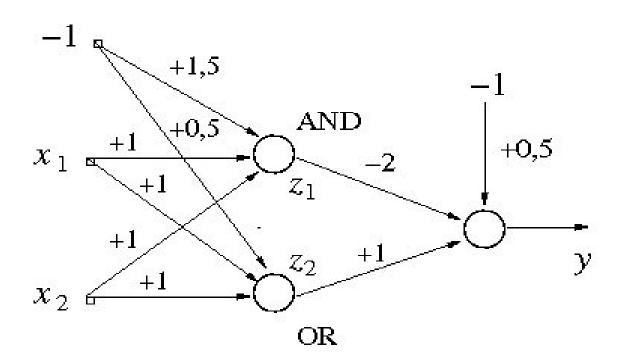
Equação da reta: $z_2=2 z_1+0.5$







Exemplo (cont.): Colocando os dois primeiros neurônios em uma camada e o terceiro neurônio na camada seguinte (subseqüente), chega-se à seguinte rede multicamadas que implementa a porta XOR.

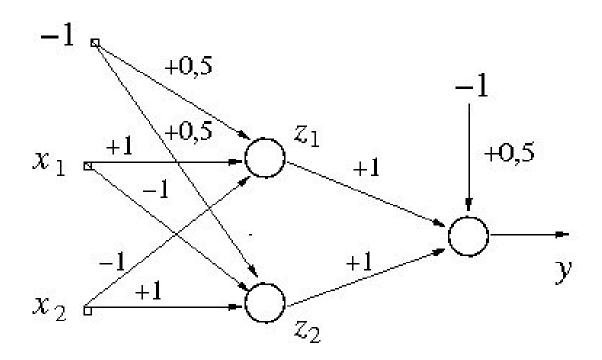


7. Implementação da Porta XOR





Exemplo (cont.) : Uma <u>outra</u> possível rede multicamadas que também implementa a porta lógica XOR é dada abaixo.



Ementa





- 1. Funcionalidades do neurônio biológico
- 2. Neurônio artificial de McCulloch-Pitts (MP)
- 3. Análise geométrica do neurônio MP
- 4. Portas lógicas AND, OR e NOT
- 5. Rede Perceptron Simples (PS) e aplicações
- 6. Problemas não-linearmente separáveis (porta XOR)
- 7. Implementação da porta XOR via redes multicamadas
- 8. Rede Perceptron Multicamadas (MLP)
- 9. Algoritmo de retropropagação do erro (error backpropagation)
- 10. Dicas de treinamento, teste e validação da rede MLP







A rede neural conhecida como <u>Perceptron Multicamadas</u> (*Multilayer Perceptron* – MLP) contém os seguintes elementos:

- (i) Unidades de entrada: responsáveis pela simples passagem dos valores de entrada para os neurônios das camadas seguintes.
- (*ii*) **Camada(s) oculta(s)**: contém neurônios responsáveis pelo processamento não-linear da informação de entrada, de modo a facilitar a resolução do problema para os neurônios da camada de saída.
- (*iii*) **Camada de saída**: contém neurônios responsáveis pela geração da saída da rede neural, após as entradas terem sido devidamente processadas pelos neurônios ocultos.







Uma Rede MLP com 1 camada oculta é representada por:

$$MLP(p, q_1, m)$$

Onde: p é o número de variáveis de entrada

 q_1 é o número de neurônios ocultos

m é o número de neurônios de saída.

Logo, o número total de parâmetros (Z) de uma rede MLP de uma camada oculta é dado por:

$$Z = (p+1)q_1 + (q_1+1)m$$







Uma Rede MLP com 1 camada oculta é representada por:

$$MLP(p, q_1, q_2, m)$$

Onde: p é o número de variáveis de entrada

 q_1 é o número de neurônios da 1a. camada oculta

 q_2 é o número de neurônios da 2a. camada oculta

m é o número de neurônios de saída.

Logo, o número total de parâmetros (Z) de uma rede MLP de duas camadas ocultas é dado por:

$$Z = (p+1)q_1 + (q_1+1)q_2 + (q_2+1)m$$







Uma rede MLP com 4 variáveis de entrada (p=4), 10 neurônios ocultos ($q_1=10$) e 2 neurônios de saída (m=2) é representada como MLP(4,10,2).

Uma rede MLP com 15 variáveis de entrada (p=15), 20 neurônios na 1a. camada oculta ($q_1=20$), 10 neurônios na 2a. camada oculta ($q_2=10$) e 4 neurônios de saída (m=4) é representada como MLP(15,20,10,2).

NOTA 1: A especificação de *p* e *m* são ditadas pela forma como o problema é codificado para ser resolvido por uma rede neural.

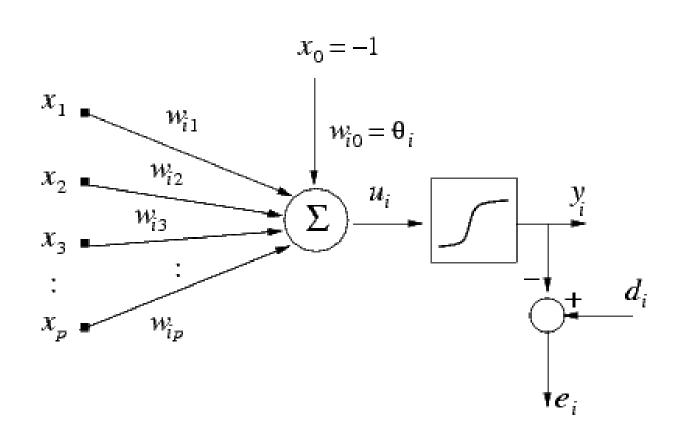
NOTA 2: As especificações de q_1 e q_2 dependem da complexidade do problema, ou seja, é preciso realizar vários testes até encontrar os valores mais adequados.







Um neurônio qualquer da rede MLP, seja oculto ou de saída, é representado genericamente como na figura abaixo.









Note que a função de ativação do neurônio M-P, que é do tipo **Degrau** (não-linearidade dura ou *hard*) foi substituída por uma função de ativação do tipo **Sigmoidal** (não-linearidade suave ou *soft*).

Assim, a saída deixa de ser uma variável do tipo

ON-OFF (binária [0,1] ou bipolar [-1,+1])

e passa a ser uma variável do tipo

Real ou Analógica (qq valor entre [0,1] ou [-1,+1]).



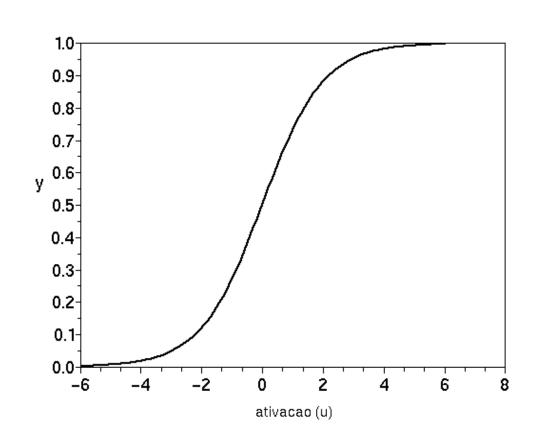




Função de ativação Sigmóide Logística

$$y_i(t) = \frac{1}{1 + \exp(-u_i(t))}$$

$$y_i(t) \in (0,1)$$





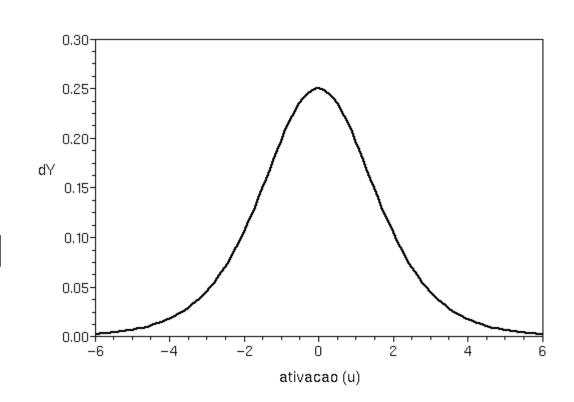




Derivada da Sigmóide Logística

$$y_{i}(t) = \frac{d y_{i}(t)}{d u_{i}(t)}$$

$$y_{i}'(t) = y_{i}(t)[1 - y_{i}(t)]$$





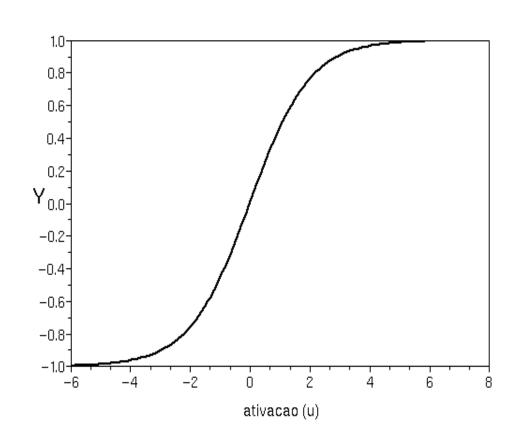




Função de ativação *Tangente Hiperbólica*

$$y_{i}(t) = \frac{1 - \exp(-u_{i}(t))}{1 + \exp(-u_{i}(t))}$$

$$y_i(t) \in (-1,1)$$





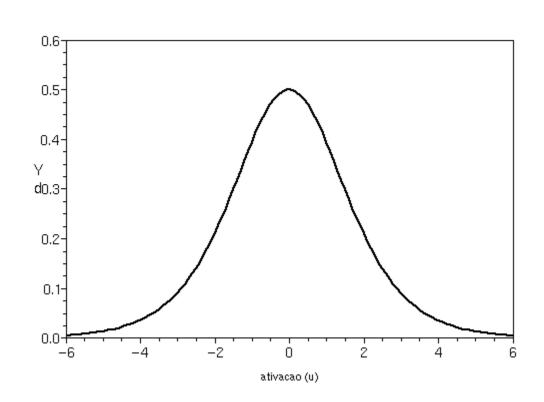




Derivada da Tangente Hiperbólica

$$y_{i}'(t) = \frac{dy_{i}(t)}{du_{i}(t)}$$

$$y_{i}(t) = 0.5[1-y_{i}^{2}(t)]$$









Sobre o Uso de Funções de Ativação Sigmoidais

Vantagens: (1) Derivadas fáceis de calcular.

- (2) Não-linearidade fraca (trecho central é quase linear)
- (3) Interpretação da saída como taxa média de disparo (*mean firing rate*), em vez de simplesmente indicar se o neurônio está ou não ativado (ON-OFF).

Desvantagens:

(1) Elevado custo computacional para implementação em sistemas embarcados devido à presença da função EXP.

$$\exp(x) = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots$$







Funcionamento de uma rede MLP com 1 camada oculta

(1) A ativação do *i*-ésimo neurônio da camada oculta é dada por:

$$u_i = \mathbf{w}_i^T \mathbf{x} = w_{i0} x_0 + w_{i1} x_1 + w_{i2} x_2 + \dots + w_{ip} x_p, \quad i = 1, \dots, q_1$$

(2) A saída do *i*-ésimo neurônio da camada oculta é dada por:

$$z_i(t) = \frac{1}{1 + \exp(-u_i(t))}, \quad i = 1, ..., q_1$$

ou

$$z_i(t) = \frac{1 - \exp(-u_i(t))}{1 + \exp(-u_i(t))}, \quad i = 1, \dots, q_1$$







Funcionamento de uma rede MLP com 1 camada oculta

(1) A ativação do *k*-ésimo neurônio de saída é dada por:

$$a_k = \mathbf{m}_k^T \mathbf{z} = m_{k0} z_0 + m_{k1} z_1 + m_{k2} z_2 + \dots + m_{kq_1} z_{q_1}, \quad k = 1, \dots, m$$

(2) A saída do *k*-ésimo neurônio de saída é dada por:

$$o_k(t) = \frac{1}{1 + \exp(-a_k(t))}, \quad k = 1, ..., m$$

ou

$$o_k(t) = \frac{1 - \exp(-a_k(t))}{1 + \exp(-a_k(t))}, \quad k = 1, ..., m$$







Treinamento de uma rede MLP (1 camada oculta)

O k-ésimo neurônio de saída têm acesso à saída desejada, d_k .

Assim, é possível calcular o erro associado a esse neurônio:

$$e_k = d_k - o_k$$

Este erro pode então ser utilizado em uma regra de aprendizagem similar àquela usada pelo algoritmo Perceptron Simples.

$$\mathbf{m}_{k}(t+1) = \mathbf{m}_{k}(t) + \eta e_{k}(t) o_{k}(t) \mathbf{z}(t)$$

Onde

 $\mathbf{z}(t)$ é o vetor de entrada da camada de saída.

•

$$o'_{k}(t) = o_{k}(t)[1 - o_{k}(t)]$$
 (p/ sigmóide logística)

$$o'_{k}(t) = 0.5[1 - o_{k}^{2}(t)]$$
 (p/ tangente hiperbólica)







Treinamento de uma rede MLP (1 camada oculta)

Contudo, o i-ésimo neurônio oculto não tem acesso a uma saída desejada equivalente, d_i .

Assim, NÃO é possível calcular o erro associado a esse neurônio.

A saída encontrada pelos pesquisadores foi "inventar" uma espécie de erro para os neurônios ocultos, sem que houvesse a necessidade de uma saída desejada, d_i .

O erro dos neurônios ocultos são obtidos a partir dos erros dos neurônios de saída por meio de uma **projeção no sentido inverso** ao do fluxo de informação convencional.

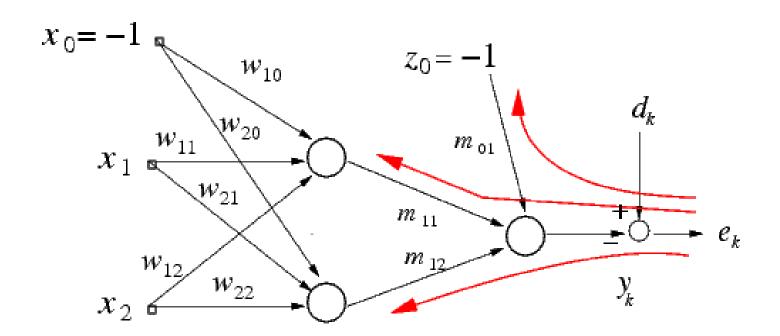






Treinamento de uma rede MLP (1 camada oculta)

Esta projeção no sentido inverso dos erros de saída é mais conhecida pelo nome de retropropagação dos erros (*Error Backpropagation*).









O algoritmo de *backpropagation* é o mais usado para treinar redes MLP, tendo sido proposto por diferentes autores em diferentes épocas.

P. Werbos (1974). "Beyond regression: new tools for prediction and analysis in the behavioral sciences", PhD thesis, Harvard University, Boston, MA.

D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, & R. J. Williams (1986). "Learning representations by back-propagating errors". *Nature*, 323:533-536, 1986.

Y. Le Cun, "Learning processes in an asymmetric threshold network", In: *Disordered Systems and Biological Organization* (eds. F. Soulie, E. Bienenstock, and G. Weisbuch, Eds.). Les Houches, France: Springer-Verlag, 1986, pp. 233-340.

Parker, D. (1985). "Learning Logic", *Technical Report* TR-87. Cambridge, MA: Center for Computational Research in Economics and Management Science, MIT.







Regras de Aprendizagem da Rede MLP (1 camada oculta) Neurônios Ocultos:

$$\mathbf{w}_{i}(t+1) = \mathbf{w}_{i}(t) + \eta e_{i}(t) z_{i}'(t) \mathbf{x}(t)$$

Onde: e_i é o erro retroprojetado do *i*-ésimo neurônio de saída

$$e_i(t) = \sum_{k=1}^{m} m_{ki} o_k'(t) e_k(t), \quad i=1,...,q_1$$

 $\mathbf{x}(t)$ é o vetor de entrada da rede.

$$z_i(t) = z_i(t)[1 - z_i(t)]$$
 (p/ sigmóide logística)

$$z_i(t) = 0.5[1 - z_i^2(t)]$$
 (p/ tangente hiperbólica)







Para a rede PS, a regra de aprendizagem foi obtida através de uma análise geométrica do problema.

Para a rede MLP vamos obter uma regra de aprendizagem semelhante, a partir da minimização de uma função-custo (ou função objetivo).

Para isso, considere inicialmente que o *erro quadrático instantâneo* para todos os *m* neurônios de saída é dado por:

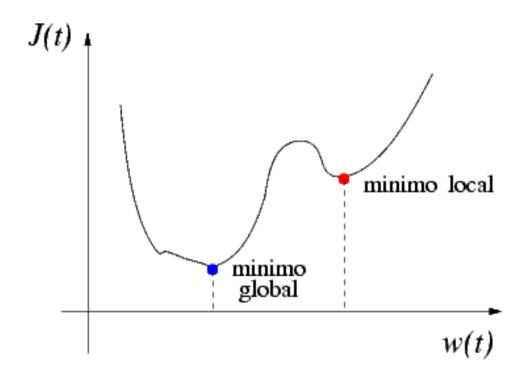
$$J(t) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{m} e_k^2(t) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{m} \left(d_k(t) - o_k(t) \right)^2$$







Gráfico hipotético que ilustra o efeito da não-linearidade na função J(t) para um único neurônio de saída com peso w é mostrado abaixo:

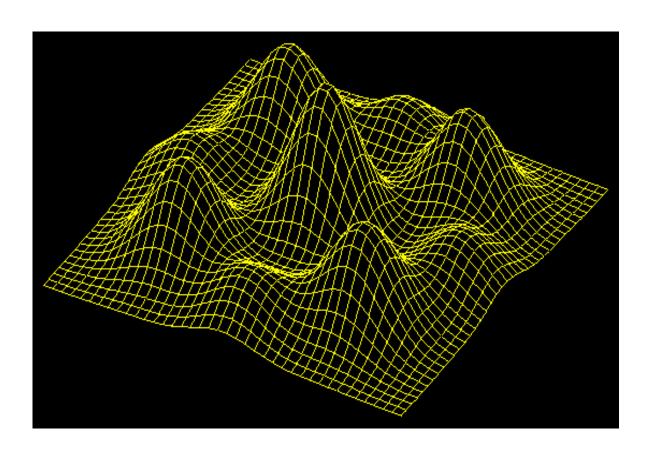








Superfície de busca hipotética em três dimensões









A função-custo de interesse é o *Erro Quadrático Médio* (EQM), para os *N* exemplos de treinamento:

$$J(\mathbf{W}) = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N} J(t) = \frac{1}{2N} \sum_{t=1}^{N} \sum_{k=1}^{m} e_{k}^{2}(t)$$
$$= \frac{1}{2N} \sum_{t=1}^{N} \sum_{k=1}^{m} \left(d_{k}(t) - o_{k}(t) \right)^{2}$$

onde W é o conjunto de todos os parâmetros (pesos e limiares) da rede.

Note que a função $J(\mathbf{W})$ pode ser minimizada ao se minimizar J(t)!







Como a função custo é <u>não-linear</u>, então o processo de minimização deve ser realizado de modo <u>iterativo</u> por meio da seguinte equação <u>recursiva</u>:

$$\mathbf{m}_{k}(t+1) = \mathbf{m}_{k}(t) - \eta \frac{\partial J(t)}{\partial \mathbf{m}_{k}(t)}$$

onde η é passo de aprendizagem (0 < η < 1).

Note que o segundo termo da equação acima é o incremento imposto ao vetor de pesos \mathbf{w}_k no instante t, ou seja

$$\Delta \mathbf{m}_{k}(t+1) = -\eta \frac{\partial J(t)}{\partial \mathbf{m}_{k}(t)}$$







Temos então que calcular a seguinte derivada, também chamada de gradiente da função J(t) na direção do vetor $\mathbf{m}_k(t)$:

$$\frac{\partial J(t)}{\partial \mathbf{m}_{k}(t)}$$

Para isso, usaremos a regra da cadeia para fatorar esta derivada em vários termos:

$$\frac{\partial J(t)}{\partial \mathbf{m}_{k}(t)} = \frac{\partial J(t)}{\partial e_{k}(t)} \frac{\partial e_{k}(t)}{\partial o_{k}(t)} \frac{\partial o_{k}(t)}{\partial a_{k}(t)} \frac{\partial a_{k}(t)}{\partial \mathbf{m}_{k}(t)}$$







Vamos calcular cada derivada separadamente:

(1) Se
$$J(t) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{m} e_k^2(t)$$
 Então $\frac{\partial J(t)}{\partial e_k(t)} = e_k(t)$

(2) Se
$$e_k = d_k - o_k$$
 Então $\frac{\partial e_k(t)}{\partial o_k(t)} = -1$

(3) Se
$$o_k(t) = \varphi(a_k(t))$$
 Então $\frac{\partial o_k(t)}{\partial a_k(t)} = \varphi'(t) = o_k'(t)$

(4) Se
$$a_k(t) = \mathbf{m}_k^T(t) \mathbf{z}(t)$$
 Então $\frac{\partial a_k(t)}{\partial \mathbf{m}_k(t)} = \mathbf{z}(t)$







Juntando novamente cada derivada, chega-se ao seguinte resultado:

$$\frac{\partial J(t)}{\partial \mathbf{m}_{k}(t)} = \frac{\partial J(t)}{\partial e_{k}(t)} \frac{\partial e_{k}(t)}{\partial o_{k}(t)} \frac{\partial o_{k}(t)}{\partial a_{k}(t)} \frac{\partial a_{k}(t)}{\partial \mathbf{m}_{k}(t)}$$

$$= e_{k}(t)(-1)o'(t)\mathbf{z}(t) = -e_{k}(t)o'(t)\mathbf{z}(t)$$

Assim, obtemos a regra de aprendizagem para os neurônios de saída:

$$\mathbf{m}_{k}(t+1) = \mathbf{m}_{k}(t) - \eta \frac{\partial J(t)}{\partial \mathbf{m}_{k}(t)}$$

$$\mathbf{m}_{k}(t+1) = \mathbf{m}_{k}(t) + \eta e_{k}(t) o_{k}(t) \mathbf{z}(t)$$







Para obter a regra de aprendizagem dos neurônios ocultos adota-se um raciocínio semelhante.

Assim, o processo de minimização deve ser realizado de modo <u>iterativo</u> por meio da seguinte equação <u>recursiva</u>:

$$\mathbf{w}_{i}(t+1) = \mathbf{w}_{i}(t) - \eta \frac{\partial J(t)}{\partial \mathbf{w}_{i}(t)}$$

O segredo está em calcular o gradiente da função função custo J(t) agora na direção do vetor $\mathbf{w}_i(t)$, ou seja:

$$\frac{\partial J(t)}{\partial \mathbf{w}_{i}(t)} = \frac{\partial J(t)}{\partial y_{i}(t)} \frac{\partial y_{i}(t)}{\partial u_{i}(t)} \frac{\partial u_{i}(t)}{\partial \mathbf{w}_{i}(t)}$$
(exercício)

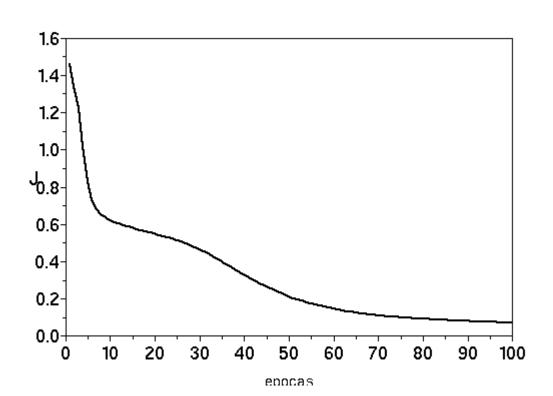






Avaliação Gráfica do Treinamento

A avaliação do treinamento é feita através do gráfico de $J(\mathbf{W})$ versus o número de épocas de treinamento, chamado de *curva de aprendizagem*.









A Rede MLP é um Aproximador Universal de Função

Uma rede $MLP(p, q_1, m)$, ou seja, uma rede com uma camada oculta, é capaz de aproximar qualquer função <u>contínua</u>, com grau de precisão arbitrário, dado um número <u>suficientemente</u> grande de neurônios ocultos com função de ativação sigmoidal.

Uma rede MLP (p, q_1, q_2, m) , ou seja, uma rede com duas camadas ocultas, é capaz de aproximar qualquer função <u>descontínua</u>, com grau de precisão arbitrário, dado um número <u>suficientemente</u> grande de neurônios ocultos com função de ativação sigmoidal em cada camada.







A Rede MLP é um Aproximador Universal de Função

K. Hornik, M. Stinchcombe & H. White (1989). "Multilayer Feedforward Networks are Universal Approximators", *Neural Networks*, vol. 2, no. 5, p. 359--366.

K. Hornik (1991). "Approximation Capabilities of Multilayer Feedforward Networks", *Neural Networks*, vol. 4, no. 2, p. 251--257.

R. Hecht-Nielsen (1987). "Kolmogorov's mapping neural network existence theorem", *Proceedings of the IEEE International Conference on Neural Networks*, pp. 11--14.

J. L. Castro, C. J. Mantas & J. M. Benitez (1987). "Neural networks with a continuous squashing function in the output are universal approximators", *Neural Networks*, vol. 13, no. 6, pp. 561--563.







A Rede MLP é um Aproximador Universal de Função

Isto quer dizer que, por menor que seja o erro quadrático médio exigido para uma boa aproximação do problema, a rede MLP será eventualmente capaz de atingi-lo, desde que o número de neurônios ocultos seja elevado.

Os resultados obtidos nas referências acima são apresentados na forma de <u>teoremas de existência</u>, ou seja, eles dizem que existe uma rede MLP que pode aproximar uma certa função, porém não dizem <u>como obtê-la</u>.

Exceção:

V. Kurkova (1992). "Kolmogorov's Theorem and Multilayer Neural Networks", *Neural Networks*, vol. 5, no. 3, p. 501--506.







Papel da Derivada da Função de Ativação na Regra de Aprendizagem

Assumindo uma função de ativação logística, tem-se que

Quando
$$a_k(t) \rightarrow +\infty$$
, então $o_k(t) \approx 1 \Rightarrow o_k'(t) \approx 0$

Quando
$$a_k(t) \rightarrow -\infty$$
, então $o_k(t) \approx 0 \Rightarrow o_k'(t) \approx 0$

Logo, se
$$o'_k(t) \approx 0 \Rightarrow \Delta \mathbf{m}_k(t) = \eta e_k(t) o'_k(t) \mathbf{z}(t) \approx 0$$

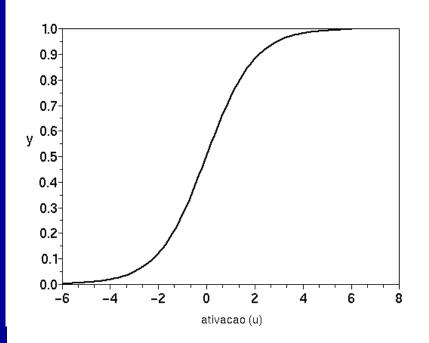
CONCLUSÃO: Quando a ativação é muito alta (ou muito baixa), a saída estará próxima da região de saturação e, assim, o ajuste dos pesos será muito pequeno e o aprendizado mais lento.

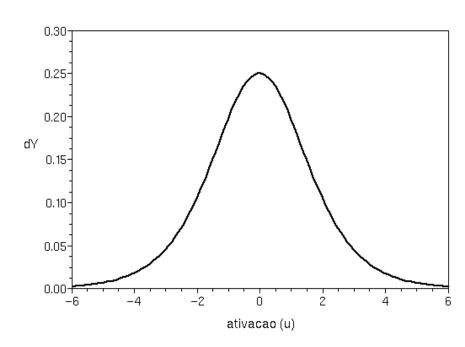






Este fênomeno recebe o nome de "**paralisia da rede**" e pode ser melhor visualizado colocando-se os gráficos da função de ativação e de sua derivada lado a lado.











Para minimizar o efeito da paralisia da rede, é recomendável que a ativação seja mantida em torno da região mais linear da função de ativação, pelo menos no início da fase de aprendizado a fim de acelerá-la.

Dicas para minimizar a paralisia da rede

- (1) Iniciar os pesos e limiares com valores pequenos, e.g. na faixa entre [-1/10, +1/10] ou [-1/2, +1/2].
- (2) Normalizar as entradas para a faixa [0,+1] ou [-1,+1].
- (3) Adicionar 0,05 ao valor da derivada da função de ativação. Assim,

$$\Delta \mathbf{m}_{k}(t) = \eta e_{k}(t) (o_{k}(t) + 0.05) \mathbf{z}(t)$$
, onde $e_{k}(t) = d_{k}(t) - o_{k}(t)$

$$\Delta \mathbf{w}_{i}(t) = \eta e_{i}(t)(z_{i}(t) + 0.05)\mathbf{x}(t), \text{ onde } e_{i}(t) = \sum_{k=1}^{m} m_{ki} o_{k}(t) e_{k}(t)$$







Determinação dos Neurônios da Camada Oculta

Infelizmente, não existe um método de passo único para determinar o número de neurônios que seja adequado a uma dada tarefa.

Em geral, este número é determinado após alguma experimentação com os dados (*tentativa e erro*).

Por tentativa-e-erro entende-se repetir o processo de treinamento e teste para cada valor especificado para o número de neuônios ocultos.

Algumas técnicas heurísticas podem fornecer um valor inicial para o número de neurônios da camada oculta.

8. Rede Perceptron Multicamadas





Heurísticas para Especificar o No. de Neurônios Ocultos

(1) Regra do Valor Médio:

$$q_1 = \frac{p+m}{2}$$

(2) Regra da Raiz Quadrada:

$$q_1 = \sqrt{p.m}$$

(3) Regra de Kolmogorov:

$$q_1 = 2p + 1$$

(4) Regra de Fletcher-Gloss:

$$2\sqrt{p} + m \le q_1 \le 2p + 1$$







Heurísticas para Especificar o No. de Neurônios Ocultos

(5) Regra de Baum-Haussler:

$$N > \frac{Z}{\varepsilon}$$

onde

Z é o número de parâmetros da rede MLP (p, q_1, m)

$$Z = (p+1)q_1 + (q_1+1)m$$

N é o tamanho do conjunto de treinamento

ε é o erro tolerado durante o teste.

Exemplo: Se $\varepsilon = 0.1$ (10% de tolerância), então N > 10Z







Dilema Viés-Variância

O número de neurônios ocultos deve ser adequadamente determinado, sob pena de o modelo apresentar uma das seguintes situações que levam a um desempenho ruim.

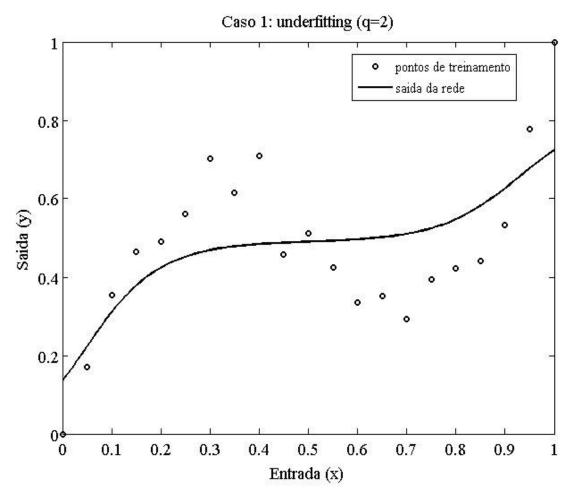
- (1) **Underfitting**: a rede neural tem poucos parâmetros ajustáveis e não consegue modelar ou capturar as características específicas dos dados, capturando apenas os detalhes mais gerais. Neste caso, diz-se que a rede generaliza demais.
- (1) **Overfitting**: a rede neural tem muitos parâmetros ajustáveis e captura até características muito específicas dos dados, que podem ter sido causadas, e.g. pela presença do ruído. Neste caso, diz-se que a rede generaliza pouco.







Underfitting: Quando a rede generaliza demais, o erro de estimação (viés) é ALTO, porém a variância da saída do modelo é BAIXA.

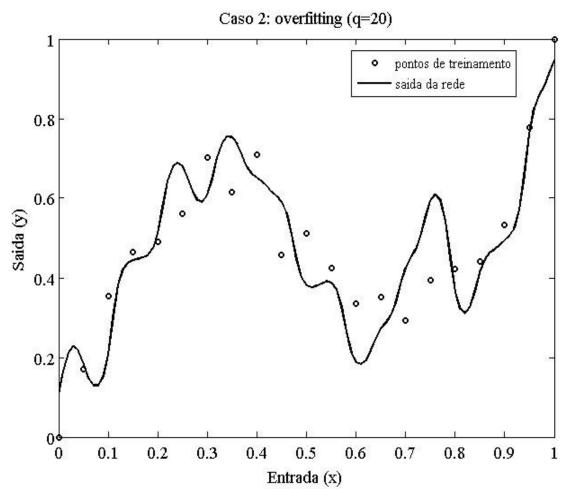








Overfitting: Quando a rede generaliza pouco, o erro de estimação (interpolação) é BAIXO, porém a variância do estimador é ALTA.

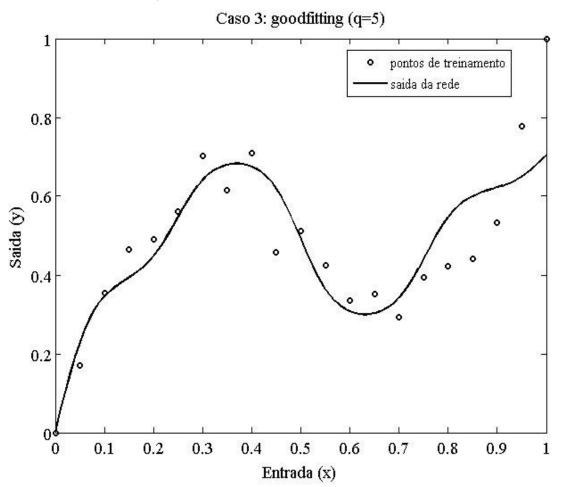








Goodfitting: Quando a rede generaliza adequadamente, há um compromisso entre viés (erro de estimação) e a variância do estimador.

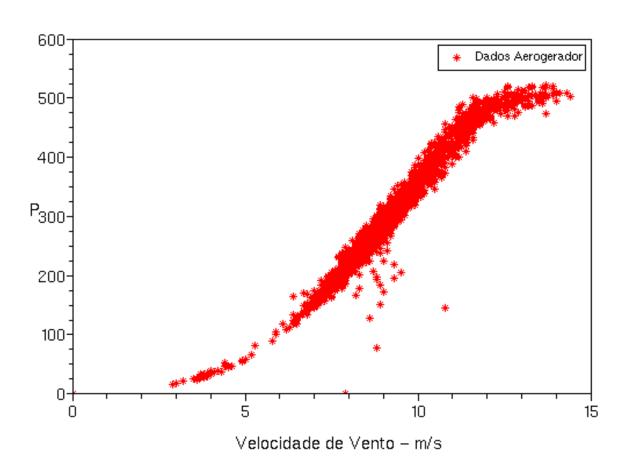








Aplicação 1: Identificação de um Aerogerador



8. Rede Perceptron Multicamadas





Aplicação 2: Crédito Bancário

