Conhecimento e Raciocínio

Aula 1

Redes Neuronais

Viriato M. Marques

Licenciatura em Engenharia Informática

DEIS – Departamento de Engenharia Informática e de Sistemas

ISEC – Instituto Superior de Engenharia de Coimbra

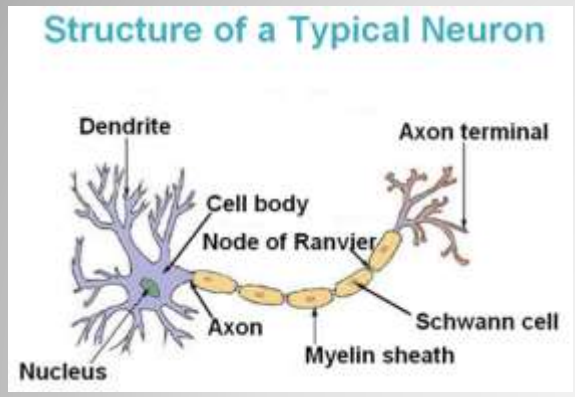
1. Redes Neuronais

(Biblio: Tom Mitchell)

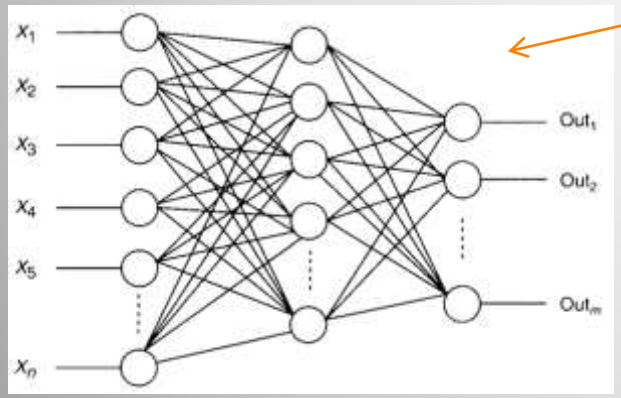
1. Introdução

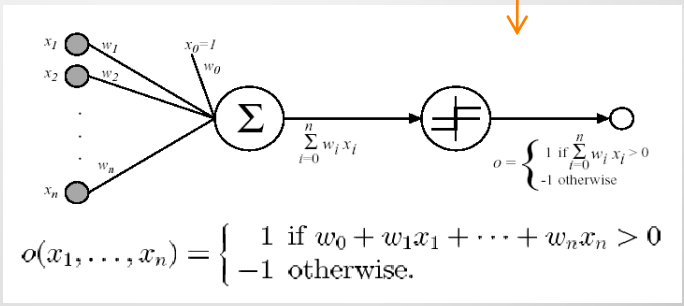
- As Redes Neuronais (*Artificial Neural Networks* – ANN ou NN) constituem um suporte geral e prático para aprendizagem de modelos de classificação
- O conceito de Rede Neuronal provém de uma analogia biológica:
  - Cérebro = Neurónios densamente interligados
  - Cada neurónio recebe inputs de outros neurónios e produz uma saída que se liga a outros neurónios.
    - O cérebro humano tem cerca de 10^{11} neurónios.
    - Cada neurónio liga-se, em média, a 10^4 outros neurónios.
  - A actividade de um neurónio é comandada pelos que a ele se ligam, dependendo dos valores de input que o neurónio recebe
  - Uma Rede Neuronal é composta por Unidades. Cada unidade simula o funcionamento de um neurónio.

1. Redes Neuronais



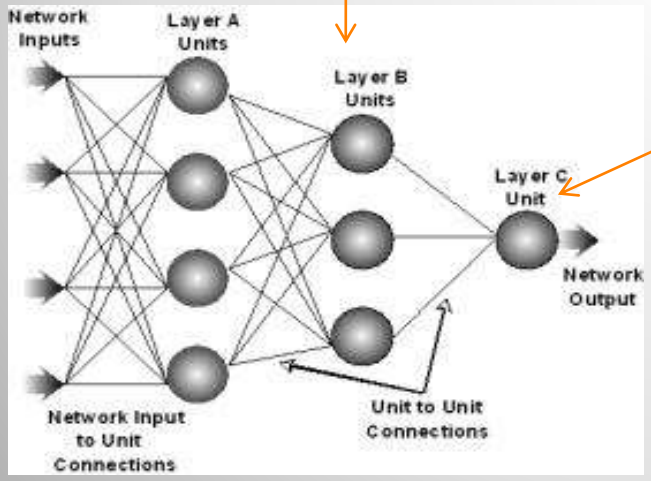
- Os neurónios interligam-se através dos axónios e dendrites
- O ponto de contacto chama-se sinapse
- A transmissão faz-se por via eléctrica, através de iões
- Os neurologistas descobriram que o cérebro aprende alterando resistência da ligação sináptica entre neurónios após estimulação repetida pelo mesmo impulso
- As ANNs são compostas por unidades, designadas por **perceptrões**





1. Redes Neuronais

- Unidades: organizadas em camadas, geralmente 2 ou 3
- "Primeiras" unidades: entrada (input units) (não constituem uma camada)
- Unidades internas (hidden units): constituem a ou as camadas internas (hidden layer(s))
- Saída: output units constituindo a camada de saída (output layer)



- Uma ANN de 3 camadas

1. Redes Neuronais

- Vamos estudar apenas a topologia Feedforward ANN (que corresponde aos diagramas atrás apresentados)

- As ANNs são capazes de aprender a classificar, i.e., distinguir imagens, caracteres, sons, etc.
- A cada classificação corresponde uma saída ou combinação de saídas distintas
- A aprendizagem pode ser supervisionada, não supervisionada ou por reinforcement learning (i.e. aproximadamente "por recompensa")
- Vamos estudar apenas a aprendizagem (treino) supervisionada

- O treino supervisionado faz-se por aplicação de exemplos previamente classificados (i.e. em que as entradas e as saídas pretendidas são previamente conhecidas)
- A aprendizagem faz-se por alteração dos coeficientes sinápticos através de um algoritmo chamado *backpropagation*

1. Redes Neuronais

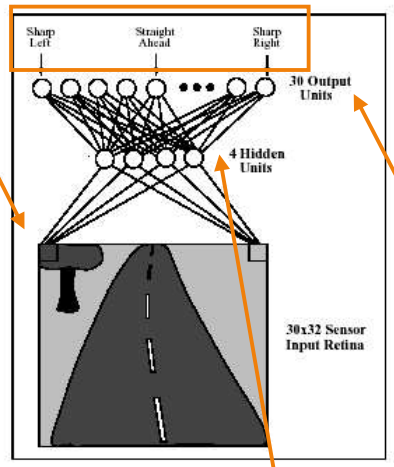
Pomerleau, 1993, Sistema ALVINN:

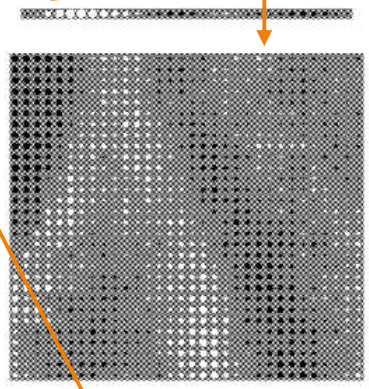
Usa uma matriz 30*32=960 pixels como entrada para uma rede neuronal previamente treinada por replicação das atitudes de um humano durante 5 minutos

Controlou a condução numa auto-estrada, numa faixa, com outros veículos presentes, a cerca de 100Km/h durante mais de 100Km

O branco significa "voltar à esquerda" porque é interpretado como maior peso activando, assim, as saídas à esquerda)

As 960 entradas de uma das unidades intermédias





Input: 960 unidades de entrada ligadas a uma câmara

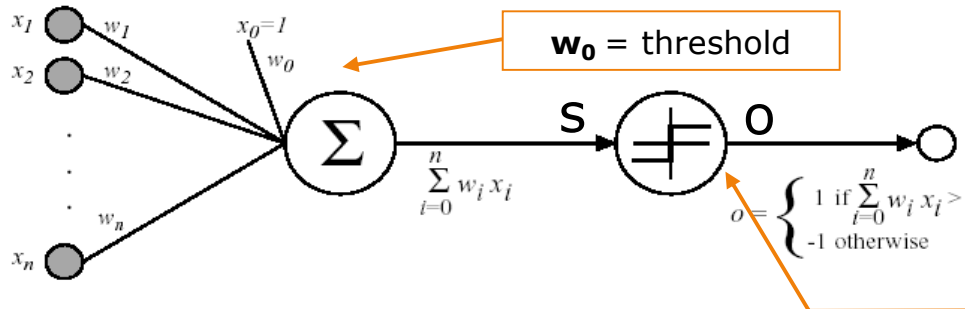
Camada Intermédia: 4 unidades

Output para actuadores: 30 unidades

1. Redes Neuronais

2. Perceptrão e Outras Unidades

- Um **perceptrão**
  - Tem um conjunto de entradas de valor real, (x_1...x_n)
  - Calcula uma combinação linear destas entradas, C
  - Saída=1 se C>-w_0 (*threshold*). Saída= -1 caso contrário



w_0 = threshold

Função SINAL, *sng(y)*

w_0 pode passar para o 2º membro, o que evidencia saídas de valor +1 ou -1 consoante Soma > ou < que -w_0

1. Redes Neuronais

- Portanto:

$$o(x_1, x_2 \ldots x_n) = \begin{cases} 1 & \text{se } w_0 + w_1 x_1 + \ldots + w_n x_n > 0 \\ -1 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

  - Os w_i designam-se por Coeficientes Sinápticos ou de Ponderação (*weighting factors*) que determinam a contribuição da entrada x_i para a adição realizada no seio do perceptrão.

- Se $x_0=1$ (fixo em vez de entrada variável), então $-w_0$ representa o limite que a combinação linear das entradas tem de ultrapassar para a saída ser *+1*
  - Seja $\vec{w}$ o vector dos coeficientes de ponderação
  - Seja $\vec{x}$ o das entradas

- Então a saída *O* do perceptrão, função apenas das entradas considerando os pesos invariáveis, é:

$$o(\vec{x}) = \text{sgn}(\vec{w}.\vec{x})$$

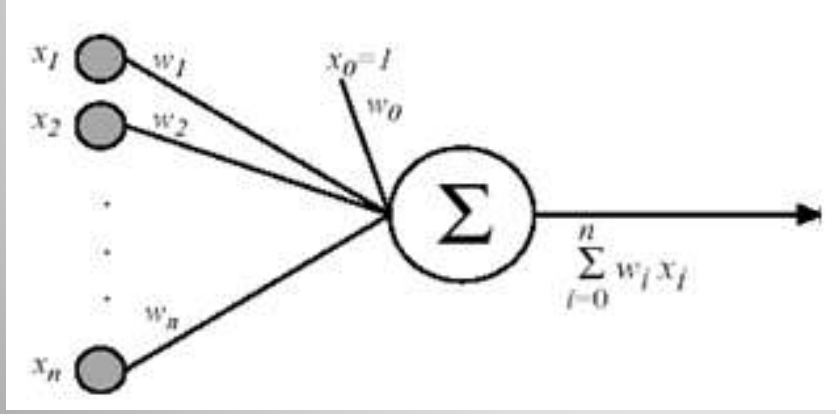
Com *sng(y)* = Função Sinal = $\begin{cases} +1 \text{ se } y>0 \\ -1 \text{ se } y<0 \end{cases}$

1. Redes Neuronais

- Uma **unidade linear**
  - Calcula apenas a combinação linear das entradas, $(x_0 \ldots x_n)$
  - $w_0 = 0$
- Portanto, para uma unidade linear

$$o(\vec{x}) = \vec{w}.\vec{x}$$

- ou seja, a função $f(s)$ reduz-se a $o=s$



1. Redes Neuronais

- Tipos de funções de activação mais comuns:

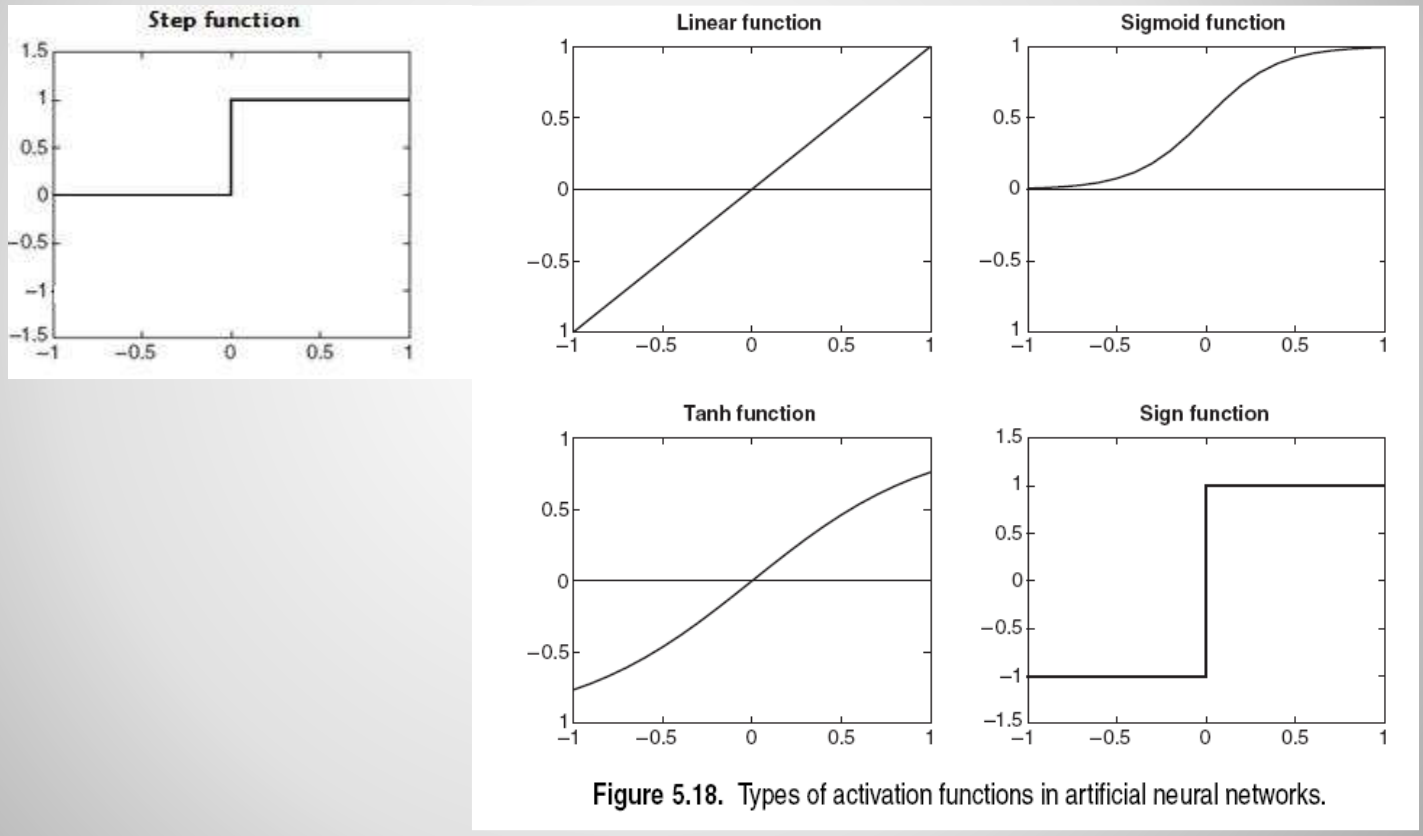


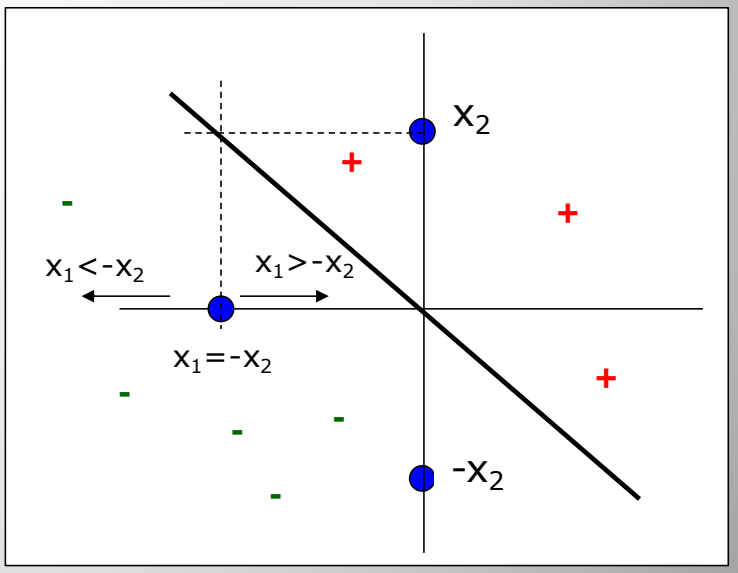
Figure 5.18. Types of activation functions in artificial neural networks.

1. Redes Neuronais

(Biblio: Russel & Norvig)

- O que pode "aprender" ou "representar" um perceptrão?
  - Seja um perceptrão de 2 entradas x_1, x_2 e coeficientes $w_1=1$, $w_2=1$
  - Seja $w_0=0$
  - A sua saída será $+1$ se $x_1.w_1 + x_2.w_2 > 0$ …
  - … e -1 se $x_1.w_1 + x_2.w_2 < 0$
  - Como estamos a considerar $w_i=1$: $\begin{cases} o=1 \text{ se } x1>-x2 \\ o=-1 \text{ se } x1<-x2 \end{cases}$

- Graficamente, com x_1 no eixo dos x e x_2 no eixo dos y, podem visualizar-se as zonas de outputs (exemplos) positivos (+1) e negativos (-1)
- Neste exemplo, estas zonas são separadas pela recta $x_1+x_2=0$ (ou, doutro modo, $x_2 = -x_1$)
- Trata-se da forma $y = -x$, que se representa na figura.



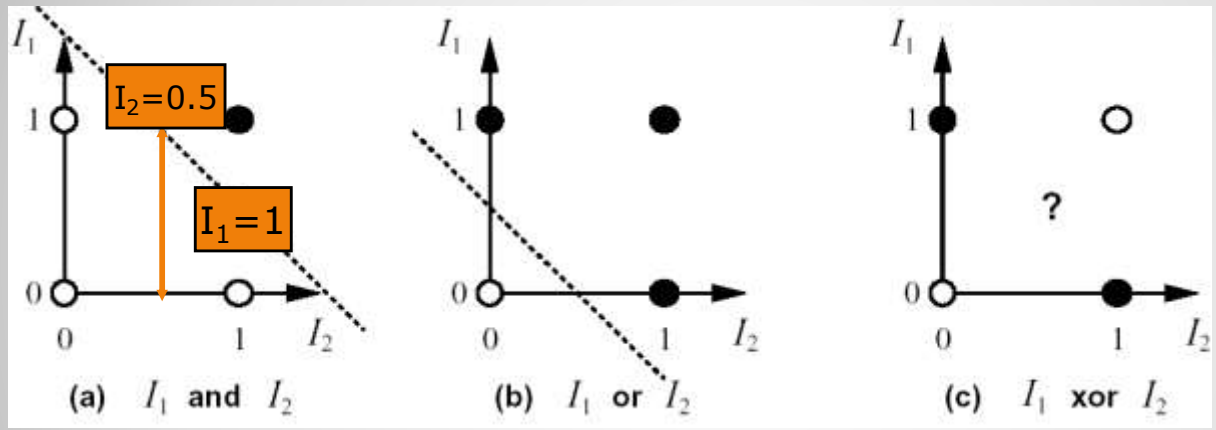
1. Redes Neuronais

(Biblio: Russel & Norvig)

- Se os coeficientes sinápticos não fossem 1 teríamos:
  - $x_1.w_1 + x_2.w_2 = 0$
  - $X_2 = -w_1/w_2.x1$
  - Ou seja, os valores (relativos) de w1 e w2 regulam o declive da recta
- E se w0 não fosse 0, teríamos:
  - $x_1.w_1 + x_2.w_2 + w_0 = 0$
  - $X_2 = -w_1/w_2.x1 - w_0/w_2$
  - Ou seja, o valor de w0 (relativamente a w2) regula a ordenada na origem
- Isto possibilita a separação de exemplos +e – em situações diversas
- Por isso a aprendizagem se faz regulando os valores dos *w's* de modo a ajustar a recta ao conjunto de exemplos de treino fornecidos, i.e., a separar os + dos -

1. Redes Neuronais

- Como as duas zonas + e – são separáveis por uma recta, diz-se que um perceptrão pode representar (apenas) Funções Linearmente Separáveis



Saída = 0

Saída = 1

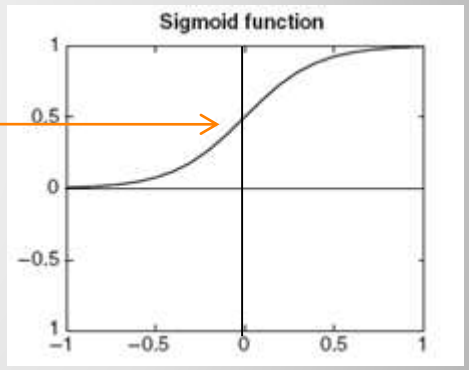
- Nesta figura:
  - (a) *I1+I2=1.5* Saída + se I1 e I2 forem ambas próximas de 1: AND
  - (b) *I1+I2=0.5* Saída – se I1 e I2 forem ambos próximos de 0: OR
  - (c) Representa a função XOR. Esta função NÃO é Linearmente Separável porque nenhuma recta consegue separar os exemplos positivos dos negativos. Um único perceptrão não pode representar um XOR.

1. Redes Neuronais

- A recta que separa os exemplos positivos dos negativos chama-se **superfície de decisão** (decision surface)
- Para um perceptrão é sempre linear, mesmo que a função de activação o não seja. Por exemplo, para a unidade sigmóide cuja função de activação é traduzida por

$$o = \sigma(s) = \frac{1}{1+e^{-s}}$$

- A condição de decisão será $\frac{1}{1+e^{-s}} = \frac{1}{2}$
- Que resolvida dá



$$1+e^{-s} = 2 \qquad e^{-s} = 1 \qquad \ln\left(e^{-s}\right) = \ln(1) \qquad -s = 0$$

$$s = x1 + x2 \qquad \textbf{(com w1=w2=1 e w0=0)}$$

$$x2 = -x1$$

- Tal como para a unidade linear e para função de activação sinal

3. Treino de Perceptrões e de Outras Unidades

- Algoritmos de treino:
  1. *Perceptron Training Rule*
  2. *Gradient Descent*
  3. *Stochastic Approximation to Gradient Descent* **(Delta Rule)**
- Em qualquer deles:
  - Ao perceptrão ou unidade são aplicadas entradas que constituem exemplos de treino classificados como "positivos" e "negativos"
  - A cada um corresponde um valor alvo (*target*) que se compara com um resultado: A saída apresentada pelo perceptrão ou unidade linear
  - Se este resultado gerar uma classificação errada, reajustam-se os coeficientes sinápticos
  - Terminado o treino, em presença de exemplos diferentes dos utilizados, o perceptrão ou unidade deverá responder correctamente (**generalização**)

1. Redes Neuronais

3.1 *Perceptron Training Rule*

- Os coeficientes *w* são inicializados com valores aleatórios
- Por cada exemplo aplicado ao perceptrão, a alteração dos coeficientes *w* é feita segundo a regra:

$$w_i \leftarrow w_i + \Delta w_i$$

$$\Delta w_i = \eta (t - o) x_i$$

t = *target value* (classe) para o exemplo actual
o = *output* (valor da saída do perceptrão)
$\boldsymbol{x_i}$ = *input* ao qual foi aplicado o atributo *i* do exemplo
η = ***Learning Rate***: Constante de baixo valor (i.e. 0,05)

- Porque é que este processo converge para os valores *w* pretendidos ?
  - Se *t-o=0,* nenhuma actualização é realizada, o que está correcto
  - Se *t=+1* e *o=-1*, os *w* devem aumentar para que a Função Sinal receba como entrada um valor mais alto e passe a dar como resultado *+1*
  - Neste caso, para uma entrada $x_i>0$, o aumento de w_i resultará bem. Ora, também neste caso será positivo porque $t-o>0$, $x_i>0$ e $\eta>0$

1. Redes Neuronais

- Pode demonstrar-se que existe convergência para os valores de *w* que classificarão correctamente os exemplos, desde que:
  - Os exemplos de treino sejam Linearmente Separáveis
  - η tenha um valor suficientemente baixo

3.2 *Gradient Descent*

- Considere-se uma Unidade Linear:
  - A sua saída é dada por

$$o(\vec{x}) = \vec{w}.\vec{x}$$

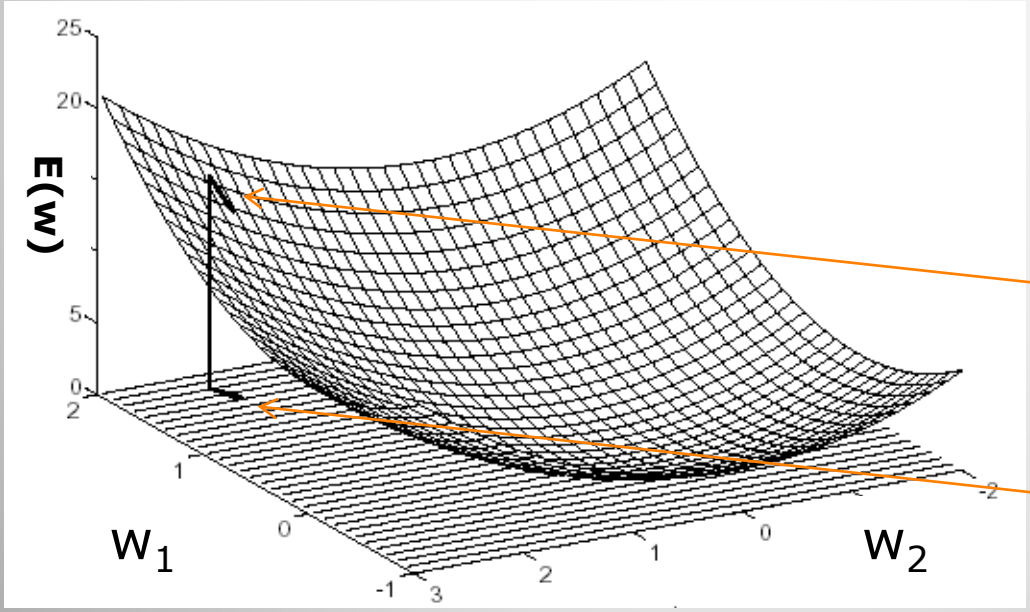
  - Para iniciar a dedução do algoritmo, há que definir uma medida do erro observado entre um valor alvo e a saída da Unidade Linear
  - Seja a Soma do Erro Quadrático (SSE):

$$E(\vec{w}) = \frac{1}{2}\sum_{d \in D}(t_d - o_d)^2$$

D = conjunto de exemplos de treino
t_d = target value para o exemplo *d*
o_d = saída da Unidade Linear para o exemplo *d*

1. Redes Neuronais

- Note-se que se exprimiu o erro *E* como função de *w* porque é em *w* que vamos actuar de modo a minimizar a diferença *t-o* entre *target* e *output* (o_d é função de w)
- A variação de $E(\vec{w})$ em função dos coeficientes *w* pode ser vista graficamente:



$$E(\vec{w}) = \frac{1}{2}\sum_{d \in D}(t_d - o_d)^2$$

Gradiente negado (neste ponto)

Direcção no plano w_1, w_2 correspondente à variação mais rápida de *E(w)*

1. Redes Neuronais

- O gradiente de $E(\vec{w})$ é dado pelas suas derivadas parciais:

$$\nabla E[\vec{w}] \equiv \left[\frac{\partial E}{\partial w_0}, \frac{\partial E}{\partial w_1}, \cdots \frac{\partial E}{\partial w_n}\right]$$

  - Exprime a direcção que produz o aumento mais rápido de $E(\vec{w})$
  - Como pretendemos uma diminuição, a expressão do gradiente terá de ser multiplicada por –1 (o vector muda de sentido)

- No *Gradient Descent* os *w* são actualizados assim:

$$w_i \leftarrow w_i + \Delta w_i \quad \text{em que} \quad \Delta w_i = -\eta \frac{\partial E}{\partial w_i} \qquad \text{(eq.1)}$$

  - Agora, há que determinar a expressão de

$$\frac{\partial E}{\partial w_i}$$

1. Redes Neuronais

- Como a função de erro é

$$E(\vec{w}) = \frac{1}{2}\sum_{d \in D}(t_d - o_d)^2$$

- Temos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial w_i} &= \frac{\partial}{\partial w_i}\frac{1}{2}\sum_d (t_d - o_d)^2 \\
&= \frac{1}{2}\sum_d \frac{\partial}{\partial w_i}(t_d - o_d)^2 \\
&= \frac{1}{2}\sum_d 2(t_d - o_d)\frac{\partial}{\partial w_i}(t_d - o_d) \\
&= \sum_d (t_d - o_d)\frac{\partial}{\partial w_i}(t_d - \vec{w}\cdot\vec{x_d})
\end{aligned}$$

- Donde:

$$\frac{\partial E}{\partial w_i} = \sum_d (t_d - o_d)(-x_{i,d}) \qquad \text{(eq.2)}$$

1. Redes Neuronais

- Substituindo eq.2 na eq.1 obtém-se a **correcção** Δw_i **dos factores** ***w_i*** em cada passo do algoritmo:

$$\Delta w_i = -\eta \frac{\partial E}{\partial w_i} \quad \text{(eq.1)}$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_i} = \sum_d (t_d - o_d)(-x_{i,d}) \quad \text{(eq.2)}$$

$$\Delta w_i = \eta \sum_{d \in D} (t_d - o_d) x_{id}$$

d é o índice do exemplo
D é o conjunto de todos os exemplos

- Resumo do *Gradient Descent*:
  - Inicializar os coeficiente *w* aleatoriamente
  - Aplicar todos os exemplos de treino à unidade linear
  - Calcular o erro Δw_i para cada coeficiente *w* segundo a eq. anterior
  - Recalcular cada w_i por adição do respectivo Δw_i calculado pela eq. acima
  - Voltar ao passo 2 até que o erro seja suficientemente baixo

1. Redes Neuronais

- O *Gradient Descent*
  - Converge para um vector de factores *w* que minimiza o erro
  - Se os exemplos não forem linearmente separáveis, o erro é minimizado mas nem para todos os exemplos se atingirá o alvo
  - η tem de ser suficientemente baixo para não se "ultrapassar" o ponto de erro mínimo. Por isso é vulgar reduzir η ao longo das iterações de treino

- Desvantagens do Gradient Descent:
  - Por vezes a convergência é muito lenta (alguns milhares de passos)
  - Se o valor de erro tem mínimos locais, não há a garantia de ser atingido o mínimo absoluto

1. Redes Neuronais

GRADIENT-DESCENT($training\_examples, \eta$)

Each training example is a pair of the form $\langle \vec{x}, t \rangle$, *where* $\vec{x}$ *is the vector of input values, and* t *is the target output value.* η *is the learning rate (e.g., .05).*

- Initialize each w_i to some small random value
- Until the termination condition is met, Do
  - Initialize each Δw_i to zero.
  - For each $\langle \vec{x}, t \rangle$ in *training_examples*, Do
    - Input the instance $\vec{x}$ to the unit and compute the output o
    - For each linear unit weight w_i, Do

$$\Delta w_i \leftarrow \Delta w_i + \eta(t - o)x_i$$

  - For each linear unit weight w_i, Do

$$w_i \leftarrow w_i + \Delta w_i$$

Gradient Descent

Note-se que o valor de correcção Δw_i a aplicar a cada coeficiente w_i, é calculado somando os erros provenientes da apresentação de todos os exemplos de treino uma vez que

$\Delta w_i = \Delta w_i + \eta(...)$

figura dentro do ciclo *"exemplos de treino"*

Compara a saída, *o*, da unidade linear, com o alvo (*target*)

1. Redes Neuronais

3.3 *Stochastic Approximation to Gradient Descent*

- Também designado por *Incremental Gradient Descent*
- Tenta ultrapassar alguns inconvenientes do *Gradient Descent*
- A diferença reside no seguinte:
  - O valor de correcção Δw_i de cada coeficiente w_i é calculado logo após a apresentação de um só exemplo, em vez de se somarem os erros de todos os exemplos
  - Ou seja, em vez de

$$\Delta w_i = \eta \sum_{d \in D} (t_d - o_d) x_{id}$$

  - Usa-se apenas

$$\Delta w_i = \eta (t - o) x_i$$

← ***Delta Rule***

1. Redes Neuronais

Stochastic Approximation to Gradient Descent

Each training example is a pair of the form $\langle \vec{x}, t \rangle$*, where* $\vec{x}$ *is the vector of input values, and* t *is the target output value.* η *is the learning rate (e.g., .05).*

- Initialize each w_i to some small random value
- Until the termination condition is met, Do
  - Initialize each Δw_i to zero.
  - For each $\langle \vec{x}, t \rangle$ in *training_examples*, Do
    - Input the instance $\vec{x}$ to the unit and compute the output o
    - For each linear unit weight w_i, Do

$$w_i = w_i + \eta(t - o)x_i$$

  - For each linear unit weight w_i, Do

~~$w_i \leftarrow w_i + \Delta w_i$~~

Stochastic Approximation to Gradient Descent)

Este algoritmo pode obter-se do anterior (*Gradient Descent*) modificando-o da forma apresentada na figura ao lado

Agora o valor de correcção Δw_i a aplicar a cada coeficiente w_i, é calculado imediatamente após se saber o erro Δw_i resultante de um só exemplo de treino, e não da soma de todos. Isto porque o somatório $\Delta w_i = \Delta w_i + \eta(...)$ desapareceu

Compara a saída, *o*, da unidade linear, com o alvo (*target*)

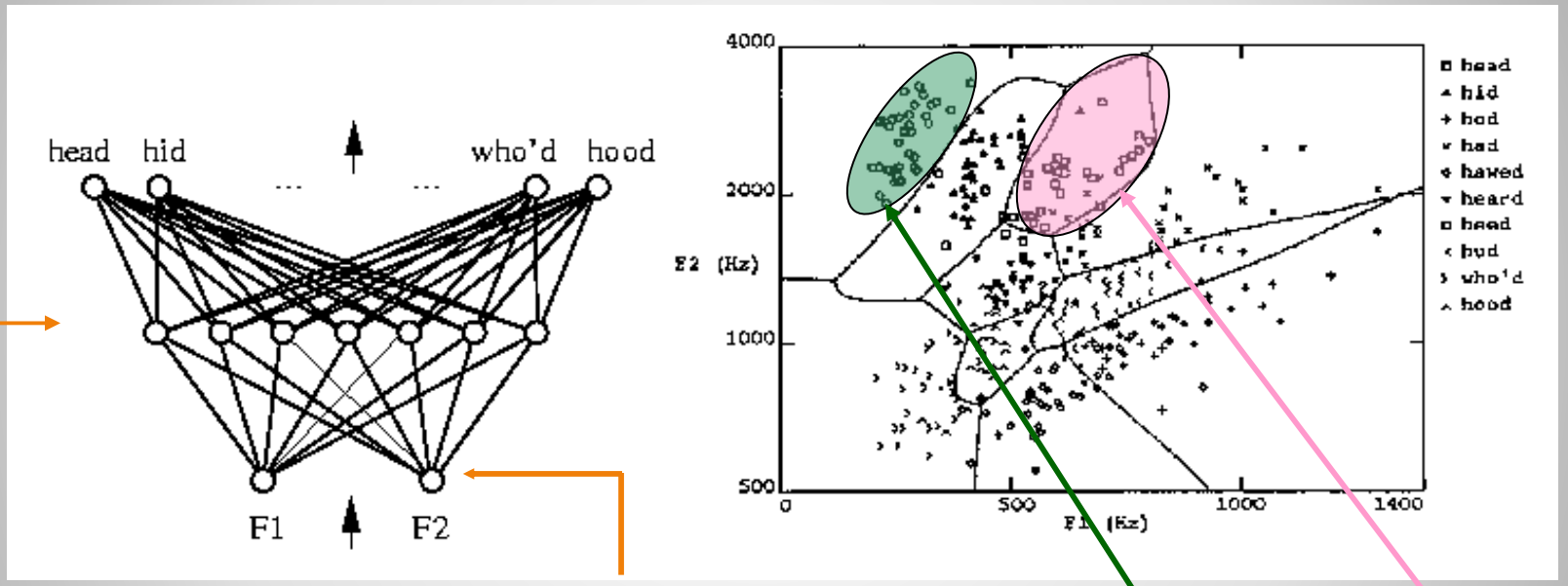
1. Redes Neuronais

4. Unidade Sigmóide e Tangente

- Os perceptrões e as unidades lineares apenas podem representar superfícies de decisão lineares.
- As Redes Neuronais multi-nível, treinadas pelo *BackPropagation Algorithm*, podem representar superfícies de decisão de forma muito variada:
  - O exemplo seguinte mostra superfícies de decisão não lineares obtidas num sistema de reconhecimento de voz que envolve a distinção de 10 vogais todas pronunciadas num contexto "h...d": "hid", "had", "head", "hood", etc.
- Redes Neuronais com estas características usam unidades não lineares, normalmente de função sigmoide ou tangente hiperbólica, distribuídas por várias camadas (normalmente 2 ou 3) interligadas entre si

1. Redes Neuronais

- Distinção entre 10 vogais num contexto "h...d"



Duas camadas de Unidades Sigmoide

Duas Input Units para as frequências f_1 e f_2

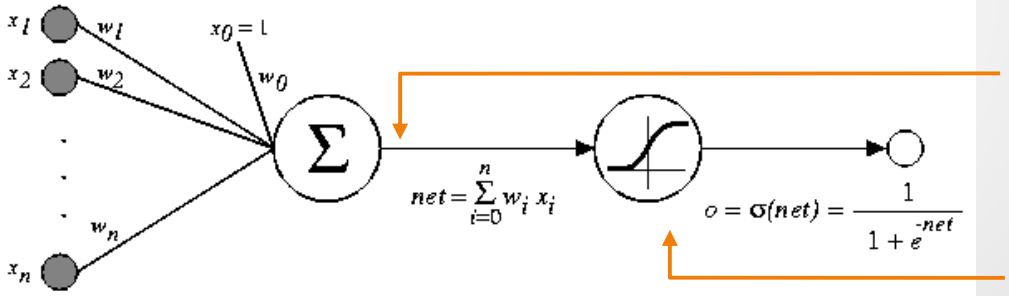
"heed"

"head"

- As superfícies de decisão delimitam zonas dentro das quais diferentes exemplos de treino referentes à mesma palavra são efectivamente reconhecidos como sendo "a mesma palavra"

1. Redes Neuronais

- A opção pela função sigmóide deve-se aos seguintes factos:
  - É não linear
  - É contínua e diferenciável, o que permite a aplicação dos princípios usados no Gradient Descent
  - É semelhante à Função Sinal, o que sugere um comportamento parecido com o desta função



$\sigma(x)$ is the sigmoid function

$$\frac{1}{1 + e^{-x}}$$

Unidade Sigmóide:

Calcula uma combinação linear das entradas, *net*, tal como a linear

A saída ***o*** é gerada por uma função contínua:

$$o = \sigma(net) = \frac{1}{1 + e^{-net}}$$

1. Redes Neuronais

- Unidade Tangente
  - Idêntica à sigmoide mas substituindo-a pela tangente hiperbólica

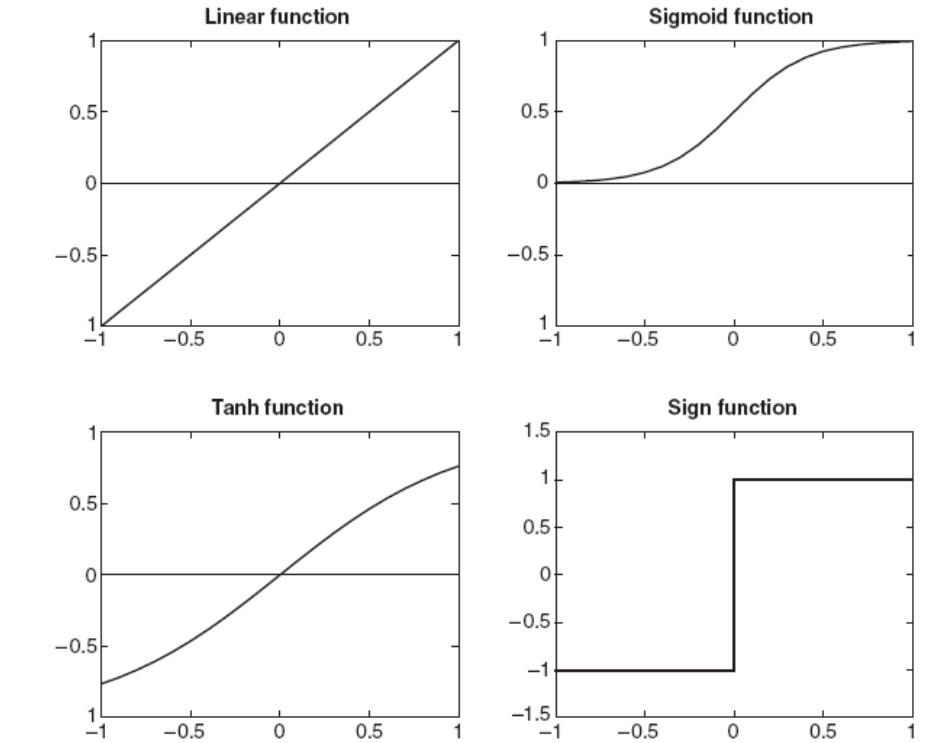


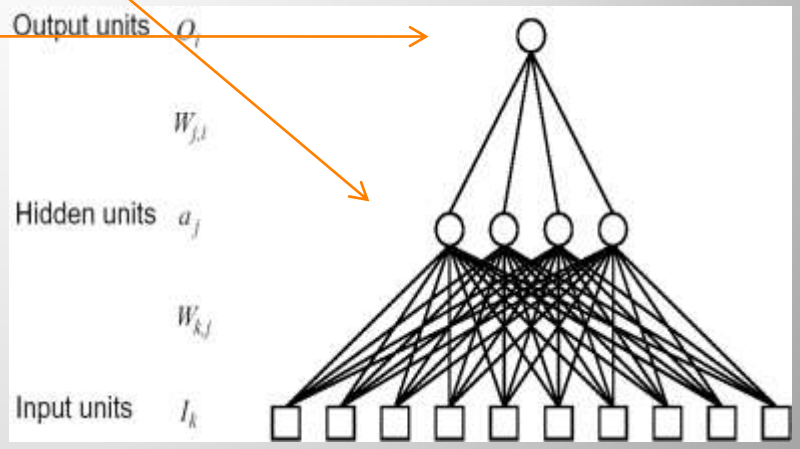
Figure 5.18. Types of activation functions in artificial neural networks.

1. Redes Neuronais

5. *Backpropagation*

- O BackPropagation Algoritm ajusta os coeficientes sinápticos de toda uma rede neuronal multi-camada
- Para a sua dedução, ver (Biblio: Tom Mitchell)
- Normalmente uma NN compreende 2 ou 3 grupos de unidades que definem 2 ou 3 camadas:
  - Camada(s) Hidden (Interna(s))
  - Camada Output

NOTA: em *input* não há "unidades" porque não se fazem cálculos



1. Redes Neuronais

Backpropagation Algorithm

Initialize all weights to small random numbers.
Until satisfied, Do

- For each training example, Do
  1. Input the training example to the network and compute the network outputs
  2. For each output unit k

$$\delta_k \leftarrow o_k(1 - o_k)(t_k - o_k)$$

  3. For each hidden unit h

$$\delta_h \leftarrow o_h(1 - o_h) \sum_{k \in outputs} w_{h,k}\delta_k$$

  4. Update each network weight $w_{i,j}$

$$w_{i,j} \leftarrow w_{i,j} + \Delta w_{i,j}$$

where

$$\Delta w_{i,j} = \eta \delta_j x_{i,j}$$

o_k = Saída da Output Unit de ordem *k*

t_k = *target* na Output Unit de ordem *k*

Cálculos entre Output e Hidden

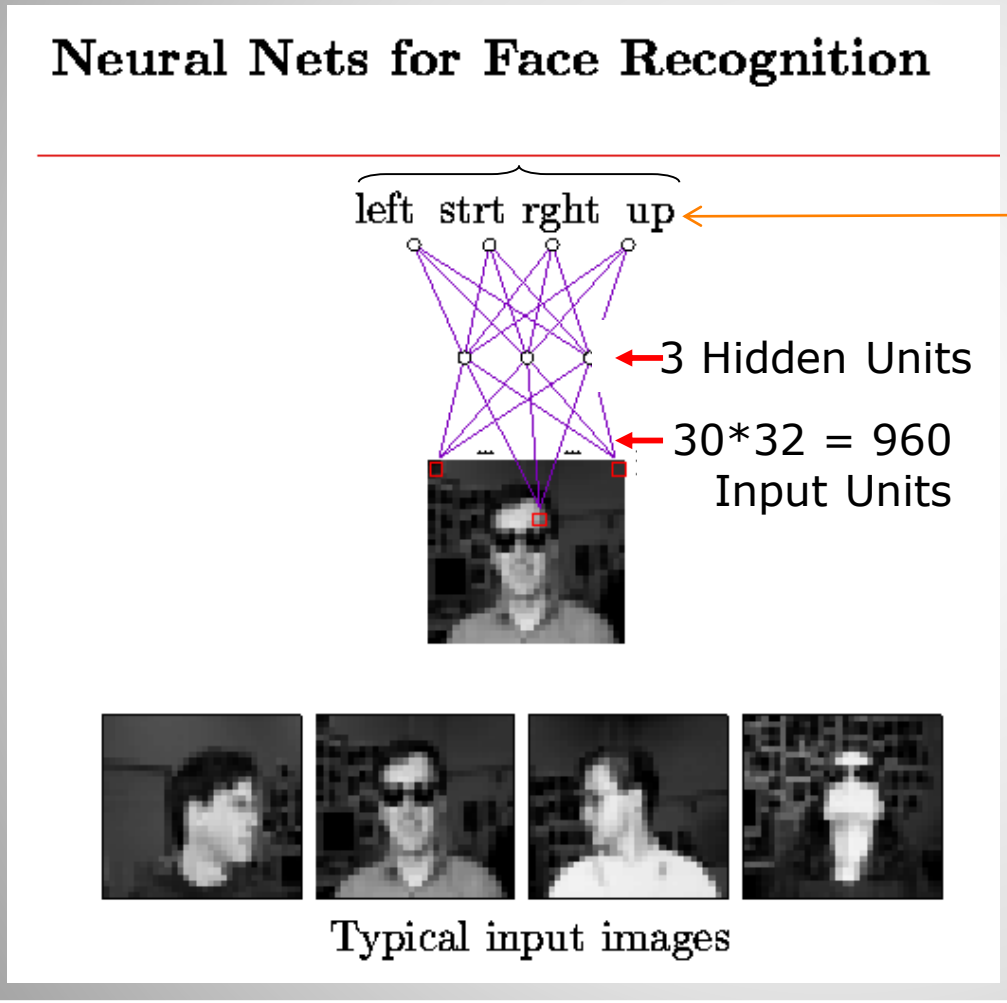
Cálculos entre Hidden e Input

w_{hk} = Coeficiente do *link* entre Hidden Unit *h* e Output Unit *k*

o_h = Saída da Hidden Unit de ordem *h*

Correcção de todos os w_{ij}

1. Redes Neuronais



4 Output Units para 4 posições

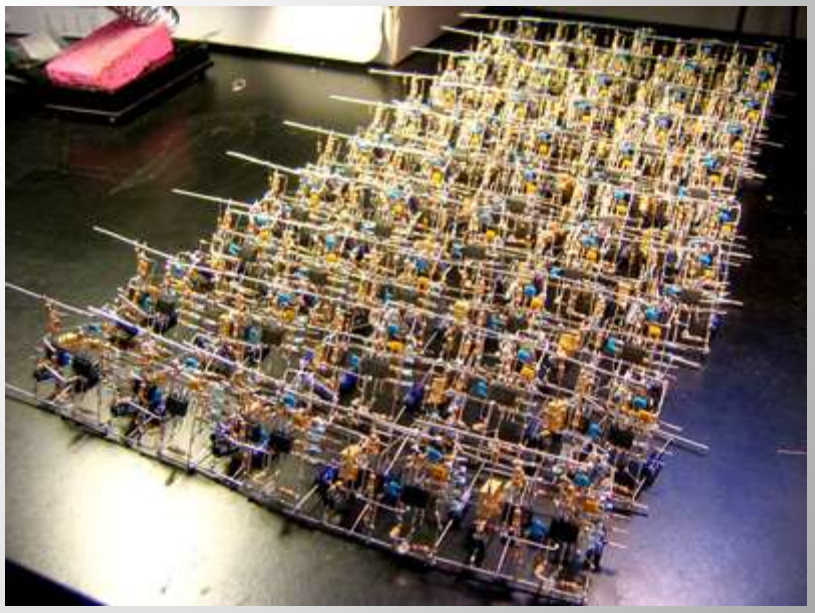
Rede de 960*3*4 treinada com 260 imagens:

- **Objectivo**: Classificar a posição da face: Olhar à esquerda, direita, cima baixo
- **Resultado**: 90% de acertos num conjunto de imagens distinto dos exemplos de treino

1. Redes Neuronais

Redes Neuronais

FIM



Escultura:
uma rede neuronal de 45 unidades implementadas com componentes electrónicos