Redes Neurais

Cristiane Neri Nobre

O que são Redes Neurais Artificiais?

Redes Neurais Artificiais (RNA) são modelos de computação com as seguintes propriedades:

- Capacidade de aprendizado
- Capacidade de generalização

O que são RNAs?

Uma rede neural é um processador maciçamente paralelo e distribuído, constituído de **unidades de processamento simples**, que têm a propensão natural para **armazenar conhecimento experimental** e torná-lo disponível para o uso. Ela se assemelha ao cérebro em dois aspectos:

1. O conhecimento é adquirido pela rede a partir de seu ambiente através de um **processo de aprendizagem**

2. Forças de conexão entre neurônios, conhecidas como **pesos sinápticos**, são utilizadas para armazenar o conhecimento adquirido.

Simon Haykin

O que são RNAs?

- RNA: estruturas distribuídas formadas por grande número de unidades de processamento conectadas entre si.

- Modelos inspirados no cérebro humano, compostos por várias unidades de processamento (“neurônios”)

- Interligadas por um grande número de conexões (“sinapses”)

- Eficientes onde métodos tradicionais têm se mostrado inadequados

Limitações das redes neurais:

- Não fornecem explicações: relação entre entrada/saída é obscura – efeito "caixa preta".
- Falta de um formalismo na especificação e análise:
  - necessidade de realizar árduas simulações até encontrar parâmetros e topologia adequados.
- Tempo de treinamento grande
- Necessitam muitos exemplos de treinamento

Potenciais áreas de aplicação das RNAs

- Classificação de padrões
- Agrupamento/categorização
- Aproximação de funções
    - Previsão
    - Otimização
    - etc...

RNA: Breve histórico

Década de 40 : O começo

- (1943) McCulloch & Pitts
  - Concentrou em descrever um modelo artificial de um neurônio biológico e apresentar suas capacidades computacionais
- (1949) Donald Hebb desenvolve algoritmo para treinar RNA (aprendizado Hebbiano)
  - Se dois neurônios estão simultaneamente ativos, a conexão entre eles deve ser reforçada

1950-1960: Anos de euforia

- (1958) Von Neumann mostra interesse em modelagem do cérebro (RNA)
  - The Computer and the Brain, Yale University Press

- (1958) Frank Rosenblatt implementa primeira RNA, a rede Perceptron
  - Ajuste iterativo de pesos
  - Prova teorema da convergência

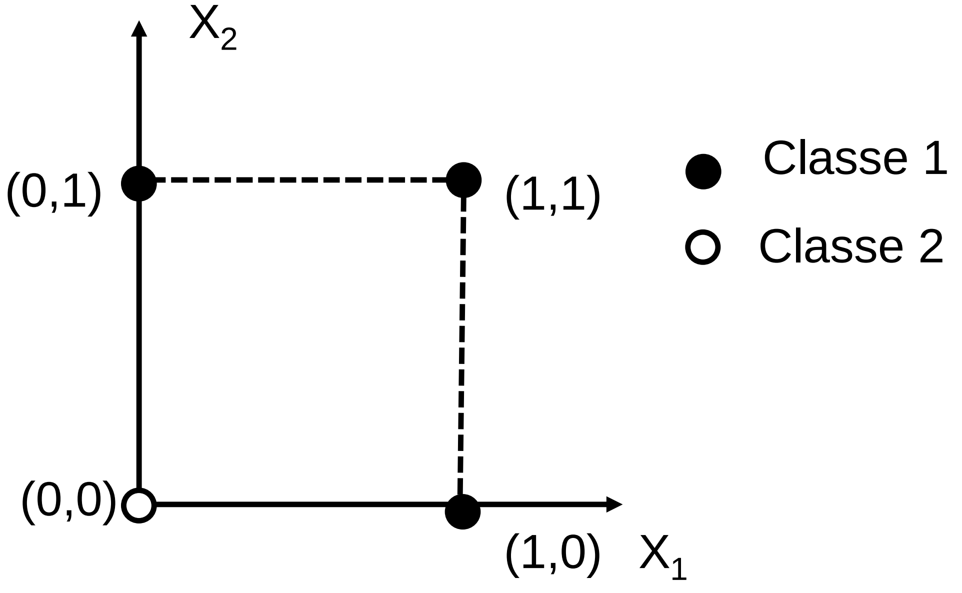
Década de 70: Pouca atividade

- (1969) Minsky & Papert analisam Perceptron e mostram suas limitações
    - Não poderiam aprender a resolver problemas simples como o **OU-exclusivo**
    - Causou grande repercussão

Implementando funções lógicas

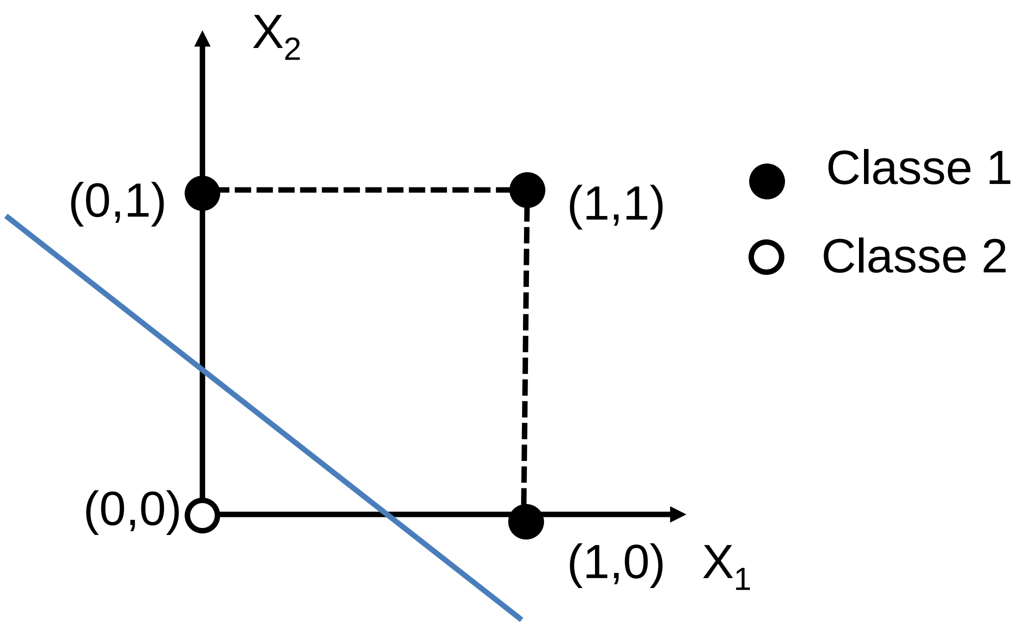
Exemplo 1: Implementando a função lógica OR

X_1	X_2	X_1 OR X_2
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	1



Implementando funções lógicas

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



Resposta:

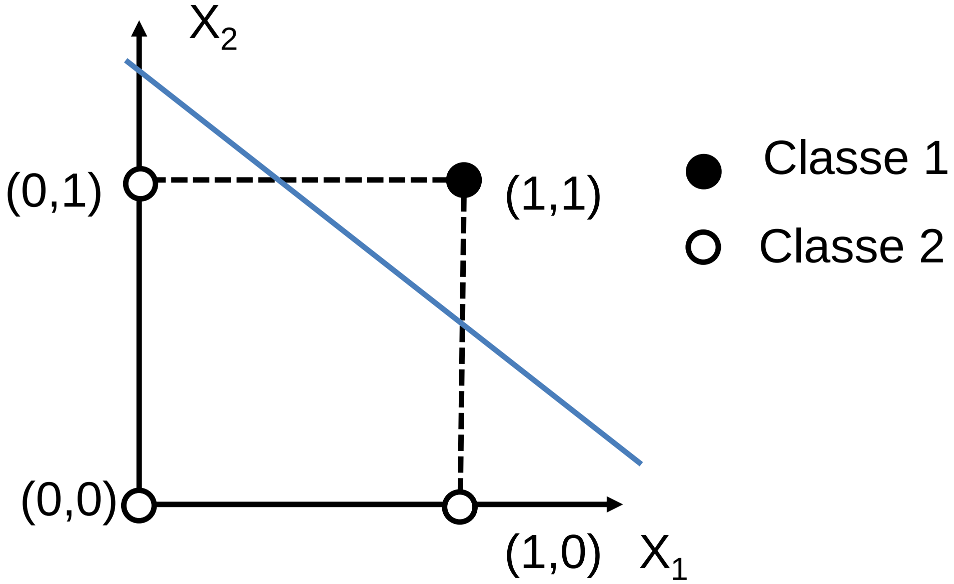
SIM!

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

Implementando funções lógicas

Exemplo 2: E como ficaria a função **AND**?

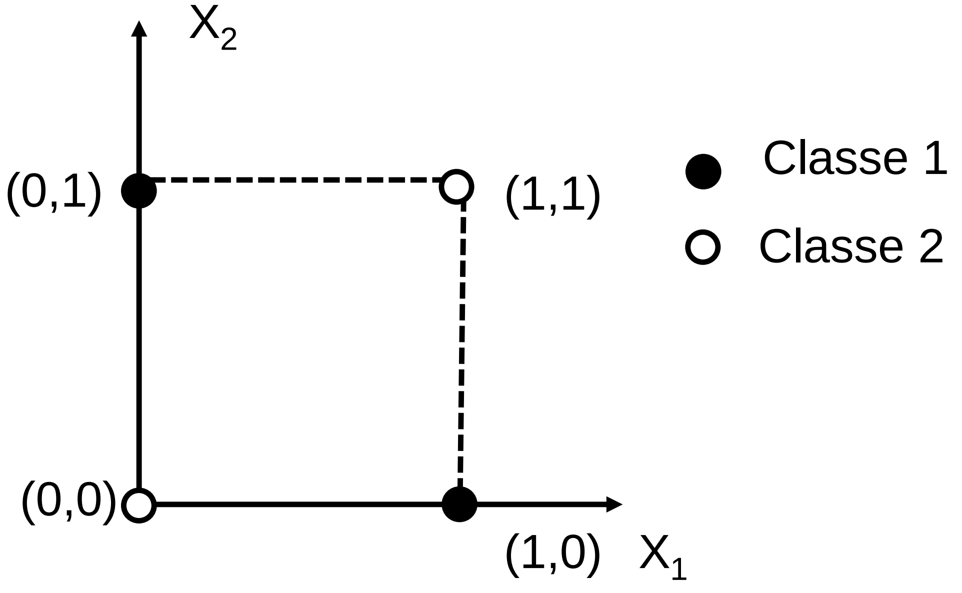
X_1	X_2	X_1 AND X_2
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1



Implementando funções lógicas

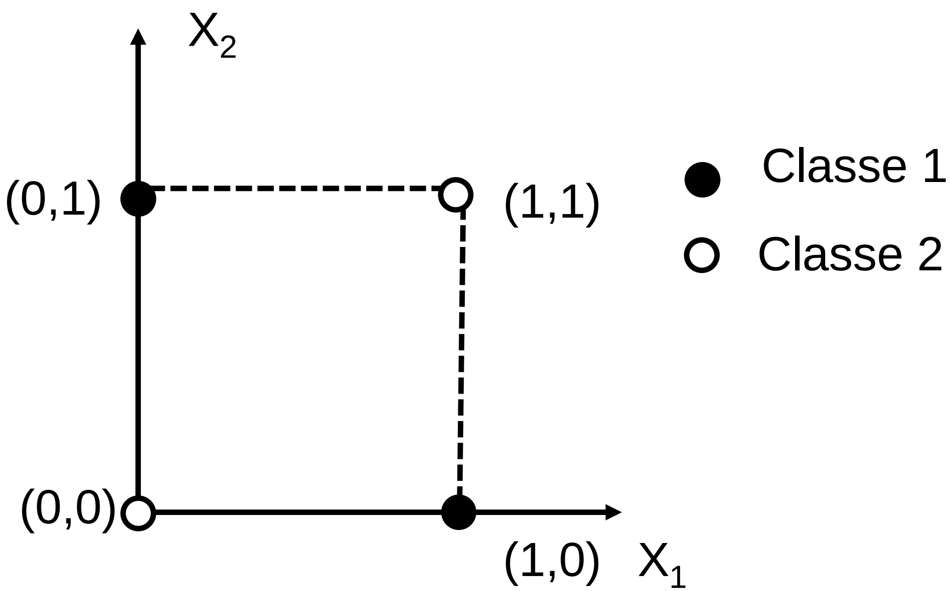
Exemplo 3: E como ficaria a função **XOR**?

X_1	X_2	X_1 XOR X_2
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0



Implementando funções lógicas

Exemplo 3: É possível encontrar uma reta que separe os pontos da Classe 1 (y=1) dos da Classe 2 (y=0)?



Resposta:

NÃO!

Década de 70: Pouca atividade

- Na década de 70, a abordagem conexionista ficou adormecida (**buraco negro**), apesar de alguns poucos trabalhos:

    - (1972) Kohonen e Anderson trabalham com RNAs associativas

    - (1975) Grossberg desenvolve a Teoria da Ressonância Adaptativa (redes ART)

Década de 80: A segunda onda

- (1982) Hopfield mostra que Redes Neurais podem ser tratadas como sistemas dinâmicos
- (1986) Hinton, Rumelhart e Williams, propõem algoritmo de aprendizagem para **redes multi-camadas**

Motivação para as RNAs: redes biológicas

- O cérebro humano contém em torno de 10^{11} neurônios, sua célula fundamental.

- Cada um desses neurônios processa e se comunica com milhares de outros continuamente e em paralelo.

- A estrutura individual dos nodos, a topologia de suas conexões e o comportamento conjunto destes nodos naturais formam a base para o estudo das RNAs.

Motivação para as RNAs: redes biológicas

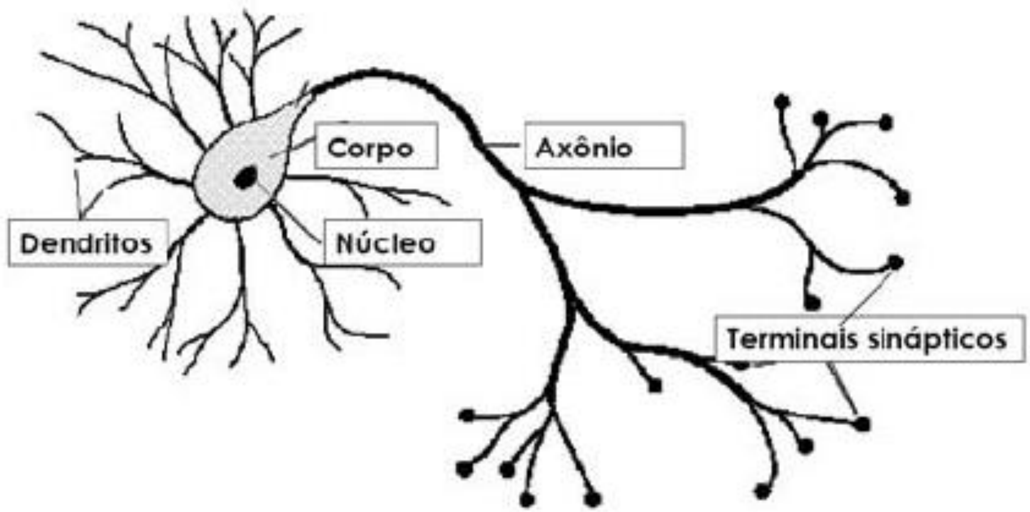
- O cérebro humano é responsável pelo que se chama de emoção, pensamento, percepção e cognição.

- Além disso, sua rede de nodos tem a capacidade de reconhecer padrões e relacioná-los, usar e armazenar conhecimento por experiência, além de interpretar observações.

- Assim, estruturas encontradas nos sistemas biológicos podem inspirar o desenvolvimento de novas arquiteturas para modelos de RNAs.

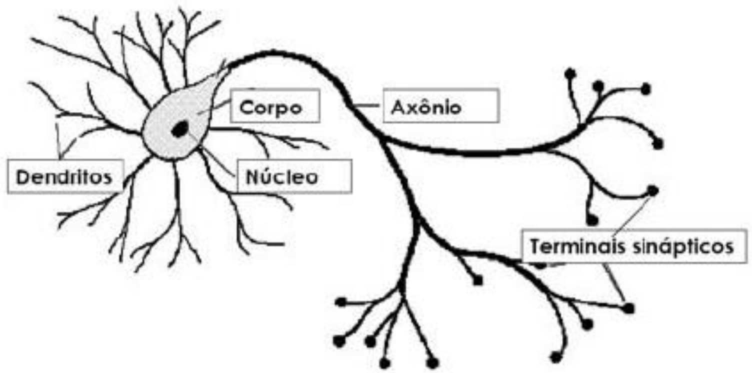
Neurônios biológicos

- Os neurônios são divididos em três seções: o **corpo da célula**, os **dentritos** e o **axônio**, cada um com funções específicas, porém complementares.



Estrutura de um neurônio biológico

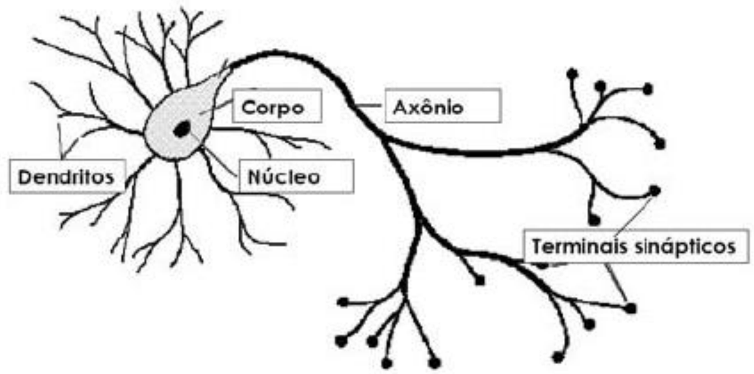
Neurônios biológicos



• Os **dentritos** têm por função receber as informações ou impulsos nervosos, oriundas de outros neurônios e conduzi-las até o **corpo celular**.

• No **corpo celular**, a informação é **processada**, e novos impulsos são gerados

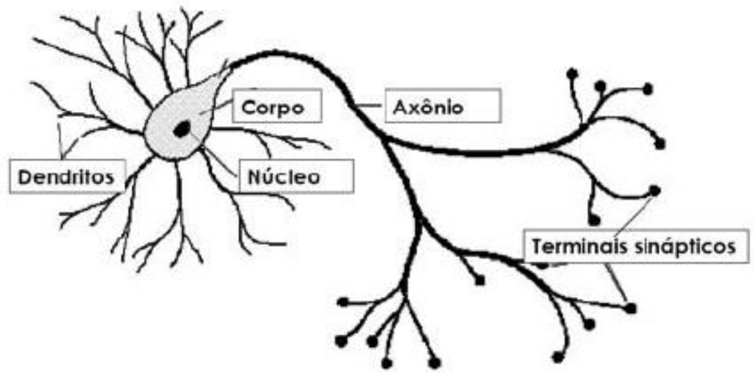
Neurônios biológicos



- Estes impulsos são transmitidos a outros neurônios, passando através do **axônio** até os dentritos dos neurônios seguintes.

- O ponto de contato entre a terminação axônica de um neurônio e o dendrito de outro é chamado de ***sinapses***.
É pelas sinapses que os nodos se unem funcionalmente, formando redes neurais.

Neurônios biológicos



• As sinapses funcionam como **válvulas**, e são capazes de **controlar a transmissão de impulsos** – isto é, o fluxo de informação – entre os nodos na rede neural.

Redes Neurais - Conceitos básicos

- **Estrutura geral das RNAs:**
  - Unidades de processamento n_i (nós)
  - Conexões w_{ij}
  - Saída
  - Topologia

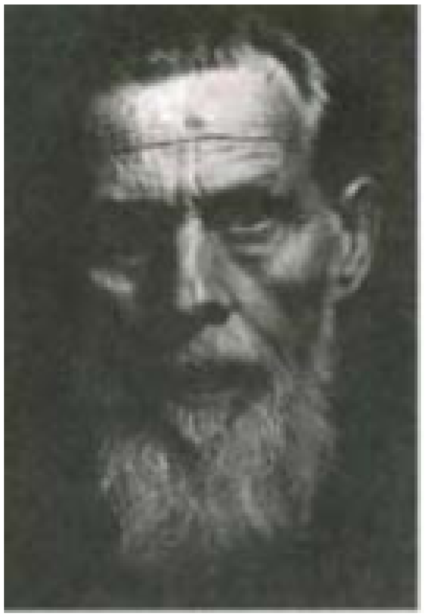
Conceitos básicos

- **Em linhas gerais o objetivo é**:

  ajustar os pesos da rede para **minimizar** alguma medida do erro no conjunto de treinamento.

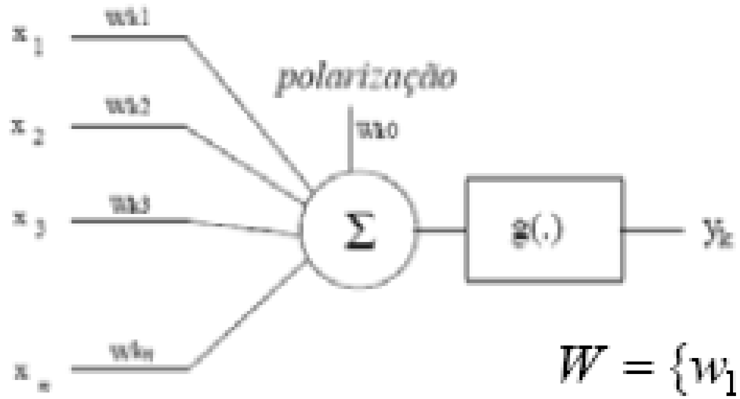
- Desse modo a aprendizagem é formulada como uma **busca de otimização** no **espaço de pesos**.

O neurônio de McCulloch-Pitts



Warren McCulloch

$x \in \{0,1\}$



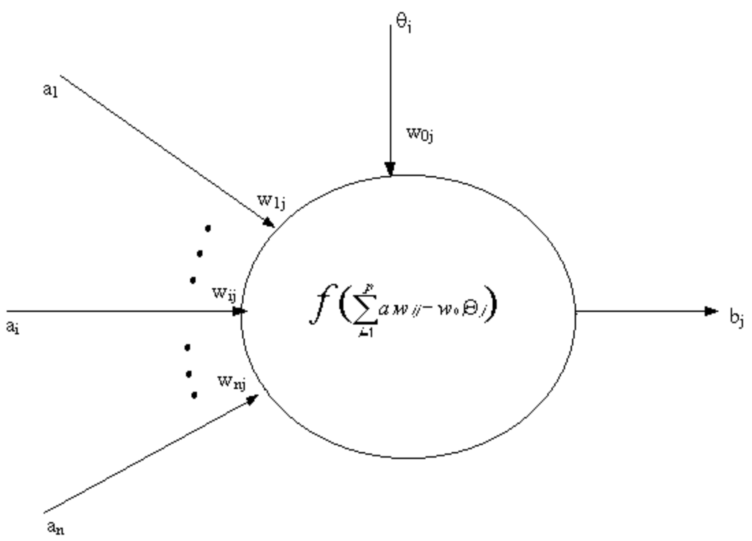
$y \in \{0,1\}$

$$W = \{w_1, w_2, \ldots, w_n\}$$
$$X = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$$

- $\boldsymbol{x_i}$ é a excitação de entrada na sinapse *i*;
- $\boldsymbol{y_k}$ é a resposta (ou saída) do neurônio *k*;
- $\boldsymbol{w_{ki}}$ é o peso sináptico da entrada *i* do neurônio *k*;
- ***g(.)*** é a função de ativação do neurônio.

Conceitos Fundamentais

- Modelo matemático de um neurônio



• Uma ligação da unidade j para unidade i serve para propagar a ativação a_j
desde j até i.

• Cada ligação tem um peso numérico $W_{j,i}$, que determina a sua intensidade.

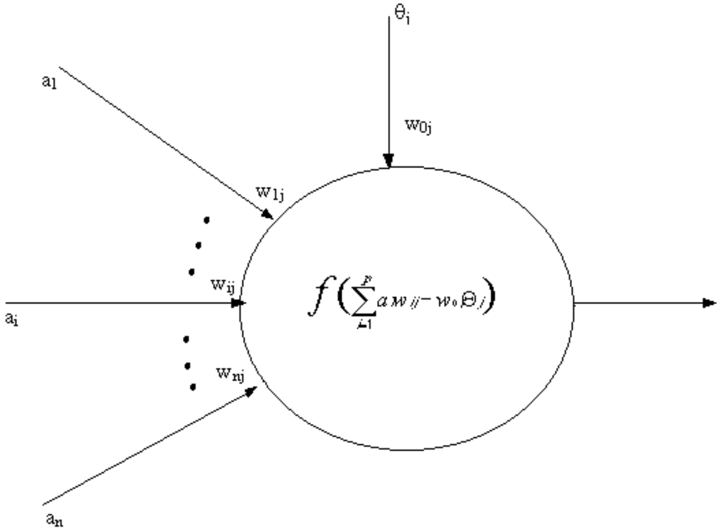
• Cada unidade calcula uma soma ponderada de suas entradas.

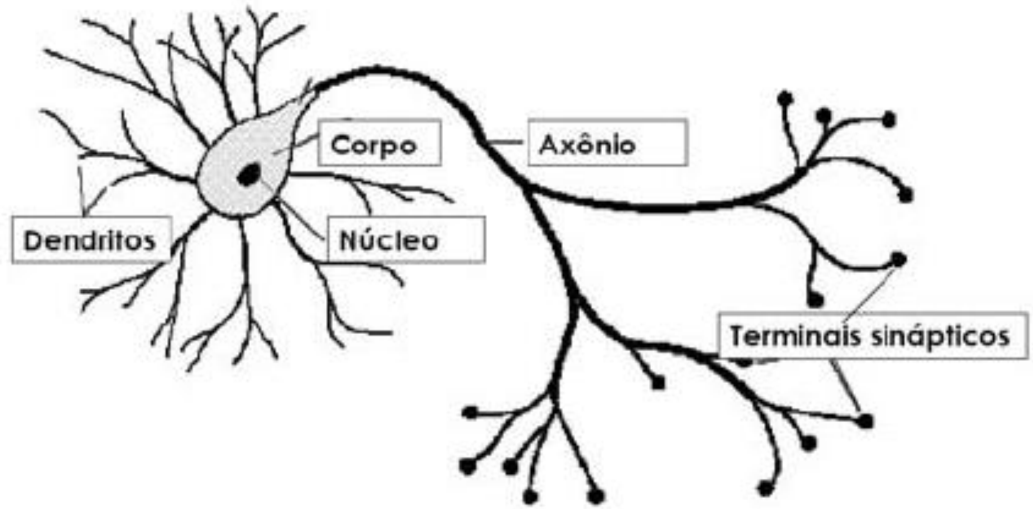
– Depois aplica uma função de ativação g a essa soma.

• O peso $W_{0,i}$ é conectado a uma entrada fixa a_0=-1

Conceitos Fundamentais

- Modelo matemático de um neurônio





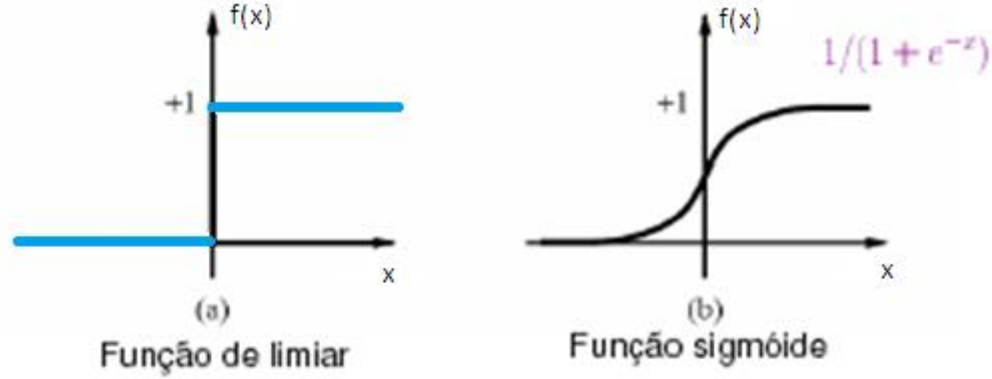
- Nesse modelo artificial, quem seriam as entradas (comparando-se com o modelo biológico)?
- Quem seria a saída?

Conceitos Fundamentais – Funções de ativação

A função de ativação tem que atender a dois critérios:

– Deve **estar ativa** (próxima de +1) para entradas "**corretas**" e **inativa** (próxima a 0) para entradas "**erradas**".

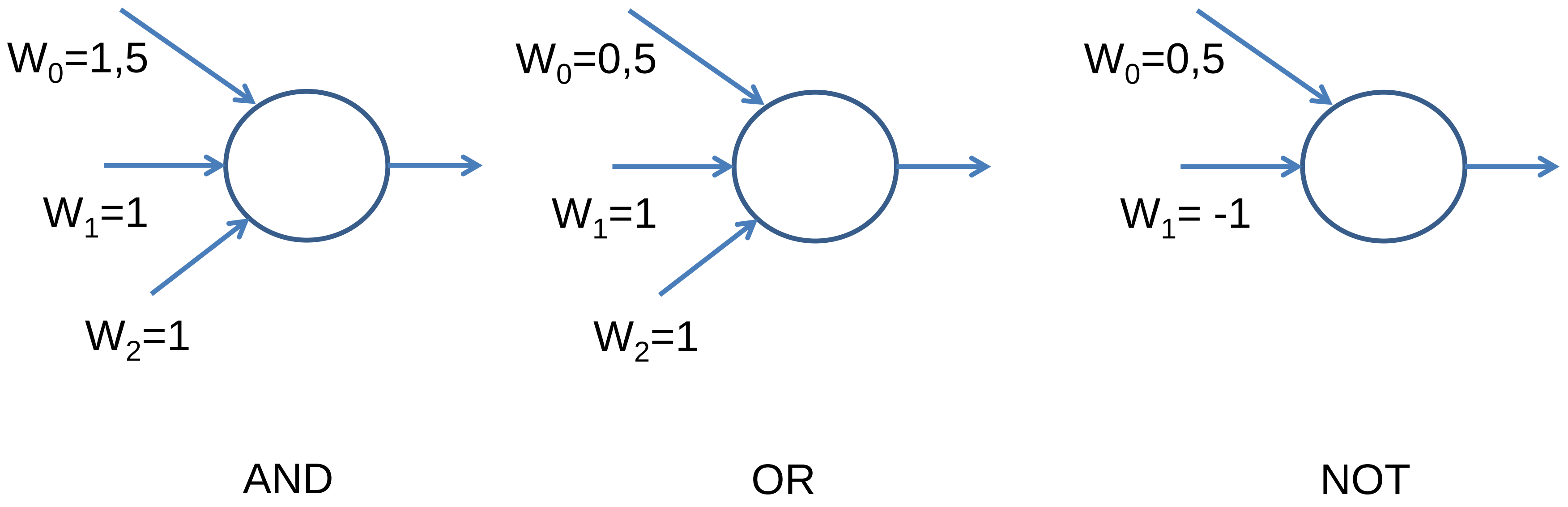
– Deve ser **não linear** para que a rede como um todo possa representar funções não-lineares.



https://pt.wikipedia.org/wiki/N%C3%BAmero_de_Euler

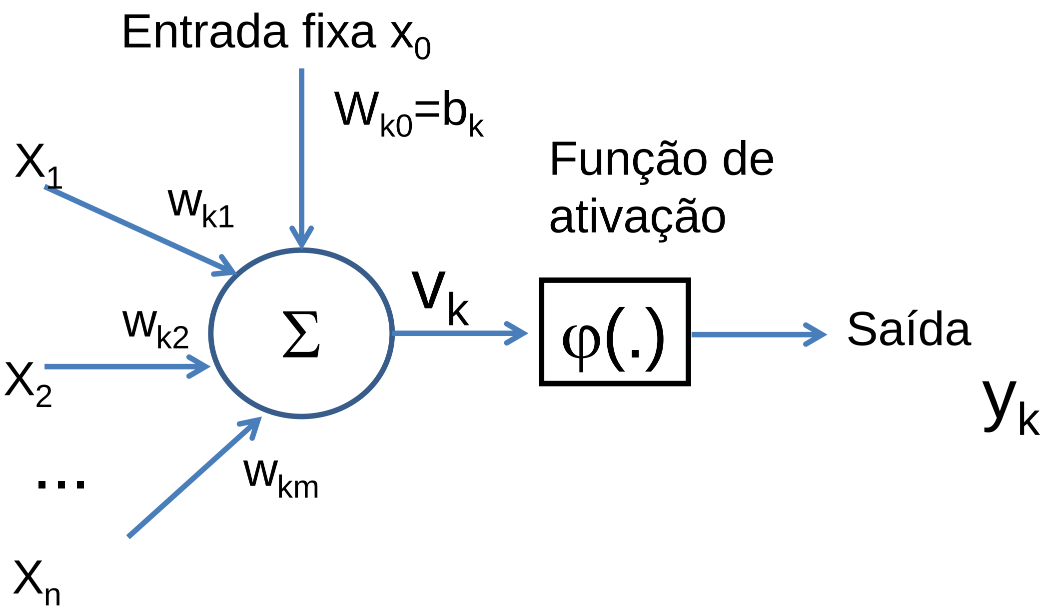
Implementando funções lógicas

Podemos utilizar as unidades para construir uma rede que calcule qualquer função booleana das entradas.



Neurônio de McCulloch-Pitts

O neurônio de McCulloch-Pitts pode ser modelado como um caso particular de um discriminador linear:



$$y_k = \begin{cases} 1 \; se \; v_k \geq 0 \\ 0 \; se \; v_k < 0 \end{cases}$$

$$v_k = \sum_{j=1}^{m} w_{kj} x_j - b_k$$

http://acroque.blogspot.com.br/2008/10/o-modelo-de-mcculloch-e-pitts-parte-1.html

Neurônio de McCulloch-Pitts

Podemos identificar três elementos básicos do modelo neural:

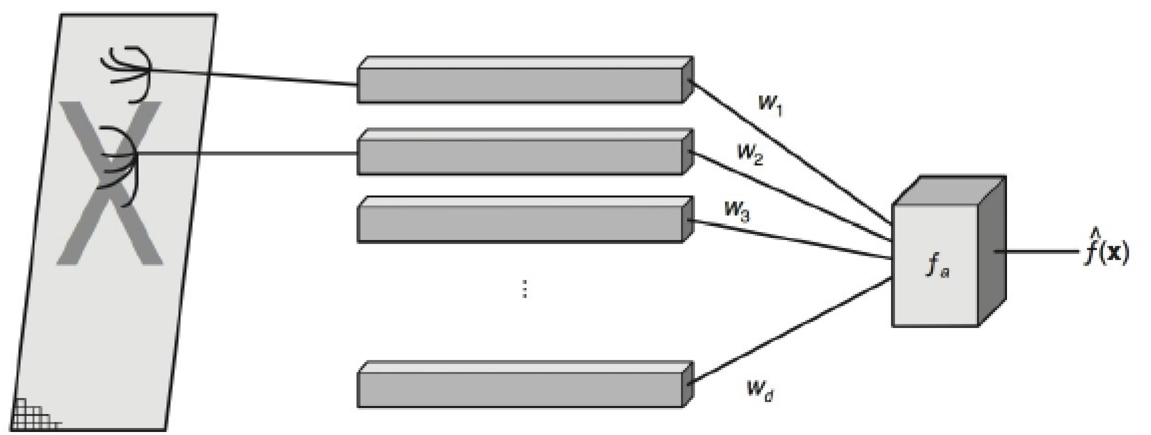
1. Um conjunto de *sinapses*

2. Um *somador* para somar os sinais de entrada, ponderados pelas respectivas sinapses do neurônio

3. Uma *função de ativação* para restringir a amplitude da saída de um neurônio. A função de ativação é também referida como função restritiva já que restringe (limita) o intervalo permissível de amplitude do sinal de saída a um valor finito.

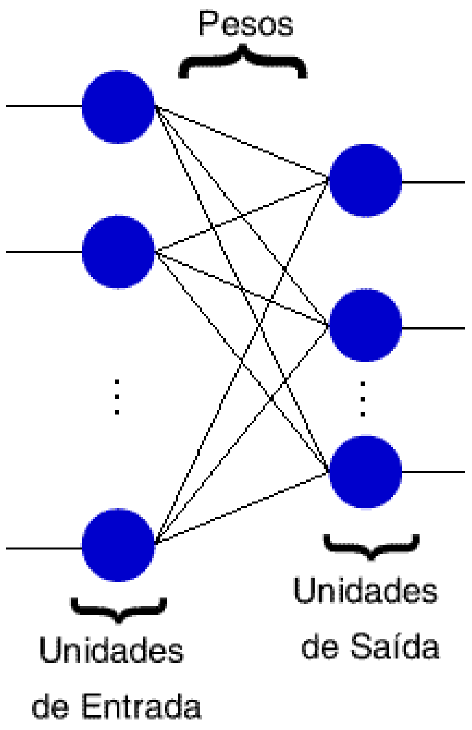
Perceptron

Perceptron Simples



Perceptron

O Perceptron, proposto por Rosenblatt, é composto pelo neurônio de McCulloch-Pitts, com Função de Limiar, e Aprendizado Supervisionado. Sua arquitetura consiste na entrada e uma camada de saída.



Perceptron - Características

- O Perceptron é usado para conjuntos de treinamento linearmente separáveis

- Inclusão de tendência ("bias")

$$S = \sum_{j=1}^{p} W_j . x_i - b$$

- O algoritmo de aprendizagem converge em um número finito de passos que classifica corretamente um conjunto de treinamento linearmente separável.

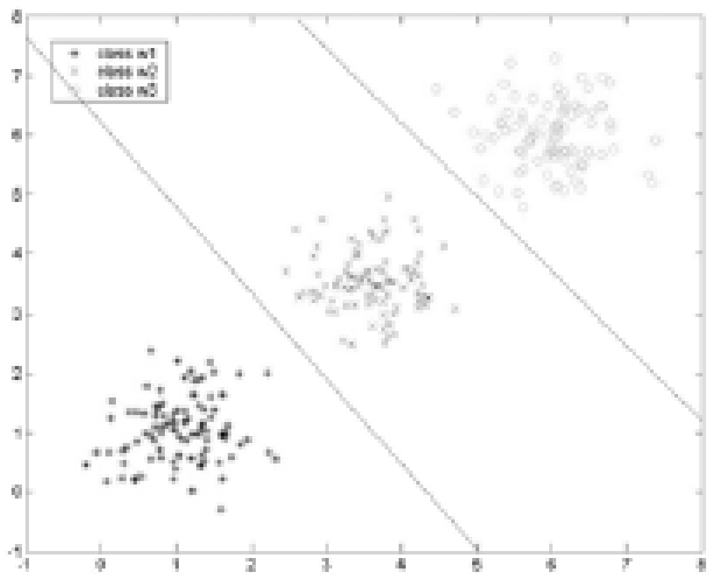
Perceptron - Características

- A superfície de decisão(curva de separação) forma um hiperplano, ou seja, para um dos lados está uma classe e para o outro lado está a outra classe.

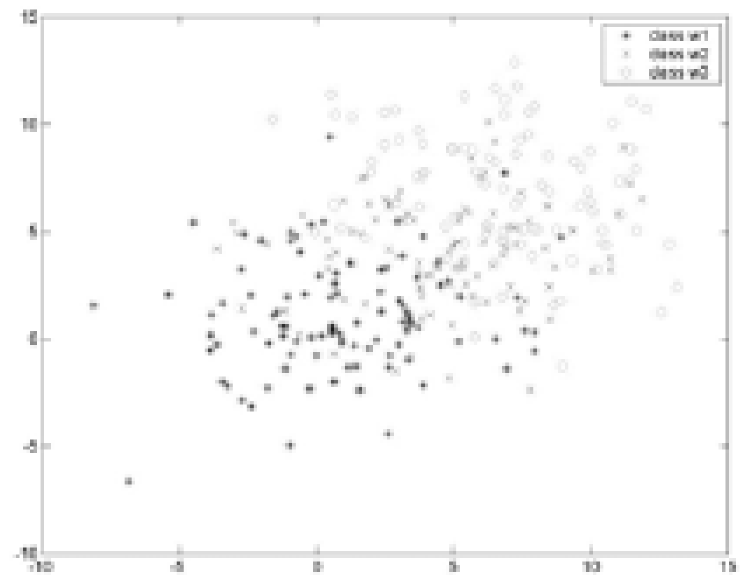
- Podemos “ver” o perceptron como uma superfície de separação em um espaço *N-dimensional* de instâncias.

- Um único perceptron consegue separar somente *conjuntos de exemplo linearmente separáveis.*

Perceptron - Características



Linearmente Separável



Linearmente Não–Separável

Perceptron - Características

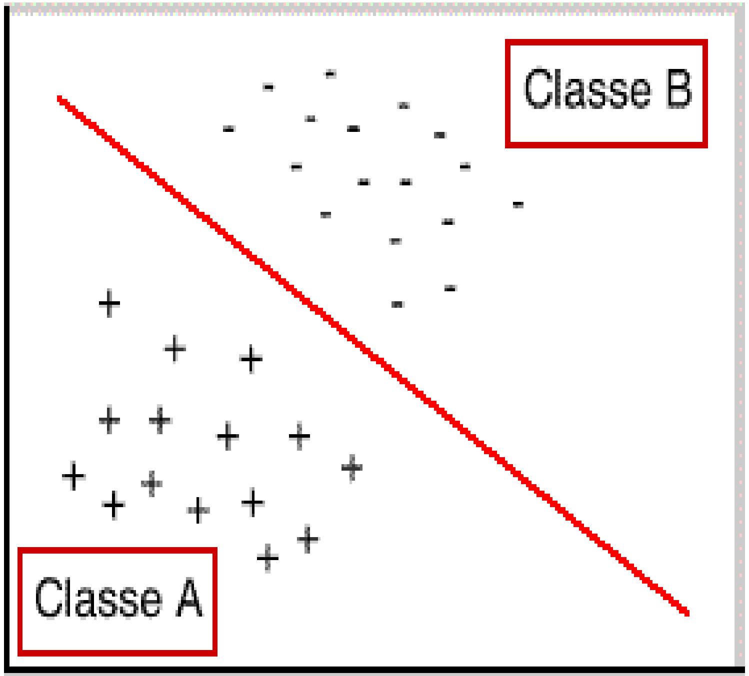


Fig. 1: Classes lineramente sepáraveis

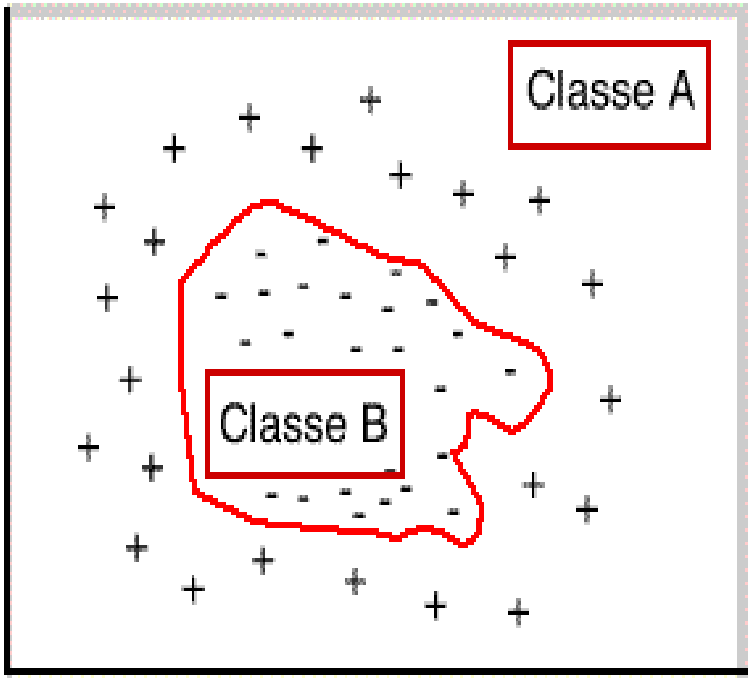


Fig. 2: Classes não lineramente sepáraveis

Algoritmo do Perceptron

Durante o processo de treinamento do Perceptron, busca-se encontrar um conjunto de pesos que defina uma reta que separe as diferentes classes, de forma que a Rede classifique corretamente as entradas apresentadas. Para que tal conjunto de pesos seja alcançado, ajustes são calculados segundo o algoritmo descrito a seguir:

Resumo do Algoritmo de Convergência do Perceptron

Variáveis e Parâmetros:

$x(n)$ = vetor de entrada $(m+1)$-por-1
$= [+1, x_1(n), x_2(n), \ldots, x_m(n)]^T$

$w(n)$ = vetor de pesos $(m+1)$-por-1
$=[b(n), w_1(n), w_2(n), \ldots, w_m(n)]T$

$b(n)$ = bias;

A camada de entrada deve possuir uma unidade especial conhecida como bias, usada para aumentar os graus de liberdade, permitindo uma melhor adaptação, por parte da rede neural, ao conhecimento a ela fornecido.

$y(n)$ = resposta real (quantizada)

$d(n)$ = resposta desejada;

$e(n)$ = erro na saída da unidade;

η = parâmetro da taxa de aprendizagem, uma constante positiva entre 0 e 1.

O valor da taxa de aprendizado define a magnitude do ajuste feito no valor de cada peso. Valores altos Fazem com que as variações sejam grandes, enquanto taxas pequenas implicam poucas variações nos pesos.
Esta magnitude vai definir a velocidade de convergência da rede.

Algoritmo do Perceptron

1 - *Inicialização:* Inicialize os pesos. Execute, então, os seguintes cálculos para os passos de tempo $n = 1, 2, ...$

2. *Ativação*. No caso de tempo n, ative o perceptron aplicando o vetor de entrada de valores contínuos $\mathbf{x}(n)$ e a resposta desejada $d(n)$.

3. *Cálculo da Resposta Real*. Calcule a resposta real do perceptron:

$$y(n) = \text{função}[\mathbf{w}^T(n)\mathbf{x}(n)]$$

onde função(.) é a Função de Limiar.

4. *Adaptação do vetor de peso*. Atualize o vetor de peso do perceptron:

$$\mathbf{w}(n+1) = \mathbf{w}(n) + \eta[d(n) - y(n)]\mathbf{x}(n)$$

onde

$$d(n) = \begin{cases} +1 \text{ } se \text{ } x(n) \text{ } pertence \text{ } à \text{ } classe \text{ } \delta_1 \\ -1 \text{ } se \text{ } x(n) \text{ } pertence \text{ } à \text{ } classe \text{ } \delta_2 \end{cases}$$

5. Continuação. Incremento o passo de tempo n em um e volte para o passo 2.

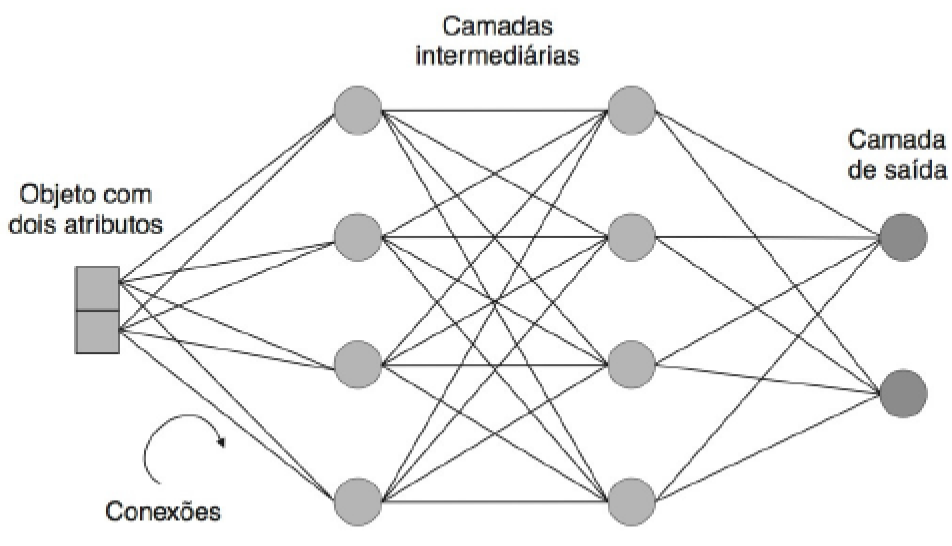
Algoritmo do Perceptron

- Quando devemos parar o treinamento, ou seja, parar a atualização dos pesos?
  - Escolha óbvia: continuar o treinamento até que o erro E seja menor que o valor pré-estabelecido.
  - Porém, isto implica em sobreajuste(*overfitting*).
  - O sobreajuste diminui a generalização da rede neural.

Perceptron - Conclusões

- Se um conjunto de exemplos de treinamento **E é não-separável**, então por definição não existe um vetor de pesos W que classifique corretamente todos os exemplos de treinamento em **E** utilizando o algoritmo de aprendizagem do perceptron. A alternativa mais natural é encontrar um vetor de pesos W* que classifique tantos exemplos de treinamento quanto possível de **E**. Tal conjunto de pesos é chamado de *ótimo.*

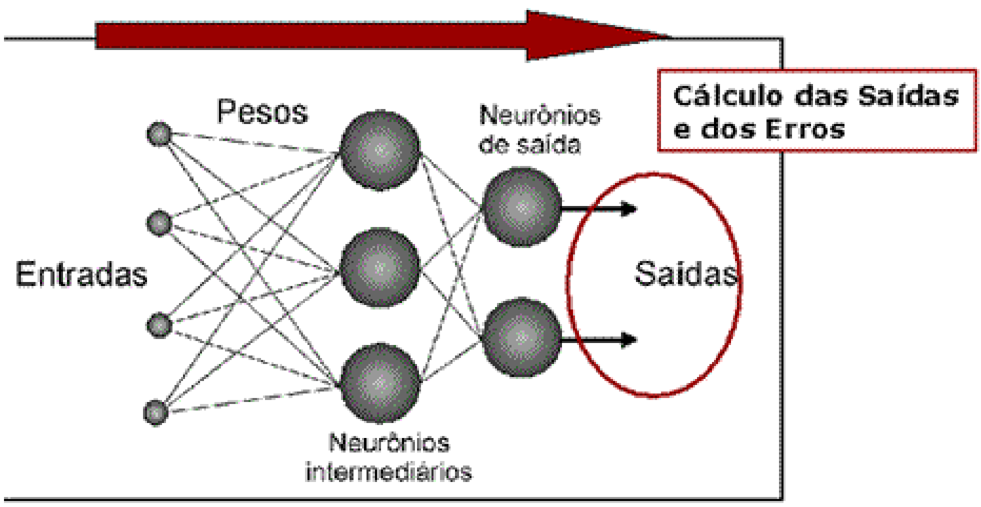
MLP – *MultiLayer* Perceptron



Algoritmo Backpropagation - MLP

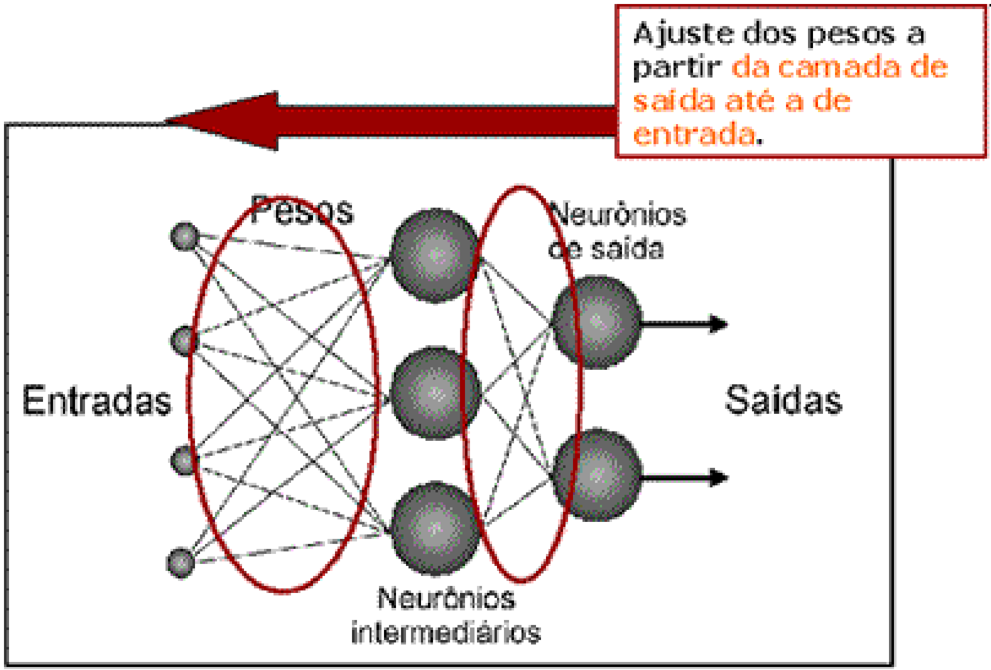
"**Backpropagation**" é um algoritmo para treinamento de Redes Multi-Camadas mais difundido. Baseia-se no **<u>Aprendizado Supervisionado por Correção de Erros</u>**, constituido de:

1° - Propagação (fase *forward*): Depois de apresentado o padrão de entrada, a resposta de uma unidade é propagada como entrada para as unidades na camada seguinte, até a camada de saída, onde é obtida a resposta da rede e o erro é calculado;



Algoritmo Backpropagation - MLP

2° - Retropropagação (fase *backward*) Desde a camada de saída até a camada de entrada, são feitas alterações nos pesos sinápticos.



Fase de Retropropagação

Algoritmo *Backpropagation* - MLP

Algoritmo Algoritmo de treinamento *back-propagation*

Entrada: Um conjunto de n objetos de treinamento
Saída: Rede MLP com valores dos pesos ajustados

```
Inicializar pesos da rede com valores aleatórios
Inicializar erro_total = 0
repita
    para cada objeto x_i do conjunto de treinamento faça
        para cada camada da rede, a partir da primeira camada intermediária faça
            para cada cada neurônio n_jl da camada atual faça
                Calcular valor da saída produzida pelo neurônio, f̂
            fim
        fim
        Calcular erro_parcial = y − f̂
        para cada camada da rede, a partir da camada de saída faça
            para cada cada neurônio n_jl da camada atual faça
                Ajustar pesos do neurônio
            fim
        fim
        Calcular erro_total = erro_total + erro_parcial
    fim
até erro_total < ξ;
```

Backpropagation - Inicialização

1 - Inicialização: Inicialize os pesos sinápticos e os bias aleatoriamente

2 - Computação para frente (propagação):

Depois de apresentado o exemplo do conjunto de treinamento T = {(x(n),d(n)}, sendo x(n) a entrada apresentada à rede e d(n) a saída desejada, calcule o valor da ativação v_j e a saída para cada unidade da rede, da seguinte forma:

$$v_j = \sum_{i=1}^{m} w_{ji} x_i + b x_0$$

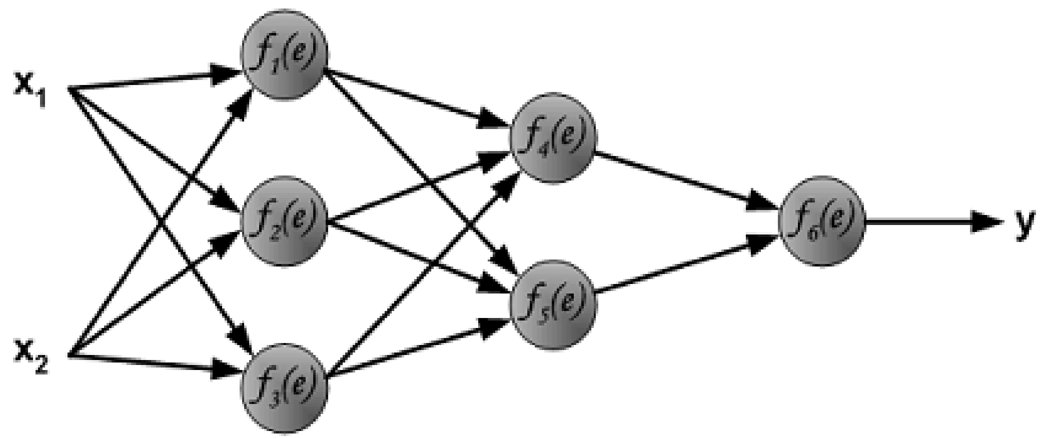
para o cálculo do valor da ativação e

$$f(v) = \frac{1}{1 + e^{(-av)}}$$

para o cálculo da saída *y* da unidade *k*, utilizando a função sigmóide, como no exemplo, ou uma outra função, se necessário.

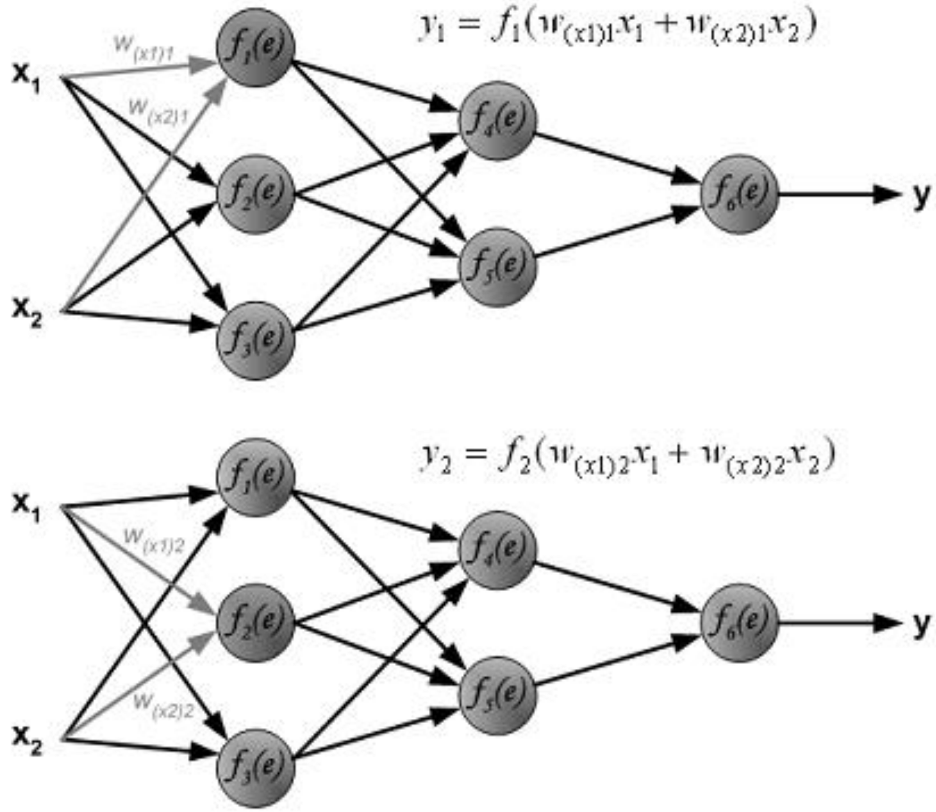
Utilize a saída das unidades de uma camada como entradas para a seguinte, até a última camada. A saída das unidades da última camada será a resposta da rede.

Exemplificação do passo 2:



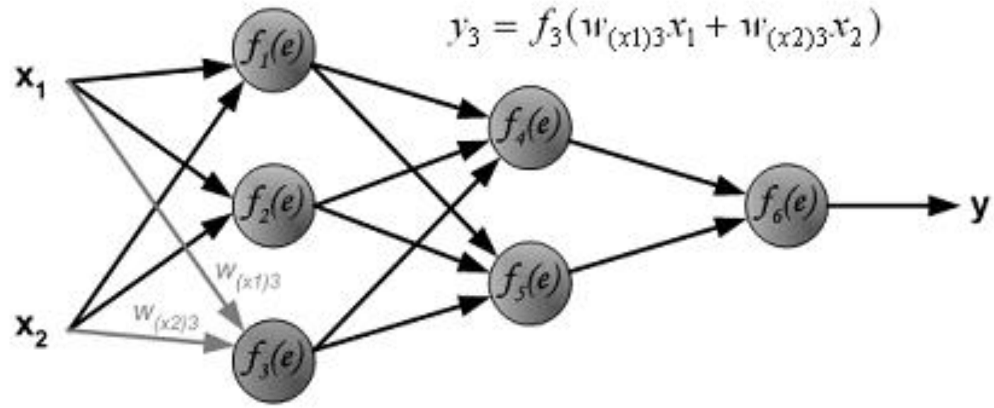
Backpropagation – Computação para frente

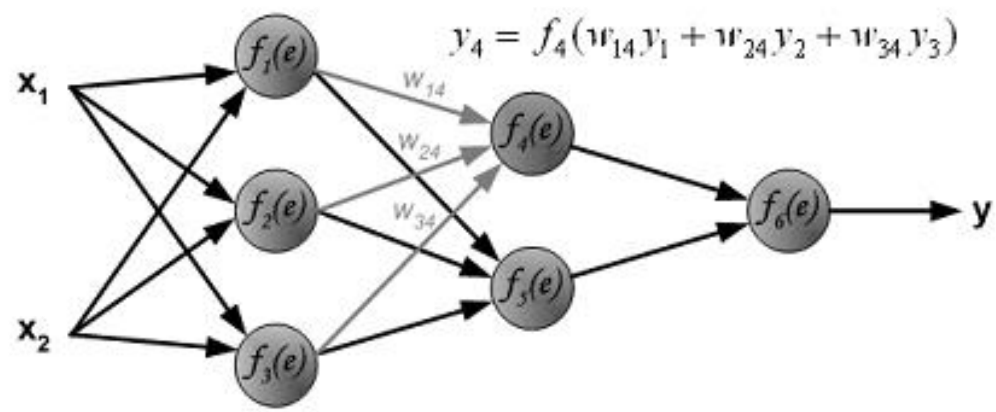
Exemplificação do passo 2:



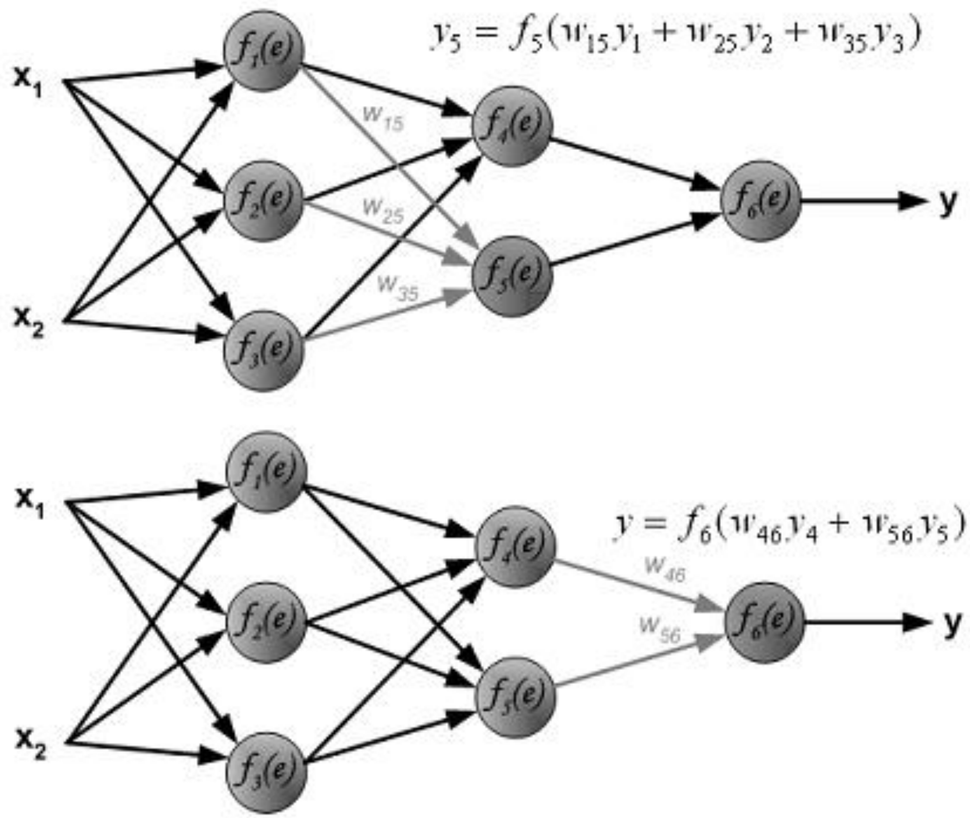
Backpropagation – Computação para frente

Exemplificação do passo 2:





Exemplificação do passo 2:



3 – Propagação do erro para trás

Como calcular o erro da rede?

Como propagar o erro para trás?

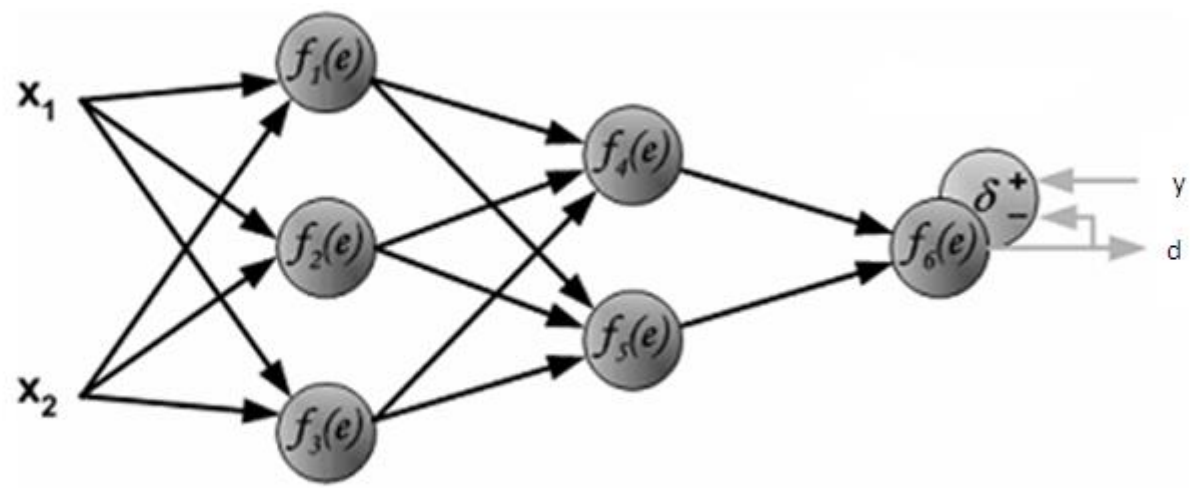
Como calcular o erro?
Depende em qual camada o neurônio se encontra:

✓ **Se pertencer à camada de saída**

δ_j = f'(net_j)*(d_j-y_i)

Dependendo da quantidade de neurônios na camada de saída, calcula-se o erro médio quadrático

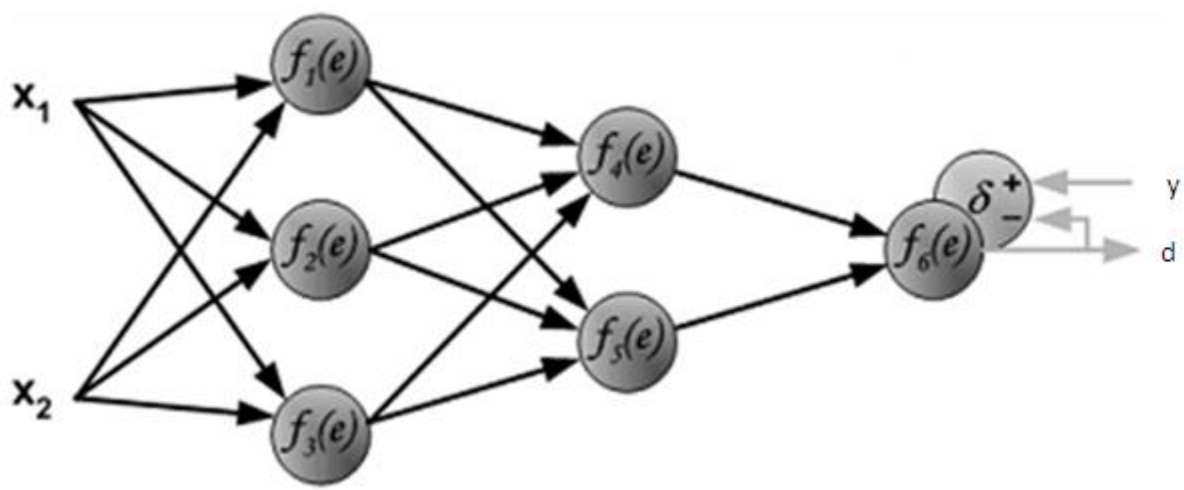
onde, $net_j = \sum_{i=}^{n}$



Se pertencer à camada intermediária:

$\delta_j = f'(net_j) \times \sum_l \delta_l w_{lj}$

onde,
w_{lj} = Pesosdasconexões
δ_l = ErroDaCamadaposterior



Resumindo

A forma para se calcular o erro depende da camada onde se encontra o neurônio

$$\delta_l = \begin{cases} f'_a e_l, & \text{se } n_l \in c_{sai} \\ f'_a \sum w_{lk}\delta_k, & \text{se } n_l \in c_{int} \end{cases}$$

Backpropagation - propagação do erro (propagação do erro)

Ou seja, como os valores dos erros são conhecidos apenas para os neurônios da camada de saída, o erro para os neurônios da camada intermediária precisam ser **estimados**

Backpropagation –Importância da derivada

A derivada parcial define o ajuste dos pesos, utilizando o gradiente descendente da função de ativação.

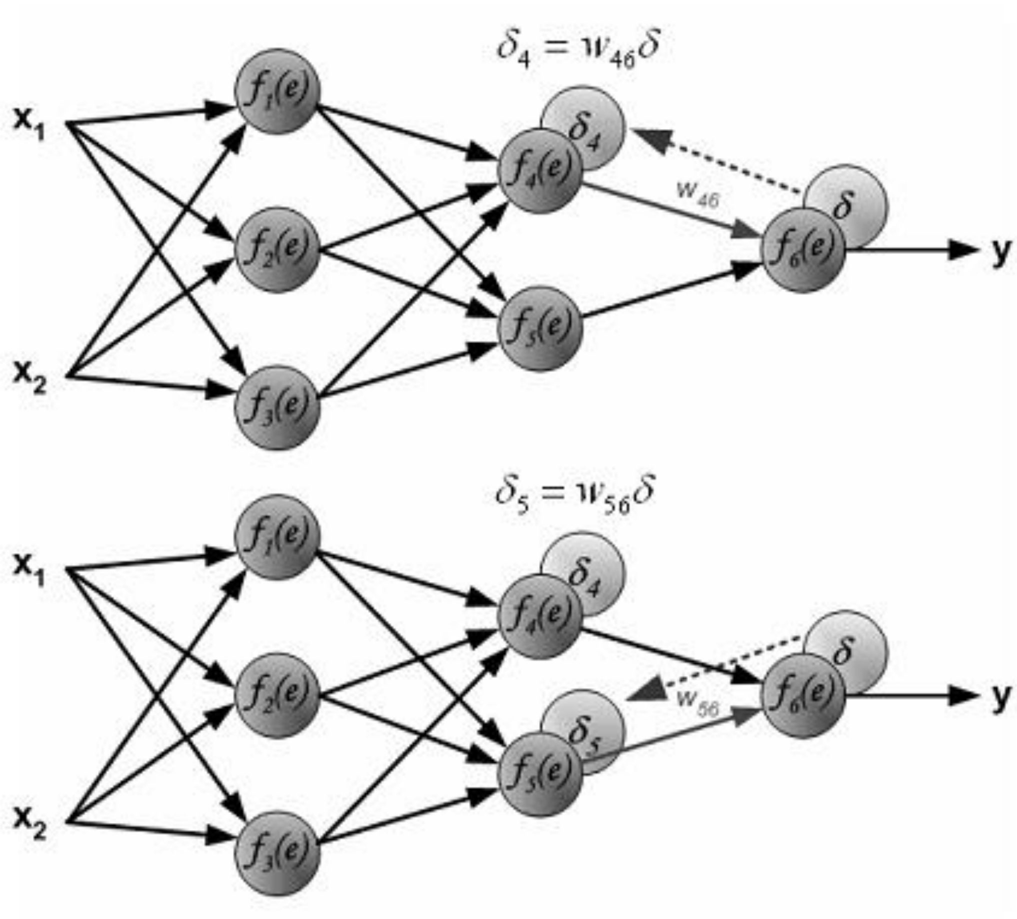
Essa derivada mede a contribuição de cada peso no erro da rede para a classificação de um dado objeto x.

Se essa derivada para um dado peso for **positiva**, o peso está provocando um **aumento da diferença** entre a saída da rede e a saída desejada. Assim, sua magnitude deve ser **reduzida** para **baixar** o erro.

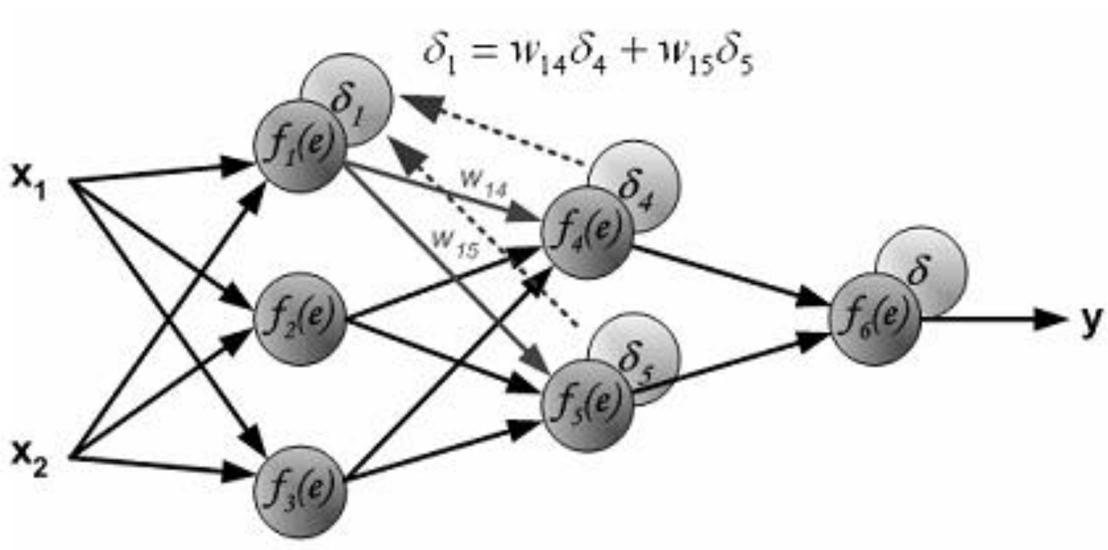
Se a derivada for **negativa**, o peso está contribuindo para que a saída produzida pela rede seja mais próxima da desejada. Dessa forma, seu valor deve ser **aumentado**.

Backpropagation – propagação do erro (propagação do erro)

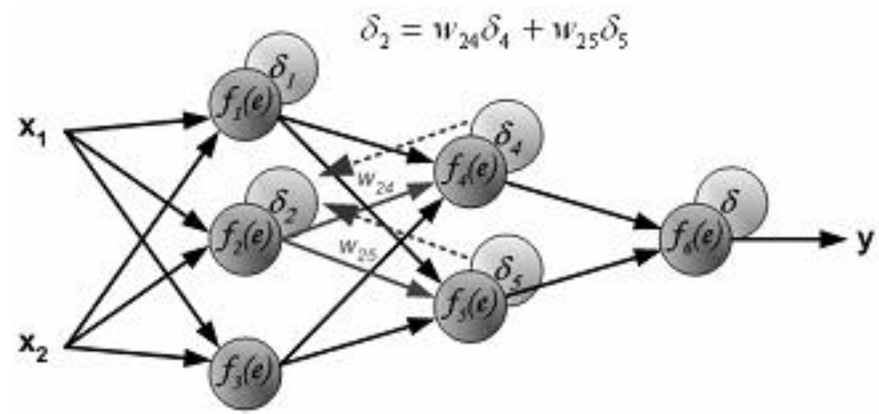
Exemplificação do passo 3 – propagação do erro:

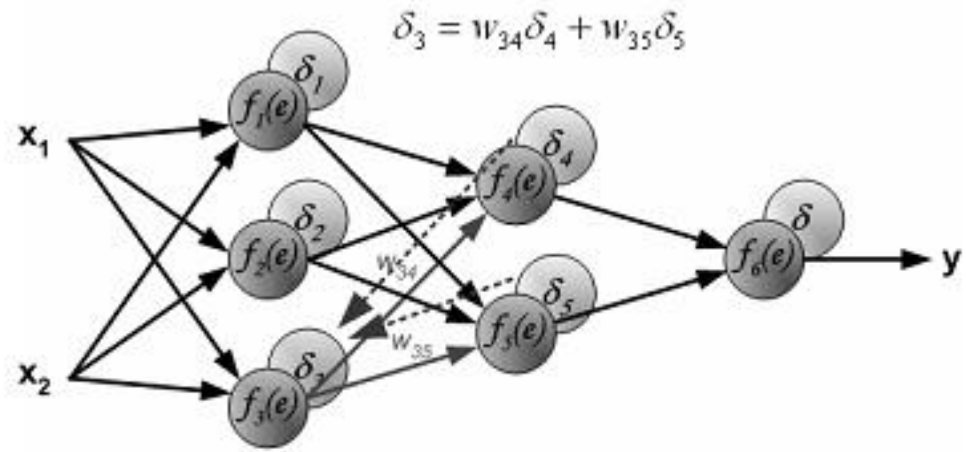


Exemplificação do passo 3 – propagação do erro:



Exemplificação do passo 3 – propagação do erro:





4 – Ajuste dos pesos

Após o cálculo dos erros é necessário corrigir os pesos das ligações entre os neurónios. O cálculo do novo peso é dado pela fórmula:

$$w_{ji}(t+1) = w_{ji}(t) + ta * xi(t) * erroj(t)$$

Onde,

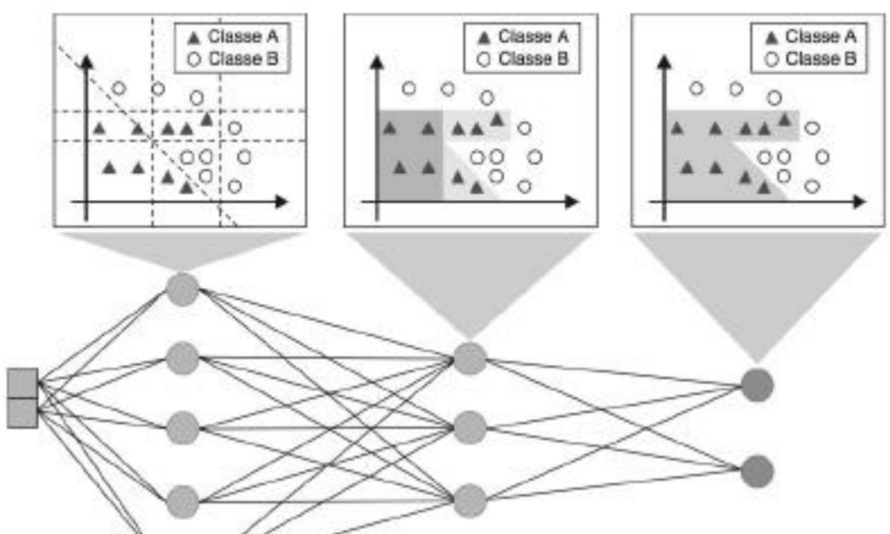
w_{ji} representa o peso entre um neurônio i e o j-ésimo atributo de entrada ou a saída do j-ésimo neurônio da camada anterior

$erro_j$ indica o erro associado ao l-ésimo neurônio

x_i indica a entrada recebida por esse neurônio (o i-ésimo atributo de entrada ou a saída do i-ésimo neurônio da camada anterior)

MPL – papel dos neurônios das camadas ocultas

- ✓ Em uma MLP, cada neurônio realiza uma função específica.
- ✓ A função implementada por um neurônio de uma dada camada é uma combinação das funções realizadas pelos neurônios da camada anterior que estão conectados a ele.
- ✓ À medida que o processamento avança de uma camada intermediária para a camada seguinte, o processamento realizado se torna mais complexo
- ✓ Na primeira camada, cada neurônio aprende uma função que define um hiperplano, o qual divide o espaço de entrada em duas partes
- ✓ Cada neurônio da camada seguinte combina um grupo de hiperplanos definidos pelos neurônios da camada anterior, formando regiões convexas.
- ✓ Os neurônios da camada seguinte combinam um subconjunto das regiões convexas em regiões de formato arbitrário.
- ✓ É a combinação das funções desempenhadas por cada neurônio da rede que define a função associada à RNA como um todo



Métodos de treinamento como o *backpropagation* exigem que a função de ativação possua derivada.

Função	Derivada
Função sigmoide: $$f(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$$	$f'(x) = x(1-x)$
tangente hiperbólica: $$f(x) = \frac{e^{2x}-1}{e^{2x}+1}$$	$f'(x) = 1-x^2$

Algoritmo Backpropagation - Considerações

- A atualização dos pesos é feita de forma individual para cada um dos vetores do conjunto de treinamento;

- Para cada vetor de treinamento, o sinal deve ser propagado das entradas para as saídas para que o erro possa então propagar em sentido contrário e permitir o treinamento;

- Cada apresentação completa de todos os elementos do conjunto de treinamento e consequente ajuste de pesos é chamada *epoch*;

- É aconselhável randomizar a sequência com que os vetores são apresentados à rede de uma *epoch* para a outra para acrescentar um componente estocástico ao treinamento e evitar ciclos limites indesejáveis na atualização dos pesos;

- Os pesos iniciais devem ser preferencialmente obtidos de uma distribuição uniforme (evita polarização)

Algumas regras para se pensar no número de neurônios:

- **Regra do valor médio** - De acordo com esta fórmula o número de neurônios da camada escondida é igual ao valor médio do número de entradas e o número de saídas da rede, ou seja:

$$q = \frac{p + M}{2}$$

Regra da raiz quadrada - De acordo com esta fórmula o número de neurônios da camada escondida é igual a raiz quadrada do produto do número de entradas pelo número de saídas da rede, ou seja:

$$q = \sqrt{p \cdot M}$$

Algumas regras para se pensar no número de neurônios:

- **Regra de Kolmogorov** - De acordo com esta fórmula o número de neurônios da camada escondida é igual a duas vezes o número de entradas da rede adicionado de 1, ou seja:

$$q = 2p + 1$$

Outras sugestões:

- Entre o número de neurônios nas camadas de entrada e saída
- 2/3 do tamanho da camada de entrada, somado ao tamanho da camada de saída
- Menor que duas vezes o tamanho da camada de entrada

Funções de ativação

- https://matheusfacure.github.io/2017/07/12/activ-func/

Bases de Dados

http://archive.ics.uci.edu/ml/

http://mldata.org/