Aprendizaje supervisado en redes multicapa

Pablo Chehade
pablo.chehade@ib.edu.ar
Redes Neuronales, Instituto Balseiro, CNEA-UNCuyo, Bariloche, Argentina, 2023

EJERCICIO 1

Se implementaron dos arquitecturas para el aprendizaje de la regla XOR, las cuales se ilustran en la figura 1, considerando, en cada caso, una entrada adicional para simular el bias.

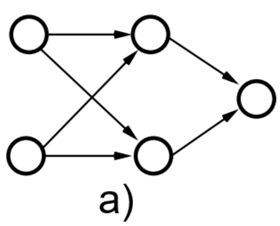

Figura 1: Arquitecturas utilizadas para el aprendizaje de la regla XOR, denominadas como arquitecturas a) A y b) B.

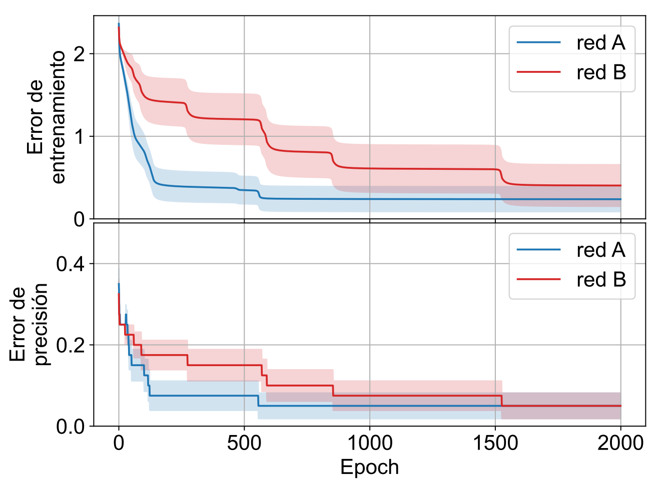

Figura 2: Valor medio del a) error de entrenamiento y b) error de precisión en función de las epochs de entrenamiento para las arquitecturas A y B. El sombreado indica la desviación estándar del promedio.

El aprendizaje fue ejecutado mediante el algoritmo de retropropagación de errores (back-propagation), con pesos inicializados aleatoriamente con un valor máximo de 0.1 y un learning rate establecido en 0.1. La función de costo empleada fue el error cuadrático medio (MSE) y se utilizó $f(x) = tanh(x)$ como función de transferencia. Los datos de entrenamiento engloban todas las posibles combinaciones de entradas y salidas. Mientras que los datos de test corresponden al mismo conjunto de datos de entrenamiento.

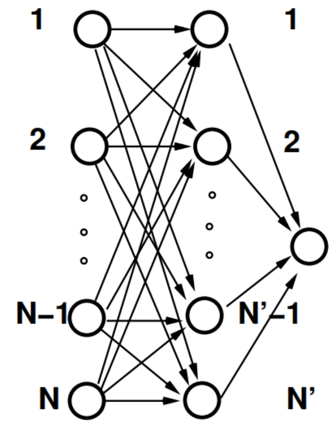

Figura 3: Arquitectura utilizada para abordar el problema de paridad.

En la figura 2 se grafican los valores medios del error de entrenamiento y de precisión en función de las epochs para ambas arquitecturas, promediados sobre 10 condiciones iniciales de los pesos. En ambas arquitecturas, se evidencia una disminución de los errores a lo largo del tiempo, sin alcanzar un error nulo debido a que algunas redes se estabilizan en mínimos locales. De forma comparativa, la arquitectura A demuestra un tiempo medio de convergencia menor a la B.

Además, se observó cualitativamente que la velocidad de convergencia es influenciada por el valor máximo posible en la inicialización de los pesos y por el learning rate, existiendo configuraciones de ambos parámetros en las cuales el error no converge.

EJERCICIO 2

Se abordó la resolución del problema de paridad, extendiendo la lógica del XOR a N entradas. La arquitectura utilizada se muestra en la figura 3, habiendo N' neuronas en la capa oculta y añadiendo una entrada adicional para simular el bias. El entrenamiento se llevó a cabo a través del algoritmo de retropropagación de errores, manteniendo la función de transferencia y la inicialización de los pesos idénticas al ejercicio previo y un learning rate de 0.05. Se establecieron N = 5 y N' = 1, 3, 5, 7, 9 y 11. Al igual que antes, los datos de entrenamiento engloban todas las posibles combinaciones de entradas y salidas. Mientras que los datos de test corresponden al mismo conjunto de datos de entrenamiento.

figure[h]

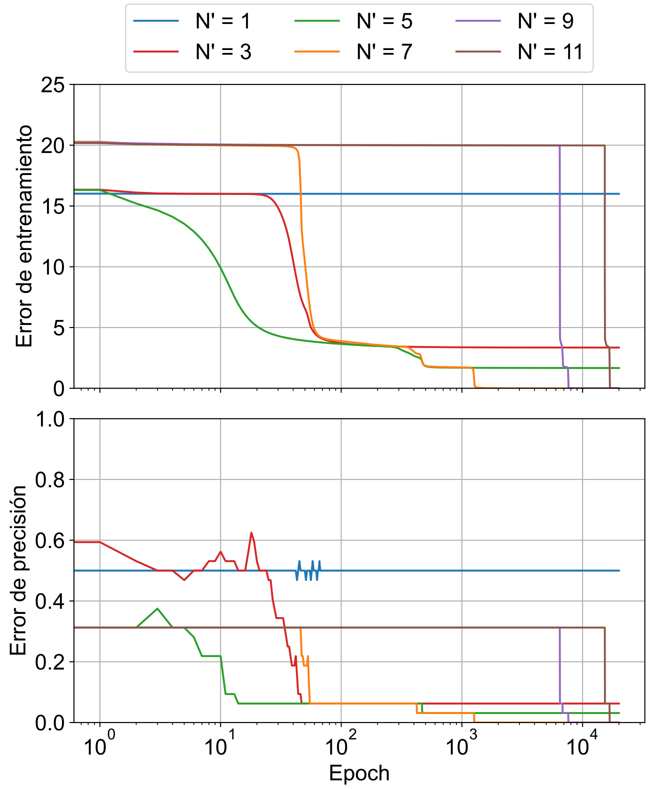

Figura 4: a) Error de entrenamiento y b) error de precisión en función de las epochs de entrenamiento, variando el número de neuronas N' en la capa oculta.

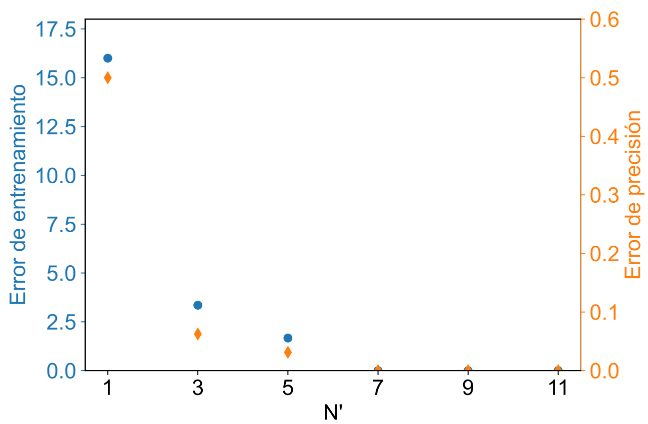

Figura 5: Error de entrenamiento y error de precisión final en función del número de neuronas N' en la capa oculta.

En la figura 4 se grafica el error de entrenamiento y de precisión en función de las epochs, explorando los diversos valores de N'. Se observa que para N' = 1 el método converge pero con un gran error. Para N' = 3, la convergencia es más gradual hacia un error menor que el anterior pero no nulo. Con incrementos en N', la tendencia persiste: la convergencia es más lenta pero converge hacia errores progresivamente menores. Cuando $N' > 5$, el error se anula pasado cierto número de epochs. Este fenómeno es evidenciado de forma más clara en la figura 5, donde se grafica el error final en función de N'. Se observa que el error decae con el aumento de N', directamente relacionado con el aumento de la complejidad de la red.

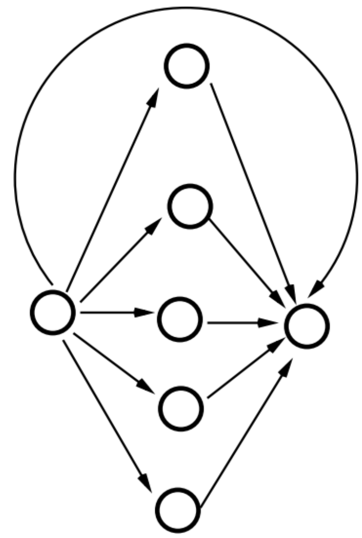

Figura 6: Arquitectura adoptada para el aprendizaje del mapeo logístico.

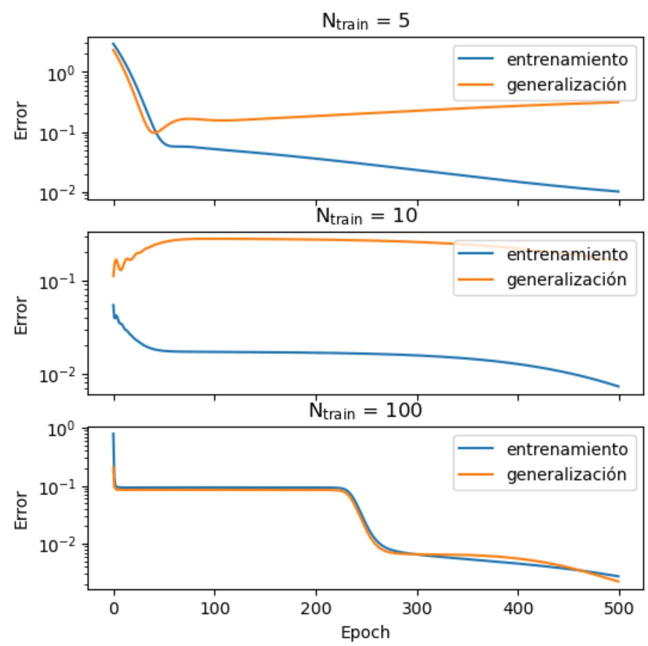

Figura 7: Error de entrenamiento y error de generalización en función de las epochs de entrenamiento, para distinto número de ejemplos N_{train} en los datos de entrenamiento.

EJERCICIO 3

Se procedió al aprendizaje del mapeo logístico utilizando el método de retropropagación de errores, con la arquitectura representada en la figura 6 y añadiendo una entrada adicional para simular el bias. Se estableció un learning rate de 0.01 y, para las capas ocultas, se implementó la función de transferencia g(x) = 1/(1 + exp(-x)), mientras que la neurona de salida adoptó una función de activación lineal. Se generaron los N_{train} datos de entrenamiento a través de la iteración del mapeo $x(t+1) = 4x(t)(1-x(t))$. De este modo, los datos corresponden a los pares {x(t), x(t+1)}. Además, se utilizaron 100 datos generados de manera análoga como ejemplos de prueba.

En la figura 7 se grafica el error de entrenamiento y el error de generalización, calculado sobre los datos de prueba, en función de las epochs. Para $N_{train} = 5$ y 10, el comportamiento observado indica que, ante un número bajo de epochs, se está en condiciones de underfitting; luego, el error de generalización alcanza un mínimo y, posteriormente, aumenta, indicando una condición de overfitting. En cambio, para $N_{train} = 100$, la gran cantidad de datos permite que ambos errores sean muy similares, sin llegar a presentar overfitting. Este comportamiento con variaciones en N_{train} se justifica en que el error de generalización tiende a disminuir con la cantidad de ejemplos.

APÉNDICE

A continuación se desarrolla el código empleado durante este trabajo implementado en Python.

```python
#Import libraries
import numpy as np
import matplotlib
import matplotlib.pyplot as plt
import tensorflow as tf


# ### Defino datos

#Def regla XOR
def XOR(x1, x2):
    #x1, x2: +1 o -1
    if x1 == x2:
        return 1
    else:
        return -1

#Def datos x e y
x_data = np.empty([4, 2])
y_data = np.empty(4)
x_data[0] = np.array([1,1])
x_data[1] = np.array([1,-1])
x_data[2] = np.array([-1,1])
x_data[3] = np.array([-1,-1])
for i in range(len(y_data)):
    y_data[i] = XOR(x_data[i][0], x_data[i][1])

# ### Defino funciones

#Def la aplicaci n de una red
def red_forward(x_test, red):
    V_0 = np.concatenate((x_test, np.array([-1])), axis = 0) #Agrego el bias 3x1
    for j in range(len(red["pesos"])):
        w = red["pesos"][j]
        h = np.dot(w.T, V_0)
        if j != len(red["pesos"]) - 1:
            V_1 = np.concatenate((g(h), np.array([-1])), axis = 0) #3x1
        else: #Si estoy en la  ltima  capa
            V_1 = g(h)
        V_0 = V_1
    return V_1[0]

```

```python
#Def funci n de validaci n
def validacion(x_test, y_test, red):
    error = 0
    for i in range(len(y_test)):
        #Forward pass
        y_out = red_forward(x_test[i], red)
        #Aproximo y_out para que sea +1 o -1
        if y_out >= 0:
            y_out = 1
        else:
            y_out = -1
        #Calculo el error
        error += np.abs(y_test[i] - np.round(y_out))/2 #Da 0 si no hay error y 1 si hay
            error
    return error/len(y_test)

def e_loss(x_test, y_test, red):
    error = 0
    for i in range(len(y_test)):
        #Forward pass
        y_out = red_forward(x_test[i], red)
        #Calculo el error
        error += (y_test[i] - y_out)**2
    return error/2

#Def funci n de transferencia
def g(h_vec):
    return np.tanh(h_vec)

def g_prima(h_vec):
    return 1 - g(h_vec)**2


#Def algoritmo de retropropagaci n de errores
def back_propagation(x_data, y_data, red, eta):
    #Se usa la nomenclatura del Hertz
    #Loop sobre las muestras
    for i in range(len(y_data)):
        #Forward pass
        V_0 = np.concatenate((x_data[i], np.array([-1])), axis = 0) #Agrego el bias 3x1
        w_1 = red["pesos"][0] #3x2
        h_1 = np.dot(w_1.T, V_0) #2x1
        V_1 = np.concatenate((g(h_1), np.array([-1])), axis = 0) #3x1
        w_2 = red["pesos"][1] #3x1
        h_2 = np.dot(w_2.T, V_1) #1x1
        V_2 = g(h_2) #1x1
        #Backward
        #Calculo el error de la capa de salida
        delta_2 = g_prima(h_2)*(y_data[i] - V_2) #1x1
        #Calculo el error de la capa oculta
        # delta_1 = g_prima(h_1)*np.dot(w_2, delta_2) #
        delta_1 = np.concatenate([g_prima(h_1),np.array([1])])*np.dot(w_2, delta_2) #3
            x1
        #Actualizo pesos
        w_1 += eta * np.outer(V_0, delta_1[:-1]) #3x2
        w_2 += eta * np.outer(V_1, delta_2)
        if red["name"] == "B":
            #Tengo que fijar algunos elementos de los pesos para que no var en
            w_1[0,0] = 1; w_1[0,2] = 0
            w_1[1,0] = 0; w_1[1,2] = 1
            w_1[2,0] = 0; w_1[2,2] = 0
        red["pesos"] = [w_1, w_2]
    return red

```

```python
#Def algoritmo de aprendizaje
def aprendizaje(x_data, y_data, red, eta, epochs = 1):
    #Def array de errores
    e_loss_vec = np.empty(epochs)
    validacion_vec = np.empty(epochs)
    #Loop sobre las epochs
    for i in range(epochs):
        #Backpropagation
        red = back_propagation(x_data, y_data, red, eta)
        #C lculo de errores
        e_loss_vec[i] = e_loss(x_data, y_data, red)
        validacion_vec[i] = validacion(x_data, y_data, red)
    return red, e_loss_vec, validacion_vec

# ### Aprendizaje
#
# Para cada arquitectura repito el entrenamiento con 10 condiciones iniciales distintas

np.random.seed(1) #def seed
N_CI = 10 #Nro de condiciones iniciales
N_epochs = 2000 #nro de epochs que voy a entrenar

def red_A(w_ini_max):
    #Cambia en cada llamada por los nros random
    return {"name": "A", "input":2, "hidden":2, "output":1, "pesos":[np.random.rand(3,2)*w_ini_max, np.random.rand(3,1)*w_ini_max]}
def red_B(w_ini_max):
    #Para modelar la neurona B, agrego en la capa oculta 2 neuronas que van a ser una copia directa de las neuronas previas correspondientes. Esto tengo que modificarlo a mano luego
    return {"name": "B" , "input":2, "hidden":2, "output":1, "pesos":[np.random.rand(3,3)*w_ini_max, np.random.rand(4,1)*w_ini_max]}

def aprendizaje_redes(N_CI, N_epochs, red, x_data, y_data, eta = 0.1):
    #red escrita como funci n, de modo de que cambie los pesos en cada CI
    w_ini_max = 1 #peso m ximo en la inicializaci n
    e_loss_matrix = np.empty([N_CI, N_epochs])
    validation_matrix = np.empty([N_CI, N_epochs])
    for i in range(N_CI):
        #Entreno red
        model_A = aprendizaje(x_data, y_data, red(w_ini_max), eta, epochs = N_epochs)
        #Guardo el error
        e_loss_matrix[i] = model_A[1]
        validation_matrix[i] = model_A[2]
    #Calculo media y desviaci n est ndar de la media de los errores a cada tiempo
    e_loss_mean = np.mean(e_loss_matrix, axis = 0)
    e_loss_std = np.std(e_loss_matrix, axis = 0)/np.sqrt(N_CI)
    validation_mean = np.mean(validation_matrix, axis = 0)
    validation_std = np.std(validation_matrix, axis = 0)/np.sqrt(N_CI)
    red_final = model_A[0]
    return e_loss_mean, e_loss_std, validation_mean, validation_std, red_final

A_e_loss_mean, A_e_loss_std, A_validation_mean, A_validation_std, A_red_final = aprendizaje_redes(N_CI, N_epochs, red_A, x_data, y_data)
B_e_loss_mean, B_e_loss_std, B_validation_mean, B_validation_std, B_red_final = aprendizaje_redes(N_CI, N_epochs, red_B, x_data, y_data)

#Grafico

fig, ax = plt.subplots(2, 1, figsize = (8,6), sharex=True)
fig.subplots_adjust(hspace=0.02)

#Red A:
ax[0].plot(A_e_loss_mean, label = "red A", color = "tab:blue")
```

```
ax[0].fill_between(np.arange(N_epochs), A_e_loss_mean - A_e_loss_std, A_e_loss_mean + A_e_loss_std, alpha = 0.2, color = "tab:blue")
ax[1].plot(A_validation_mean, label = "red A", color = "tab:blue")
ax[1].fill_between(np.arange(N_epochs), A_validation_mean - A_validation_std, A_validation_mean + A_validation_std, alpha = 0.2, color = "tab:blue")
#Red B:
ax[0].plot(B_e_loss_mean, label = "red B", color = "tab:red")
ax[0].fill_between(np.arange(N_epochs), B_e_loss_mean - B_e_loss_std, B_e_loss_mean + B_e_loss_std, alpha = 0.2, color = "tab:red")
ax[1].plot(B_validation_mean, label = "red B", color = "tab:red")
ax[1].fill_between(np.arange(N_epochs), B_validation_mean - B_validation_std, B_validation_mean + B_validation_std, alpha = 0.2, color = "tab:red")

#Decoraci n
ax[1].set_xlabel("Epoch")
ax[0].set_ylabel("Error de\nentrenamiento")
ax[1].set_ylabel("Error de\nprecisi n")
ax[0].grid(); ax[1].grid()
ax[0].set_ylim([0, np.max(np.array([np.max(A_e_loss_mean + A_e_loss_std), np.max(B_e_loss_mean + B_e_loss_std)] ) )])
ax[1].set_ylim([0, 0.5])
ax[0].legend()
ax[1].legend()
plt.show()

# ## Ejercicio 2
from itertools import product

#Defino ejemplos a aprender
def XOR_gral(x_vec):
    #x[i] = +/- 1 for all i
    return np.prod(x_vec, axis = 0)

def generate_matrix(N):
    # Generar todas las combinaciones posibles de 0s y 1s de longitud N
    combinations = product([-1, 1], repeat=N)
    # Convertir las combinaciones a una matriz de numpy
    matrix = np.array(list(combinations))
    return matrix

def RN_XOR_gral(N_prima_array, x_data, y_data, N_CI, N_epochs, eta = 0.1):
    N = len(x_data[0]) #Nro de entradas
    #Def la seed
    np.random.seed(1) #Para obtener siempre el mismo resultado
    e_loss_mean_matrix = np.empty([len(N_prima_array), N_epochs])
    e_loss_std_matrix = np.empty([len(N_prima_array), N_epochs])
    validation_mean_matrix = np.empty([len(N_prima_array), N_epochs])
    validation_std_matrix = np.empty([len(N_prima_array), N_epochs])
    for i, N_prima in enumerate(N_prima_array):
        def red_C(w_ini_max):
            return {"name": "C", "input":N, "hidden":N_prima, "output":1, "pesos":[np.random.rand(N+1,N_prima)*w_ini_max, np.random.rand(N_prima+1,1)*w_ini_max]}
        e_loss_mean_matrix[i], e_loss_std_matrix[i], validation_mean_matrix[i], validation_std_matrix[i], red_final = aprendizaje_redes(N_CI, N_epochs, red_C, x_data, y_data, eta = eta)
    return e_loss_mean_matrix, e_loss_std_matrix, validation_mean_matrix, validation_std_matrix

#Genero datos

N = 5
x_data = generate_matrix(N)
y_data = np.empty(2**N)
```

```
for i in range(2**N):
    y_data[i] = XOR_gral(x_data[i])

#Entreno

N_prima_array = [1, 3, 5, 7, 9, 11]
N_CI = 1
N_epochs = 2*10000
eta = 0.05 #0.01
e_loss_mean_matrix, e_loss_std_matrix, validation_mean_matrix, validation_std_matrix = RN_XOR_gral(N_prima_array, x_data, y_data, N_CI, N_epochs, eta)

#Calculo y grafico
fig, ax = plt.subplots(2, 1, figsize = (8,9), sharex=True, squeeze=True)
#Junto las subplots
fig.subplots_adjust(hspace=0.1)

#labels
N_prima_labels = []
for i in range(len(N_prima_array)):
    N_prima_labels.append("N'␣=␣" + str(N_prima_array[i]))
colors = ["tab:blue", "tab:red", "tab:green", "tab:orange", "tab:purple", "tab:brown"]
#Grafico e_loss_mean_matrix.T
for i in range(len(N_prima_array)):
    ax[0].plot(e_loss_mean_matrix[i], label = N_prima_labels[i], color = colors[i])
    ax[0].fill_between(np.arange(N_epochs), e_loss_mean_matrix[i] - e_loss_std_matrix[i], e_loss_mean_matrix[i] + e_loss_std_matrix[i], alpha = 0.2)
for i in range(len(N_prima_array)):
    ax[1].plot(validation_mean_matrix[i], label = N_prima_labels[i], color = colors[i])
    ax[1].fill_between(np.arange(N_epochs), validation_mean_matrix[i] - validation_std_matrix[i], validation_mean_matrix[i] + validation_std_matrix[i], alpha = 0.2)

#Decoraci n
ax[1].set_xlabel("Epoch")
ax[0].set_ylabel("Error␣de␣entrenamiento")
ax[1].set_ylabel("Error␣de␣precisi n")
ax[0].set_xscale("log")
ax[1].set_xscale("log")
ax[0].set_ylim([0, 25])
ax[1].set_ylim([0, 1])
# ax[0].set_ylim([0, np.max(np.array([np.max(A_e_loss_mean + A_e_loss_std), np.max(B_e_loss_mean + B_e_loss_std)] ) )])
ax[0].grid()
ax[1].grid()
#Agrego legend fuera del gr fico arriba de todo
ax[0].legend(loc = "upper␣center", bbox_to_anchor=(0.5, 1.3), ncol = 3)
plt.show()

#Grafico el  ltimo  valor de error de entrenamiento y de validaci n como funci n de N'
fig, ax = plt.subplots(figsize = (7,5))
ax.plot(N_prima_array, e_loss_mean_matrix[:,-1], "o")
ax.set_xlabel("N'")
ax.set_ylabel("Error␣de␣entrenamiento", color = "tab:blue")
#Agrego los ticks en x sobre N_prima_array
ax.spines['right'].set_color('tab:blue')
ax.tick_params(axis='y', colors='tab:blue')
ax.set_xticks(N_prima_array)
ax.set_ylim([0,18])
#En el eje derecho grafico e_validation
ax2 = ax.twinx()
#Pinto eje y ticks de naranja
ax2.spines['right'].set_color('tab:orange')
```

```
ax2.tick_params(axis='y', colors='tab:orange')
ax2.plot(N_prima_array, validation_mean_matrix[:,-1], "d", color = "tab:orange")
ax2.set_ylabel("Error␣de␣precisi n", color = "tab:orange")
ax2.set_ylim([0, 0.6])

plt.show()


# ## Ejercicio 3

#Fijo seed for reproducibility
seed=2
np.random.seed(seed)
tf.random.set_seed(seed)
# Data Input
def mapeo_logistico(x):
    return 4*x*(1-x)

N_train = 100
N_test = 100

x_train = np.random.rand(N_train)
x_test = np.random.rand(N_test)

y_train = mapeo_logistico(x_train)
y_test = mapeo_logistico(x_test)

#Def red
def output_activation(x):
    return 1/(1 + tf.math.exp(-x))

def RN(x_train, y_train, x_test, y_test, N_epochs = 500):
    # Network architecture
    hidden_dim=5 # Number of hidden units
    inputs = tf.keras.layers.Input(shape=(1,))
    x = tf.keras.layers.Dense(hidden_dim, activation=output_activation)(inputs)
    merge=tf.keras.layers.concatenate([inputs,x],axis=-1)
    predictions = tf.keras.layers.Dense(1)(merge) #si no se declara activation, se usa activation lineal

    # Model
    opti=tf.keras.optimizers.Adam(lr=0.01, decay=0.0)
    model = tf.keras.Model(inputs=inputs, outputs=predictions)
    model.compile(optimizer=opti,
                  loss='MSE') #, metrics=[v1_accuracy]
    history=model.fit(x=x_train, y=y_train,
                      epochs=N_epochs,
                      batch_size=5,
                      shuffle=False,
                      validation_data=(x_test, y_test), verbose=True)
    e_loss = history.history['loss']
    e_validation = history.history['val_loss']
    return e_loss, e_validation

#Var o la cantidad de datos de train
N_train_vec = [5, 10, 100] #[5,10,20,40,60,80,100]
N_epochs = 500
e_loss_matrix = np.empty([len(N_train_vec), N_epochs])
e_validation_matrix = np.empty([len(N_train_vec), N_epochs])
for i, N_train in enumerate(N_train_vec):
    e_loss_matrix[i], e_validation_matrix[i] = RN(x_train[:N_train], y_train[:N_train], x_test, y_test, N_epochs)

#Graph
```

```
fig, ax = plt.subplots(len(N_train_vec), 1, figsize = (6,6), sharex = True)
fig.subplots_adjust(hspace=0.2)
for i in range(len(N_train_vec)):
    ax[i].plot(e_loss_matrix[i], label='entrenamiento')
    ax[i].plot(e_validation_matrix[i], label='generalizaci n')
    ax[i].set_title("$\mathrm{N_{train}}$ = " + str(N_train_vec[i]))
    # ax[i].set_ylim([0,1.3])
    ax[i].legend(loc = 'upper right')
    ax[i].set_ylabel('Error')
    ax[i].set_yscale("log")
ax[2].set_xlabel('Epoch')
plt.show()
```