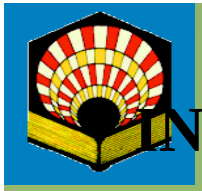


INTRODUCCIÓN A LOS MODELOS COMPUTACIONALES:
CUARTO CURSO DEL GRADO
DE ING. INFORMÁTICA EN COMPUTACION

Algoritmo de retropropagación del error

César Hervás-Martínez
Grupo de Investigación AYRNA

Departamento de Informática y Análisis Numérico
Universidad de Córdoba
Campus de Rabanales. Edificio Einstein.
Email: chervas@uco.es

2019-2020

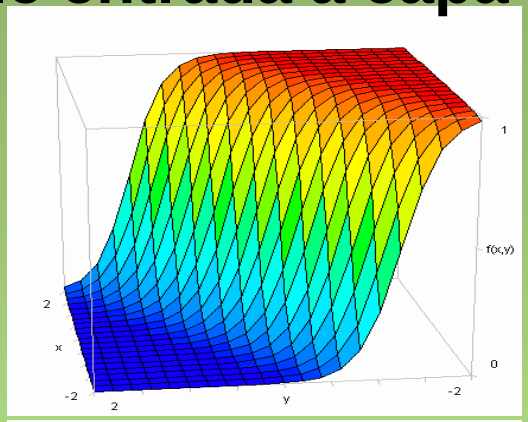
INTRODUCCIÓN AL MODELADO MEDIANTE REDES NEURONALES

FUNCIONES DE BASE DE REDES NEURONALES

Asociadas a los pesos de capa de entrada a capa oculta

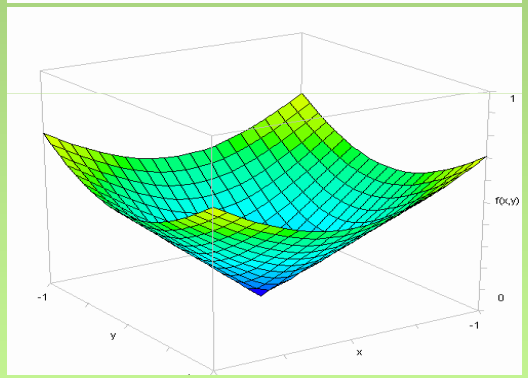
- **Unidades Sigmoides**

$$B_i(\mathbf{x},\mathbf{w}) = \frac{1}{1+\exp-\left(\sum_{i=1}^{k}(w_{j0}+w_{ji}\times x_i)\right)}$$



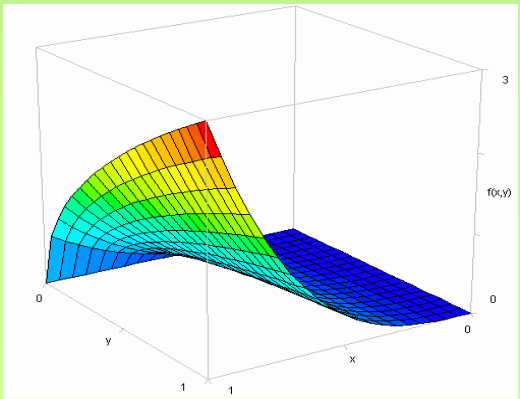
- **Unidades de Base Radial**

$$B_j(\mathbf{x};(\mathbf{c}_j \mid r_j)) = \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{\left\|\mathbf{x}-\mathbf{c}_j\right\|^2}{r_j^2}\right)$$



- **Unidades Producto**

$$B_i(\mathbf{x},\mathbf{w}) = \prod_{i=1}^{k} x_i^{w_{ji}}$$



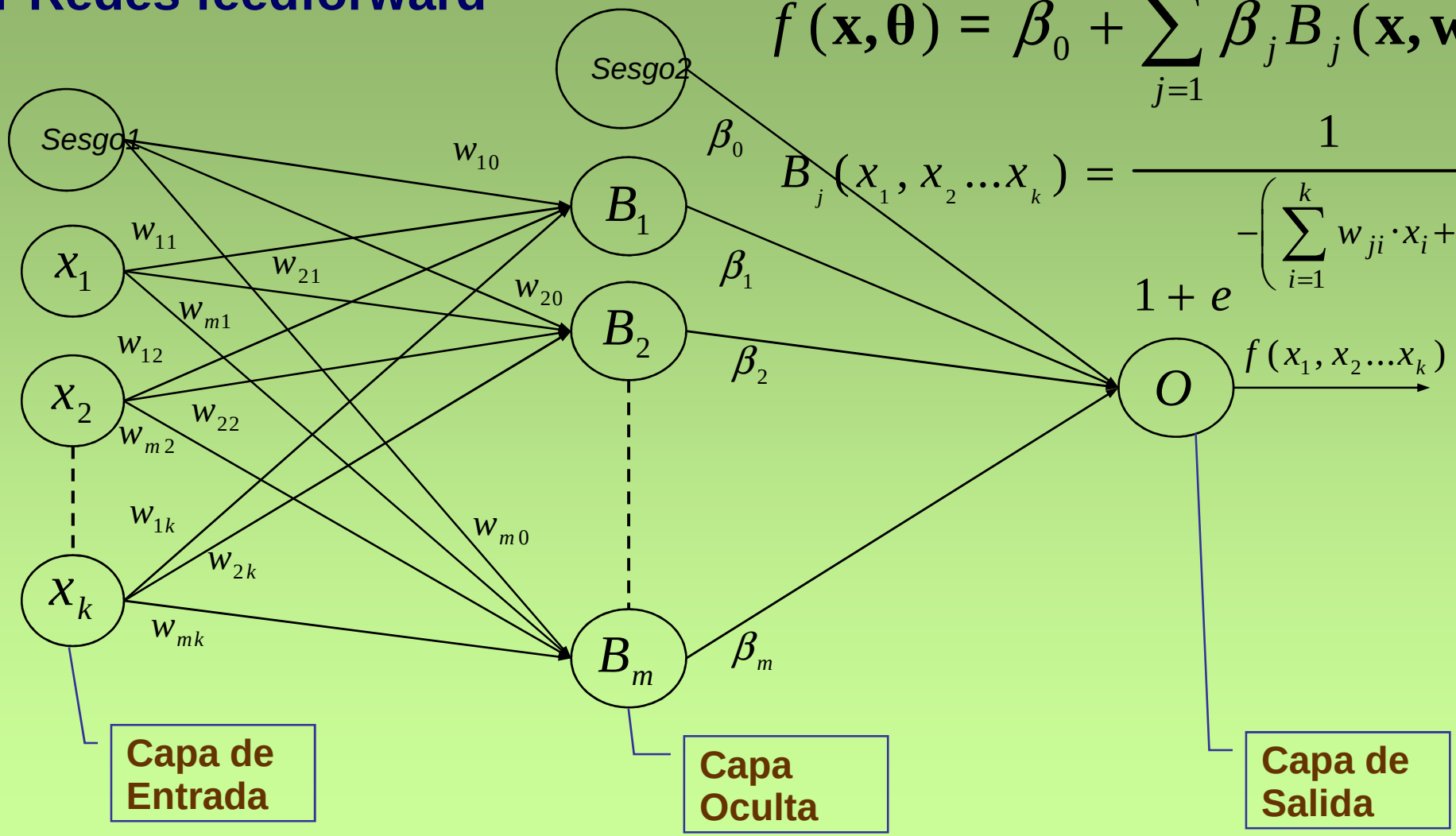
ESTRUCTURA DE UNA RED NEURONAL

ESTRUCTURA DE UN RED DE REGRESIÓN

- **Redes feedforward**

$$f(\mathbf{x},\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \hat{\beta}_0 + \sum_{j=1}^{m} \hat{\beta}_j B_j(\mathbf{x},\mathbf{w})$$

$$B_j(x_1, x_2 \ldots x_k) = \frac{1}{1+e^{-\left(\sum_{i=1}^{k} w_{ji}\cdot x_i + \theta_j\right)}}$$



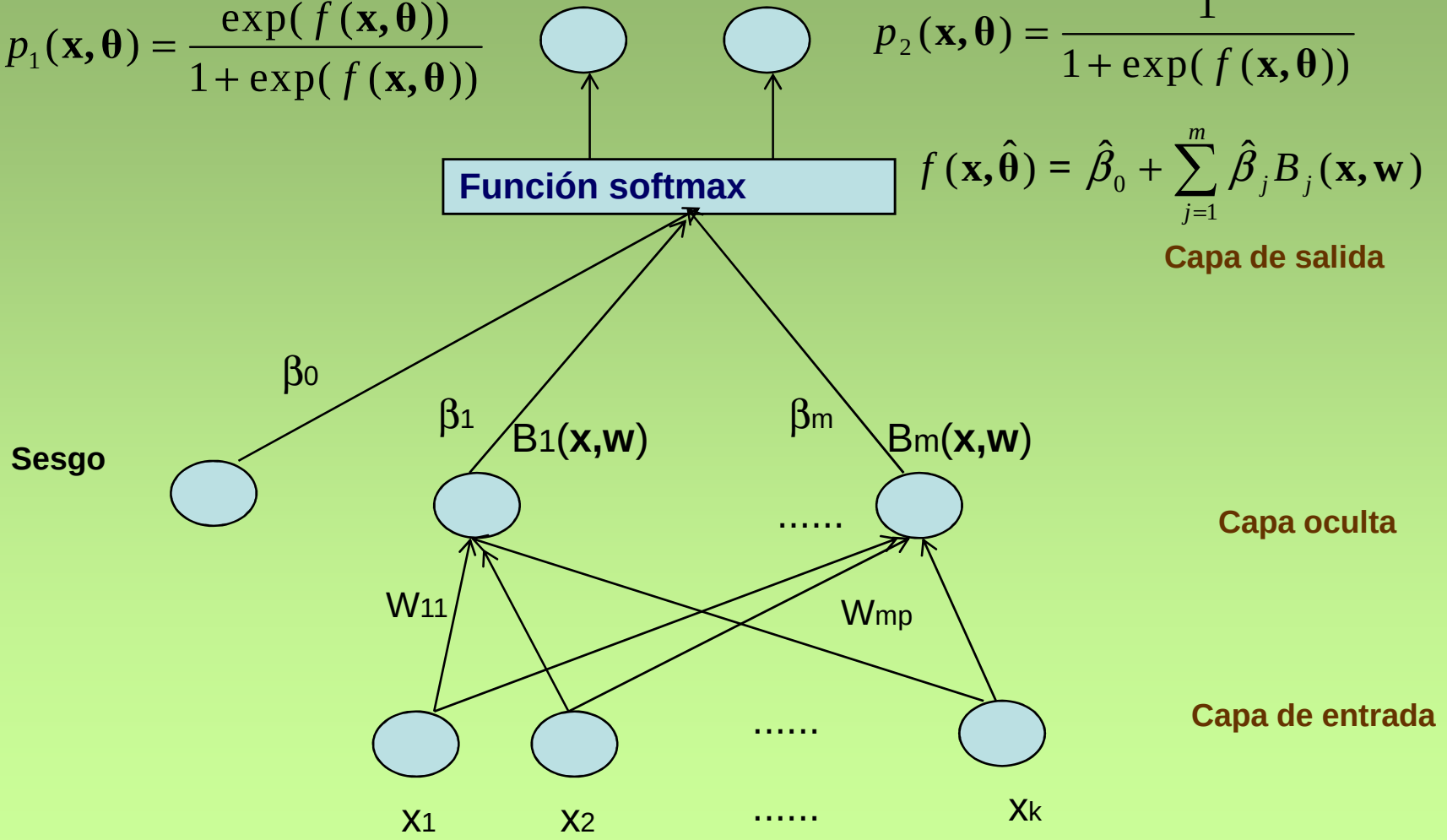
ESTRUCTURA DE UNA RED NEURONAL

Representación de un modelo de red para clasificación binaria

$$p_1(\mathbf{x},\boldsymbol{\theta}) = \frac{\exp(f(\mathbf{x},\boldsymbol{\theta}))}{1+\exp(f(\mathbf{x},\boldsymbol{\theta}))}$$

$$p_2(\mathbf{x},\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{1+\exp(f(\mathbf{x},\boldsymbol{\theta}))}$$

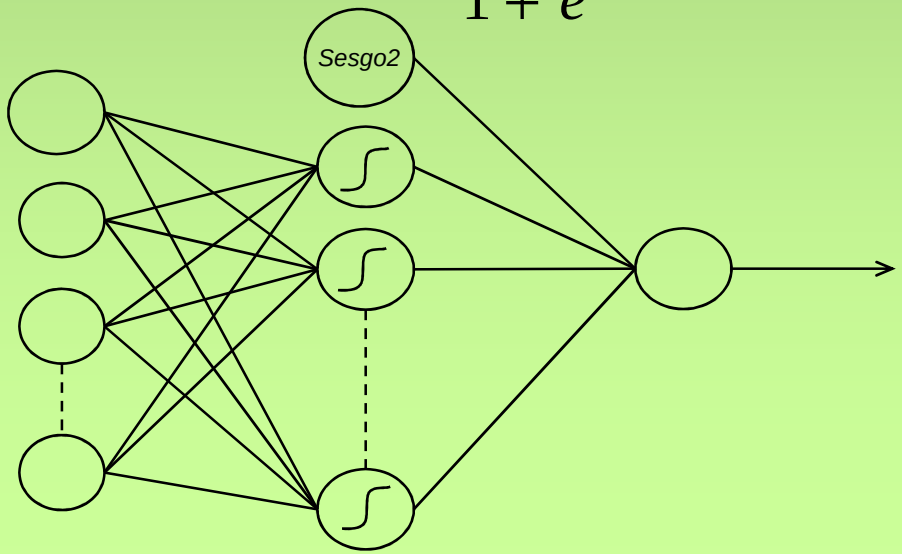
$$f(\mathbf{x},\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \hat{\beta}_0 + \sum_{j=1}^{m} \hat{\beta}_j B_j(\mathbf{x},\mathbf{w})$$



- **Distintas unidades en capa oculta → Distintos modelos Redes Neuronales**

Unidades Sigmoides (MLP)

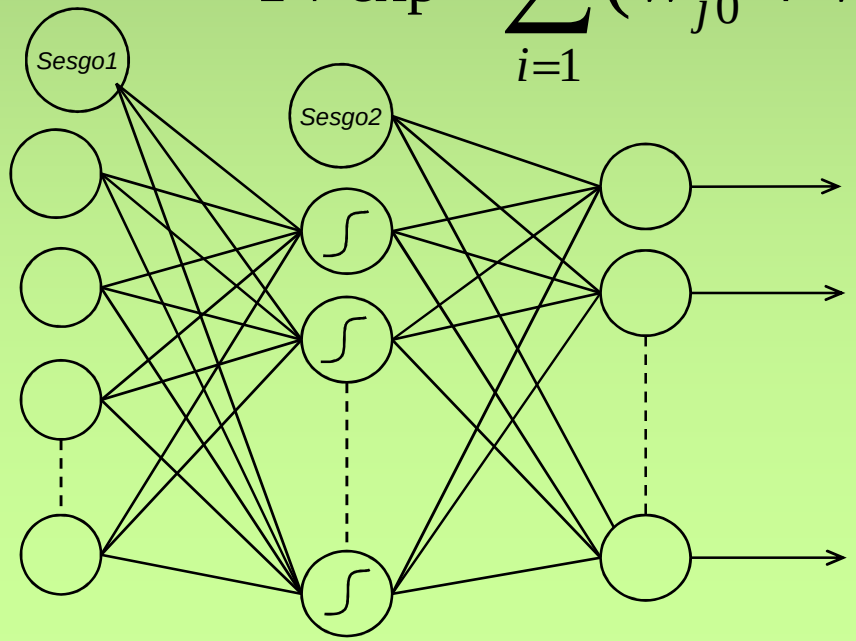
$$B_i(x_1, x_2, ..., x_k) = \frac{1}{1 + e^{-\left(\sum_{i=1}^{k} w_{ji} \cdot x_i + \theta_j\right)}}$$



Redes MLP en Clasificación (Unidades de base sigmoides)

- **Distintas funciones de salida en capa oculta → Distintos modelos Redes Neuronales**
- **Unidades Sigmoides en Clasificación Multiclase (US)**

$$f_j(x_1, x_2 \ldots x_k) = \frac{1}{1 + \exp - \sum_{i=1}^{k} (w_{j0} + w_{ji} x_i)}$$



APRENDIZAJE MEDIANTE ALGORITMOS DE GRADIENTE DESCENDENTE

REDES NEURONALES ARTIFICIALES MLP

Arquitectura:

Una red *Feedforward* de al menos una capa oculta y con nodos ocultos no-lineales.

Una función de transferencia diferenciable, siendo la más común la función sigmoide

Aprendizaje: supervisado, control del error, regla delta generalizada

Algoritmo de retropropagación del error:
Regla de adaptación de los pesos de la red (aproximación mediante un método de gradiente descendente)

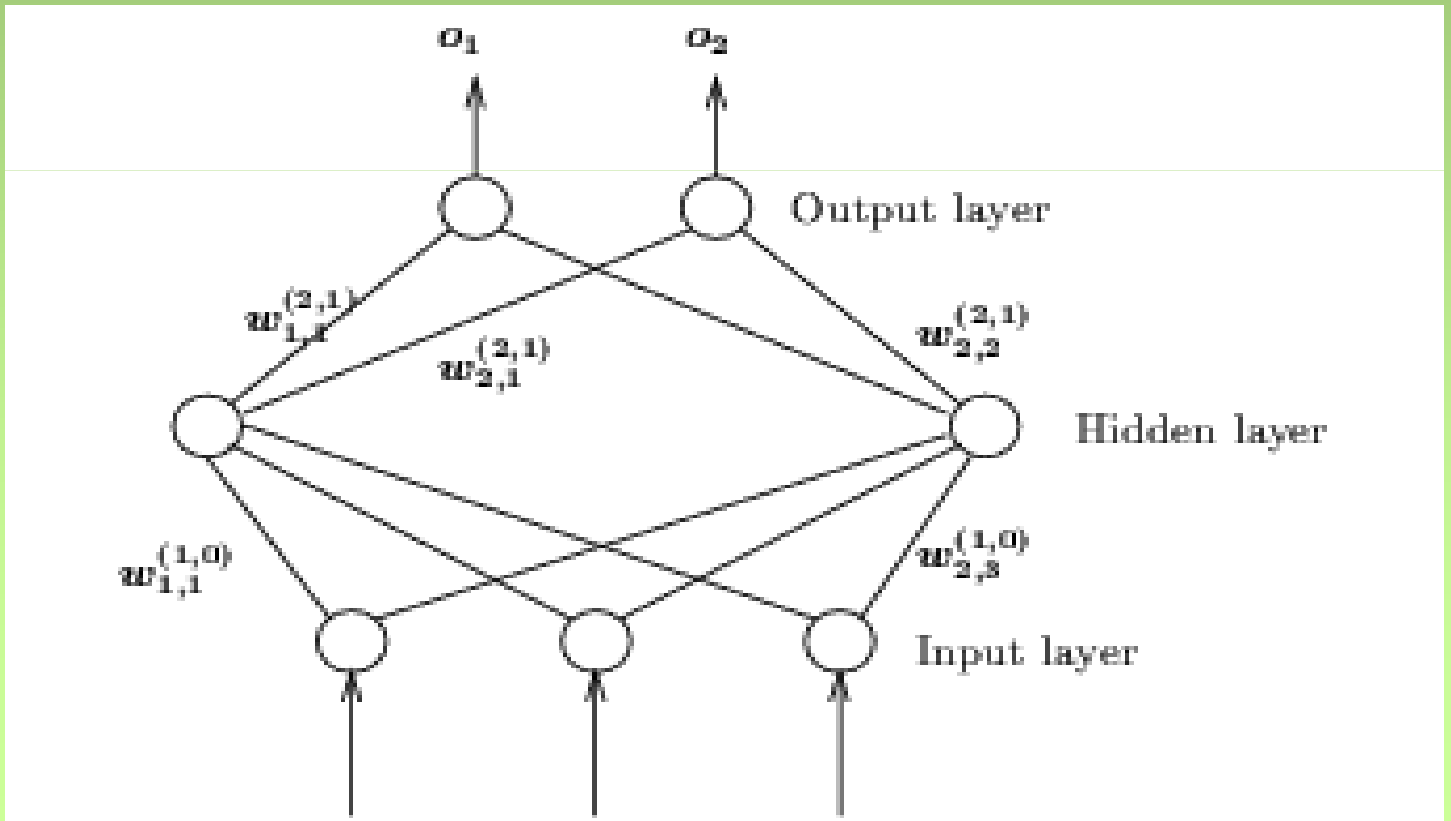
REDES NEURONALES ARTIFICIALES MLP

Pesos: dos matrices de pesos:

$w^{(1,0)}$ **desde la capa de entrada (0) a la capa oculta (1)**

$w^{(2,1)}$ **desde la capa oculta (1) a la capa de salida (2)**

$w_{2,1}^{(1,0)}$ **peso desde el nodo 1 de la capa de entrada 0 al nodo 2 en la capa oculta 1**



Neurona de Umbral (Perceptron)

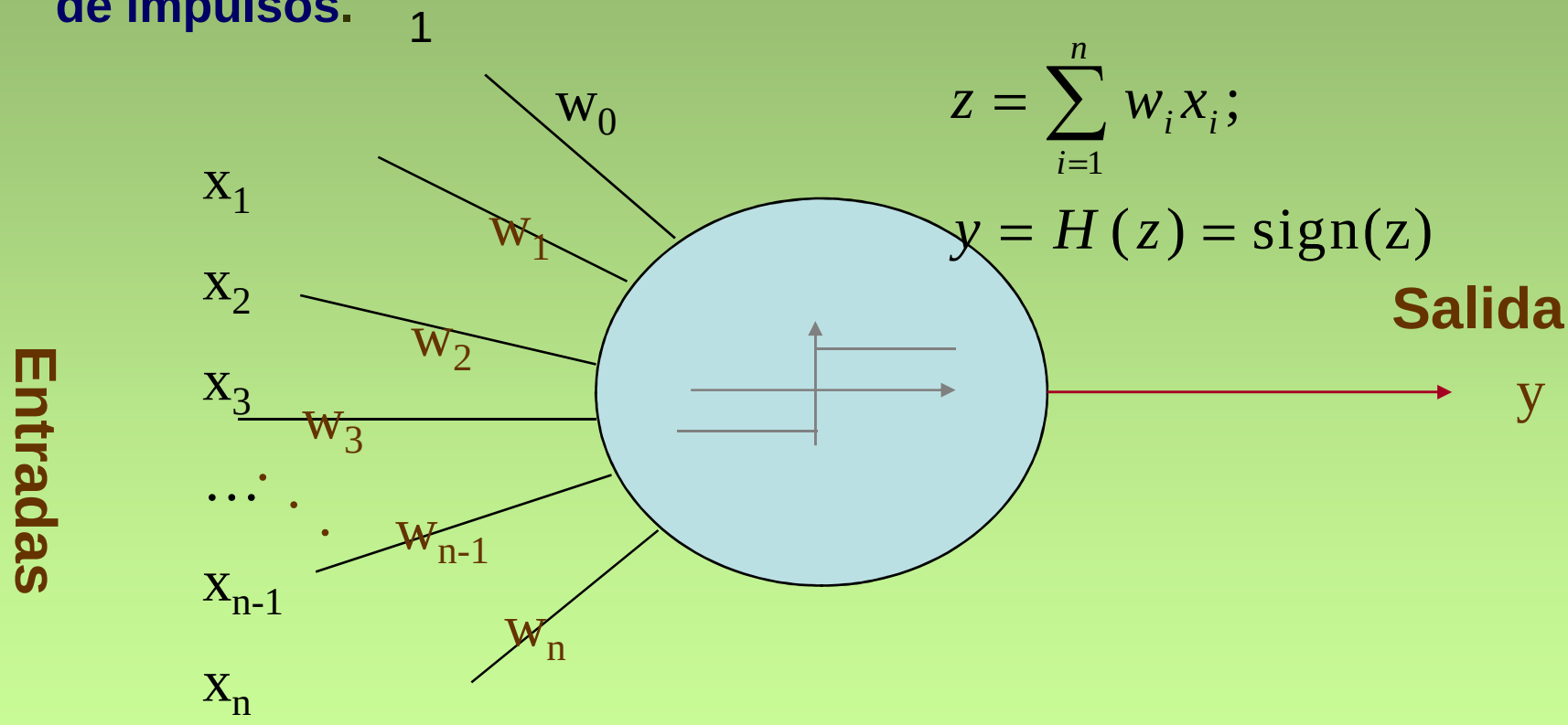
- La salida de una neurona de umbral es binaria, mientras que las entradas pueden ser binarias o continuas.
- Si las entradas son binarias, una función de umbral implementa una función Booleana.
- El alfabeto Booleano {1, -1} es el que habitualmente se utiliza en teoría en vez del {0, 1}. La correspondencia con el alfabeto clásico Booleano {0, 1} se establece en la forma:

$$0 \rightarrow 1; 1 \rightarrow -1; \quad y \in \{0,1\}, x \in \{1,-1\}$$

$$\Rightarrow x = 1 - 2y = (-1)^y$$

Perceptrón

Las neuronas realizan el trabajo de procesamiento de la información. Ellas reciben y proporcionan información en forma de impulsos.

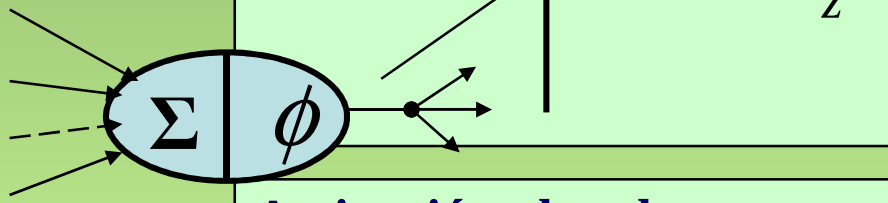


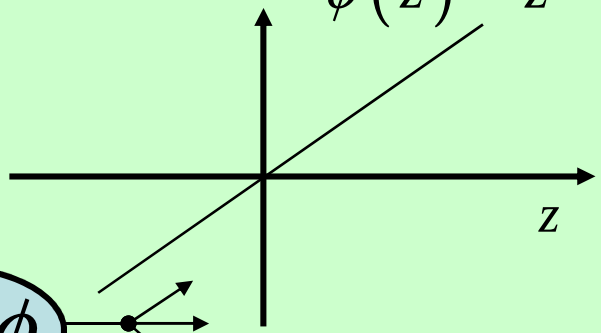
El modelo de McCullogh-Pitts

Neurona Artificial : Funciones Clásicas de Activación

Activación Lineal

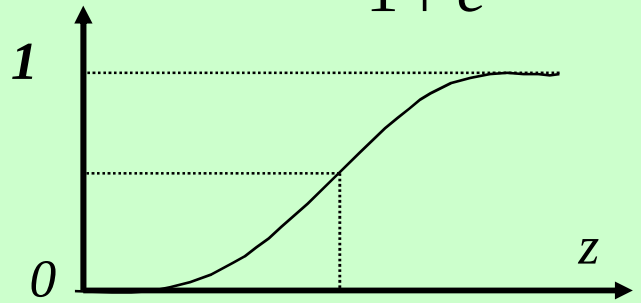
$$\phi(z) = z$$





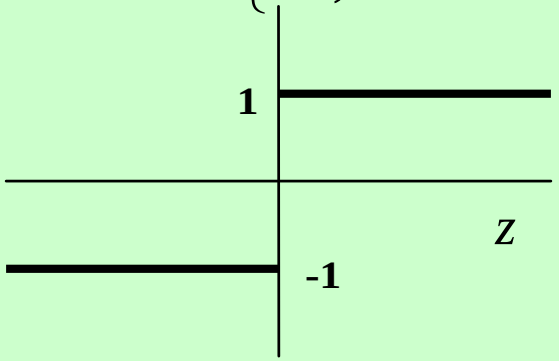
Activación Logistica

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



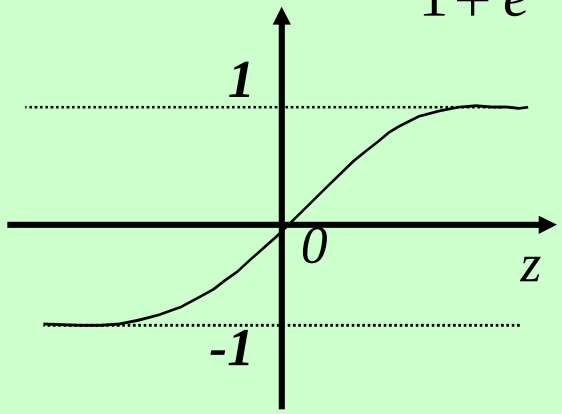
Activación de salto

$$\phi(z) = \text{sign}(z) = \begin{cases} 1, & si \quad z \geq 0, \\ -1, & si \quad z < 0. \end{cases}$$



Activación Tangente Hiperbólica

$$\varphi(u) = tanh(\gamma u) = \frac{1-e^{-2\gamma u}}{1+e^{-2\gamma u}}$$



Algoritmo de retro-propagación del error

- **Notaciones: P patrones, k variables de salida, n variables de entrada**

  - **Muestras de entrenamiento: pares de valores** $\{(x_p, d_p)\, p = 1,..., P\}$ **de forma tal que el aprendizaje es supervisado**
  - **Patrón de entrada:** $\mathbf{x_p} = (x_{p,1}, ..., x_{p,n})$
  - **Patrón de salida:** $\mathbf{o_p} = (o_{p,1}, ..., o_{p,k})$
  - **Salida deseada:** $\mathbf{d_p} = (d_{p,1}, ..., d_{p,k})$
  - **Error:** $l_{p,j} = o_{p,j} - d_{p,j}$ **error de la salida j cuando se aplica el patrón x_p a la red.**

Función objetivo: Suma de errores al cuadrado $= \sum_{p=1}^{P} \sum_{j=1}^{K} (l_{p,j})^2$

La minimización de este error dirige el entrenamiento (cambiando los pesos $w^{(1,0)}$ **y** $w^{(2,1)}$ **)**

ALGORITMO DE RETROPROPAGACIÓN

Unidad Sigmoide

- Como en el perceptrón, la primera parte de una unidad sigmoide computa una combinación lineal de sus entradas.

$$o' = \mathbf{w}.\mathbf{x}$$

A continuación la unidad sigmoide computa su salida con la siguiente función.

$$o = \text{sgn}(\mathbf{w}.\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp - (w_{10} + w_{11}x_1 + ... + w_{1k}x_K)}$$

$$\text{o también } S(\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + e^{-\sum_{j=o}^{K} w_{1j}x_j}}$$

- Esta segunda ecuación a menudo se la reconoce como una función de alisamiento puesto que transforma un dominio de entradas muy grande a un dominio de salida pequeño.

Algoritmo de retro-propagación del error

Una función sigmoide tiene la propiedad de que su derivada se expresa con facilidad en términos de su salida, lo que hace la descripción del algoritmo de retropropagación del error mucho más compacta, al hacer uso de esta derivada.

- **Derivada de la función sigmoide** : $S(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}; \quad S'(x) = S(x)(1-S(x))$

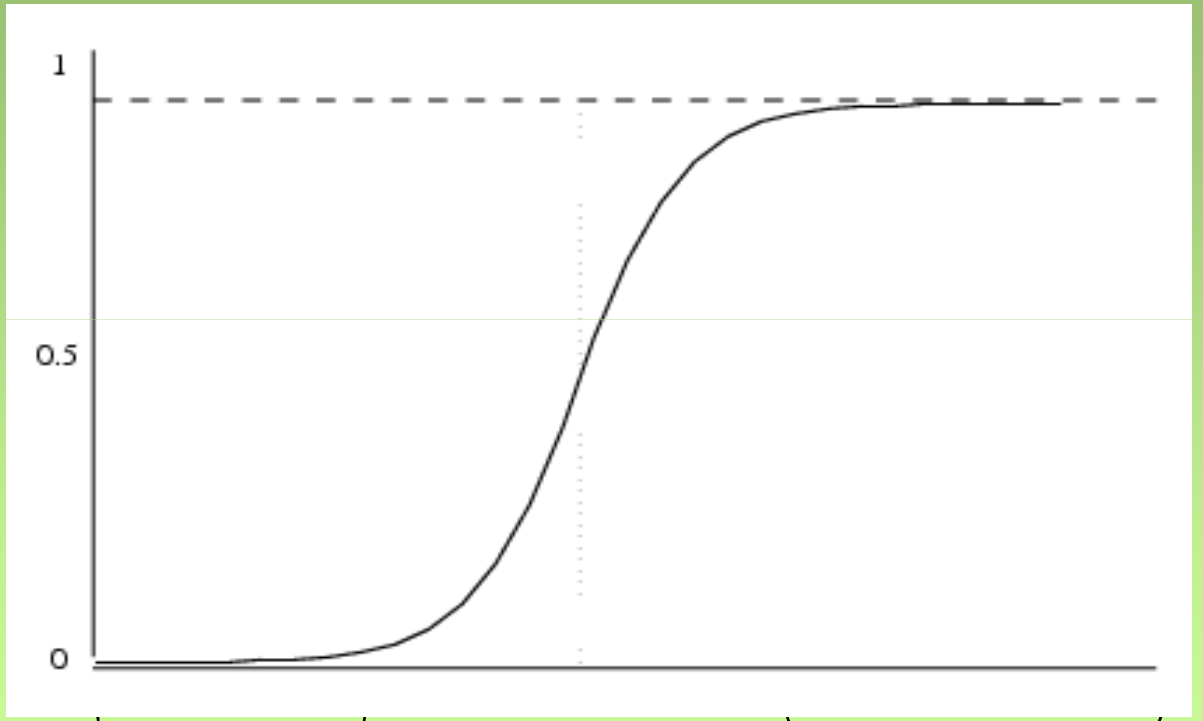
$$S'(x) = -\frac{1}{(1+e^{-x})^2} \cdot (1+e^{-x})' =$$

$$= -\frac{1}{(1+e^{-x})^2} \cdot (-e^{-x})$$

$$= \frac{1}{1+e^{-x}} \cdot \frac{e^{-x}}{1+e^{-x}} = S(x)(1-S(x))$$

Algoritmo de retro-propagación del error

- **Cuando x es suficientemente grande o muy cercana a 0, se mueve hacia una de las dos regiones de saturación, comportándose como un umbral o función de tipo rampa.**



ALGORITMO DE RETROPROPAGACIÓN

Computación hacia adelante:

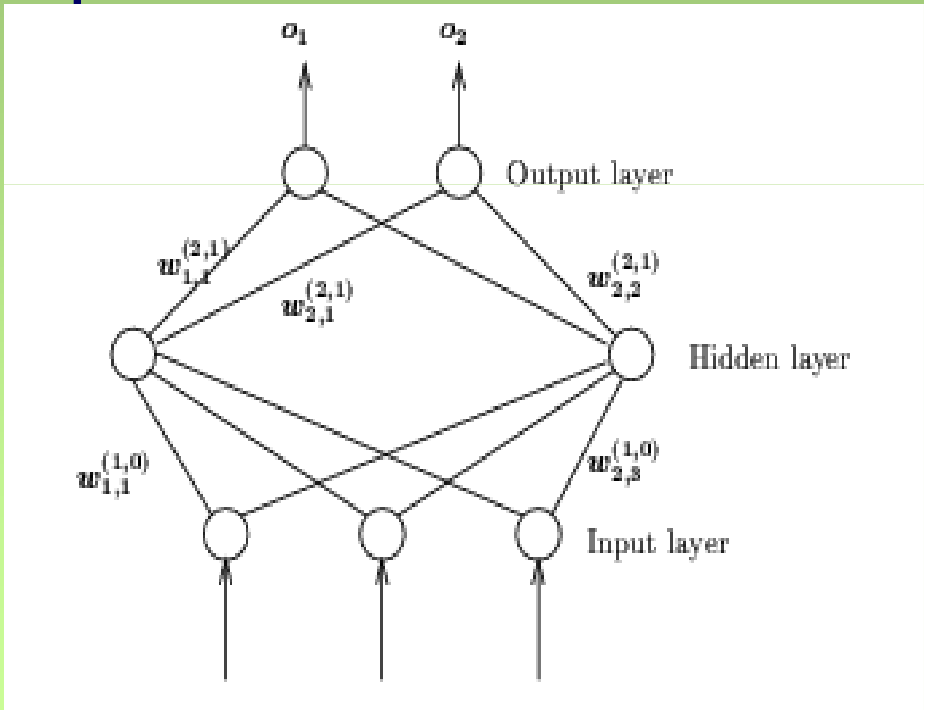
- **Se aplica un vector *x* de entrada a los nodos de la capa de entrada**

- **Se calcula el vector de salida x(1) de la capa oculta**

$$x_j^{(1)} = S(net_j^{(1)}) = S(\sum_i w_{j,i}^{(1,0)} x_i)$$

- **Se calcula el vector de salida o de la capa de salida**

$$o_k = S(net_k^{(2)}) = S(\sum_j w_{k,j}^{(2,1)} x_j^{(1)})$$



- **Se dice que la red es una transformación de la entrada x a la salida o**

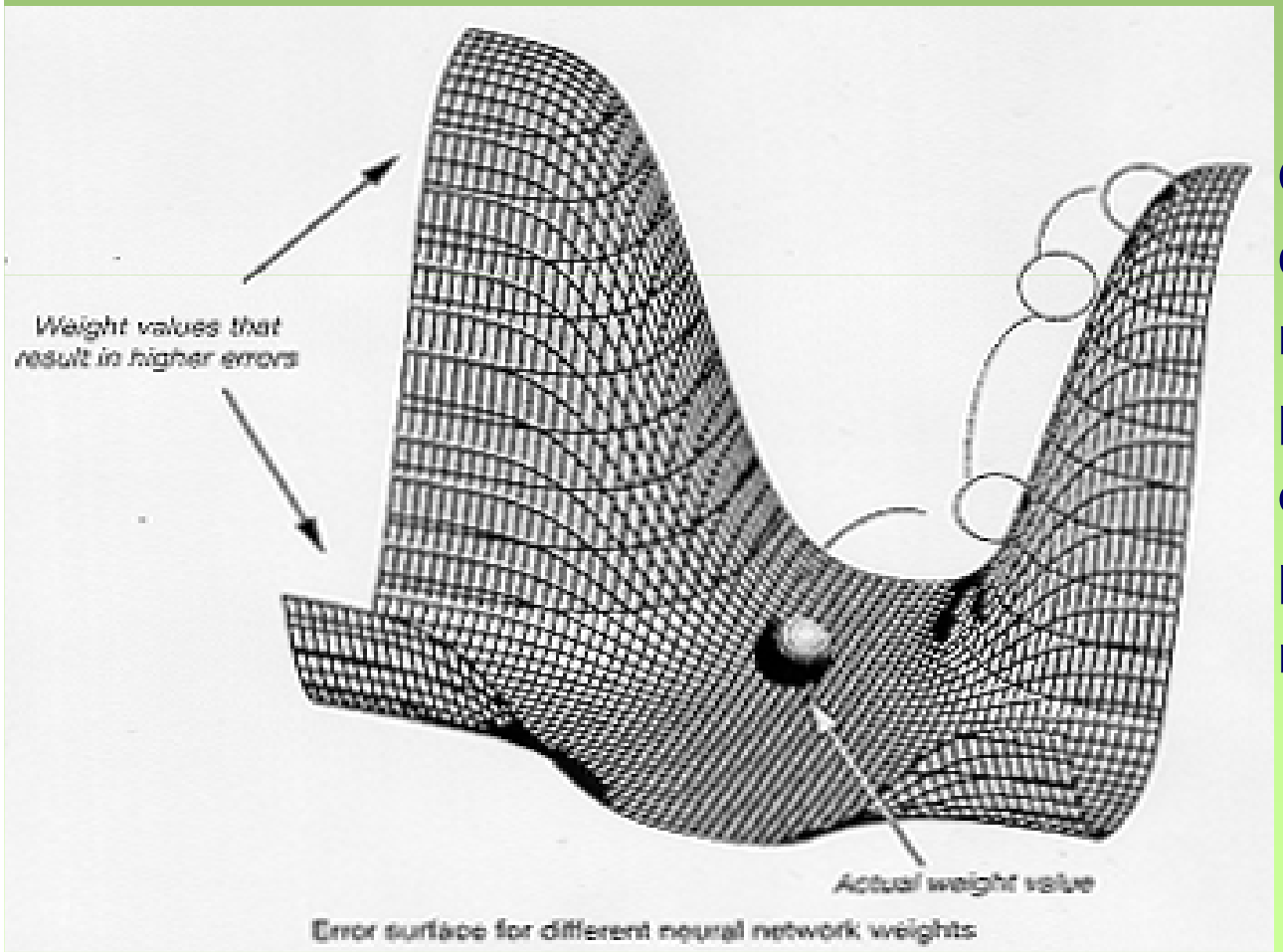
ALGORITMO DE RETROPROPAGACIÓN DEL ERROR

- **El algoritmo *Back-propagation* es un procedimiento para ajustar los pesos de la red con el fin de minimizar el error de salida.**

- **La técnica empleada es un algoritmo de búsqueda local de gradiente descendente: se calcula la derivada de las funciones de transferencia y, para cada peso, se decide si añadir o restar una pequeña cantidad con el objetivo de reducir el error total.**

ALGORITMO DE RETROPROPAGACIÓN DEL ERROR

Supongamos que podemos ajustar dos pesos (w_1 y w_2). La superficie de debajo es un ejemplo de como puede variar el error como resultado de la combinación de esos diferentes pesos.

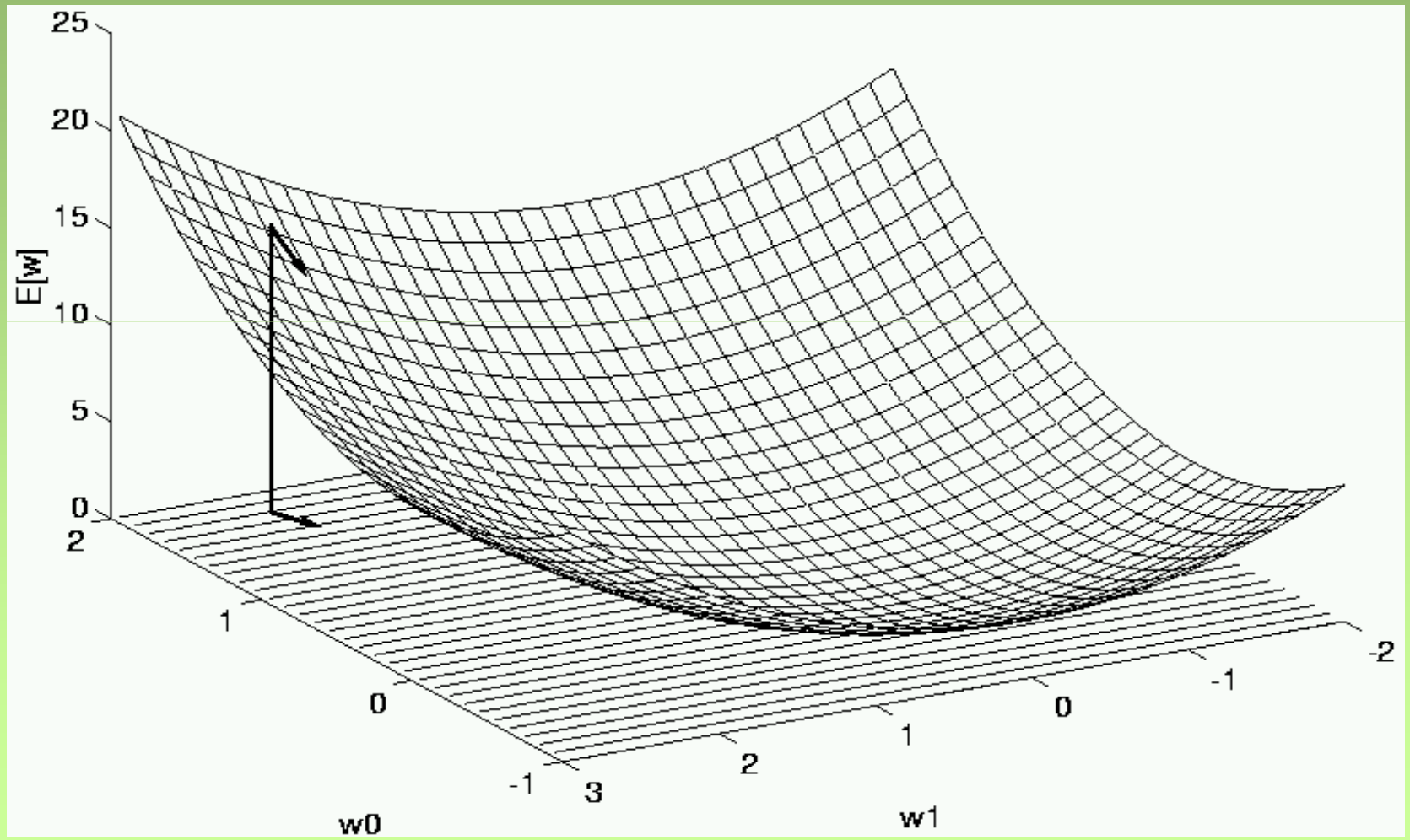


Error surface for different neural network weights

Observamos que la dirección (positiva o negativa) y las etapas de las pendientes se pueden obtener utilizando derivadas parciales del error con respecto a w_1 y w_2

GRADIENTE DESCENDENTE

Aqui mostramos otra gráfica para ver como el error de predicción puede cambiar cuando cambian los valores de los pesos:



ALGORITMO DE RETROPROPAGACIÓN

Objetivo del aprendizaje:

Minimizar la suma de errores al cuadrado

$$\sum_{p=1}^{P}\sum_{j=1}^{K}(l_{p,j})^2$$

para el número de patrones de entrenamiento P tanto como sea posible (a cero si fuese posible)

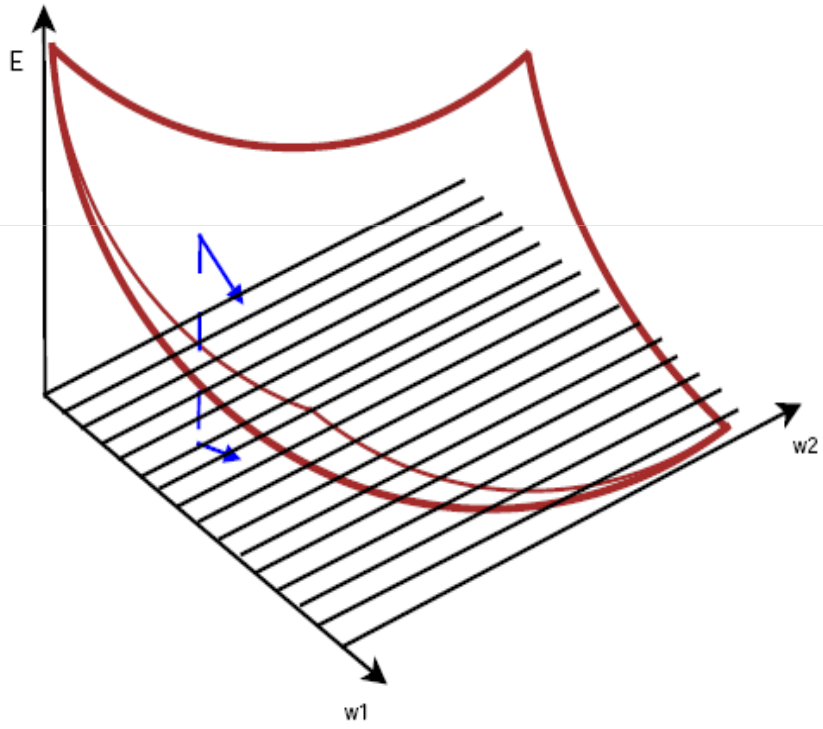


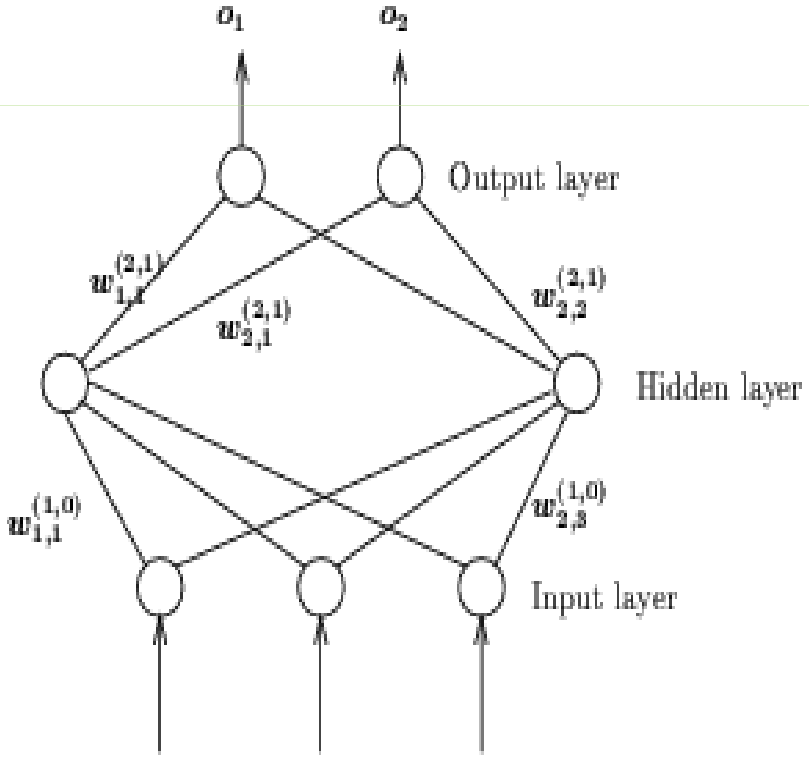
Figure 2: Hypothesis surface

ALGORITMO DE RETROPROPAGACIÓN: BP

- **Objetivo del algoritmo BP:**

- **Cambiar los pesos en $w^{(2,1)}$ (de la capa oculta a la capa de salida): Utilizando la regla delta en una sola capa oculta de la red minimizando la suma de los errores cuadráticos**

- **La regla delta no se puede utilizar “ *a priori*” para cambiar los pesos $w^{(1,0)}$ (desde la capa de entrada a la capa oculta) porque no conocemos los valores deseados de los nodos de la capa oculta**



ALGORITMO DE RETROPROPAGACIÓN: BP

- **Solución: Propagamos los errores de los nodos de la capa de salida hacia los nodos de la capa oculta impulsando los cambios de los pesos en $w^{(1,0)}$ (utilizando de nuevo la regla delta), definiendo este procedimiento como aprendizaje por retropropagación del error).**

  - **La clave está, por tanto, en como calcular los errores en los nodos de la capa oculta.**
  - **El error BP puede continuar retropropagandose si la red tiene más de una capa oculta, pero tiene el inconveniente de que los valores de las derivadas tienden a cero "se desvanece la derivada".**
  - **Fue propuesto, primero por Werbos (1974), y más adelante por Rumelhart, Hinton, and Williams (1986).**

ALGORITMO BP: Regla delta generalizada

- Consideraremos un método de aprendizaje secuencial: para un patrón muestral dado (x_p, d_p). La suma del error cuadrático cometido es

$$E = \sum_k (l_{p,k})^2$$

  - Cambiando los pesos mediante un algoritmo de gradiente descendente
  - Para los pesos en $w^{(2,1)}$: $\Delta w_{k,j}^{(2,1)} \propto (-\partial E / \partial w_{k,j}^{(2,1)})$
  - Para los pesos en $w^{(1,0)}$: $\Delta w_{j,i}^{(1,0)} \propto (-\partial E / \partial w_{j,i}^{(1,0)})$
  - Derivación mediante la regla de actualización de los pesos $w_{k,j}^{(2,1)}$, puesto que *E* es una función de $l_k = d_k - o_k$, y $d_k - o_k$ es una función de $net_k^{(2)}$, y $net_k^{(2)}$ es una función de $w_{k,j}^{(2,1)}$, si utilizamos la regla de la cadena, tenemos

$$\frac{\partial E}{\partial w_{k,j}^{(2,1)}} = \frac{\partial E}{\partial (d_k - o_k)} \frac{\partial (d_k - o_k)}{\partial net_k^{(2)}} \frac{\partial net_k^{(2)}}{\partial w_{k,j}^{(2,1)}}$$

$$= -2(d_k - o_k) S'(net_k^{(2)}) x_j^{(1)}.$$

$$o_k = S(net_k^{(2)}) = S(\sum_j w_{k,j}^{(2,1)} x_j^{(1)})$$

ALGORITMO BP: Regla delta generalizada detallada

- **Consideraremos un método de aprendizaje secuencial: para un patrón muestral dado (x_p, d_p). La suma del error cuadrático cometido es**

$$E = \sum_k (l_{p,k})^2 = \sum_{k=1}^{K} (d_k - o_k)^2 = \sum_{k=1}^{K} (d_k - S(\sum_{j=1}^{M} w_{k,j}^{(2,1)} x_j^{(1)}))^2 =$$

$$\text{por tanto } -\frac{\partial E}{\partial w_{k,j}^{(2,1)}} = -\frac{\partial E}{\partial (d_k - o_k)} \frac{\partial (d_k - o_k)}{\partial o_k} \frac{\partial o_k}{\partial w_{k,j}^{(2,1)}} =$$

$$= -2(d_k - o_k)(-1) \frac{\partial S(\sum_{j=1}^{M} w_{k,j}^{(2,1)} x_j^{(1)})}{\partial w_{k,j}^{(2,1)}} = 2(d_k - o_k) S'(\sum_{j=1}^{M} w_{k,j}^{(2,1)} x_j^{(1)}) x_j^{(1)} =$$

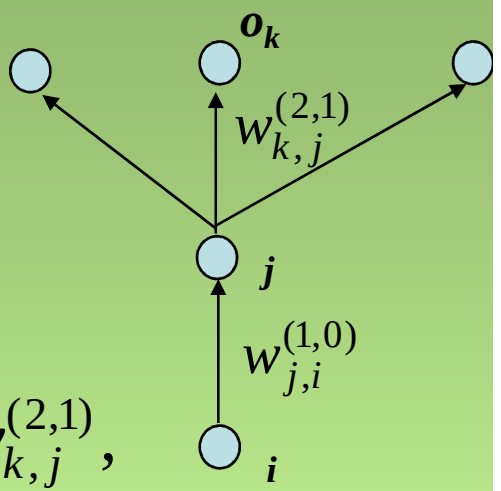
$$= 2(d_k - o_k) S(\sum_{j=1}^{M} w_{k,j}^{(2,1)} x_j^{(1)})(1 - S(\sum_{j=1}^{M} w_{k,j}^{(2,1)} x_j^{(1)})) x_j^{(1)}$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_{k,j}^{(2,1)}} = \frac{\partial E}{\partial (d_k - o_k)} \frac{\partial (d_k - o_k)}{\partial net_k^{(2)}} \frac{\partial net_k^{(2)}}{\partial w_{k,j}^{(2,1)}}$$

$$= -2(d_k - o_k) S'(net_k^{(2)}) x_j^{(1)}.$$

ALGORITMO BP: Regla delta generalizada

- Derivación mediante la regla de cambio para $w_{j,i}^{(1,0)}$
- consideramos el nodo oculto *j*:
- el peso $w_{j,i}^{(1,0)}$ influye en $net_j^{(1)}$
- se envía $S(net_j^{(1)})$ a todos los nodos de salida
- todos los *K* terminos en *E* son funciones de $w_{j,i}^{(1,0)}$



$$E = \sum_k (d_k - o_k)^2, \quad o_k = S(net_k^{(2)}), \quad net_k^{(2)} = \sum_j x_j^{(1)} w_{k,j}^{(2,1)},$$

$$x_j^{(1)} = S(net_j^{(1)}), \; net_j^{(1)} = \sum_i x_i w_{j,i}^{(1,0)}$$

Regla de la cadena

$$\frac{\partial E}{\partial w_{j,i}^{(1,0)}} = \sum_{k=1}^{K} \left\{ \frac{\partial E}{\partial o_k} \frac{\partial S(net_k^{(2)})}{\partial net_k^{(2)}} \frac{\partial net_k^{(2)}}{\partial x_j^{(1)}} \frac{\partial x_j^{(1)}}{\partial net_j^{(1)}} \frac{\partial net_j^{(1)}}{\partial w_{j,i}^{(1)}} \right\}$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_{j,i}^{(1,0)}} = \sum_{k=1}^{K} \left\{ -2(d_k - o_k) S'\left(net_k^{(2)}\right) w_{k,j}^{(2,1)} S'\left(net_j^{(1)}\right) x_i \right\}$$

ALGORITMO BP: Regla delta generalizada detallada

$$E = \sum_k (l_{p,k})^2 = \sum_{k=1}^{K} (d_k - o_k)^2 = \sum_{k=1}^{K} (d_k - S(\sum_{j=1}^{M} w_{k,j}^{(2,1)} x_j^{(1)}))^2 =$$

$$\text{por tanto } -\frac{\partial E}{\partial w_{i,j}^{(0,1)}} = \sum_{k=1}^{K} -\frac{\partial E}{\partial (d_k - o_k)} \frac{\partial (d_k - o_k)}{\partial o_k} \frac{\partial o_k}{\partial x_j^{(1)}} \frac{\partial x_j^{(1)}}{\partial net_j^{(1)}} \frac{\partial net_j^{(1)}}{\partial w_{i,j}^{(0,1)}} =$$

$$\begin{pmatrix} \text{pero } o_k = S(net_k^{(2)}), net_k^{(2)} = \sum_j x_j^{(1)} w_{k,j}^{(2,1)}, \\ x_j^{(1)} = S(net_j^{(1)}),\ net_j^{(1)} = \sum_i x_i w_{j,i}^{(1,0)} \end{pmatrix} \text{ luego}$$

$$= \sum_{k=1}^{K} -2(d_k - o_k)(-1) \frac{\partial S(\sum_{j=1}^{M} w_{k,j}^{(2,1)} x_j^{(1)})}{\partial net_j^{(2)}} \frac{\partial net_j^{(2)}}{\partial x_j^{(1)}} \frac{\partial x_j^{(1)}}{\partial net_j^{(1)}} \frac{\partial net_j^{(1)}}{\partial w_{j,i}^{(1,0)}} =$$

$$= \sum_{k=1}^{K} -2(d_k - o_k)(-1) S'(net_j^{(2)}) w_{k,j}^{(2,1)} S'(net_j^{(1)}) x_i$$

Regla de la cadena

$$\frac{\partial E}{\partial o_k} \quad \frac{\partial S(net_k^{(2)})}{\partial net_k^{(2)}} \quad \frac{\partial net_k^{(2)}}{\partial x_j^{(1)}} \quad \frac{\partial x_j^{(1)}}{\partial net_j^{(1)}} \quad \frac{\partial net_j^{(1)}}{\partial w_{j,i}^{(1)}}$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_{j,i}^{(1,0)}} = \sum_{k=1}^{K} \left\{ -2(d_k - o_k) S' \left(net_k^{(2)} \right) w_{k,j}^{(2,1)} S' \left(net_j^{(1)} \right) x_i \right\}$$

ALGORITMO DE RETROPROPAGACIÓN

- **Entonces, el vector de pesos de la red se puede adaptar mediante:**

$$\mathbf{w}_{new} = \mathbf{w}_{old} - \nabla E(\mathbf{w})$$

- **Donde $\nabla E(\mathbf{w})$ es el gradiante de la función de error E:**

$$\nabla E(\mathbf{w}) = \left(\frac{\partial E}{\partial w_0}, \ldots, \frac{\partial E}{\partial w_m}\right)$$

Para cada valor k se puede adaptar el peso mediante:

$$w_k = w_k + \Delta w_k$$

$$\Delta w_k = -\eta \frac{\partial E}{\partial w_k}$$

ALGORITMO BP: Regla delta generalizada

- **Reglas del cambio:**
- **para los pesos de las capas (oculta-salida)** $w^{(2,1)}$ **:**

$$\frac{\partial E}{\partial w_{k,j}^{(2,1)}} = -2(d_k - o_k)\mathcal{S}'(net_k^{(2)})x_j^{(1)}$$

$x_j^{(1)}$ = salida del valor del patrón x por el nodo j de la capa oculta

- $\Delta w_{k,j}^{(2,1)} = \eta \times \delta_k \times x_j^{(1)}$ **donde** $\delta_k = (d_k - o_k)S'(net_k^{(2)})$

- **para los pesos de las capas (entrada-oculta)** $w^{(1,0)}$ **:**

$$\frac{\partial E}{\partial w_{j,i}^{(1,0)}} = \sum_{k=1}^{K}\left\{-2(d_k - o_k)\mathcal{S}'\left(net_k^{(2)}\right) w_{k,j}^{(2,1)}\mathcal{S}'\left(net_j^{(1)}\right) x_i\right\}$$

- $\Delta w_{j,i}^{(1,0)} = \eta \times \mu_j \times x_i$

$$\mu_j = (\sum_k \delta_k w_{k,j}^{(2,1)})S'(net_j^{(1)})$$

donde

Suma ponderada de errores de la capa de salida

Algorithm Backpropagation;

Start with randomly chosen weights;

while MSE is unsatisfactory

and computational bounds are not exceeded, do

for each input pattern x_p, $1 \leq p \leq P$,

Compute hidden node inputs ($net_{p,j}^{(1)}$);

Compute hidden node outputs ($x_{p,j}^{(1)}$);

Compute inputs to the output nodes ($net_{p,k}^{(2)}$);

Compute the network outputs ($o_{p,k}$);

Modify outer layer weights:

$$\Delta w_{k,j}^{(2,1)} = \eta(d_{p,k} - o_{p,k})\mathcal{S}'(net_{p,k}^{(2)})x_{p,j}^{(1)}$$

Modify weights between input & hidden nodes:

$$\Delta w_{j,i}^{(1,0)} = \eta \sum_k \left((d_{p,k} - o_{p,k})\mathcal{S}'(net_{p,k}^{(2)})w_{k,j}^{(2,1)} \right) \mathcal{S}'(net_{p,j}^{(1)})x_{p,i}$$

end-for

end-while.

Salida del valor del patrón p por el nodo j de la capa oculta

Nota: Si S es una función sigmoide, entonces *S'*(*x*) = *S*(*x*)(1 – *S*(*x*))

ALGORITMO BP: Regla delta generalizada

Clasificación de patrones:

- **Dos clases: 1 nodo de salida**
- **J clases: codificación "1 de J"representada como (0,..., 0,1, 0,.., 0)**
- **Con función sigmoide en la capa de salida, (no tenemos una función softmax) los nodos en la capa de salida nunca serán 1 o 0, sino 1- *ε* o *ε***
- **La reducción del error se muestra más lenta cuando nos movemos en las regiones de saturación (cuando *ε* es pequeño).**
- **Para conseguir un aprendizaje rápido, damos una determinada cota de error *ε*, y definimos un error**

$$l_{p,k} = 0 \quad \text{si} \quad \left| d_{p,k} - o_{p,k} \right| \leq \varepsilon$$

- **Cuando se clasifica un patrón x mediante una red entrenada con el algoritmo BP, la red lo clasifica en la k-esima clase si $l_k < l_l$ para todo l != k**

FORTALEZAS DE UNA RED ENTRENADA MEDIANTE UN ALGORITMO BP

- **Gran poder de representación**
  - **Cualquier función L_2 puede ser representada mediante una red MLP entrenada mediante BP**
  - **Muchas de estas funciones se pueden aproximar mediante un algoritmo de aprendizaje BP (una aproximación de un algoritmo de gradiente descendente)**
- **Amplia aplicabilidad del aprendizaje BP**
  - **Sólo se necesita que tengamos un buen conjunto de patrones de entrenamiento**
  - **No se necesita conocimiento *a priori* substancial, o un conocimiento o entendimiento del propio dominio del problema (problemas mal estructurados)**

FORTALEZAS DE UNA RED ENTRENADA MEDIANTE UN ALGORITMO BP

Amplia aplicabilidad del aprendizaje BP

- **Tolerancia a ruido y a datos perdidos en el conjunto de entrenamiento (leve degradación)**
- **Es fácil de implementar el fundamento del algoritmo**

Buen poder de generalización

- **A menudo produce resultados precisos para patrones no situados en el conjunto de entrenamiento**

DEBILIDADES DE UNA RED ENTRENADA MEDIANTE UN ALGORITMO BP

- **El algoritmo a veces tarda mucho en converger**

  El entrenamiento para funciones complejas necesita a menudo cientos o miles de épocas (paso de todos los patrones de entrenamiento por el algoritmo)

- **La red es esencialmente una caja negra**
  - **Puede proporcionar una transformación o función no lineal entre los vectores de entrada y las clases de salida (*x*, *o*) pero no tenemos información de porque un patrón particular x es transformado a una clase particular de salida *o*.**
  - **De esta forma no puede proporcionar, en general, una relación intuitiva causa/efecto que explique el resultado obtenido.**

DEBILIDADES DE UNA RED ENTRENADA MEDIANTE UN ALGORITMO BP

La red es esencialmente una caja negra

- Esto es debido a que los nodos ocultos y los pesos aprendidos no tienen una clara semántica.
  - Lo que podemos aprender son parámetros operacionales, no generales, del conocimiento abstracto de un dominio.
- A diferencia de otros métodos estadísticos, no existe una teoría bien fundamentada que nos asegure la calidad del aprendizaje BP
  - ¿Cual es el nivel de confianza que uno puede tener para una red entrenada mediante BP con el error final E (el cual puede estar o no cerca de cero)?
  - ¿Cual es el nivel de confianza de la salida ***o*** calculada a partir de una entrada **x** utilizando tal red?

DEBILIDADES DE UNA RED ENTRENADA MEDIANTE UN ALGORITMO BP

- Problema con la aproximación de gradiente descendente.
- Solo garantiza que reduce el error total de entrenamiento a un mínimo local (E puede no quedar reducida a cero)
  - No puede escapar del estado de error del mínimo local.
  - No toda función que es representable puede ser aprendida.

Como es este problema de malo: Dependerá de la forma de la función de error, pues si presenta muchos valles y simas, fácilmente quedará atrapado el algoritmo en un mínimo local.

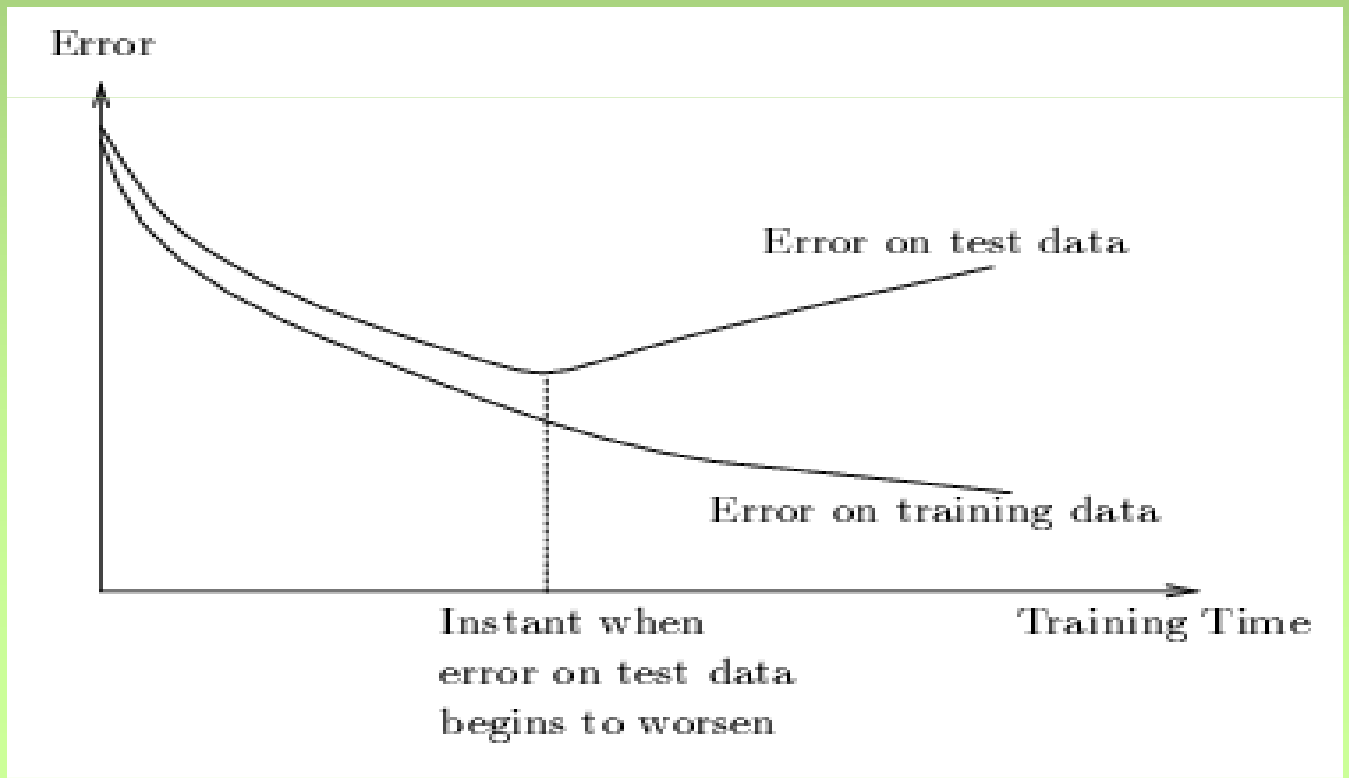
DEBILIDADES DE UNA RED ENTRENADA MEDIANTE UN ALGORITMO BP

Posibles remedios:

- **Probar redes con diferentes números de capas y/o nodos ocultos (pudiendo dar lugar a diferentes funciones de error, unas mejores que otras)**
- **Probar diferentes pesos iniciales para el algoritmo BP (estos serán diferentes puntos de inicio sobre la superficie de error)**
- **Forzar una salida del mínimo local mediante por ejemplo una perturbación aleatoria (p.e., enfriamiento simulado)**

ANALISIS DE LA GENERALIZACIÓN

- **La capacidad de generalización de la red no esta garantizada aun cuando el error de entrenamiento sea 0.**
  - **Problema de sobrefijación o sobreentrenamiento: la red entrenada fija o clasifica las muestras de entrenamiento perfectamente (E se reduce a 0) pero no da salidas adecuadas para patrones no pertenecientes al conjunto de entrenamiento**

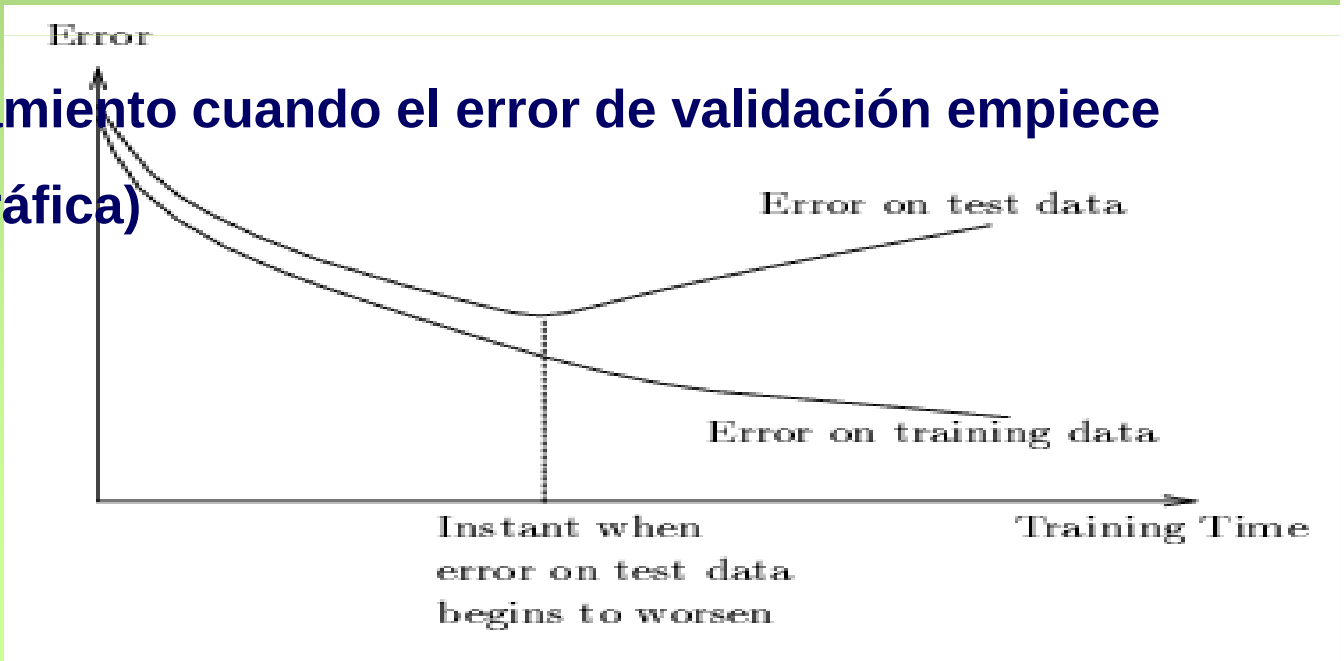


ANALISIS DE LA GENERALIZACIÓN

- **Posibles remedios:**
  - **Mas y mejores muestras**
  - **Utilizar redes de tamaño lo más pequeñas posibles**
  - **Utilizar una cota de error mayor (forzando una terminación más rápida, menos épocas)**
  - **Introducir ruido en las muestras**
    - **modificar (x_1,…, x_n) por ($x_1\alpha_1$,…, $x_n\,\alpha_n$) donde α_n son variables aleatorias que generen pequeños valores**

ANALISIS DE LA GENERALIZACIÓN

- Validación-cruzada en generalización
  - Tomar aproximadamente un (~10%) de las muestras de entrenamiento como datos de validación (no se utilizan para el cambio de pesos ni para generalizar)
  - Chequear periódicamente los errores sobre este conjunto de validación
  - Detener el entrenamiento cuando el error de validación empiece a aumentar (ver gráfica)



Parálisis de la red con funciones de activación sigmoides

Regiones de saturacion

Sea $S(x) = 1/(1+e^{-x})$,

su derivada $S'(x) = S(x)(1-S(x)) \rightarrow 0$ cuando $x \rightarrow \pm\infty$.

Cuando x cae en una región de saturación, S(x) cambia fuertemente su valor independientemente de como de rápido aumente la magnitud de x

- **Una entrada a un nodo puede caer en una región de saturación cuando alguno de sus pesos de entrada se hagan muy grandes durante el aprendizaje. En consecuencia, los pesos dejan de cambiar sin importar los esfuerzos que se hagan.**

$$\frac{\partial E}{\partial w_{k,j}^{(2,1)}} = -2(d_k - o_k)\mathcal{S}'(net_k^{(2)})x_j^{(1)}$$

- **Posibles remedios:**
  - **Utilizar funciones de activación no saturadas**
  - **Normalizar periódicamente todos los pesos**

$$w^*_{k,j} = w_{k,j} / \|w_{.k}\|_2$$

PARÁMETROS DEL ALGORITMO BP

- **El aprendizaje (precisión, velocidad de convergencia, capacidad de generalización) depende mucho de un conjunto de parámetros de aprendizaje, entre otros son:**
  - **Pesos iniciales para el algoritmo BP, coeficiente de aprendizaje, nº de capas ocultas, nº de nodos en capa oculta, tipo de funciones de transferencia, etc...**
  - **La mayoría de ellos se determinan empíricamente (mediante experimentación).**
  - **Una de las técnicas más utilizada es la validación cruzada sobre el conjunto de entrenamiento utilizando un 5-fold y una estructura de tipo malla donde se van probando diferentes valores de cada uno de los parámetros del algoritmo.**

PARÁMETROS DEL ALGORITMO BP

- Una buena red entrenada mediante BP necesita algo más que el código del algoritmo. Es necesario determinar los parámetros del algoritmo para obtener un buen rendimiento en generalización.
- Aunque las deficiencias del algoritmo BP no pueden ser resueltas completamente, algunas de ellas se pueden resolver en la práctica.

Pesos iniciales y sesgos

- De forma aleatoria, [-0.05, 0.05], [-0.1, 0.1], [-1, 1]
- Normalizar los pesos de capa de entrada a capa oculta (Nguyen-Widrow) $w^{(1,0)}$

PARÁMETROS DEL ALGORITMO BP

Pesos iniciales y sesgos

- **Asignación aleatoria de los pesos iniciales para todos los pesos de capa oculta a capa de salida**
- **Para cada nodo de la capa oculta j , normalizar sus pesos de entrada mediante**

$$w_{j,i}^{(1,0)*} = \beta \cdot w_{j,i}^{(1,0)} \; / \left\| w_j^{(1,0)} \right\|_2 \quad \text{donde } \beta = 0.7\sqrt[n]{m}$$

$m =$ nº de nodos ocultos, $n =$ nº de nodos de entrada

$$\left\| w_j^{(1,0)*} \right\|_2 = \beta \text{ después de la normalización}$$

- **Evitar sesgos en la inicialización de los pesos.**

DISEÑO DE EXPERIMENTOS Y TOPOLOGÍA DE LA RED

Nº de muestras de entrenamiento:

- **La calidad y cantidad de patrones o muestras de entrenamiento determina la calidad de los resultados de entrenamiento**
- **Las muestras deben de representar a toda la población del espacio del problema**
  - **Muestreo aleatorio**
  - **Muestreo proporcional (con conocimiento a priori del espacio del problema)**
- **Nº de muestras de entrenamiento necesarias: No existe una teoría al respecto.**

DISEÑO DE EXPERIMENTOS Y TOPOLOGÍA DE LA RED

Regla empírica de Baum and Haussler (1989): P = W/e, donde

W: nº total de pesos a ser entrenados (depende de la estructura de la red). P: nº de muestras de entrenamiento

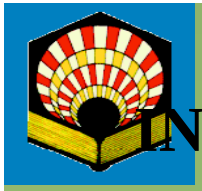
e: porcentaje de error deseable de clasificación en entrenamiento.

Si la red puede ser entrenada para clasificar correctamente (1 – e/2)P de las P muestras de entrenamiento, entonces la precisión en clasificación de esta red es 1 – e para patrones de entrada procedentes del mismo espacio muestral.

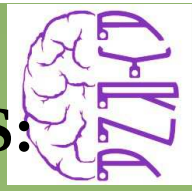
Ejemplo: W = 27, e = 0.05, P = 540. Si podemos entrenar la red para clasificar correctamente (1 – 0.05/2)x540 = 526 de las muestras, la red trabajará correctamente el 95% de las veces con otros patrones de entrada.

TOPOLOGÍA DE LA RED

- **Cuantas capas ocultas y cuantos nodos en capa oculta:**
  - **Teóricamente con una sola capa oculta (posiblemente con muchos nodos en dicha capa) es suficiente para representar cualquier función L_2**
  - **No existen resultados teóricos acerca del número de nodos en capa oculta, siendo este parámetro determinante en el aprendizaje de la red**
  - **Regla empírica:**
    - **n = nº de nodos de entrada; m =nº de nodos en capa oculta**
    - **Para datos binarios: m = 2n**
    - **Para datos reales: m >> 2n**
  - **En algunas aplicaciones, múltiples capas ocultas con menos nodos en cada capa pueden ser entrenadas más rápidamente con precisiones similares.**



INTRODUCCIÓN A LOS MODELOS COMPUTACIONALES:
CUARTO CURSO DEL GRADO
DE ING. INFORMÁTICA EN COMPUTACION



Algoritmo de retropropagación del error

GRACIAS POR SU ATENCIÓN

César Hervás-Martínez
Grupo de Investigación AYRNA

Departamento de Informática y Análisis Numérico
Universidad de Córdoba
Campus de Rabanales. Edificio Einstein.
Email: chervas@uco.es

2019-2020