Aprendizado de Máquina

Aula 6: Redes Neurais

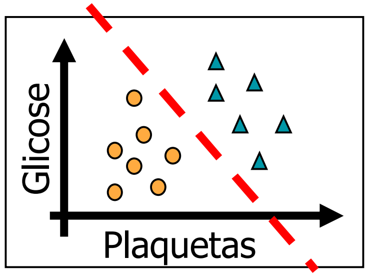
André C. P. L. F de Carvalho
ICMC/USP
andre@icmc.usp.br

Tópicos

- Técnicas geométricas
- Discriminante linear
- Redes neurais artificiais
- Arquitetura e aprendizado de redes neurais
- Rede perceptron
- Rede adaline
- Rede multi-layer perceptron (MLP)

Discriminante linear

- Busca modelo que melhor se ajuste aos dados
  - Representação matemática
    - Dois atributos preditivos
      - Fronteira de decisão = reta (hiperplano para > 2)
    - Classificação
    - Função discriminante
      - Combinação linear dos atributos preditivos
        - Soma ponderada
      - Como definir valores dos pesos?



$$y = ax + b$$
$$f(x) = ax + b$$
$$f(x) = -2x + 15$$

Função de classificação:

$$classe(x) = \begin{cases} +1 \text{ se } f(x) + 2p - 15 \geq 0 \\ -1 \text{ se } f(x) + 2p - 15 < 0 \end{cases}$$

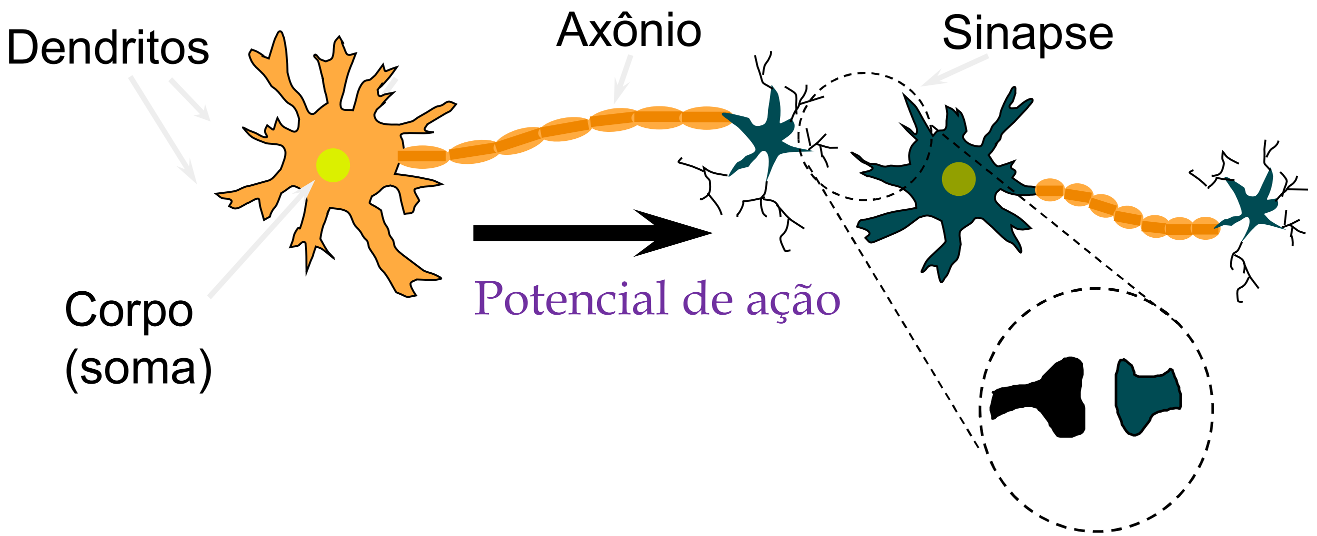
$$f(x) = w_0 + w_1x_1$$
$$f(x) = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + \ldots$$

Redes Neurais

- Sistemas distribuídos inspirados no cérebro humano
    - Redes são compostas por várias unidades de processamento (“neurônios”)
        - Interligadas por um grande número de conexões (“sinapses”)
- Bom desempenho preditivo em várias aplicações

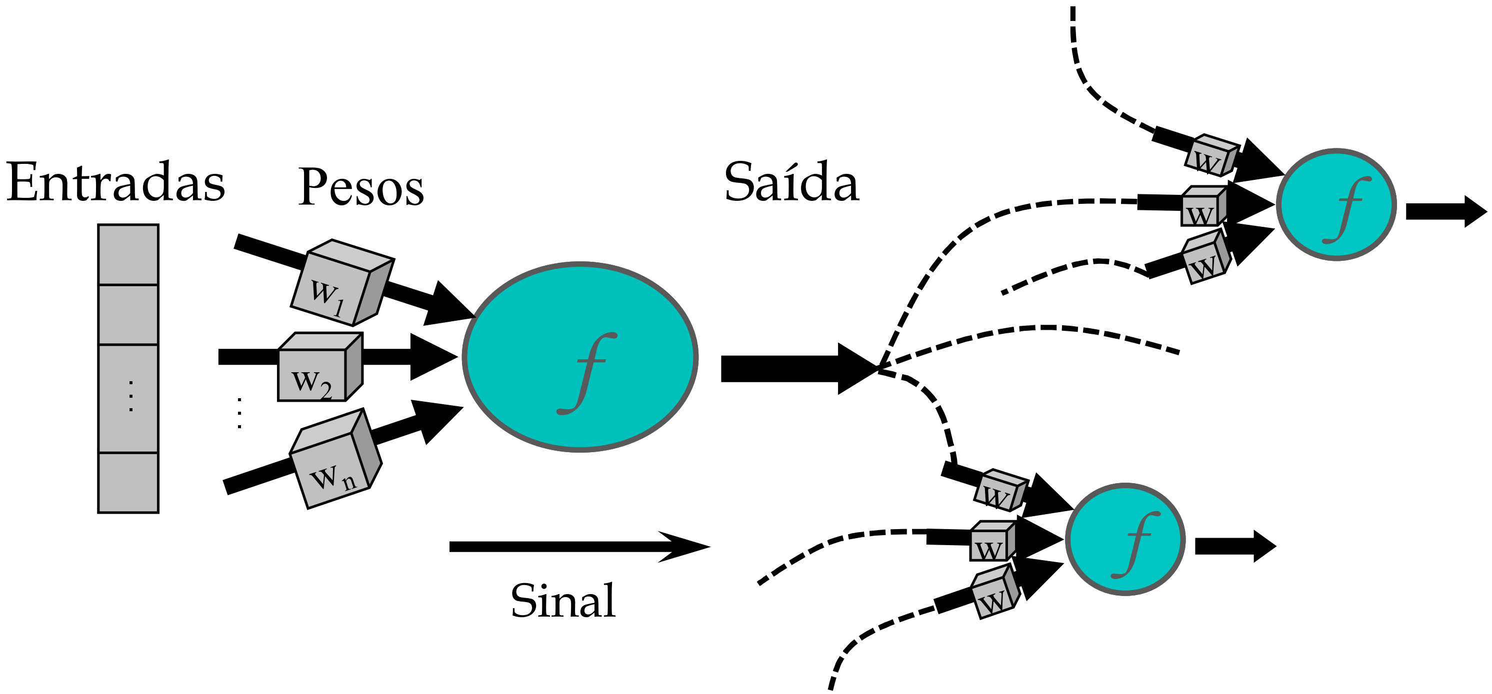
Redes Neurais

- Um neurônio simplificado:



Neurônio artificial

- Modelo de um neurônio abstrato



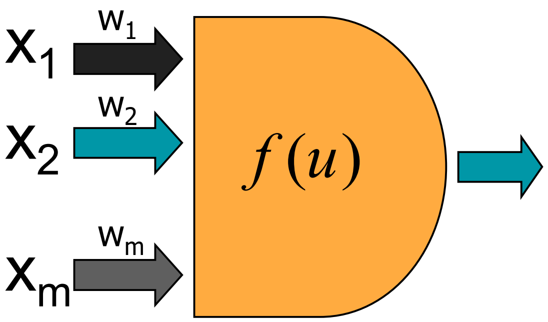
Conceitos básicos

- Principais aspectos das RNA
  - Arquitetura
    - Unidades de processamento (neurônios)
    - Conexões (sinapses)
    - Topologia
  - Aprendizado
    - Algoritmos
    - Paradigmas

Unidades de processamento

- Funcionamento
  - Recebem entradas de conjunto de unidades A
  - Aplicam função de ativação sobre entradas
  - Enviam resultado para saída ou conjunto de unidades B
- Entrada total

$$u = \sum_{i=1}^{m} x_i w_i$$

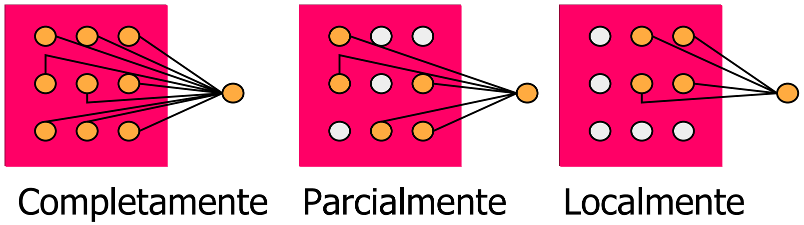


Conexões

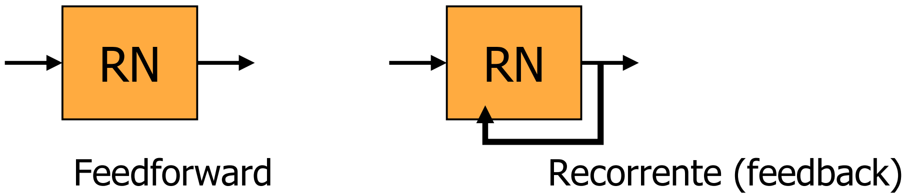
- Definem como neurônios artificiais estão interligados
- Codificam conhecimento da rede
- Tipos de conexões:
    - Excitatória: ($w_{ik}(t) > 0$)
    - Inibitória: ($w_{ik}(t) < 0$)
- Número de conexões de um neurônio
    - *Fan-in*
    - *Fan-out*

Topologia

- Número de camadas
- Cobertura das conexões



- Arranjo das conexões



Algoritmos de aprendizado

- Conjunto de regras que define como ajustar os parâmetros da rede
- Principais formas de ajuste
    - Correção de erro
    - Hebbiano
    - Competitivo
    - Termodinâmico (Boltzmann)
- Diferem na maneira como os pesossão ajustados

Paradigmas de aprendizado

- Definidos pelas informações externas que a rede recebe durante seu aprendizado
    - Principais abordagens
        - Supervisionado
        - Não supervisionado
            - Semi-supervisionado
            - Aprendizado ativo
        - Reforço
        - Híbrido

História das Redes Neurais

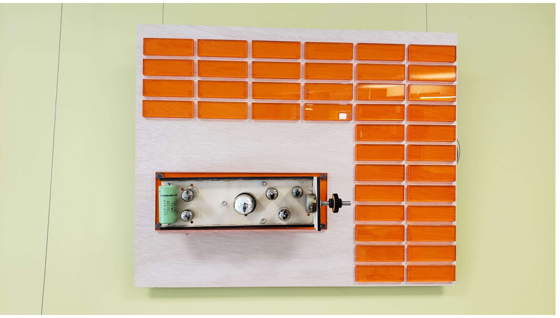
- 300 A. C.: Aristóteles escreveu: *de todos os animais, o homem, proporcionalmente, tem o maior cérebro*
- 1700 D.C.: Descartes acreditava que mente e cérebro eram entidades separadas
- 1911: Ramon y Cajal introduz a idéia de neurônios como estruturas básicas do cérebro
  - Considerado o pai da neurociência moderna
- 1943: McCulloch & Pitts desenvolvem modelo matemático de RNAs
- 1949: Hebb desenvolve algoritmo para treinar RNA (aprendizado Hebbiano)
  - Se dois neurônios estão simultaneamente ativos, a conexão entre eles deve ser reforçada

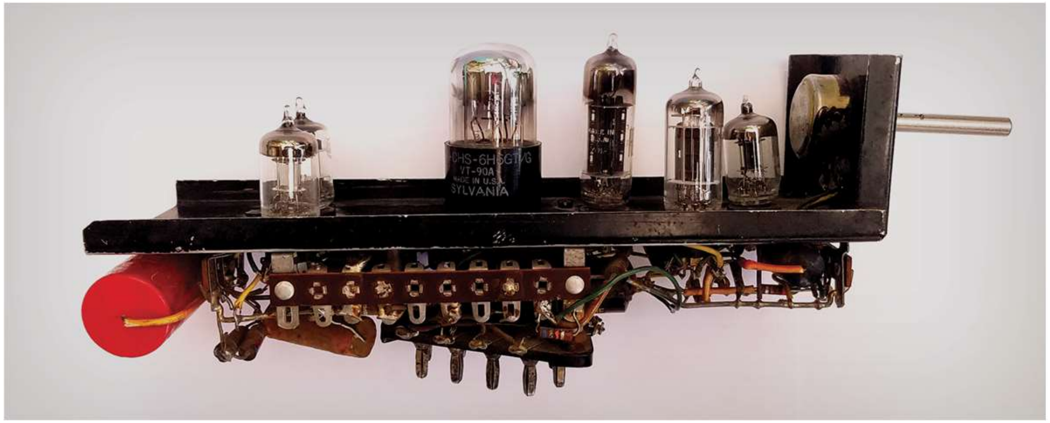
História das Redes Neurais

- 1951: Marvin Minsky and Dean Edmonds constoem a primeira máquina que implementa uma rede neural (Princeton/Harvard)
    - SNARC (Stochastic neural analog reinforcement calculator)
- 1957: Rosenblatt implementa primeira RNA a ser usada na prática, a rede Perceptron
- 1958: Von Neumann mostra interesse na modelagem do cérebro
    - The Computer and the Brain, Yale University Press
- 1969: Minsky & Papert publicam livro mostrando limitações da rede Perceptron
- 1982: Hopfield mostra que Redes Neurais podem ser tratadas como sistemas dinâmicos

SNARC

- ***S***tochastic ***N***eural ***A***nalog ***R***einforcement ***C***alculator
  - Implementada por Marvin Minsky e Dean Edmonds em 1951
  - Primeira implementação de uma rede neural
  - Testada para sair de um labirinto



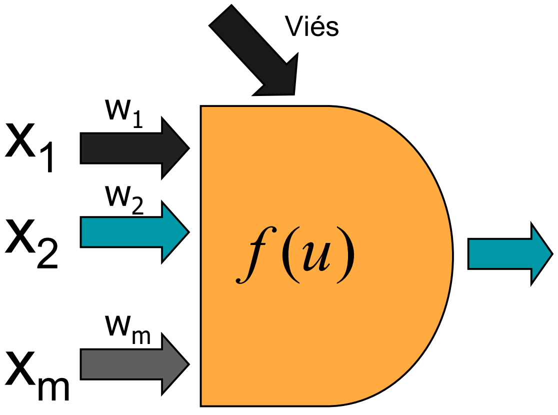


SNARC

- Rede Neural baseada em componentes analógicos e eletromecânicos
- Possuia 40 neurônios conectados em rede
  - Cada neurônio usava:
    - Um capacitor: para memória de curto prazo
      - Componente que armazena energia elétrica
    - Um potenciômetro, para memória de longo prazo
      - Funcionavam como pesos associados às conexões de entrada dos neurônios artificiais
  - Treinada por algoritmo de aprendizado por reforço

Rede Perceptron

- Proposta por Rosemblat, 1957
  - Modelo de neurônio de McCulloch-Pitts
- Treinamento
  - Supervisionado
  - Correção de erro
    - $w_i(t) = w_i(t-1) + \Delta w_i$
      - $\Delta w_i = \eta x_i \delta$
      - $\Delta w_i = \eta x_i (y - f(\mu))$
- Teorema de convergência



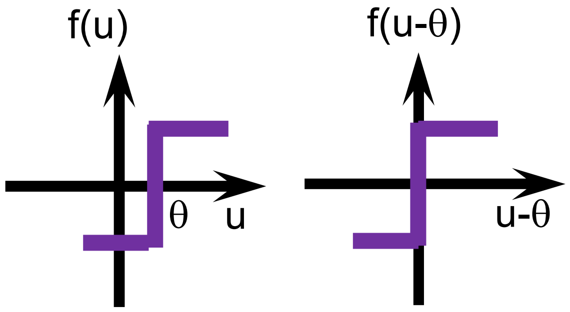
Rede Perceptron

- Resposta / saída da rede
    - Aplica função de ativação limiar sobre soma total de entrada recebida por um neurônio

$$u = \sum_{i=1}^{m} x_i w_i$$

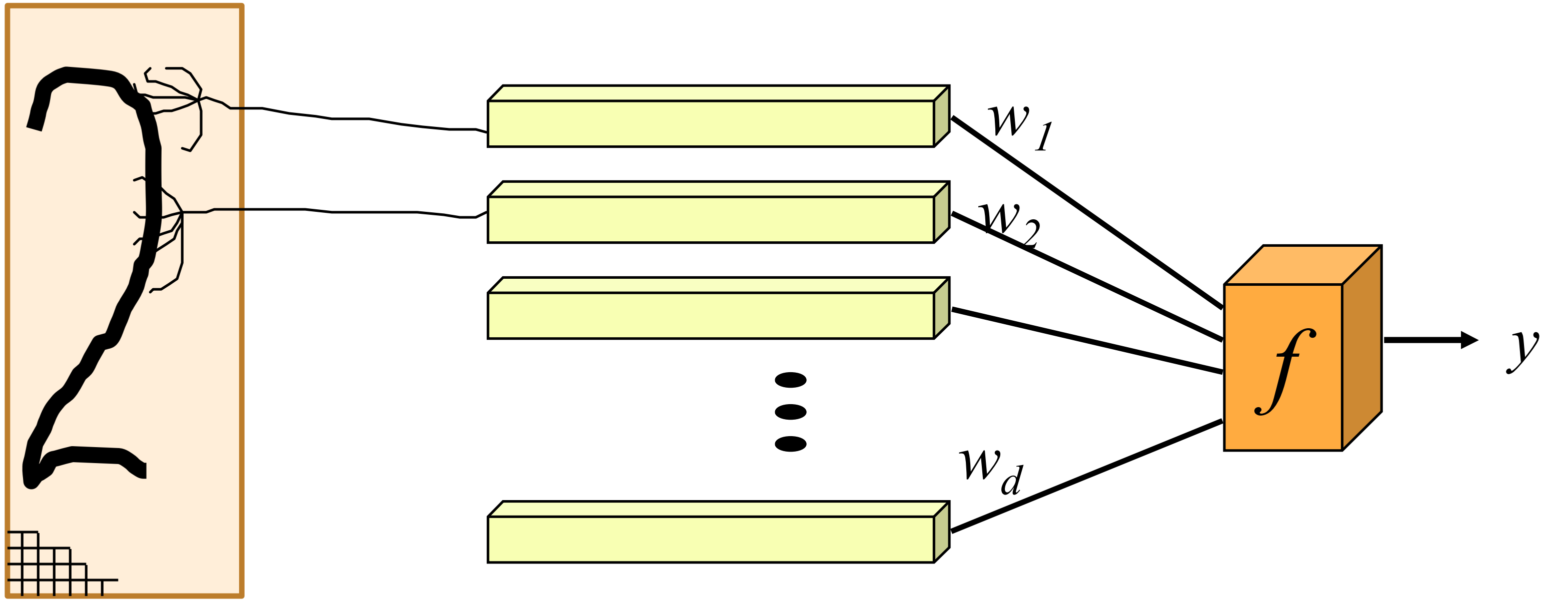
$$f(u) = \begin{cases} +1 \text{ if } u \geq \theta \\ -1 \text{ if } u < \theta \end{cases}$$

$$net = \sum_{i=0}^{m} x_i w_i$$



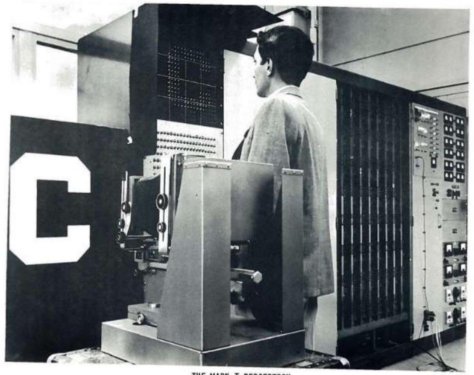
f(u-θ) = sinal (u-θ)
f(net) = f(u-θ)

Rede Perceptron

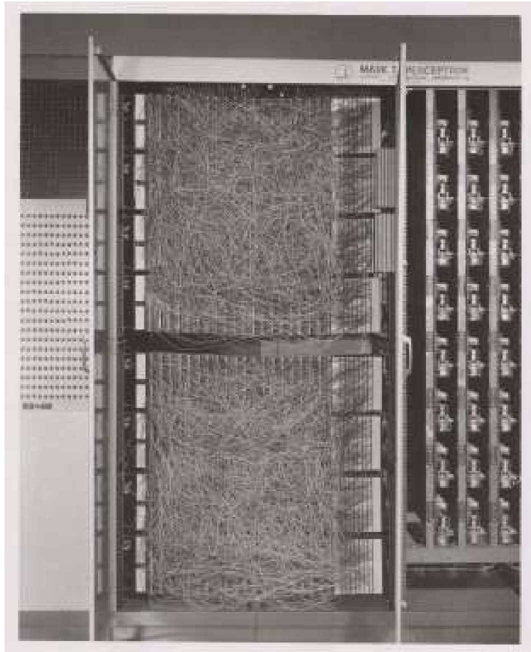


Rede Perceptron

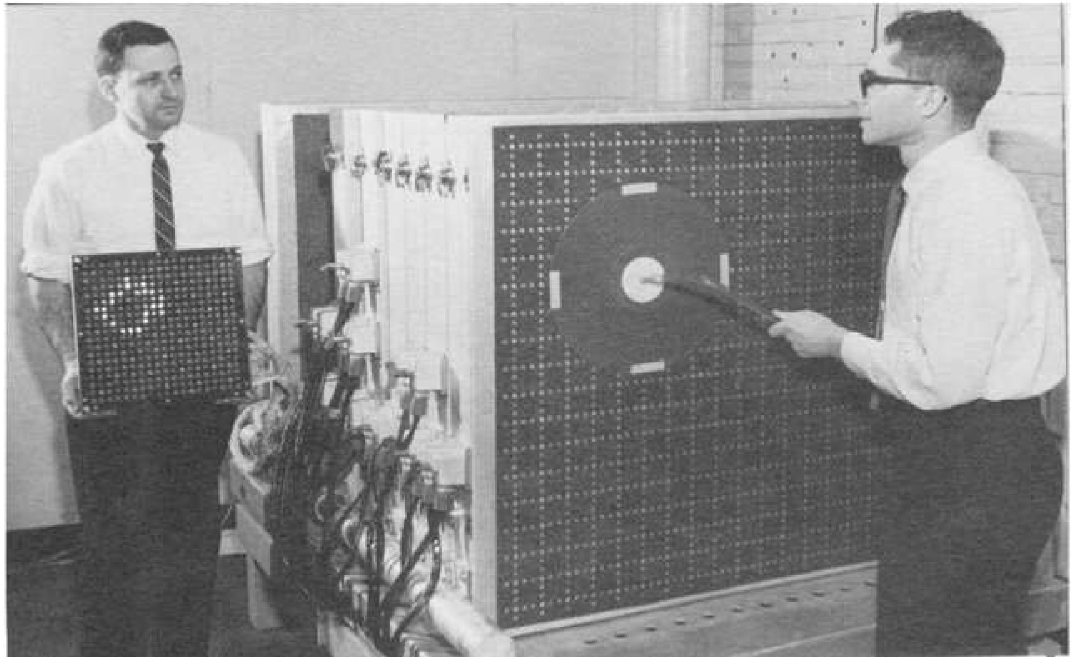
- Primeira implementação:
  - Mark I Perceptron
  - Cornell Aeronautical Laboratory



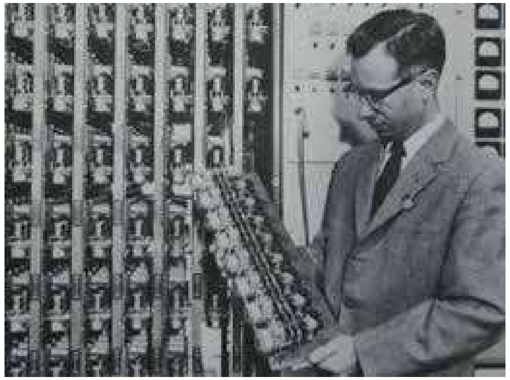
THE MARK I PERCEPTRON

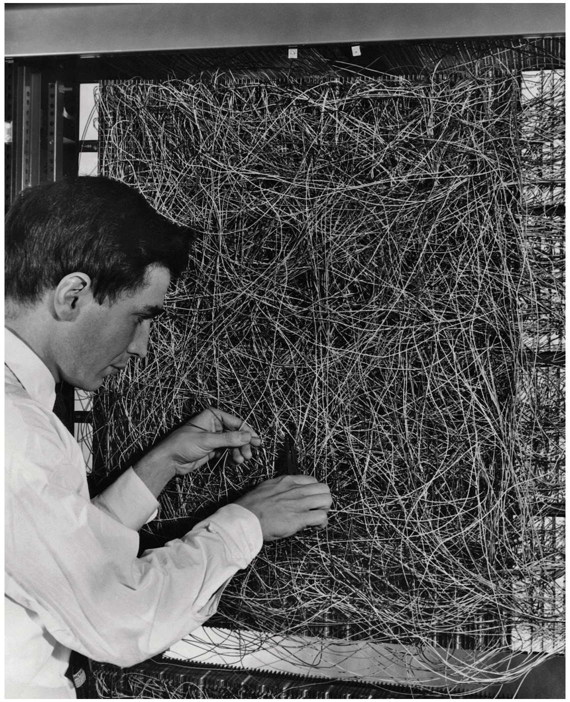


Começando a implementação

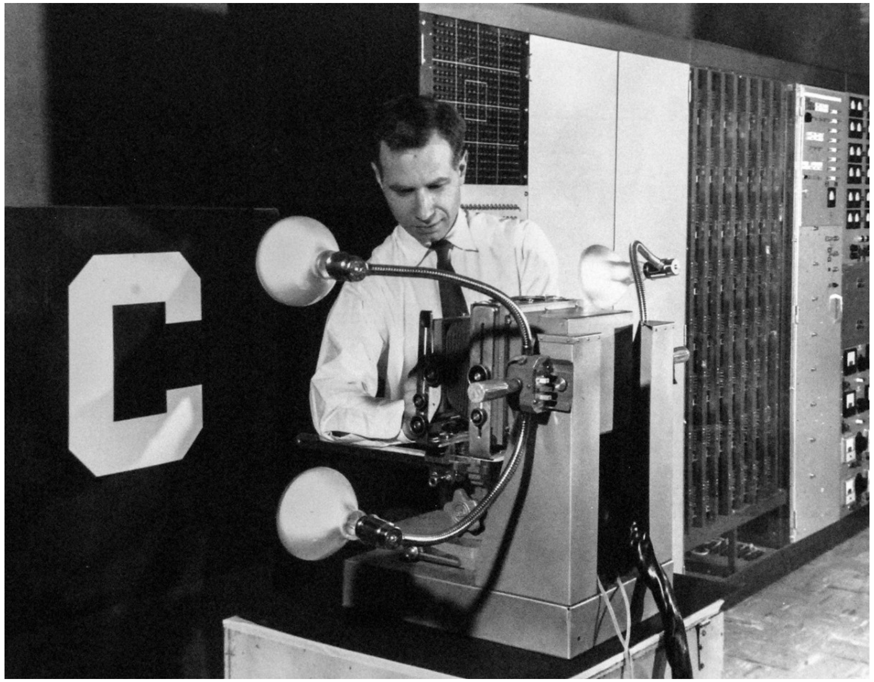


Preparando a rede Perceptron

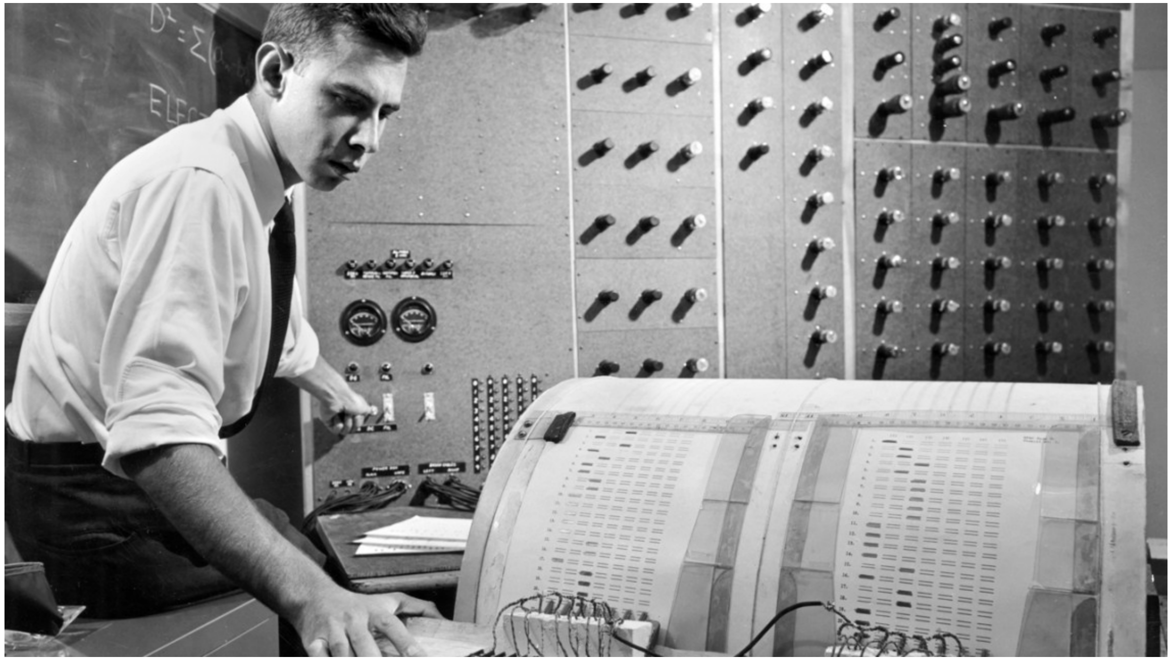




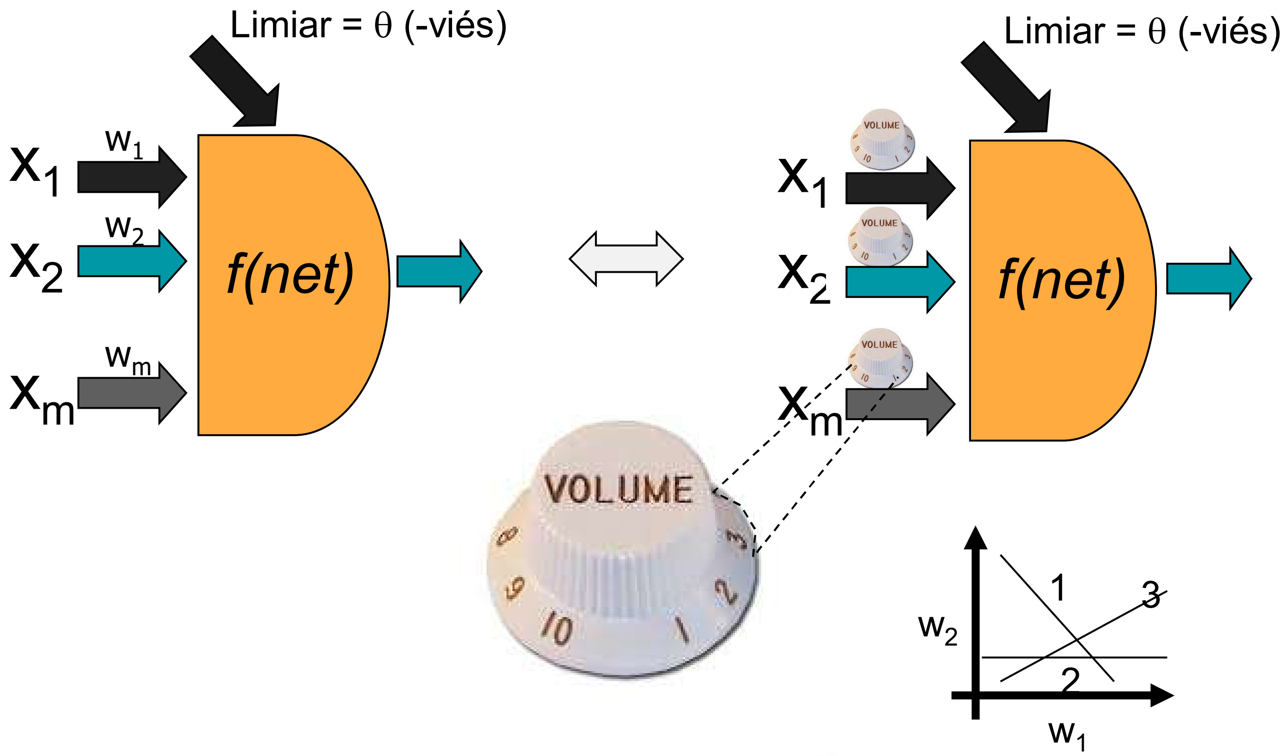
Finalizando a rede Perceptron



Perceptron funcionando



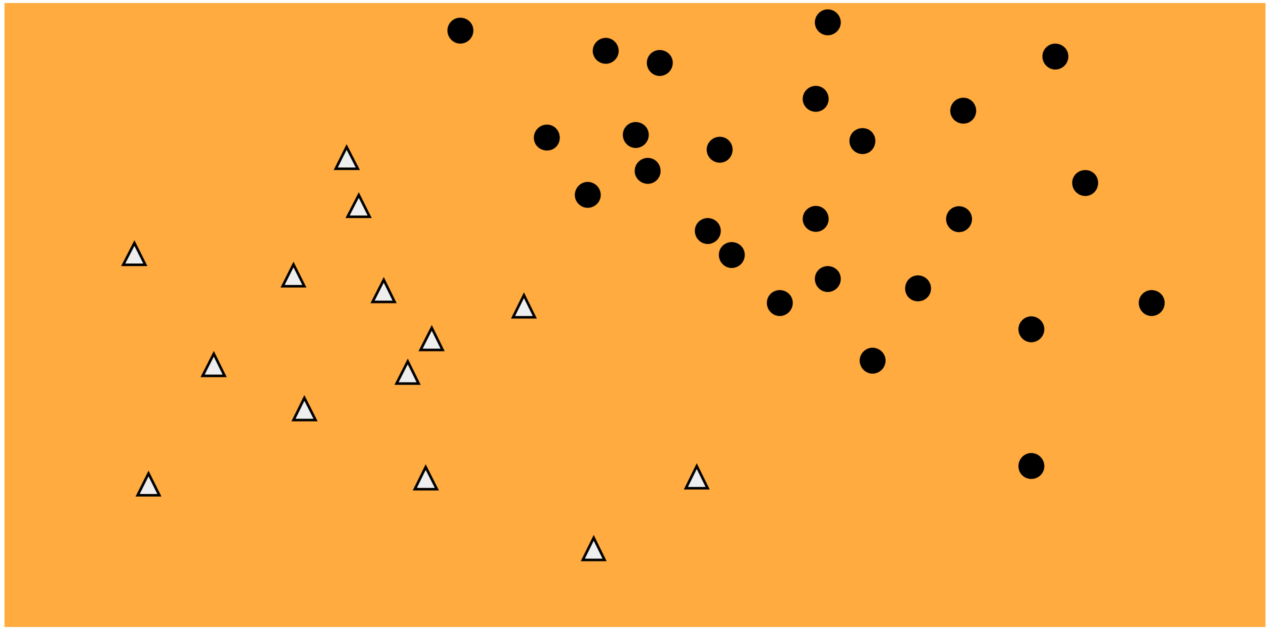
Treinamento



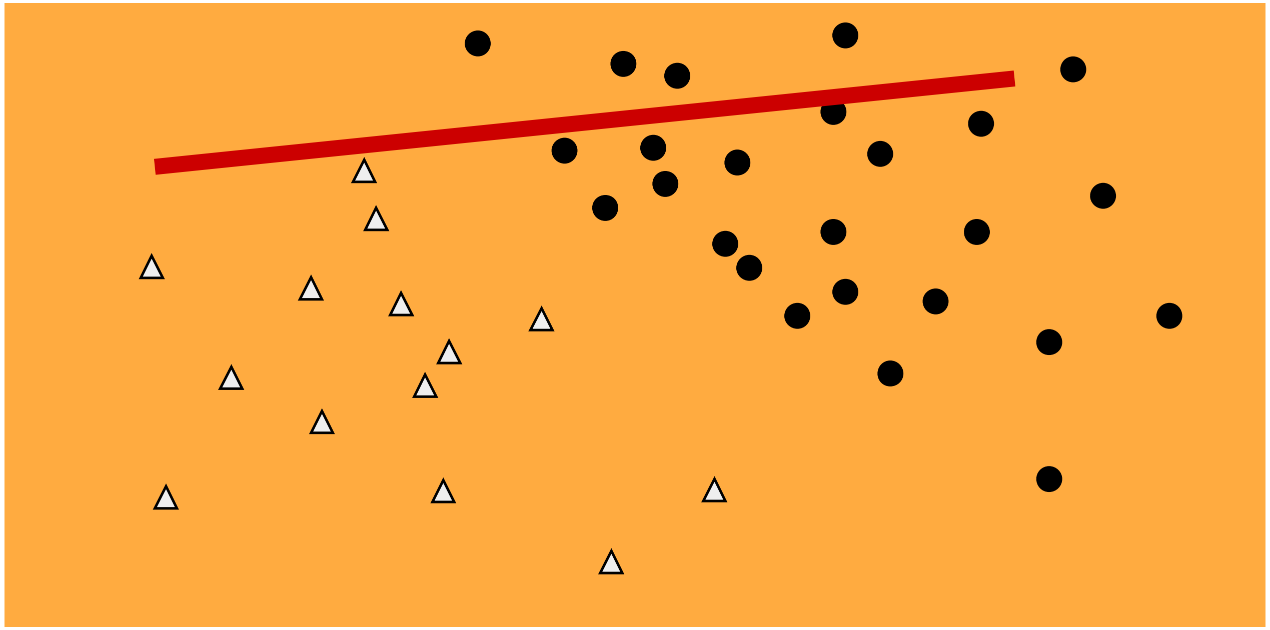
Algoritmo de treinamento

1 Iniciar peso de cada conexão com o valor 0
2 Repita
    Para cada par de treinamento (X, y)
        Calcular a saída f(X)
        Se (y ≠ f(X))
        Então
            Atualizar pesos do neurônio
Até condição de parada

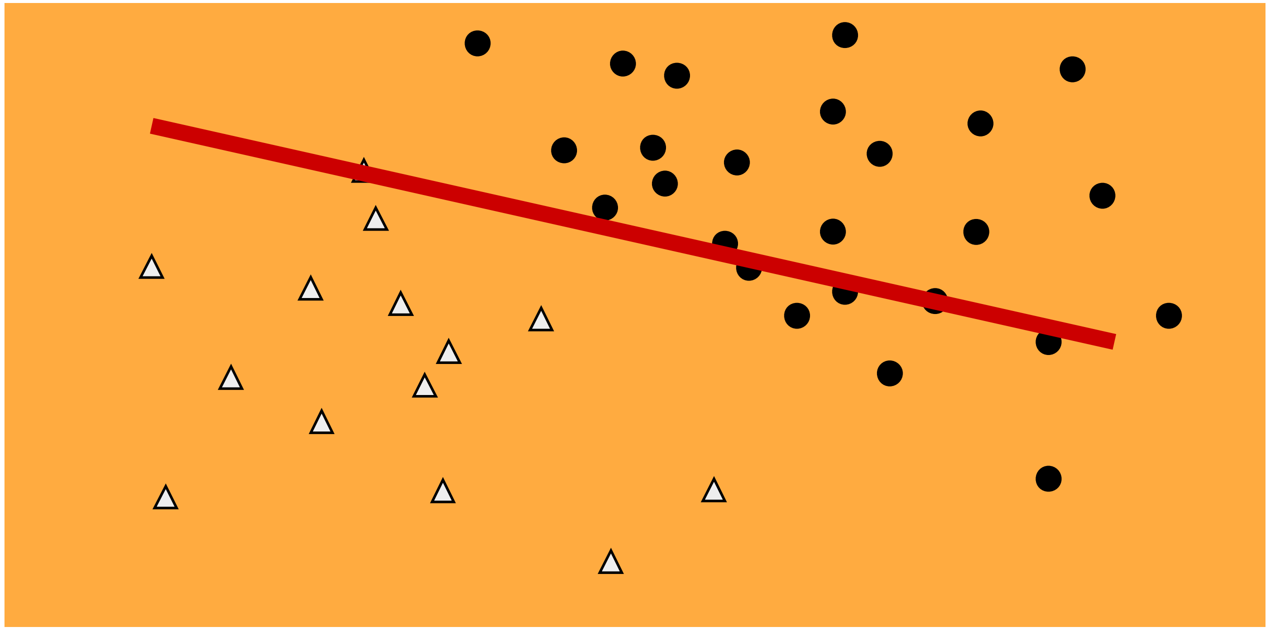
Treinamento modificando fronteiras



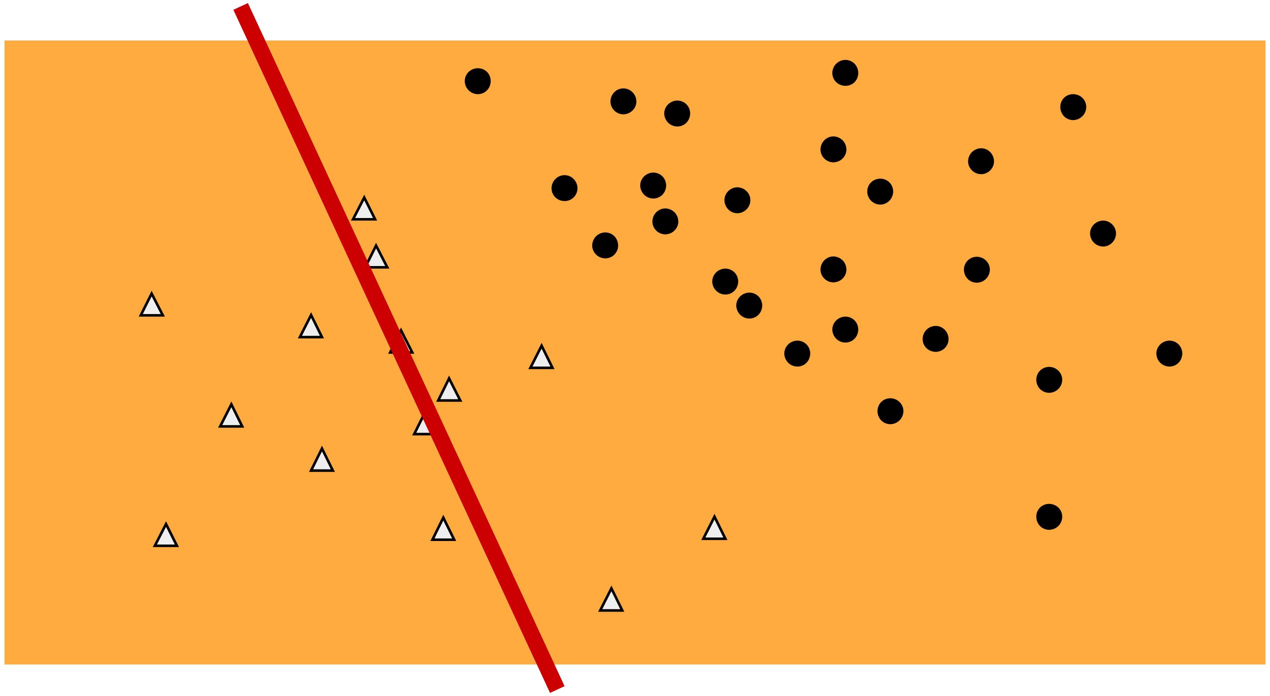
Treinamento modificando fronteiras



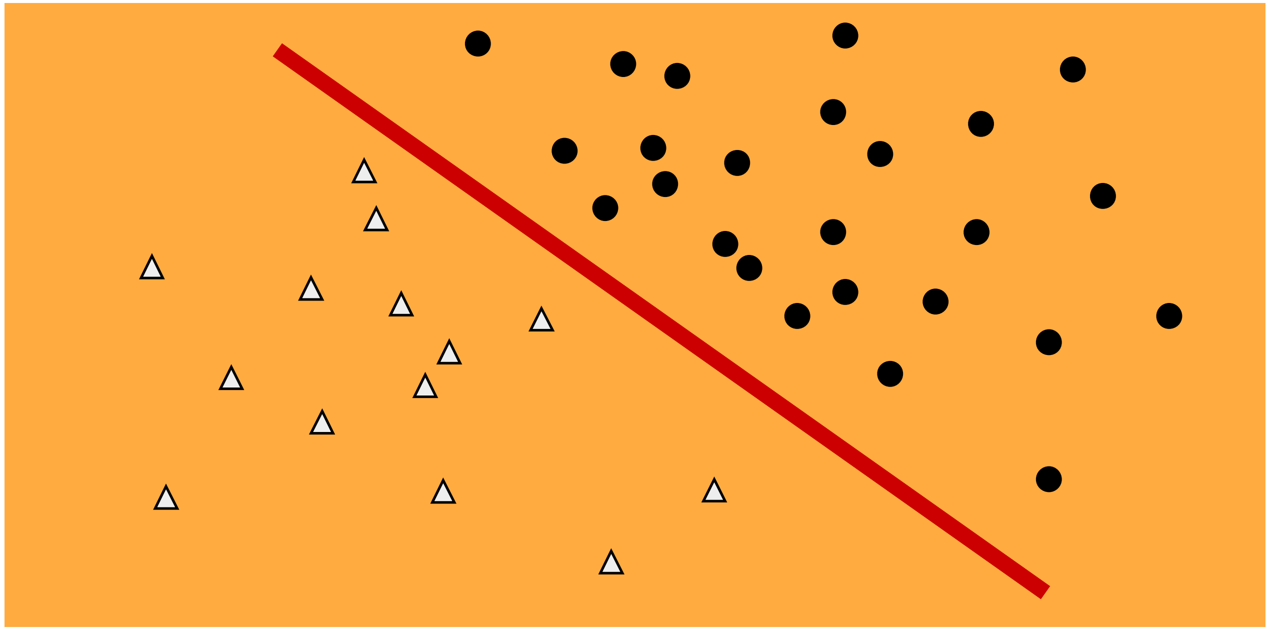
Treinamento modificando fronteiras



Treinamento modificando fronteiras



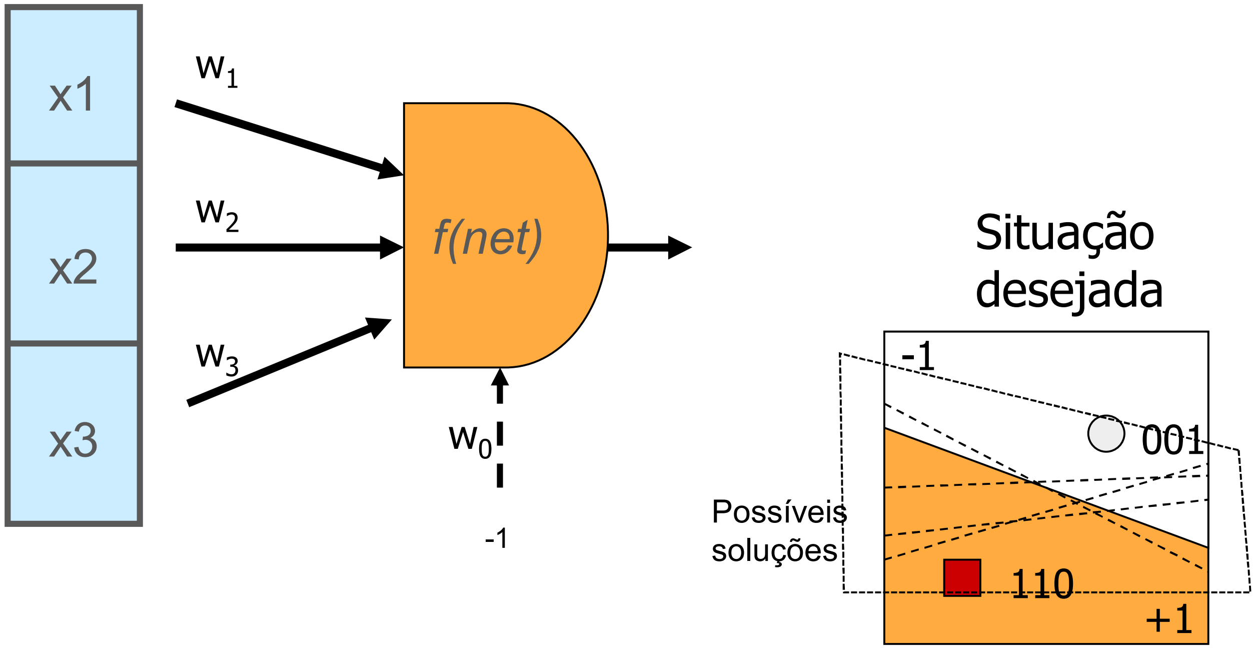
Treinamento modificando fronteiras



Exemplo

- Dada uma rede Perceptron com:
  - Três entradas, pesos $w_1 = 0.4$, $w_2 = -0.6$ e $w_3 = 0.6$, e limiar $\theta = 0.5$:
    - Ensinar a rede com os exemplos (001, -1) e (110, +1)
  - Utilizar taxa de aprendizado $\eta = 0.4$
    - Predizer a classe dos exemplos: 111, 000, 100 e 011

Exemplo


x1
x2
x3
w1
w2
w3
f(net)
w0
-1
Situação
desejada
-1
001
Possíveis
soluções
110
+1

Exemplo

- Treinar a rede $x_0, w_0\ (\theta), w_1, w_2, w_3, \eta = -1, 0.5, 0.4, -0.6, 0.6, 0.4$

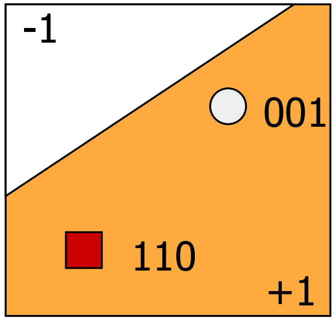
1) Para o exemplo 001 (y = -1)

Passo 1: definir a saída da rede (Σxw)

$$u-\theta = -1(0.5) + 0(0.4) + 0(-0.6) + 1(0.6) = 0.1$$

$$f(net) = +1 \text{ (uma vez que } 0.1 \geq 0)$$

Passo 2: atualizar pesos ($y \neq f(net)$)



$$w_0 = 0.5 + 0.4(-1)(-1 - (+1)) = 1.3$$

$$w_1 = 0.4 + 0.4(0)(-1 - (+1)) = 0.4$$

$$w_2 = -0.6 + 0.4(0)(-1 - (+1)) = -0.6$$

$$w_3 = 0.6 + 0.4(1)(-1 - (+1)) = -0.2$$

Exemplo

- Treinar a rede x_0, w_0 (θ), w_1, w_2, w_3, η = -1, 1.3, 0.4, -0.6, -0.2, 0.4

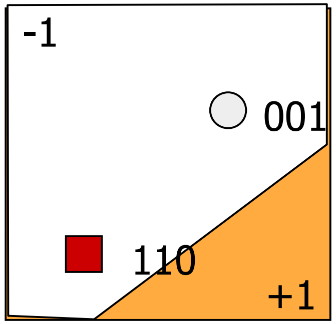
2) Para o exemplo 110 (y = +1)

Passo 1: definir a saída da rede

$u\text{-}\theta = -1(1.3) + 1(0.4) + 1(-0.6) + 0(-0.2) = -1.5$

$f(net) = -1$ (uma vez que $-1.5 < 0$)

Passo 2: atualizar pesos ($y \neq f(net)$)



$w_0 = 1.3 + 0.4(-1)(1 - (-1)) = 0.5$

$w_1 = 0.4 + 0.4(1)(1 - (-1)) = 1.2$

$w_2 = -0.6 + 0.4(1)(1 - (-1)) = 0.2$

$w_3 = -0.2 + 0.4(0)(1 - (-1)) = -0.2$

Exemplo

- Treinar a rede x_0, w_0 (θ), w_1, w_2, w_3, η = -1, 0.5, 1.2, 0.2, -0.2, 0.4

3) Para o exemplo 001 (y = -1)

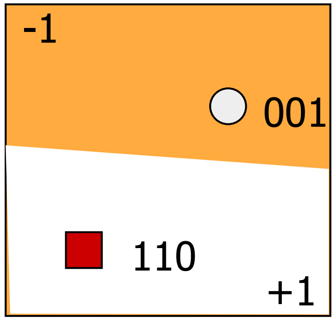
Passo 1: definir a saída da rede

$u - \theta = -1(0.5) + 0(1.2) + 0(0.2) + 1(-0.2) = -0.7$

$f(net) = -1$ (uma vez que $-0.7 < 0$)

Passo 2: atualizar pesos (y = f(net))

Como y = f(net), os pesos não precisam ser modificados



Exemplo

- Treinar a rede x_0, w_0 (θ), w_1, w_2, w_3, η = -1, 0.5, 1.2, 0.2, -0.2, 0.4

4) Para o exemplo 110 (y = +1)

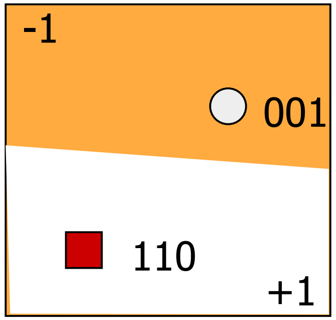
Passo 1: definir a saída da rede

$u\text{-}\theta = -1(0.5) + 1(1.2) + 1(0.2) + 0(-0.2) = +0.7$

$f(net) = +1$ (uma vez $0.7 \geq 0$)

Passo 2: atualizar pesos (y = f(net))

Como y = f(net), os pesos não precisam ser modificados



Exemplo

- Utilizar a rede treinada para classificar os exemplos 111, 000, 100 e 011
  - Pesos aprendidos: 0.5, 1.2, 0.2, -0.2

b.1) Para o exemplo 111

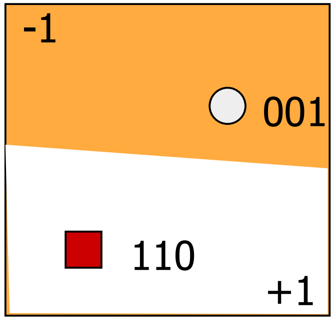
$u-\theta = -1(0.5) + 1(1.2) + 1(0.2) + 1(-0.2) = 0.7$

f(net) = +1 (porque $0.7 \geq 0$)) $\Rightarrow$ classe +1

b.2) Para o exemplo 000

$u-\theta = -1(0.5) + 0(1.2) + 0(0.2) + 0(-0.2) = -0.5$

f(net) = -1 (porque $-0.5 < 0$) $\Rightarrow$ classe -1



Exemplo

- Utilizar a rede treinada para classificar os exemplos 111, 000, 100 e 011
  - Pesos aprendidos: 0.5, 1.2, 0.2, -0.2

b.1) Para o exemplo 100

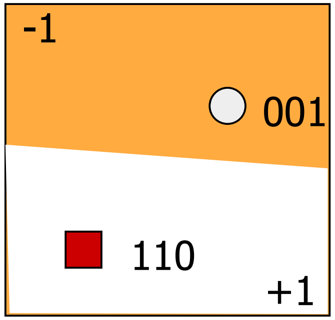
$u\text{-}\theta = -1(0.5) + 1(1.2) + 0(0.2) + 0(-0.2) = 0.7$

$f(net) = +1$ (porque $0.7 \geq 0$)) $\Rightarrow$ classe +1

b.2) Para o exemplo 011

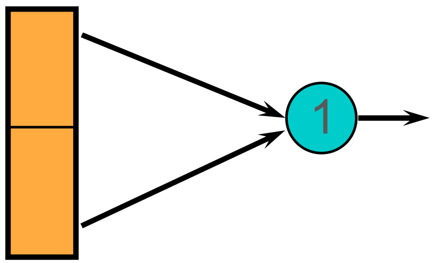
$u\text{-}\theta = -1(0.5) + 0(1.2) + 1(0.2) + 1(-0.2) = -0.5$

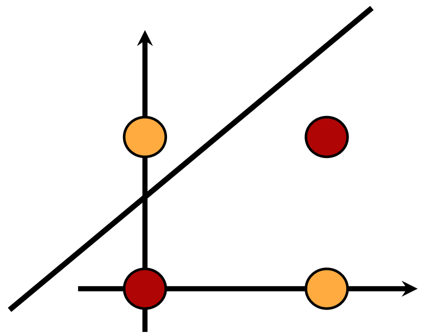
$f(net) = -1$ (porque $-0.5 < 0$) $\Rightarrow$ classe -1



Problema da rede Perceptron

$$0, 0 \rightarrow 0$$
$$0, 1 \rightarrow 1$$
$$1, 0 \rightarrow 1$$
$$1, 1 \rightarrow 0$$





Rede Adaline

- Problema do Perceptron: ajuste de pesos não leva em conta distância entre saída e resposta desejada
- Rede Adaline
    - Proposta pôr Widrow e Hoff em 1960
    - Utiliza modelo de McCulloch-Pitts como neurônio

Rede Adaline

- Estado de ativação
  - 1 = ativo
  - 0 = inativo
- Função de ativação
  - $a_i(t + 1) = u_i(t)$
- Função de saída = função identidade

Rede Adaline

- Treinamento
  - Supervisionado
  - Correção de erro (regra LMS (delta, Widrow-Hoff)
    - $\Delta w_{ij} = \eta x_i(d_j - y_j)$ (d $\neq$ y)
    - $\Delta w_{ij} = 0$ (d = y)
      - Implícito na primeira equação
    - Reajuste gradual do peso
      - Leva em conta distância entre saída e resposta desejada

Algoritmo de treinamento

1 Iniciar peso de cada conexão com o valor 0
2 Repita
    Para cada par de treinamento (X, y)
        Calcular a saída f(X)
        Se $(y \neq f(X))$
        Então
            Atualizar pesos do neurônio
Até condição de parada

Fase de teste

1 Para cada objeto de teste X faça
    apresentar X a entrada da rede
    calcular a saída y
    se ($y < lim\_inf$)
    então $X \in$ classe 0
    senão se ($y > lim\_sup$)
        então $X \in$ classe 1
        senão indefinido

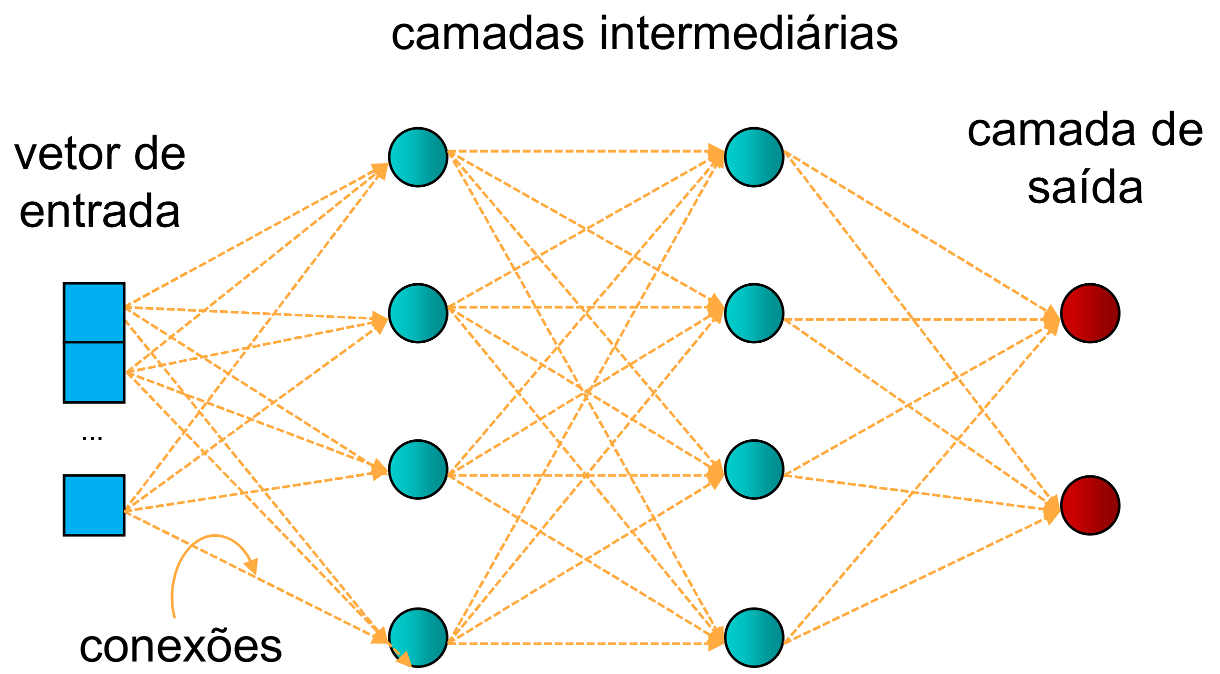
Rede madaline

- Trata algumas funções não linearmente separáveis
- Cada Adaline pode estar associado a uma reta
- Multicamadas
    - Primeira camada
        - Adaptativa
        - Várias redes Adaline
    - Segunda camada
        - Fixa
        - Funções AND ou maioria

Rede Multi-Layer Perceptron (MLP)

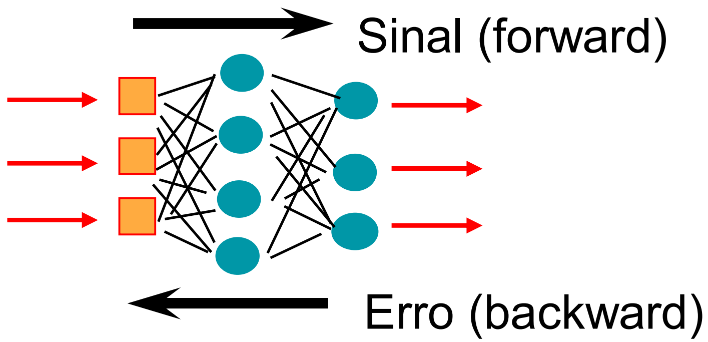
- Arquitetura de RNA mais utilizada
  - Uma ou mais camadas intermediárias de neurônios
- Funcionalidade (teórica)
  - Uma camada intermediária: qualquer função contínua ou Booleana
  - Duas camadas intermediárias: qualquer função
- Originalmente treinada com o algoritmo *backpropagation*

MLP e backpropagation



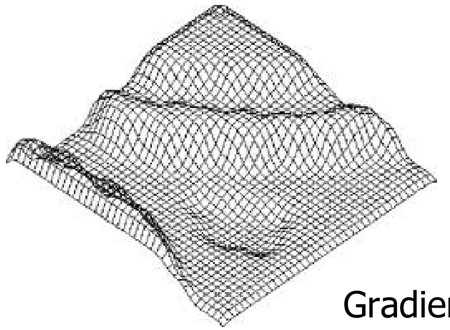
Backpropagation

- Treina a rede com pares entrada-saída
    - Cada vetor de entrada é associado a uma saída desejada
- Treinamento em duas fases, cada uma percorrendo a rede em um sentido
    - Fase forward
    - Fase backward
- Rumelhart, Hinton e Williams (1986)
    - Werbos (1974)



Backpropagation

- Treinamento
  - Supervisionado
  - Ajuste dos pesos: $\Delta w_{ij} = \eta x_i \delta_j$

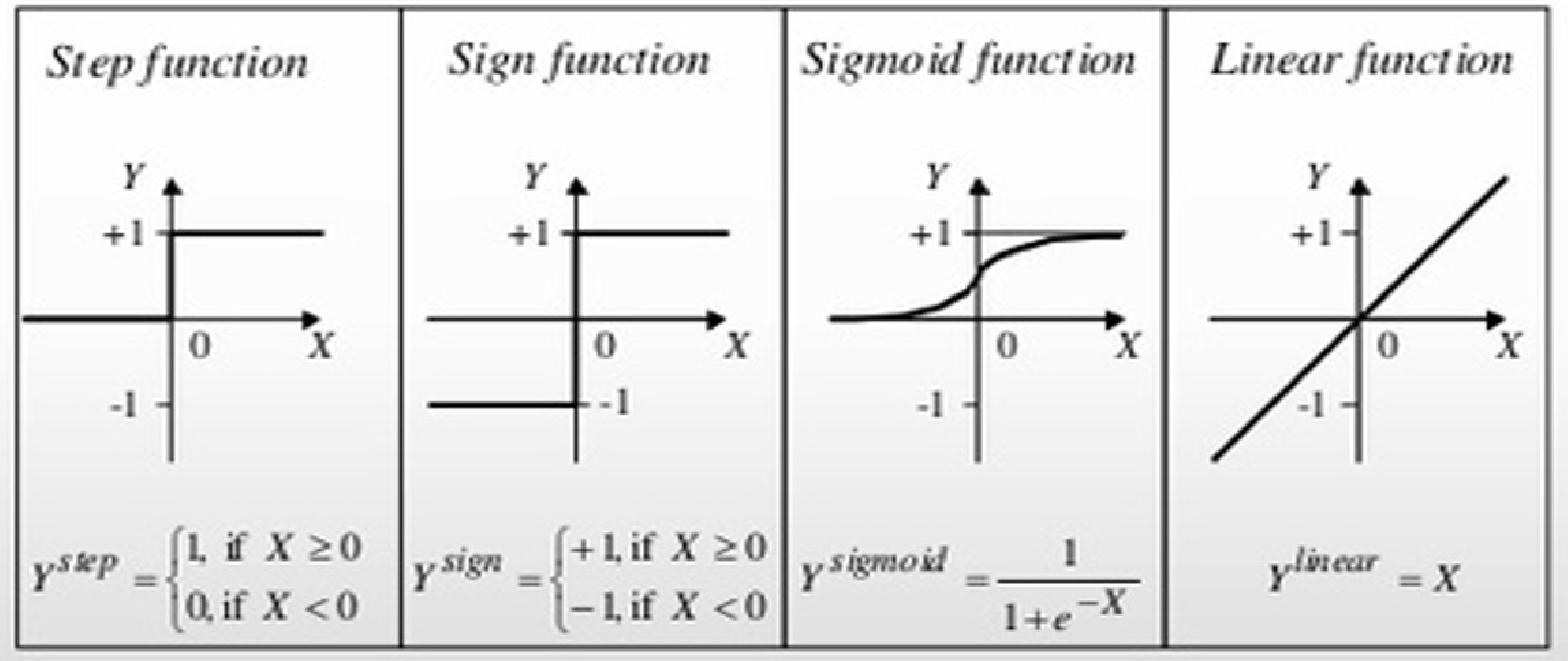

Gradiente da função

$$\delta_j = \begin{cases} f'(net)erro_j & \text{se j for camada de saída} \\ f'(net)\sum w_{jk}\delta_k & \text{se j for camada intemediária} \end{cases}$$

$$erro_j = \frac{1}{2}\sum_{q=1}^{c}(y_q - f(net_q))$$

$$net = \sum_{i=0}^{m} x_i w_i$$

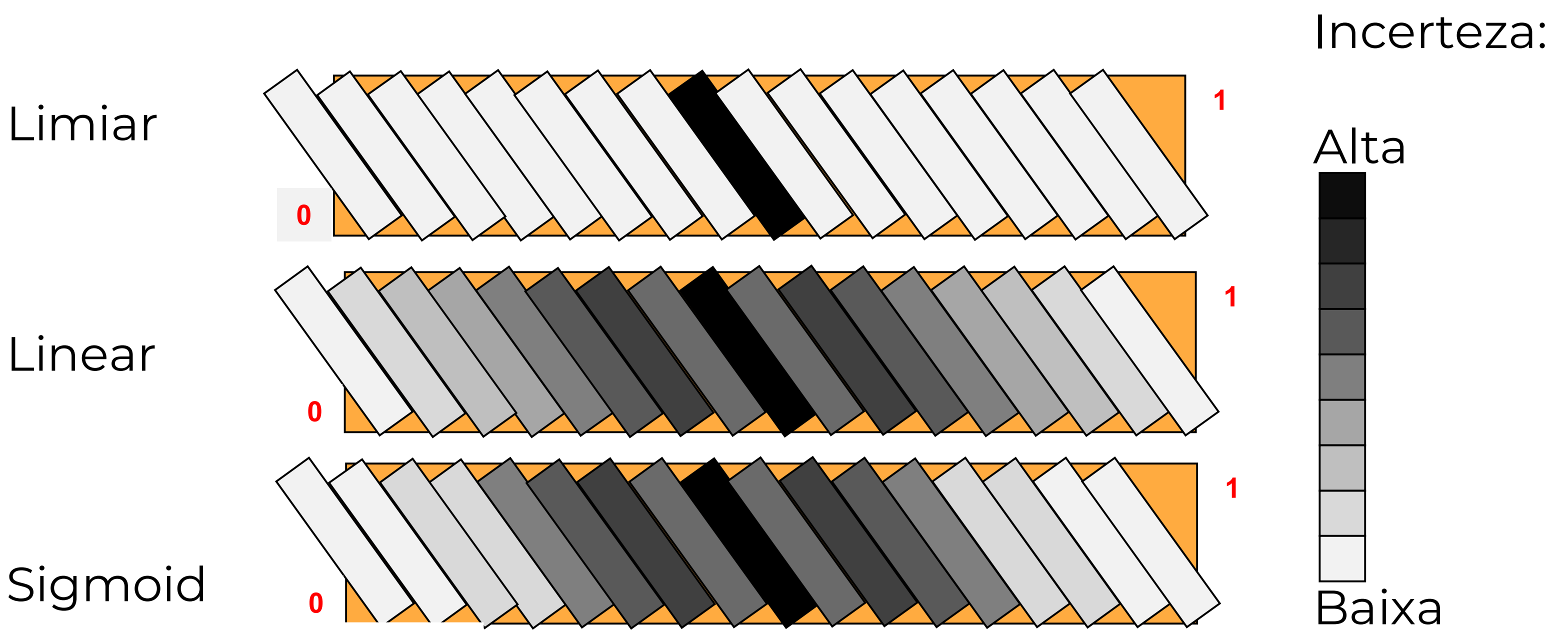
Funções de ativação



Funções de ativação linear

- Redes com função de ativação linear são mais fáceis de treinar
  - Derivada é uma constante
- Generaizam bem, mas não permitem aprender funções complexas
  - Ainda são usadas na camada de saída
  - Usando manipulação de matrizes, é possivel mostrar que rede com várias camadas pode ser reduzida a uma camada
- Funções diferenciávies mais usadas são sigmoide e tangente hiperbólica
  - Até o início dos anos 1990 era a função default, substituída depois pela tanh
    - Mais fácil de treinar e em geral produzia melhores resultados

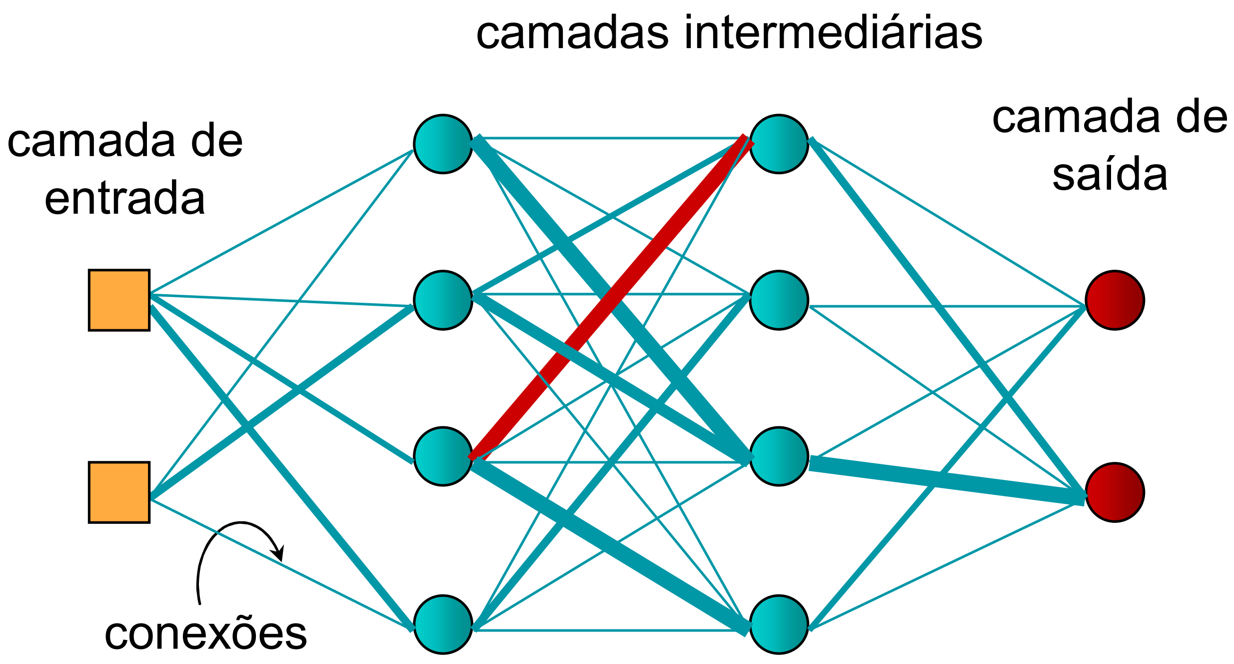
Funções de ativação e fronteiras de decisão



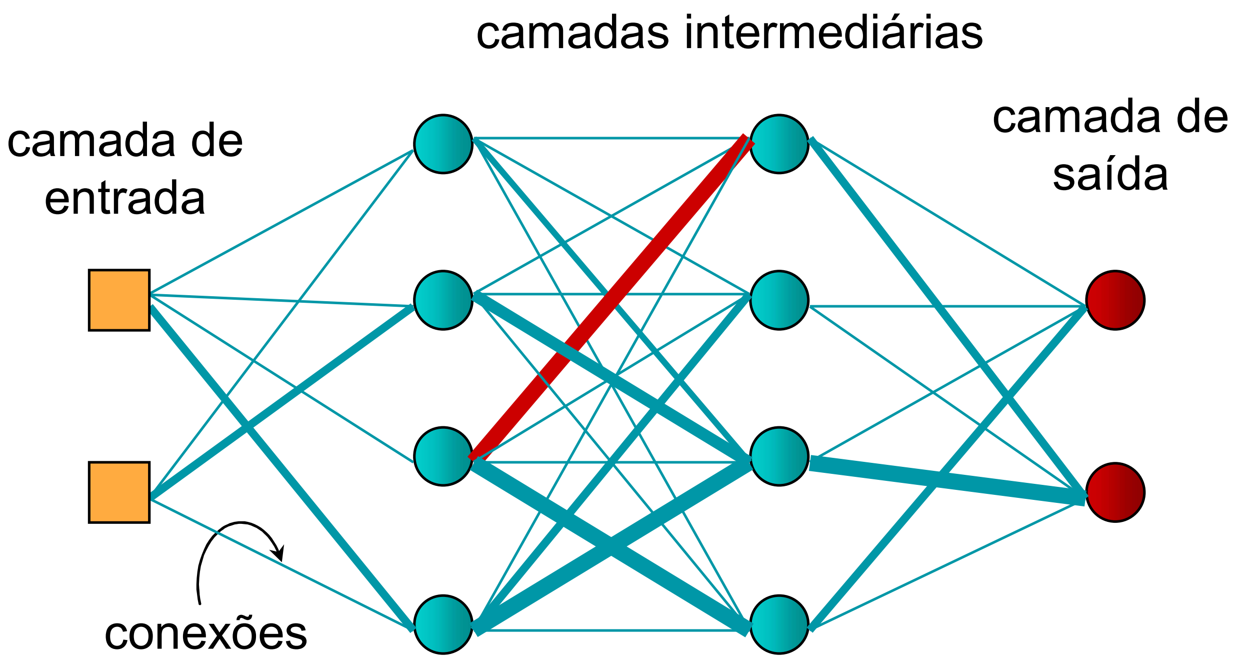
Algoritmo de treinamento

Iniciar todas as conexões com valores aleatórios $\in [a,b]$
Repita
    erro = 0;
    Para cada par de treinamento (X, y)
        Para cada camada k := 1 a N
            Para cada neurônio j := 1 a M_k
                Calcular a saída $f_{kj}(net)$
                Se k= N
                Então Calcular soma dos erros dos neurônios da camada;
                    Se erro > ε
                    Então Para cada camada k := N a 1
                        Para cada neurônio j:= 1 a M_k
                            Atualizar pesos;
Até erro < ε *(ou número máximo de ciclos)*

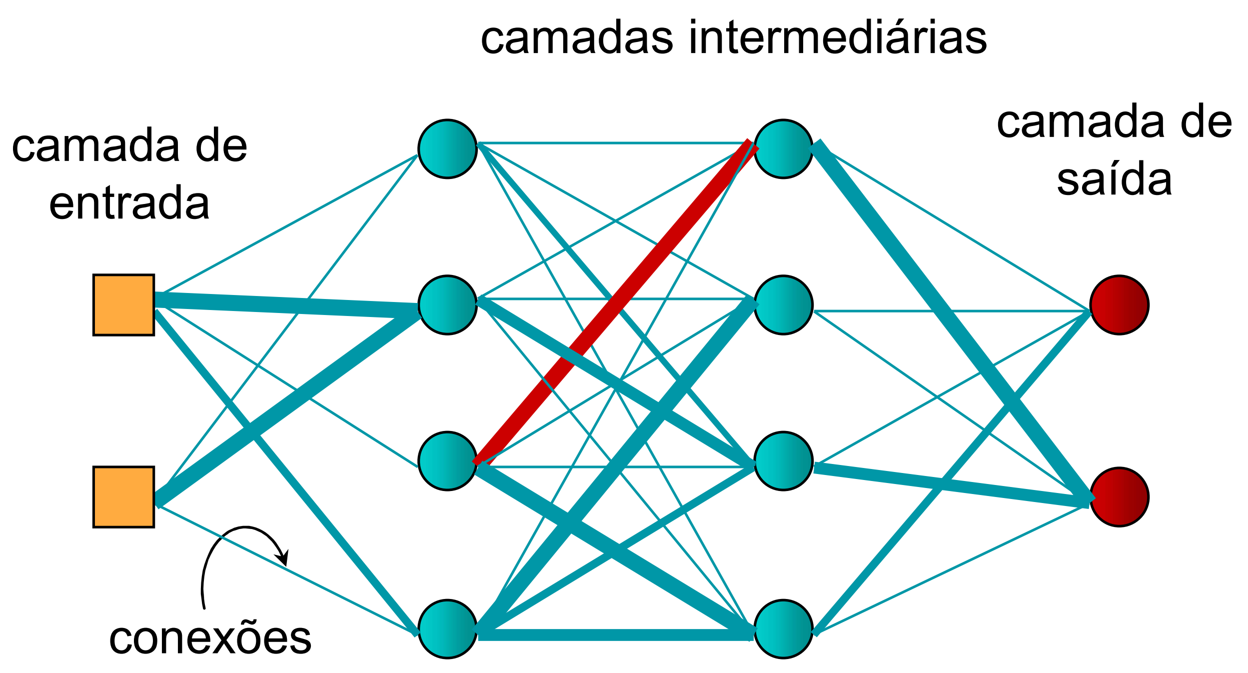
Treinamento modificando pesos



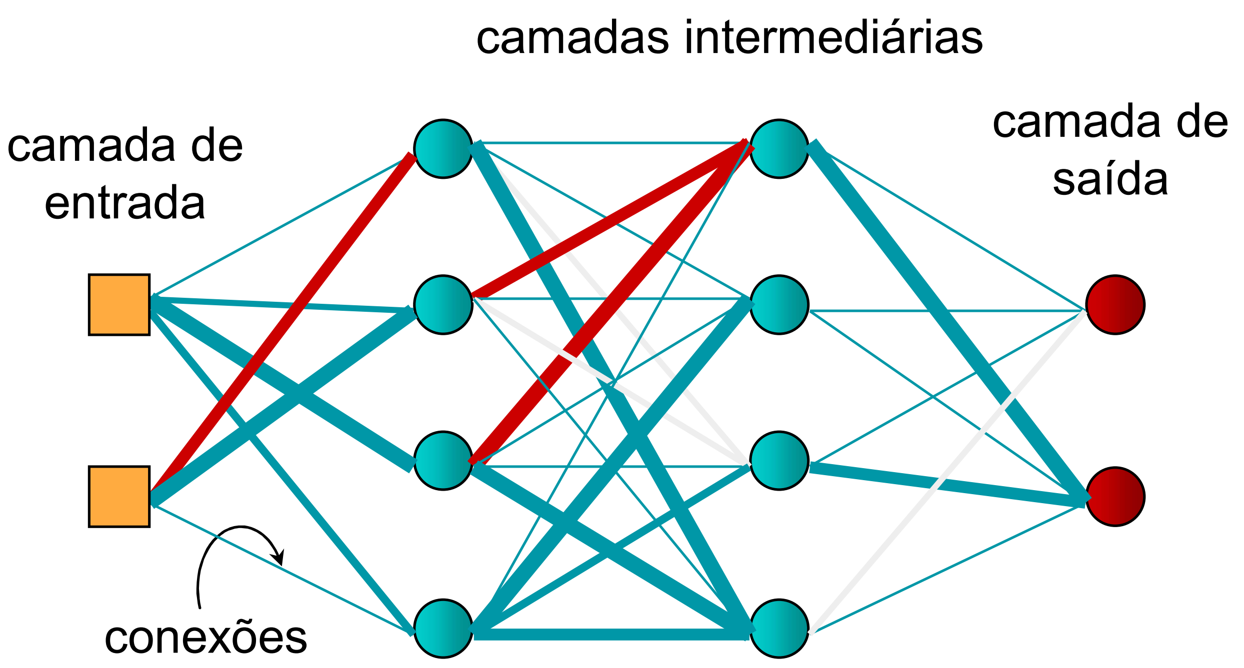
Treinamento modificando pesos



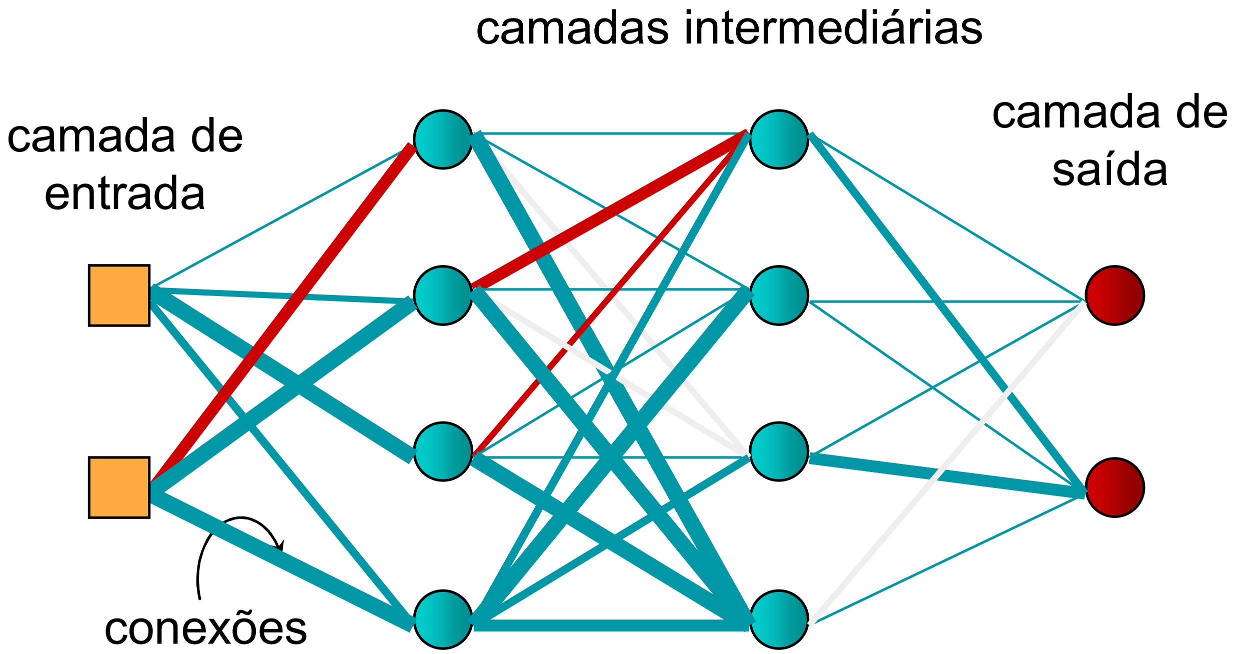
Treinamento modificando pesos



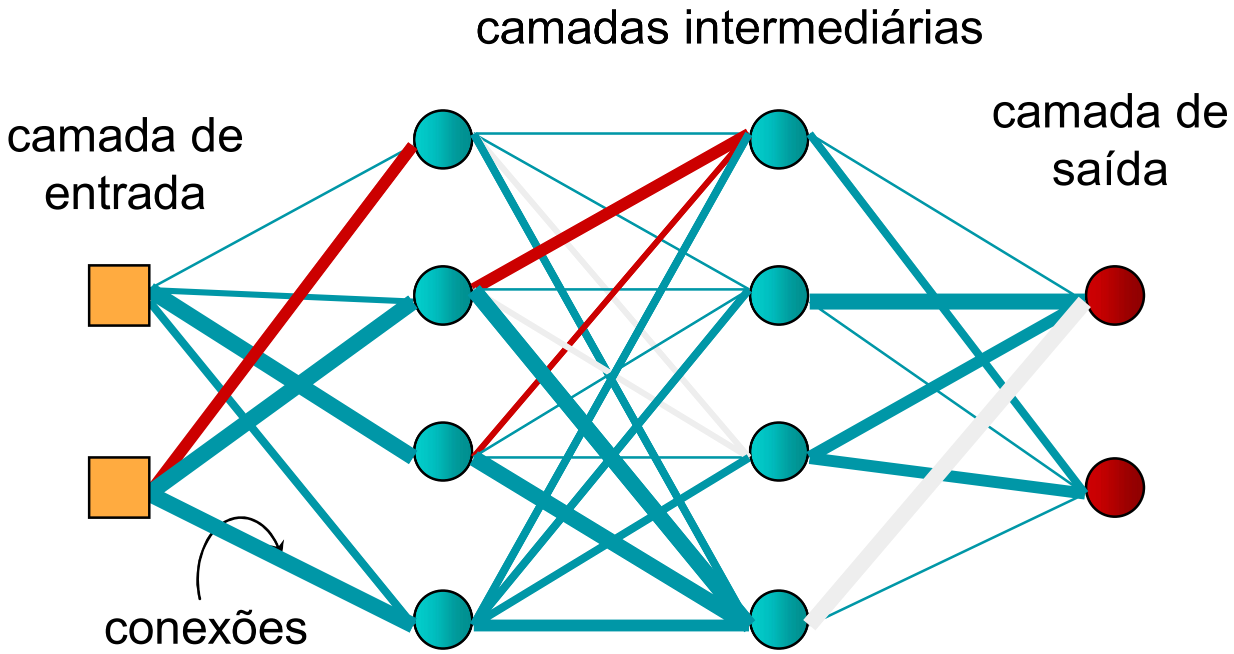
Treinamento modificando pesos



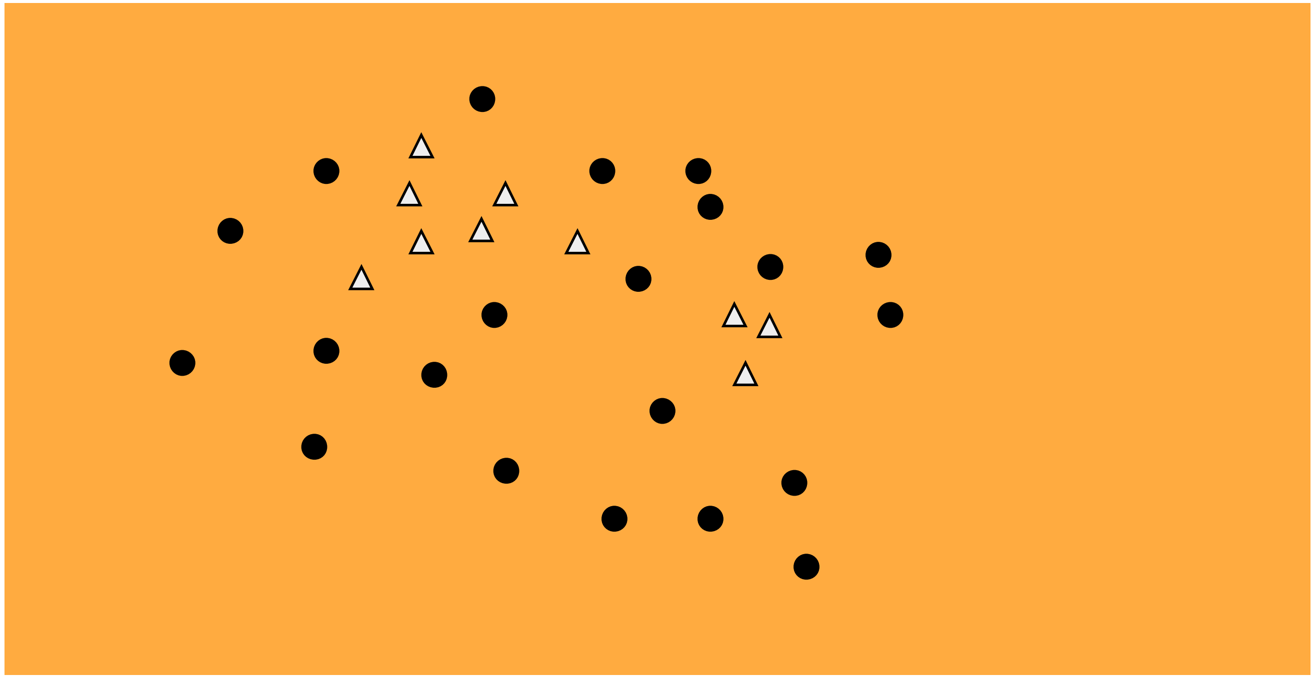
Treinamento modificando pesos



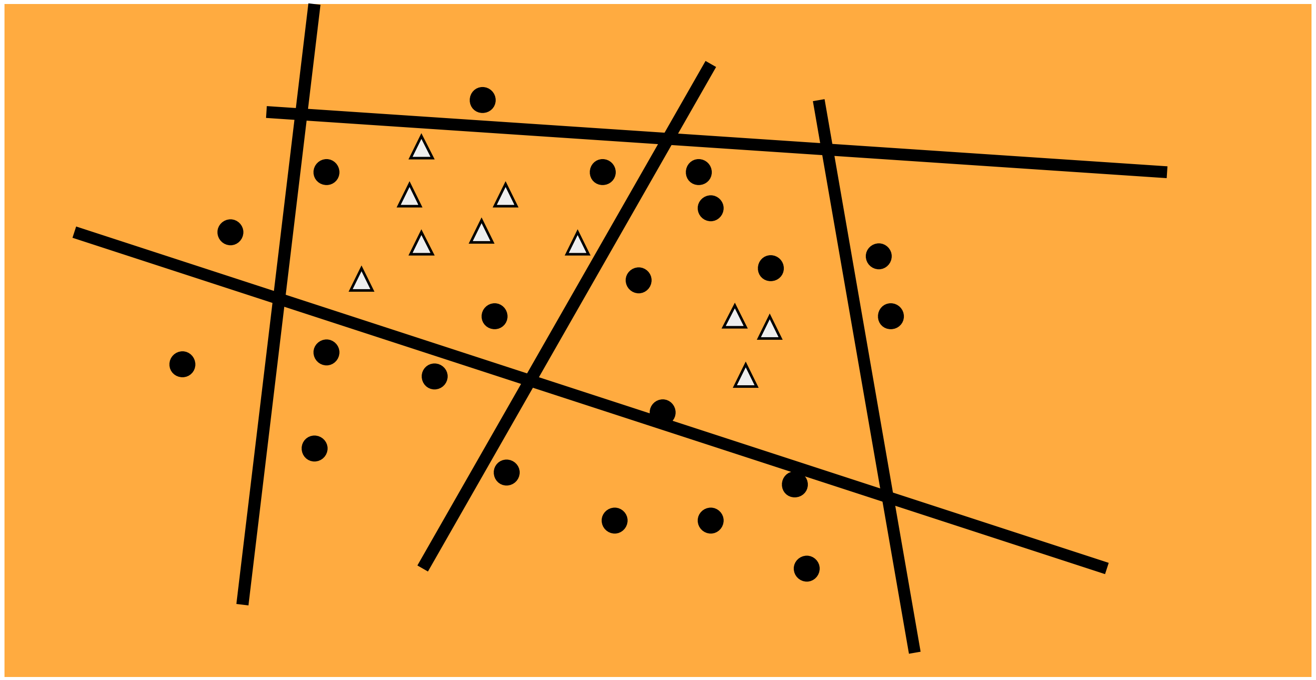
Treinamento modificando pesos



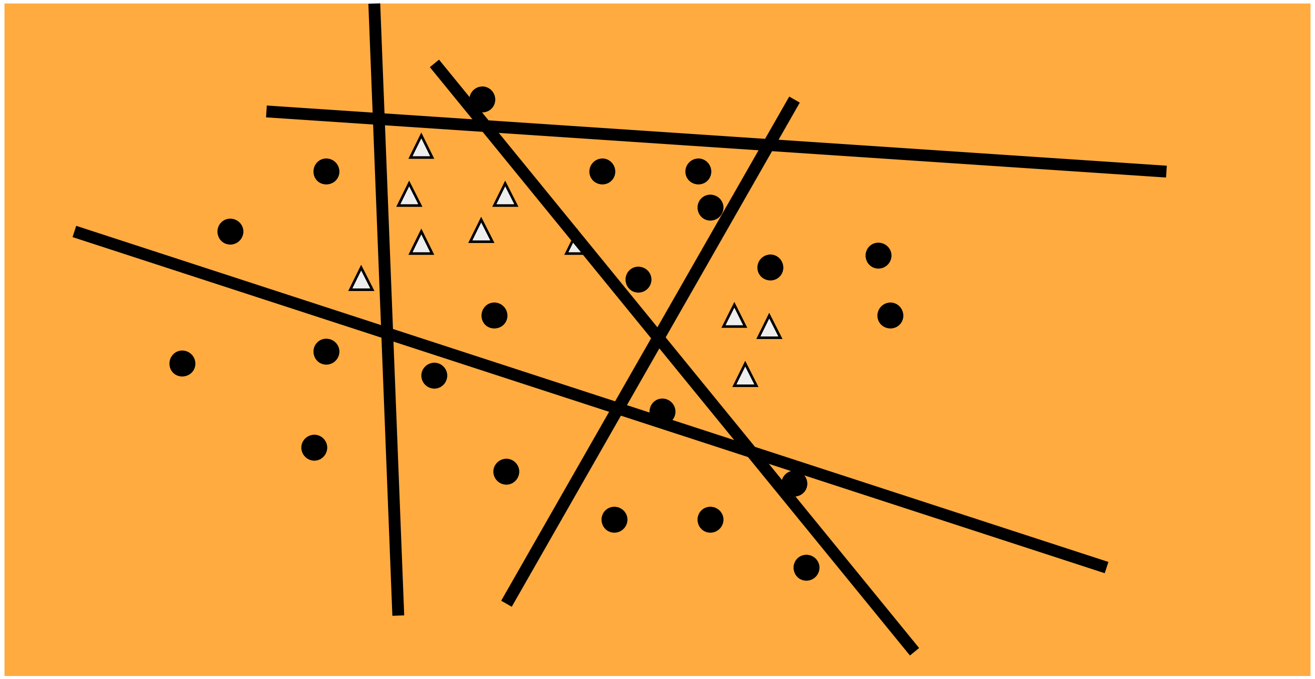
Treinamento modificando fronteiras



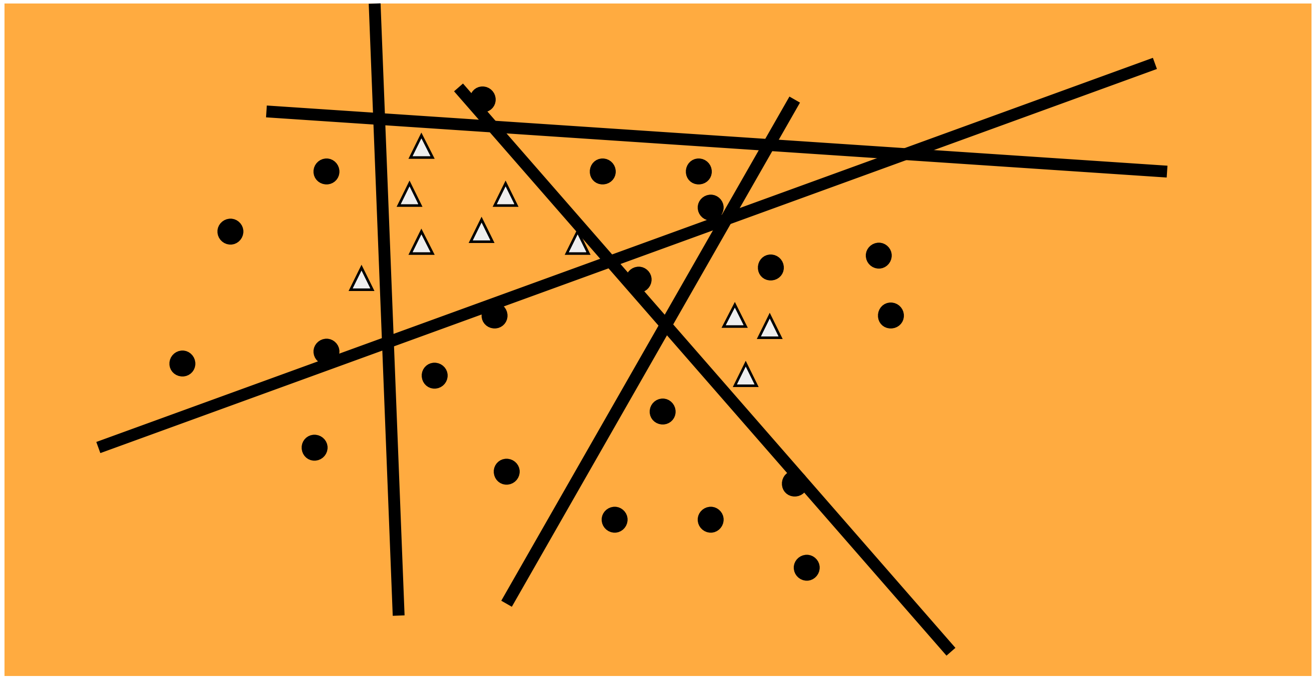
Treinamento modificando fronteiras



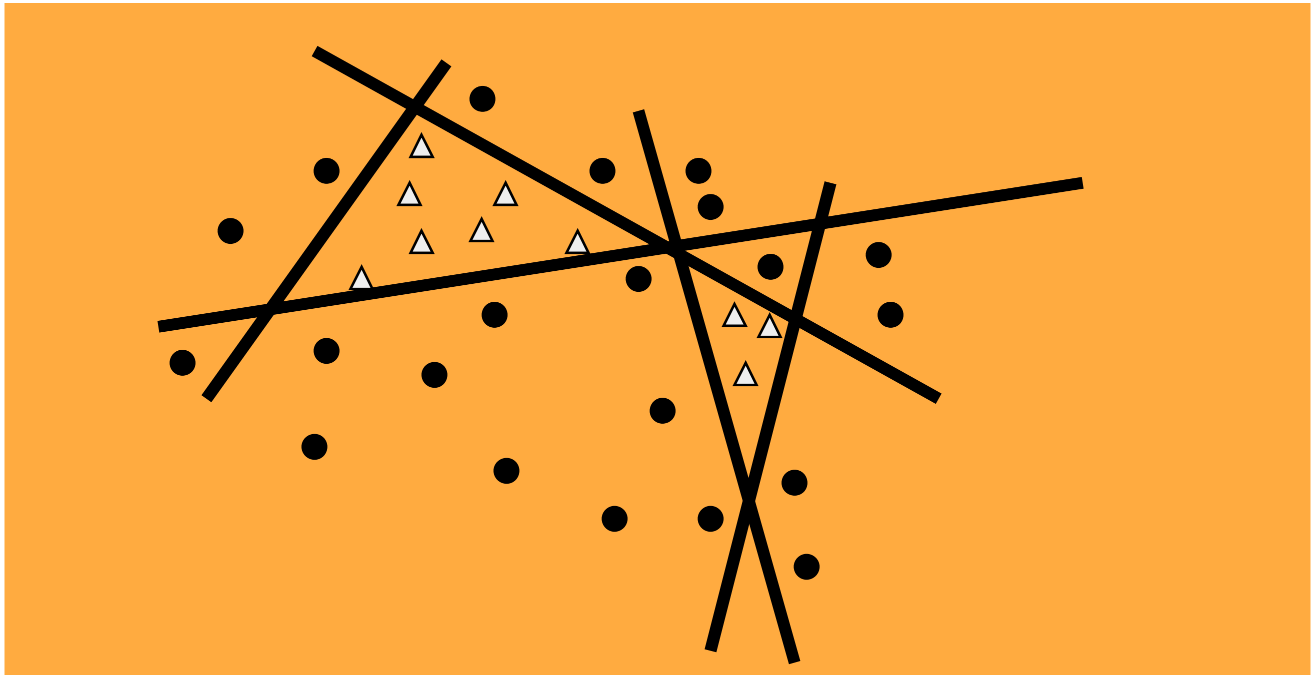
Treinamento modificando fronteiras



Treinamento modificando fronteiras



Treinamento modificando fronteiras



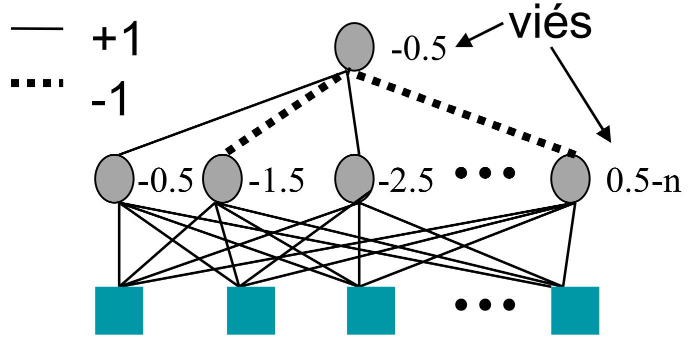
Exercício

Dada a rede abaixo, que recebe como entrada um vetor binário de *n* bits e gera como saída um valor binário:

a) Indicar a função implementada pela rede abaixo:

b) Explicar papel de cada neurônio no processamento da função

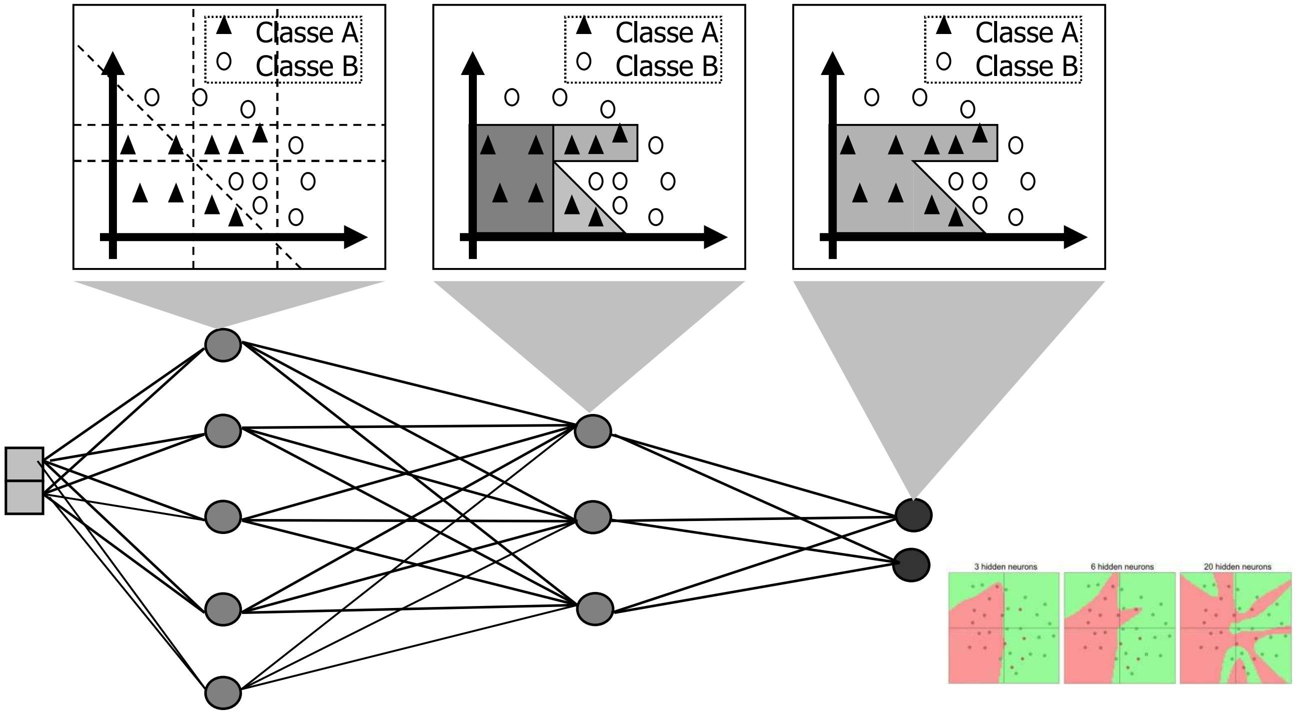
Considerar função de ativação limiar (threshold) entrada/saída binária



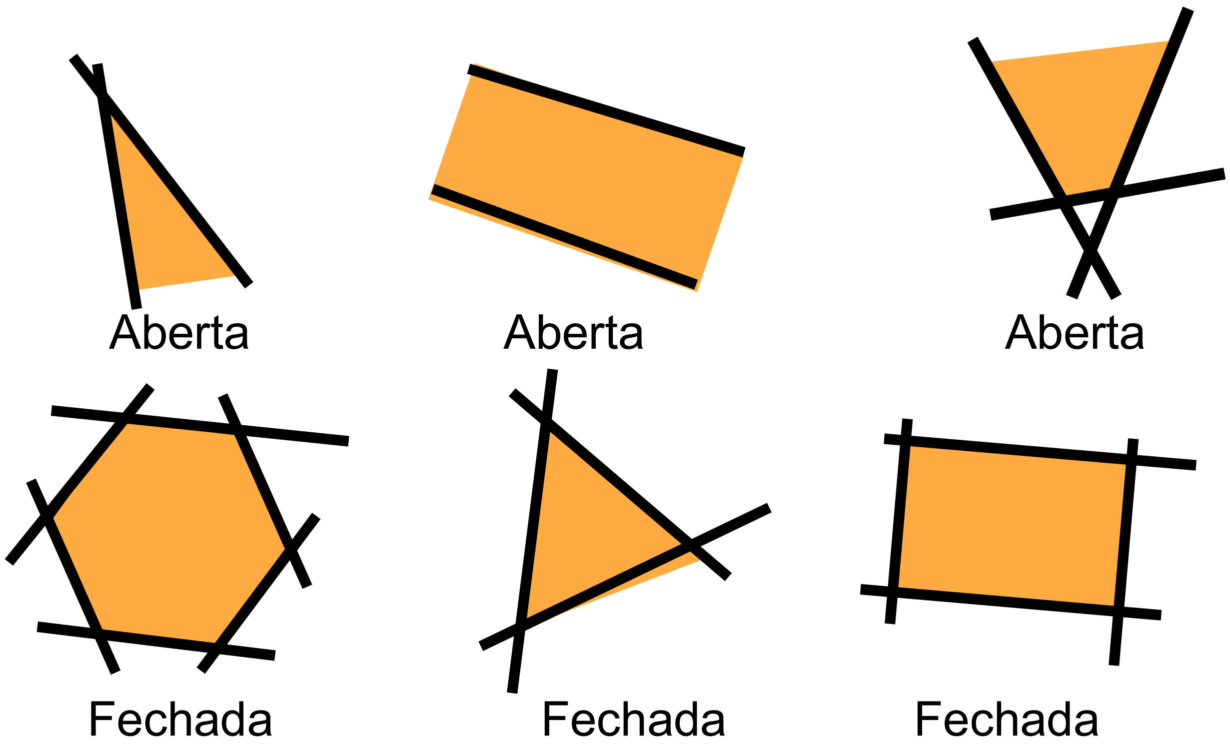
Exercício

- Paridade
  - Uma das limitações do Perceptron levantadas por Minsky e Papert
- Problema difícil
  - Padrões mais semelhantes requerem respostas diferentes
  - Usa *n* unidades intermediárias para detectar paridade em vetores com *n* bits

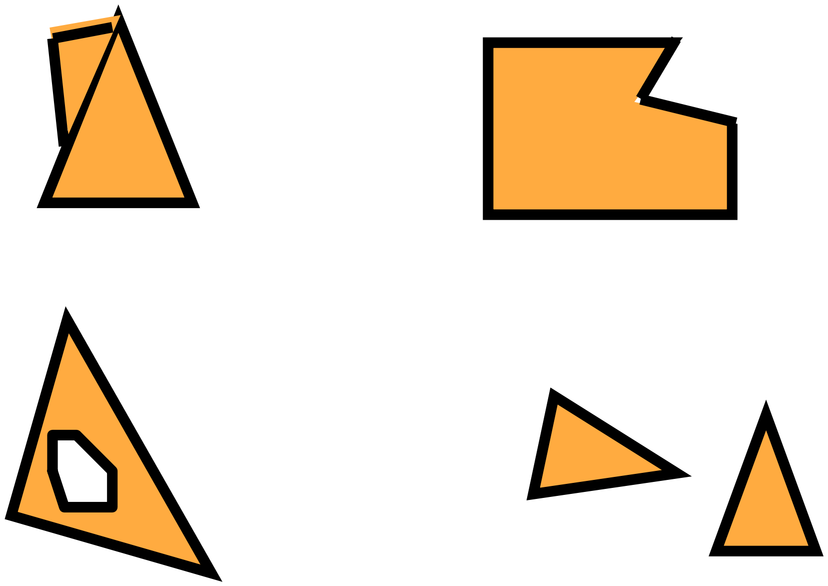
MLPs como classificadores



Regiões convexas

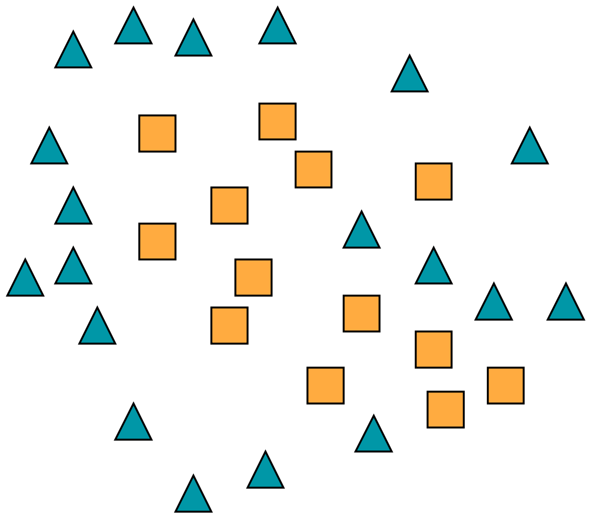


Combinações de regiões convexas



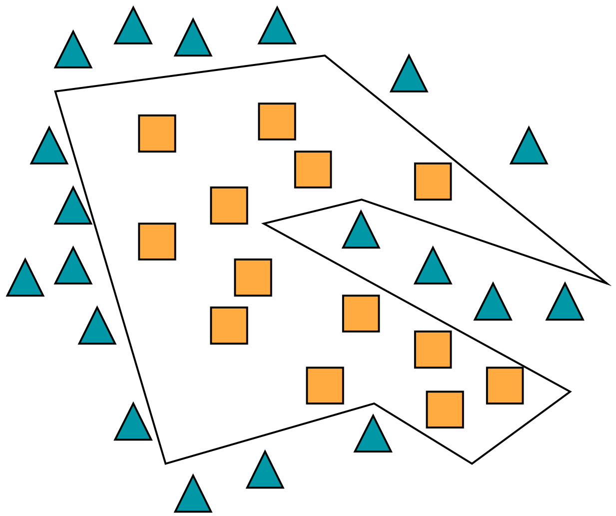
Combinações de regiões convexas

- Encontrar fronteiras de decisão que separem os dados abaixo:

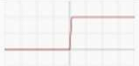
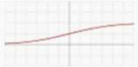
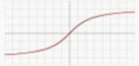
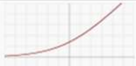


Combinações de regiões convexas

- Encontrar fronteiras de decisão que separem os dados abaixo:



Funções de ativação

Name	Plot	Equation	Derivative
Identity		$f(x) = x$	$f'(x) = 1$
Binary step		$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ 1 & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$	$f'(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x \neq 0 \\ ? & \text{for } x = 0 \end{cases}$
Logistic (a.k.a Soft step)		$f(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$	$f'(x) = f(x)(1 - f(x))$
TanH		$f(x) = \tanh(x) = \frac{2}{1+e^{-2x}} - 1$	$f'(x) = 1 - f(x)^2$
ArcTan		$f(x) = \tan^{-1}(x)$	$f'(x) = \frac{1}{x^2+1}$
Rectified Linear Unit (ReLU)		$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ x & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$	$f'(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ 1 & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$
Parameteric Rectified Linear Unit (PReLU)[2]		$f(x) = \begin{cases} \alpha x & \text{for } x < 0 \\ x & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$	$f'(x) = \begin{cases} \alpha & \text{for } x < 0 \\ 1 & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$
Exponential Linear Unit (ELU)[3]		$f(x) = \begin{cases} \alpha(e^x - 1) & \text{for } x < 0 \\ x & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$	$f'(x) = \begin{cases} f(x) + \alpha & \text{for } x < 0 \\ 1 & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$
SoftPlus		$f(x) = \log_e(1 + e^x)$	$f'(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$

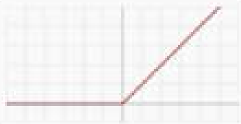
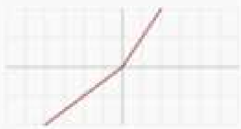
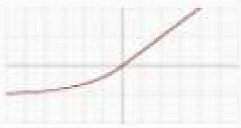
Função Sigmoide e Tangente Hiperbólica

- Problema das funções sigmoide e tangente hiperbólica é a saturação nos extremos
  - Sensíveis a mudanças apenas para valores próximos ao meio
  - Dificuldade para treinar redes com muitas camadas
  - Problema do gradiente desaparecendo (vanishing gradient problem)
    - Camadas mais próximas da entrada não recebem informação gradiente útil
    - Erros retro-propagados para as camadas de trás decresce reduz drasticamente a cada nova camada adicionada
    - Causado pela derivada da função de ativação
    - Faz com que redes com muitas camadas não aprendam de forma eficiente

Função Rectified Linear Unit (ReLU)

- Nos ultimos anos, funções sigmoide e tangente hiperbólica têm sido substituídas por funções de unidade linear retificada ReLU
  - ReLU pode evitar o problema de gradiente decrescente
- Atualmente utilizada em vários tipos de redes neurais
  - Mais fáceis de treinar
    - Por serem quase lineares, preservam propriedades que fazem modelos lineares mais fáceis de otimizar por métodos baseados no gradiente
  - Muitas vezes obtem melhores resultados
    - Por preservarem muitas das propriedades que fazem com que modelos lineares tenham boa capacidade de generalização

Funções de ativação

Nome	Figura	Função	Derivada
Rectified Linear Unit (ReLU)		$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad x < 0 \\ x & \text{for} \quad x \geq 0 \end{cases}$	$f'(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad x < 0 \\ 1 & \text{for} \quad x \geq 0 \end{cases}$
Parameteric Rectified Linear Unit (PReLU)[2]		$f(x) = \begin{cases} \alpha x & \text{for} \quad x < 0 \\ x & \text{for} \quad x \geq 0 \end{cases}$	$f'(x) = \begin{cases} \alpha & \text{for} \quad x < 0 \\ 1 & \text{for} \quad x \geq 0 \end{cases}$
Exponential Linear Unit (ELU)[3]		$f(x) = \begin{cases} \alpha(e^x - 1) & \text{for} \quad x < 0 \\ x & \text{for} \quad x \geq 0 \end{cases}$	$f'(x) = \begin{cases} f(x) + \alpha & \text{for} \quad x < 0 \\ 1 & \text{for} \quad x \geq 0 \end{cases}$
SoftPlus		$f(x) = \log_e(1 + e^x)$	$f'(x) = \dfrac{1}{1 + e^{-x}}$

Conclusão

- Redes Neurais
  - Sistema nervoso
  - Muito utilizadas em problemas reais
    - Várias arquiteturas e algoritmos de treinamento
  - Magia negra
  - Caixa preta

Fim do apresentação