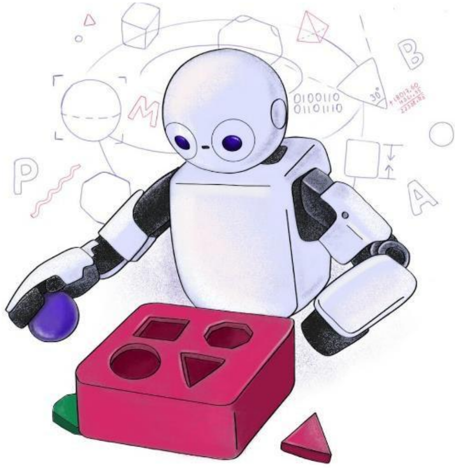
TP555 - Inteligência Artificial e Machine Learning: *Redes Neurais Artificiais (Parte I)*



Esse material foi desenvolvido e gentilmente cedido pelo Prof. Dr. Felipe Augusto Pereira de Figueiredo, do Inatel.(felipe.figueiredo@inatel.br)

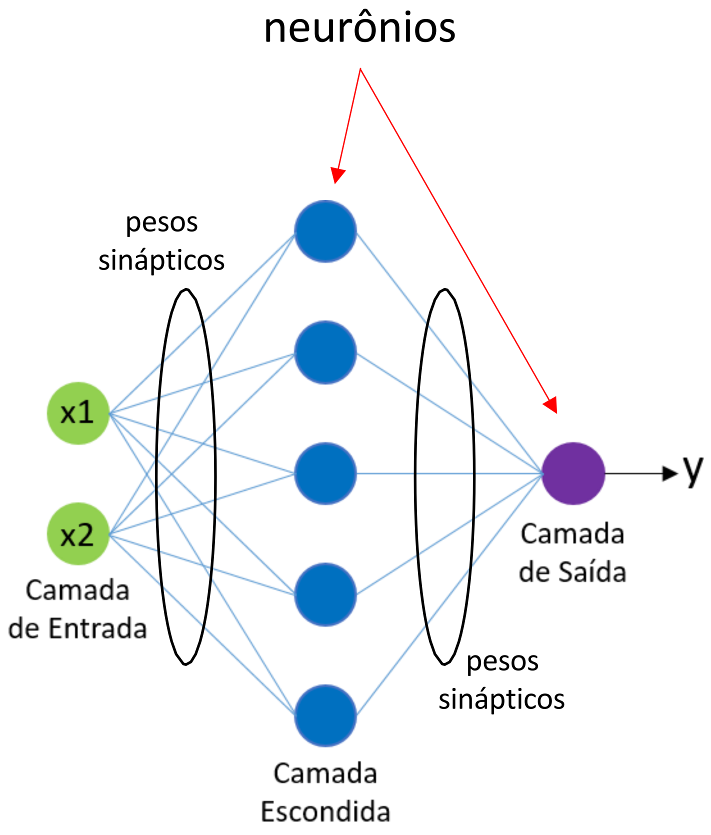
Inatel

Prof. Dr. Luiz Augusto Melo Pereira
luiz.melo@inatel.br

Introdução

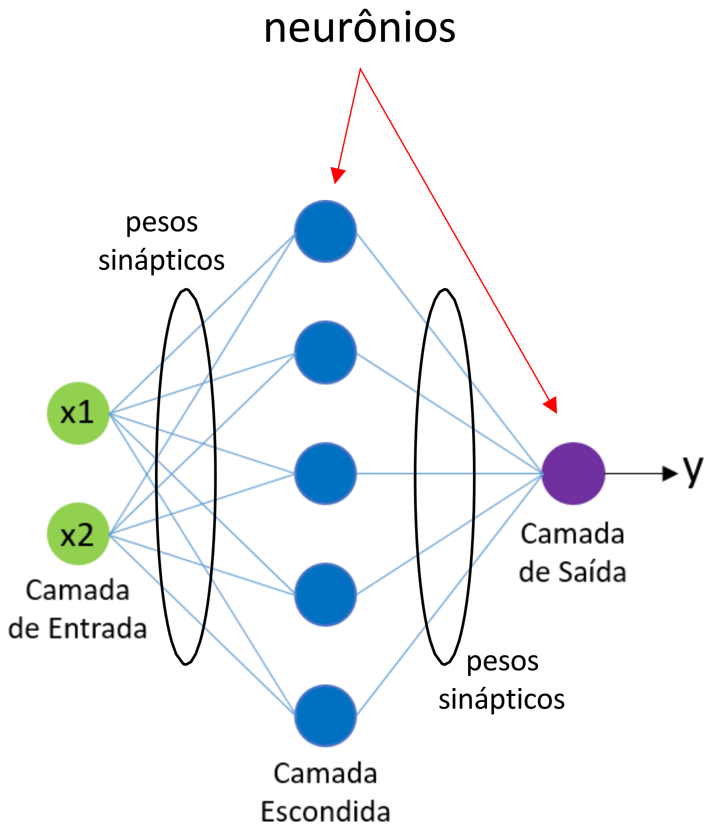
- A partir desta aula, entenderemos como as ideias que discutimos até agora serão úteis na construção de ***modelos matemáticos que aproximam a atividade de aprendizagem do cérebro***.
- Essas ideias que já discutimos, nos ajudarão a entender o funcionamento das ***redes neurais artificiais*** (RNAs).
- Redes neurais artificiais são uma das formas mais ***populares e efetivas para implementação de sistemas de aprendizado de máquina*** e mereceriam por sí só uma disciplina em separado.
- Portanto, neste tópico, veremos uma breve visão geral sobre as RNAs.

Redes neurais artificiais



- ***Redes neurais artificiais*** são modelos computacionais ***inspirados*** pelo funcionamento do cérebro dos animais.
- Elas são capazes de realizar tarefas de aprendizado de máquina (e.g., regressão e classificação) com grande eficácia.

Redes neurais artificiais



- RNAs são geralmente apresentadas como ***sistemas de nós (unidades ou neurônios) interconectados***, que geram valores de saída, simulando o comportamento de ***redes neurais biológicas***.
- Esta primeira parte deste tópico, ***foca nos elementos básicos de construção de uma rede neural***, os ***nós*** ou ***neurônios***.

Algumas aplicações famosas

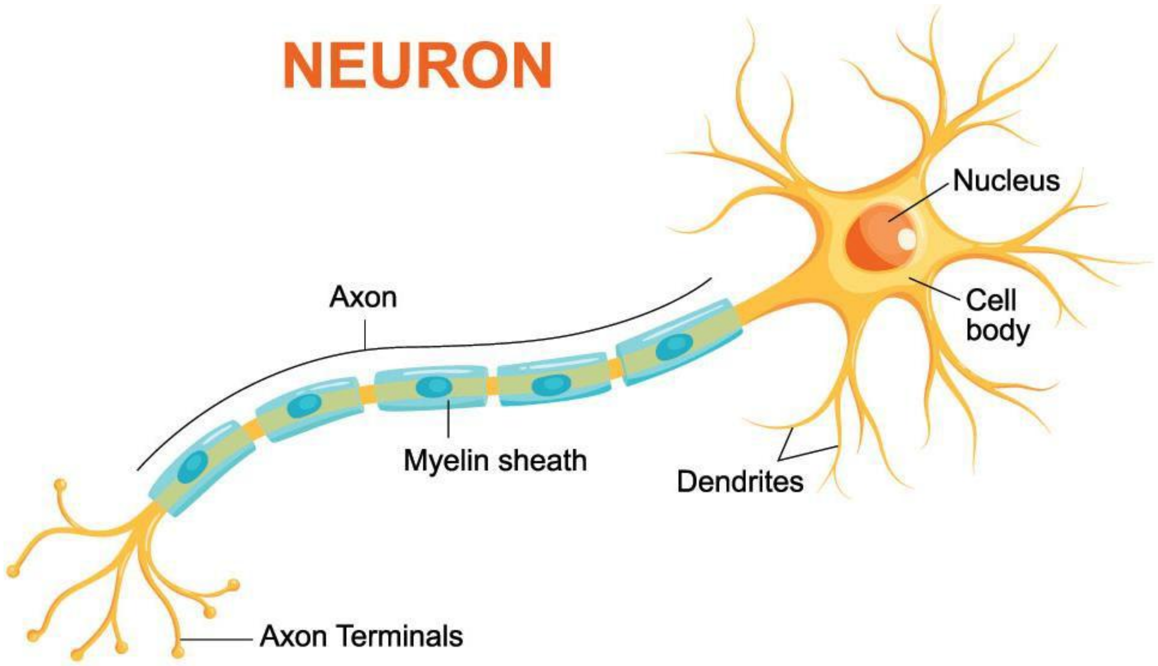
- RNAs são versáteis, poderosas e escalonáveis, tornando-as ideais para realizar tarefas grandes e altamente complexas de ***aprendizado de máquina***, como por exemplo:
  - Classificar bilhões de imagens (e.g., como o Google Images, Facebook, etc. fazem),
  - Serviços de reconhecimento de fala (e.g., a Siri da Apple, Alexa da Amazon e Google Assistant),
  - Recomendar vídeos que melhor se adequam ao comportamento de centenas de milhões de usuários todos os dias (e.g., YouTube, Netflix),
  - Pilotar um veículo com pouca ou nenhuma intervenção humana,
  - Responder perguntas (e.g., ChatGPT).

Alexa

Google Assistant

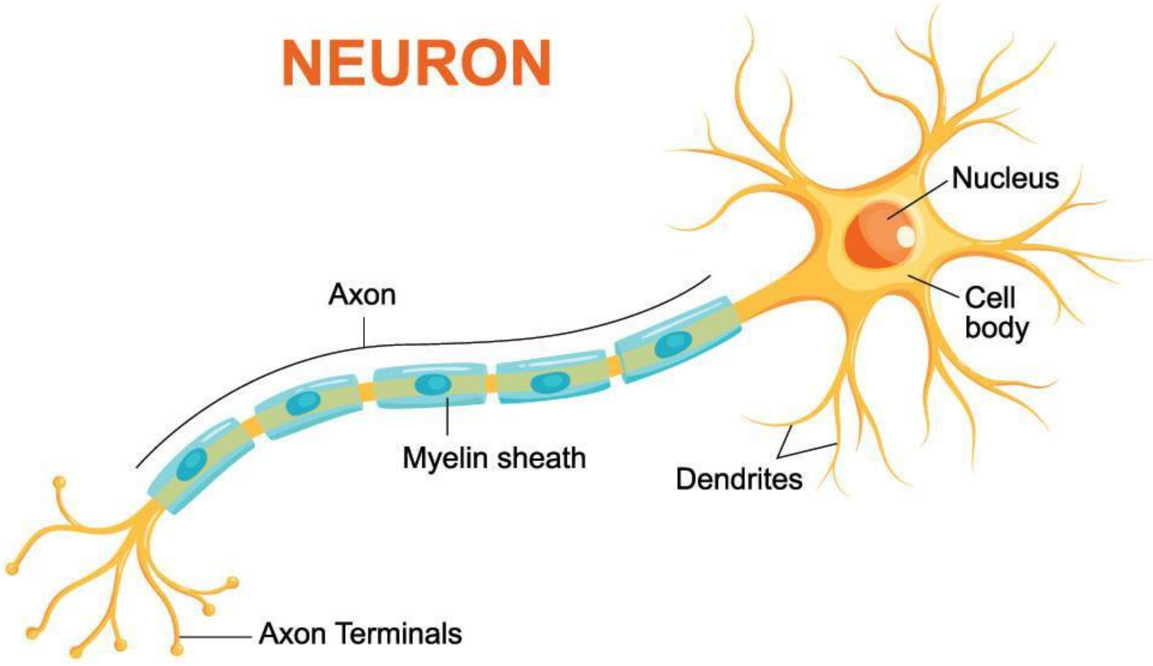
Siri

Um pouco de contexto



- Os ***neurônios*** são células ***eucariontes*** que possuem ***mecanismos eletroquímicos*** característicos para transmissão de informações.
  - Células eucariontes possuem membrana celular, citoplasma e núcleo.
- Além da membrana celular, citoplasma e núcleo, os neurônios apresentam três partes importantes: os ***dendritos***, o ***axônio*** e o ***corpo celular (soma)***.

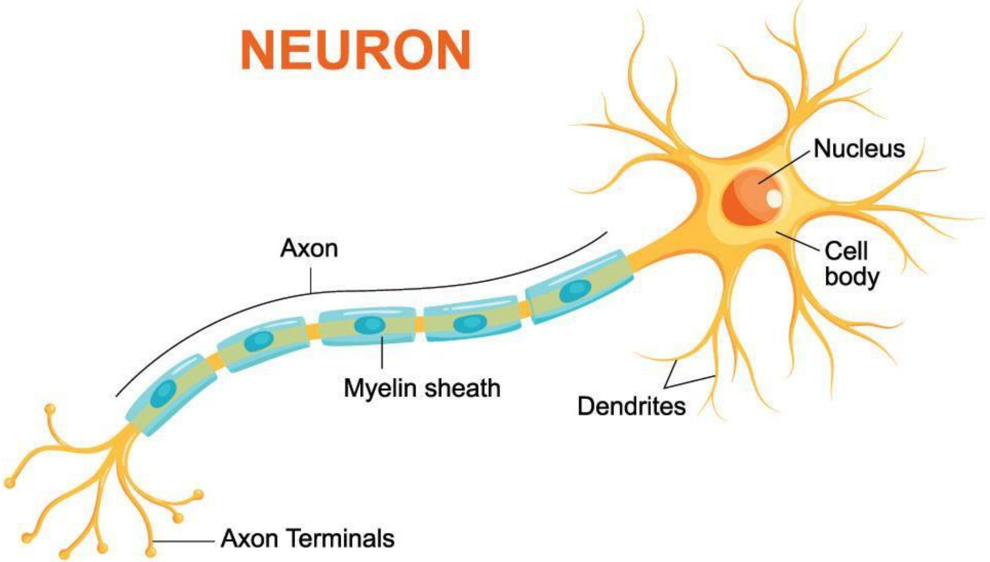
Um pouco de contexto

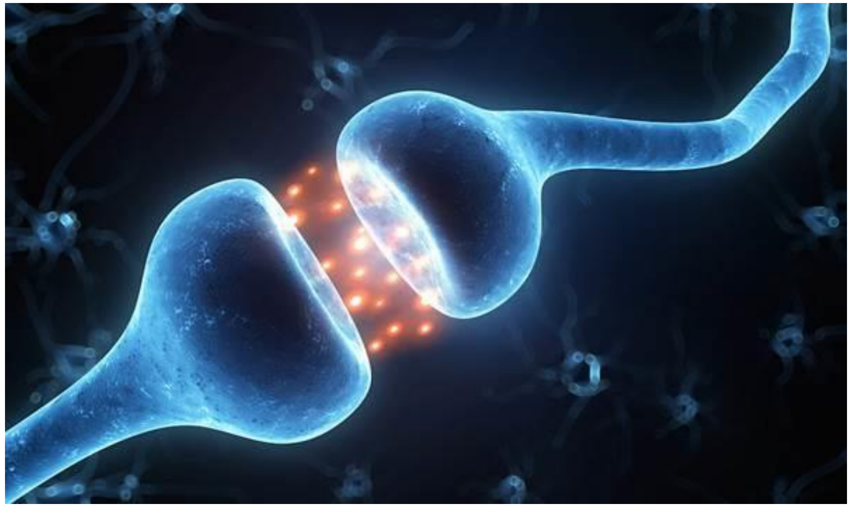


- Os ***dendritos*** são prolongamentos do neurônio que garantem a ***recepção de estímulos*** de outros neurônios, levando impulsos nervosos em direção ao ***corpo celular***.
- O ***axônio*** é um prolongamento que garante o ***envio de informação*** (estímulos) ***a outros neurônios*** através de seus ***terminais***.
- Cada neurônio possui apenas um axônio, o qual é, geralmente, mais longo que os dendritos.

Um pouco de contexto

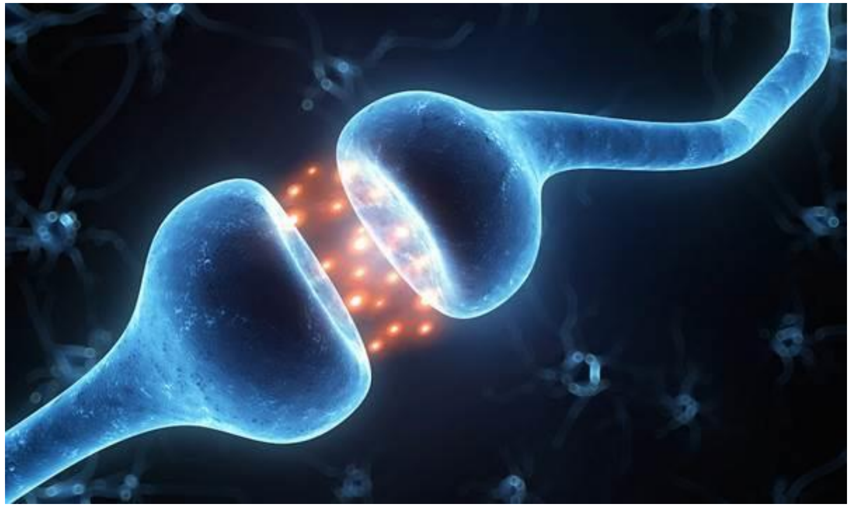
- O ***corpo celular*** (também conhecido como ***soma***) contém o núcleo do neurônio e é responsável por realizar a ***integração*** dos estímulos recebidos pelo neurônio através de seus dendritos.
- Os ***pontos de contato*** entre os dentritos de um neurônio e os terminais do axônio de outro neurônio são chamados de ***sinapses***.



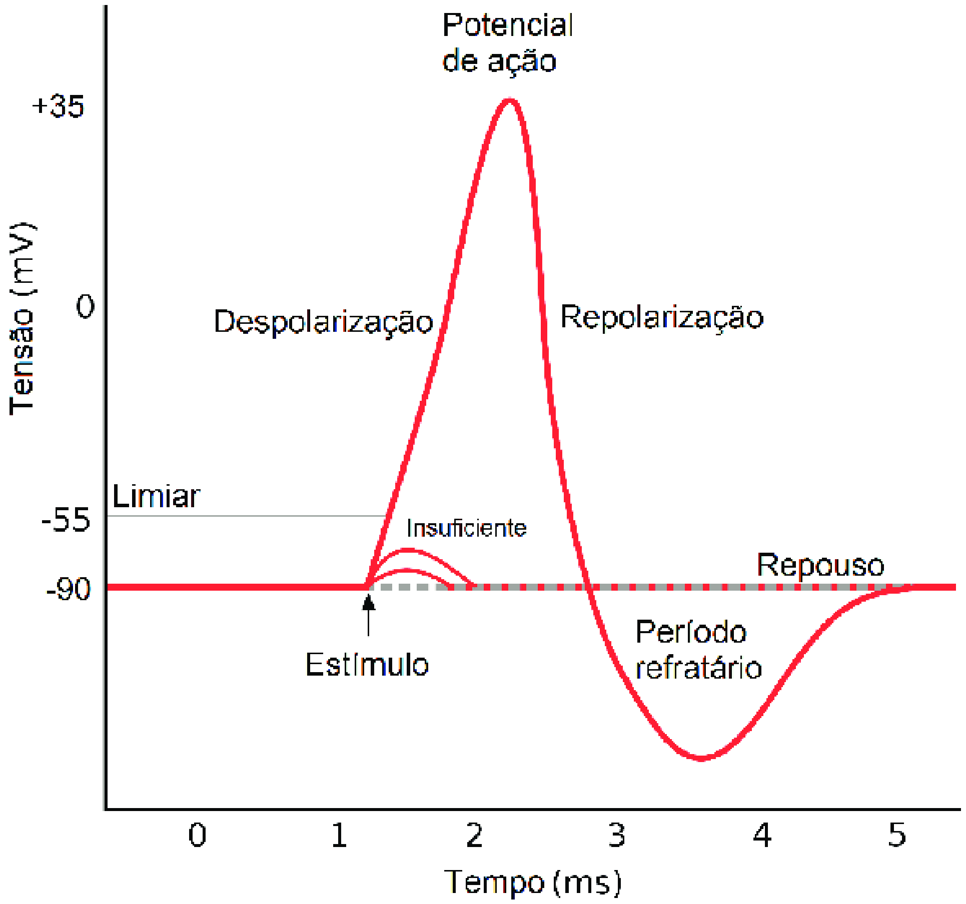


Um pouco de contexto

- Ou seja, os neurônios se comunicam uns com os outros através das ***sinapses***.
- Sinapses podem ser ***químicas***, as mais comuns, ou ***elétricas***, pouco comuns.
- A figura ao lado apresenta uma sinapse química.

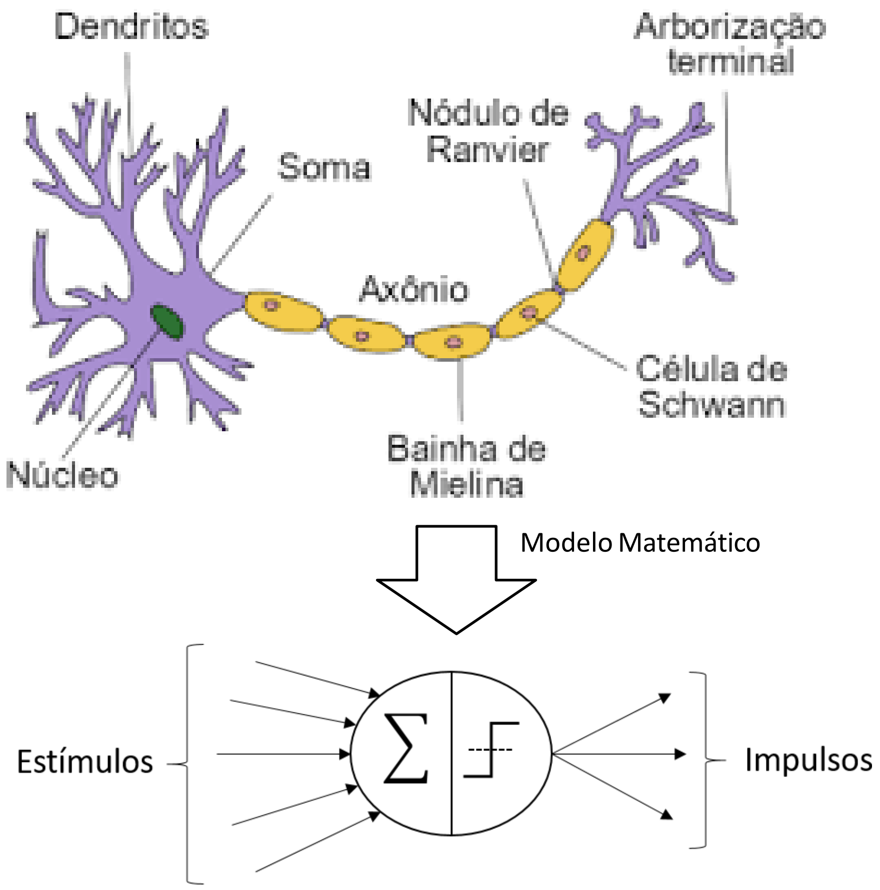


Um pouco de contexto



- Em termos bem simples, mas lembrando de que existem exceções, nós podemos simplificar o funcionamento do ***neurônio*** como:
  - O neurônio recebe estímulos elétricos, através dos ***dendritos***.
  - Esses estímulos são somados no ***corpo celular*** (i.e., *soma*).
  - Se a soma dos estímulos exceder um certo ***limiar de ativação***, o ***neurônio*** gera um pulso (ou ***potencial de ação***) que é enviado pelos ***terminais do axônio*** a outros neurônios.

Um pouco de contexto



- Um ***neurônio*** pode se conectar a até 20.000 outros ***neurônios*** através das ***sinapses***.
- Os sinais são passados de ***neurônio*** para ***neurônio*** através das ***sinapses*** (químicas ou elétricas).
- Do ponto de vista do nosso curso, o ***neurônio*** será considerado como um ***sistema com várias entradas e uma ou mais saídas*** onde a comunicação entre neurônios é feita através de ***sinais elétricos***.

O modelo de McCulloch e Pitts

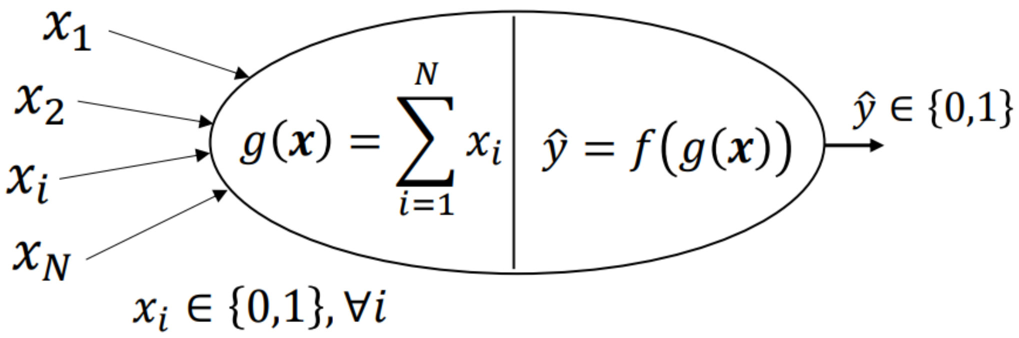
Walter Pitts e Warren McCulloch

- O final do século XIX e o início do século XX foram períodos fundamentais para o estabelecimento do conhecimento atual do sistema nervoso.
- De posse desse entendimento, em 1943, dois ***neurocientistas***, Warren McCulloch e Walter Pitts apresentam em um artigo científico o primeiro ***modelo computacional de um neurônio***.
- A partir desse modelo, foi possível estabelecer uma conexão entre o funcionamento de um neurônio e a ***lógica proposicional***.

O modelo de McCulloch e Pitts

- ***Lógica proposicional*** se baseia em ***proposições***.
  - Uma ***proposição*** é uma ***sentença declarativa*** ou ***afirmação***, ou seja, é uma sentença que faz uma ***afirmação sobre um fato***, ***podendo este ser verdadeiro ou falso***.
- O artigo de McCulloch e Pitts forneceu *insights* fundamentais sobre como a ***lógica proposicional pode ser processada por um neurônio***.
- Existe uma correspondência direta entre a lógica proposicional e a lógica Booleana.
  - Podemos pensar em uma ***sentença declarativa*** como sendo uma ***expressão Booleana***
    - 1 ou 1 = 1
    - 1 e 0 = 0
- A partir desta correspondência, a relação com a computação foi direta e natural.

O modelo de McCulloch e Pitts

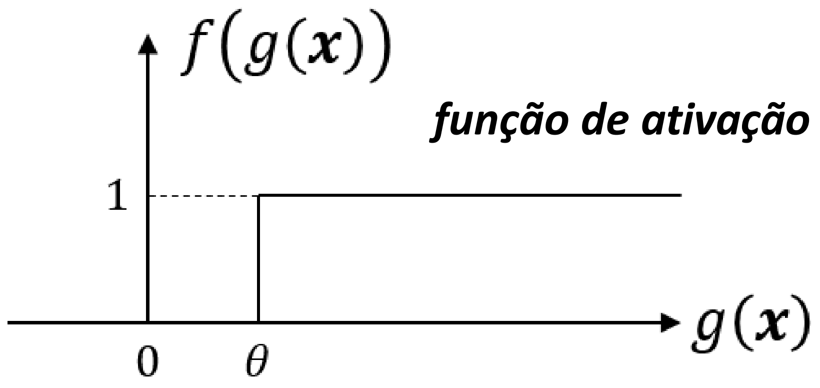


$$\hat{y} = f(g(\boldsymbol{x})) = \begin{cases} 1, \text{se } g(\boldsymbol{x}) \geq \theta \\ 0, \text{se } g(\boldsymbol{x}) < \theta \end{cases}$$

onde θ é o ***limiar de ativação***.

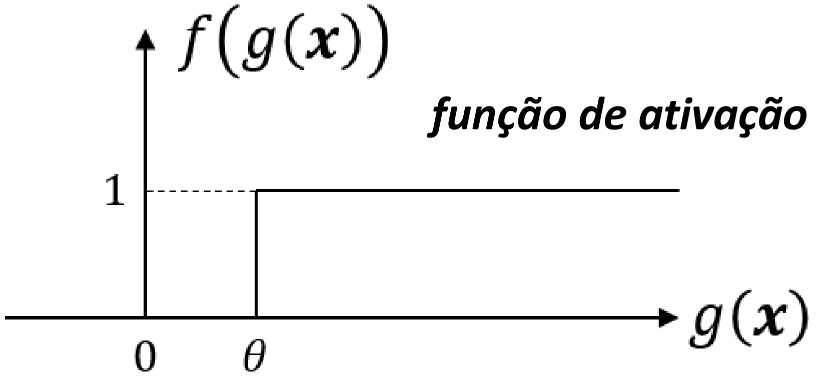
- A figura ao lado apresenta o modelo matemático do ***neurônio*** proposto por McCulloch e Pitts.
- Esse modelo é chamado de modelo de McCulloch e Pitts (M-P).
- Grosso modo, o ***neurônio é ativado*** (ou disparado) quando a ***soma de suas entradas***, $g(\boldsymbol{x})$, ***excede o limiar de ativação***, θ, da função de ativação $f(.)$.
- O modelo estabelece algumas premissas apresentadas a seguir.

Premissas do modelo de McCulloch e Pitts



- Os valores das entradas, x_i, $\forall i$, ou também chamados de ***sinapses***, são sempre valores ***booleanos***, i.e., '0', ou '1'.
- As entradas são multiplicadas por ***pesos com magnitudes unitárias*** (+/- 1) e ***somadas***.
- A atividade do ***neurônio*** é um processo do tipo "***tudo ou nada***", ou seja, um processo binário (0 ou 1).
- Portanto, a ***função de ativação*** do neurônio é uma ***função degrau*** com ***ponto de disparo variável***, dependente do ***limiar de ativação***, θ.
- Um certo número de ***sinapses*** deve ser excitado para que o neurônio "dispare".

O modelo de McCulloch e Pitts

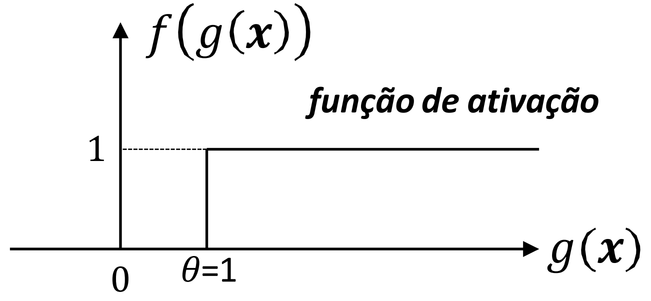


- Portanto, o modelo do ***neurônio*** de McCulloch e Pitts nada mais é do que um ***classificador linear binário*** com
  - ***limiar de decisão rígido,***
  - ***ponto de disparo variável,***
  - ***pesos com magnitudes unitárias*** e
  - ***atributos booleanos***.
- Percebam que este ***não é um modelo de aprendizado supervisionado***.
- Vamos ver alguns exemplos com portas lógicas, os quais podem ser vistos como problemas de classificação binária.

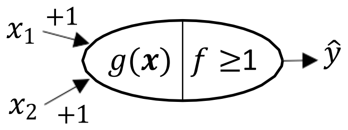
Exemplos de portas lógicas com o modelo M-P

OR			
x_1	x_2	$g(\boldsymbol{x})$	$\hat{y}$
0	0	0	0
0	1	1	1
1	0	1	1
1	1	2	1

- Qual é o valor do ***limiar de ativação***, θ?
- Analisando-se $g(\boldsymbol{x})$, vemos que o disparo deve ocorrer quando $g(\boldsymbol{x}) \geq 1$, portanto, $\theta = 1$.

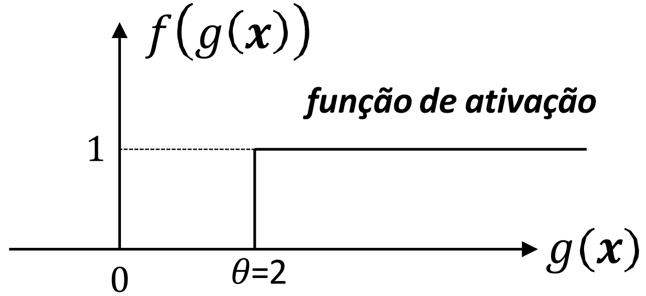


OBS.: pesos iguais a +1.

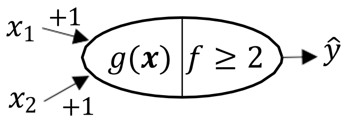


AND			
x_1	x_2	$g(\boldsymbol{x})$	$\hat{y}$
0	0	0	0
0	1	1	0
1	0	1	0
1	1	2	1

- Qual é o valor do ***limiar de ativação***, θ?
- Analisando-se $g(\boldsymbol{x})$, vemos que o disparo deve ocorrer quando $g(\boldsymbol{x}) \geq 2$, portanto, $\theta = 2$.

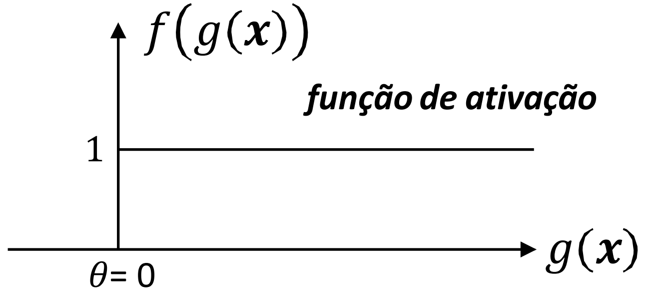


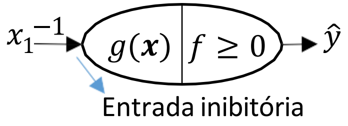
OBS.: pesos iguais a +1.



NOT			
x_1	$-x_1$	$g(\boldsymbol{x})$	$\hat{y}$
0	0	0	1
1	-1	-1	0

- Qual é o valor do ***limiar de ativação***, θ?
- Analisando-se x_1, vemos que para o disparo ocorrer, seu valor deve ser ***negado*** (i.e., multiplicado por -1), e assim, o disparo ocorre quando $g(\boldsymbol{x}) \geq 0$, portanto, $\theta = 0$.





OBS.: Entradas inibitórias são entradas que têm seus valores multiplicados por -1.

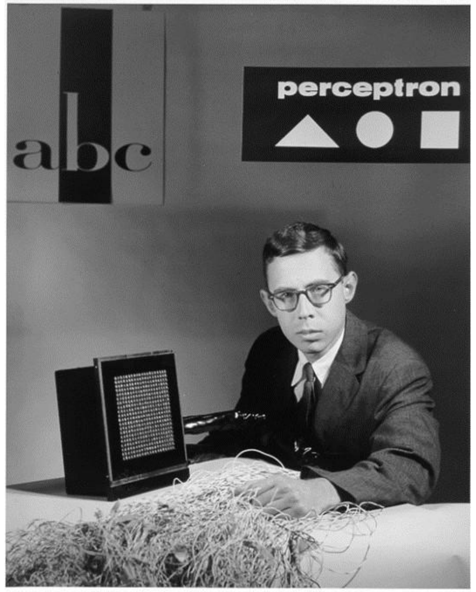
Exemplos de portas lógicas com o modelo M-P

- Para casa:
  - Qual deve ser o valor do ***limiar de ativação***, θ, para a porta lógica XOR?
  - Dicas
    - Desenhem uma figura com os 4 pontos com cores diferentes representando as 2 classes.
    - Esse é um problema linearmente separável, ou seja, um hiperplano consegue separar as classes?

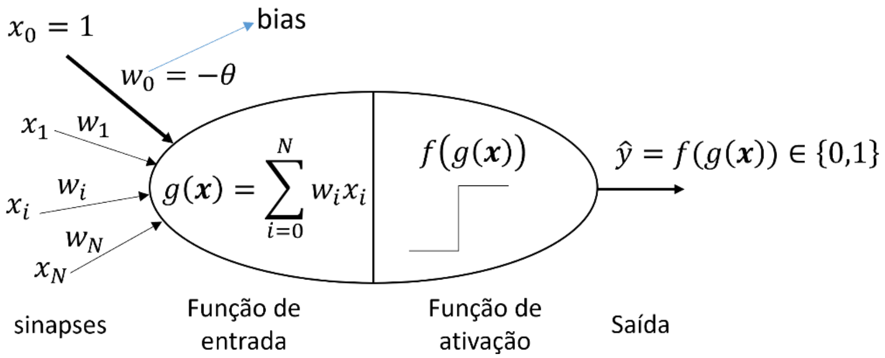
XOR		
x_1	x_2	$\hat{y}$
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

Perceptron

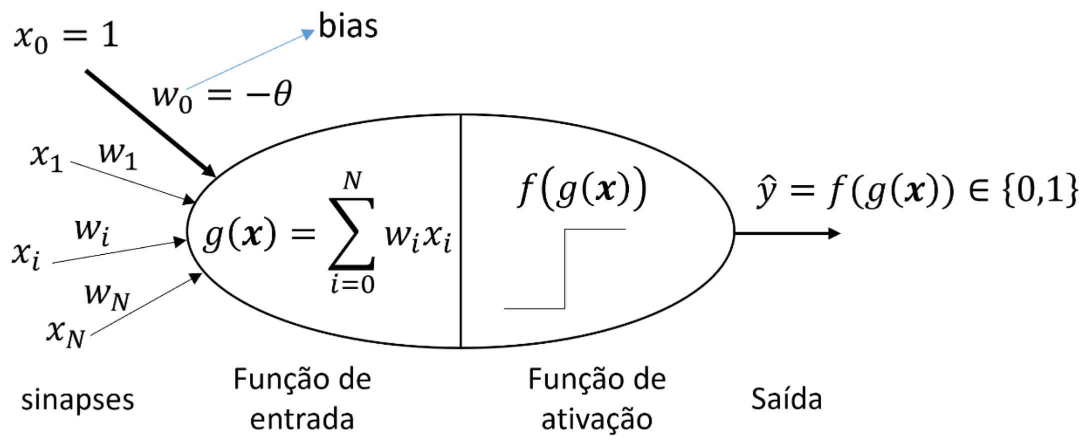
- Em 1958, Frank Rosenblatt, propôs um novo ***modelo computacional mais geral*** que o modelo do ***neurônio*** de McCulloch e Pitts.
- O modelo criado por ele foi chamado de ***perceptron*** e é mostrado na figura ao lado.
- O ***perceptron*** é um modelo para ***aprendizado supervisionado*** de ***classificadores binários***.
- Assim como o modelo de M-P, por definição, o ***perceptron*** só é capaz de classificar padrões ***linearmente separáveis***.



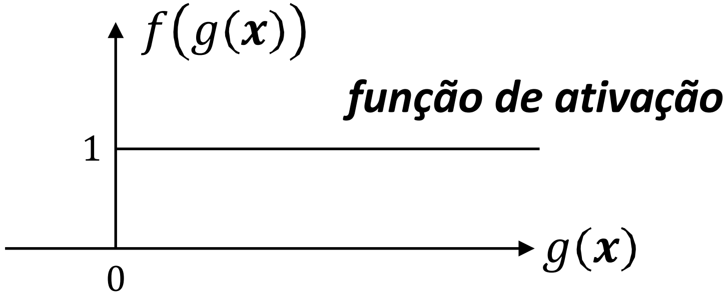
Frank Rosenblatt



Perceptron



$$\hat{y} = f(g(\boldsymbol{x})) = \begin{cases} 1, & \text{se } g(\boldsymbol{x}) \geq 0 \\ 0, & \text{se } g(\boldsymbol{x}) < 0 \end{cases}$$

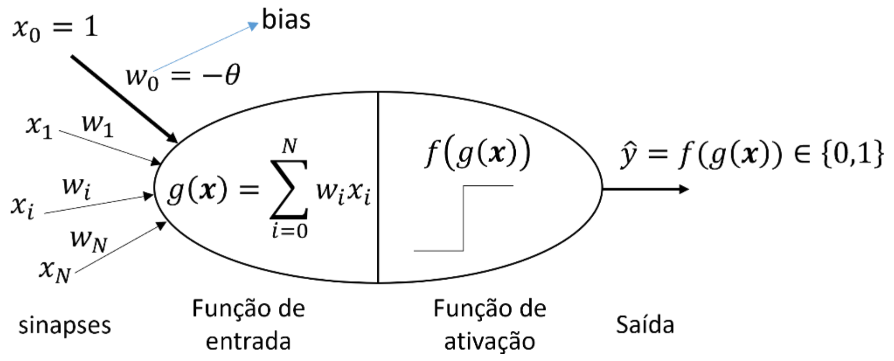


Percebam que o ***limiar de ativação***, θ, agora faz parte das entradas e é chamado de ***peso de bias***.

- Esse novo modelo ***supera algumas das limitações*** do modelo de M-P:
  - Introdução de ***pesos sinápticos com valores reais*** para as entradas (i.e., ***sinapses***).
    - Pesos dão uma medida de importância dos sinapses (i.e., atributos).
  - E um método para que o modelo ***aprenda os pesos e o ponto de ativação***, que passa a ser um peso também.

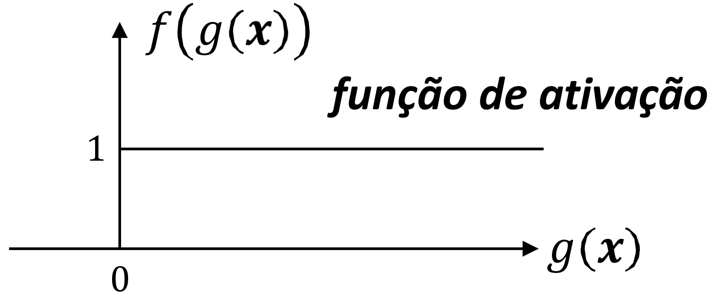
Perceptron

- Além disso, as ***entradas*** não são mais limitadas a valores booleanos, como no caso do modelo de M-P, ***suportando entradas com valores reais***, o que torna este modelo mais útil e generalizado.
- Porém, assim como no modelo de M-P, a ***função de ativação*** utilizada pelo ***perceptron*** também é a ***função degrau*** com a ***diferença que aqui ela não mais depende do limiar de ativação***, θ.
- Ou seja, a ***transição*** ou ***ativação*** sempre ocorre quando $g(\boldsymbol{x}) = 0$.



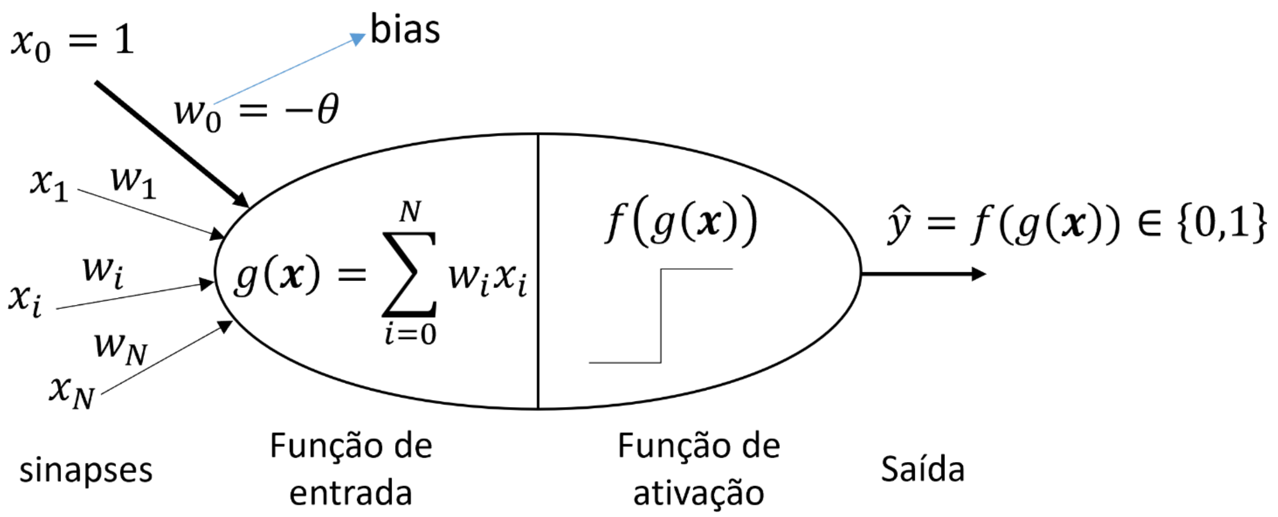
$$\hat{y} = f(g(\boldsymbol{x})) = \begin{cases} 1, & \text{se } g(\boldsymbol{x}) \geq 0 \\ 0, & \text{se } g(\boldsymbol{x}) < 0 \end{cases}$$

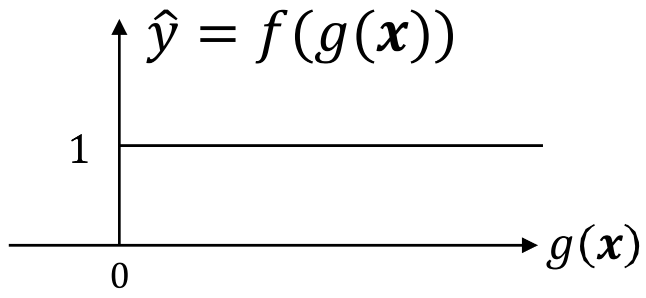
Percebam que o ***limiar de ativação***, θ, agora faz parte das entradas e é chamado de ***bias***.



Perceptron

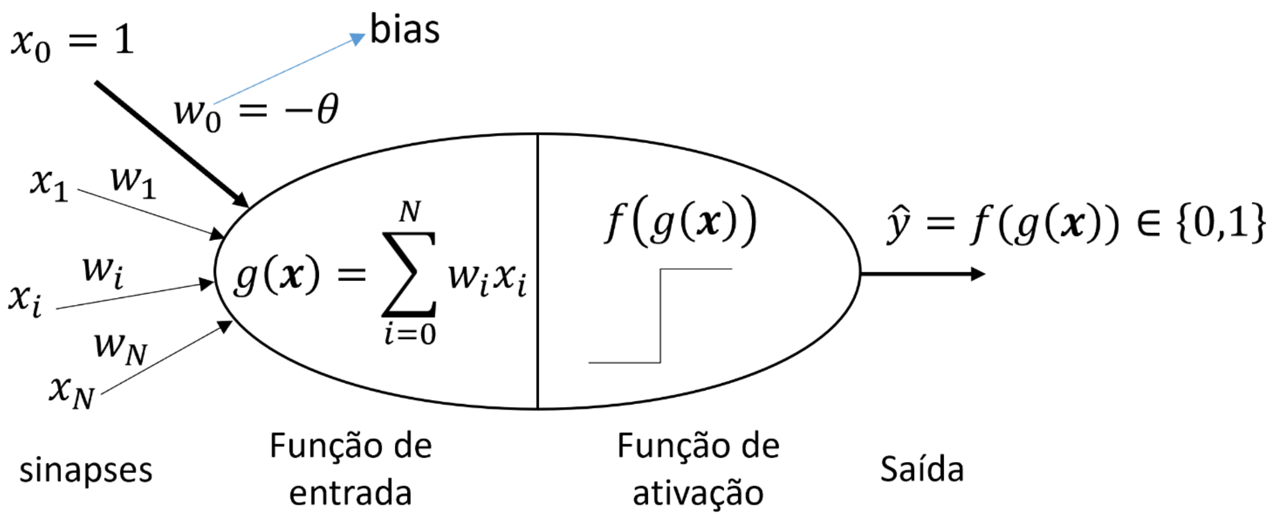
- A ativação do ***perceptron*** é causada pela ***combinação linear*** dos ***estímulos de entrada*** em relação aos ***pesos sinápticos***.
- Se a ***combinação linear*** ***exceder*** o ***limiar de ativação***, θ, o ***disparo ocorre***.
- Isso é expresso por uma ***função de ativação*** do tipo ***degrau***.

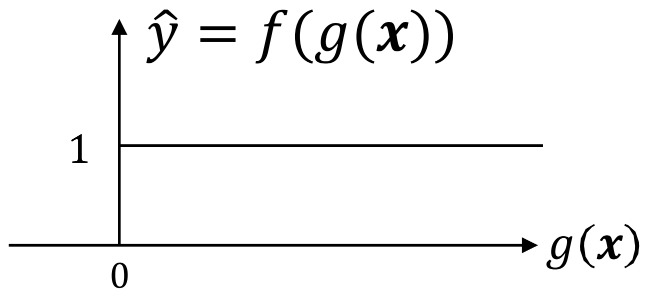




Perceptron

- Notem que a ***função de ativação***, $f(.)$, tem a transição para o valor 1 quando $g(\boldsymbol{x}) = 0$, ou seja, o ***limiar de ativação não é variável***.
- ***Mas então como podemos ter limiares de ativação diferentes para resolver diferentes tipos de problemas de classificação?***





Perceptron

- No caso do perceptron, o ***limiar de ativação é controlado pelo valor do peso de bias***, w_0, fazendo com que a transição sempre seja em $g\ (\boldsymbol{x}) = 0$.
- Ao incorporar o ***limiar de ativação*** à combinação linear, $g\ (\boldsymbol{x})$, podemos usar uma ***função de ativação com transição fixa em zero***, pois, agora, ajusta-se o ***limiar de ativação*** através do peso w_0.
- O peso w_0 (i.e., o limiar de ativação, θ) é incorporado ao modelo para que seu valor seja aprendido durante o treinamento junto com os outros pesos.

Perceptron

- Para que tenhamos a saída do perceptron, $\hat{y}$, igual a 1, então

$$g(\boldsymbol{x}) = w_0 + \sum_{i=1}^{N} w_i x_i \quad \geq 0$$

- Portanto, reescrevendo a equação acima, temos

$$\sum_{i=1}^{N} w_i x_i \quad \geq -w_0$$

para que haja a ativação do perceptron.

- Por exemplo
  - Se $w_0 = 1,\ \sum_{i=1}^{N} w_i x_i \quad \geq -1$
  - Se $w_0 = -1,\ \sum_{i=1}^{N} w_i x_i \quad \geq 1$

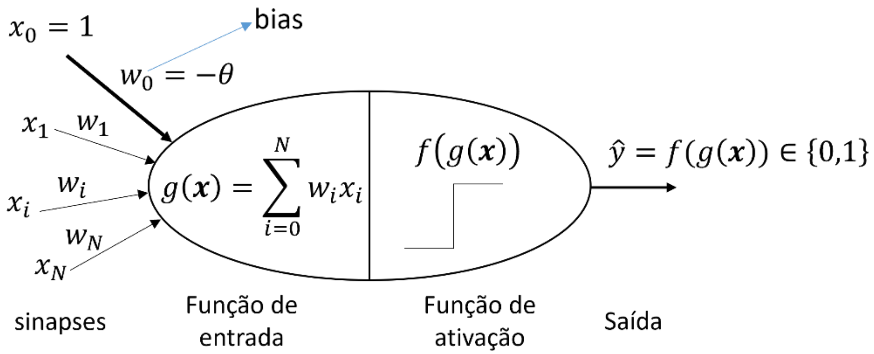
Perceptron

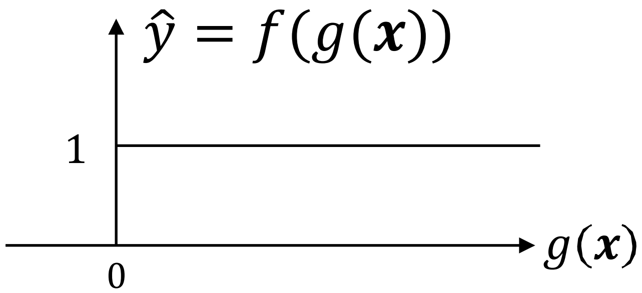
- Como vimos, a ***função discriminante***, $g\,(\boldsymbol{x})$, do ***perceptron*** tem a forma de um ***hiperplano***

$$g(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=0}^{N} w_i x_i$$

onde x_0 é o atributo de bias com valor constante igual a 1.

- Portanto, como já sabemos, este tipo de função dá origem a um ***classificador binário*** onde as ***classes são separadas*** por uma ***superfície de separação linear***.

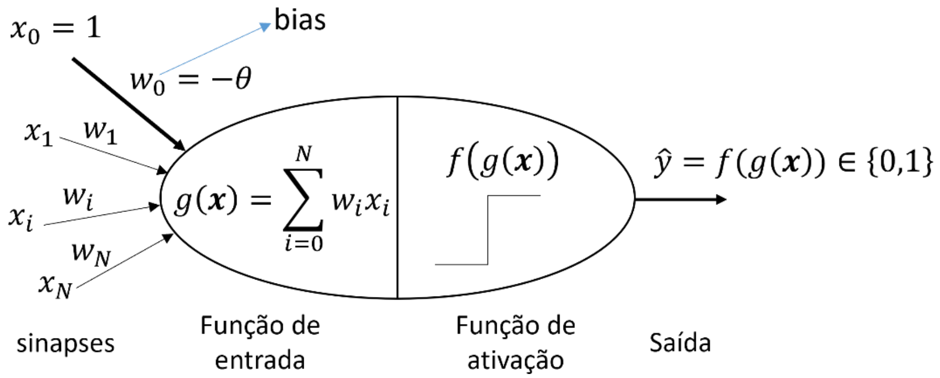


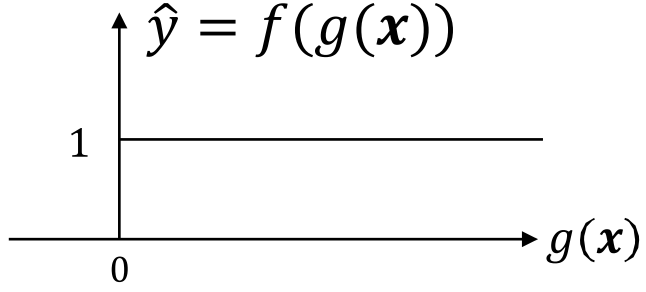


Como os pesos são aprendidos?

Regra de aprendizado do perceptron

- Devido ao fato da ***função degrau***, $f\,(g(\boldsymbol{x}))$, ter derivada igual a zero em todos os pontos, exceto em $g\,(\boldsymbol{x}) = 0$, onde ela é indefinida, nós ***não podemos utilizar o gradiente descendente***.
- Entretanto, como aprendemos anteriormente, podemos usar a ***regra de aprendizado do perceptron*** para treinar o modelo.
- É uma regra ***simples e intuitiva*** para atualização dos pesos do modelo.





Regra de aprendizado do perceptron

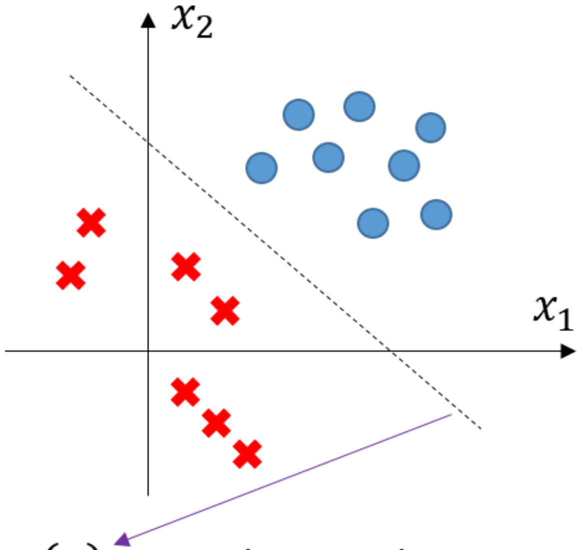
- No caso do perceptron, onde $g(\boldsymbol{x})$, por definição, é um ***hiperplano***, a ***regra converge*** para uma ***solução perfeita***, se e somente se, as classes forem ***linearmente separáveis***.
  - Classes ***suficientemente espaçadas*** e que podem ser separadas por um ***hiperplano***.
- A ***equação de atualização dos pesos*** é definida como

$$\boldsymbol{w} \leftarrow \boldsymbol{w} + \alpha(y - \hat{y})\boldsymbol{x},$$

onde $\boldsymbol{w}$ é o vetor de pesos, α é o passo de aprendizagem, y é o valor de saída esperado, $\hat{y}$ é a saída do modelo, i.e., $f(g(\boldsymbol{x}))$, e $\boldsymbol{x}$ é o vetor de atributos.

- Percebam que a equação acima é idêntica a da atualização do gradiente descendente estocástico, mas ela só tem 3 possibilidades.

Perceptron

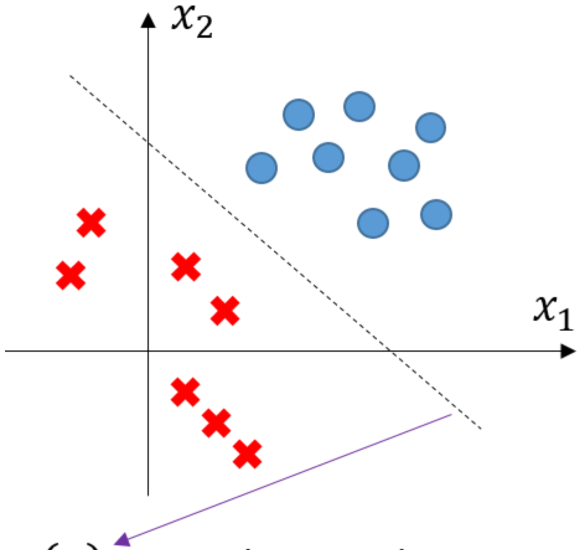


$g(\boldsymbol{x}) = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 = 0$

A separação das duas classes ocorre onde $g(\boldsymbol{x}) = 0$.

- Como percebemos, o ***perceptron*** é *idêntico* ao ***classificador binário com limiar de decisão rígido***.
- Por definição, o ***perceptron*** sempre utiliza ***superfícies de separação lineares***, ou seja, sempre teremos $g(\boldsymbol{x})$ como sendo a equação de um ***hiperplano***.

Perceptron

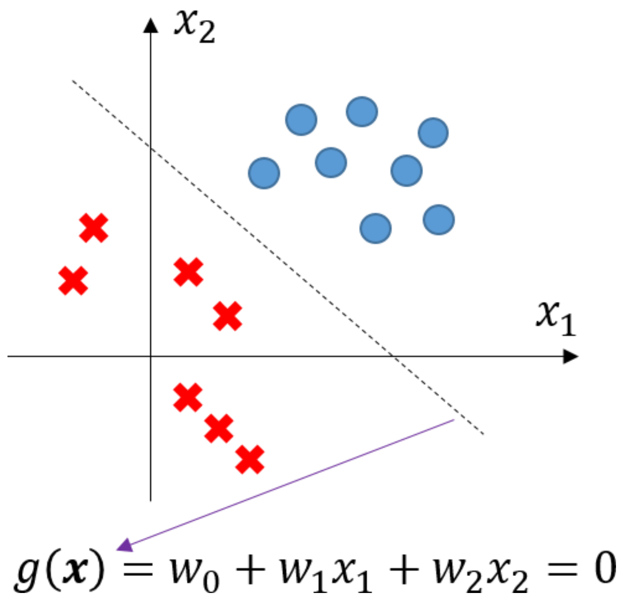


$g(\boldsymbol{x}) = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 = 0$

A separação das duas classes ocorre onde $g(\boldsymbol{x}) = 0$.

- Portanto, teoricamente, ***sem transformação dos atributos***, um ***único*** ***perceptron*** só é capaz de ***classificar*** dados que sejam ***linearmente separáveis*** (ou seja, separáveis por um ***hiperplano***).
- A figura ao lado ilustra isso para um caso bidimensional.
- A separação das duas classes ocorre onde $g(\boldsymbol{x}) = 0$.

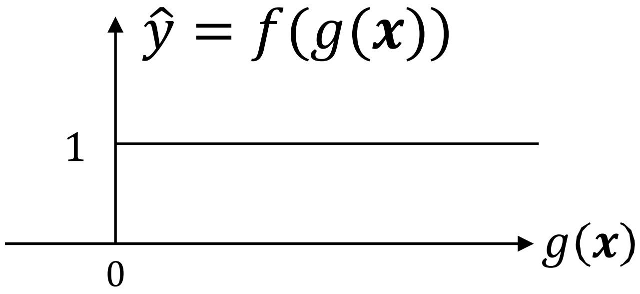
Perceptron



A separação das duas classes ocorre onde $g(\boldsymbol{x}) = 0$.

- Entretanto, como veremos na sequência, podemos ***combinar os resultados de vários perceptrons*** para criar ***superfícies de separação*** que separem dados ***que não sejam linearmente separáveis*** sem a necessidade de ***transformar os atributos***.
- Ou seja, não precisamos usar funções discriminantes, $g(\boldsymbol{x})$, com outros formatos (e.g., polinômios) que não sejam o de um hiperplano.

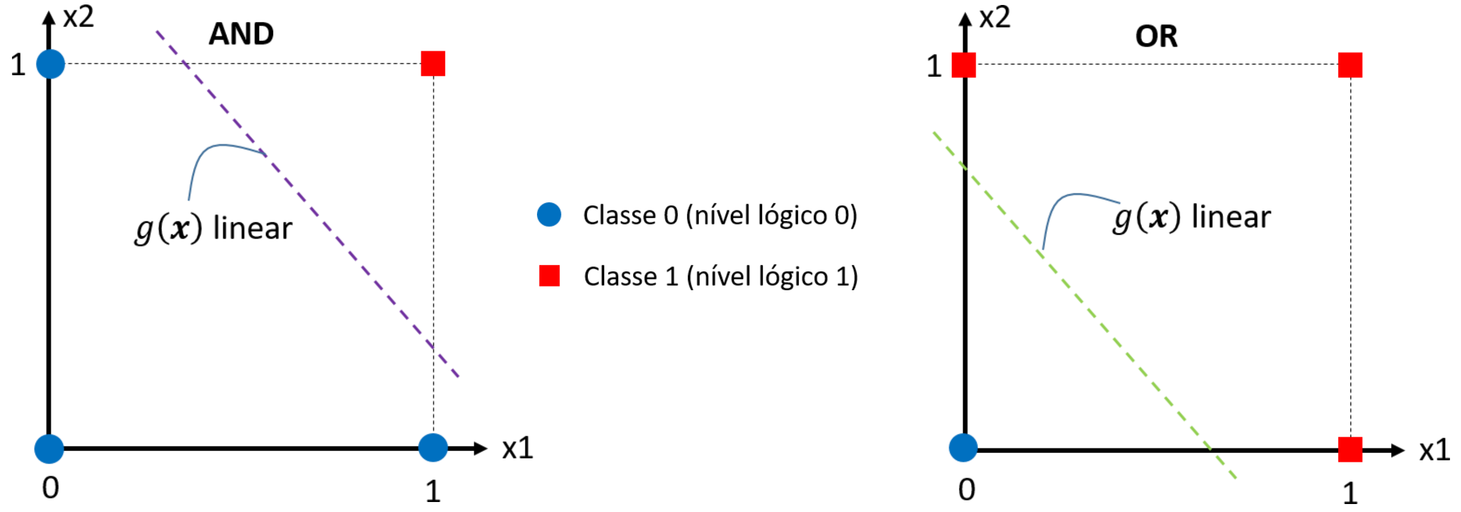
Perceptron



- Observem que, ao contrário do ***regressor logístico***, o ***perceptron não produz em sua saída a probabilidade da classe positiva***, em vez disso, ele faz ***predições rígidas***, i.e., ***confiantes***, em uma das duas classes.
- Essa é uma das razões para se preferir a ***regressão logística*** ao invés do ***perceptron***.
- Além disso, para se ***treinar perceptrons em conjunto*** (i.e., uma ***rede neural***), é necessário que as funções de ativação dos perceptrons sejam deriváveis.

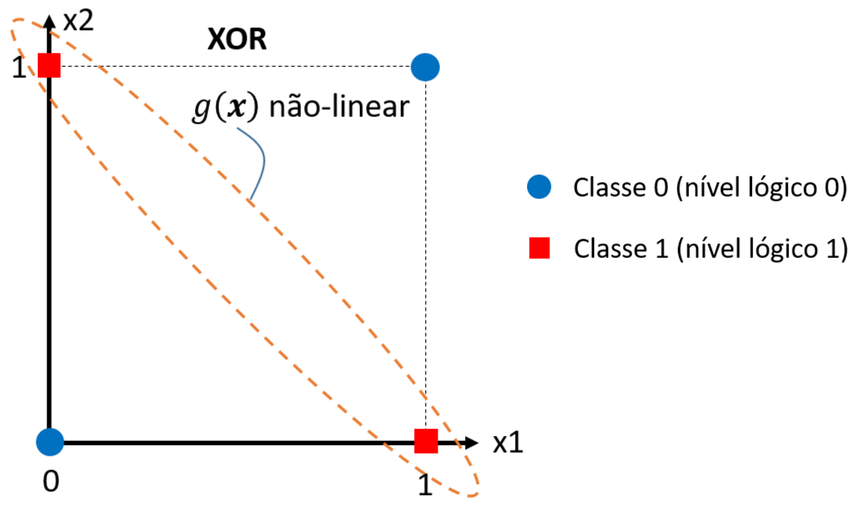
Exemplo: Perceptron com SciKit-Learn

- Por serem ***linearmente separáveis***, as lógicas AND e OR podem ser separadas por um único perceptron.
- As figuras abaixo demonstram que uma simples reta consegue separar os dados das duas lógicas.



[Exemplo: Perceptron.ipynb]

Perceptron e o problema da lógica XOR

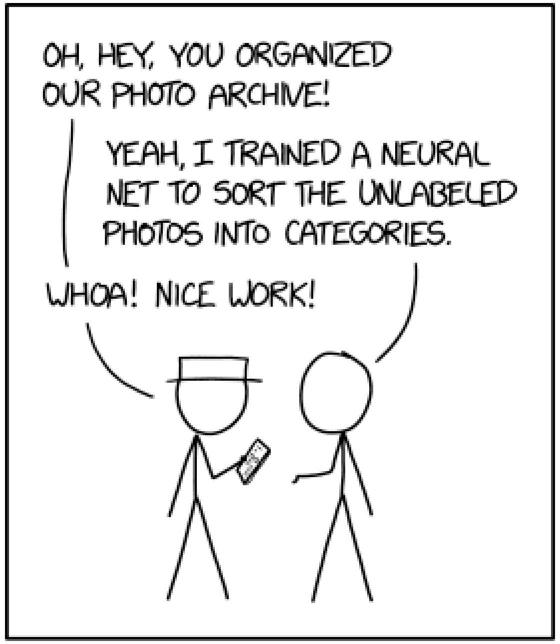


- Porém, a lógica XOR ***não é linearmente separável*** e necessita de uma ***superfície de separação não-linear***.
- Vejam na figura ao lado que são necessárias ***no mínimo duas retas paralelas***.
- ***A separação da lógica XOR pode ser obtida combinando-se o resultado alguns perceptrons***, o que resultará em uma superfície de separação não linear.
- Qual o número mínimo de perceptrons?

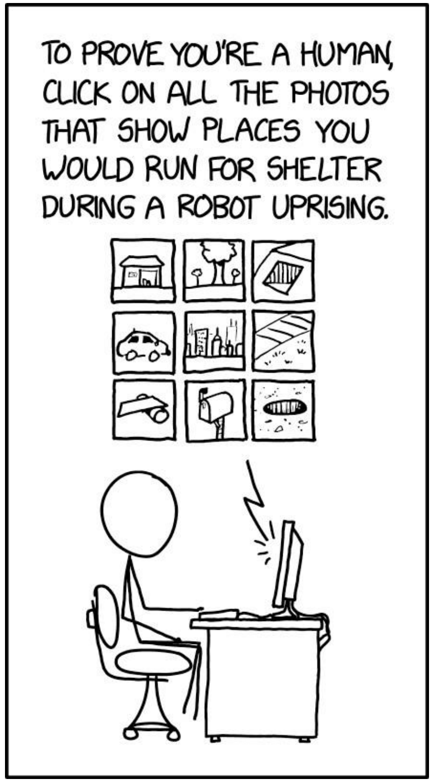
Avisos

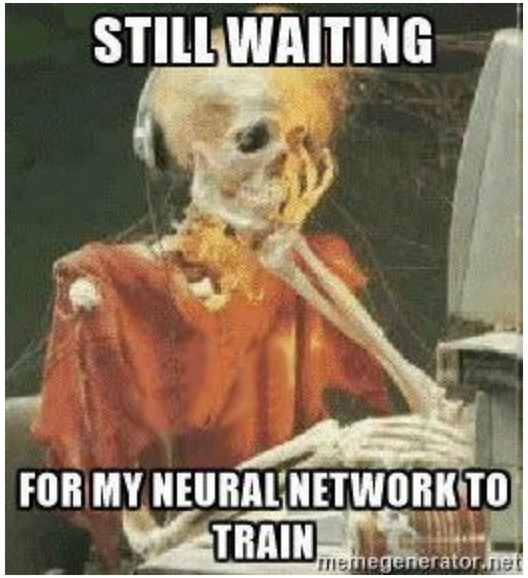
- Vocês já podem fazer os exercícios da lista #10.

Obrigado!

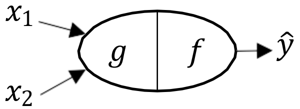


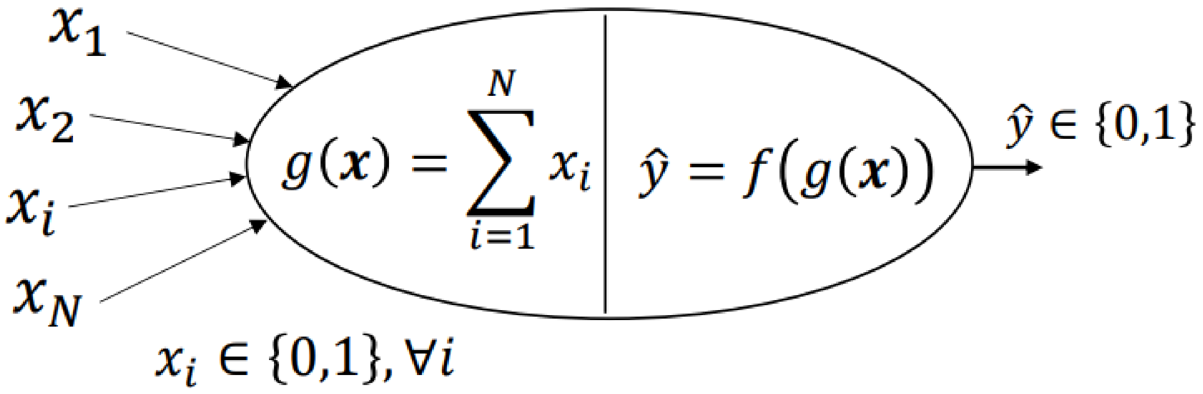
ENGINEERING TIP:
WHEN YOU DO A TASK BY HAND, YOU CAN TECHNICALLY SAY YOU TRAINED A NEURAL NET TO DO IT.

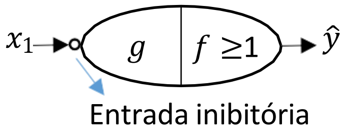


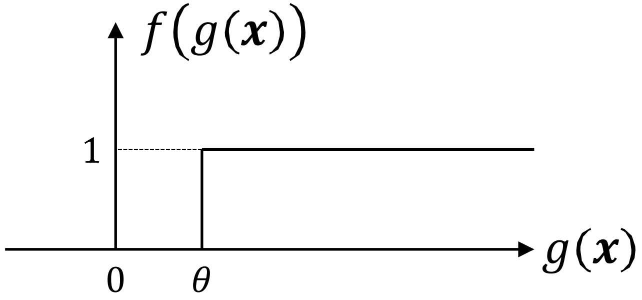


Figuras



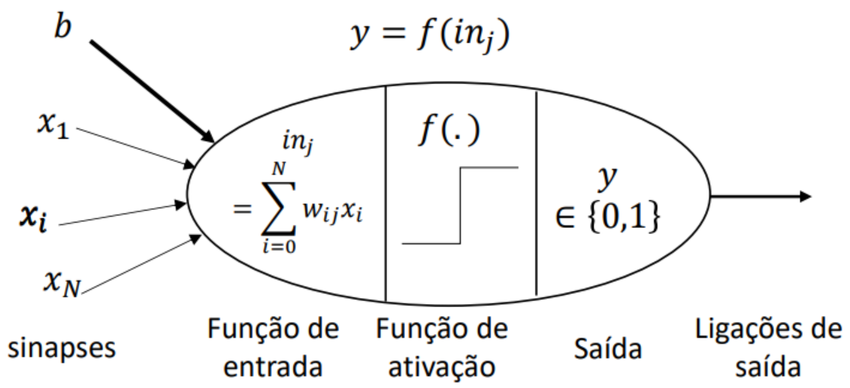


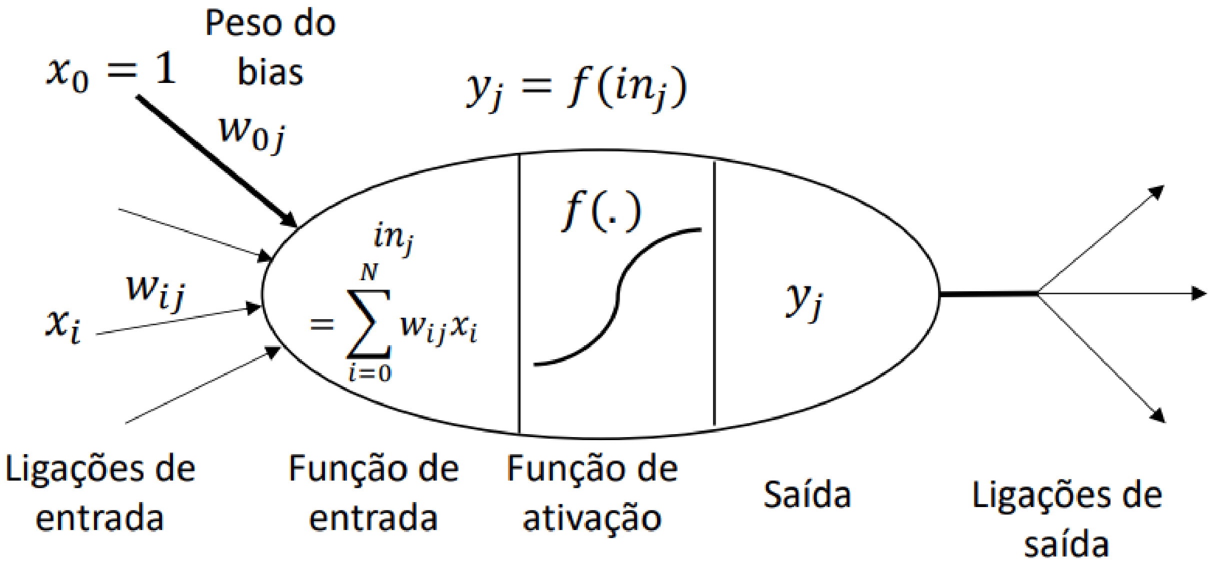




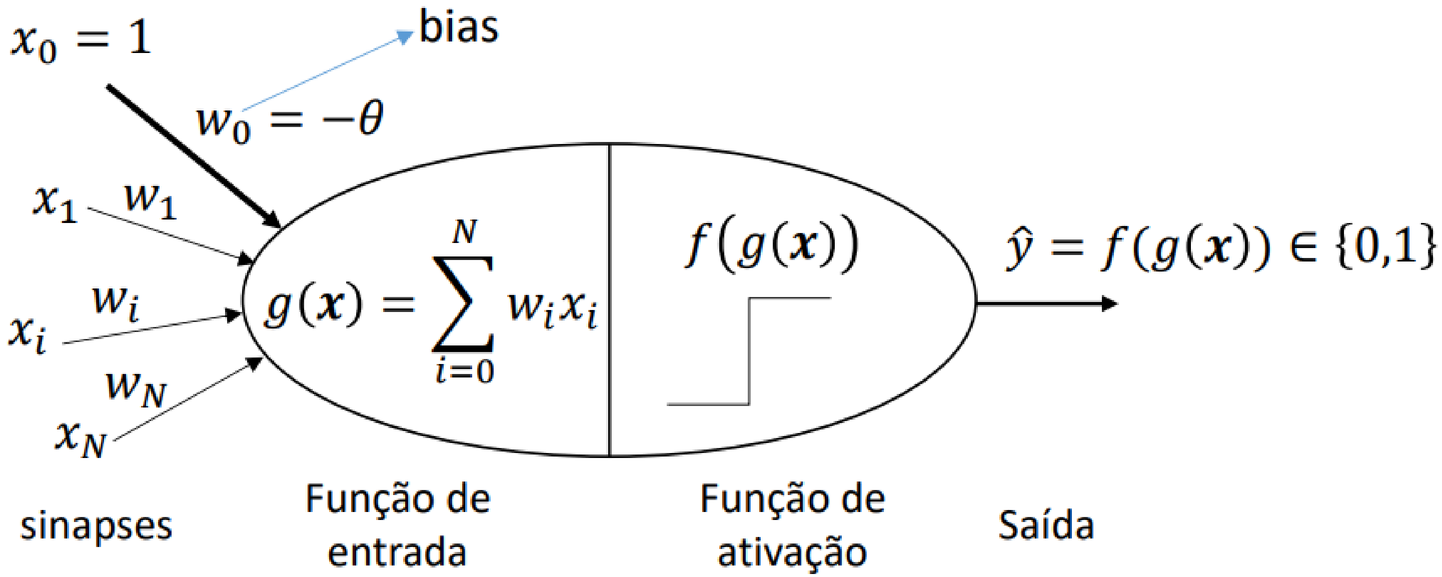
$$\hat{y} = f(g(\boldsymbol{x})) = \begin{cases} 1, & \text{se } g(\boldsymbol{x}) \geq \theta \\ 0, & \text{se } g(\boldsymbol{x}) < \theta \end{cases}$$

onde θ é o limiar de decisão.

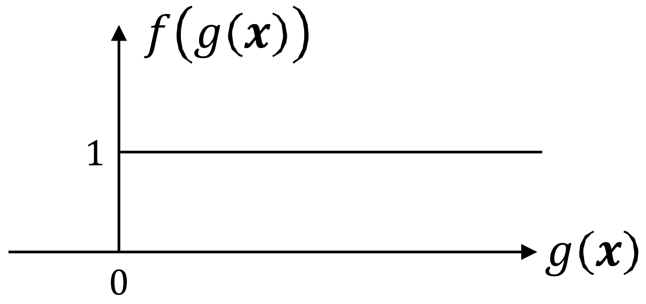

b
$y = f(in_j)$
x_1
x_i
x_N
$in_j = \sum_{i=0}^{N} w_{ij} x_i$
$f(.)$
$y \in \{0,1\}$
sinapses
Função de entrada
Função de ativação
Saída
Ligações de saída



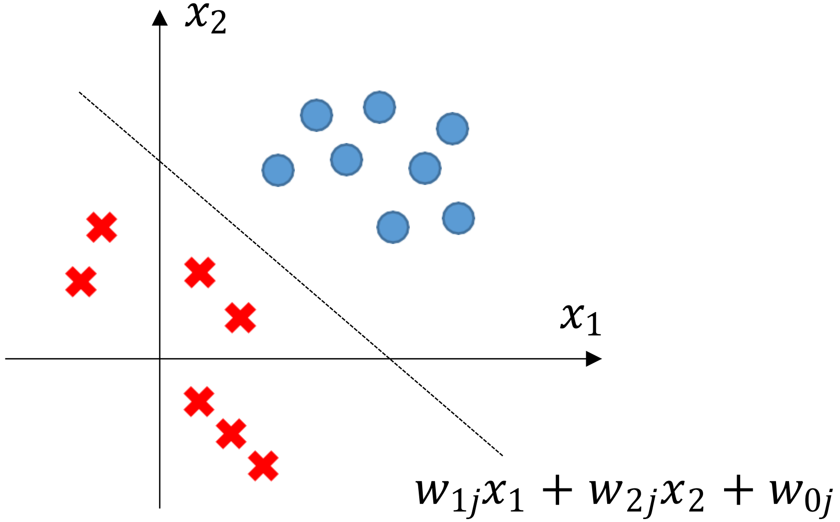
Peso do bias
$x_0 = 1$
w_{0j}
$y_j = f(in_j)$
x_i
w_{ij}
$in_j = \sum_{i=0}^{N} w_{ij} x_i$
$f(.)$
y_j
Ligações de entrada
Função de entrada
Função de ativação
Saída
Ligações de saída

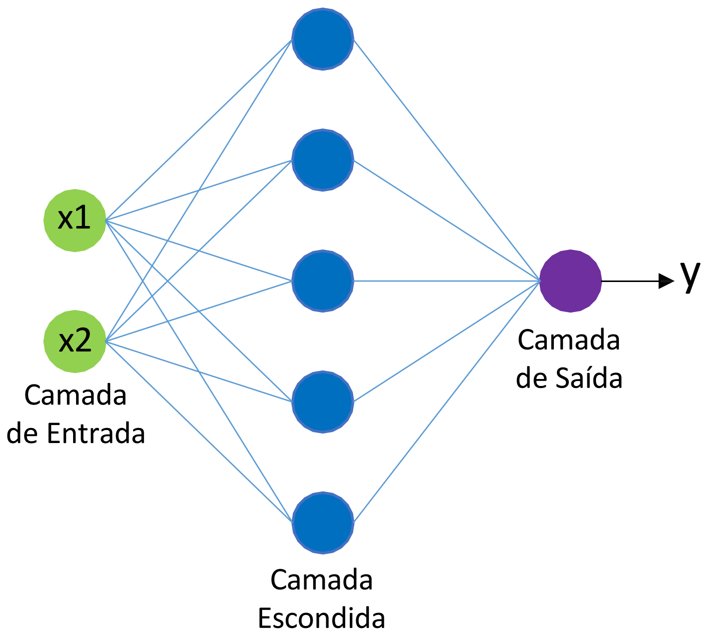


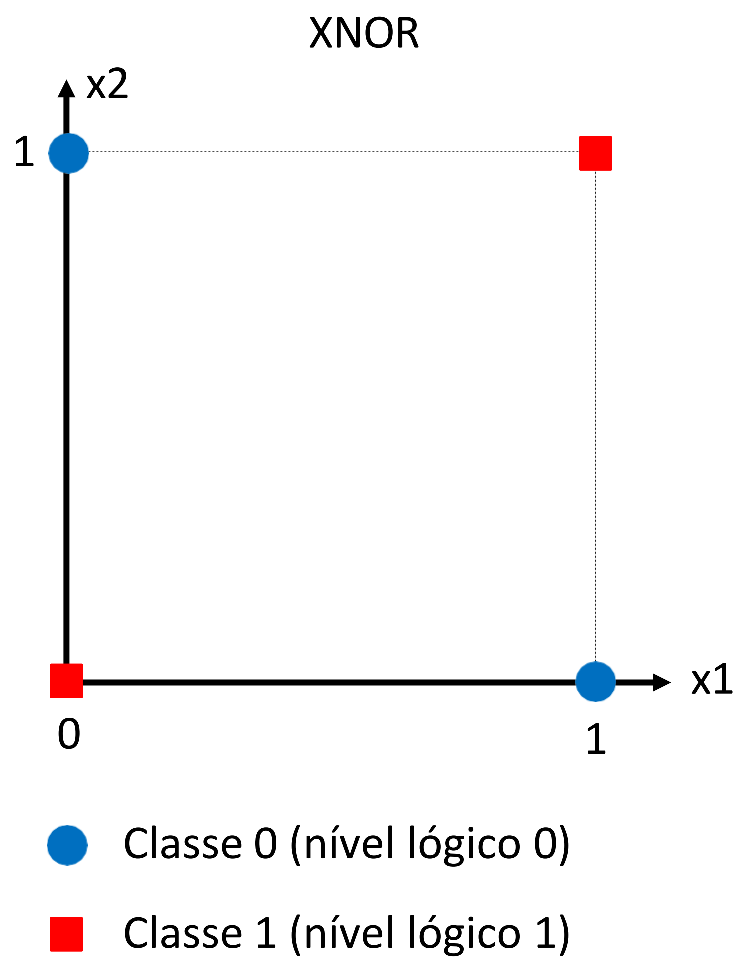
$x_0 = 1$
bias
$w_0 = -\theta$
x_1
w_1
w_i
x_i
w_N
x_N
$g(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=0}^{N} w_i x_i$
$f(g(\boldsymbol{x}))$
$\hat{y} = f(g(\boldsymbol{x})) \in \{0,1\}$
sinapses
Função de entrada
Função de ativação
Saída



$f(g(\boldsymbol{x}))$
1
0
$g(\boldsymbol{x})$


x_2
x_1
$w_{1j}x_1 + w_{2j}x_2 + w_{0j}$


x1
x2
Camada
de Entrada
Camada
Escondida
Camada
de Saída
y


XNOR
x2
1
x1
0
1
Classe 0 (nível lógico 0)
Classe 1 (nível lógico 1)