Perceptron Multi-camadas Treinada por Retropropagação

Aluizio Fausto Ribeiro Araújo

Universidade Federal de Pernambuco

Centro de Informática

Conteúdo

- Histórico
- Introdução
- Perceptron de Camadas Múltiplas
- Algoritmo de Retropropagação: Descrição, Funções, Capacidades e Exemplos
- Aproximação de Funções
- Arquivo de Treinamento para Generalização.
- Seleção de Modelo
- Protocolo de Treinamento
- Pontos Positivos e Negativos do MLP-BP
- Heurísticas para Melhoria de Desempenho do MLP-BP
- Técnicas para Melhoria do MLP-BP

Histórico

- O perceptron de Rosenblatt: Neurônio com pesos e bias ajustáveis.
- Teorema da convergência do perceptrom: Se padrões empregados para treinar o perceptron são extraídos de duas classes linearmente separáveis, então o algoritmo converge e posiciona uma superfície de decisão na forma de hiperplano para separar duas classes.
- Limitações do perceptron:
  - Resolve apenas casos linearmente separáveis.
  - A não-linearidade na ativação do perceptron (função limiar) não é diferenciável, logo não pode ser aplicada a camadas múltiplas.
- Um simples neurônio gera uma classe de soluções que não são gerais para resolver problemas mais complexos, justificando o aparecimento do Perceptron de Camada Múltipla (MLP).

Histórico

- Surgimento do MLP treinado por retropropagação (MLP-BP):
  - Widrow & Hoff (1960) introduzem o algoritmo mínimo quadrado médio (LMS), considerando uma rede de 3 camadas com pesos fixos da entrada para a camada escondida e pesos ajustáveis (regra delta) da camada escondida para a de saída.
  - Desenvolvimento do MLP-RP:
    - Filtro de Kalman (Kalman 1960, Bryson,Denham,Dreyfus 1963,1969).
    - Werbos: Tese de doutorado (Havard University, 1974): Beyond Regression: New Tools for Prediction and Analysis in the Behavioral Science.
    - Parker 1982,1985: "Learning logic: Casting the cortex of the human brain in silicon," TR-47, M.I.T. Center for Computational Research in Economics and Management Science, Cambridge, MA, Feb. 1985.
    - Rumelhart, Hinton, Williams: Learning internal representations by backpropagating errors, Nature 323(99),pp533-536, 1986.

Introdução

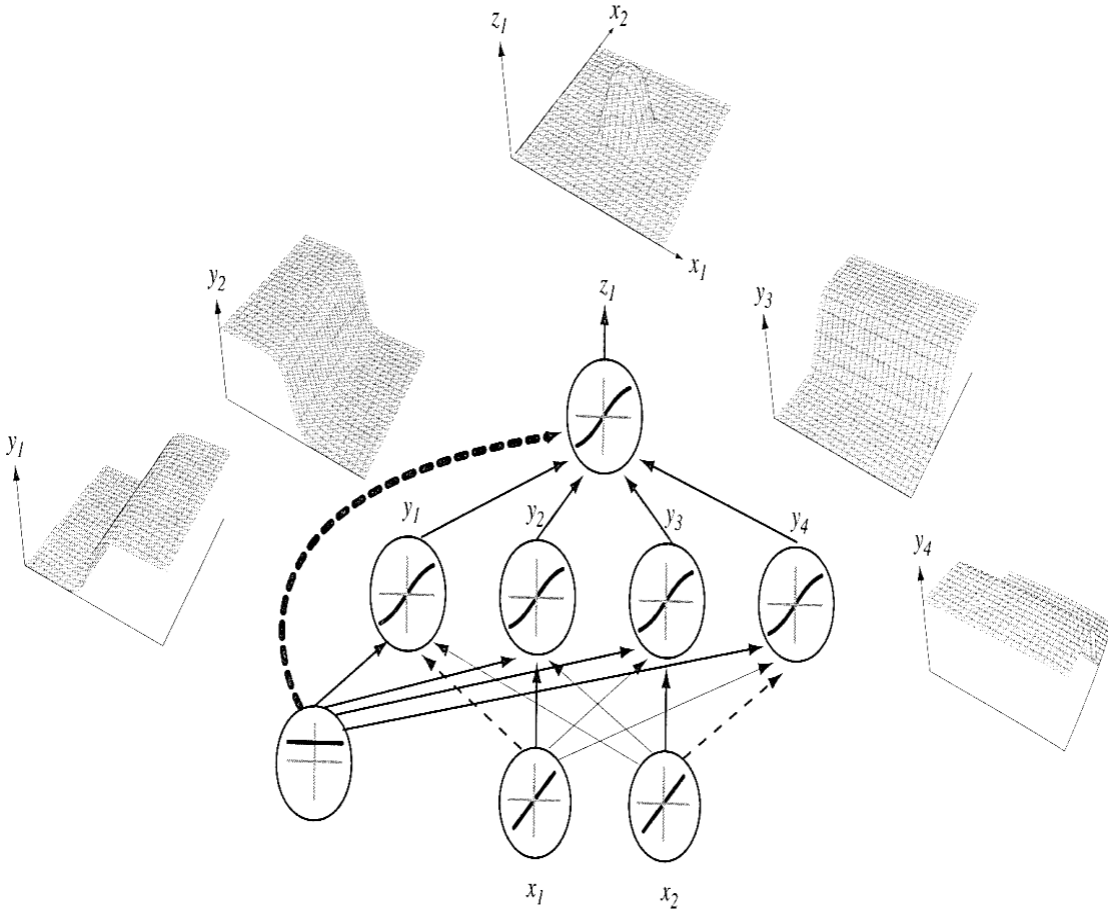
- A rede neural supervisonada chamada Perceptron multicamadas (*multilayer percetron*) utiliza métodos derivados do gradiente no ajustes de seus pesos por retropropagação.
  - Esta rede consiste de uma camada de entrada, uma ou mais camadas escondidas e uma camada de saída. Um sinal de entrada é propagado, de camada em camada, da entrada para a saída.
  - MLP é treinada com um algoritmo de retropropagação do erro.
- Estágios da aprendizagem por retropropagação do erro:
  - Passo para frente: Estímulo aplicado à entrada é propagado para frente até produzir resposta da rede.
  - Passo para trás: O sinal de erro da saída é propagado da saída para a entrada para ajuste dos pesos sinápticos.

Introdução

- A MLP apresenta três características importantes:
  - Cada unidade de processamento tem função de ativação logística (forma sigmoidal) que é não-linear, suave e diferenciável.
  - Existência de ao menos uma camada escondida que possibilita aprendizagem de tarefas complexas por extração progressiva de características relevantes dos padrões de entrada.
  - O grau de conectividade é alto.
- As limitações de um Percepton simples devem desaparecer quando se utiliza camadas intermediárias, ou escondidas, entre as camadas de entrada e de saída.
- O emprego de Redes MLP aumentou com a introdução do método retropropagação para aprendizagem.

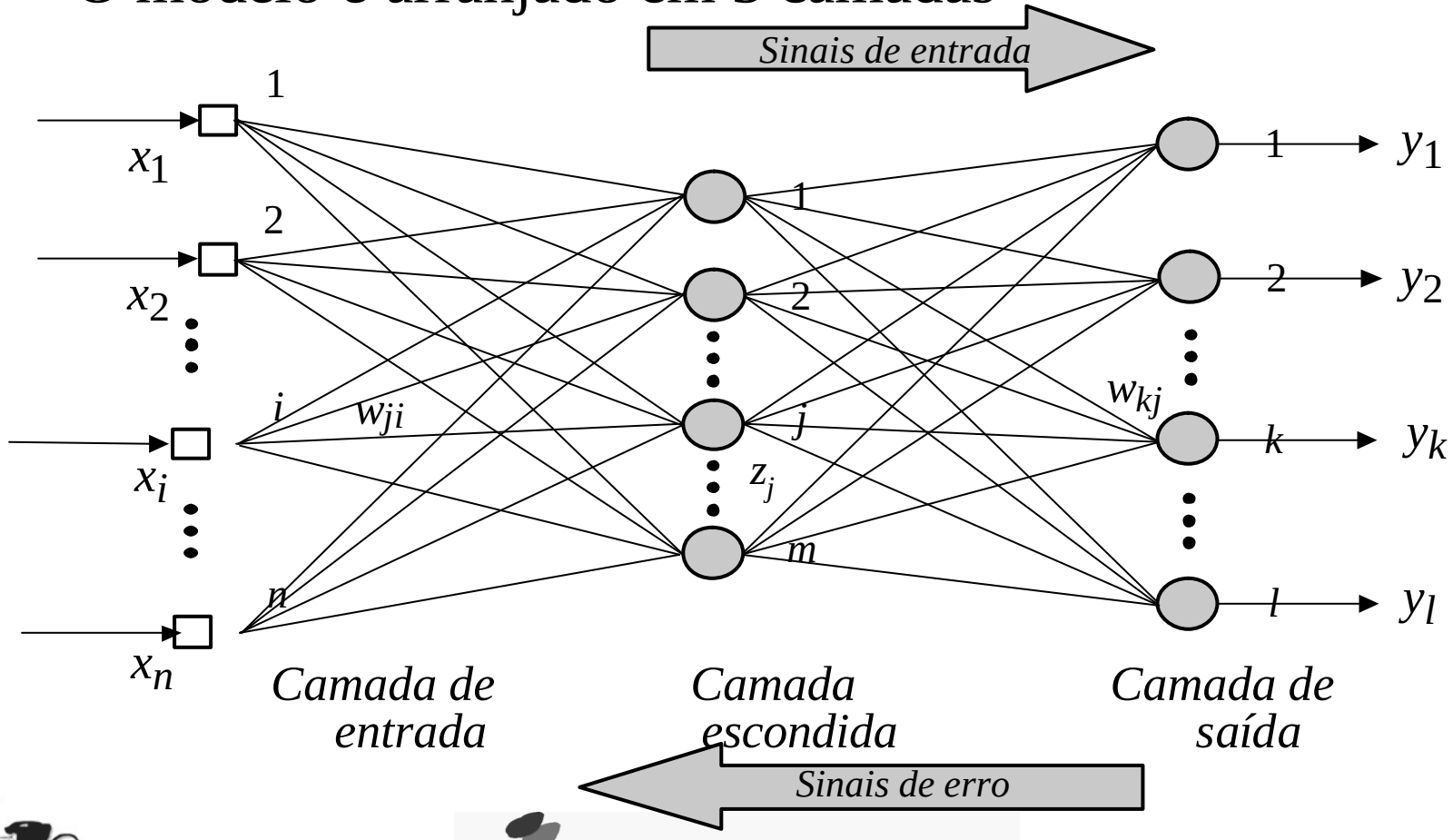
Introdução

- Sumário da MLP-RP
  - Camada de entrada
  - Camada escondida
  - Camada de saída
  - Unidade de bias
  - $net_j = \mathbf{w}^t_j \mathbf{x}$
  - $y_j = f(net_j)$
  - $f(net_k) = \text{Sigm}(net_k)$
  - $z_k = f(net_k)$



Perceptron de Camadas Múltiplas

- O modelo é arranjado em 3 camadas



Algoritmo MLP-BP

- Sinal de erro para a unidade *k* na iteração *n*: $e_k(n) = t_k(n) - y_k(n)$
- Erro total:
  - *C* é o conjunto de nodos de saída.

$$E(n) = \frac{1}{2}\sum_{k \in C} e_k^2(n)$$

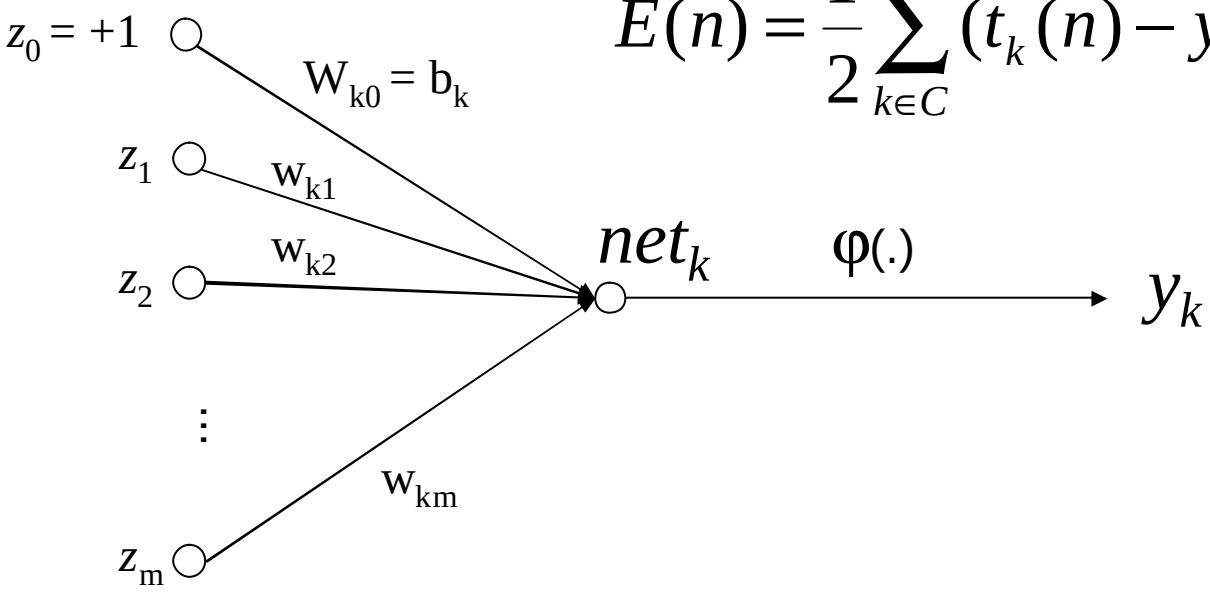
- Erro quadrado médio:
  - Média sobre todo conjunto de treinamento.
  - *Npad* é o número de padrões.

$$E_{av} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{Npad} E(n)$$

- Processo de aprendizagem: Ajusta parâmetros (pesos sinápticos) para minimizar *Eav*.
- Pesos são atualizados padrão a padrão até completar uma época (apresentação completa do conjunto de treinamento).

Algoritmo MLP-BP

- Notação:



$$E(n) = \frac{1}{2}\sum_{k \in C}(t_k(n) - y_k(n))^2$$

$$net_k(n) = \sum_{i=0}^{m} w_{ki}(n)\, z_i(n) \qquad y_k(n) = j_{\,k}(net_k(n))$$

Algoritmo MLP-BP

- Atualização dos pesos

$$\mathbf{W}(n+1) = \mathbf{W}(n) + \Delta\mathbf{W}(n)$$

- Gradiente Descendente

$$\Delta w_{pq}(n) = -h \frac{\partial E(n)}{\partial w_{pq}(n)}$$

- Por simplicidade de notação, o índice *n* será retirado.

$$\Delta w_{pq} = -h \frac{\partial E}{\partial w_{pq}}$$

MLP-BP: Ajuste de pesos *j*->*k* (nodo *h*-*o*)

- Gradiente determina a direção de busca no espaço de pesos.

$$\frac{\partial E}{\partial w_{kj}} = \frac{\partial E}{\partial net_k}\frac{\partial net_k}{\partial w_{kj}} = -d_k \frac{\partial net_k}{\partial w_{kj}} \therefore \frac{\partial net_k}{\partial w_{kj}} = \frac{\partial}{\partial w_{kj}} \sum_{q=1}^{m} w_{kq} z_q = \sum_{q=1}^{m} \frac{\partial w_{kq}}{\partial w_{kj}} z_q \therefore$$

$$\frac{\partial net_k}{\partial w_{kj}} = z_j, \quad \text{pois} \quad \frac{\partial w_{kq}}{\partial w_{kj}} = 0, \quad \frac{\partial w_{kj}}{\partial w_{kj}} = 1$$

- Sensibilidade descreve como o erro total se modifica com a atividade *net* de cada unidade.

$$d_k = -\frac{\partial E}{\partial net_k} = -\frac{\partial E}{\partial y_k}\frac{\partial y_k}{\partial net_k} = (t_k - y_k) j'_k(net_k)$$

  - Ajuste para nodo *h*-*o*: $\Delta w_{kj} = h d_k z_j = h(t_k - y_k) j'_k(net) z_j$

MLP-BP: Ajuste de pesos *i->j* (nodo *i-h*)

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial E}{\partial z_j}\frac{\partial z_j}{\partial net_j}\frac{\partial net_j}{\partial w_{ji}}, \qquad \text{onde} \qquad \frac{\partial E}{\partial z_j} = \frac{\partial}{\partial z_j}\left[\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{l}(t_k - y_k)^2\right] \therefore$$

$$\frac{\partial E}{\partial z_j} = -\sum_{k=1}^{l}(t_k - y_k)\frac{\partial y_k}{\partial z_j} = -\sum_{k=1}^{l}(t_k - y_k)\frac{\partial y_k}{\partial net_k}\frac{\partial net_k}{\partial z_j} = -\sum_{k=1}^{l}(t_k - y_k)j'_k(net_k)w_{kj}$$

$$\frac{\partial z_j}{\partial net_j} = j'_j(net_j); \qquad \frac{\partial net_j}{\partial w_{ji}} = x_i;$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ji}} = \left(-\sum_{k=1}^{l}(t_k - y_k)j'_k(net_k)w_{kj}\right)\left(j'_j(net_j)\right)(x_i) = \left(-\sum_{k=1}^{l}d_k w_{kj}\right)\left(j'_j(net_j)\right)(x_i)$$

$$\Delta w_{ji} = hd_j x_i = h\left[\sum_{k=1}^{l}w_{kj}d_k\right]j'_j(net_j)x_i$$

MLP-BP: Resumo da Aprendizagem

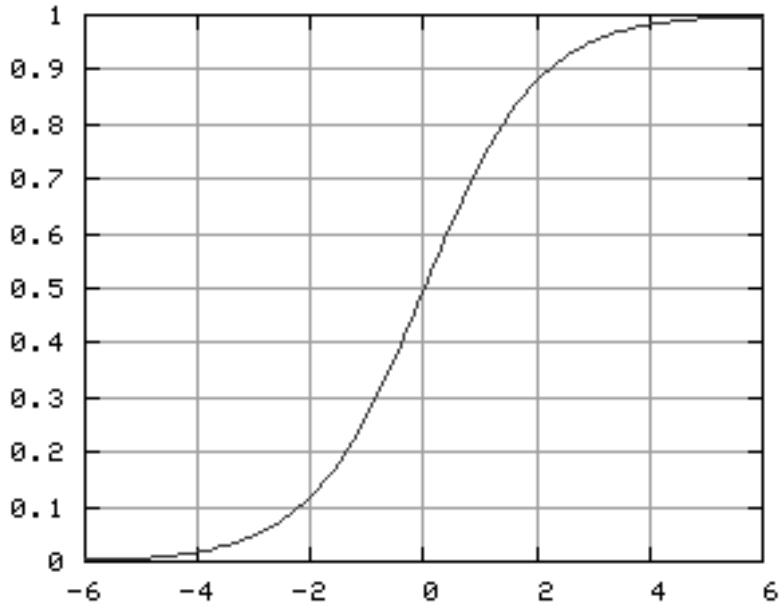
$$\begin{pmatrix}\text{correção}\\ \text{no peso}\\ \Delta w_{ji}(n)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\text{taxa de}\\ \text{aprendizagem}\\ h\end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix}\text{sensibilidade}\\ \delta_j(n)\end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix}\text{sinal de entrada}\\ \text{para nodo } j\\ y_i(n)\end{pmatrix}$$

$$net_j(n) = \sum_{i=0}^{m} w_{ji}(n)\, x_i(n) \qquad y_j(n) = j_j(net_j(n))$$

- Passagem entrada-saída
- Passagem saída-entrada
  - Compute recursivamente gradiente local δ
    - Da camada de saída para a de entrada
  - Modifique os pesos pela regra delta

MLP-BP: Funções de Ativação

- Função Sigmoide

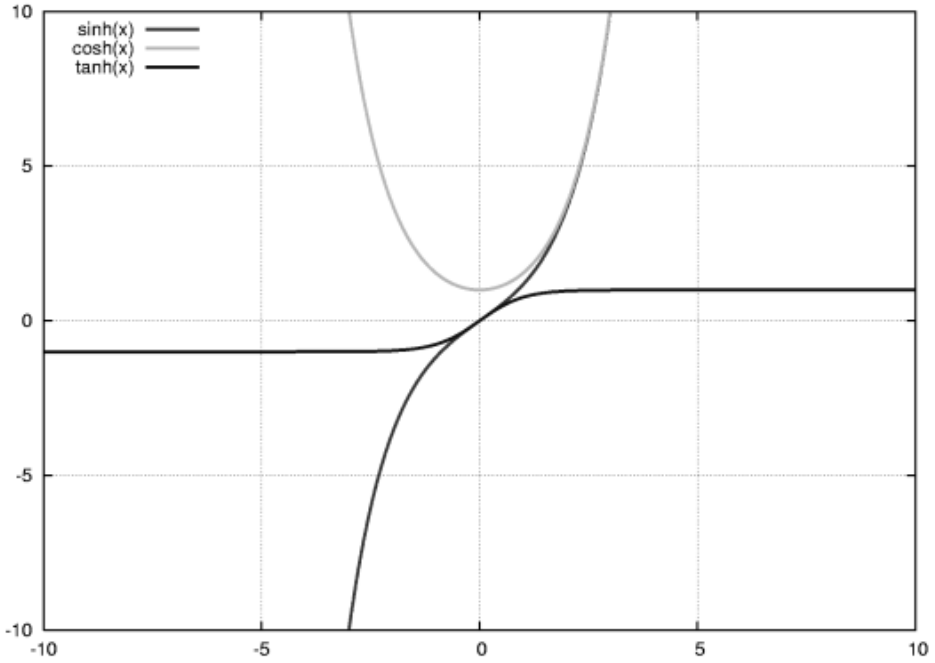


$$y_j = j(net_j) = \frac{1}{1+\exp(-a \cdot net_j)} \quad a > 0 \text{ and } -\infty < net_j < \infty$$

$$j'(net_j) = \frac{1}{1+\exp(-a \cdot net_j)} \frac{a \cdot [1+\exp(-a \cdot net_j) - 1]}{1+\exp(-a \cdot net_j)} = a \cdot y_j [1 - y_j]$$

MLP-BP: Funções de Ativação

- Função Tangente hiperbólica

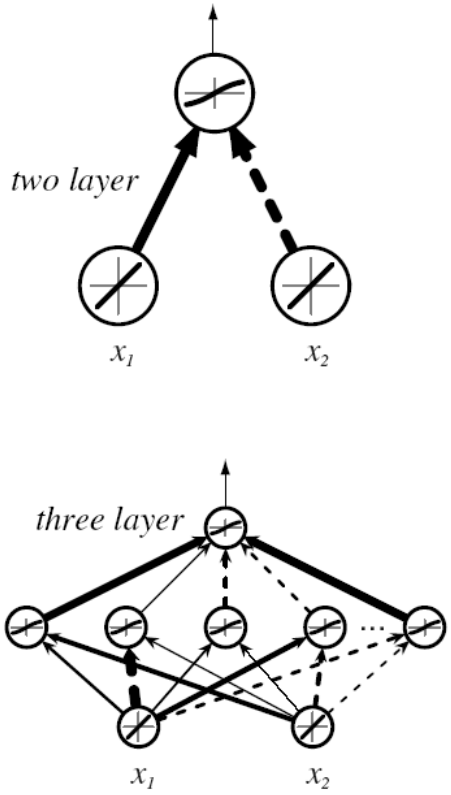


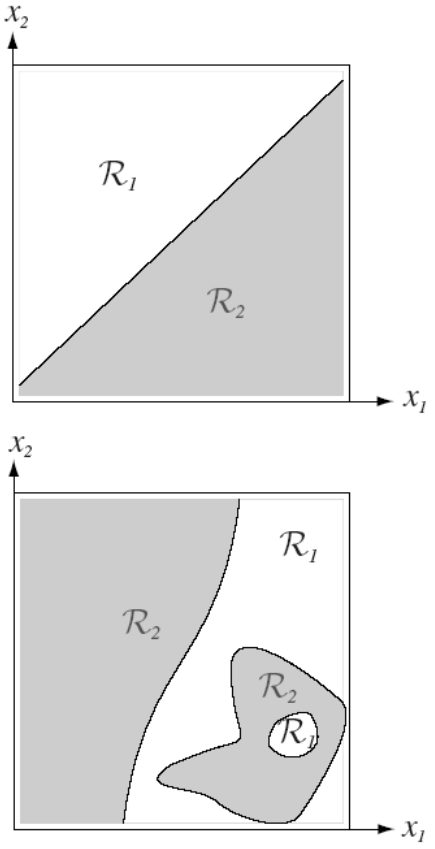
$$j(net_i) = a \cdot \tanh(b \cdot net_j) \qquad (a,b) > 0$$

$$j'(net_i) = a \cdot b \cdot \operatorname{sech}^2(b \cdot net_j) = a \cdot b(1 - \tanh^2(b \cdot net_j)) = \frac{b}{a}[a - y_j][a + y_j]$$

Poder Expressivo da MLP-PB

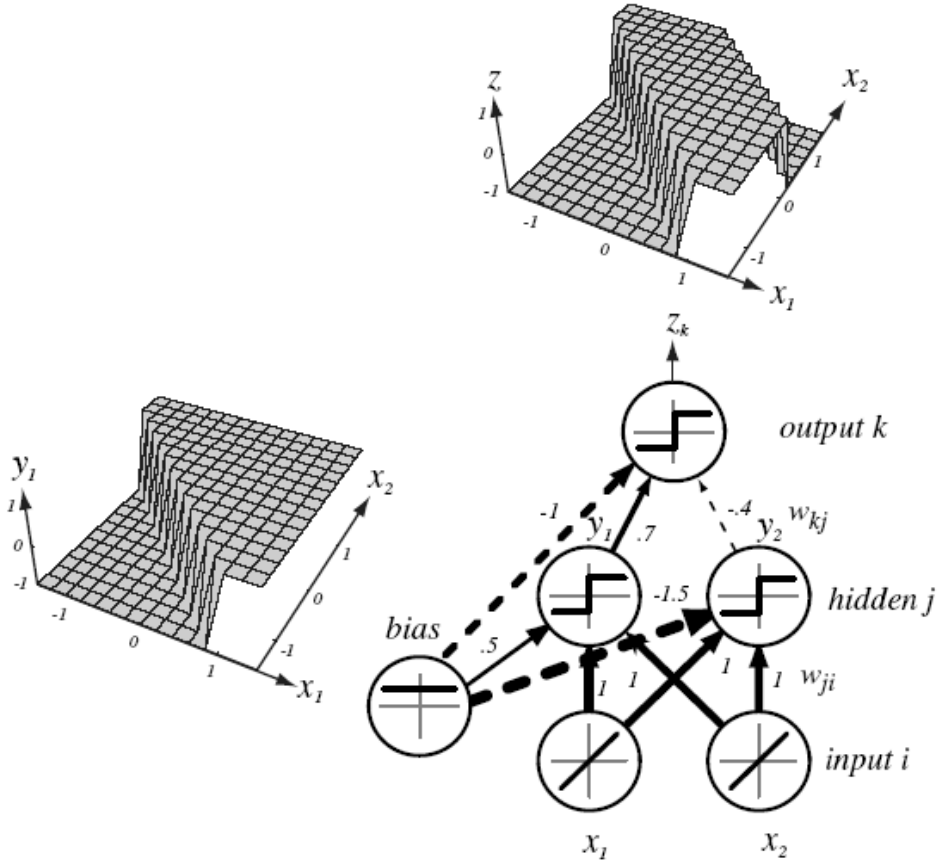
- Qualquer transformação pode ser implementada por 3 camadas?
  - Sim, qualquer função contínua da entrada para a saída pode ser implementada com número suficiente de nodos escondidos.
  - Prova-se pelo teorema de Kolmogorov.



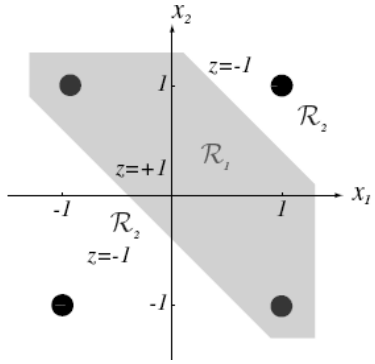


Poder Expressivo da MLP-PB

- Porta XOR: Operação da rede

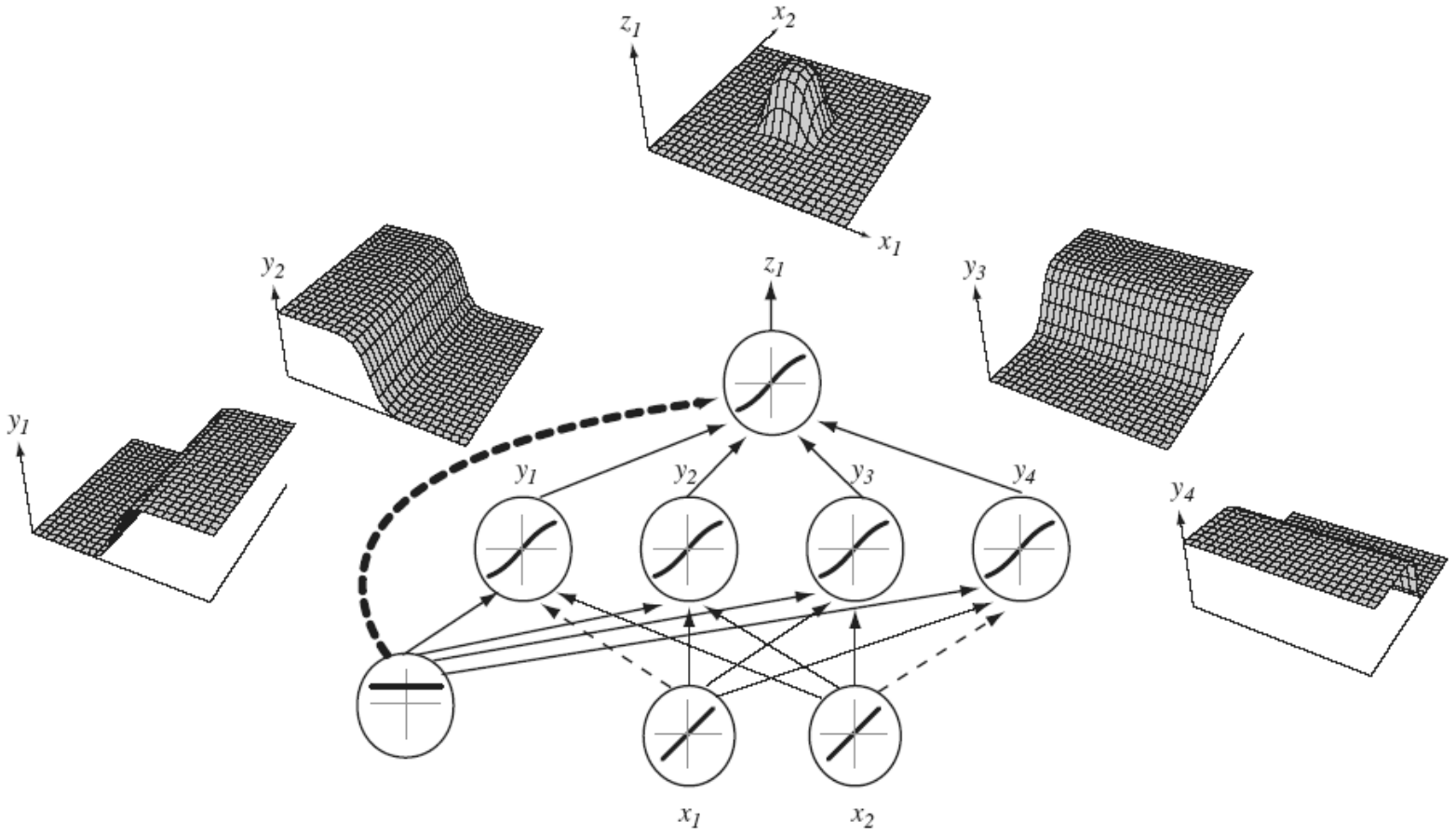


Divisão de classes



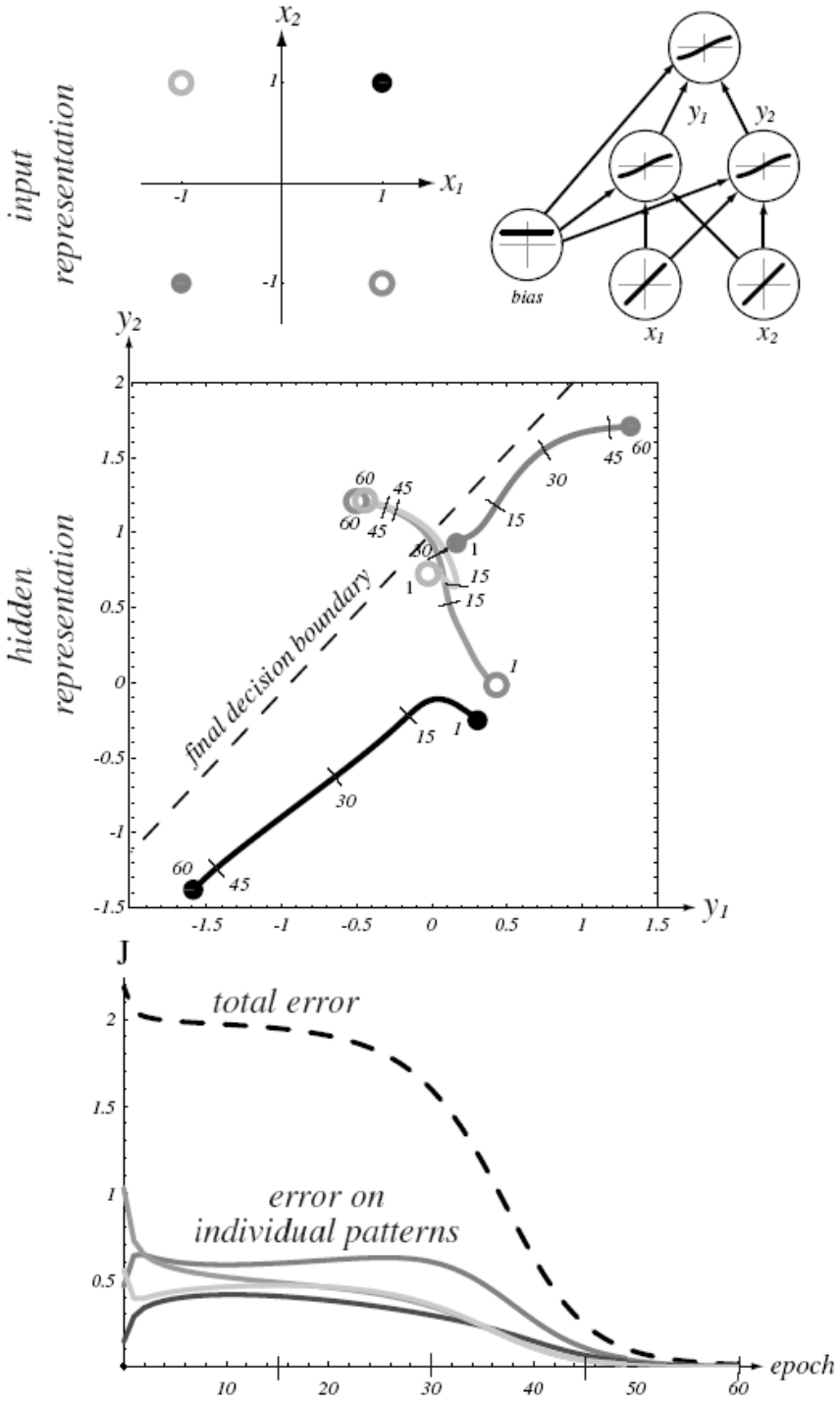
Poder Expressivo da MLP-PB

- Exemplo de operação



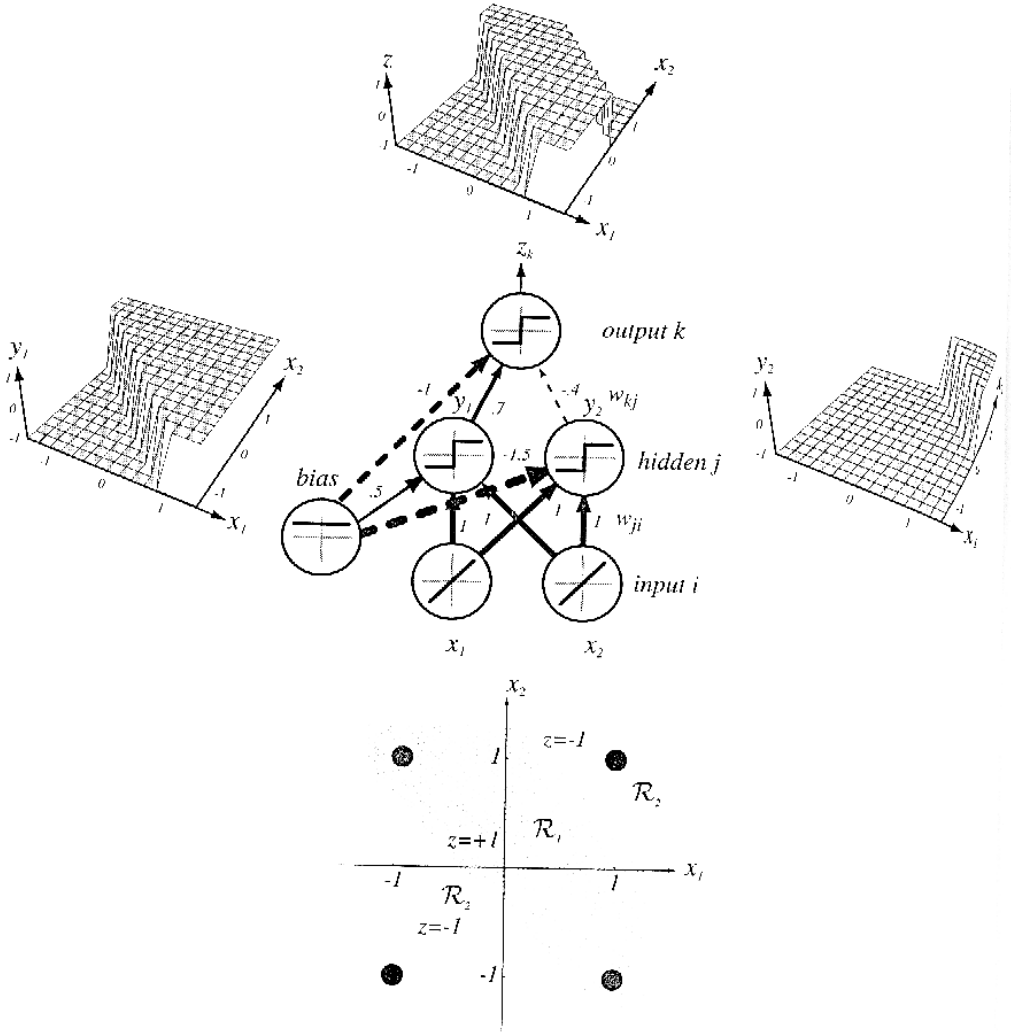
MLP-BP: Exemplo

- Detector de Características:
  - Unidades escondidas atuam como detectores de características.
  - O progresso da aprendizagem leva as unidades escondidas a descobrirem gradualmente característica salientes dos dados de treinamento.
  - Transformação não-linear do espaço de entrada para o de características.
  - Semelhança com o discriminante linear de Fisher.



MLP-BP: Exemplo

- **Porta XOR:**
  - (x_1 OR x_2) AND NOT (x_1 AND x_2)
  - $y_1 : x_1 + x_2 + 0.5 = 0$
  - > 0 -> $y_1 = 1$, de outro modo –1
  - $y_2 : x_1 + x_2 - 1.5 = 0$
  - > 0 -> $y_2 = 1$, de outro modo –1



Aproximação de Funções

- Uma MLP-BP pode ser vista como um mecanismo para construir um mapeamento entrada-saída não-linear.
  - Questão fundamental: O número de camadas escondidas na MLP para se construir um mapeamento contínuo.
- Teorema da Aproximação Universal:
  - Definido como um teorema de existência no sentido que ele provê a justificativa matemática para aproximação de uma função arbitraria e contínua em contraposição a uma representação exata.
  - A equação ($F(.)$) que fundamenta o teorema generaliza aproximações através de uma série de Fourier.

Aproximação de Funções

Teorema da aproximação universal : Seja $j(\cdot)$ uma função não constante, limitada, monotonicamente crescente e contínua. Seja I_{m_0} o hipercubo unitário m_0 - dimensional $[0,1]^{m_0}$. O espaço de funções contínuas sobre I_{m_0} é denotado por $C(I_{m_0})$. Então, dada uma função f, com $C(I_{m_0}) \in f$ e $e > 0$, existe um inteiro M e conjuntos de constantes reais a_i, b_i e w_{ij}, onde $i = 1, \ldots, m_1; j = 1, \ldots, m_0$ tal que pode-se definir :

$$F(x_1, x_2, \ldots, x_{m_0}) = \sum_{i=1}^{m_1} a_i j \left(\sum_{j=1}^{m_0} w_{ij} x_j + b_i \right)$$ como uma realização aproximada da função $f(\cdot)$, isto é $\left| F(x_1, x_2, \ldots, x_{m_0}) - f(x_1, x_2, \ldots, x_{m_0}) \right| < e$

$x_1, x_2, \ldots, x_{m_0}$ contido no espaço de entrada.

Aproximação de Funções

- O teorema é diretamente aplicável a uma Perceptron MLP pois
  - A função logística é não-constante, limitada, monotonicamente crescente e contínua.
  - A equação ($F(.)$) representa a saída da rede se for suposto que:

- A rede neural tem m_0 unidades de entrada, m_1 unidades escondidas na única camada escondida e sua entrada é denotada por $x_1, x_2, \ldots, x_{m_0}$.

- Cada neurônio tem pesos sinápticos $w_{i_1}, w_{i_2}, \ldots, w_{m_0}$ e bias b_i.

- A saída da rede é a combinação linear das saídas das unidades escon - didas com $a_1, a_2, \ldots, a_{m_1}$ definindo os pesos sinápticos da camada de saída.

Aproximação de Funções

- Teorema da Aproximação Universal
  - Existência de aproximação de função contínua arbitrária.
  - Um camada escondida simples é suficiente para a MLP-BP computar uma aproximação uniforme ε para um conjunto de treinamento.
  - Uma camada escondida única é a melhor opção pois tem baixo tempo de treinamento, é fácil de implementar e generalizar.
- Fronteira de Erros de Aproximação de Nodo Escondido:
  - Quanto maior for o número de nodos escondidos, mais acurada é a aproximação.
  - Quanto menor for o número de nodos escondidos, mais acurada é o ajuste (interpolação) empírico.

Arquivo de Treinamento para Generalização

- Uma rede neural generaliza se seu mapeamento entrada-saída for completo ou aproximadamente correto para os dados de teste.
  - O processo de treinamento pode ser visto como a solução de um problema de ajuste de curva para interpolação não-linear dos dados de entrada.
  - Uma RN deixa de generalizar quando está sobretreinada, isto é, quando aprende muitos pares entrada-saída e passa a considerar características não gerais para o conjunto de padrões. Assim, ocorre memorização analogamente a uma tabela *look-up*.
  - É importante buscar mapeamentos não-lineares suaves (*smooth*) para demandar menos esforço computacional.

Arquivo de Treinamento para Generalização

- Occam's Razer
  - Encontra a função mais simples entre várias que satisfazem condições desejadas.
- Fatores que influenciam generalização :
  - Conjunto de treinamento: Tamanho e sua representatividade do ambiente por este conjunto deve ser compatível com a arquitetura fixa da rede neural.
  - Arquitetura da rede neural: Ela deve ser boa o suficiente para generalizar, pressupondo um conjunto de treinamento fixo.
  - Complexidade física do problema tratado. Este fator independe do usuário ou pesquisador.

Seleção de Modelo

- Seleção de MLP-BP com o melhor número de pesos dados N amostras de treinamento. Deve-se encontrar *r*: para minimizar erro de classificação do modelo treinado pelo conjunto de estimação e testado pelo conjunto de validação.

$$r = \frac{\text{tamanho do conjunto de validação}}{\text{tamanho do conjunto de estimação} + \text{tamanho do conjunto de validação}}$$

  - Sugestão: $r = 0.2$

- Kearns(1996) levantou as propriedades qualitativas de *r* ótimo:
  - Análise com Dimensão VC.
  - Em problemas de baixa complexidade (# de respostas desejadas comparado ao número de amostras), desempenho da validação cruzada é insensível a *r*.
  - Um único *r* pode ser adequado para um conjunto grande de funções.

Protocolo de Treinamento

- Treinamento estocástico:
  - Seleção aleatória de amostras.
- Treinamento *Batch*
  - Época (Epoch): Apresentação simples de todos padrões de treinamento.
  - Pesos são atualizados apenas uma vez por época:

$$\Delta w_{ji}(n) = -h \frac{\partial E_{av}(n)}{\partial w_{ji}(n)} = -\frac{h}{N} \sum_{n=1}^{Npad} e_j(n) \frac{\partial e_j(n)}{\partial w_{ji}(n)}$$

Protocolo de Treinamento

- Modo Seqüencial:
  - Atualiza-se pesos para cada amostra de treinamento.
  - Menos armazenamento, maior velocidade de convergência.
  - Risco: Ordem seqüencial pode levar a convergências para ótimos locais.
- Treinamento on-line:
  - Dados de treinamento abundantes.
  - Alto custo para armazenamento.

Protocolo de Treinamento

- Maximização do conteúdo de informação: Todo exemplo propiciar mais pesquisa no espaço de pesos:
  - Uso de um exemplo que resulta no maior erro (exemplo difícil) com respeito às iterações prévias.
  - Uso de um exemplo radicalmente deferente do demais.
  - Emprego de ordem aleatória para apresentação de exemplos para assegurar propriedade de pertinência a uma dada classe.
  - Ênfase em tratar mais amostras difíceis que fáceis, tendo cuidado com a distorção da distribuição dos exemplos e com presença de "outliers".
- Valores alvos devem ser tratáveis pela função de ativação, isto é, o valor do padrão desejado deve ser atingido pela função.
  - Quando isto não acontece, os pesos podem tender a infinito.

Algoritmo MLP-BP

- Inicialize aleatoriamente pesos e bias;
- Enquanto E_{av} for insatisfatório e houver disponibilidade computacional:
  - Para cada padrão de entrada:
    - Compute a soma ponderada dos nodos escondidos;
    - Compute a resposta dos nodos escondidos;
    - Compute a soma ponderada dos nodos escondidos;
    - Compute a resposta dos nodos escondidos;
    - Modifique os pesos que chegam à camada de saída;
    - Modifique os pesos que chegam a cada uma das camadas escondidas;
  - Fim-do-Para
- Fim-do-Enquanto

Pontos Positivos de MLP-BP

- Alto Poder de Representação
  - Qualquer função L2 (função que sobre um intervalo finito possua número finito de descontinuidades) pode ser representada por MLP-BP.
  - Muitas destas funções podem ser aproximadas por uma MLP-BP.
- Larga Aplicabilidade
  - Requer conjunto de treinamento representativo;
  - Não requer significativos conhecimento a priori ou do domínio (problema mal estruturado).
  - Tolera dados ruidosos ou faltosos entre as amostras de treinamento.

Pontos Positivos de MLP-BP

- Facilidade de implementar a aprendizagem:
  - O algoritmo é de simples implementação;
  - Funções empregadas e suas derivadas existem.
- Capacidade de Generalização:
  - Produz bons resultados para padrões não treinados.

Pontos Negativos de MLP-BP

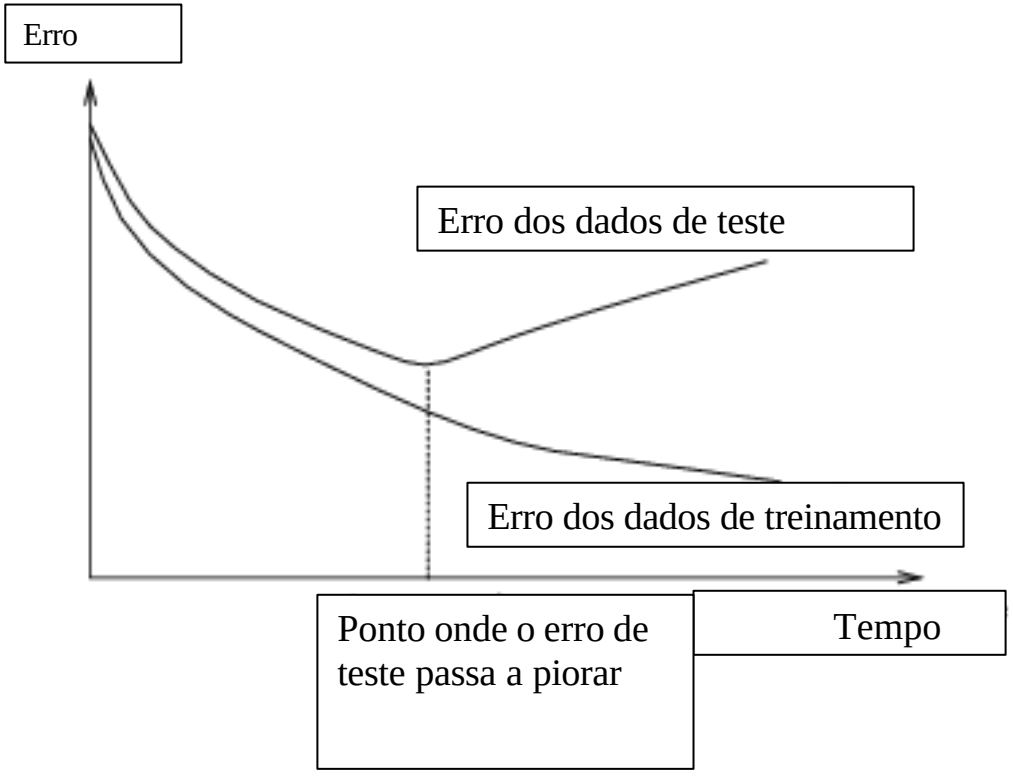
- Aprendizagem de transformações complexas pode demorar para convergir.
- Visualização da MLP-BP como uma caixa preta:
  - Constrói mapeamento mas não justifica as associações.
  - Não explica resultados intuitivamente pois a aprendizagem na camada escondida não tem significado claro no espaço do problema.
- Ausência de maneira teoricamente fundamentada (como em métodos estatísticos) para avaliar a aprendizagem:
  - Nível de confiança que alguém pode ter depois de treinar uma MLP-BP e atingir um determinado erro?
  - Nível de confiança da reposta para uma entrada particular empregando a rede treinada.

Pontos Negativos de MLP-BP

- Limitações decorrentes do gradiente descendente:
  - Garante a redução do erro para mínimo local.
  - Pode cair em mínimos locais, dependendo da superfície de erro:
    - Superfícies com vales e poços podem levar a ótimos locais.
  - Nem toda função que é representável pode ser aprendida, isto é, os erros podem não convergir para o desejado.
  - Possíveis correções:
    - Redes com diferentes número de unidades escondidas que podem levar a superfícies menos inadequadas.
    - Pesos iniciais diferentes para iniciar a otimização a partir de pontos iniciais distintos na superfície.
    - Mecanismo de perturbação aleatória, e.g., cozimento simulado, para escapar de mínimos locais.

Pontos Negativos de MLP-BP

- A generalização não é garantida:
  - Problema de sobre-treinamento: A rede treinada atende com perfeição os padrões treinados não garante respostas acuradas para entradas não-treinadas.



Pontos Negativos de MLP-BP

- A generalização não é garantida:
  - Possíveis soluções:
    - Mais e melhores amostras;
    - Emprego de rede menor;
    - Uso de fronteira de erro para forçar término mais rápido;
    - Adição de ruído nas amostras;
      - Mudar de $(x_1,\ldots, x_n)$ para $(x_1 a_1,\ldots, x_n a_n)$ onde a_n são pequenos deslocamentos aleatórios.
    - Validação cruzada:
      - Separe amostras (cerca de 10%) para dado de teste;
      - Verifique o erro nos dados de teste periodicamente;
      - Interrompa a aprendizagem quando erro passar a crescer.

Pontos Negativos de MLP-BP

- Paralisação da rede com função de ativação tipo sigmoide

  $S(x) = 1/(1+e^{-x}),$ logo $S'(x) = S(x)(1-S(x)) \to 0$

  assim $x \to \pm\infty$ então $S'(x) \to 0.$

  Se x cair na região de saturação, $S(x)$ não altera seu valor de modo significativo independentemente do crescimento da magnitude of x.

  – Entrada para um nó pode cair dentro de uma região de saturação quando alguns pesos se tornam muito grandes durante a aprendizagem. A implicação disto é que os pesos param de crescer pois a derivada da função de ativação tende a zero.

  – Possíveis soluções:
    - Uso de funções que não saturem;
    - Normalização periódica dos pesos.

$$w_{kj} = w_{kj} \Big/ \sqrt{\sum_{i=1}^{ncama} \left(w_{kj}\right)^2}$$

Técnicas para Melhoraria em MLP-BP

- Determinação de função de ativação
- Escalonamento de valores entrada/saída
- Treinamento com dados ruidosos ou artificiais
- Determinação do número de unidades escondidas
- Inicialização dos pesos
- Termo de Momento
- Taxa de Aprendizagem
- Decaimento dos pesos
- Poda da rede
- Aprendizagem a partir de pistas
- Critério de parada

Determinação da Função de Ativação

- Propriedades da função de ativação:
  - Não linearidade;
  - Saturação para valores máximos e mínimos;
  - Continuidade e suavidade;
  - Monotonicidade, que não é essencial.
- A função sigmóide tem estas propriedades.
  - O número de iterações de treinamento tende diminuir quando a função sigmoide é antiassimétrica ($f(-v)=-f(v)$) ao invés de não-simétrica.
  - A centralização em zero facilita treinamento.
  - O alcance (*range*) e a inclinação devem ser compatíveis com as amostras de entrada e saída.

Escalonamento de Valores de Entrada/Saída

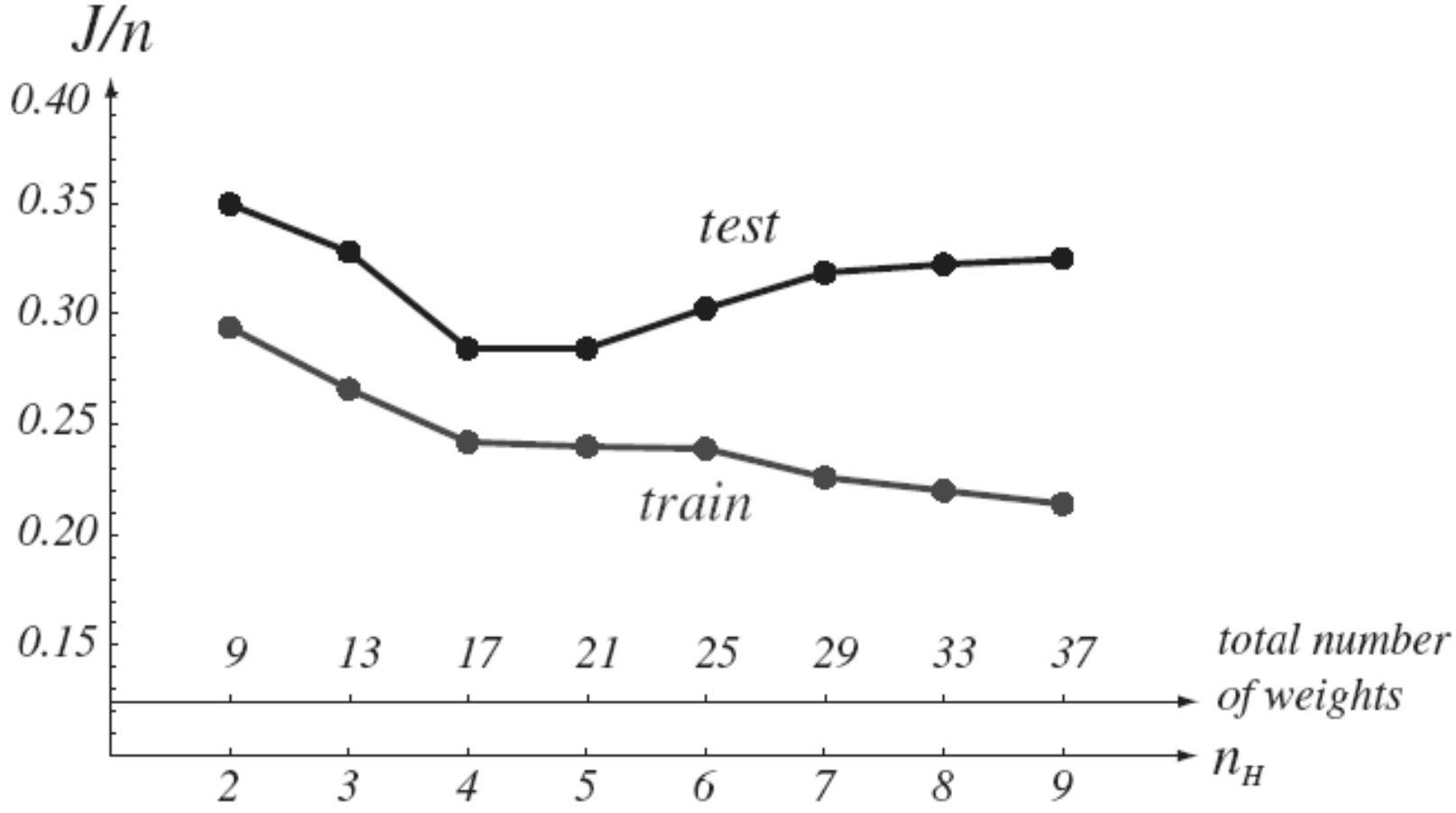
- Deve-se padronizar:
  - Diferenças altas de escala pode provocar redução de erros apenas nos valores mais altos de escala.
- Normalização das entradas: Pré-processamento das entradas para obter média pequena se comparada a seu desvio padrão, e variância unitária.
  - Para acelerar treino, usa-se entradas não-correlacionadas e escalonadas para se obter covariâncias aproximadamente iguais.
- Valores para alvos: Estes valores devem estar dentro do alcance da função de ativação:
  - Nenhuma saída deve atingir a parte saturada da função de ativação.
  - Sugestão para representação local: Binária (+1 positivo; -1 negativo).

Treinamento com Dados Ruidosos ou Artificiais

- Para conjunto de treinamento pequeno, pode-se gerar padrões de treinamento adicionais através de:
  - Adição de ruído Gaussiano *d*-dimensional aos verdadeiros padrões de treinamento (ausência de informações do problema) com variância menor que um.
  - Geração artificial de padrões (existência de informações sobre o problema).

- O número de unidades escondidas deveria ser menor que o número total de amostras para treinamento (*Npad*). Uma sugestão inicial é *Npad*/10.

Determinação do Número de Unidades Escondidas



Inicialização de Pesos

- Não se deve inicializar todos os pesos em zero pois não há mapeamento inicial restringindo a busca à vizinhança da origem.
- Pesos inicialmente altos tendem a saturar as unidades. Valores inicialmente baixos levam à operação em região muito plana em torno da origem da superfície de erro.
  - Valores de pesos sinápticos cujo desvio padrão do campo local induzido se situe entre as partes linear e saturada da sigmoidal.
- Seleção de sementes adequadas para aprendizagem rápida e uniforme.

Inicialização de Pesos

- Para dados padronizados:
  - Escolha aleatória de distribuição única.
  - Utilize igualmente pesos positivos e negativos $-? < w < +?$:
    - Para $?$ pequeno, então *net* é linear;
    - Para $?$ grande, então *net* satura rapidamente.
- Recomendações de valores iniciais:
  - Pesos entrada-escondida $$-\frac{1}{\sqrt{n}} < w_{ji} < +\frac{1}{\sqrt{n}}$$
  - Pesos escondida-saída: $$-\frac{1}{\sqrt{m}} < w_{kj} < +\frac{1}{\sqrt{m}}$$

Termo de Momento

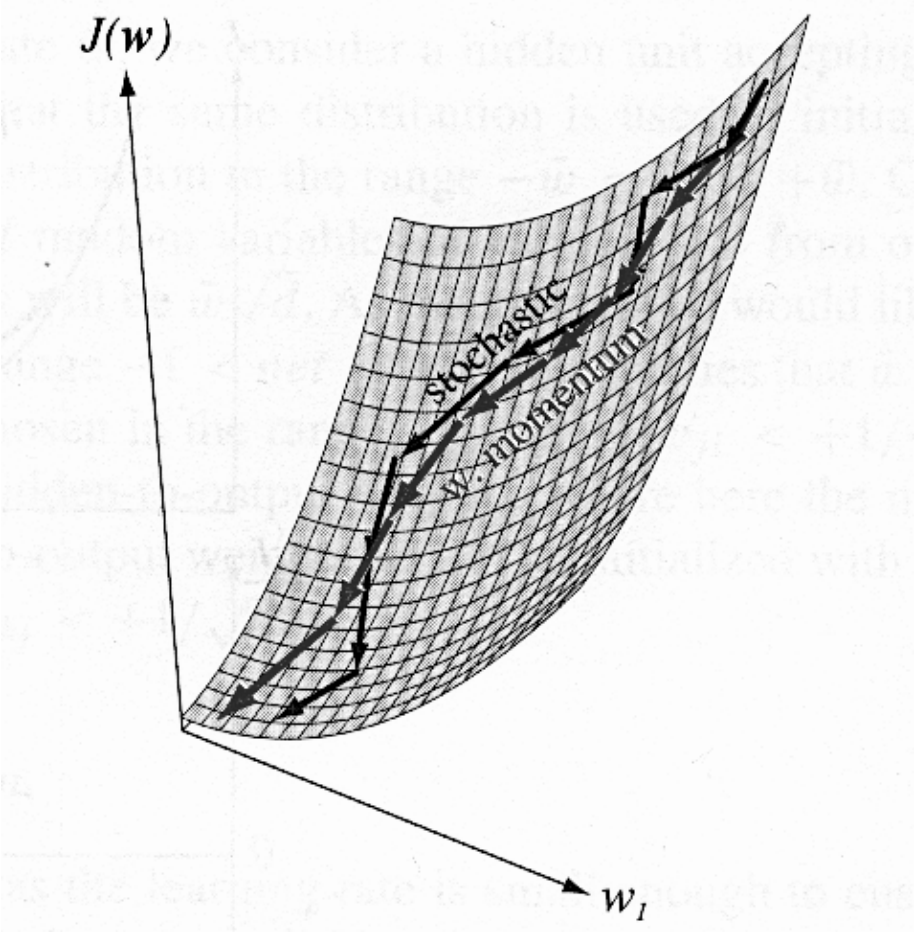
- Pode ajudar a que um processo de aprendizagem não fique preso em um mínimo local.

$$\mathbf{w}(m+1) = \mathbf{w}(m) + (1-a)\Delta\mathbf{w}_{bp}(m) + a\Delta\mathbf{w}(m-1)$$

  - onde a é a constante do momento que para convergir $0 \leq |\alpha| \leq 1$.
    - Valor típico = 0.9
  - Se a derivada parcial tiver mesmo sinal em iterações consecutivas, o momento aumenta o ajuste dos pesos que estiverem na mesma direção do ajuste atual, acelerando a convergência.
    - Caso contrário, momento leva à diminuição do ajuste.

Termo de Momento

- O termo de momento:
  - Permite que a rede aprenda mais rapidamente em regiões de planícies na superfície de erro.
  - Impede variações súbitas de direção durante a atualização dos pesos.



Taxa de Aprendizagem

- Taxas de aprendizagem pequenas levam a ajustes mais sutis mas demoram mais a convergir.
  - Taxa de aprendizagem fixa deve ser menor que 1.
  - Inicie com *?*, alto e gradualmente diminua seu valor.
  - Inicie com *?*, baixo e periodicamente dobre seu valor até o erro começar a aumentar.
  - Atribua taxas mais altas para padrões pouco representados.
  - Determine máximo passo para cada estágio de aprendizagem para evitar sobrevalor de erro.
- Taxa da última camada deve ser menor que das anteriores.
  - Última camada tem gradiente local mais alto.
  - Permite ajustes sutis.

Taxa de Aprendizagem

- Sugestão de LeCun: A taxa de aprendizagem é inversamente proporcional à raiz quadrada do número de conexões sinápticas da camada.
- Taxa de aprendizagem adaptativa (método delta-bar-delta)
  - Cada peso $w_{k,j}$ tem sua própria taxa $?_{k,j}$.
  - Se $? w_{k,j}$ mantém a direção, aumenta $?_{k,j}$ pois E tem curva suave na vizinhança do peso atual.
  - Se $? w_{k,j}$ muda de direção, diminua $?_{k,j}$ pois E tem curva acentuada na vizinhança do peso atual.

Decaimento do Peso

- Heurística: Manutenção do peso pequeno.
  - Simplifica rede e evita sobretreinamento.
- Possibilidade de não houver algum tipo de normalização: Inicie com pesos altos e decaia seus valores durante o treinamento:

$$\mathbf{w}^{new} = \mathbf{w}^{old}(1-e)$$

  - Pesos pequenos são eliminados.

Poda da Rede

- Minimização da rede tende a melhorar generalização
  - Diminui probabilidade de aprender peculiaridades ou ruídos.
- Poda da rede elimina pesos sinápticos com magnitude pequena.
- Complexidade-regularização
  - Compromisso entre confiabilidade dos dados de treinamento e desempenho do modelo.
  - Aprendizagem supervisionada minimizando função de risco:

$$R(w) = E_s(W) + ?E_c(W)$$

onde $E_s(W)$ é a medida de desempenho

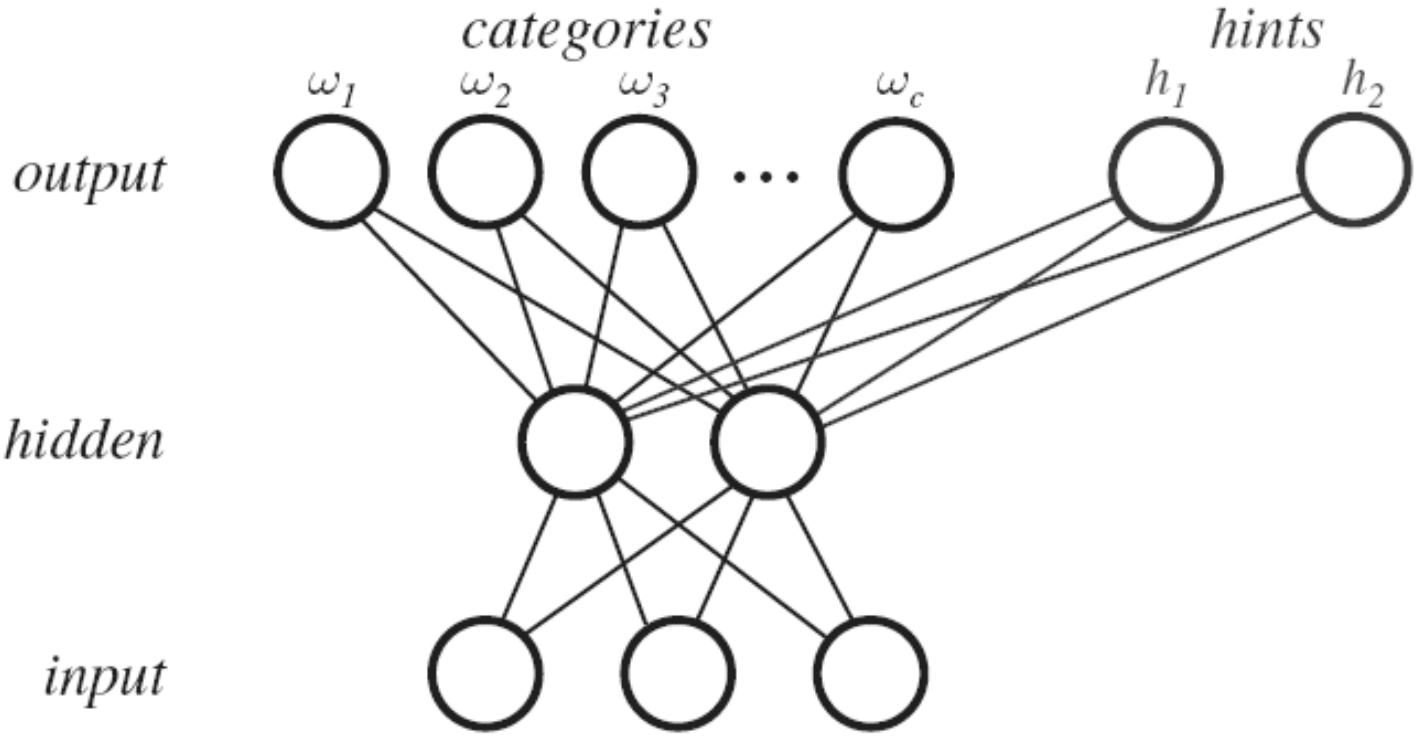
$E_c(W)$ é a penalização por complexidade

Aprendizagem a Partir de Pistas

- Emprego de informação a priori para ser inclusa no processo. Tal informação inclui propriedades invariantes, simetrias, outros conhecimentos sobre a função de ativação.
- Adição de unidades de saída para resolver problema secundário
  - O problema secundário é diferente mas relacionado ao original.
- Treinamento com problema original e secundário simultaneamente.
- Descarte unidades de pistas após treinamento.
- Vantagens
  - Melhora na seleção de características;
  - Melhora representação de unidades escondidas.

Aprendizagem a Partir de Pistas

- Interessante se houver dados para treinamento que sejam insuficientes para chegar a precisão desejada.

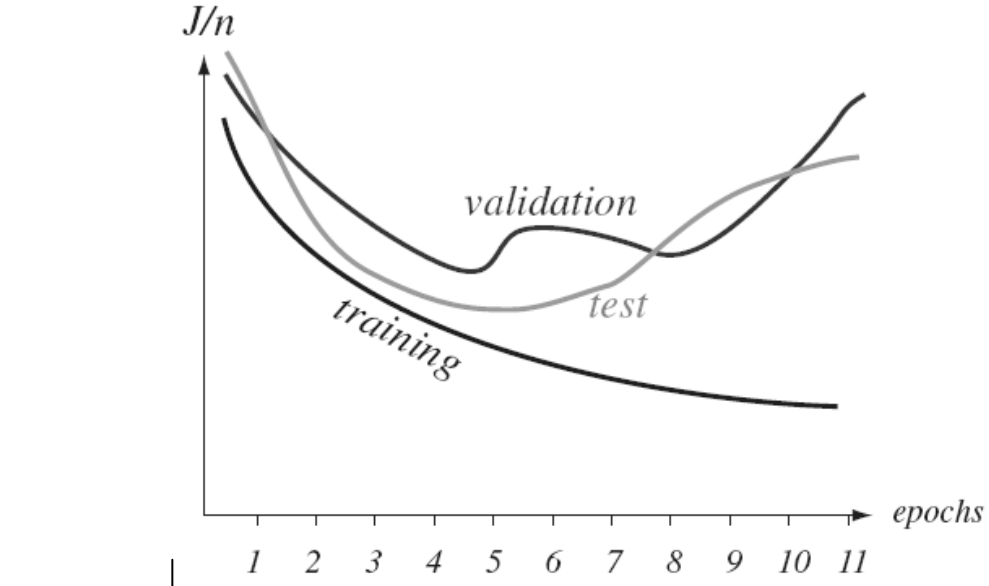


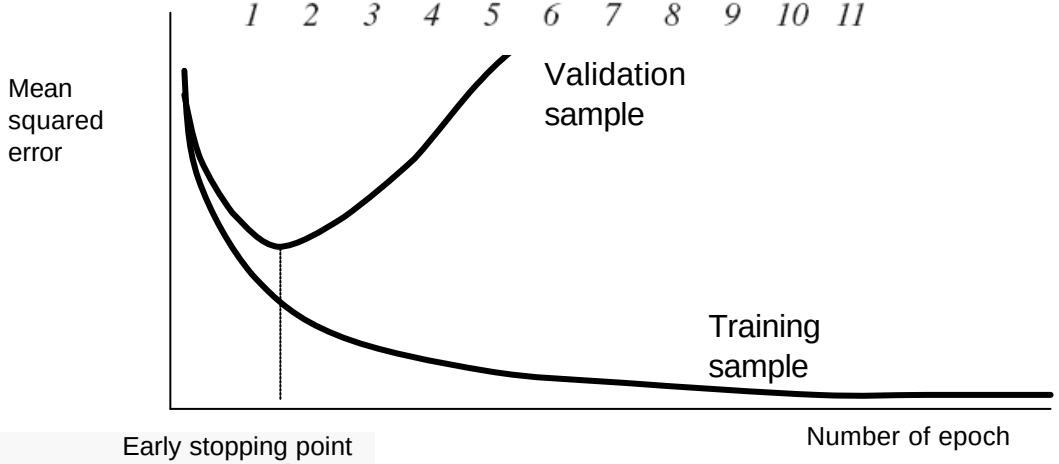
Critério de Parada

- Alguns possíveis critérios de parada:
  - Vetor de gradiente nulo, indicando mínimo local ou global.
  - Medida de erro estacionária.
  - Medida de erro dentro de faixa de aceitação.
- Progresso de treinamento a partir de pesos iniciais pequenos:
  - Início: Linearidade.
  - Avançado: A não linearidade é alcançada.
  - Portanto, término prematuro do treinamento se parece com decaimento de pesos.

Parada com Conjunto de Validação Separado

- Método de antecipação de parada:
  - Computar os pesos sinápticos depois de parte do treinamento, tomando valores fixos de pesos.
  - Reassumir treinamento depois de calcular erro de validação.





Referências

- Hassoun, M. H. (1995). *Fundamentals of Artificial Neural Networks*. Cambridge: The MIT Press.
- Haykin, S. (1999). *Neural Networks: A Comprehensive Foundation*. IEEE Press.