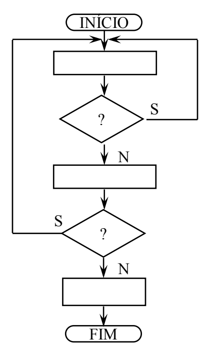
Redes Neuronais

(Introdução, perceptrões, e MLP)

Victor Lobo

Origens de AI e Redes Neuronais



- Programação Imperativa
  - Explicita-se o algoritmo
  - Conjunto de instruções
- Inteligência Artificial
  - Usar o homem e a biologia como inspiração
  - Abordagem simbólica
    - Estudar os processos cognitivos -> Lógica, Sistemas Periciais
  - Abordagem sub-simbólica
    - Estudar os processos biológicos -> Redes Neuronais

Introdução histórica

- Anos 50 – primeira sugestão
  - Ideia de "programar" um computador simulando um conjunto de neurónios…
- Anos 60 – primeira "era"
  - Muito trabalho com neurónios simples, também chamados "máquinas lineares".
- Final da década de 60 – primeiro "fim"
  - Publicação de "Perceptrons", de Minsky
  - Demonstrada a limitação dos neurónios simples,
  - Dúvidas quanto à possibilidade de treinar redes complexas de neurónios.
  - Desilusão: a investigação nesta área quase parou.

Introdução histórica

- 1986 – Rumelhart "re-inventa" o algoritmo de "Back-Propagation"
  - Descoberto em 1975 por Werbos, mas quase ignorado
  - Possibilita o treino de redes multi-camada
  - Euforia sobre redes neuronais
- Anos 80 – o "ressurgir"
  - Aparecem novas arquitecutas: os mapas auto-organizados (SOM), Redes de funções de base radial (RBF), redes de Hopfield, etc,
  - Várias aplicações práticas
- Anos 90 – a "consolidação"
  - Uso generalizado de redes neuronais
  - Pontes para outras áreas como a estatística, processamento de sinal, etc

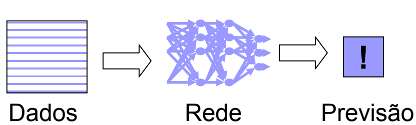
Principais tipos de redes neuronais

- Perceptrões simples
- Perceptrões multicamada (MLP)
- Redes de funções de base radial (RBF)
- Mapas auto-organizados (SOM)
- Support Vector Machines (SVM)
- Outros
  - Hopfield, Boltzman, ART, Spiking Networks, Neural Gas, LVQ, BPTT, BSB, etc.

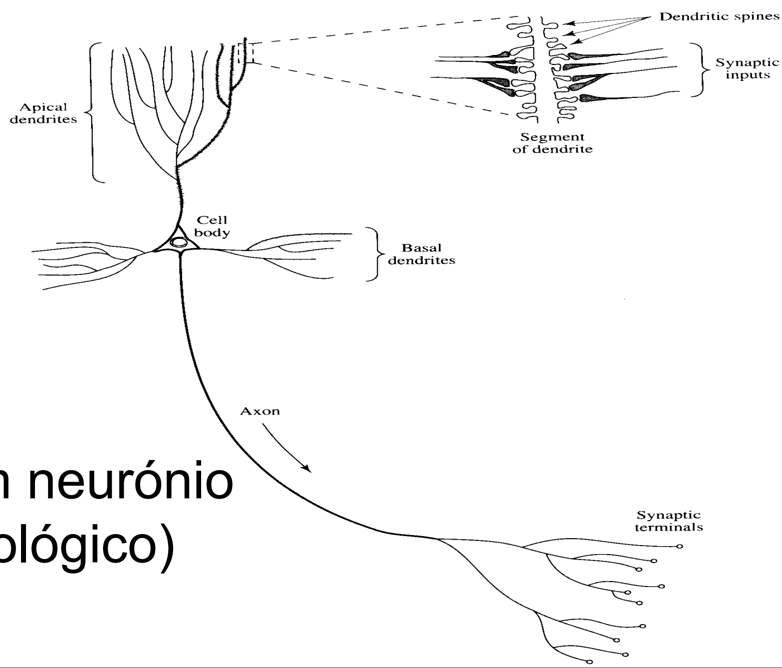
Quase tudo...

Algumas vantagens das redes neuronais MLP para SAD

- Em problemas de previsão, com aprendizagem supervisionada a partir de bases de dados
  - Aprendem "automaticamente"
  - Fazem interpolações não-lineares
  - São aproximadores universais



Inspiração e formalização para redes neuronais



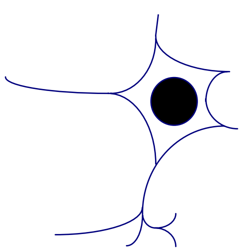
Um neurónio (biológico)

Funcionamento de um neurónio biológico

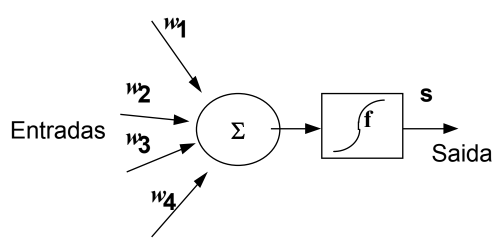
- Dendrites recebem iões através das sinapses
  - Esses iões são injectados por outros neurónios vizinhos. Quando mais excitados estiverem os vizinhos, mais iões são injectados
- O sinal eléctrico é propagado até ao núcleo
  - Se o neurónio fôr suficientemente estimulado, ele próprio entra em estado de excitação e começa a estimular os seus vizinhos
- Factores que condicionam a activação de um neurónio
  - As ligações que tem, ou seja os vizinhos que escolhe
  - A "força" da sua ligação a cada um desses esses vizinhos, i.e., a eficiência das sinapses.
  - A sua sensibilidade, i.e., o ponto a partir do qual ele dispara
- O cérebro humano tem MUITOS (10^{12}) neurónios...

Modelo matemático de um neurónio biológico

- McCullor & Pitts (1943)

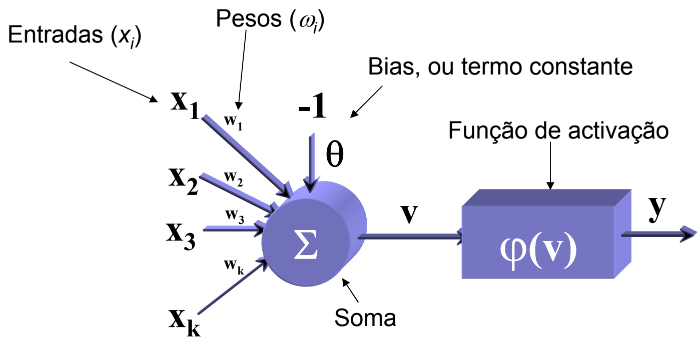


Neurónio biológico



Neurónio artificial

Modelo mais completo



$$v = \sum_{i=1}^{k} w_i x_i - \theta$$

$$y = \varphi(v) = sign(v)$$

Aprendizagem num neurónio

- Determinação dos pesos sinápticos
  - Como escolher os ω ?
- Ideia geral:
  - Sinapses que ajudam a obter bons resultados devem ser reforçadas
  - Sinapses que levam a maus resultados devem ser enfraquecidas

Problemas tipo

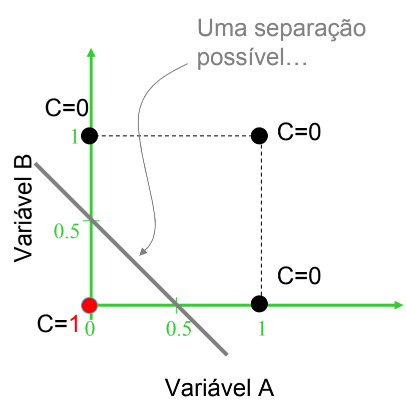
- Biologia
  - Se os neurónios da ponta dos dedos indicam muito calor → Activar o neurónio que enconhe o músculo do braço
  - Se um pé indica peso e o outro não → Activar o neurónio responsável pelo equilíbrio
- Outros problemas
  - Se os dados sobre uma casa (preço, área, anos, etc), são bons → Comprar a casa
  - Se os dados sobre um cliente (saldo médio, salário, idada, etc) são bons → Conceder crédito
- Sempre:
  - Dadas umas entradas activar umas saídas

Exemplo muito simples

- Queremos prever se a classe é 1 ou 0.

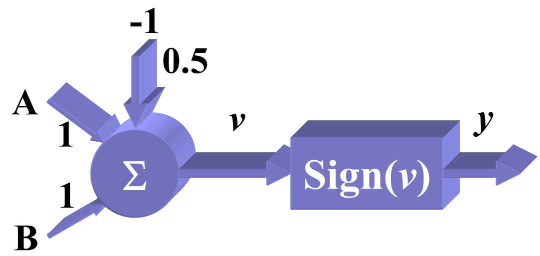
Variáveis

A	B	Classe
0	0	1
0	1	0
1	0	0
1	1	0



- Qual a rede neuronal que resolve este exemplo?

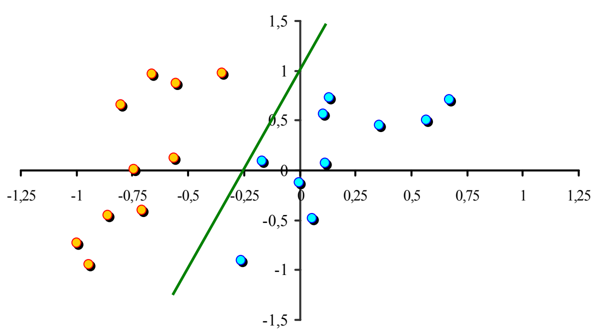
A solução



$$y = f_{activação}(\sum_i \omega_i x_i - \theta) = sign(A + B - 0.5)$$

- A separação entre os locais onde *y* é positivo e negativo será sempre um hiperplano!
  - $v = w_1x_1 + w_2x_2 - \theta = 0 \Rightarrow x_2 = w_1/w_2 x_1 + \theta/w_2$

Outro exemplo



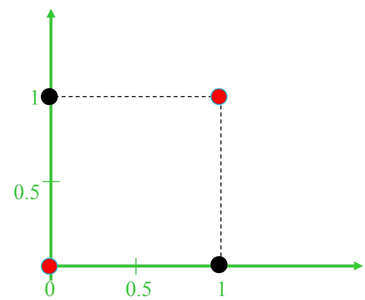
Mais outro exemplo…

…que corre mal

- Qual o classificador de

A	B	Classe
0	0	1
0	1	0
1	0	0
1	1	1

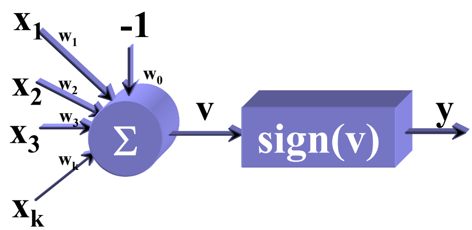
- Qual a rede neuronal que resolve este exemplo?



Perceptrão
(um neurónio isolado)

Perceptrão simples

- O perceptrão é o exemplo mais simples de uma rede neuronal
- Consiste num único neurónio
- Permite classificar duas classes linearmente separáveis



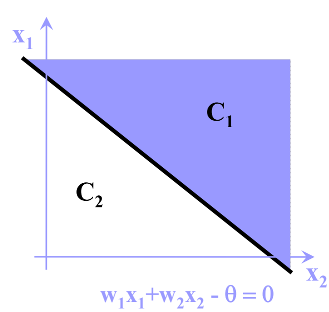
Regra de classificação

- **Se**

  $x(t) = [-1, x_1(t), \ldots, x_n(t)]^T$,

  $W(t) = [\theta, w_1(t), \ldots, w_n(t)]^T$

  então $v(t) = W(t)^T.x(t)$
- A equação do hiperplano é dada por $v(t) = 0$
- A regra de classificação é
  - **se** $W(t)^T.x(t) \geq 0$ **então** $x(t) \in C_1$
  - **se** $W(t)^T.x(t) < 0$ **então** $x(t) \in C_2$



Algoritmo de aprendizagem

Dado um vector x

Se $(W(t)^T \cdot x \geq 0 \wedge x \in C_1) \vee (W(t)^T \cdot x < 0 \wedge x \in C_2)$

então $W(t+1) = W(t)$

senão

Se $(W(t)^T \cdot x \geq 0 \wedge x \in C_2)$

então

$W(t+1) = W(t) - \eta(t)\, x$

senão

$W(t+1) = W(t) + \eta(t)\, x$

Onde $\eta(t)$ é o ritmo de aprendizagem

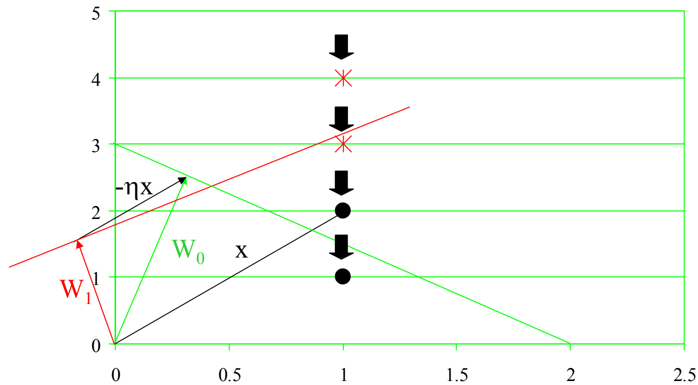
Escolher outro x e repetir o processo

Algoritmo de aprendizagem

- **Considerando:**
  - **Uma série de vectores *x* como sendo uma série *x(t)***
  - **Uma função d(t) que indica se o dado pertence a uma classe ou outra**
- Obtém-se uma forma mais elegante:

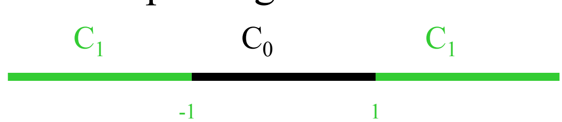
$$\begin{cases} y(t) & = & sign\left(W^T(t).x(t)\right) \\ \Delta W(t) & = & \eta(t)\left[d(t) - y(t)\right].x(t) \\ d(t) & = & \begin{cases} +1 & se & x(t) \in C_1 \\ -1 & se & x(t) \in C_2 \end{cases} \end{cases}$$

Exemplo



Questão

- Só é possível resolver problemas de classificação linearmente separáveis?
- Por exemplo, pode resolver-se o problema de duas classes com uma única variável, representado pela figura abaixo?



Nota

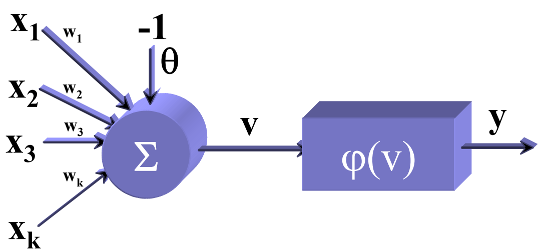
- Se o número de variáveis for **maior do que** o número de exemplos de treino o problema de classificação é sempre **linearmente separável**

Multi-Layer Perceptrons (MLP)

Feed-Forward Networks with Error Backpropagation

Redes Multicamada com Retropropagação do erro

Modelo de cada neurónio

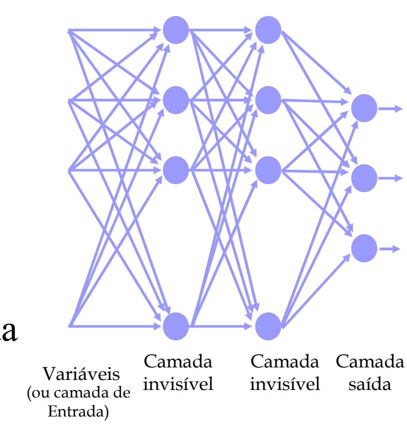


em que φ(v) pode ser

- a função sinal
- a função sigmoide
- a função tangente hiperbólica

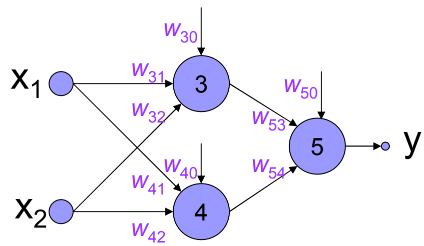
Modelo das ligações entre neurónios

- Os valores de saída de uns neurónios são usados como entradas nos neurónios da camada seguinte
- Convém ter funções de avaliação diferenciáveis
- Aprendizagem Supervisionada
  - É necessário um algoritmo de aprendizagem para ajustar os pesos sinápticos
  - "Error Back-Propagation" (BP) é o mais comum (ou pelo menos mais simples…)



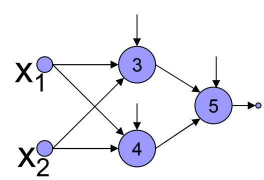
Exemplo XOR (1)

- Problema que não pode ser resolvido com uma só camada
- Funções de activação "step"
  - $H(x)=1 \Leftarrow x \geq 0$



Uma solução possível:
w_{30}= 0.5
w_{31}= 1.0
w_{32}= -1.0
w_{40}= 0.5
w_{41}= -1.0
w_{42}= 1.0
w_{50}= 0.5
w_{53}= 1.0
w_{54}= 1.0

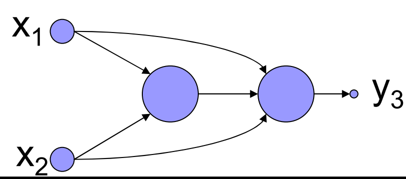
Exemplo XOR (2)



- Implementação em Excel

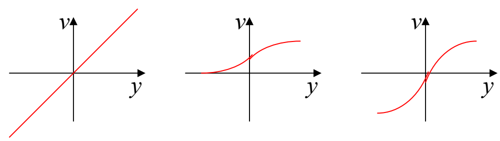
Entradas	**A**	0			
	B	1			
Neurónio	**Bias**	**Peso 1**	**Peso 2**	**Soma**	**Saída**
3	0,5	1	-1	-1,5	0
4	0,5	-1	1	0,5	1
5	0,5	1	1	0,5	1

- Outra arquitectura possível…



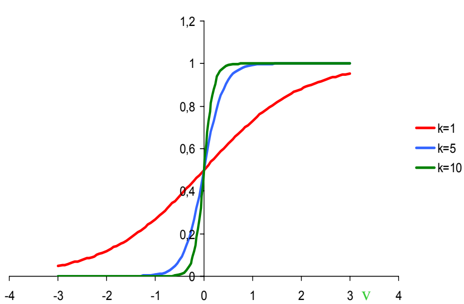
Funções de activação(1)

- No neurónio de saída
  - Problema de classificação ⇒ 2 valores de saída (p.ex. Heaviside)
  - Problema de regressão ⇒ valores de saída de $-\infty$ a $+\infty$ (p.ex. recta)
- Nos neurónio interiores
  - Evitar saturação ⇒ Valores de saída limitados
  - Monótonas
  - Diferenciáveis
  - Variações suaves



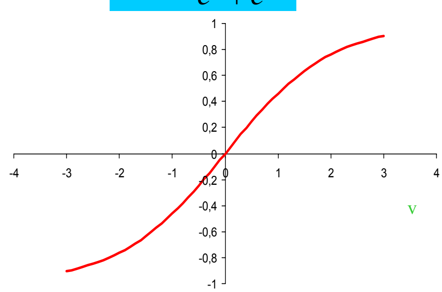
Funções de activação (2)

$$\varphi(v) = \frac{1}{1+e^{-kv}}$$



Sigmoide

$$\varphi(v) = \frac{e^{v}-e^{-v}}{e^{v}+e^{-v}}$$



Tangente hiperbólica

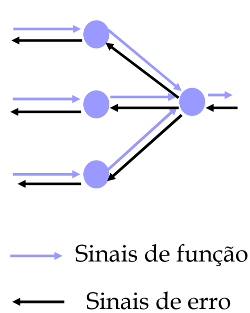
Como encontrar os *pesos mágicos* ?

- Algoritmo de treino da rede
  - Ajusta os pesos sinápticos de modo a que a rede, dadas umas entradas, produza o resultado pretendido
  - Ideia base: tentativa e erro
    - Inicia-se com pesos aleatórios.
    - Se der o resultado certo (ganda'sorte)… não mexe !
    - Se der um resultado errado… faz um "ajustezinho"
    - Alternativa: resolver um sistema de *n* equações a *n* incógnitas
  - Exemplo de função de saída:

$$y = f(\vec{x}) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \sum_i w_{Si} \frac{1}{1 + e^{-k(\sum_j w_{ij} x_j - \theta_i)}}$$

Sinais numa rede multicamada

- Sinais "de função" que se propagam desde os neurónios de entrada até às saídas.
- Sinais "de erro" que se propagam de uma saída para as entradas (camada a camada), através da rede.



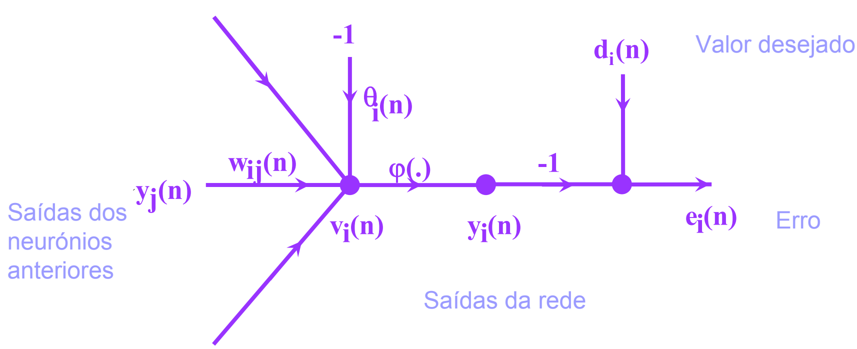
Algoritmo de "backpropagation"

- Função de custo: erro médio da rede

$$\begin{cases} \xi(n) & = \dfrac{1}{2}\sum_{j \in O} e_j^2(n) & \textit{erro instantâneo} \\ \xi_{av} & = \dfrac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \xi(n) & \textit{erro médio} \end{cases}$$

em que O representa os neurónios de saída e N o número total de exemplos

Neurónio *i* da camada de saída



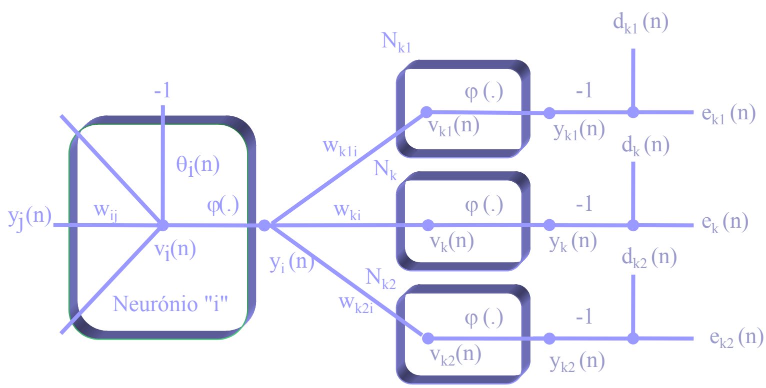
Aplicação do método do gradiente

$$\begin{aligned}
\Delta w_{ij} &= -\eta \frac{\partial \xi(n)}{\partial w_{ij}} \\
&= -\eta \frac{\partial \xi(n)}{\partial e_i(n)} \frac{\partial e_i(n)}{\partial y_i(n)} \frac{\partial y_i(n)}{\partial v_i(n)} \frac{\partial v_i(n)}{\partial w_{ij}} \\
&= -\eta e_i(n).(-1) \left. \frac{d\varphi(v)}{dv} \right|_{v=v_i} y_j(n) \\
&= \eta \delta_i(n) y_j(n)
\end{aligned}$$

em que $\delta_i(n)$ é definido como o gradiente local e é dado por

$$\delta_i(n) = e_i(n). \left. \frac{d\varphi(v)}{dv} \right|_{v=v_i}$$

Neurónio *i* de um nó invisível



Aplicação do método do gradiente

$$\begin{aligned}
\Delta w_{ij} &= -\eta \frac{\partial \xi(n)}{\partial w_{ij}} \\
&= -\eta \frac{\partial \xi(n)}{\partial y_i(n)} \frac{\partial y_i(n)}{\partial v_i(n)} \frac{\partial v_i(n)}{\partial w_{ij}} \\
&= -\eta \left(\sum_k \frac{\partial \xi(n)}{\partial e_k(n)} \frac{\partial e_k(n)}{\partial y_k(n)} \frac{\partial y_k(n)}{\partial v_k(n)} \frac{\partial v_k(n)}{\partial y_i(n)} \right) . \left. \frac{d\varphi(v)}{dv} \right|_{v=v_i} y_j(n) \\
&= -\eta \left(\sum_k e_k(n)(-1) \left. \frac{d\varphi(v)}{dv} \right|_{v=v_k} w_{ki} \right) . \left. \frac{d\varphi(v)}{dv} \right|_{v=v_i} y_j(n) \\
&= -\eta \left(\sum_k \delta_k(n) w_{ki} \right) . \left. \frac{d\varphi(v)}{dv} \right|_{v=v_i} y_j(n) \\
&= \eta \delta_i(n) y_j(n)
\end{aligned}$$

Regra delta

- A regra de aprendizagem pode ser descrita por

$$\Delta w_{ij} = \eta \delta_i(n) y_j(n)$$

- em que $\delta_i(n)$ é o gradiente local dado por

$$\begin{cases}
\delta_i(n) = e_i(n) . \left. \dfrac{d\varphi(v)}{dv} \right|_{v=v_i} & \textit{para os neurónios de saída} \\
\delta_i(n) = \left. \dfrac{d\varphi(v)}{dv} \right|_{v=v_i} \displaystyle\sum_k \delta_k(n) w_{ki} & \textit{para os neurónios invisíveis}
\end{cases}$$

Função de avaliação: Sigmoide

- Para a camada de saída

Derivada da sigmoide:
Y(1-Y)

$$\delta_i(n) = [d_i(n) - o_i(n)]o_i(n)[1 - o_i(n)]$$

- Para as camadas invisíveis

$$\delta_i(n) = y_i(n)[1 - y_i(n)]\sum_k \delta_k(n) w_{ki}$$

Generalização da regra delta

Rumelhart (1986) propôs a regra

$$\Delta w_{ij}(n) = \alpha \Delta w_{ij}(n-1) + \eta \delta_i(n) y_j(n)$$

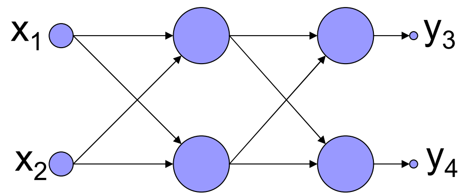
incluindo um termo de momento em que α é a constante de momento e é positiva.

Exemplo

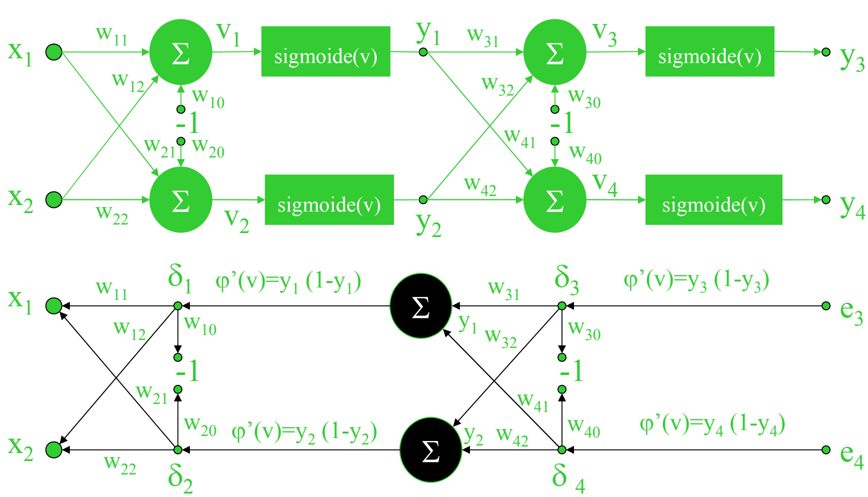
- Sejam as funções

x_1	x_2	y_3	y_4
0	0	1	0
0	1	0	1
1	0	1	1
1	1	1	0

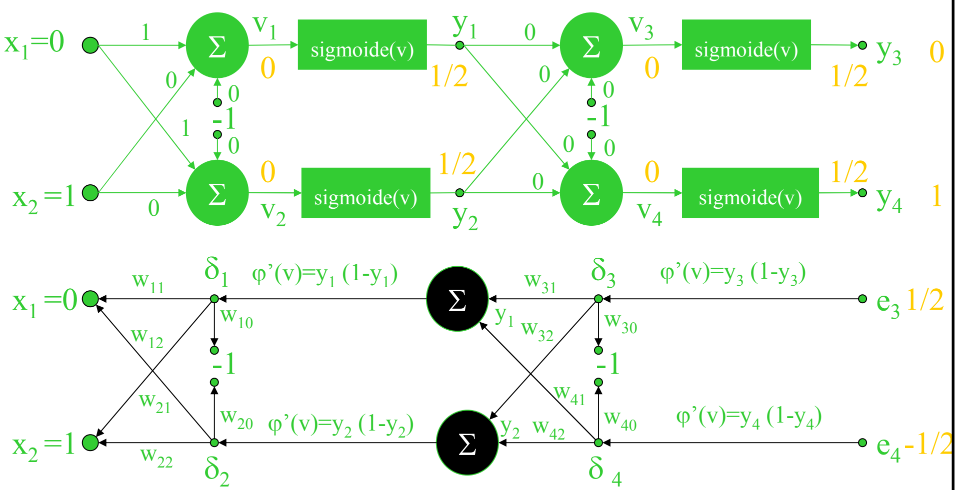
- A Rede Neuronal



Exemplo (cont)



Exemplo (cont)



Problemas com o BackProp

- É um método de gradiente, logo sujeito a mínimos locais
  - Infelizmente é normal haver muitos mínimos locais...
- É lento
- Soluções
  - Várias inicializações
  - Vários valores para o momento
  - Vários métodos de optimização dos parâmetros
- No SAS
  - Múltiplas corridas, e escolhe o melhor
  - Optimização por quasi-newton, Lavenberg-Marquadt, gradiente conjugado...

Redes Neuronais

Bibliografia