

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO INSTITUTO DE CIÊNCIAS MATEMÁTICAS E DE COMPUTAÇÃO Departamento de Ciências de Computação

SCC-5809 - Capítulo 5 Perceptron Multicamadas

João Luís Garcia Rosa¹

¹SCC-ICMC-USP - joaoluis@icmc.usp.br

2011



Sumário

- Introdução
 - O Perceptron de camada única
 - O Perceptron Multicamadas
- Back-propagation (BP)
 - Algoritmo LMS
 - Gradientes
 - Função de Ativação
- MLPs
 - XOR
 - Generalização
 - Aproximação de Funções
 - Validação
- Convolução
 - Redes Convolucionais

Sumário

- Introdução
 - O Perceptron de camada única
 - O Perceptron Multicamadas
- Back-propagation (BP)
 - Algoritmo LMS
 - Gradientes
 - Função de Ativação
- MLPs
 - XOR
 - Generalização
 - Aproximação de Funções
 - Validação
- 4 Convolução
 - Redes Convolucionais



Introdução Back-propagation (BP) MLPs Convolução O Perceptron de camada única O Perceptron Multicamadas

O perceptron

- Como já visto, o primeiro modelo matemático do neurônio foi proposto por McCulloch & Pitts em 1943 [3].
- Mais tarde em 1957, Rosenblatt [5] criou o modelo do perceptron.
- Um perceptron modela um neurônio tomando uma soma ponderada de suas entradas e enviando a saída 1 (spike) se esta soma é maior que um determinado limiar de ativação.
- O perceptron, com função de ativação linear, pode ser modelado como um discriminador linear:
 - dados 2 pontos, uma reta é capaz de discriminar esses 2 pontos,
 - para algumas configurações de m pontos, uma reta é capaz de separar estes pontos em 2 classes.

- O perceptron é uma rede feedforward (não recorrente) de uma única camada.
- O perceptron só é capaz de aprender a solução de problemas linearmente separáveis.
- O algoritmo de aprendizagem do perceptron (regra delta) não funciona com redes de mais de uma camada.

Sumário

- Introdução
 - O Perceptron de camada única
 - O Perceptron Multicamadas
- Back-propagation (BP)
 - Algoritmo LMS
 - Gradientes
 - Função de Ativação
- MLPs
 - XOR
 - Generalização
 - Aproximação de Funções
 - Validação
- Convolução
 - Redes Convolucionais



Introdução Back-propagation (BP) MLPs Convolução O Perceptron de camada única O Perceptron Multicamadas

Mais camadas

- Redes Neurais alimentadas à frente com múltiplas camadas:
 - Um conjunto de unidades sensoriais (nós fonte): camada de entrada.
 - Uma ou mais camadas escondidas de nós computacionais.
 - Uma camada de saída de nós computacionais.
 - O sinal de entrada se propaga através da rede numa direção às frente, camada por camada.
 - Essas redes são conhecidas como perceptrons multicamadas (MLP), uma generalização do perceptron de camada única.

- MLP têm sido aplicados com sucesso para resolver diversos e difíceis problemas.
- Treinados de forma supervisionada
- Algoritmo muito popular: error back-propagation [1, 6], baseado na regra de aprendizado de correção de erro:
 - Generalização do algoritmo do filtro adaptativo: LMS.
 - Duas fases: um passo à frente e um passo para trás.
 - No passo à frente, um padrão de atividade (vetor de entrada) é aplicado aos nós sensoriais da rede e seu efeito é propagado através da rede camada por camada.
 - Por fim, um conjunto de saídas é produzido como resposta real da rede.

• BP:

- Durante o passo à frente, os pesos sinápticos são fixos.
- Durante o passo para trás, os pesos sinápticos são ajustados de acordo com uma regra de correção de erro.
- Especificamente, a resposta real é subtraída da resposta desejada para produzir um sinal de erro.
- Este sinal de erro é propagado de volta através da rede, em sentido contrário aos estímulos.
- Os pesos s\(\tilde{a}\) o ajustados para fazer a resposta real se aproximar da resposta desejada, de uma forma estat\(\tilde{s}\) tica.

Características do MLP

- Características do MLP:
 - O modelo de cada neurônio da rede inclui uma função de ativação não-linear, a não-linearidade sigmoidal definida pela função logística:

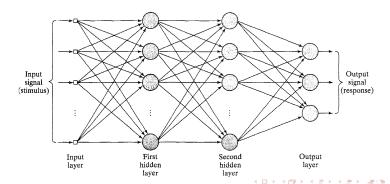
$$y_j = \frac{1}{1 + exp(-v_j)} \tag{1}$$

onde v_j é o campo local induzido (isto é, a soma ponderada das entradas mais o *bias*) do neurônio j e y_j é a saída.

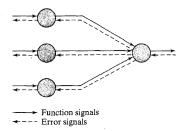
- A rede contém uma ou mais camadas de neurônios escondidos, que não são parte da entrada nem da saída.
- A rede exibe um alto grau de conectividade, determinado pelas sinapses.

Introdução Back-propagation (BP) MLPs Convolução O Perceptron de camada única O Perceptron Multicamadas

- A figura 6 abaixo [2] mostra um grafo arquitetural de um perceptron multi-camadas com duas camadas escondidas e uma camada de saída.
- Esta rede é totalmente conectada.



- A figura 7 abaixo [2] mostra uma porção de um MLP.
- Dois tipos de sinais são identificados:
 - Sinais de função: sinal de entrada (estímulo) que chega na entrada, propaga-se para frente (neurônio por neurônio) através da rede e emerge na saída da rede como um sinal de saída. Também conhecido como sinais de entrada.
 - Sinais de erro: origina em um neurônio de saída da rede e propaga-se de volta (camada por camada) através da rede.





- Cada neurônio escondido ou de saída de um MLP realiza. duas computações:
 - Sinal de função que aparece na saída de um neurônio, expresso como um função não-linear contínua do sinal de entrada e pesos associados.
 - Estimativa do vetor gradiente (isto é, os gradientes da superfície de erro com respeito aos pesos conectados às entradas de um neurônio), necessária para o passo para trás através da rede.

Sumário

- 1 Introdução
 - O Perceptron de camada única
 - O Perceptron Multicamadas
- Back-propagation (BP)
 - Algoritmo LMS
 - Gradientes
 - Função de Ativação
- MLPs
 - XOR
 - Generalização
 - Aproximação de Funções
 - Validação
- Convolução
 - Redes Convolucionais



Algoritmo de aprendizagem LMS

- Algoritmo de aprendizagem usado por perceptrons de uma única camada.
- LMS = Least-Mean-Square.
- Seja um conjunto de treinamento composto de / padrões de entrada/saída desejada.
- Como a rede tem m unidades de entrada x e n unidades de saída desejada d, cada um dos l padrões é do tipo:

$$((x_1,...,x_m),(d_1,...,d_n))$$

- Uma vez que se apresenta à rede os / padrões de treinamento, pode-se obter uma medida do erro produzido pela rede.
- O erro é função:
 - de cada padrão, e
 - do erro produzido em cada unidade de saída, quando cada padrão é apresentado.

<ロ > → □ > → □ > → □ > □ □ □ の Q ○

Treinamento Supervisionado: Regra delta

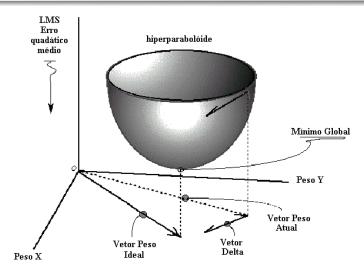


Figure: A direção do gradiente negativo é a de descida mais íngreme (steepest descent).

Algoritmo de aprendizagem LMS

- Se...
 - a rede aprende perfeitamente os padrões de treinamento, e
 - os padrões de treinamento refletem perfeitamente a tarefa que se quer aprender
- Então...
 - após o treinamento, o erro será zero.
- A principal causa do erro vem das diferenças entre saída real e saída desejada, que decorre da saída produzida por pesos (e biases) incorretos.
- Aprender significa achar os pesos que tornem mínimo o erro.

Algoritmo de aprendizagem LMS

O erro total ξ após o treinamento é:

$$\xi(w) = \sum_{p=1}^{l} \xi_p \tag{2}$$

onde ξ_p é o erro produzido quando o p-ésimo padrão de treinamento é apresentado à rede.

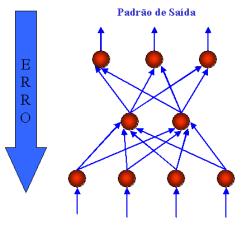
 O erro ξ_p pode ser medido de várias maneiras, mas a medida mais usada é o *erro quadrático médio*:

$$\xi_p = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} (d_k - y_k)^2 \tag{3}$$

Back-propagation

- A dificuldade de aplicar a regra delta: como calcular o erro para uma unidade da camada escondida?
- Solução: (Error) Back-propagation ⇒ Generalização da regra delta.
- Back-propagation é um algoritmo supervisionado, que requer duas fases:
 - propagação da ativação, e
 - retropropagação do erro.
- permite calcular o erro baseado só em informação local: disponível nos pesos e unidades próximas ao peso que está sendo modificado (como no SNC).

Error Back-propagation





Padrão de Entrada

Algoritmo LMS Gradientes Função de Ativação

Gradiente [4]

Gradiente:

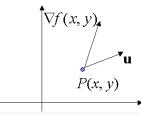
$$\nabla f(x,y) = \left(\frac{\partial}{\partial x} f(x,y), \frac{\partial}{\partial y} f(x,y)\right) \tag{4}$$

Derivada direcional:

$$D_{u}f(x,y) = \nabla f(x,y).\mathbf{u} = ||\nabla f(x,y)|| ||\mathbf{u}|| ||\cos\gamma||$$
 (5)

$$D_{u}f(x,y) = \parallel \nabla f(x,y) \parallel \parallel \cos \gamma \parallel$$
 (6)

 D_uf(x, y) é a taxa de variação de f(x, y) na direção definida por u.



Gradiente [4]

- Teorema do gradiente: Seja f uma função de duas variáveis diferenciável no ponto P(x, y).
 - O máximo de $D_u f(x, y)$ em P(x, y) é $\| \nabla f(x, y) \|$.
 - O máximo da taxa de crescimento de f(x, y) em P(x, y) ocorre na direção de $\nabla f(x, y)$.
- Corolário: Seja f uma função de duas variáveis, diferenciável no ponto P(x, y).
 - O mínimo de $D_u f(x, y)$ em P(x, y) é $\| \nabla f(x, y) \|$.
 - O máximo da taxa de decrescimento de f(x, y) em P(x, y) ocorre na direção de $-\nabla f(x, y)$.

Gradiente [4]

Método do Gradiente Descendente (GD):

$$\Delta \mathbf{w}_{ij} = -\eta \frac{\partial \xi_j}{\partial \mathbf{w}_{ij}} \tag{7}$$

- Cada peso sináptico i do elemento processador j é atualizado proporcionalmente ao negativo da derivada parcial do erro deste processador com relação ao peso.
- Logo

$$\Delta w_{ij} = -\eta \frac{\partial \xi_j}{\partial w_{ij}} = -\eta \frac{\partial \xi_j}{\partial y_j} \frac{\partial y_j}{\partial w_{ij}}$$
 (8)

- Como $\xi_j = \frac{1}{2}(d_j y_j)^2$, $\frac{\partial \xi_j}{\partial y_i} = 2.\frac{1}{2}(d_j y_j).(-1)$.
- Como $y_j = \sum x_i w_{ij} + \theta_j, \ \frac{\partial y_j}{\partial w_{ii}} = x_i$
- Assim, $\Delta w_{ii} = -\eta x_i (d_i y_i)$

Energia do erro

 O sinal de erro na saída do neurônio j na iteração n (isto é, apresentação do n-ésimo exemplo de treinamento) é definido por:

$$e_j(n) = d_j(n) - y_j(n)$$
 (9)

- Define-se o valor instantâneo da energia do erro para o neurônio j como $\frac{1}{2}e_i^2(n)$.
- O valor instantâneo $\xi(n)$ da energia do erro total é obtida somando $\frac{1}{2}e_i^2(n)$ de todos os neurônios da camada de saída:

$$\xi(n) = \frac{1}{2} \sum_{j \in C} e_j^2(n) \tag{10}$$

onde o conjunto C inclui todos os neurônios da camada de saída.



Energia do erro

 A energia do erro quadrático médio é obtida somando ξ(n) de todo n e normalizando em relação a N, o número total de padrões (exemplos) do conjunto de treinamento:

$$\xi_{av} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \xi(n)$$
 (11)

- $\xi(n)$, e portanto ξ_{av} , é função de todos os parâmetros livres (pesos sinápticos e biases).
- ξ_{aν} representa a função custo como uma medida da performance do aprendizado.
- O objetivo é minimizar ξ_{av} , sendo para isso, usada uma aproximação similar à adotada para a derivação do algoritmo LMS.

- Considera-se um método onde os pesos são atualizados numa base padrão a padrão até que uma época tenha acontecido, isto é, até que todo o conjunto de treinamento tenha sido apresentado à rede.
- Os ajustes aos pesos são feitos de acordo com os respectivos erros computados para cada padrão apresentado à rede.
- A média aritmética destas mudanças de peso é uma estimativa da mudança real resultante da modificação dos pesos baseada na minimização da função custo ξ_{av} sobre todo o conjunto de treinamento.

Campo local induzido

• O campo local induzido $v_j(n)$ produzido na entrada da função de ativação associada com o neurônio j é:

$$v_{j}(n) = \sum_{i=0}^{m} w_{ji}(n)y_{i}(n)$$
 (12)

onde *m* é o número total de entradas (excluindo o *bias*) aplicadas ao neurônio *j*.

- O peso sináptico w_{j0} (correspondendo à entrada fixa $y_0 = +1$) é igual ao bias b_i aplicado ao neurônio j.
- Portanto o sinal de função y_j(n) que aparece na saída do neurônio j na iteração n é

$$y_j(n) = \varphi_j(v_j(n)) \tag{13}$$

• Similarmente ao algoritmo LMS, BP aplica uma correção $\Delta w_{ji}(n)$ ao peso sináptico $w_{ji}(n)$ proporcional à derivada parcial $\partial \xi(n)/\partial w_{ji}(n)$. De acordo com a regra da cadeia, este gradiente pode ser expresso:

$$\frac{\partial \xi(n)}{\partial w_{ji}(n)} = \frac{\partial \xi(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} \frac{\partial v_j(n)}{\partial w_{ji}(n)}$$
(14)

- A derivada parcial $\partial \xi(n)/\partial w_{ji}(n)$ representa um fator de sensibilidade. que determina a direção da busca no espaço de pesos para o peso sináptico w_{ji} .
- Diferenciando ambos os lados da equação 10 com respeito a e_i(n):

$$\frac{\partial \xi(n)}{\partial e_i(n)} = e_j(n) \tag{15}$$

 Diferenciando ambos os lados da equação 9 com respeito a y_i(n):

$$\frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} = -1 \tag{16}$$

Agora diferenciando a equação 13 com respeito a v_i(n):

$$\frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} = \varphi_j'(v_j(n)) \tag{17}$$

 Finalmente, diferenciando a equação 12 com respeito a w_{ii}(n):

$$\frac{\partial v_j(n)}{\partial w_{ji}(n)} = y_i(n) \tag{18}$$

O uso das equações 15 a 18 em 14:

$$\frac{\partial \xi(n)}{\partial w_{ij}(n)} = -e_j(n)\varphi_j'(v_j(n))y_i(n) \tag{19}$$

Sumário

- 1 Introdução
 - O Perceptron de camada única
 - O Perceptron Multicamadas
- Back-propagation (BP)
 - Algoritmo LMS
 - Gradientes
 - Função de Ativação
- MLPs
 - XOR
 - Generalização
 - Aproximação de Funções
 - Validação
- Convolução
 - Redes Convolucionais



Gradiente descendente

 A correção Δw_{ji}(n) aplicada a w_{ji}(n) é definida pela regra delta:

$$\Delta w_{ji}(n) = -\eta \frac{\partial \xi(n)}{\partial w_{ji}(n)} \tag{20}$$

- O uso de sinal de menos justifica o gradiente descendente no espaço de pesos (isto é, a busca de uma direção para a mudança do peso que reduza o valor de ξ(n)).
- Assim, o uso das equações 19 em 20:

$$\Delta w_{ji}(n) = \eta \delta_j(n) y_i(n) \tag{21}$$

onde o *gradiente local* $\delta_j(n)$ é definido por

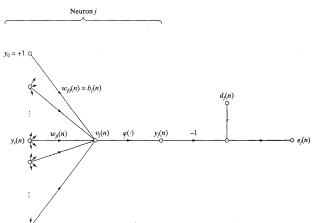
$$\delta_{j}(n) = -\frac{\partial \xi(n)}{\partial v_{j}(n)} = \frac{\partial \xi(n)}{\partial e_{j}(n)} \frac{\partial e_{j}(n)}{\partial y_{j}(n)} \frac{\partial y_{j}(n)}{\partial v_{j}(n)} = e_{j}(n) \varphi_{j}'(v_{j}(n))$$
(22)

Gradiente local

- De acordo com a equação 22, o gradiente local $\delta_j(n)$ para o neurônio de saída j é igual ao produto do sinal de erro correspondente $e_j(n)$ para esse neurônio e a derivada $\varphi'_i(v_j(n))$ da função de ativação associada.
- Observe que, a partir das equações 21 e 22, o sinal de erro e_j(n) é um fator chave no ajuste de pesos Δw_{jj}(n).
- Dois casos distintos:
 - oneurônio j é saída: simples, pois há uma resposta desejada. Usa-se a equação 9 para computar o sinal de erro $e_j(n)$ associado a este neurônio; veja figura 2. Determinado $e_j(n)$, é fácil computar o gradiente local $\delta_j(n)$ usando a equação 22.
 - e neurônio j é escondido: como penalizar ou recompensar neurônios escondidos?

Neurônio de saída

Figure: Grafo do fluxo de sinal mostrando os detalhes do neurônio de saída j [2].



Neurônio escondido

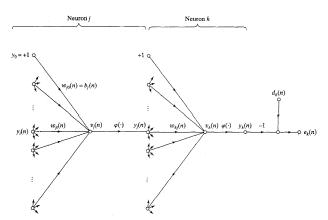
- Caso 2: Neurônio j é escondido:
 - Neste caso, não há resposta desejada para este neurônio.
 - O sinal de erro deve ser determinado recursivamente em termos dos sinais de erro de todos os neurônios aos quais o neurônio escondido está diretamente conectado: BP torna-se complicado!
 - Veja a situação retratada na figura 3, que mostra o neurônio j como um nó escondido da rede.
 - De acordo com a equação 22, pode-se redefinir o gradiente local $\delta_i(n)$ para o neurônio escondido j como

$$\delta_{j}(n) = -\frac{\partial \xi(n)}{\partial y_{i}(n)} \frac{\partial y_{j}(n)}{\partial v_{i}(n)} = -\frac{\partial \xi(n)}{\partial y_{i}(n)} \varphi_{j}'(v_{j}(n))$$
(23)

onde na segunda parte foi usada a equação 17.

Neurônio de saída conectado ao neurônio escondido

Figure: Grafo do fluxo de sinal mostrando os detalhes do neurônio de saída k conectado ao neurônio escondido j [2].



• Para calcular a derivada parcial $\frac{\partial \xi(n)}{\partial y_j(n)}$, da figura 3, vê-se que:

$$\xi(n) = \frac{1}{2} \sum_{k \in C} e_k^2(n)$$
 (24)

que é a equação 10 com o k no lugar do j.

 Diferenciando a equação 24 com respeito ao sinal de função y_i(n) tem-se

$$\frac{\partial \xi(n)}{\partial y_j(n)} = \sum_k e_k \frac{\partial e_k(n)}{\partial y_j(n)}$$
 (25)

• Depois, usa-se a regra da cadeia para a derivada parcial $\frac{\partial e_k(n)}{\partial y_i(n)}$, re-escrevendo a equação 25 na forma equivalente:

$$\frac{\partial \xi(n)}{\partial y_j(n)} = \sum_{k} e_k \frac{\partial e_k(n)}{\partial v_k(n)} \frac{\partial v_k(n)}{\partial y_j(n)}$$
(26)

• Entretanto, da figura 3, nota-se que:

$$e_k(n) = d_k(n) - y_k(n) = d_k(n) - \varphi_k(v_k(n))$$
 (27)

Portanto.

$$\frac{\partial e_k(n)}{\partial v_k(n)} = -\varphi'_k(v_k(n)) \tag{28}$$

 Nota-se da figura 3 que, para o neurônio de saída k, o campo local induzido é

$$v_k(n) = \sum_{j=0}^{m} w_{kj}(n) y_j(n)$$
 (29)

onde m é o número total de entradas (excluindo o bias) aplicadas ao neurônio k.

• De novo, $w_{k0}(n) = b_k(n)$ e a entrada correspondente é fixa em +1.

Fórmula do BP

Diferenciando a equação 29 com respeito a y_i(n):

$$\frac{\partial v_k(n)}{\partial y_i(n)} = w_{kj}(n) \tag{30}$$

Usando as equações 28 e 30 em 26:

$$\frac{\partial \xi(n)}{\partial y_j(n)} = -\sum_k e_k(n)\varphi_k'(v_k(n))w_{kj}(n) = -\sum_k \delta_k(n)w_{kj}(n)$$
(31)

onde, na segunda parte, foi usada a definição de gradiente local $\delta_k(n)$ da equação 22.

 Finalmente, usando a equação 31 em 23, tem-se a fórmula do *back-propagation* para o gradiente local $\delta_i(n)$:

$$\delta_j(n) = \varphi_j'(v_j(n)) \sum_k \delta_k(n) w_{kj}(n)$$
 (32)

- A figura 10 abaixo [2] mostra a representação do grafo do fluxo de sinal da equação 32, assumindo que a camada de saída contém m_L neurônios.
- A correção Δw_{ji}(n) aplicada ao peso sináptico entre os neurônios i e j é definida pela regra delta:

$$\Delta w_{ji}(n) = \eta . \delta_j(n) . y_i(n) \tag{33}$$

onde $y_i(n)$ é o sinal de entrada do neurônio j.

- O gradiente local $\delta_i(n)$ depende se o neurônio i é um neurônio de saída ou escondido:
 - **1** Se j é de saída, $\delta_i(n)$ é igual ao produto da derivada $\varphi'_i(v_j(n))$ e o sinal de erro $e_j(n)$, ambos associados ao neurônio *j* (vide equação 22).
 - 2 Se j é escondido, $\delta_i(n)$ é igual ao produto da derivada associada $\varphi'_i(v_i(n))$ e a soma ponderada dos δ s computada para os neurônios da próxima camada escondida ou de saída que estão conectados ao neurônio *j* (vide equação 32).
- A aplicação do BP requer dois passos de computação:
 - Passo para frente: os pesos mantêm-se fixos e os sinais de função são computados neurônio por neurônio.
 - Passo para trás: os pesos são alterados, através do cálculo do gradiente local para cada neurônio, da camada de saída para a entrada.

- Passo para frente:
 - Sinal de função:

$$y_i(n) = \varphi(v_i(n)) \tag{34}$$

onde

$$v_{j}(n) = \sum_{i=0}^{m} w_{ji}(n)y_{i}(n)$$
 (35)

 Se j está na primeira camada escondida, m = m₀ e o índice i refere-se ao i-ésimo terminal de entrada da rede:

$$y_i(n) = x_i(n) \tag{36}$$

onde $x_i(n)$ é o *i*-ésimo elemento do vetor (padrão) de entrada.

 Se j está na camada de saída, m = m_L e j refere-se ao j-ésimo terminal de saída:

$$y_i(n) = o_i(n) \tag{37}$$

onde $o_j(n)$ é o j-ésimo elemento do vetor (padrão) de saída.

Passo para frente (cont.):

- $o_j(n)$ é comparada à resposta desejada $d_j(n)$, obtendo-se o sinal de erro $e_j(n)$ para o j-ésimo neurônio de saída.
- Portanto, a fase para frente começa na primeira camada escondida através da apresentação do vetor de entrada e termina na camada de saída computando o sinal de erro para cada neurônio desta camada.

Passo para trás:

- Começa na camada de saída passando os sinais de erro "para trás" na rede, camada por camada, recursivamente computando o δ (gradiente local) para cada neurônio.
- Esse processo recursivo permite mudanças nos pesos sinápticos de acordo com a regra delta da equação 33.
- Para um neurônio localizado na camada de saída, δ é igual ao sinal de erro multiplicado pela primeira derivada de sua não-linearidade (figura 10).
- Para as outras camadas, calcula-se o δ através da equação 32.

Sumário

- 1 Introdução
 - O Perceptron de camada única
 - O Perceptron Multicamadas
- Back-propagation (BP)
 - Algoritmo LMS
 - Gradientes
 - Função de Ativação
- 3 MLPs
 - XOR
 - Generalização
 - Aproximação de Funções
 - Validação
- 4 Convolução
 - Redes Convolucionais



Função de Ativação

- Para a computação do δ de cada neurônio do MLP há a necessidade de se conhecer a derivada da função de ativação $\varphi(\cdot)$ associada ao neurônio.
- Para que exista a derivada, $\varphi(\cdot)$ deve ser contínua (diferenciável).
- Não-linearidade sigmoidal:
 - Função logística:

$$\varphi_j(v_j(n)) = \frac{1}{1 + exp(-av_j(n))}, \quad a > 0, -\infty < v_j(n) < \infty$$
(38)

2 Função tangente hiperbólica:

$$\varphi_i(v_i(n)) = a \tanh(bv_i(n)), \quad (a,b) > 0$$
 (39)

onde a e b são constantes.



Função de Ativação

1 Função logística:

- De acordo com esta não-linearidade, a amplitude da saída fica 0 ≤ y_i ≤ 1.
- Diferenciando a equação 38 com respeito a v_j(n):

$$\varphi_j'(v_j(n)) = \frac{a \exp(-av_j(n))}{(1 + \exp(-av_j(n)))^2}$$
(40)

• Com $y_j(n) = \varphi_j(v_j(n))$, elimina-se o termo exponencial:

$$\varphi'_{j}(v_{j}(n)) = a y_{j}(n)(1 - y_{j}(n))$$
 (41)

• Para um neurônio j da camada de saída, $y_j(n) = o_j(n)$:

$$\delta_j(n) = e_j(n)\varphi_j'(v_j(n)) = a(d_j(n) - o_j(n))o_j(n)(1 - o_j(n))$$
 (42)

Por outro lado, para j escondido:

$$\delta_j(n) = \varphi_j'(v_j(n)) \sum_k \delta_k(n) w_{kj}(n) = a y_j(n) (1 - y_j(n)) \sum_k \delta_k(n) w_{kj}(n)$$

(43)

Função de Ativação

1 Função logística (cont.):

- Note, a partir da equação 41, que a derivada $\varphi'_j(v_j(n))$ tem seu valor máximo em $y_j(n) = 0.5$ e seu valor mínimo (zero) em $y_j(n) = 0$ ou $y_j(n) = 1$.
- Como a quantidade de mudança em um peso sináptico é proporcional à derivada φ'_j(v_j(n)), segue que os pesos são mudados o máximo onde os sinais de função estão na metade: característica do aprendizado do BP que contribui para sua estabilidade [6].

2 Função tangente hiperbólica:

A derivada de 39 com respeito a v_j(n):

$$\varphi_j'(v_j(n)) = ab \ sech^2(bv_j(n)) = ab(1 - tanh^2(bv_j(n))) \quad (44)$$

$$\varphi'_{j}(v_{j}(n)) = \frac{b}{a}(a - y_{j}(n))(a + y_{j}(n))$$
 (45)



Função de Ativação

- 2 Função tangente hiperbólica (cont.):
 - Para j na saída:

$$\delta_{j}(n) = e_{j}(n)\varphi'_{j}(v_{j}(n)) = \frac{b}{a}(d_{j}(n) - o_{j}(n))(a - o_{j}(n))(a + o_{j}(n))$$
(46)

Para j na escondida:

$$\delta_j(n) = \varphi_j'(v_j(n)) \sum_k \delta_k(n) w_{kj}(n)$$
 (47)

$$\delta_j(n) = \frac{b}{a}(a - y_j(n))(a + y_j(n)) \sum_k \delta_k(n) w_{kj}(n)$$
 (48)

• Usando as equações 42 e 43 para a função logística e as equações 46, 47 e 48 para a tanh, pode-se calcular δ_j sem conhecimento explícito da função de ativação.

Taxa de aprendizado

- BP provê uma "aproximação" à trajetória no espaço de pesos computado pelo método do steepest descent.
- Quanto menor for η , menores as mudanças nos pesos sinápticos entre duas iterações e mais suave a trajetória no espaço de pesos.
- O custo é um aprendizado mais lento.
- Para η muito grande, a rede pode ficar instável.
- Uma forma de aumentar η sem o perigo da instabilidade é modificar a regra delta da equação 21 incluindo um termo momentum [6]:

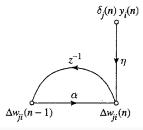
$$\Delta w_{ji}(n) = \alpha \Delta w_{ji}(n-1) + \eta \delta_j(n) y_i(n)$$
 (49)

onde α , número positivo, chamado de *constante momentum*, que controla o *loop* de retro-alimentação que age em volta de $\Delta w_{ji}(n)$ (figura 7 [2]).

Taxa de aprendizado

- A equação 49 é chamada de **regra delta generalizada**, que inclui a regra delta da equação 21 como um caso especial ($\alpha = 0$).
- Re-escrevendo a equação 49 como uma série temporal: o índice t vai de 0 a n.

$$\Delta w_{ji}(n) = \eta \sum_{t=0}^{n} \alpha^{n-t} \delta_j(t) y_i(t)$$
 (50)



Taxa de aprendizado

Das equações 19 e 22 nota-se que

$$\delta_j(n)y_i(n) = -\frac{\partial \xi(n)}{\partial w_{ji}(n)}$$
 (51)

Assim

$$\Delta w_{ji}(n) = -\eta \sum_{t=0}^{n} \alpha^{n-t} \frac{\partial \xi(t)}{\partial w_{ji}(t)}$$
 (52)

- 3 observações:
 - Δw_{ji}(n) representa a soma de uma série temporal exponencialmente ponderada. Para que seja *convergente*: 0 ≤ | α | < 1.
 - ② Quando $\frac{\partial \xi(n)}{\partial w_{ji}(n)}$ tem o mesmo sinal algébrico em iterações consecutivas, $\Delta w_{ji}(n)$ cresce em magnitude.
 - **3** Quando $\frac{\partial \xi(n)}{\partial w_{ji}(n)}$ tem sinais opostos em iterações consecutivas, $\Delta w_{ji}(n)$ encolhe em magnitude.

Critérios de parada

- Não se pode provar que BP converge.
- Assim, não há critérios bem definidos de parada.
- A ideia é considerar as propriedades dos mínimos locais ou globais da superfície do erro.
- Seja o vetor de peso w* denotando um mínimo, seja local ou global.
- Uma condição necessária para w* ser mínimo é que o vetor gradiente g(w) (derivada parcial de primeira ordem) da superfície do erro com relação ao vetor de pesos w seja zero em w = w*.

Critério 1: O algoritmo BP converge quando a norma Euclidiana do vetor gradiente alcança um limiar de gradiente suficientemente pequeno.

Critérios de parada

- A desvantagem do critério 1 é que, para tentativas bem sucedidas, os tempos de aprendizado podem ser longos.
- Além disso, requer a computação do vetor gradiente g(w).
- Outro ponto a se considerar é que a função custo ou medida de erro ξ_{aν}(w) é estacionária no ponto w = w*:

Critério 2: O algoritmo BP converge quando a taxa absoluta de mudança no erro quadrático médio por época é suficiente pequeno.

- Essa taxa é considerada pequena na faixa de 0.1 a 1% por época (as vezes, 0.01%).
- Este critério pode resultar numa terminação prematura do processo de aprendizado.

Back-propagation

O algoritmo supervisionado *back-propagation* pode ser resumido:

- Propague a ativação
 - da camada de entrada para a escondida,
 - da camada escondida para a de saída.
- Calcule o erro.
 - para as unidades de saída,
 - Retropropague o erro para as unidades escondidas e para as de entrada.
 - Os passos 1 e 2 constituem um ciclo de ativação.

Back-propagation

- Os problemas do back-propagation:
 - É bastante caro computacionalmente (lento),
 - Não resolve bem problemas de grande porte,
 - Às vezes, a solução encontrada é um mínimo local um valor localmente mínimo para a função erro.
- Vantagens do back-propagation:
 - poder de aproximação universal:
 - dada uma função contínua, existe uma rede de duas camadas (uma escondida) que pode ser treinada por back-propagation de modo a aproximar o quanto se queira essa função.
 - algoritmo mais usado.

Sumário



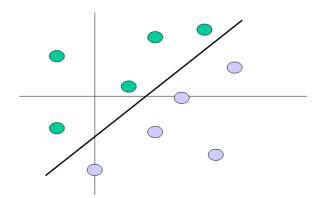
- O Perceptron de camada única
- O Perceptron Multicamadas
- Back-propagation (BP)
 - Algoritmo LMS
 - Gradientes
 - Função de Ativação
- MLPs
 - XOR
 - Generalização
 - Aproximação de Funções
 - Validação
- Convolução
 - Redes Convolucionais



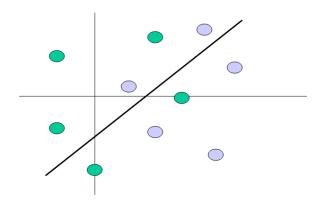
Problema XOR

- No perceptron de única camada não há neurônio escondido, porisso não é possível classificar padrões de entrada que não são linearmente separáveis.
- Entretanto, padrões não linearmente separáveis são comuns.
- Por exemplo, o problema do ou-exclusivo (XOR), que pode ser visto como um caso especial de um problema mais geral, a classificação de pontos no hipercubo unitário.
- Cada ponto no hipercubo ou é da classe 0 ou da classe 1.
- Porém, no caso do XOR, precisa-se considerar apenas os quatro cantos do *quadrado unitário*, que correspondem aos padrões de entrada (0,0), (0,1), (1,1) e (1,0).

Conjunto de pontos linearmente separáveis

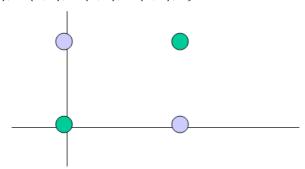


Conjunto de pontos *não*-linearmente separáveis (por 1 reta)



OU Exclusivo

• {(0,0),0;(0,1),1;(1,0),1;(1,1),0}



E por n retas?

OU Exclusivo

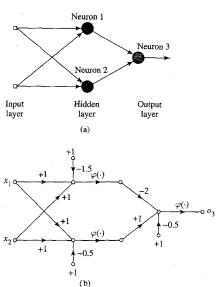
- Pode-se resolver o problema XOR usando uma única camada escondida com dois neurônios (veja figura 7a [2]).
- O grafo do fluxo de sinal é mostrado na figura 7b [2].
 Assume-se:
 - Cada neurônio é representado por um modelo de McCulloch-Pitts [3], que usa uma função limiar como função de ativação.
 - Os bits 0 e 1 são representados pelos níveis 0 e +1, respectivamente.
- O neurônio 1 da camada escondida é caracterizado como:

$$w_{11} = w_{12} = +1$$
 $b_1 = -\frac{3}{2}$ (53)

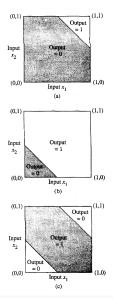
 A inclinação do limite de decisão construído por esse neurônio escondido é igual a -1 (veja figura 8a [2]).



OU Exclusivo



OU Exclusivo



OU Exclusivo

O neurônio 2 da camada escondida é caracterizado por:

$$w_{21} = w_{22} = +1$$
 $b_2 = -\frac{1}{2}$ (54)

- A orientação e posição do limite de decisão construído pelo segundo neurônio são mostrados na figura 8b [2].
- O neurônio de saída 3 é caracterizado como:

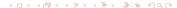
$$w_{31} = -2$$
 $w_{32} = +1$ $b_3 = -\frac{1}{2}$ (55)

 A função desse neurônio de saída é construir uma combinação linear dos limites de decisão formados pelos dois neurônios escondidos (figura 8c [2]).

Sumário

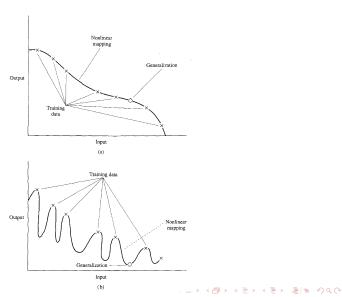


- O Perceptron de camada única
- O Perceptron Multicamadas
- Back-propagation (BP)
 - Algoritmo LMS
 - Gradientes
 - Função de Ativação
- MLPs
 - XOR
 - Generalização
 - Aproximação de Funções
 - Validação
- 4 Convolução
 - Redes Convolucionais



- No aprendizado BP, começa-se com uma amostra de treinamento e usa-se o algoritmo BP para computar os pesos sinápticos de um MLP carregando (codificando) o máximo possível de exemplos de treinamento na rede.
- A esperança é que a RNA projetada generalize: quando os mapeamentos entrada-saída computados pela rede são corretos (ou próximos) para dados de teste nunca usados na criação ou no treinamento da rede.
- Assume-se que os dados de teste são retirados da mesma população usada para gerar o conjunto de treinamento.
- O processo de aprendizado (treinamento de uma rede neural) pode ser visto como um problema de "preenchimento de curva."

- Veja na figura 4a [2] como a generalização pode ocorrer em uma rede hipotética.
- O mapeamento de entrada-saída não linear representado pela curva é computado pela rede como um resultado do aprendizado dos pontos "training data".
- O ponto "generalization" é o resultado da interpolação feita pela rede.
- <u>Problema</u>: quando a rede aprende muitos exemplos de entrada-saída pode terminar memorizando os dados de treinamento.
- Isso pode fazer com que a RNA ache uma característica (devido ao ruído) que está presente nos dados de treinamento, mas que não é verdadeira para a função modelada: overfitting ou overtraining.
- Quando uma rede é "overtrained", perde a habilidade de generalizar.



- Um exemplo de como a generalização pobre devido à memorização em uma RNA pode ocorrer é ilustrada na figura 4b [2], para os mesmos dados da figura 4a.
- "Memorização" é essencialmente uma "look-up table", que implica que o mapeamento de entrada-saída computado pela rede não é suave.
- A suavidade do mapeamento entrada-saída é relacionada aos critérios de seleção de modelo como a navalha de Occam¹: selecionar a função "mais simples" na ausência de qualquer conhecimento prévio.
- Aqui, a função mais simples significa a função mais suave que aproxima o mapeamento para um dado critério de erro, porque isso acarreta menos recursos computacionais.

Sumário

- Introdução
 - O Perceptron de camada única
 - O Perceptron Multicamadas
- Back-propagation (BP)
 - Algoritmo LMS
 - Gradientes
 - Função de Ativação
- MLPs
 - XOR
 - Generalização
 - Aproximação de Funções
 - Validação
- Convolução
 - Redes Convolucionais



Aproximações de funções

- Um MLP treinado com BP pode realizar um mapeamento de entrada-saída não-linear.
- Seja m_0 o número de nós de entrada de um MLP e $M = m_L$ o número de neurônios na camada de saída.
- O relacionamento entrada-saída da rede define um mapeamento de um espaço de entrada Euclidiano m₀-dimensional para um espaço de saída Euclidiano M-dimensional, que é infinitamente continuamente diferenciável quando a função de ativação também é.
- Ao avaliar a capacidade de um MLP a partir desse ponto de vista de mapeamento entrada-saída, surge a seguinte questão fundamental:

Qual é o número mínimo de camadas escondidas em um MLP com um mapeamento entrada-saída que provê uma realização aproximada de qualquer mapeamento contínuo?



Teorema da Aproximação Universal

 A resposta a essa pergunta (Teorema da Aproximação Universal):

Seja $\varphi(\cdot)$ uma função não-constante, limitada, monotônica-crescente e contínua. Seja I_{m_0} o hipercubo unitário m_0 -dimensional $[0,1]^{m_0}$. O espaço de funções contínuas em I_{m_0} é denotado por $C(I_{m_0})$. Então, dada qualquer função $f\ni C(I_{m_0})$ e $\epsilon>0$, existe um inteiro M e conjuntos de constantes reais α_i , b_i e w_{ij} , onde $i=1,...,m_1$ e $j=1,...,m_0$ tais que pode-se definir

$$F(x_1,...,x_{m_0}) = \sum_{i=1}^{m_1} \alpha_i \varphi(\sum_{j=1}^{m_0} w_{ij} x_j + b_i)$$
 (56)

como uma realização aproximada da função f(·), ou seja,

$$|F(x_1,...,x_{m_0}) - f(x_1,...,x_{m_0})| < \epsilon$$
 (57)

para todos $x_1, x_2, ..., x_{m_0}$ que estão no espaço de entrada.

Teorema da Aproximação Universal

- O TAU é diretamente aplicável ao MLP.
- A função logística 1/(1+exp(-v)) usada como a não-linearidade do MLP é não-constante, limitada e monotônica-crescente.
- A equação 56 representa a saída de um MLP descrito como:
 - A rede tem m_0 nós de entrada $x_1, ..., x_{m_0}$ e uma única camada escondida com m_1 neurônios;
 - O neurônio escondido i tem pesos sinápticos w_{i1}, ..., w_{m0}, e bias b_i;
 - **3** A saída da rede é uma combinação linear das saídas dos neurônios escondidos, com $\alpha_1,...,\alpha_{m_1}$ definindo os pesos sinápticos da camada de saída.

Introdução Back-propagation (BP) MLPs Convolução XOR Generalização Aproximação de Funções Validação

Teorema da Aproximação Universal

- O TAU é um teorema de existência, já que provê a justificativa matemática para a aproximação de uma função contínua arbitrária.
- A equação 56 generaliza aproximações por séries finitas de Fourier.
- Estabelece que uma única camada escondida é suficiente para um MLP computar uma aproximação ε uniforme para um dado conjunto de treinamento representado pelo conjunto de entradas x₁,..., x_{m₀} e uma saída desejada f(x₁,..., x_{m₀}).
- No entanto, o teorema não diz que uma única camada escondida é ótima no sentido de tempo de aprendizado, facilidade de implementação ou (mais importante) generalização.

Sumário



- O Perceptron de camada única
- O Perceptron Multicamadas
- Back-propagation (BP)
 - Algoritmo LMS
 - Gradientes
 - Função de Ativação
- MLPs
 - XOR
 - Generalização
 - Aproximação de Funções
 - Validação
- Convolução
 - Redes Convolucionais



Introdução Back-propagation (BP) MLPs Convolução XOR Generalização Aproximação de Funções Validação

Validação cruzada

- A essência do aprendizado BP é codificar o mapeamento entrada-saída (representado por um conjunto de exemplos rotulados) nos pesos sinápticos e limiares de um MLP.
- A esperança é que a rede seja bem treinada, tal que aprenda o suficiente do passado para generalizar no futuro.
- Pode-se ver o problema de seleção da rede como a escolha, dentro de um conjunto de estruturas de modelos candidatos (parametrização), da "melhor" estrutura de acordo com certo critério.
- Nesse contexto, uma ferramenta da estatística conhecida como validação cruzada pode ajudar.
- Primeiro, o conjunto de dados disponível é particionado aleatoriamente em um conjunto de treinamento e um conjunto de teste.

Introdução Back-propagation (BP) MLPs Convolução XOR Generalização Aproximação de Funções Validação

Validação cruzada

- O conjunto de treinamento é então dividido em:
 - Subconjunto de estimativa: usado para selecionar o modelo.
 - Subconjunto de validação: usado para testar ou validar o modelo.
- A motivação aqui é validar o modelo em um conjunto de dados diferente do usado para a estimativa de parâmetros.
- Dessa forma, utiliza-se o conjunto de treinamento para avaliar a performance de vários modelos candidatos e daí escolher o "melhor."
- É possível, no entanto, que o modelo com valores de parâmetros de melhor performance termine overfitting o subconjunto de validação.
- Nesse caso, a performance da generalização é medida no conjunto de teste, diferente do subconjunto de validação.

- Introdução
 - O Perceptron de camada única
 - O Perceptron Multicamadas
- Back-propagation (BP)
 - Algoritmo LMS
 - Gradientes
 - Função de Ativação
- MLPs
 - XOR
 - Generalização
 - Aproximação de Funções
 - Validação
- Convolução
 - Redes Convolucionais

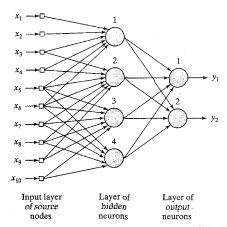


Como incluir informação prévia no projeto de uma RNA

- Procedimento ad-hoc para construir informação prévia no design de uma RNA:
 - Restringir a arquitetura da rede através do uso de conexões locais conhecidas como campos receptivos.
 - Limitar a escolha dos pesos sinápticos através do uso do compartilhamento de pesos.
- Essas duas técnicas, especialmente a segunda, têm um efeito colateral benéfico: o número de parâmetros livres na rede é reduzido significativamente.
- Considere a rede feedforward parcialmente conectada da figura 4.
- Essa rede apresenta uma arquitetura restringida por construção.
- Os seis nós fonte superiores constituem o campo receptivo para o neurônio escondido 1.

Como incluir informação prévia no projeto de uma RNA

Figure: Ilustração do uso combinado do campo receptivo e compartilhamento de pesos [2].



Introdução Back-propagation (BP) MLPs Convolução

Como incluir informação prévia no projeto de uma RNA

- Para satisfazer a restrição do compartilhamento de pesos, deve-se usar o mesmo conjunto de pesos sinápticos para cada um dos neurônios da camada escondida.
- Portanto, para seis conexões locais por neurônio escondido e um total de quatro neurônios escondidos (figura 4), pode-se expressar o campo local induzido do neurônio escondido *j* como (**soma de convolução**):

$$v_j = \sum_{i=1}^6 w_i x_{i+j-1}, \qquad j = 1, 2, 3, 4$$
 (58)

onde $\{w_i\}_{i=1}^6$ constitui o mesmo conjunto de pesos compartilhados por todos os quatro neurônios escondidos e x_k é o sinal do nó fonte k = i + j - 1.

 É por essa razão que uma rede feedforward usando conexões locais e compartilhamento de pesos na forma descrita é conhecida como rede convolucional.

- Foco no layout estrutural do MLP: classe especial chamada redes convolucionais.
- Uma rede convolucional é um MLP projetado para reconhecer formas bi-dimensionais com um alto grau de invariância para translação, mudança de escala, e outras formas de distorção.
- Esta tarefa difícil é aprendida de uma maneira supervisionada por uma rede cuja estrutura inclui as seguintes formas de restrições:
 - Extração de características,
 - Mapeamento de características,
 - Sub-amostragem.

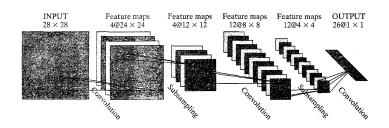
Restrições:

- 1 Extração de características: Cada neurônio obtém suas entradas sinápticas de um campo receptivo local da camada anterior, forçando-o a extrair características locais. A posição relativa de uma característica extraída em relação às outras é preservada.
- 2 Mapeamento de características: Cada camada computacional da rede é composta de múltiplos mapas de características, onde cada mapa tem a forma de um plano no qual os neurônios individuais são restringidos para compartilhar o mesmo conjunto de pesos sinápticos. Efeitos benéficos:
 - - Invariância de deslocamento: uso da convolução seguido de uma função sigmoide (achatamento).
 - Redução no número de parâmetros livres, acompanhado de compartilhamento de pesos.



- Restrições (cont.):
 - 3 Sub-amostragem: cada camada convolucional é seguida por uma camada computacional que realiza cálculo da média local e sub-amostragem, onde a resolução do mapa de características é reduzida. Tem o efeito de reduzir a sensibilidade da saída do mapa a deslocamentos e outras formas de distorção.
- Todos os pesos em todas as camadas de uma rede convolucional são aprendidos através do treinamento.
- No entanto, a rede aprende a extrair suas próprias características automaticamente.

- A figura 8 abaixo [2] mostra um layout arquitetural de uma rede convolucional com uma camada de entrada, quatro camadas escondidas e uma camada de saída.
- Esta rede foi projetada para realizar processamento de imagem: reconhecimento de caracteres manuscritos.



- A camada de entrada, com 28 x 28 nós sensoriais, recebe as imagens de diferentes caracteres, centralizados e normalizados.
- Então, a computação alterna entre convolução e sub-amostragem:
 - 1^a escondida: convolução. 4 mapas de características com cada mapa consistindo de 24 × 24 neurônios. Cada neurônio tem um campo receptivo de tamanho 5×5 .
 - 2^a escondida: sub-amostragem e média local. 4 mapas de características com cada mapa consistindo de 12 × 12 neurônios. Cada neurônio tem um campo receptivo de tamanho 2 × 2, um coeficiente treinável, um bias treinável e uma função de ativação sigmoide.
 - 3ª escondida: convolução. 12 mapas de características com cada mapa consistindo de 8 × 8 neurônios. Cada neurônio tem conexões sinápticas com vários mapas de características das camadas escondidas anteriores.

- Computação (cont.):
 - 4^a escondida: sub-amostragem e média local. 12 mapas de características com cada mapa consistindo de 4 × 4 neurônios.
 - A camada de saída realiza um estágio final da convolução. Consiste de 26 neurônios, atribuídos a um dos 26 caracteres possíveis. Cada neurônio tem um campo receptivo de tamanho 4×4 .
- Efeito "bipiramidal:" a cada camada convolucional ou de sub-amostragem, o número de mapas de características é aumentado enquanto que a resolução espacial é reduzida, comparada a camada anterior correspondente.
- O MLP da figura 8 contém 100.000 conexões sinápticas mas apenas 2.600 parâmetros livres.
- Esta redução dramática é conseguida através do uso de compartilhamento de pesos.

- A capacidade da máguina de aprendizado é reduzida, que por sua vez, aumenta sua habilidade de generalização.
- Os ajustes dos parâmetros livres são feitos usando uma forma estocástica (sequencial) do aprendizado back-propagation.
- O uso de compartilhamento de pesos torna possível implementar a rede convolucional de forma paralela: outra vantagem sobre o MLP totalmente conectado.
- Duas lições (figura 8):
 - Um MLP de tamanho gerenciável é capaz de aprender um mapeamento complexo, de alta dimensão e não-linear restringindo seu projeto através da incorporação de conhecimento prévio sobre a tarefa.
 - Os níveis dos pesos sinápticos e bias podem ser aprendidos repetindo o algoritmo BP simples através do conjunto de treinamento.

Bibliografia I

- A. E. Bryson and Y.-C. Ho Applied Optimal Control. Blaisdell, New York, 1969.
- [2] S. Haykin

 Neural networks a comprehensive foundation.

 2nd. edition. Prentice Hall, 1999.
- [3] W. S. McCulloch and W. Pitts
 A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity
 Bulletin of Mathematical Biophysics, 5, pp. 115-133, 1943.

Bibliografia II

- [4] R. A. F. Romero SCC-5809 Redes Neurais.
 - Slides e listas de exercícios. Programa de Pós-Graduação em Ciência de Computação e Matemática Computacional. ICMC/USP, 2010.
- [5] F. Rosenblatt The perceptron: A perceiving and recognizing automaton. Report 85-460-1, Project PARA, Cornell Aeronautical Lab., Ithaca, NY, 1957.
- [6] D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, and R. J. Williams Learning representations of back-propagation errors. Nature (London), vol. 323, pp. 533–536, 1986.