Redes neuronais

Ano lectivo 2010/2011 – Secção 18.7

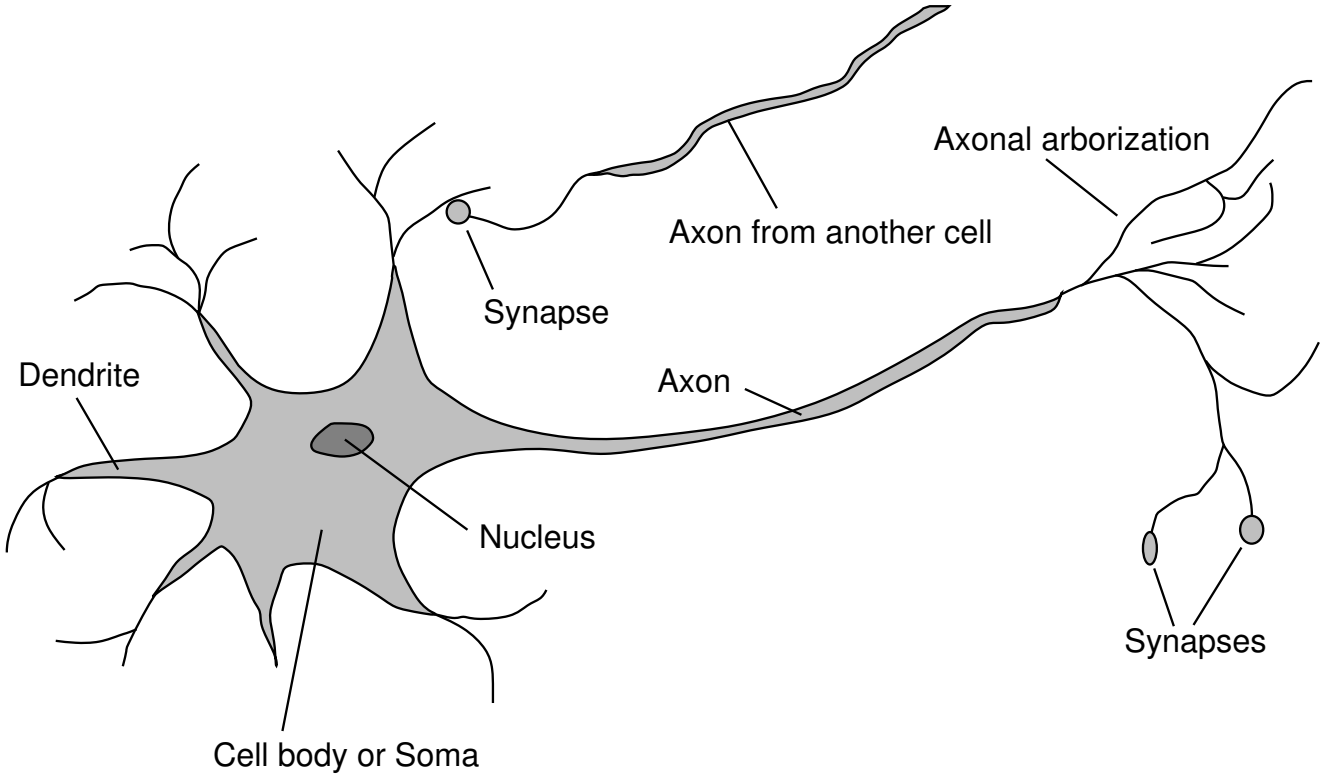
Resumo

- ♢ Cérebro
- ♢ Redes Neuronais
- ♢ Perceptrões
- ♢ Redes neuronais multicamada
- ♢ Aplicações de redes neuronais

Cérebro

10^{11} neurónios de > 20 tipos, 10^{14} sinapes, 1ms–10ms tempo de ciclo

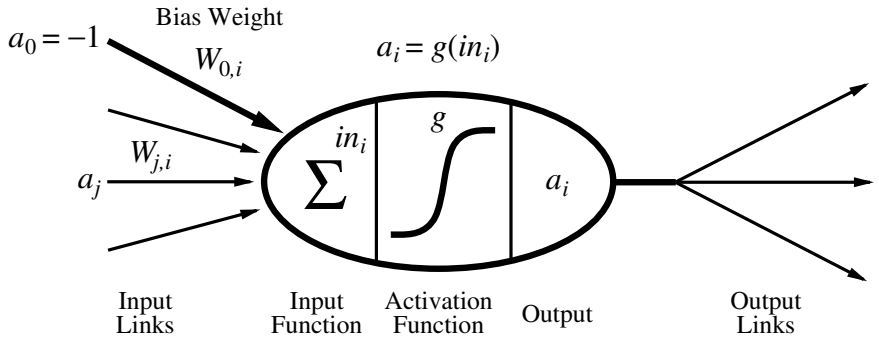
Sinais têm ruído "spike trains" de potenciais eléctricos



Unidade de McCulloch–Pitts

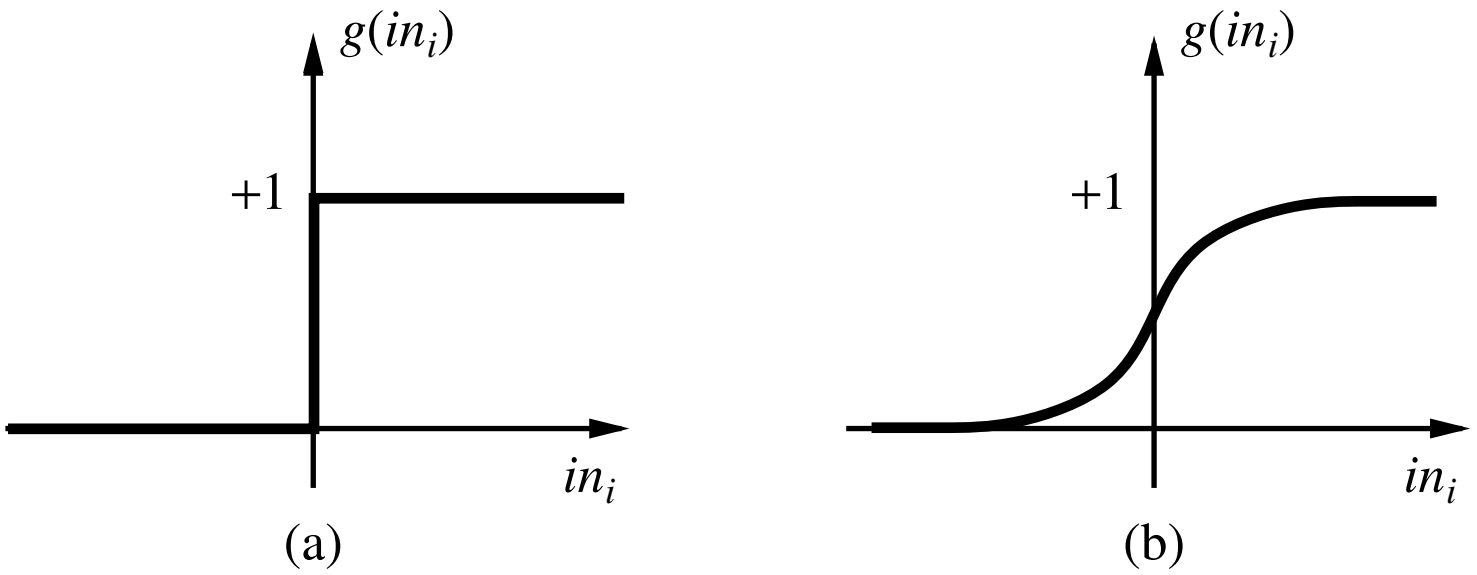
Saída é uma função linear "esmagada" das entradas:

$$a_i \leftarrow g(in_i) = g\left(\sum_j W_{j,i} a_j\right)$$



Uma simplificação rude dos neurónios reais, mas o seu objectivo é obter conhecimento sobre o que conseguem fazer as redes de unidades simples

Funções de activação



(a) é a função degrau ou função limiar

(b) é a função sigmóide $1/(1+e^{-x})$

Alteração da polarização (bias weight) $W_{0,i}$ desloca a localização do limiar

Funções de activação

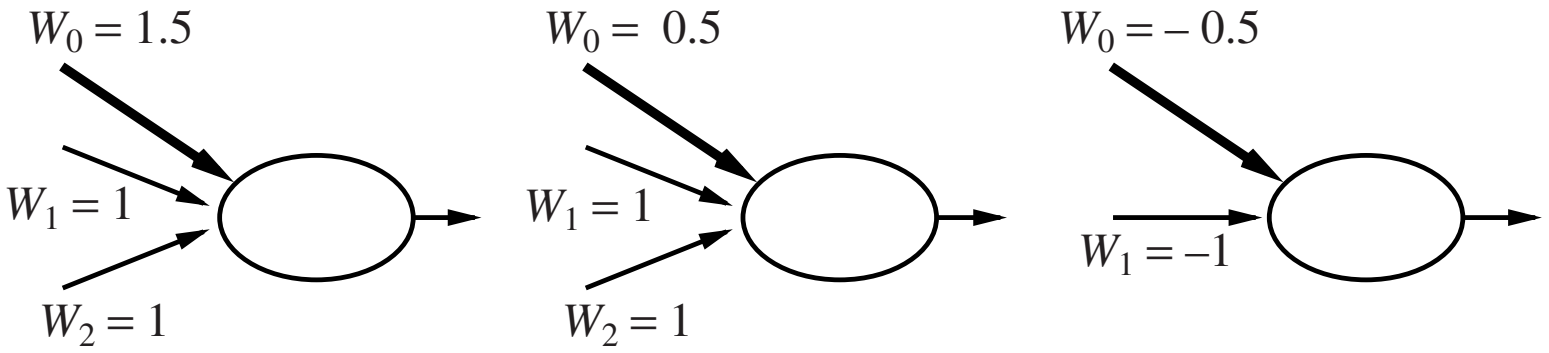
É importante que a função seja não-linear, caso contrário a saída reduz-se a uma combinação linear das entradas!

Os algoritmos de aprendizagem que estudaremos assumem que a função é diferenciável.

Outros exemplos:

- Tangente Hiperbólica (contra-domínio $[-1, 1]$)
- Seno (contra-domínio $[-1, 1]$)

Implementação das funções lógicas



AND **OR** **NOT**

McCulloch e Pitts: qualquer função Booleana pode ser implementada combinando as construções anteriores.

Topologia das redes

Redes alimentadas para a frente:

- rede monocamada de perceptrões
- rede multicamada de perceptrões

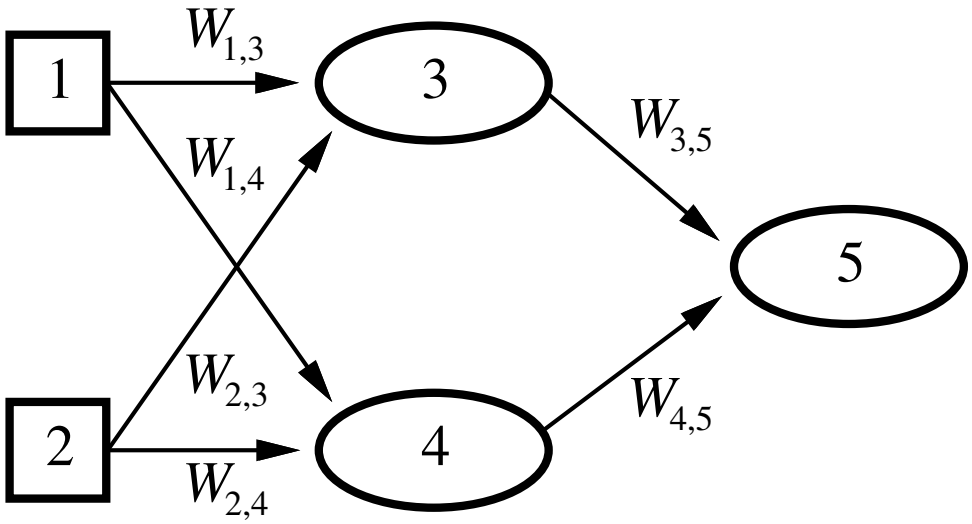
Redes alimentadas para a frente implementam funções, não têm estado interno

Redes recorrentes:

- Redes de Hopfield têm pesos simétricos ($W_{i,j} = W_{j,i}$)
  $g(x) = \mathsf{sign}(x)$, $a_i = \pm 1$; **memórias holográficas associativas**
- Máquinas de Boltzmann utilizam funções de activação estocásticas,

Nota: As redes recorrentes têm ciclos dirigidos com atrasos (delays)
$\Rightarrow$ têm estado interno (como flip-flops), podem oscilar etc.

Exemplo de rede alimentada para a frente

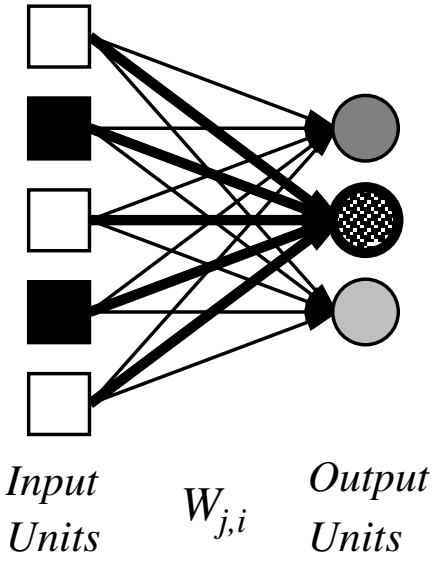


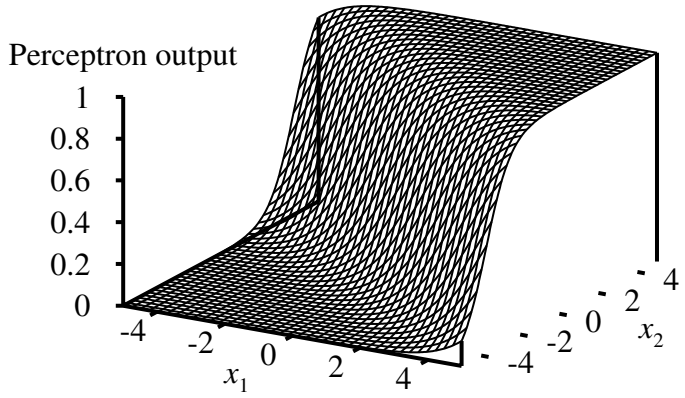
Rede alimentada para a frente = família parametrizada de funções não-lineares:

$$\begin{aligned} a_5 &= g(W_{3,5} \cdot a_3 + W_{4,5} \cdot a_4) \\ &= g(W_{3,5} \cdot g(W_{1,3} \cdot a_1 + W_{2,3} \cdot a_2) + W_{4,5} \cdot g(W_{1,4} \cdot a_1 + W_{2,4} \cdot a_2)) \end{aligned}$$

Ajustando os pesos altera-se a função: efectuar aprendizagem desta maneira!

Rede monocamada de perceptrões





As unidades operam separadamente—não existem pesos partilhados

Ajustando os pesos altera-se a localização, orientação e inclinação do declive

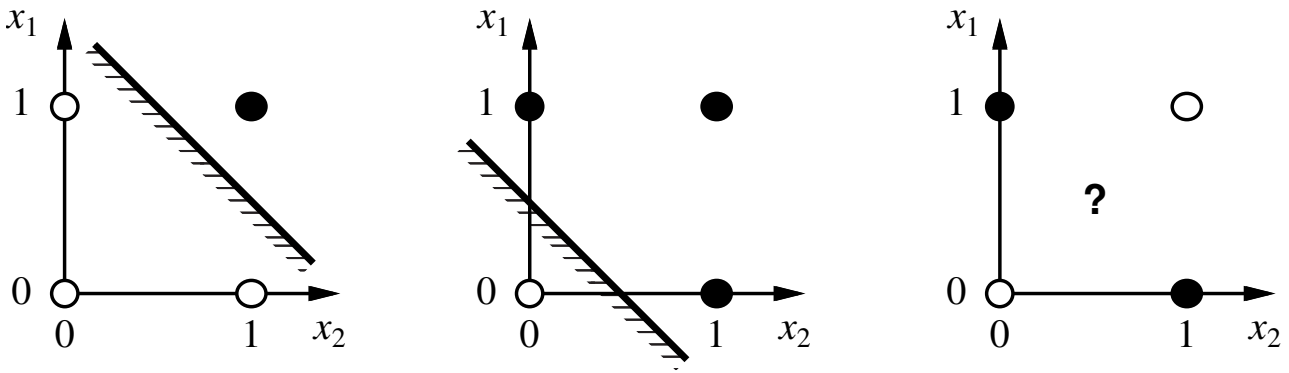
Expressividade dos perceptrões

Considere-se o perceptrão com a função de activação g = degrau (Rosenblatt, 1957, 1960)

Pode representar AND, OR, NOT, maioria, etc., mas não o XOR

Representa um separador linear no espaço de entradas:

$$\sum_j W_j x_j > 0 \quad \text{or} \quad \mathbf{W} \cdot \mathbf{x} > 0$$



(a) x_1 **and** x_2 (b) x_1 **or** x_2 (c) x_1 **xor** x_2

Minsky & Papert (1969) "furaram" o balão das redes neuronais

Regra Delta - Widrow e Hoff

Aprender por ajustamento dos pesos de forma a reduzir o erro no conjunto de exemplos de treino. Tratamos primeiro o caso de função de activação linear:

O erro quadrático para um exemplo com entrada $\mathbf{x}$ e valor correcto y é

$$E = \frac{1}{2}Err^2 \equiv \frac{1}{2}(y - h_{\mathbf{W}}(\mathbf{x}))^2 \ ,$$

Recorrer ao método do gradiente descendente para minimizar E:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial W_j} &= Err \times \frac{\partial Err}{\partial W_j} = Err \times \frac{\partial}{\partial W_j}\left(y - \sum_{j=0}^{n} W_j x_j\right) \\ &= -Err \times x_j \end{aligned}$$

Regra simples para actualização dos pesos:

$$W_j \leftarrow W_j + \eta \times Err \times x_j \quad (\eta \text{ é ritmo de aprendizagem})$$

Também utilizada por Rosenblatt com função de activação limiar.

Perceptrão (regra delta generalizada)

Aprender por ajustamento dos pesos de forma a reduzir o erro no conjunto de exemplos de treino. Caso de funções de activação diferenciáveis:

Recorrer novamente ao método do gradiente descendente para minimizar E:

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial W_j} &= Err \times \frac{\partial Err}{\partial W_j} = Err \times \frac{\partial}{\partial W_j}\left(y - g(\textstyle\sum_{j=0}^{n} W_j x_j)\right) \\ &= -Err \times g'(in) \times x_j\end{aligned}$$

Regra simples para actualização dos pesos:

$$W_j \leftarrow W_j + \eta \times Err \times g'(in) \times x_j$$

E.g., erro +ve $\Rightarrow$ aumenta saída da rede
$\Rightarrow$ aumento de pesos com entradas com +ve , diminuir em entradas -ve

Nota: $sig'(x) = sig(x) \times (1 - sig(x))$

Algoritmo de Aprendizagem do Perceptrão

function PERCEPTRON-LEARNING(*network*, *examples*, η) **returns** a perceptron hypothesis

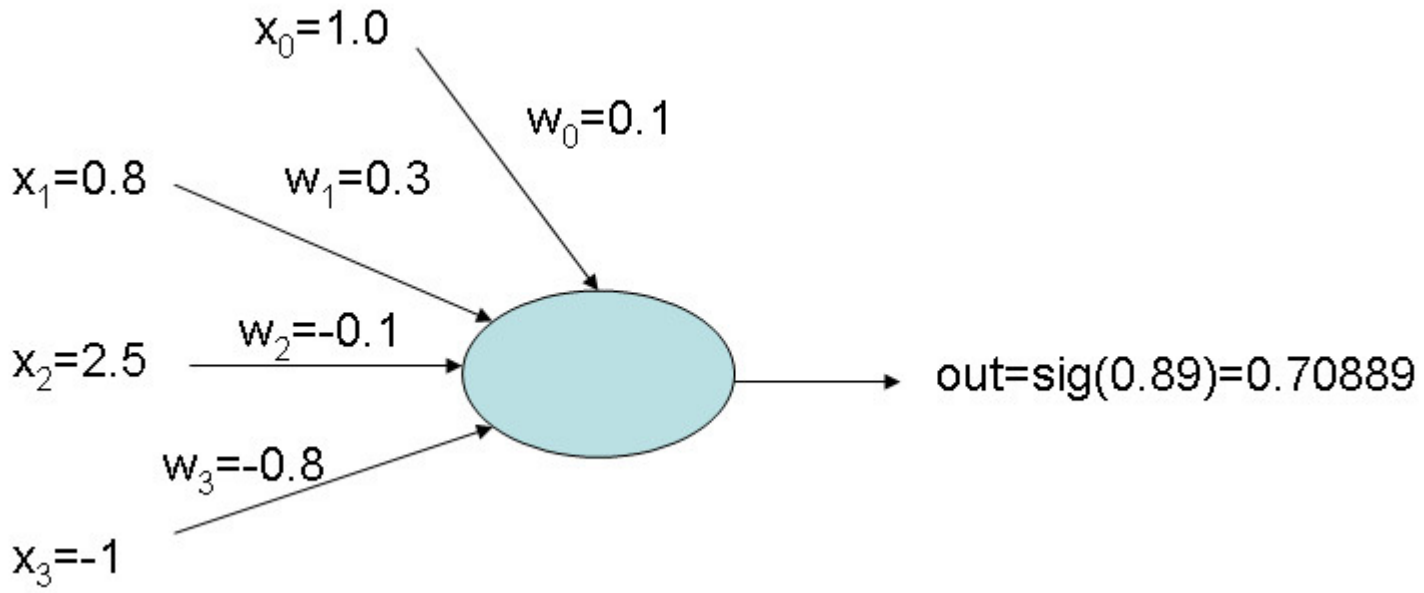
inputs: *network*, um perceptrão com pesos W_j, $J = 0, \ldots, n$ e função de activação g
examples, um conjunto de exemplos, com entrada $\mathbf{x} = x_1, \ldots, x_n$ e saída y
η, o ritmo de aprendizagem

repeat
  for each e **in** *examples* **do**
    /* *Calcular o valor de saída para este exemplo* */
    $in \leftarrow \sum_{j=0}^{n} W_j \; x_j[e]$
    $out \leftarrow g(in)$
    /* *Calcular o erro* */
    $Err \leftarrow y[e] \; - \; out$
    /* *Actualizar os pesos das entradas* */
    for each entrada j do perceptrão **do**
      $W_j \leftarrow W_j \; + \; \eta \; \times \; Err \; \times \; g'(in) \; \times \; x_j[e]$
    end
  end
until se tenha atingindo um critério de paragem

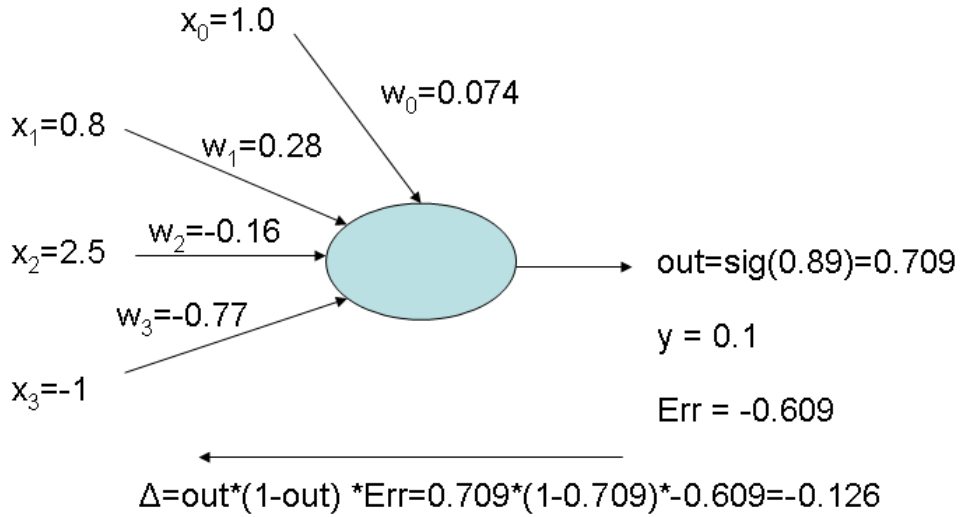
Notas:

Com função de activação sigmóide a expressão de actualização dos pesos é: $W_j \leftarrow W_j + \eta \times Err \times out \times (1 - out) \times x_j[e]$. Com função limiar a expressão de actualização de pesos é $W_j \leftarrow W_j + \eta \times Err \times x_j[e]$

Exemplo de aplicação



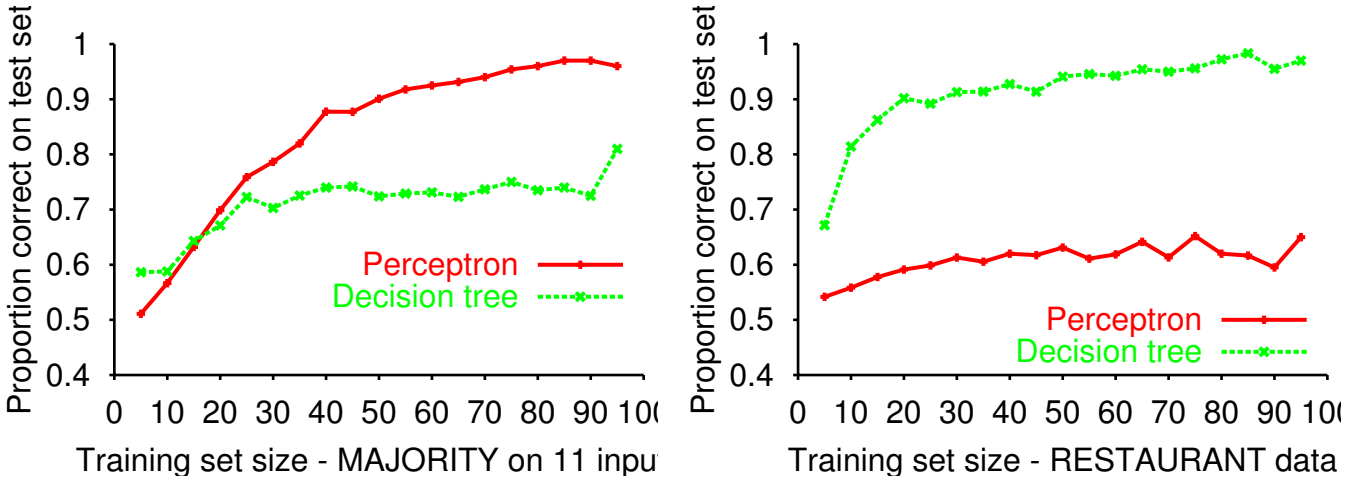
Exemplo de aplicação



Peso	Inicial	Entrada	Actualização(ΔW_i)	Peso Final
W_0	0.1	$x_0 = 1.0$	$\eta * \Delta * x_0 = 0.2 * -0.126 * 1.0 = -0.025$	0.074
W_1	0.3	$x_1 = 0.8$	$\eta * \Delta * x_1 = 0.2 * -0.126 * 0.8 = -0.02$	0.28
W_2	-0.1	$x_2 = 2.5$	$\eta * \Delta * x_2 = 0.2 * -0.126 * 2.5 = -0.06$	-0.16
W_3	-0.8	$x_3 = -1.0$	$\eta * \Delta * x_2 = 0.2 * -0.126 * -1.0 = 0.03$	-0.77

Aprendizagem do perceptrão (cont.)

A regra de aprendizagem do perceptrão converge para uma função consistente **para qualquer conjunto de dados linearmente separável**

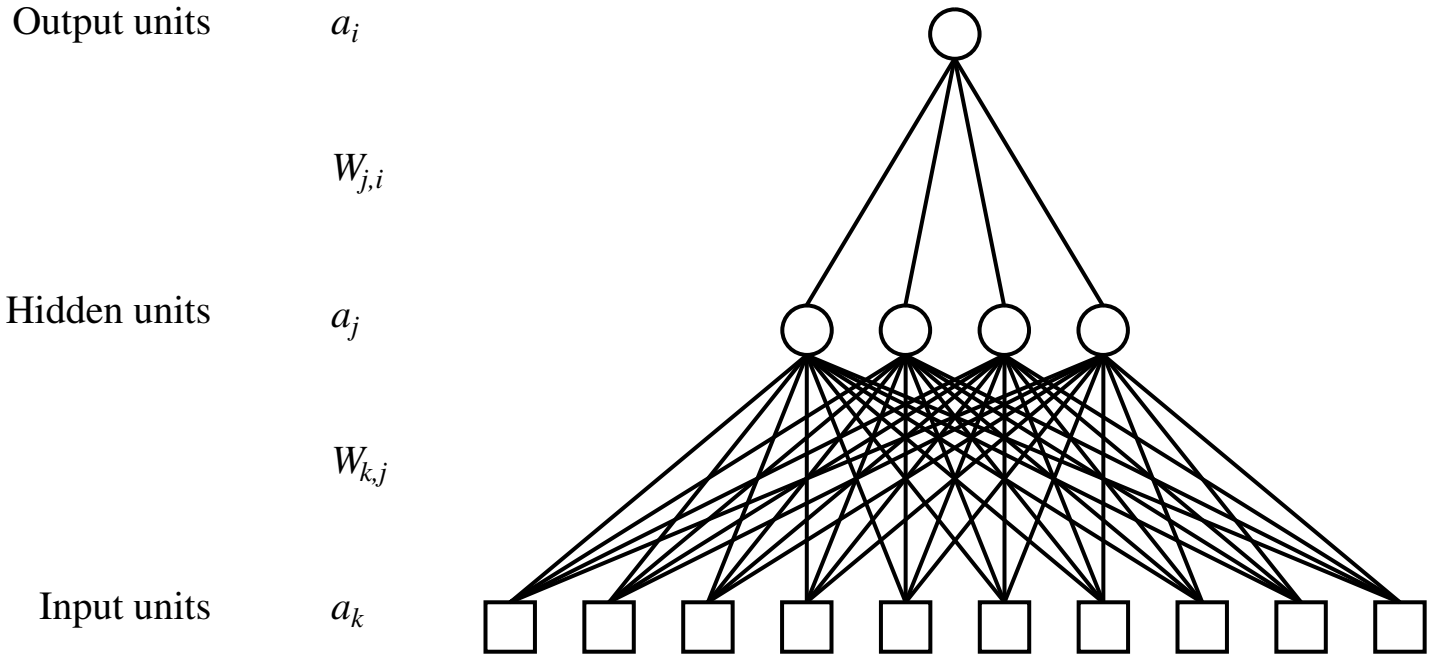


♢ Perceptrão aprende função de maioria facilmente, indução de árvore de decisão é inútil

♢ Indução de árvore de decisão aprende função do restaurante, perceptrão não pode representá-la.

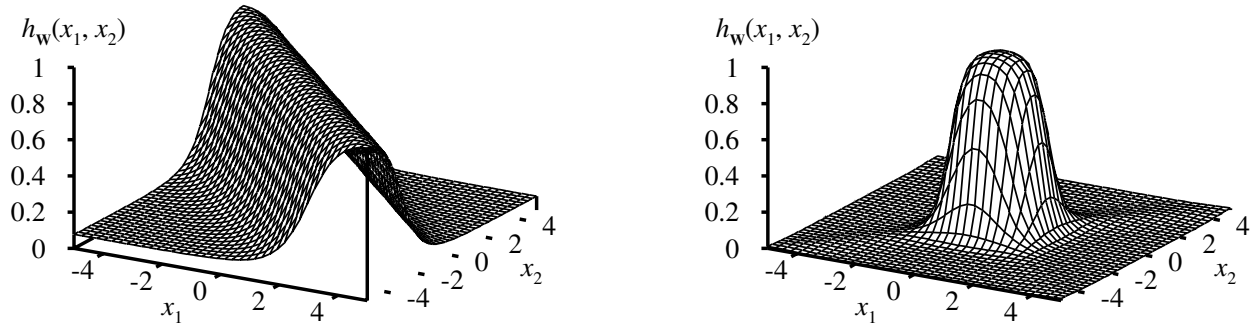
Perceptrões multicamada

Normalmente as camadas são totalmente ligadas;
número de unidades escondidadas tipicamente escolhido manualmente



Expressividade de redes multicamada

Todas as funções contínuas com 1 camada escondida, todas as funções com 2 camadas escondidas



♢ Combinar duas funções limiar opostas para construir uma crista

♢ Combinar duas cristas perpendicualres para construir um morro

♢ Juntar morros de vários tamanhos e localizações para obter qualquer superfície.

A prova requer um número exponencial de unidades escondidas.

Aprendizagem por retropropagação

Camada de saída: o mesmo para o perceptrão monocamada,

$$W_{j,i} \leftarrow W_{j,i} + \eta \times a_j \times \Delta_i$$

em que $\Delta_i = Err_i \times g'(in_i)$

Camada escondida: **retropropaga** o erro da camada de saída:

$$\Delta_j = g'(in_j) \sum_i W_{j,i} \Delta_i \ .$$

Regra de actualização para os pesos da camada escondida:

$$W_{k,j} \leftarrow W_{k,j} + \eta \times a_k \times \Delta_j \ .$$

(A maioria dos neurocientistas nega a existência de retropropagação no cérebro)

Derivação da regra de retropropagação

O erro quadrático num único exemplo[1] definido como

$$E = \frac{1}{2}\sum_i (y_i - a_i)^2 \ ,$$

em que a soma inclui todos os nós da camada de saída

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial W_{j,i}} &= -(y_i - a_i)\frac{\partial a_i}{\partial W_{j,i}} = -(y_i - a_i)\frac{\partial g(in_i)}{\partial W_{j,i}} \\
&= -(y_i - a_i)g'(in_i)\frac{\partial in_i}{\partial W_{j,i}} = -(y_i - a_i)g'(in_i)\frac{\partial}{\partial W_{j,i}}\left(\sum_j W_{j,i}a_j\right) \\
&= -(y_i - a_i)g'(in_i)a_j = -a_j\Delta_i
\end{aligned}$$

[1] O erro médio quadrático (MSE) é a média dos erros quadráticos de todos os exemplos. O RMSE (root mean square error) é a raiz quadrada do MSE.

Derivação retropropagação outras camadas

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial W_{k,j}} &= -\sum_i (y_i - a_i)\frac{\partial a_i}{\partial W_{k,j}} = -\sum_i (y_i - a_i)\frac{\partial g(in_i)}{\partial W_{k,j}} \\
&= -\sum_i (y_i - a_i) g'(in_i)\frac{\partial in_i}{\partial W_{k,j}} = -\sum_i \Delta_i \frac{\partial}{\partial W_{k,j}}\left(\sum_j W_{j,i} a_j\right) \\
&= -\sum_i \Delta_i W_{j,i}\frac{\partial a_j}{\partial W_{k,j}} = -\sum_i \Delta_i W_{j,i}\frac{\partial g(in_j)}{\partial W_{k,j}} \\
&= -\sum_i \Delta_i W_{j,i} g'(in_j)\frac{\partial in_j}{\partial W_{k,j}} \\
&= -\sum_i \Delta_i W_{j,i} g'(in_j)\frac{\partial}{\partial W_{k,j}}\left(\sum_k W_{k,j} a_k\right) \\
&= -\sum_i \Delta_i W_{j,i} g'(in_j) a_k = -a_k \Delta_j
\end{aligned}
$$

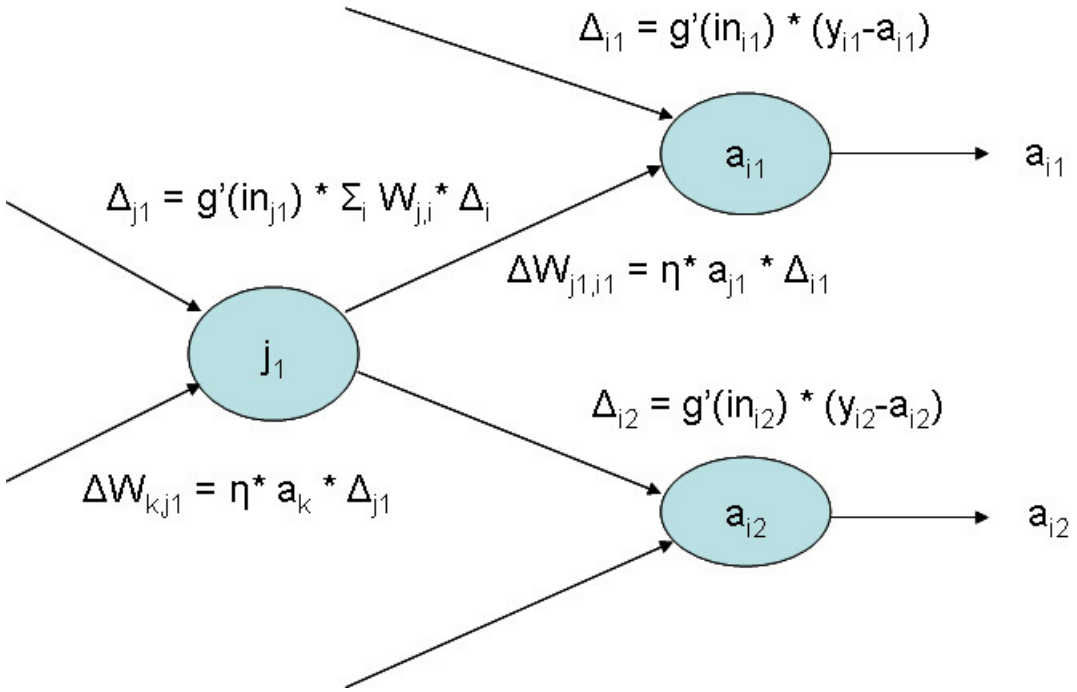
O algoritmo de retropropagação

function BACK-PROP-UPDATE(*network*, *examples*, η) **returns** a network with changed weights

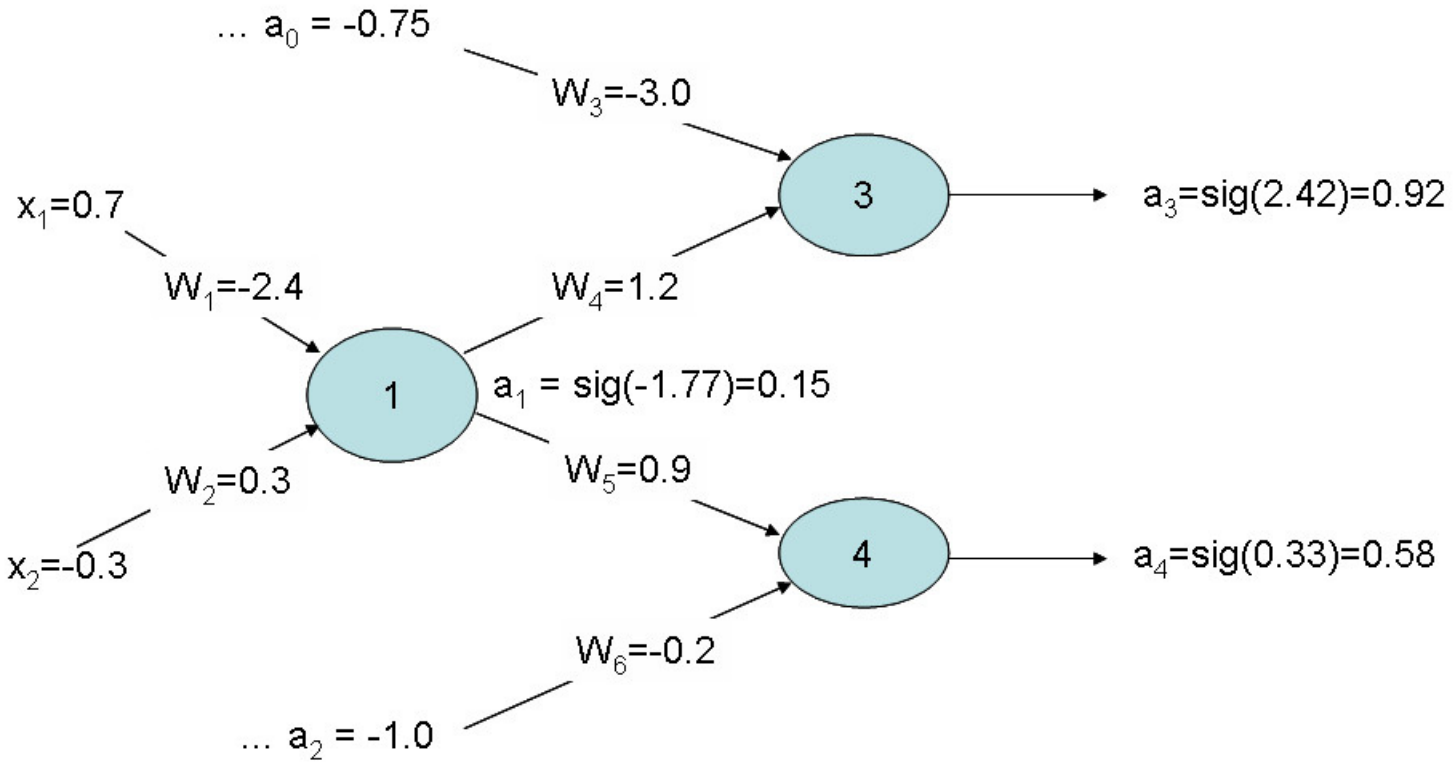
inputs: *network*, a multilayer network
examples, a set of input/output pairs
η, the learning rate

repeat
  for each e **in** *examples* **do**
    /* *Compute the output for this example having inputs* $\mathbf{I}^e$ */
    $\mathbf{O}^e \leftarrow$ RUN-NETWORK(*network*, $\mathbf{I}^e$)
    /* *Compute the error and* Δ *for units in the output layer* */
    $\mathbf{Err}^e \leftarrow \mathbf{Y}^e - \mathbf{O}^e$ /* $\mathbf{Y}^e$ *are the expected output values for the example* */
    /* *Update the weights leading to the output layer* */
    $W_{j,i} \leftarrow W_{j,i} + \eta \times a_j \times Err_i^e \times g'(in_i)$
    for each subsequent layer **in** *network* **do**
      /* *Compute the error at each node* */
      $\Delta_j \leftarrow g'(in_j) \sum_i W_{j,i} \Delta_i$
      /* *Update the weights leading into the layer* */
      $W_{k,j} \leftarrow W_{k,j} + \eta \times a_k \times \Delta_j$
    end
  end
until *network* has converged
return *network*

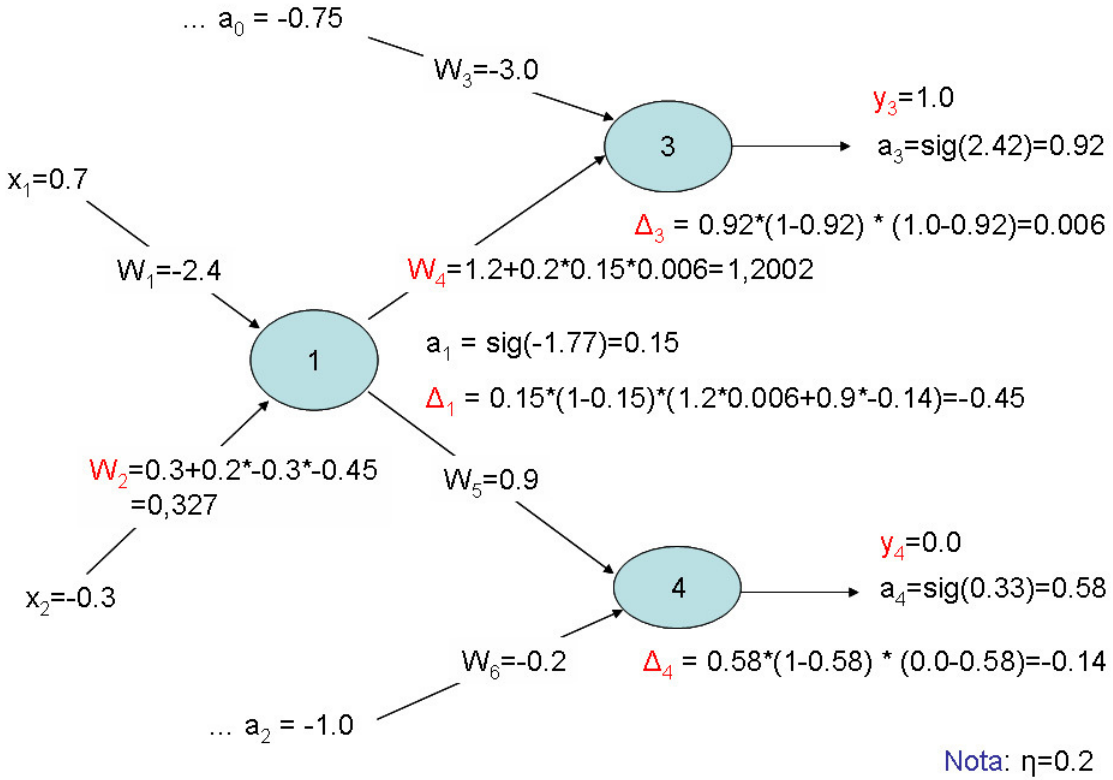
Esquema de funcionamento



Exemplo de aplicação (propagação)



Exemplo de aplicação (retropropagação)

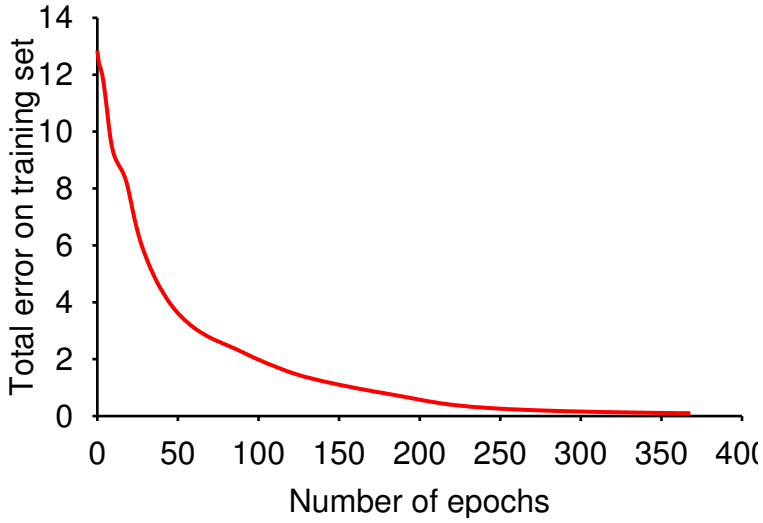


Só mostrada actualização dos pesos W_2 e W_4 a partir dos termos de erro Δ_1, Δ_3 e Δ_4. Os outros pesos são alterados de maneira semelhante.

Aprendizagem com Retropropagação (cont)

Em cada época, somar actualizações de gradiente para todos os exemplos e aplicar

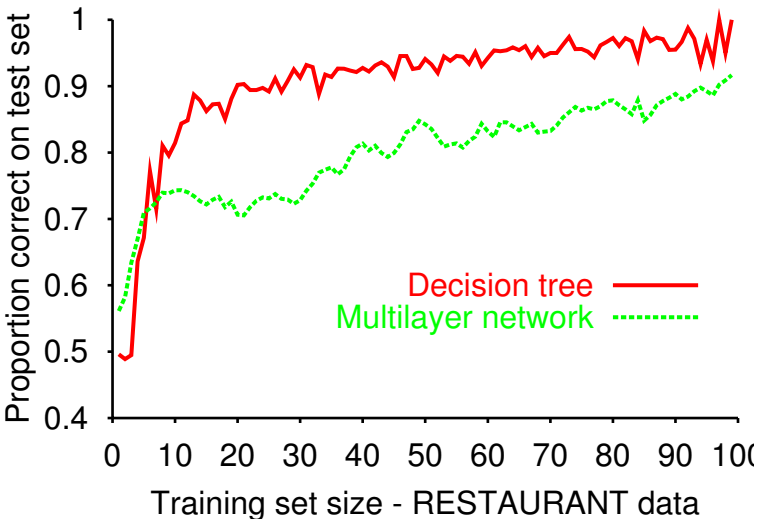
Curva de treino para 100 exemplos do restaurante: encontra ajustamente perfeito



Problemas típicos: convergência lenta, mínimos locais

Aprendizagem com Retropropagação (cont)

Curva de aprendizagem para rede multicamada com 4 unidades escondidas:



Redes multicamada são adequadas para tarefas complexas de reconhecimento de padrões, mas o resultado não pode ser facilmente compreendido

Utilização prática do algoritmo

♢ Para o caso da função sigmóide é habitual inicializarem-se os pesos com valores aleatórios no intervalo $[-0.5, 0.5]$ ou $[-1, 1]$.

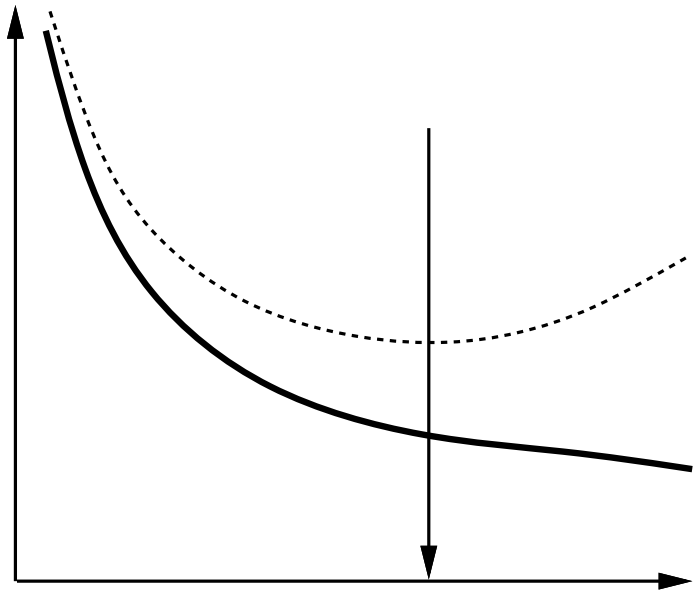
♢ O prolongamento da aprendizagem pode levar a problemas de sobreajustamento, ou seja, a rede classifica bem o conjunto de treino mas mal o conjunto de validação.

♢ O número de exemplos de treino também é difícil de determinar, mas pode-se seguir uma das seguintes regras práticas:

- O número de exemplos deve ser 5 a 10 vezes mais que o número de pesos.
- Treino da rede para classificar com precisão $1 - (e/2)$ exemplos de treino. Para se obter precisão $1 - e$ no conjunto de validação serão necessários tantos exemplos de treino quanto o número de pesos na rede divididos por e.

♢ Unidades escondidas a menos resulta na impossibilidade de aprendizagem da função; unidades escondidas a mais pode redundar em sobreajustamento.

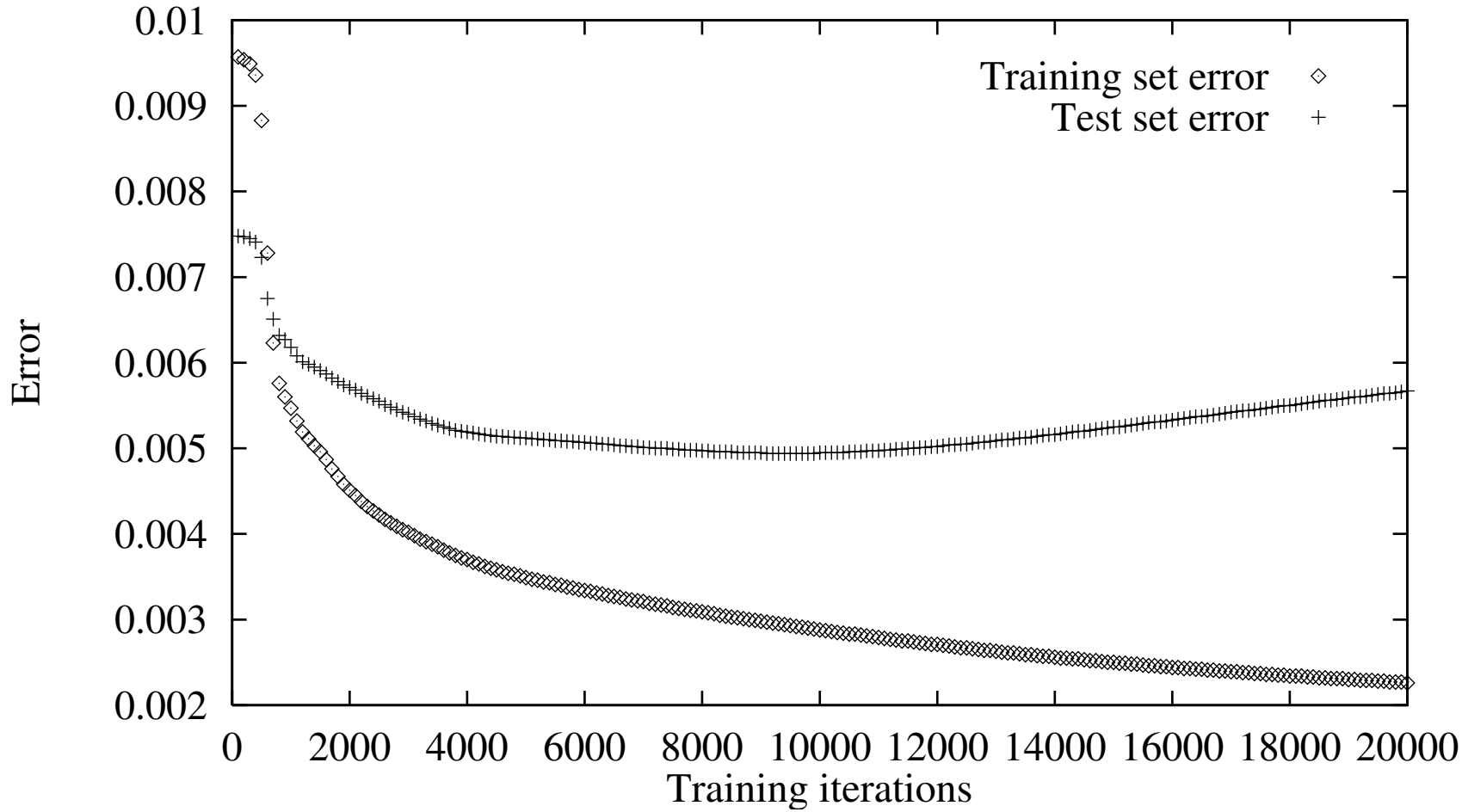
Sobreajustamento



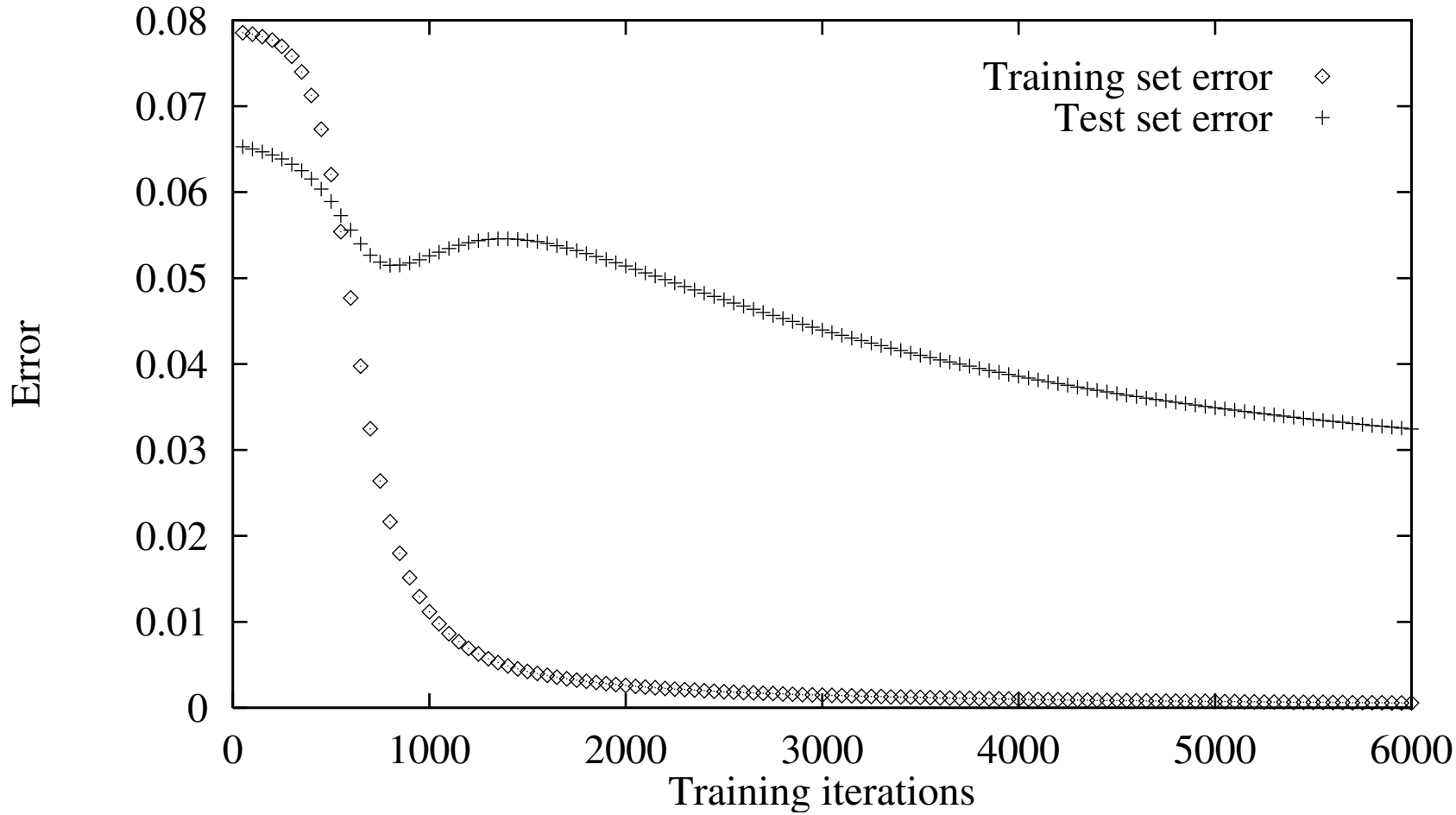
Os exemplos devem ser divididos em conjunto de treino e conjunto de validação. Deve haver um conjunto de teste que não é utilziado na aprendizagem.

Utiliza-se o conjunto de treino no algoritmo de aprendizagem, parando-se quando se minimiza o erro no conjunto de validação.

Sobreajustamento (quando parar?)



Sobreajustamento (quando parar?)



Problemas de convergência

Pode haver grandes oscilações no erro. Uma das formas consiste em alterar a regra para utilizar momento - μ.

As variações dos pesos da iteração t para $t+1$ são dadas por:

$$\Delta W_{j,i}(t+1) = \eta \times a_j \times \Delta_i + \mu \Delta W_{j,i}(t)$$
$$\Delta W_{k,j}(t+1) = \eta \times a_k \times \Delta_j \ + \mu \Delta W_{k,j}(t).$$

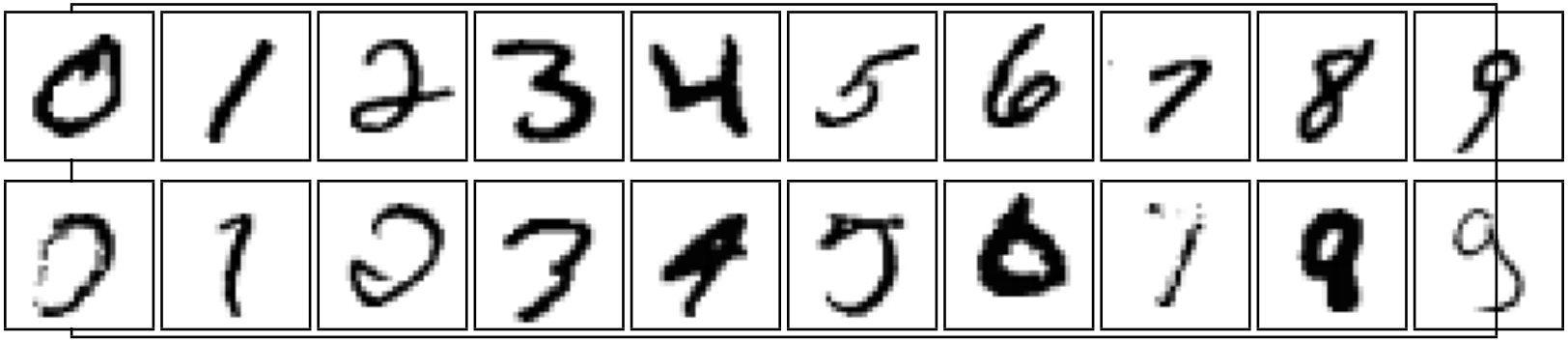
Paralelo com bola a descer superfície:

♢ Ritmo de aprendizagem: velocidade (valores típicos entre 0.1 e 0.9).

♢ Momento: inércia - mantém direcção do movimento anterior.

♢ Acelerar convergência através de treino em lote. As alterações nos pesos de todos os casos de treino são acumuladas e só no final propagadas após o processamento integral do conjunto de treino. Esta versão normalmente converge mais rapidamente, mas pode ficar preso mais facilmente em mínimos locais.

Reconhecimento de escrita



3-nearest-neighbor = 2.4% erro
400–300–10 unit MLP = 1.6% erro
LeNet: 768–192–30–10 unit MLP = 0.9% erro

Melhores (kernel machines, algoritmos de visão) $\approx$ 0.6% erro

Sumário

♢ A maioria dos cérebros tem muitos neurónios; cada neurónio $\approx$ unidade de limiar (?)

♢ Perceptrões (redes monocamada) são pouco expressivos

♢ Redes multicamada são suficientemente expressivas; podem ser treinadas pelo método de descida do gradiente, i.e., retropropagação do erro

♢ Sobreajustamento é um problema sério a evitar, devendo-se utilizar técnicas de validação cruzada.

♢ Muitas aplicações: fala, condução, reconhecimento escrita, detecção de fraudes, etc.