Redes Neurais Artificiais



Prof. João Marcos Meirelles da Silva



www.protessores.utt.br/jmarco:



Universidade Federal Fluminense





Ementa



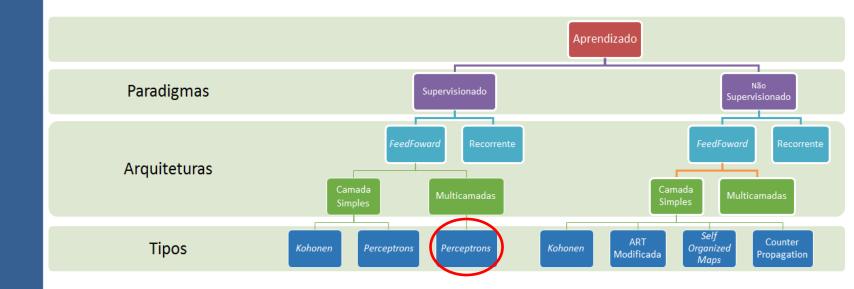




Redução de Dimensionalidade

Tipos de Dados

Detecção de Anomalias



Objetivo da Aula







Conhecer a rede *multilayer perceptron*, suas funcionalidades e modos de treinamento.







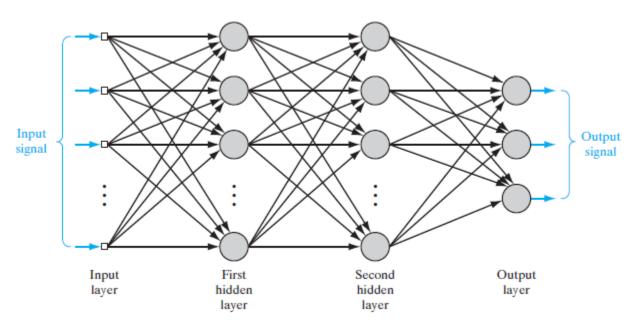


Figura 1: Rede multilayer perceptron com duas camadas escondidas.







- A rede apresenta, tipicamente, três camadas: Entrada, escondida e saída
- Capacidade de resolver problemas mais complexos que a rede perceptron de camada simples
- Algoritmo de treinamento: Error back-propagation
- Capacidade de generalização → respostas razoáveis para padrões nunca vistos pela rede durante o treinamento.

Aprendizado *back-propagation* → redes *back-propagation*







A Figura 2 abaixo mostra o esquema de aprendizado supervisionado para a rede *multilayer perceptron*. Os blocos *Environment + Teacher* podem ser substituídos por uma base de dados rotulada.

Vector describing

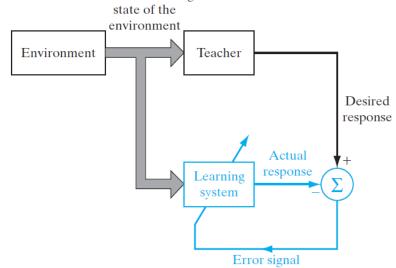


Figura 2: Exemplo de um possível esquema para aprendizado supervisionado.







Como exemplo, veja a figura a seguir:

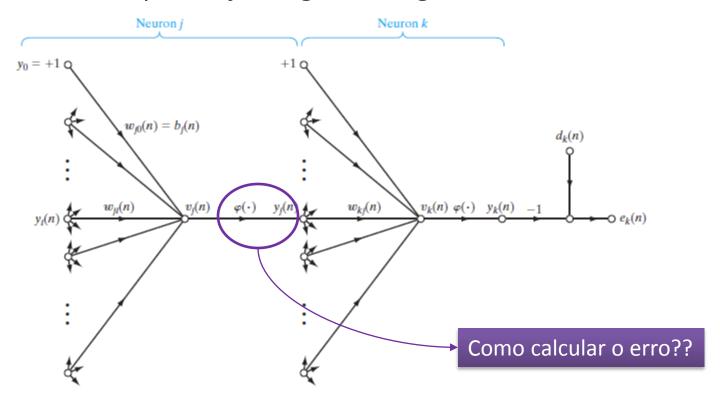


Figura 3: Neurônio *j* como neurônio da camada escondida.







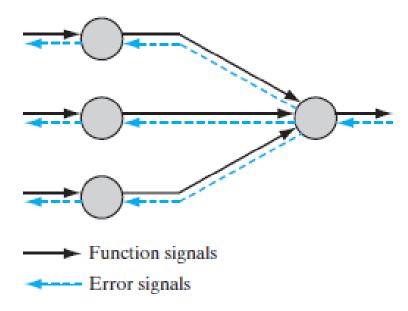


Figura 4: Sinais feedfoward (preto) e back (azul) propagations.

Dois tipos de sinais podem ser identificados na Figura 3 acima:

- 1. Sinal de entrada (feedfoward propagation)
- 2. Sinal de erro (error back-propagation)







O treinamento de uma rede via algoritmo *Error Back-propagation* envolve 3 estágios:

- A propagação do sinal de entrada, camada a camada, a partir do padrão apresentado até a camada de saída;
- 2. O cálculo e a *retro-propagação* do erro associado;
- 3. O ajuste dos pesos das sinapses.







Observações:

- Após o treinamento, a operação da rede envolve somente a primeira fase;
- Mesmo que a fase de treinamento seja muito lenta, a operação da rede, depois de treinada, é muito rápida;
- Em geral, o número de camadas escondidas depende da complexidade do problema e do número de padrões que rede necessita aprender.







Notação:

- Os índices *i*, *j* e *k* referem-se a neurônio de camadas diferentes na rede:
 - 1. $i \rightarrow$ neurônio da camada anterior à camada j;
 - 2. $j \rightarrow$ neurônio da camada j;
 - 3. $k \rightarrow$ neurônio da camada posterior à camada j
- Na n-ésima iteração, o n-ésimo padrão é apresentado à rede;







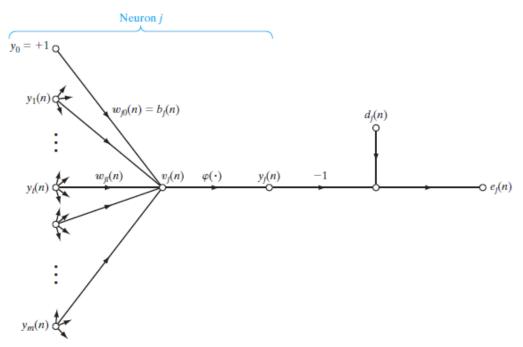


Figura 5: Diagrama simplificado de um neurônio *j* na camada de saída da rede neural.







Back-propagation Algorithm ⇒ Gradiente de Erro

O sinal de erro na saída do neurônio *j* na iteração *n* é dado por:

$$e_j(n) = d_j(n) - y_j(n) \tag{1}$$

Definimos o valor instantâneo do erro de energia para o neurônio j como sendo 0.5e_i²(n).







Assim, o valor instantâneo do erro de energia total E(n) é obtido somando-se o valor instantâneo sobre todos os neurônios da camada de saída.

$$E(n) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{m_L} e_j^2(n)$$
 (2)







Seja N o número total de padrões (exemplos) contidos no conjunto de treinamento. O valor médio do erro quadrático de energia é obtido somando-se E(n), ∀n e normalizando-o em relação ao tamanho N do conjunto:

$$E_{avg} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} E(n)$$
(3)

 \Rightarrow E(n) e E_{avg} é função dos pesos e do bias da rede!







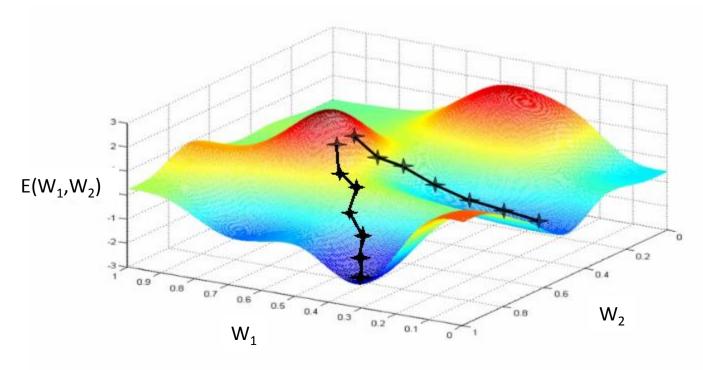


Figura 6: Gradiente aplicado na superfície de erro.







O chamado campo local induzido (induced local field), $v_i(n)$, associado ao neurônio j, é dado por:

$$v_{j}(n) = \sum_{i=0}^{m} w_{ji}(n) y_{i}(n)$$
 (4)

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







O peso w_{j0} (Correspondente à entrada fixa y_0 = +1) possui valor igual a b_j . Logo, a saída do neurônio j é dada por:

$$y_j(n) = \sum_{i=0}^m \varphi_j(v_j(n)) \tag{5}$$







O algoritmo *back-propagation* aplica uma correção $\Delta w_{ji}(n)$ na sinapse w_{ji} , proporcional à derivada parcial $\partial E(n)/\partial w_{ii}(n)$.

$$\frac{\partial E(n)}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial E(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} \frac{\partial v_j(n)}{\partial w_{ji}(n)}$$
(6)

 $\partial E(n)/\partial w_{ij}(n) \Rightarrow$ Determina a direção de busca no espaço de busca da sinapse w_{ii} .







Diferenciando ambos os lados da equação (2) em relação a $e_i(n)$, temos:

$$\frac{\partial E(n)}{\partial e_j(n)} = e_j(n) \tag{7}$$

Diferenciando ambos os lados da equação (1) em relação a $y_i(n)$, temos:

$$\frac{\partial e_j(n)}{\partial y_i(n)} = -1 \tag{8}$$







Diferenciando ambos os lados da equação (5) em relação a $v_i(n)$, temos:

$$\frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} = \varphi_j'(v_j(n)) \tag{9}$$

Diferenciando ambos os lados da equação (4) em relação a $w_{ii}(n)$, temos:

$$\frac{\partial v_j(n)}{\partial w_{ii}(n)} = y_i(n) \tag{10}$$







Através da substituição das equações (7) a (10) em (6):

$$\frac{\partial E(n)}{\partial w_{ji}(n)} = -e_j(n)\varphi_j'(v_j(n))y_i(n) \tag{11}$$

A correção $\Delta w_{ij}(n)$ aplicada à sinapse w_{ij} é definida pela Regra Delta:

$$\Delta w_{ji}(n) = -n \frac{\partial E(n)}{\partial w_{ji}(n)} \tag{12}$$

onde *n* é a taxa de aprendizado do algoritmo *back-propagation*.







Substituindo a equação (11) em (12), temos:

$$\Delta w_{ii}(n) = n\delta_i(n)y_i(n) \tag{13}$$

onde o gradiente local $\delta_i(n)$ é definido por:

$$\delta_j(n) = -\frac{\partial E(n)}{\partial v_j(n)}$$

$$\delta_{j}(n) = -\frac{\partial E(n)}{\partial e_{j}(n)} \frac{\partial e_{j}(n)}{\partial y_{j}(n)} \frac{\partial y_{j}(n)}{\partial v_{j}(n)}$$

$$\delta_j(n) = e_j(n)\varphi_j'(v_j(n)) \tag{14}$$







O cálculo do ajuste das sinapses $\Delta w_{ij}(n)$ depende do erro de saída $e_i(n)$ do neurônio j, mas:

Se o neurônio j for da camada escondida, como fazer para aplicar a equação (13), uma vez que não há como determinar um sinal de erro $e_i(n)$?







Neste caso, o cálculo do gradiente para este neurônio deve ser redefinido. Veja a figura a

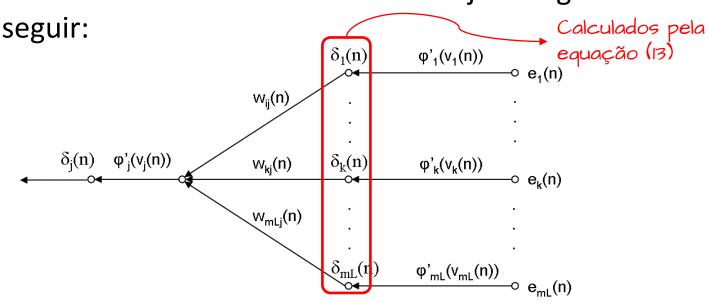


Figura 7: Esquema de retro-propagação do erro para cálculo do gradiente $\delta_i(n)$, a partir dos gradientes da camada de saída.

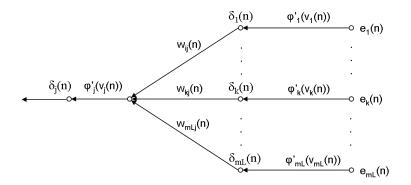






Por analogia com o raciocínio anterior para o cálculo do gradiente da camada de saída, temos:

$$\delta_j(n) = \varphi_j'(v_j(n)) \sum_{k=1}^{m_L} \delta_k(n) w_{kj}(n)$$
 (15)









Correção dos pesos das sinapses:

$$\Delta w_{ji} = n\delta_j(n)y_i(n) \tag{16}$$

• Se o neurônio *j* pertencer a camada de saída:

$$\delta_j(n) = e_j(n)\varphi_j'(v_j(n)) \tag{17}$$

Se o neurônio j pertencer a uma camada escondida:

$$\delta_j(n) = \varphi_j'(v_j(n)) \sum_{k=1}^{m_l} \delta_k(n) w_{kj}(n)$$
 (18)







Resta agora atentarmos para a função de ativação. Se utilizarmos a tangente hiperbólica:

$$\varphi_j(v_j(n)) = a \tanh(bv_j(n)), \qquad (a,b) > 0$$
 (19)

e diferenciando (18) em relação a v_i(n):

$$\varphi'_{j} = ab \operatorname{sech}^{2} b v_{n}(n)$$

$$= ab(1 - \tanh^{2} b v_{j}(n))$$

$$= \frac{b}{a} [a - y_{j}(n)][a + y_{j}(n)] \tag{20}$$







Desta forma, o gradiente local pode ser expresso das seguintes formas:

• Para um neurônio j da camada de saída:

$$\delta_{j}(n) = e_{j}(n)\varphi'_{j}(v_{j}(n))$$

$$= \frac{b}{a} [d_{j}(n) - y_{j}(n)][a - y_{j}(n)][a + y_{j}(n)]$$
(21)

Para um neurônio j de uma camada escondida:

$$\delta_{j}(n) = \varphi'_{j}(v_{j}(n)) \sum_{k=1}^{m_{L}} \delta_{k}(n) w_{kj}(n)$$

$$= \frac{b}{a} [a - y_{j}(n)] [a + y_{j}(n)] \sum_{k=1}^{m_{l}} \delta_{k}(n) w_{kj}(n)$$
(22)







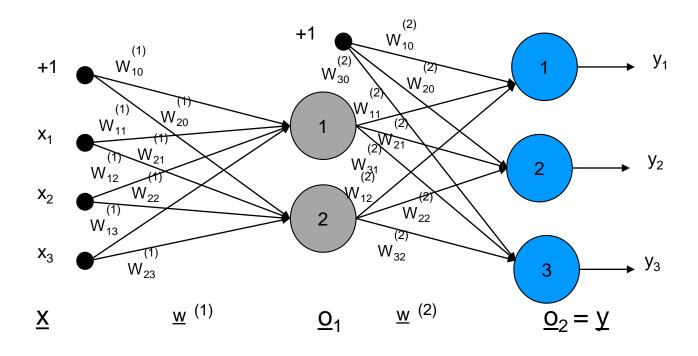


Figura 8: Vamos tomar como exemplo uma rede 3 x 2 x 3.







1) Inicialização:

Pesos das sinapses devem ser iniciados com valores em torno de zero.

2) Padrões de treinamento:

Apresentar um padrão \underline{x} qualquer na camada de entrada da rede







3) Propagação da Entrada (cálculo do campo induzido – camada escondida)

$$v_1^{(1)} = w_{10}^{(1)} + w_{11}^{(1)} x_1 + w_{12}^{(1)} x_2 + w_{13}^{(1)} x_3$$

$$v_2^{(1)} = w_{20}^{(1)} + w_{21}^{(1)} x_1 + w_{22}^{(1)} x_2 + w_{23}^{(1)} x_3$$

Em notação matricial:

$$\begin{bmatrix} v_1^{(1)} \\ v_2^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{10}^{(1)} & w_{11}^{(1)} & w_{12}^{(1)} & w_{13}^{(1)} \\ w_{20}^{(1)} & w_{21}^{(1)} & w_{22}^{(1)} & w_{23}^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} +1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$

(1)







Logo:

$$\underline{v}^{(1)} = W^{(1)}\underline{x}_b \tag{2}$$

onde
$$\underline{v}^{(1)} \in \mathbb{R}^{2x1}$$
, $W^{(1)} \in \mathbb{R}^{2x4}$, $\underline{x}_b = [+1 \quad \underline{x}]^T \in \mathbb{R}^{4x1}$

A saída da camada escondida é dada por:

$$\underline{o}^{(1)} = \tanh(\underline{v}^{(1)}) \tag{3}$$

onde $\underline{o}^{(1)} \in \mathbb{R}^{2x_1}$.







Para a camada de saída, temos:

$$v_1^{(2)} = w_{10}^{(2)} + w_{11}^{(2)} o_1 + w_{12}^{(2)} o_2$$

$$v_2^{(2)} = w_{20}^{(2)} + w_{21}^{(2)} o_1 + w_{22}^{(2)} o_2$$

$$v_3^{(2)} = w_{30}^{(2)} + w_{31}^{(2)} o_1 + w_{32}^{(2)} o_2$$

Em notação matricial:

$$\begin{bmatrix} v_1^{(2)} \\ v_2^{(2)} \\ v_3^{(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{10}^{(2)} & w_{11}^{(2)} & w_{12}^{(2)} \\ w_{20}^{(2)} & w_{21}^{(2)} & w_{22}^{(2)} \\ w_{30}^{(2)} & w_{31}^{(2)} & w_{32}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} +1 \\ o_1 \\ o_2 \end{bmatrix}$$

(4)







Logo:

$$\underline{v}^{(2)} = W^{(2)}\underline{o}_b \tag{5}$$

onde
$$\underline{v}^{(2)} \in \mathbb{R}^{3x1}$$
, $W^{(2)} \in \mathbb{R}^{3x3}$, $\underline{o}_b = [+1 \quad \underline{o}]^T \in \mathbb{R}^{3x1}$

A saída da rede é dada por:

$$\underline{o}^{(2)} = y = \tanh(\underline{v}^{(2)})$$
 onde $\underline{o}^{(2)} \in \mathbb{R}^{3x1}$.







4) Calculando o erro:

$$e_1 = d_1 - y_1$$

 $e_2 = d_2 - y_2$
 $e_3 = d_3 - y_3$

No caso desse exemplo (rede autoassociativa), temos que $\underline{d} \equiv \underline{x}$. Na forma vetorial:

$$\underline{e} = \underline{x} - \underline{y} , \quad \underline{e} \in \mathbb{R}^{3x1}$$
 (7)







5) Agora vamos retropropagar os erros. Vamos inicialmente calcular os gradientes (camada de saída):

$$\delta_1^{(2)} = e_1(1 - y_1^2)$$

$$\delta_2^{(2)} = e_2(1 - y_2^2)$$

$$\delta_3^{(2)} = e_3(1 - y_3^2)$$

Na forma matricial:

$$\underline{\delta}^{(2)} = diag(\underline{e})[\underline{1} - diag(\underline{y})\underline{y}] \tag{8}$$

Em python, a equação (8) fica:

delta2 = np.dot(np.diagflat(e), (1 - np.dot(np.diagflat(Y), Y)))







Para a camada escondida, temos:

$$\underline{v}_{\delta} = W^{(2)^T} \underline{\delta}^{(2)} \tag{9}$$

onde $\underline{v}_{\delta} \in \mathbb{R}^{2x_1}$, $W^{(2)^T} \in \mathbb{R}^{3x_3} e \underline{\delta}^{(2)} \in \mathbb{R}^{3x_1}$.

Calculando os gradientes da camada escondida (camada 1) de forma escalar:

$$\delta_1^{(1)} = (1 - o_1^2) v_{\delta_1}$$
$$\delta_2^{(1)} = (1 - o_2^2) v_{\delta_2}$$







Em notação matricial:

$$\underline{\delta}^{(1)} = diag[\underline{1} - diag(\underline{o})\underline{o}]\underline{v}_{\delta} \qquad (10)$$

Agora que temos o gradiente das camadas (1) e (2), podemos proceder com a atualização dos pesos das sinapses:

$$W^{(1)} = W^{(1)} + \eta \underline{\delta}^{(1)} \underline{x}_b$$

$$W^{(2)} = W^{(2)} + \eta \underline{\delta}^{(2)} \underline{o}_b$$







De forma genérica, para uma rede MLP de três camadas m-N-L, temos:

- m Número de neurônios da camada de entrada
- N Número de neurônios da camada escondida ou intermediária
- L Número de neurônios da camada de saída
- X Vetor de entrada.
- \underline{X}_h Vetor de entrada com bias.
- o Vetor de saída da camada escondida.
- o_h Vetor de entrada da camada de saída.







W⁽¹⁾ – Matriz de pesos das camada escondida:

$$W^{(1)} = \begin{bmatrix} w_{10}^{(1)} & w_{11}^{(1)} & \cdots & w_{1m}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{N0}^{(1)} & w_{N1}^{(1)} & \cdots & w_{Nm}^{(1)} \end{bmatrix}, \qquad W^{(1)} \in \mathbb{R}^{Nx(m+1)}$$

W⁽²⁾ – Matriz de pesos das camada de saída:

$$W^{(2)} = \begin{bmatrix} w_{10}^{(2)} & w_{11}^{(2)} & \cdots & w_{1N}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{L0}^{(2)} & w_{L1}^{(2)} & \cdots & w_{LN}^{(2)} \end{bmatrix}, \qquad W^{(2)} \in \mathbb{R}^{Lx(N+1)}$$







• Propagação:

$$\underline{v}^{(1)} = W^{(1)} \underline{X}_b \tag{23}$$

$$\underline{o} = tanh(\underline{v}^{(1)}) \tag{24}$$

$$\underline{v}^{(2)} = W^{(2)}\underline{o}_b \tag{25}$$

$$y = tanh(\underline{v}^{(2)}) \tag{26}$$

• Cálculo do erro:

$$\underline{e} = \underline{d} - \underline{y}, \qquad \underline{e} \in \mathbb{R}^{Lx1} \tag{27}$$







• Retropagação:

$$\underline{\delta}^{(2)} = diag(\underline{e}) \left[\underline{1} - diag(\underline{y}) \underline{y} \right], \qquad \underline{\delta}^{(2)} \in \mathbb{R}^{Lx_1}$$
 (28)

$$\underline{v}_{\delta} = W^{(2)^T} \underline{\delta}^{(2)}, \qquad \underline{v}_{\delta} \in \mathbb{R}^{(N+1)x_1}$$
 (29)

$$\underline{\delta}^{(1)} = diag[\underline{1} - diag(\underline{o})\underline{o}]\underline{v}_{\delta}, \quad \underline{\delta}^{(1)} \in \mathbb{R}^{mx_1}$$
 (30)

Atualização dos Pesos:

$$W^{(1)} = W^{(1)} + \eta \, diag(\underline{\delta}^{(1)}) \, \underline{x}_b \tag{31}$$

$$W^{(2)} = W^{(2)} + \eta \operatorname{diag}(\underline{\delta}^{(2)}) \underline{o}_b \tag{32}$$

Referências







- 1. Neural Networks and Learning Machines, 3rd. Edition, Simon Haykin
- 2. Fundamental of Neural Networks Architectures, Algorithms and Applications, Laurene Fausett
- 3. Pattern Classification, Richard O. Duda, Peter E. Hart, David G. Stork