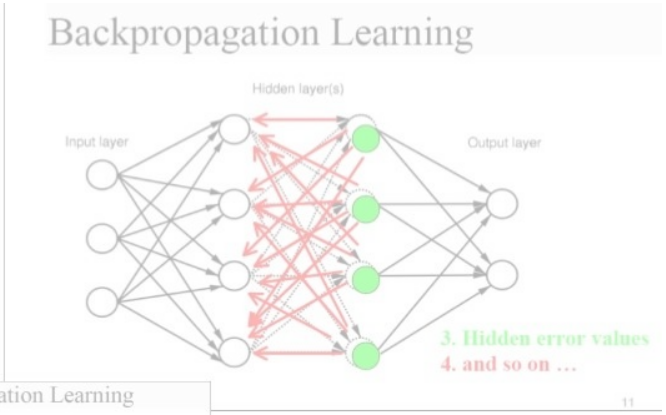
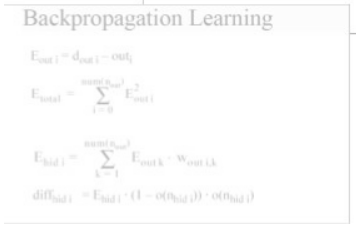
Universidade Federal do Paraná (UFPR)
Bacharelado em Informática Biomédica

Multiple Layer Perceptron





David Menotti

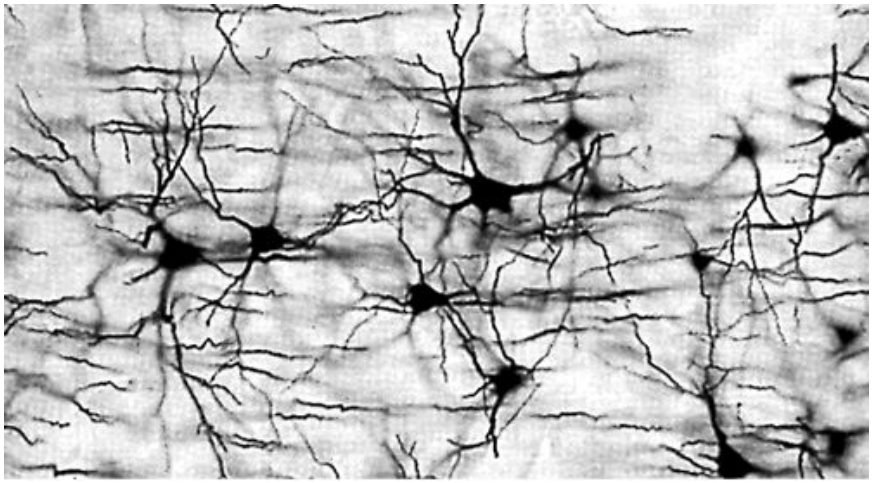
www.inf.ufpr.br/menotti/ci171-182

Hoje

- Multiple Layer Perceptron (MLP)
  - Backpropagation

Multiple Layer Perceptron

Redes Neuronais



- Cérebro humano.
  - Mais fascinante processador existente.
  - Aprox. 10 bilhões de neurônios conectados através de sinapses.
  - Sinapses transmitem estímulos e o resultado pode ser estendido por todo o corpo humano.

Redes Neuroniais Artificiais: Um breve histórico

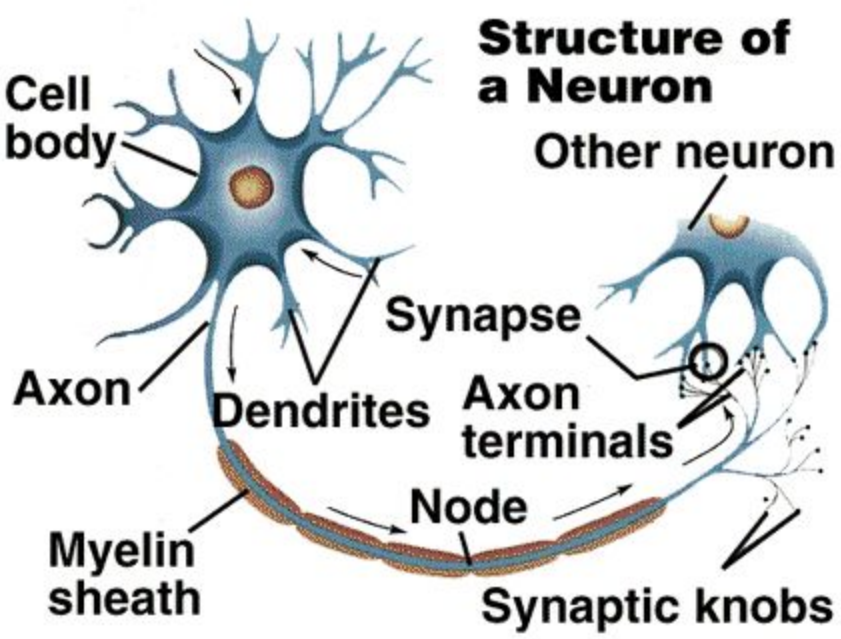
- 1943 – McCulloch e Pitts.
  - Sugeriram a construção de uma máquina baseada ou inspirada no cérebro humano.
- 1949 – Donald Hebb.
  - Propõe uma lei de aprendizagem específica para as sinápses dos neurônios.
- 1957/1958 - Frank Rosenblatt.
  - Estudos aprofundados → pai da neuro-computação.
  - Perceptron.
  - Criador do primeiro neuro-computador a obter sucesso (Mark I).

Mark I - Perceptron

Um breve histórico (cont)

- 1958-1967.
  - Várias pesquisas mal sucedidas.
- 1967-1982.
  - Pesquisas silenciosas.
- 1986 – David Rumelhart.
  - Livro "*parallel distributed processing*".
  - Algoritmo eficaz de aprendizagem.
- 1987.
  - Primeira conferência IEEE Int. Conf. On Neural Nets.

N



- Dendritos:
  - Receber os estímulos transmitidos por outros neurônios.
- Corpo (somma).
  - Coletar e combinar informações vindas de outros neurônios.
- Axônio.
  - Transmite estímulos para outras células.

Redes Neuronais Artificiais

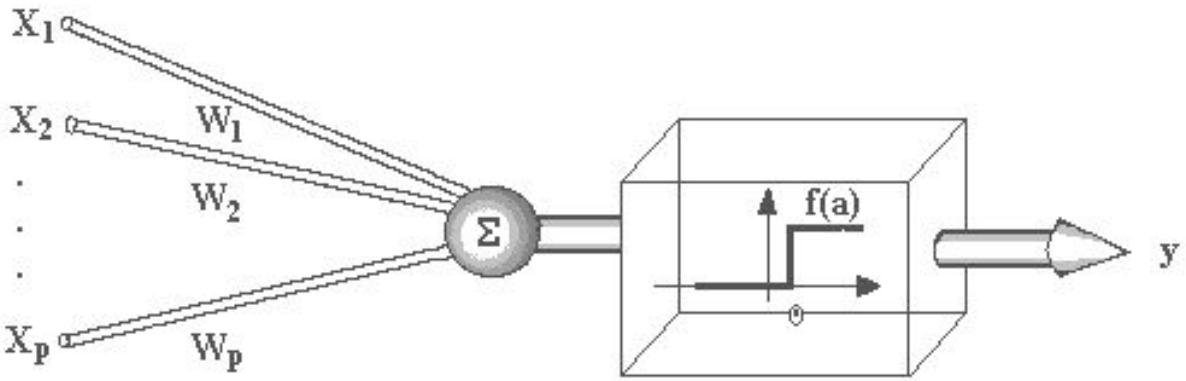
- Técnica computacional que apresenta um modelo inspirado na estrutura do neurônio.
- Simula o cérebro humano:
  - Aprendendo, errando e fazendo descobertas.
- Estrutura de processamento de informação distribuída paralelamente na forma de um grafo direcionado.

Cérebro X Computador

Parâmetro	Cérebro	Computador
Material	Orgânico	Metal e Plástico
Velocidade	Milisegundos	Nanosegundos
Tipo de Processamento	Paralelo	Sequêncial
Armazenamento	Adaptativo	Estático
Controle de Processos	Distribuído	Centralizado
Número de Elementos Processados	10^{11} a 10^{14}	10^{5} a 10^{6}
Ligações entre Elementos Processados	10.000	< 10

Neurônio artificial

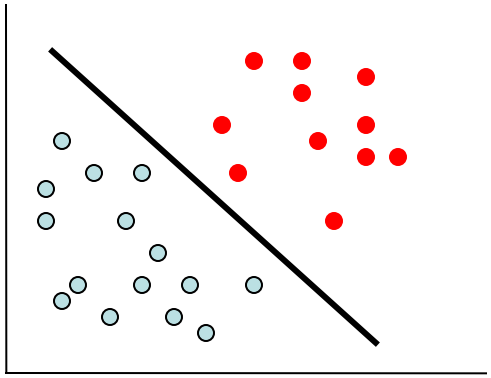
- Sinais são apresentados à entrada.
- Cada sinal é multiplicado por um peso.
- Soma ponderada produz um nível de ativação.
- Se esse nível excede um limite (*threshold*) a unidade produz uma saída.

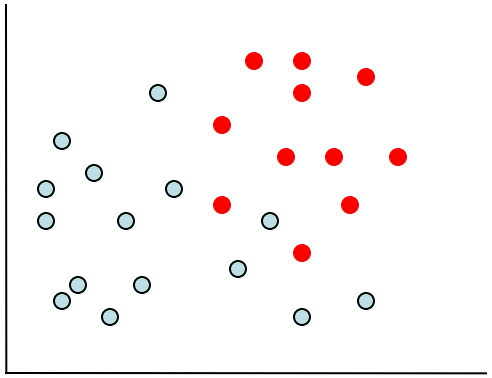


[PERCEPTRON]

Perceptron

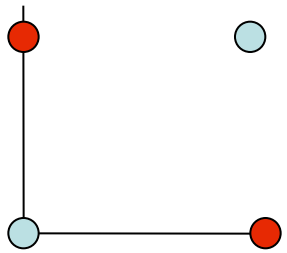
- Resolve problemas linearmente separáveis somente.
- Problemas reais, entretanto, na maioria das vezes são mais complexos.

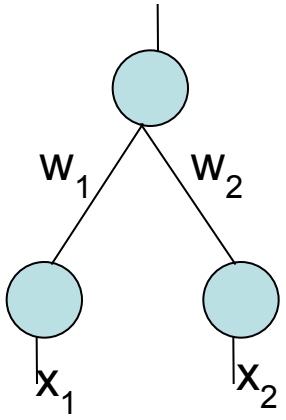




Exemplo

- Considere por exemplo, o problema XOR





Como visto anteriormente com SVMs, podemos afirmar que em altas dimensões os problemas são linearmente separáveis.

Sendo assim, vamos mudar o problema de R^2 para R^3 adicionando uma terceira característica.

Exemplo

X1	X2	X3	Output
1	1	1	0
1	0	0	1
0	1	0	1
0	0	0	0

- Nesse caso, a característica adicionada (X3) é a operação AND entre X_1 e X2
- O fato de adicionarmos essa característica faz com que o problema torne-se linearmente separável.

Adicionando uma camada

- Outra maneira de resolver esse problema consiste em adicionar uma camada extra (escondida) entre as camadas de entrada e saída.

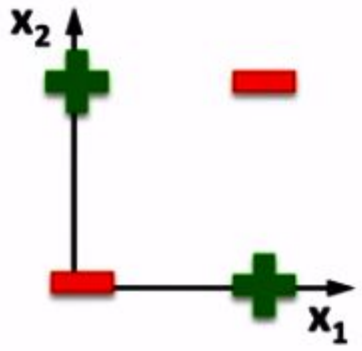
- Dado uma quantidade suficiente de neurônios na camada escondida, é possível resolver qualquer tipo de problemas
  - Claro que isso depende das características de entrada.

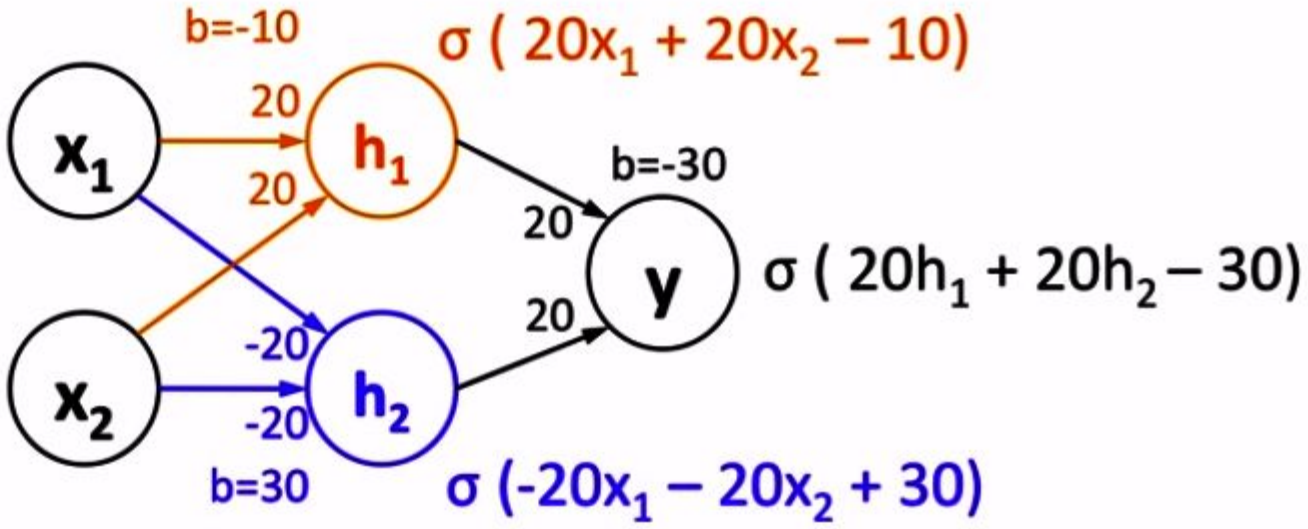
Camada Escondida

- Essa camada pode ser vista como um extrator de características, ou seja, a grosso modo, o neurônio escondido seria uma característica a mais
  - O que torna o problema do XOR linearmente separável.

Uma outra rede: XOR

Linear classifiers
cannot solve this





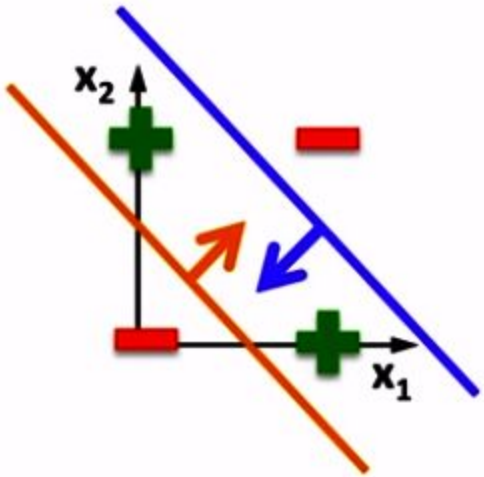
$\sigma(20*0 + 20*0 - 10) \approx 0$
$\sigma(20*1 + 20*1 - 10) \approx 1$
$\sigma(20*0 + 20*1 - 10) \approx 1$
$\sigma(20*1 + 20*0 - 10) \approx 1$

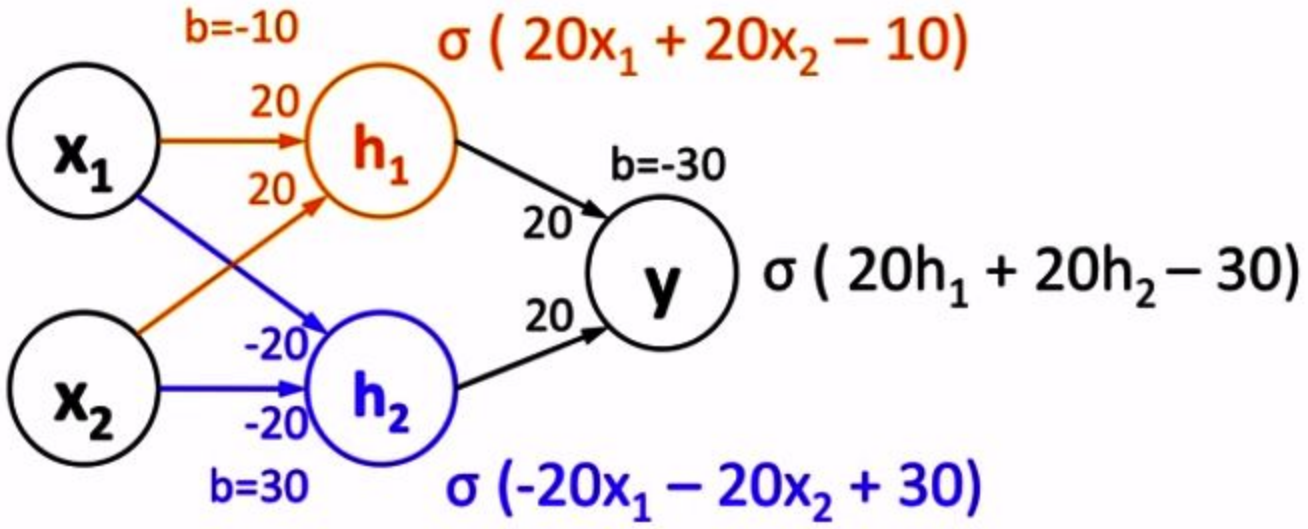
$\sigma(-20*0 - 20*0 + 30) \approx 1$
$\sigma(-20*1 - 20*1 + 30) \approx 0$
$\sigma(-20*0 - 20*1 + 30) \approx 1$
$\sigma(-20*1 - 20*0 + 30) \approx 1$

$\sigma(20*0 + 20*1 - 30) \approx 0$
$\sigma(20*1 + 20*0 - 30) \approx 0$
$\sigma(20*1 + 20*1 - 30) \approx 1$
$\sigma(20*1 + 20*1 - 30) \approx 1$

Uma outra rede: XOR

Linear classifiers
cannot solve this



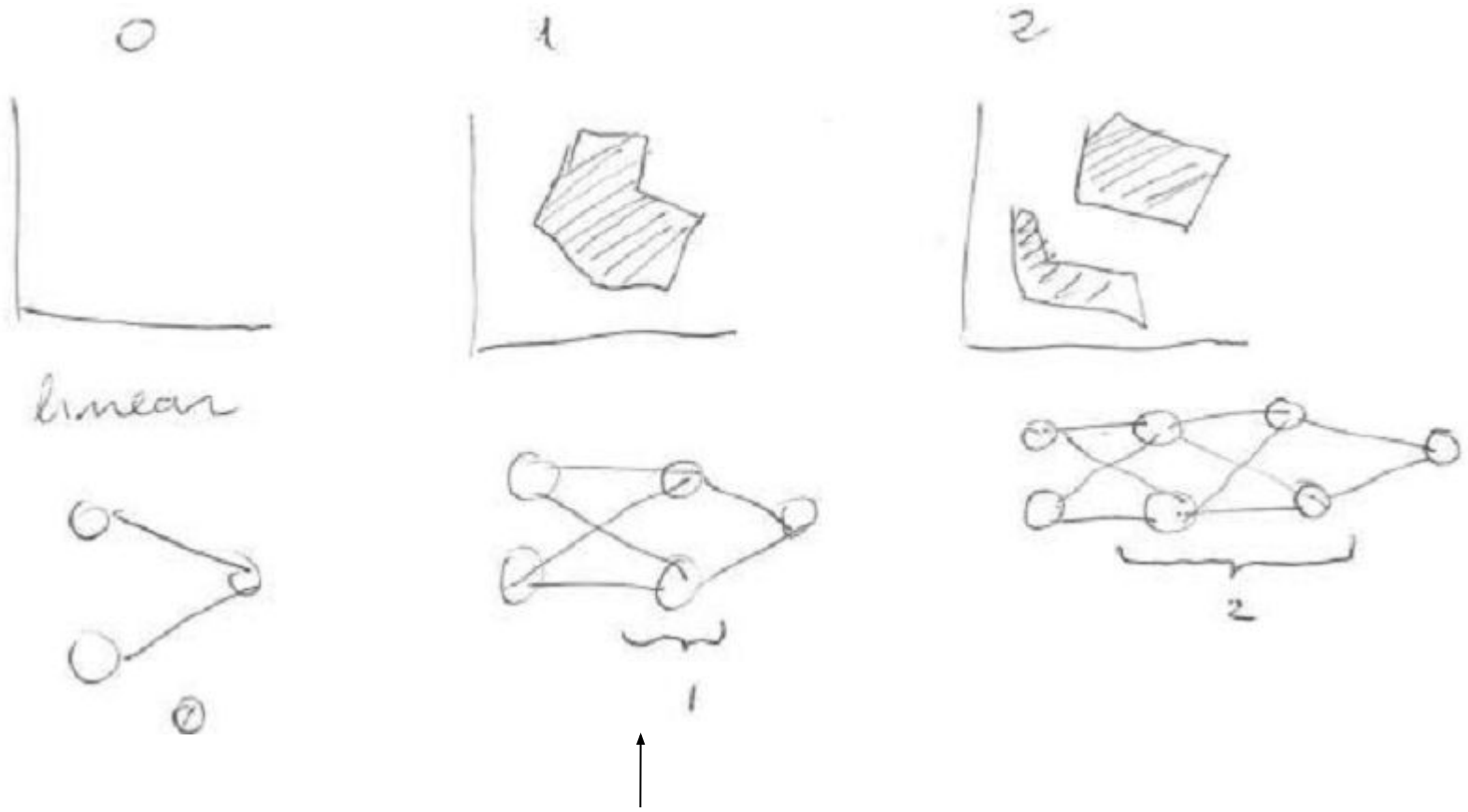


σ(20*0 + 20*0 – 10) ≈ 0
σ(20*1 + 20*1 – 10) ≈ 1
σ(20*0 + 20*1 – 10) ≈ 1
σ(20*1 + 20*0 – 10) ≈ 1

σ (-20*0 – 20*0 + 30) ≈ 1
σ (-20*1 – 20*1 + 30) ≈ 0
σ (-20*0 – 20*1 + 30) ≈ 1
σ (-20*1 – 20*0 + 30) ≈ 1

σ (20*0 + 20*1 – 30) ≈ 0
σ (20*1 + 20*0 – 30) ≈ 0
σ (20*1 + 20*1 – 30) ≈ 1
σ (20*1 + 20*1 – 30) ≈ 1

Camadas X Fronteiras



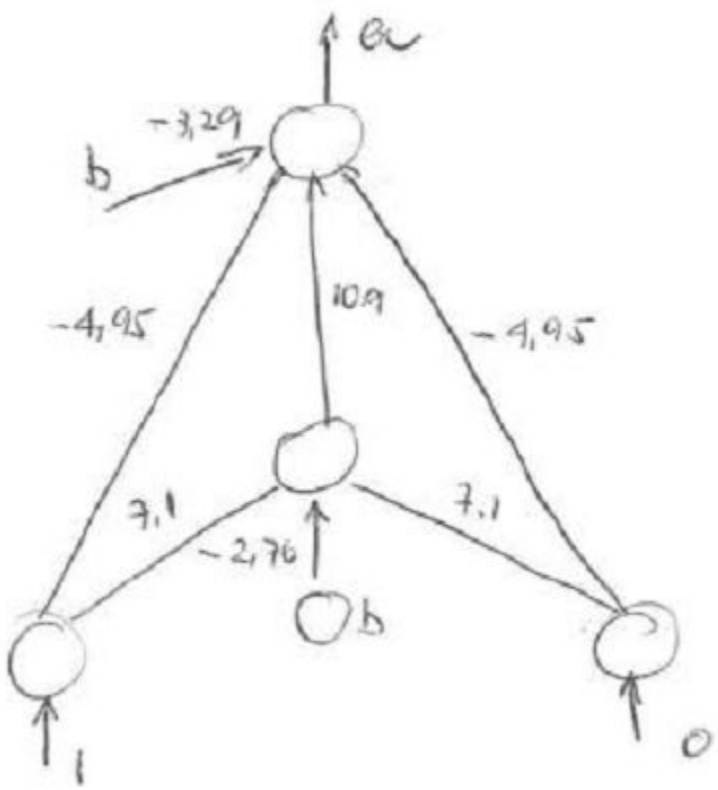
Geralmente uma camada escondida resolve
a grande maioria dos problemas.

O problema de atribuição de créditos

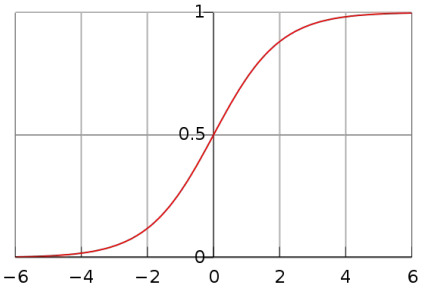
- Quando temos uma camada escondida, surge o problema de atribuição de créditos aos neurônios desta camada
  - Não existem "*targets*" como na camada de saída.
  - Período entre 1958 e 1982 foi dedicado a resolver esse problema
  - Solução foi o algoritmo conhecido como Backpropagation.
    - David E. Rumelhart et al (1986)

MLP para o problema XOR

- Considere o problema XOR e a seguinte rede já treinada.



A saída é calculada de maneira similar ao perceptron, mas a MLP geralmente usa **sigmoid** como função de ativação.



$$v = \frac{1}{1+e^{-s}}$$

Para grandes quantidades de dados o resultado da sigmoid pode ser interpretado como estimação de probabilidade.

MLP para o problema XOR

- Para calcular a saída da rede, primeiramente devemos encontrar o valor do neurônio escondido.

  1 * 7.1 + 1 * -2.76 +0 * 7.1 = 4.34

  – Passando o valor 4.34 na função de ativação,
    - temos 0.987.

- O valor de saída é então calculado

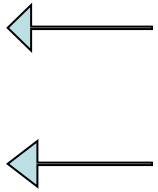
  1 * -4.95 + 0 * -4.95 + 0.987 * 10.9 + 1 * -3.29 = 2.52

  – Passando 2.52 na função de ativação,
    - temos a saída igual a 0.91

MLP para o problema XOR

- Após classificarmos todos os padrões de entrada teríamos

1	0	0.91
0	0	0.08
0	1	1.00
1	1	0.10



Podemos usar como regra de decisão um limiar igual a 0.9, por exemplo.

BackProp

- Seja o_j o valor de ativação para o neurônio j.
- Seja ***f*** uma função de ativação.

$$net_j = \sum_{i=1}^{n} \omega_{ij} o_i$$

- Seja w_{ij} o peso entre os neurônios ***i*** e ***j***.
- Seja net_j a entrada para o neurônio ***j***, a qual é calculada por

$$o_j = f(net_j)$$

onde ***n*** é o número de unidades ligadas ao neurônio ***j***

BackProp

- O treinamento acontece da seguinte maneira:
  1. Inicializar os valores dos pesos e neurônios aleatoriamente.
  2. Apresentar um padrão a camada de entrada da rede
  3. Encontrar os valores para as camadas escondidas e a camada de saída.
  4. Encontrar o erro da camada de saída.
  5. Ajustar os pesos através da retropropagação dos erros (*Backpropagation*)
     1. Diminuir o erro a cada iteração
  6. Encontrar o erro na camada escondida
  7. Ajustar os pesos.

Critério de parada é o erro desejado

BackProp

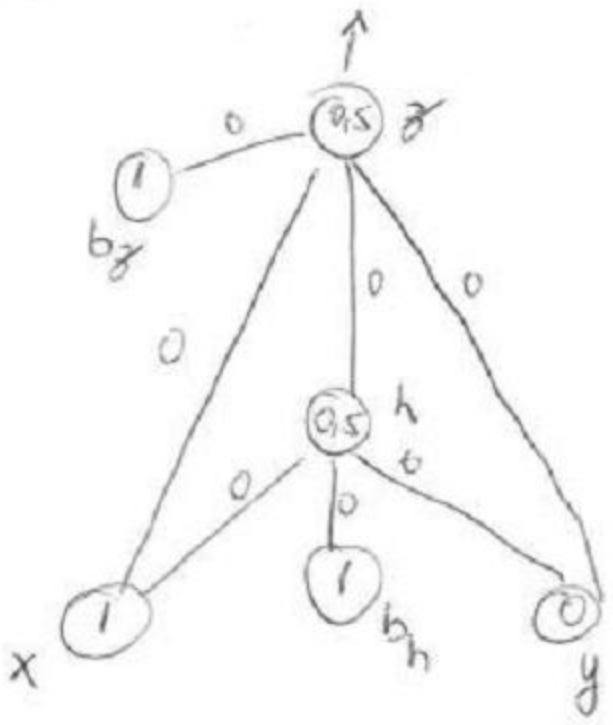
- O valor corrente de ativação de um neurônio *k* é o_k e o target é t_k

- Após realizar os passos 1, 2, e 3, o próximo passo consiste em calcular o erro, o qual pode ser realizado através da seguinte equação

$$\delta_k = (t_k - o_k) o_k (1 - o_k)$$

BackProp: Exemplo

- Considere uma rede inicializada da seguinte forma



Nesse caso $\delta_z = (1-0.5) \times 0.5 \times (1-0.5) = 0.125$

BackProp: Exemplo

- A fórmula para atualizar os pesos W entre o neurônio i e j é

$$\omega_{ij} = \omega_{ij} + \eta \delta_j o_i$$

- onde **eta** é uma constante pequena e positiva camada de "taxa de aprendizagem" (*learning rate*)
- Usando uma taxa de 0.1, temos

BackProp: Exemplo

$$w_{xz} = 0 + 0.1 \times 0.125 \times 1 = 0.0125$$
$$w_{yz} = 0 + 0.1 \times 0.125 \times 0 = 0$$
$$w_{hz} = 0 + 0.1 \times 0.125 \times 0.5 = 0.00625$$
$$w_{bz} = 0 + 0.1 \times 0.125 \times 1 = 0.0125$$

A fórmula para calcular o erro dos neurônios da camada escondida é

$$\delta_i = o_i(1 - o_i)\sum_k \delta_k w_{ik}$$

Como temos somente um neurônio no nosso exemplo

$$\delta_h = o_h(1 - o_h)\delta_z w_{hz}$$

BackProp: Exemplo

Nesse caso teríamos

$$\delta_h = 0.5(1-0.5)0.125 \times 0.00625 = 0.000195313$$

Para atualizar os pesos, usamos a mesma fórmula

$$w_{hx} = 0 + 0.1 \times 0.0001953 \times 1 = 0.00001953$$
$$w_{hy} = 0 + 0.1 \times 0.0001953 \times 0 = 0$$
$$w_{hbh} = 0 + 0.1 \times 0.0001953 \times 1 = 0.00001953$$

Com os novos pesos calculados, a saída da rede seria 0.507031

BackProp: Exemplo

- Após aplicarmos todos os padrões, teríamos o seguinte

1	0	0.4998
0	0	0.4998
0	1	0.4998
1	1	0.4997

- Usando uma taxa de aprendizagem = **0,1** ,
  - o algoritmo levará 20.000 iterações para convergir.
- Uma solução para melhorar isso seria
  - aumentar a ***learning rate***.
- Se usarmos *learning rate* = **2**,
  - o algoritmo converge em 480 iterações.

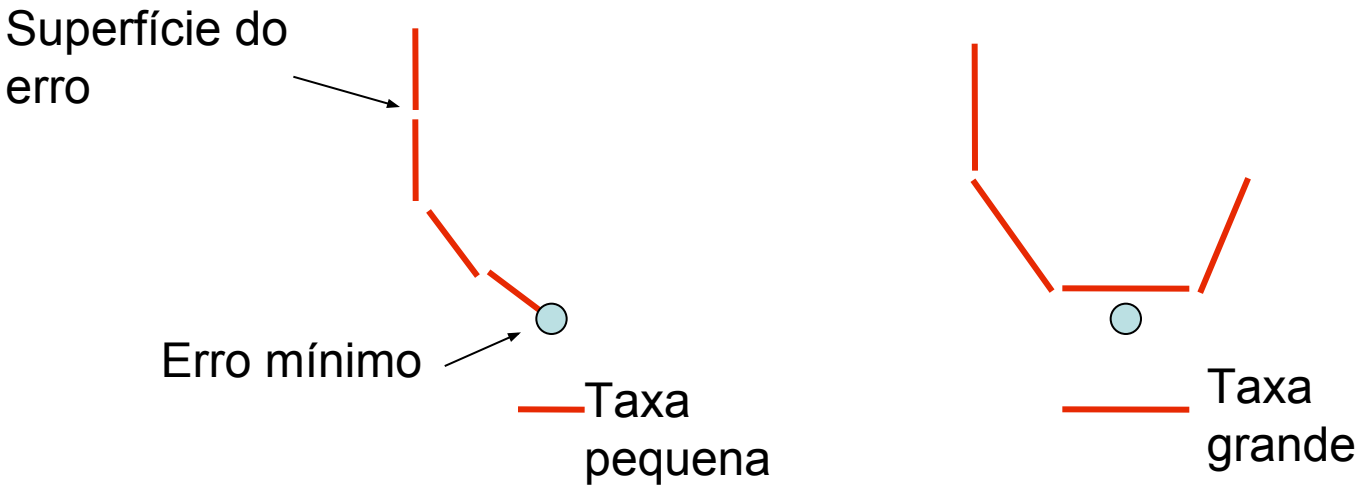
Aspectos Práticos

- Alguns aspectos práticos devem ser considerados na utilização de redes neuronais **MLP**.
  - Taxa de aprendizagem
  - Momentum
  - Online vs batch
  - Shuffle
  - Normalização
  - Inicialização dos pesos
  - Generalização

Y. LeCun et al,
Efficient Backprop, 1998

Taxa de Aprendizagem

- Taxas muito pequenas tornam o processo bastante lento.
- Taxas muito grandes tornam o processo rápido.
  - Podem não trazer os resultados ideais.

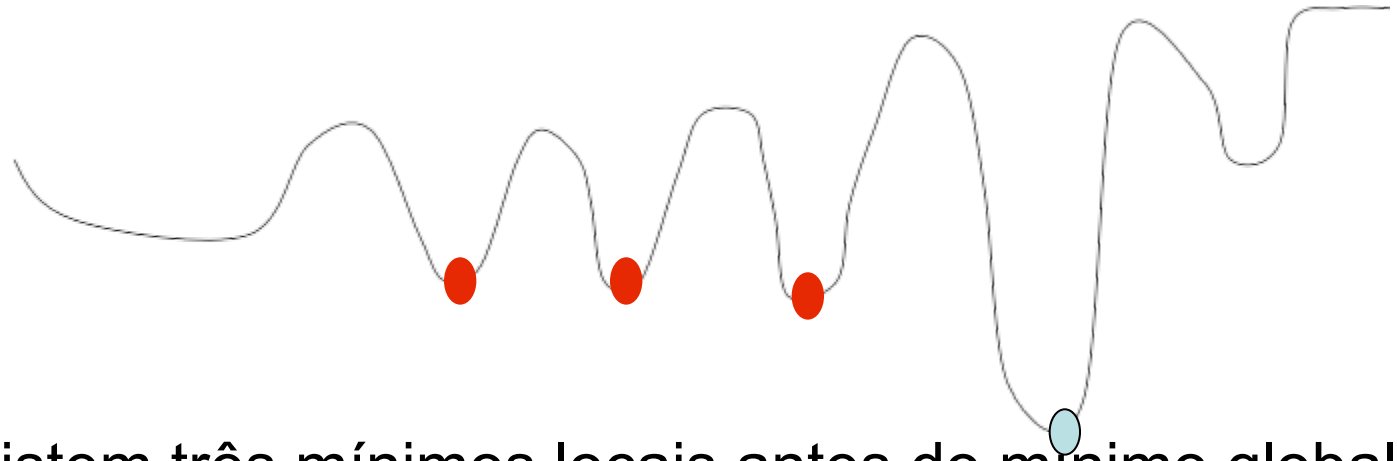


Taxa de Aprendizagem

- O ideal é começar com uma taxa grande e reduzir durante as iterações.
- Permite a exploração global no início (*exploration*) a local (*exploitation*) quando o algoritmo estiver próximo do ótimo global.
- Geralmente valores entre 0.05 e 0.75 fornecem bons resultados.

Momentum

- É uma estratégia usada para evitar mínimos locais.
- Considere a seguinte superfície



- Existem três mínimos locais antes do mínimo global.

Momentum

- Considere, por exemplo, que uma bola seja solta no início da superfície.
- Se ela tiver "*momentum*" suficiente, ela vai conseguir passar os três mínimos locais e alcançar o mínimo global.

$$\omega_{ij} = \alpha\omega_{ij} + \eta\delta_j o_k$$

- Normalmente $0 \leq \alpha \leq 0.9$

On-line vs *Batch*

- A diferença está no momento em que os pesos são atualizados.
- Na versão *on-line*, os pesos são atualizados a cada padrão apresentado a rede.
- Na versão *batch*, todos os pesos são somados durante uma iteração/época (todos os padrões) e só então os pesos são atualizados.
- Versão *batch*
  - Interessante para aplicações que possam ser paralelizadas.
- Versão *on-line*
  - Geralmente converge mais rapidamente.

Misturando Exemplos (*Shuffle*)

- Redes neuronais aprendem melhor quando diferentes exemplos de diferentes classes são apresentados a rede.

- Uma prática muito comum consiste em apresentar um exemplo de cada classe a rede
  - Isso garante que os pesos serão atualizados levando-se em consideração todas as classes.

Misturando Exemplos (*Shuffle*)

- Se apresentarmos à rede todos os exemplos de uma classe, e assim por diante, os pesos finais tenderão para a última classe
  - A rede vai “esquecer” o que ela aprendeu antes.

Normalização

- A normalização é interessante quando existem características em diversas unidades dentro do vetor de características.
- Nesses casos, valores muito altos podem saturar a função de ativação.
- **Soma 1**: Uma maneira bastante simples de normalizar os dados consiste em somar todas as características e dividir pela soma

$$x'_i = \frac{x_i}{\sum_i x_i}$$

- Garante que a “energia” inserida na rede seja 1

Normalização

- Z-score: Para redes neuronais MLP, geralmente é interessante ter as características com média próxima de zero

$$x'_i = \frac{x_i - \mu(X_i)}{\sigma(X_i)}$$

- Melhora o tempo de convergência durante a aprendizagem.

Normalização

- Max-min: Pode-se também normalizar cada característica para ficar entre 0 e 1

$$x'_i = \frac{max(X_i) - x_i}{max(X_i) - min(X_i)}$$

- Pode “sobrecarregar” a rede

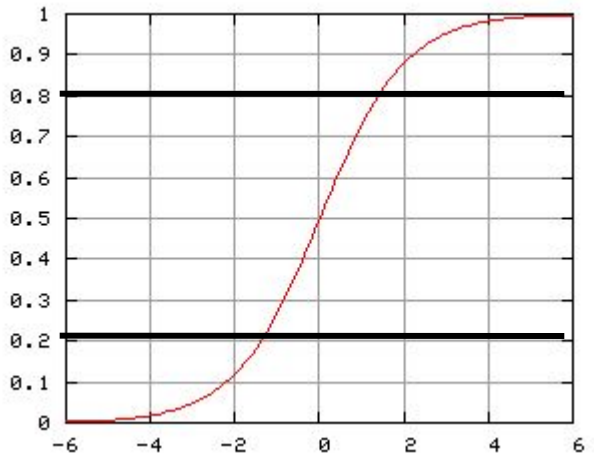
Normalização

- As características devem ser não correlacionadas se possível
  - Quando temos poucas características podemos verificar isso facilmente.
  - Com várias características, o problema se torna muito mais complexo.
  - Métodos de seleção de características para escolher características descorrelacionadas

Inicialização dos Pesos

- Assumindo que os dados foram normalizados e uma *sigmoid* está sendo usada como função de ativação.
  - Os pesos (espaço de separação) devem ser inicializados aleatoriamente mas de modo que fiquem na região linear da sigmoid

Com pesos muito altos ou muito baixo a sigmoid deve saturar
- Gradientes pequenos
- Aprendizagem muito lenta.



Generalização

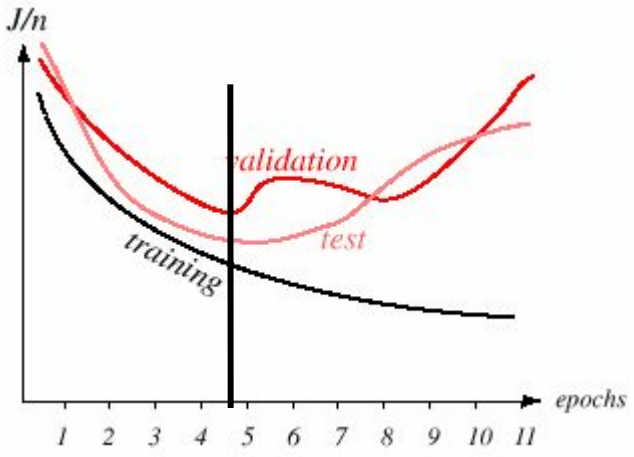
- Um aspecto bastante importante quando treinamos um classificador é garantir que o mesmo tenha um bom poder de generalização.
  - Evitar *overfitting*.

- A maneira clássica de se garantir uma boa generalização consiste em reservar uma parte da base para **validar** a generalização.

Generalização

- A cada iteração, devemos monitorar o desempenho na base de validação.

- Não é raro observar o seguinte desempenho



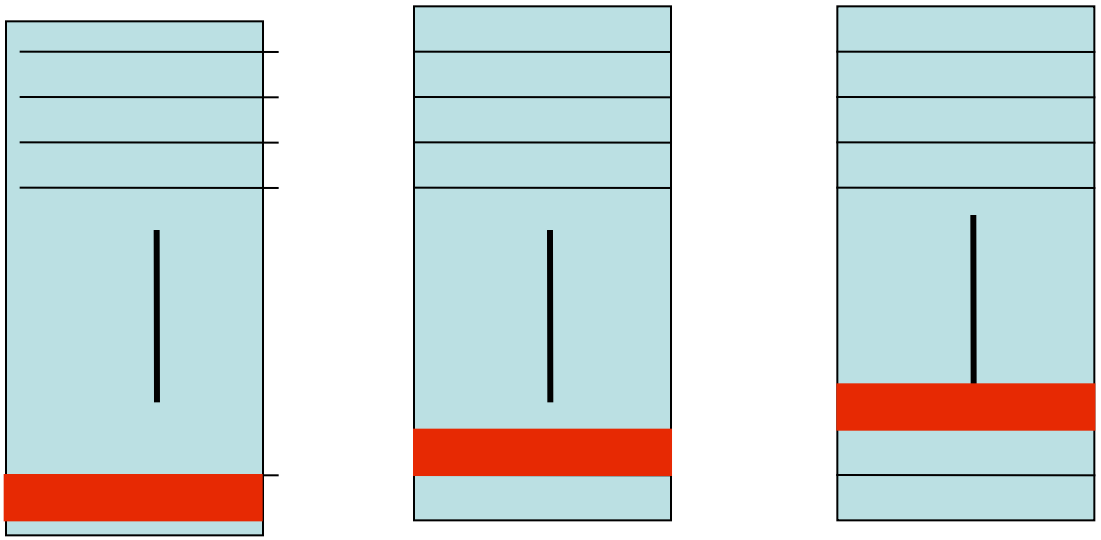
Generalização

- Uma outra estratégia é a validação cruzada.
  - Interessante quando a base não é muito grande
  - Separar alguns exemplos para validação pode prejudicar o treinamento.

- Consiste em dividir a base de aprendizagem em *n* partições iguais e usar *n-1* partições para aprendizagem e uma partição para validação.

Generalização

- A cada iteração de aprendizado a partição usada para validação é trocada.



Tamanho da Rede

- Geralmente uma camada escondida é suficiente.
- Em poucos casos você vai precisar adicionar uma segunda camada escondida.
- Não existe uma fórmula matemática para se encontrar o número de neurônios.
  - Empírico
- Dica prática
  - Comece com uma rede menor, pois a aprendizagem vai ser mais rápida.

Referências

- Luiz E. S Oliviera, **Classificadores Lineares**, DInf / UFPR, 2014.

- Victor Lavrenko, Introductory Applied Machine Learning, University of Edinburgo, 2014.