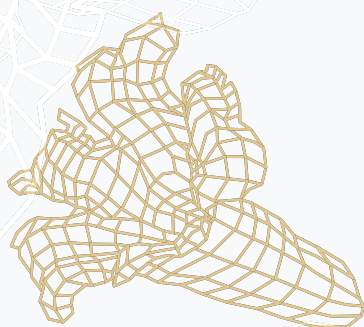


02 A 05

DE OUTUBRO 2017

UBERLÂNDIA - MG

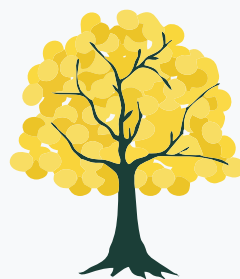


SBBD

TÓPICOS EM GERENCIAMENTO DE DADOS E INFORMAÇÕES 2017

**VANINHA VIEIRA, HUMBERTO L. RAZENTE,
MARIA CAMILA N. BARIONI (ORG.)**

SOCIEDADE BRASILEIRA DE COMPUTAÇÃO



SBBD2017



32nd BRAZILIAN SYMPOSIUM ON DATABASES

October 2nd to 5th, 2017

Uberlândia – MG – Brazil

TÓPICOS EM GERENCIAMENTO DE DADOS E INFORMAÇÕES 2017

Editora

Sociedade Brasileira de Computação – SBC

Organizadores

Vaninha Vieira

Humberto Luiz Razente

Maria Camila Nardini Barioni

Realização

Sociedade Brasileira de Computação – SBC

Comissão Especial de Banco de Dados (CEBD) da SBC

Universidade Federal de Uberlândia – UFU

ISBN: 978-85-7669-400-7

B827t Brazilian Symposium on databases (32. : 2017 : Uberlândia, MG, Brazil)
 Tópicos em gerenciamento de dados e informações 2017 [recurso eletrônico], 2 a 5 de Outubro de 2017 em Uberlândia, Minas Gerais ; organizadores Vaninha Vieira, Humberto Luiz Razente, Maria Camila Nardini Barioni. - Uberlândia: SBC, 2017.
 94 p. : il.

ISBN: 9788576694007

Inclui bibliografia.

Modo de acesso: <http://www.sbbd.org.br/2017>

1. Banco de dados - Congressos. 2. Bases de Dados - Congressos. I. Vieira, Vaninha. II. Razente, Humberto Luiz. III. Barioni, Maria Camila Nardini. IV. Universidade Federal de Uberlândia. V. Sociedade Brasileira de Computação. VI. Título.

XXXII Simpósio Brasileiro de Banco de Dados

02 a 05 de Outubro 2017
Uberlândia – MG – Brasil

MINICURSOS

Promoção

Sociedade Brasileira de Computação – SBC
Comissão Especial de Banco de Dados (CEBD) da SBC

Organização

Faculdade de Computação, Universidade Federal de Uberlândia – UFU

Comitê Diretivo do SBBD 2017

Javam Machado (UFC), Coordenador da CEBD
Agma Juci Machado Traina (USP)
Bernadette Lóscio (UFPE)
Caetano Traina Jr. (USP)
Carmem Hara (UFPR)
Mirella M. Moro (UFMG)
Vanessa Braganholo (UFF)

Coordenadores do SBBD 2017

Coordenador do Comitê Diretivo

Javam Machado (UFC)

Coordenadores de Organização Local

Maria Camila Nardini Barioni (UFU) e Humberto Luiz Razente (UFU)

Coordenadora do Comitê de Programa

Carmem S. Hara (UFPR)

Coordenadoras do Comitê de Programa de Artigos Curtos

Bernadette Lóscio (UFPE) e Damires Souza (IFPB)

Coordenador da Sessão de Demos e Aplicações

Daniel de Oliveira (UFF)

Coordenadora do Workshop de Teses e Dissertações em Banco de Dados

Carina Dorneles (UFSC)

Coordenadora de Minicursos

Vaninha Vieira (UFBA)

Coordenadora de Tutoriais

Ana Carolina Salgado (UFPE)

Coordenadora do Concurso de Teses e Dissertações

Vânia Vidal (UFC)

Coordenadora de Workshops

Fernanda Baião (UNIRIO)

Comitê Diretivo do KDMiLe 2017

Alexandre Plastino (UFF) (Coordenador)

André Ponce de Leon F. de Carvalho (ICMC-USP)

Wagner Meira Jr. (UFMG)

Comitê de Organização Local

Coordenadora Local do KDMiLe 2017

Elaine Ribeiro de Faria (UFU)

Membros do Comitê de Organização Local

Maria Camila N. Barioni (UFU)

Humberto L. Razente (UFU)

Elaine Ribeiro de Faria Paiva (UFU)
João Henrique de Souza Pereira (UFU)
José Gustavo de Souza Paiva (UFU)
Marcelo Zanchetta do Nascimento (UFU)

Comitê de Avaliação de Minicursos

Vaninha Vieira (UFBA) (Coordenadora)
Daniela Barreiro Claro (UFBA)
João Batista Rocha Jr. (UEFS)
José Palazzo Moreira de Oliveira (UFRGS)

Sumário

Capítulo 1	9
-------------------------	----------

É uma questão de tempo! Extraindo Conhecimento de Redes Sociais Temporais

Fabíola S. F. Pereira, João Gama, e Gina M. B. de Oliveira

Capítulo 2	30
-------------------------	-----------

Sports Analytics: Mudando o Jogo

Ígor Barbosa da Costa, Carlos Eduardo Santos Pires, e Leandro Balby Marinho

Capítulo 3	63
-------------------------	-----------

Como funciona o *Deep Learning*

Moacir A. Ponti, e Gabriel B. Paranhos da Costa

mini:3

Capítulo

3

Como funciona o *Deep Learning*

Moacir A. Ponti¹ e Gabriel B. Paranhos da Costa¹

Resumo

Métodos de Aprendizado Profundo (Deep Learning) são atualmente o estado-da-arte em muitos problemas possíveis de se resolver via aprendizado de máquina, em particular problemas de classificação. No entanto, ainda há pouco entendimento de como esses métodos funcionam, porque funcionam e quais as limitações envolvidas ao utilizá-los. Nesse capítulo descreveremos em detalhes a transição desde redes rasas (shallow) até as redes profundas (deep), incluindo exemplos em código de como implementá-las, bem como os principais fatores a se levar em consideração ao treinar uma rede profunda. Adicionalmente, iremos introduzir aspectos teóricos que embasam o uso de modelos profundos, e discutir suas limitações.

Abstract

Deep Learning methods are currently the state-of-the-art in many problems which can be tackled via machine learning, in particular classification problems. However there is still lack of understanding on how those methods work, why they work and what are the limitations involved in using them. In this chapter we will describe in detail the transition from shallow to deep networks, include examples of code on how to implement them, as well as the main issues one faces when training a deep network. Afterwards, we introduce some theoretical background behind the use of deep models, and discuss their limitations.

3.1. Introdução

Nos últimos anos, técnicas de Aprendizado Profundo tem revolucionado diversas áreas de aprendizado de máquina, em especial a visão computacional. Isso ocorreu principalmente por dois motivos: a disponibilidade de bases de dados com milhões de imagens [8, 46], e de computadores capazes de reduzir o tempo necessário para realizar o processamento

¹ICMC — Universidade de São Paulo, São Carlos, SP, Brasil

dessas bases de dados. Antes disso, alguns estudos exploraram a utilização de representações hierárquicas com redes neurais, tais como o Neocognitron de Fukushima [11] e a rede neural para reconhecimento de dígitos de LeCun [28]. Apesar desses métodos serem conhecidos pelas comunidades de Aprendizado de Máquinas e Inteligência Artificial, grande parte dos esforços dos pesquisadores de outras áreas tiveram como foco outras técnicas. Por exemplo, em Visão Computacional abordagens baseadas em características invariantes a escala, *Bag-of-Features*, pirâmides espaciais e abordagens baseadas em dicionários foram bastante utilizadas durante o final da década de 2000. Características baseadas em frequência foram comumente utilizadas pela comunidade de Processamento de Sinais, Áudio e Fala, enquanto métodos de *Bag-of-Words* e suas variantes foram explorados no Processamento de Linguagem Natural.

Talvez um dos principais marcos que atraiu a atenção das diferentes comunidades tenha sido a publicação do artigo e código-fonte que implementa a rede neural convolucional AlexNet [26]. Os resultados apontavam para uma indiscutível performance estatística de tais métodos para realizar classificação de imagem e, a partir desse ponto, o Aprendizado Profundo (do inglês *Deep Learning* (DL)) passou a ser aplicado a diversas áreas, em particular, mas não exclusivamente, as áreas de Visão Computacional, Processamento de Imagens, Computação Gráfica. Redes neurais convolucionais (do inglês *Convolutional Neural Networks* (CNN)), *Deep Belief Networks*, *Restricted Boltzmann Machines* e *Autoencoders* (AE) começaram a aparecer como base para métodos do estado da arte em diversas aplicações. A competição ImageNet [8] teve grande impacto nesse processo, começando uma corrida para encontrar o modelo que seria capaz de superar o atual campeão nesse desafio de classificação de imagens, além de segmentação de imagens, reconhecimento de objetos, entre outras tarefas.

De fato, técnicas de Aprendizado Profundo oferecem atualmente um importante conjunto de métodos para analisar sinais como áudio e fala, conteúdos visuais, incluindo imagens e vídeos, e ainda conteúdo textual. Entretanto, esses métodos incluem diversos modelos, componentes e algoritmos. A variedade de palavras-chave utilizadas nesse contexto faz com que a literatura da área praticamente se torne uma nova linguagem: Mapas de Atributos, Ativação, Campos Receptivos, *dropout*, ReLU, MaxPool, softmax, SGD, Adam, FC, etc. Isso pode fazer com que seja difícil para que um leigo entenda e consiga acompanhar estudos recentes. Além disso, apesar do amplo uso de redes neurais profundas por pesquisadores em busca da resolução de problemas, há ainda uma lacuna no entendimento desses métodos: como eles funcionam, em que situações funcionam e quais suas limitações?

Nesse texto, iremos descrever as Redes Neurais Profundas (*Deep Neural Networks*), e em particular as Redes Convolucionais. Como o foco é na compreensão do funcionamento desse grupo de métodos, outros métodos de Aprendizado Profundo não serão tratados tais como *Deep Belief Networks* (DBN), *Deep Boltzmann Machines* (DBM) e métodos que utilizam Redes Neurais Recorrentes (do inglês *Recurrent Neural Networks* (RNN)) e *Reinforcement Learning*. Para maiores detalhes sobre esses métodos, recomendamos [10, 27, 47] como referências para estudos que utilizam DBNs e DBMs, e [57, 17, 40] para estudos relacionados a RNNs. Para o estudo de Autoencoders, recomendamos [2] e [14], e para o estudo de Redes Geradoras Adversariais (Generative Adversarial Networks, GANs) [15]. Acreditamos que a leitura desse material será de grande ajuda para o

entendimento dos outros métodos citados e não cobertos por esse texto.

A partir da seção seguinte iremos nos referir ao Aprendizado Profundo pelo seu termo em inglês *Deep Learning* (DL), visto que é esse o mais comumente utilizado mesmo na literatura em língua portuguesa. Utilizaremos ainda as siglas em inglês pelo mesmo motivo, e.g. CNN.

Esse capítulo está organizado da seguinte forma. A Seção 3.2 apresenta definições que serão utilizadas ao longo do texto bem como os pré-requisitos necessários. A seguir, na Seção 3.3 apresentamos de forma suave os conceitos desde o aprendizado de máquina até o aprendizado profundo, por meio do exemplo de classificação de imagens. As Redes Convolucionais (Seção 3.4) são apresentadas, contextualizando suas particularidades. Então, na Seção 3.5 apresentamos as bases teóricas que até o momento explicam o sucesso dos métodos de aprendizado profundo. Finalmente, considerações finais são discutidas na Seção 3.5.1.

3.2. Deep Learning: pré-requisitos e definições

Os pré-requisitos necessários para entender como Deep Learning funciona, incluem conhecimentos básicos de Aprendizado de Máquinas (ML) e Processamento de Imagens (IP), em particular conhecimentos básicos sobre aprendizado supervisionado, classificação, redes neurais Multilayer Perceptron (MLP), aprendizado não-supervisionado, fundamentos de processamento de imagens, representação de imagens, filtragem e convolução. Como esses conceitos estão fora do escopo deste capítulo, recomenda-se [13, 1] como leituras introdutórias. Assume-se também que o leitor está familiarizado com Álgebra Linear e Cálculo, além de Probabilidade e Otimização — uma introdução a esses tópicos pode ser encontrada na Parte 1 do livro-texto de Goodfellow *et al.* sobre Deep Learning [14]. Ainda assim tentaremos descrever os métodos de forma clara o suficiente para que seja possível o entendimento mesmo com rudimentos dos pré-requisitos.

Métodos que utilizam **Deep Learning** buscam descobrir um modelo (e.g. regras, parâmetros) utilizando um conjunto de dados (exemplos) e um método para guiar o aprendizado do modelo a partir desses exemplos. Ao final do processo de aprendizado tem-se uma função capaz de receber por entrada os dados brutos e fornecer como saída uma representação adequada para o problema em questão. Mas como DL se diferencia de ML? Vamos ver dois exemplos.

Exemplo 1 — classificação de imagens : deseja-se receber como entrada uma imagem no formato RGB e produzir como saída as probabilidades dessa imagem pertencer a um conjunto possíveis de classes (e.g. uma função que seja capaz de diferenciar imagens que contém cães, gatos, tartarugas e corujas). Assim queremos aprender uma função como $f(\mathbf{x}) = y$, em que x representa a imagem, e y a classe mais provável para \mathbf{x} .

Exemplo 2 — detecção de anomalias em sinais de fala : deseja-se receber como entrada um áudio (sinal) e produzir como saída uma representação desse sinal que permita dizer se a entrada representa um caso normal ou anômalo (e.g. uma função que permita responder para anomalias na fala de uma pessoa que indique alguma enfermidade ou sín-

drome). Assim, a função a ser aprendida estaria no formato $f(\mathbf{x}) = p$, em que p representa a probabilidade de \mathbf{x} ser um áudio anômalo.

Note que a definição e ambos os exemplos são iguais aos de aprendizado de máquina: o Exemplo 1 é um cenário de aprendizado supervisionado, enquanto o Exemplo 2 se trata de um cenário semi-supervisionado (podendo também ser não supervisionado a depender da base de dados).

De ML para DL : a diferença quando se trata de DL é como se aprende a função $f(\cdot)$. De forma geral, métodos não-DL, comumente referidos na literatura como “superficiais” ou “rasos” (o termo em inglês, que utilizaremos, é *shallow*) buscam diretamente por uma única função que possa, a partir de um conjunto de parâmetros, gerar o resultado desejado. Por outro lado, em DL temos métodos que aprendem $f(\cdot)$ por meio da **composições** de funções, i.e.:

$$f(\mathbf{x}) = f_L(\cdots f_2(f_1(\mathbf{x}_1)) \cdots),$$

onde cada função $f_l(\cdot)$ (o índice l se refere comumente a uma “camada”, veremos mais a frente o significado desse termo) toma como entrada um vetor de dados \mathbf{x}_l (preparado para a camada l), gerando como saída o próximo vetor \mathbf{x}_{l+1} .

Para sermos mais precisos, cada função faz uso de parâmetros para realizar a transformação dos dados de entrada. Iremos denotar o conjunto desses parâmetros (comumente uma matriz) por W_l , relacionado a cada função f_l , e então podemos escrever:

$$f_L(\cdots f_2(f_1(\mathbf{x}_1, W_1); W_2) \cdots), W_L),$$

onde \mathbf{x}_1 representa os dados de entrada, cada função tem seu próprio conjunto de parâmetros e sua saída será passada para a próxima função. Na equação acima, temos a composição de L funções, ou L camadas.

Assim uma das ideias centrais em Deep Learning é aprender sucessivas representações dos dados, intermediárias, ou seja, os $\mathbf{x}_l, l = 1 \cdots L$ acima. Os algoritmos de DL resolvem o problema de encontrar os parâmetros W diretamente a partir dos dados e definem cada representação como combinações de outras (anteriores) e mais simples [14]. Assim a profundidade (em termos das representações sucessivas) permite aprender uma sequência de funções que transformam vetores mapeando-os de um espaço a outro, até atingir o resultado desejado.

Por isso é de fundamental importância a hierarquia das representações: cada função opera sobre uma entrada gerando uma representação que é então passada para a próxima função. A hipótese em DL é a de que, se tivermos um número suficiente de camadas L , espaços com dimensionalidade alta o suficiente, i.e., o número de parâmetros W em cada função (iremos detalhar o que isso significa nas próximas seções), e dados suficientes para aprender os parâmetros W_l para todo l , então conseguiremos capturar o escopo das relações nos dados originais, encontrando assim a representação mais adequada para a tarefa desejada [6]. Matematicamente, podemos interpretar que essa sequência de transformações separa as múltiplas variedades (do ponto de vista geométrico, do termo inglês

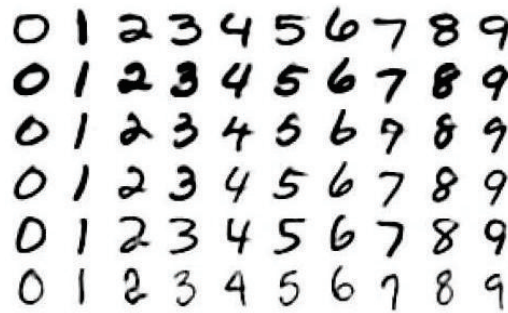


Figura 3.1. Exemplos de imagens das 10 classes da base de dígitos MNIST.

manifolds) que nos dados originais estariam todas enoveladas.

Na seção seguinte utilizaremos o exemplo do reconhecimento de dígitos para ilustrar os conceitos introduzidos, indo de um modelo *shallow* para um modelo *deep*.

3.3. From Shallow to Deep

Vamos tomar como exemplo o problema de classificar imagens contendo dígitos numéricos dentre 10 dígitos (de 0 a 9). Para isso utilizaremos a base de dados MNIST que possui imagens de tamanho 28×28 (veja exemplos na Figura 3.1). Montando uma arquitetura de rede neural simples, poderíamos tentar resolver o problema da seguinte forma:

1. **entrada:** vetorizamos a imagem de entrada 28×28 de forma a obter um vetor \mathbf{x} de tamanho 784×1 ;
2. **neurônios:** criamos 10 neurônios de saída, cada um representando a probabilidade da entrada pertencer a uma das 10 classes (dígitos 0,1,2,3,4,5,6,7,8 ou 9);
3. **pesos/parâmetros:** assim como em uma rede MLP, cada neurônio de saída está associado a pesos e termos bias que são aplicados nos dados para gerar uma combinação linear como saída;
4. **classificação:** para que a saída possa ser interpretada como probabilidades permitindo atribuir um exemplo à classe com maior probabilidade, utilizamos uma função conhecida como *softmax*.

Vamos recordar a montagem de uma rede neural e definir a notação. Na nossa arquitetura *shallow*, cada neurônio j processa uma imagem de entrada na forma $\mathbf{w}_j^t \mathbf{x} + \mathbf{b}_j$. Para ilustrar, se tivermos uma entrada com 4 valores no vetor, o neurônio j produziria o seguinte resultado:

$$\mathbf{w}_j^t \mathbf{x} + \mathbf{b}_j = (w_{j,1}x_1 + b_1) + (w_{j,2}x_2 + b_2) + (w_{j,3}x_3 + b_3) + (w_{j,4}x_4 + b_4)$$

Como temos apenas uma camada precisamos que esse valor resultante do neurônio j seja o score da rede neural para a classe j . Assim, a partir do valor gerado pelo produto vetorial e somados os biases, aplicamos a função softmax, que é uma forma de obter valores normalizados para o intervalo 0-1 para cada classe c . A probabilidade de predizer

y como pertencendo à classe c , dada uma imagem de entrada \mathbf{x} , um conjunto de pesos, w , e ainda os termos *bias*, \mathbf{b} , ambos relativos ao neurônio da classe c é definida como:

$$P(y = c | \mathbf{x}; \mathbf{w}_c; \mathbf{b}_c) = \text{softmax}_c(\mathbf{x}^t \mathbf{w}_c + \mathbf{b}_c) = \frac{e^{\mathbf{x}^t \mathbf{w}_c + \mathbf{b}_c}}{\sum_j |e^{\mathbf{x}^t \mathbf{w}_j + \mathbf{b}_j}|}.$$

Note que então temos primeiro uma combinação linear $\mathbf{x}^t \mathbf{w}_c + \mathbf{b}_c$, depois exponenciamos esse valor, e dividimos pela soma da saída de todos os outros neurônios, de forma que a soma seja unitária, respeitando os critérios para uma distribuição de probabilidade. A função softmax é considerada uma **função de ativação** para classificação. Veremos posteriormente que existem diversas funções de ativação possíveis: cada qual adequada a um tipo de cenário.

Na Figura 3.2 mostramos a arquitetura pretendida. A título de ilustração mostramos dois casos, no primeiro teríamos como entrada apenas um escalar, enquanto que, no segundo caso, tem-se um vetor como entrada.

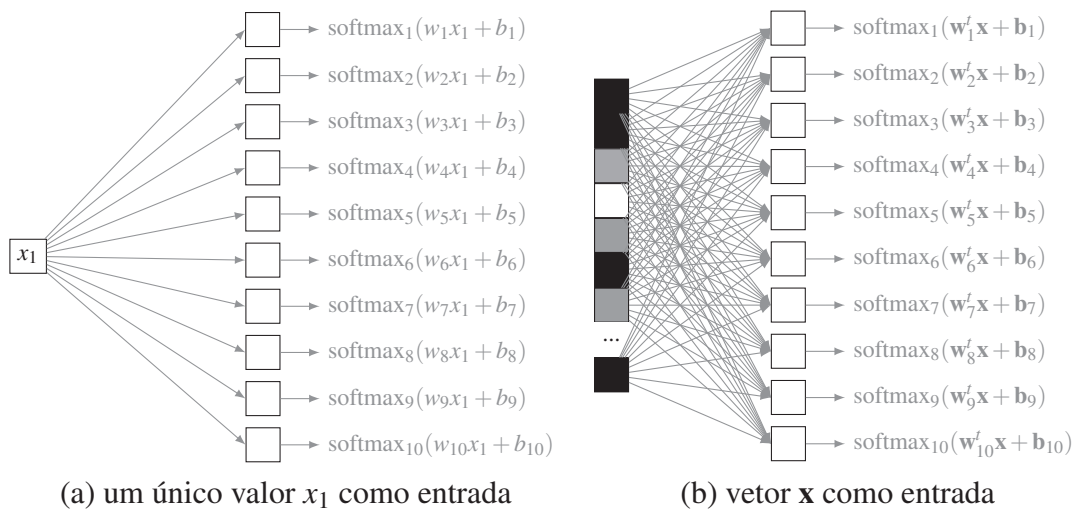


Figura 3.2. Uma arquitetura *shallow*: (a) caso em que teríamos apenas um valor escalar de entrada e 10 neurônios de saída, (b) mostra um vetor de valores como entrada, assim cada um dos 10 neurônios de saída está associado a um vetor de pesos diferente.

Na prática, ao invés de utilizarmos uma única imagem de entrada por vez, utilizamos um conjunto de exemplos de entrada, chamado de **batch**. Para que isso possa ser feito, utilizaremos notação matricial. Agora, o resultado da combinação linear computada pelos neurônios será dado por:

$$\mathbf{X} \cdot \mathbf{W} + \mathbf{b} \quad (1)$$

\mathbf{X} é uma matriz em que cada linha é uma imagem (ou seja, cada linha possui 784 valores, referentes aos 784 pixels da imagem). Aqui utilizaremos batches de tamanho 64, ou seja, a rede receberá como entrada 64 imagens de uma só vez e portanto a matriz \mathbf{X} tem tamanho 64×784 .

\mathbf{W} é uma matriz que contém os pesos com os quais as imagens serão transforma-

das. Note que queremos produzir como saída, para cada imagem (linha da matriz \mathbf{X}), as probabilidades para os 10 dígitos. Para isso a matriz \mathbf{W} deverá ter 10 colunas e 784 linhas. Cada coluna contém os 784 pesos de um neurônio.

\mathbf{b} é um vetor de termos bias: são utilizados os mesmos biases para todas as 64 imagens no batch. Assim a Equação 1 pode ser detalhada da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} x_{0,0} & x_{0,1} & x_{0,2} & \dots & x_{0,783} \\ x_{1,0} & x_{1,1} & x_{1,2} & \dots & x_{1,783} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{63,0} & x_{63,1} & x_{63,2} & \dots & x_{63,783} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} w_{0,0} & w_{0,1} & \dots & w_{0,9} \\ w_{1,0} & w_{1,1} & \dots & w_{1,9} \\ w_{2,0} & w_{2,1} & \dots & w_{2,9} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{783,0} & w_{783,1} & \dots & w_{783,9} \end{bmatrix} + [b_0 \ b_1 \ b_2 \ \dots \ b_9]$$

Aplicamos então a função de ativação softmax para obter os resultados de classificação ou previsões também em formato matricial \mathbf{Y} . Note que essa será uma matriz com 64 linhas e 10 colunas, ou seja, para cada uma das 64 imagens no batch, temos as probabilidades para as 10 classes:

$$\mathbf{Y} = \text{softmax}(\mathbf{X} \cdot \mathbf{W} + \mathbf{b})$$

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_{0,0} & y_{0,1} & y_{0,2} & \dots & y_{0,9} \\ y_{1,0} & y_{1,1} & y_{1,2} & \dots & y_{1,9} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y_{63,0} & y_{63,1} & y_{63,2} & \dots & y_{63,9} \end{bmatrix}$$

Agora seria importante questionar: quando \mathbf{Y} terá boas previsões para as imagens de entrada, ou seja, predizendo corretamente os dígitos? Isso acontecerá apenas se os parâmetros da rede (pesos \mathbf{W} e bias \mathbf{b}) forem adequados para o sistema. Mas como encontrar esses parâmetros e como saber quão bons esses parâmetros são?

Precisamos de uma função que compute a qualidade da predição realizada! Essa função é conhecida como **função de custo** (em inglês se utilizam os termos *loss function* ou *cost function*). Essa função é responsável por dizer quão longe estamos da predição ideal e portanto quantifica o “custo” ou “perda” ao aceitarmos a predição gerada pelos parâmetros atuais do modelo. Em outras palavras, qual é o custo de aceitarmos uma predição \hat{y} sendo que a classe verdadeira é y ? Para que possamos computar essa função precisamos nos basear em exemplos rotulados com suas classes verdadeiras, então o termo mais correto seria função de custo empírica.

Dentre as funções de custo mais utilizadas em classificação temos a **entropia cruzada** (*cross-entropy*). Considerando um único exemplo cuja distribuição de probabilidade de classes real é \mathbf{y} e a predição é dada por $f(\mathbf{x}) = \hat{\mathbf{y}}$ temos a soma das entropias cruzadas (entre a predição e a classe real) de cada classe j :

$$\ell^{(ce)} = - \sum_j y_j \cdot \log(\hat{y}_j + \epsilon), \quad (2)$$

onde $\epsilon \ll 1$ é uma variável para evitar $\log(0)$. Vamos assumir $\epsilon = 0.0001$.

A título de exemplo sejam os seguintes vetores de distribuição de probabilidade de classes (note que ambas classe real e predita são a classe 7):

$$\mathbf{y} = [0.00 \ 0.00 \ 0.00 \ 0.00 \ 0.00 \ 0.00 \ 1.00 \ 0.00 \ 0.00 \ 0.00]$$

$$\hat{\mathbf{y}} = [0.18 \ 0.00 \ 0.00 \ 0.02 \ 0.00 \ 0.00 \ 0.65 \ 0.05 \ 0.10 \ 0.00]$$

Então a entropia cruzada para esse exemplo seria:

$$\ell^{(ce)} = -(0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 - 0.6214 + 0 + 0 + 0) = 0.6214$$

Essa função recebe como entrada um vetor de scores, e produz valor 0 apenas no caso ideal em que $\mathbf{y} = \hat{\mathbf{y}}$. Em problemas de classificação, a entropia cruzada pode ser vista como a minimização da divergência de Kullback-Leibler entre duas distribuições de classes na qual a distribuição verdadeira tem entropia nula (já que possui um único valor não nulo, 1) [42]. Assim, temos a minimização da log-verossimilhança negativa da classe correta, o que relaciona essa equação também com a estimação de máxima verossimilhança.

Dado um conjunto atual de parâmetros \mathbf{W} e \mathbf{b} , o custo completo com base em um batch (ou conjunto de treinamento) contendo N instâncias é geralmente computado por meio da média dos custos de todas as instâncias \mathbf{x}_i e suas respectivas distribuições de classe: \mathbf{y}_i :

$$\mathcal{L}(\mathbf{W}; \mathbf{b}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \ell(\mathbf{y}_i, f(\mathbf{x}_i; \mathbf{W}; \mathbf{b})).$$

Agora, precisamos ajustar os parâmetros de forma a minimizar $\mathcal{L}(\mathbf{W}; \mathbf{b})$. Isso porque comumente esses parâmetros são inicializados com valores aleatórios, e queremos modificar esses valores iniciais de maneira a *convergir* para um modelo que nos dê boas previsões.

Esse processo é feito utilizando algoritmos de otimização como o Gradiente Descendente (GD), que basicamente computa derivadas parciais de forma a encontrar, para cada parâmetro do modelo, qual modificação dos parâmetros permite minimizar a função. Veremos nas seções seguintes os métodos de otimização comumente utilizados em Deep Learning. Por enquanto assumiremos que o leitor está familiarizado com o Gradiente Descendente (GD) básico. Assim, executamos o treinamento por meio do algoritmo conhecido por Backpropagation, que irá atualizar os parâmetros de forma que a saída $\hat{\mathbf{y}}$ se aproxime do resultado esperado \mathbf{y} .

Treinamento nesse ponto, temos todos os componentes necessários para executar o algoritmo de treinamento. Inicializamos os parâmetros de forma aleatória, e então o algoritmo: (1) carrega 64 imagens sorteadas aleatoriamente do conjunto de treinamento, e (2) ajusta os parâmetros do modelo utilizando essas 64 imagens. Os passos (1) e (2) são repetidos por um número de vezes (iterações), até que o erro de classificação computado dentro do conjunto de treinamento seja suficientemente baixo, ou estabilize. Por exemplo, podemos definir 1000 iterações. Note que, nesse caso, o treinamento utilizará no máximo $64 \times 1000 = 64000$ exemplos (imagens) para aprender os parâmetros da rede.

Para mostrar como isso poderia ser feito na prática, abaixo mostramos um código na Listagem 3.1 em linguagem Python utilizando a biblioteca Tensorflow versão 1.2. Definimos primeiramente as variáveis: na linha 3 a matriz de imagens com $28 \times 28 \times 1$ (pois são em escala de cinza — para imagens RGB usar 3) além de um campo para indexar as imagens no batch (indicado por None); na linha 4 a matriz de pesos e na linha 5 o vetor de bias. O modelo considera as imagens redimensionadas para um vetor com 784 elementos (ver linha 10). A seguir a função de custo e método de otimização são definidos e 1000 iterações são executadas. Note que esse capítulo não pretende ser um tutorial sobre Tensorflow: o código é mostrado em alguns pontos para auxiliar no entendimento dos conceitos via implementação dos métodos.

Listagem 3.1. Treinamento de uma rede shallow com Tensorflow

```

1 import tensorflow as tf
2 # variaveis (matrizes e vetores)
3 X = tf.placeholder(tf.float32, [None, 28, 28, 1]) # batch de imagens X
4 W = tf.Variable(tf.zeros([784, 10])) # pesos
5 b = tf.Variable(tf.zeros([10])) # bias
6 Y = tf.placeholder(tf.float32, [None, 10]) # classes das imagens em X
7 inicia = tf.initialize_all_variables() # instancia inicializacao
8
9 # modelo que ira gerar as predicoes com base nas imagens vetorizadas
10 Y_ = tf.nn.softmax(tf.matmul(tf.reshape(X, [-1, 784]), W) + b)
11
12 # define funcao de custo (entropia cruzada)
13 entropia_cruzada = -tf.reduce_sum(Y * tf.log(Y_+0.0001))
14
15 # otimizacao com taxa de aprendizado 0.0025
16 otimiza = tf.train.GradientDescentOptimizer(0.0025)
17 treinamento = optimizer.minimize(entropia_cruzada)
18
19 sess = tf.Session() # instancia sessao
20 sess.run(inicia) # executa sessao e inicializa
21
22 # executa 1000 iteracoes
23 for i in range(1000):
24     # carrega batch de 64 imagens (X) e suas classes (Y)
25     batch_X, batch_Y = mnist.train.next_batch(64)
26     dados_treinamento={X: batch_X, Y: batch_Y}
27
28     # treina com o batch atual
29     sess.run(treinamento, feed_dict=dados_treinamento)
30     # computa entropia-cruzada para acompanhar convergencia
31     ce = sess.run(entropia_cruzada, feed_dict=dados_treinamento)

```

3.3.1. Criando uma rede profunda

A rede anterior consegue alcançar uma acurácia próxima a 91% considerando o conjunto de testes da base de dados MNIST. Para que possamos melhorar esse resultado iremos utilizar uma arquitetura profunda, fazendo uso da composição de funções. Adicionaremos 2 camadas novas entre a entrada e a saída. Essas camadas são conhecidas como camadas ocultas (*hidden layers*). Em particular faremos uso de camadas completamente conectadas ou como se diz em terminologia Deep Learning, *fully connected* (FC), que é nada mais do que uma camada oculta assim como utilizada em redes MLP. Ilustramos a arquitetura na Figura 3.3. Teremos portanto uma predição alcançada por uma composição na forma:

$$\hat{\mathbf{y}} = f(\mathbf{x}) = f_3(f_2(f_1(\mathbf{x}_1; \mathbf{W}_1; \mathbf{b}_1); \mathbf{W}_2; \mathbf{b}_2)), \mathbf{W}_3; \mathbf{b}_3),$$

em que $f_1(\mathbf{x}_1) = \mathbf{x}_2$, $f_2(\mathbf{x}_2) = \mathbf{x}_3$ e finalmente $f_3(\mathbf{x}_3) = \mathbf{y}$.

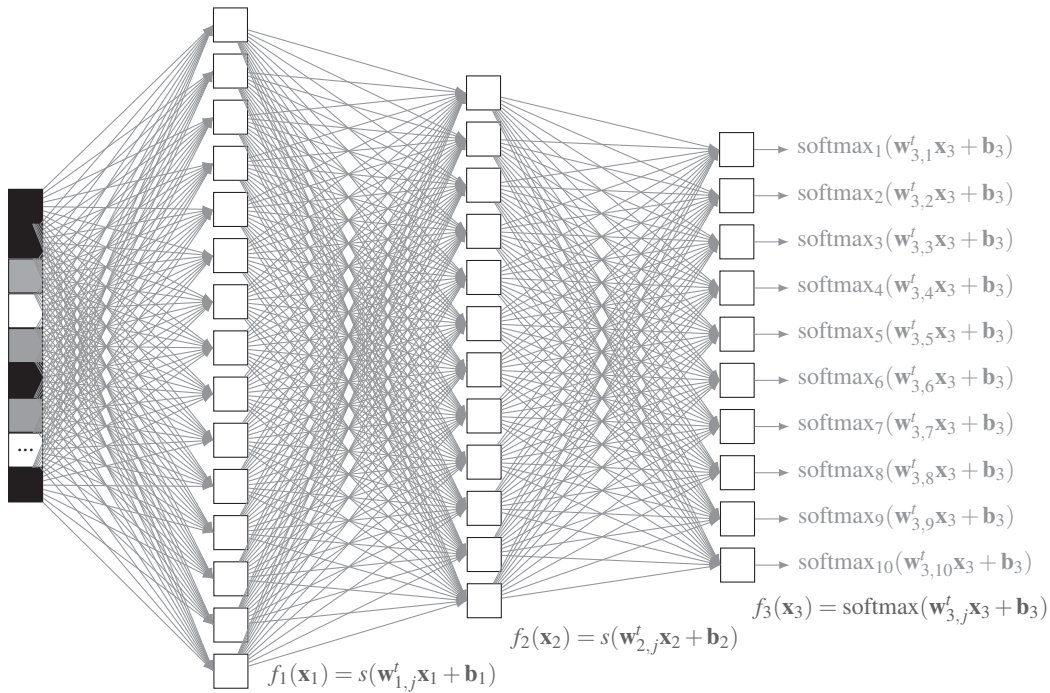


Figura 3.3. Uma arquitetura profunda com duas camadas ocultas, gerando representações intermediárias que antecedem a classificação. A quantidade de neurônios em cada camada é meramente ilustrativa.

Funções de ativação para as camadas FC ocultas a função de ativação softmax não é ideal! Em redes neurais é comum o uso de funções sigmoidais (como a logística e a tangente hiperbólica). Porém em Deep Learning, a função retificadora linear (*rectified linear function*, ReLU) tem sido mais utilizada por facilitar o processo de treinamento [36]. Isso porque as funções sigmoidais saturam a partir de um determinado ponto, enquanto a ReLU é simplesmente a função identidade para valores positivos. Veja a Figura 3.4 para exemplos de funções de ativação: as funções sigmoidais comprimem a saída para um intervalo curto, enquanto ReLU cancela todos os valores negativos, sendo linear para os positivos.

A função ReLU possui relações com a restrição de não-negatividade presente em regularização como em restauração de imagens utilizando projeções em subespaços [41]. Note ainda que ao calcularmos a derivada da ReLU, seu gradiente terá sempre uma direção não-nula, enquanto no caso das sigmoidais, para valores longe da origem podemos ter gradiente nulo. A ReLU paramétrica (PReLU) é uma variação que permite valores negativos com menor ponderação, parametrizado por uma variável $0 \leq a \leq 1$ [19]. Uma das possíveis vantagens da PReLU é a possibilidade de aprender a durante a fase de treinamento. No caso particular em que temos um valor fixo $a = 0.01$, temos a função conhecida por *Leaky ReLU*.

Na Listagem 3.2 mostramos como modificar o código anterior de forma a criar camadas intermediárias e utilizar a função ReLU para essas camadas.

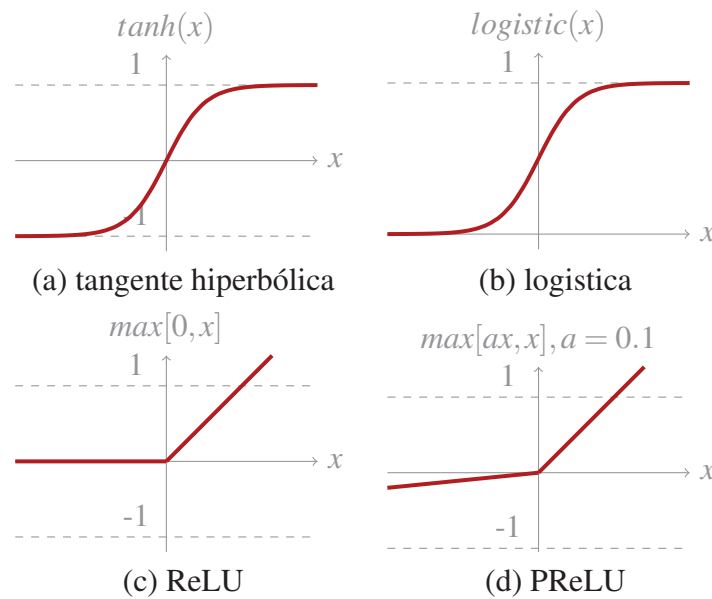


Figura 3.4. Ilustração comparativa de funções de ativação: (c) ReLU é a mais utilizada em Deep Learning.

Listagem 3.2. Treinamento de uma rede deep com Tensorflow

```

1  # cria e inicializa aleatoriamente os pesos com distribuicao normal e sigma=0.1
2  W1 = tf.Variable(tf.truncated_normal([784, 64], stddev=0.1))
3  # bias sao inicializados com valores fixos 1/10
4  B1 = tf.Variable(tf.ones([64])/10)
5  W2 = tf.Variable(tf.truncated_normal([64, 32], stddev=0.1))
6  B2 = tf.Variable(tf.ones([32])/10)
7  W3 = tf.Variable(tf.truncated_normal([32, 10], stddev=0.1))
8  B3 = tf.Variable(tf.zeros([10]))
9
10 # entrada redimensionada
11 X1 = tf.reshape(X, [-1, 784])
12
13 # modelos das representacoes intermediarias
14 X2 = tf.nn.relu(tf.matmul(X1, W1) + B1)
15 X3 = tf.nn.relu(tf.matmul(X2, W2) + B2)
16
17 # saida da rede (a.k.a. logits)
18 X4 = tf.matmul(X3, W3) + B3
19 # classificacao softmax
20 Y_ = tf.nn.softmax(X4)
21
22 # utilizamos uma funcao pronta no TF para calculo da entropia cruzada
23 entr_cruz = tf.nn.softmax_cross_entropy_with_logits(logits=X4, labels=Y_)
24 entr_cruz = tf.reduce_mean(entr_cruz)*100

```

Basicamente adicionamos novas matrizes de pesos e bias. Sendo que o número de neurônio de uma camada será o tamanho do seu vetor de saída. Assim, a matriz de pesos da camada seguinte deverá respeitar esse número. No código mostramos as camadas ocultas com 64 e 32 neurônios. Portanto \mathbf{W}_1 terá tamanho 784×64 (lembre que 784 é o tamanho do vetor de entrada), \mathbf{W}_2 terá tamanho 64×32 e finalmente \mathbf{W}_3 terá tamanho 32×10 . Note também no código que a inicialização das matrizes de peso é feita usando números aleatórios obtidos de uma distribuição normal. Os bias são inicializados com valores pequenos, no exemplo todos iguais a $1/10$.

Taxa de aprendizado com decaimento : é comum definir a taxa de aprendizado com decaimento (ao invés de fixa como no exemplo anterior). Isso significa que podemos começar com um valor mais alto, por exemplo algo entre 0.005 e 0.0025, e definir uma função de decaimento exponencial como $\exp^{-k/d}$, em que k é a iteração atual e d a taxa de decaimento (quanto maior, mais lento o decaimento).

Utilizando a base MNIST, com uma arquitetura parecida com a definida acima, é possível alcançar acurácias próximas a 97% no conjunto de testes. Isso foi alcançado por meio da inclusão de novas camadas, o que torna mais fácil encontrar os parâmetros corretos pois agora não é mais necessário aprender uma transformação direta de um vetor para uma classe, mas ao invés, aprendemos representações intermediárias, da mais simples, que processa o vetor, até a mais complexa, que prediz a classe da imagem. Sendo a MNIST uma base de imagens, para ir além do resultado atual precisamos utilizar um tipo de rede conhecida como Rede Convolutiva.

3.4. Redes Convolucionais (CNNs)

Redes Neurais Convolucionais (CNNs) são provavelmente o modelo de rede Deep Learning mais conhecido e utilizado atualmente. O que caracteriza esse tipo de rede é ser composta basicamente de **camadas convolucionais**, que processa as entradas considerando campos receptivos locais. Adicionalmente inclui operações conhecidas como *pooling*, responsáveis por reduzir a dimensionalidade espacial das representações. Atualmente as CNNs de maior destaque incluem as Redes Residuais (ResNet) [18] e Inception [51].

A principal aplicação das CNNs é para o processamento de informações visuais, em particular imagens, pois a convolução permite filtrar as imagens considerando sua estrutura bidimensional (espacial). Considere o exemplo da base de dados MNIST apresentado na seção anterior. Note que ao vetorizar as imagens estamos desprezando toda a estrutura espacial que permite entender a relação entre os pixels vizinhos em uma determinada imagem. É esse tipo de estrutura que as CNNs tentam capturar por meio da camada convolutiva.

3.4.1. Camada convolutiva

Na camada convolutiva cada neurônio é um filtro aplicado a uma imagem de entrada e cada filtro é uma matriz de pesos. Novamente, indicamos o livro texto [13] para uma introdução sobre convolução e filtros de imagens.

Seja uma imagem RGB de tamanho $224 \times 224 \times 3$ (o 3 indica os canais de cor R, G e B), que serve de entrada para uma camada convolutiva. Cada filtro (neurônio) dessa camada irá processar a imagem e produzir uma transformação dessa imagem por meio de uma combinação linear dos pixels vizinhos. Note que agora não temos um peso para cada elemento da imagem. A título de exemplo em uma camada FC teríamos, para cada neurônio do nosso exemplo, 150528 pesos, um para cada valor de entrada. Ao invés, definimos filtros de tamanho $k \times k \times d$, em que k é a dimensão espacial do filtro (a ser definida) e d a dimensão de profundidade (essa depende da entrada da camada). Por exemplo, se definirmos $k = 5$ para a primeira camada convolutiva, então teremos filtros $5 \times 5 \times 3$, pois como a imagem possui 3 canais (RGB), então $d = 3$, e assim cada neurônio terá $5 \times 5 \times 3 = 75$ pesos.

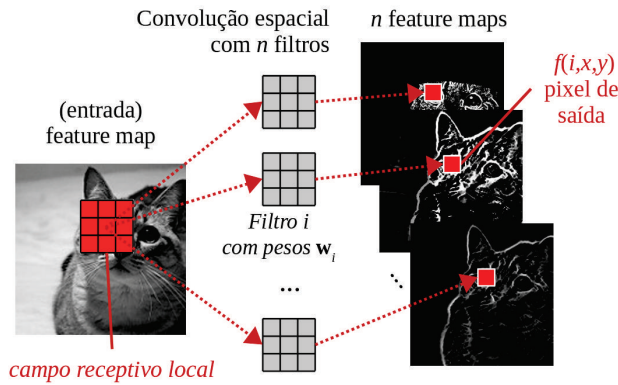


Figura 3.5. Ao utilizar convolução, processa-se informações locais utilizando cada posição (x,y) como centro: essa região é chamada de campo receptivo. Seus valores são então usados como entrada para um filtro i com parâmetros w_i , produzindo um único valor (pixel) no mapa de características $f(i,x,y)$ gerado como saída.

Cada região da imagem processada pelo filtro é chamada de campo receptivo local (*local receptive field*); um valor de saída (pixel) é uma combinação dos pixels de entrada nesse campo receptivo local (veja Figura 3.5). No entanto todos os campos receptivos são filtrados com os mesmos pesos locais para todo pixel. Isso é o que torna a camada convolucional diferente da camada FC. Assim, um valor de saída ainda terá o formato bidimensional. Por exemplo podemos dizer que $f_{l+1}(i,x,y)$ é o pixel resultante da filtragem da imagem vinda da camada anterior l , processada pelo filtro i a partir dos valores da vizinhança centrados na posição (x,y) . No nosso exemplo com $k = 5$, teremos uma combinação linear de 25 pixels da vizinhança para gerar um único pixel de saída.

Os tamanhos de filtros mais utilizados são $5 \times 5 \times d$, $3 \times 3 \times d$ e $1 \times 1 \times d$. Como trabalhamos com matrizes multidimensionais (com profundidade d), utilizamos o termo **tensor** para denotá-las.

Considere um problema em que temos como entrada imagens RGB, de tamanho $64 \times 64 \times 3$. Sejam então duas camadas convolucionais, a primeira com 4 filtros de tamanho $k_1 = 5$, e a segunda com 5 filtros de tamanho $k_2 = 3$. Considere ainda que a convolução é feita utilizando extensão da imagem com preenchimento por zeros (*zero padding*) de forma que conseguimos realizar a filtragem para todos os pixels da imagem, mantendo seu tamanho. Nesse cenário teríamos a seguinte composição:

$$\hat{\mathbf{y}} = f(\mathbf{x}) = f_2(f_1(\mathbf{x}_1; \mathbf{W}_1; \mathbf{b}_1); \mathbf{W}_2; \mathbf{b}_2)),$$

em que \mathbf{W}_1 possui dimensão $4 \times 5 \times 5 \times 3$ (4 filtros de tamanho 5×5 , entrada com profundidade 3), e portanto a saída da camada 1, $\mathbf{x}_2 = f_1(\mathbf{x}_1)$ terá tamanho: $64 \times 64 \times 4$. Após a convolução utiliza-se uma função de ativação (comumente a função ReLU já descrita anteriormente) que trunca para zero os pixels negativos. A Figura 3.6 ilustra esse processo, bem como o da camada 2, que recebe por entrada o tensor $64 \times 64 \times 4$. Essa segunda camada possui 5 filtros $3 \times 3 \times 4$ (já que a profundidade do tensor de entrada tem $d = 4$), e gera como saída $\mathbf{x}_3 = f_2(\mathbf{x}_2)$, um tensor de tamanho $64 \times 64 \times 5$.

Chamamos de mapa de características a saída de cada neurônio da camada convo-

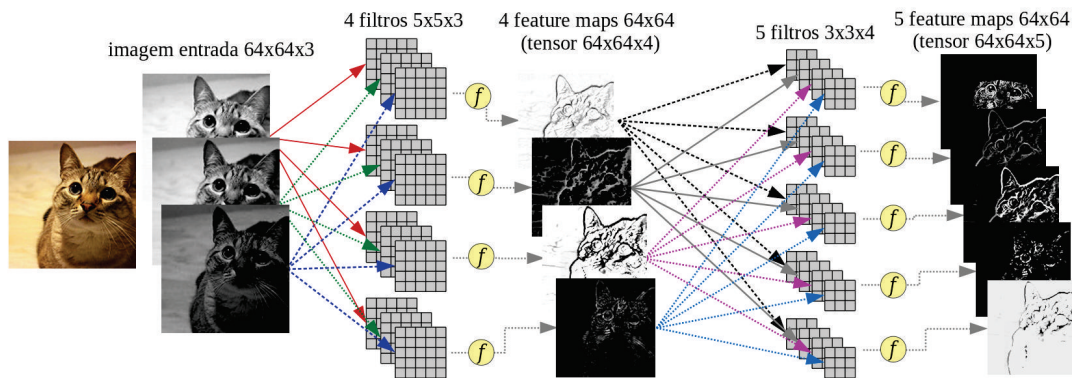


Figura 3.6. Ilustração de duas camadas convolucionais: a primeira com 4 filtros $5 \times 5 \times 3$, que recebe como entrada uma imagem RGB $64 \times 64 \times 3$, e produz um tensor com 4 feature maps; a segunda camada convolucional contém 5 filtros $3 \times 3 \times 4$ que filtram o tensor da camada anterior, produzindo um novo tensor de feature maps com tamanho $64 \times 64 \times 5$. Os círculos após cada filtro denotam funções de ativação, como por exemplo a ReLU.

lucional (mais detalhes na seção seguinte). Antes de prosseguir, outro aspecto importante para se mencionar é o passo ou *stride*. A convolução convencionais é feita com passo/stride 1, ou seja, filtramos todos os pixels e portanto para uma imagem de entrada de tamanho 64×64 , geramos uma nova imagem de tamanho 64×64 . O uso de strides maiores que 1 é comum quando deseja-se reduzir o tempo de execução, pulando pixels e assim gerando imagens menores. Ex. com stride = 2 teremos como saída uma imagem de tamanho 32×32 .

3.4.2. Feature maps (mapas de características)

Cada representação gerada por um filtro da camada convolucional é conhecida como “mapa de características”, do inglês *feature map* ou *activation map*. Utilizaremos *feature map* pois é o termo mais comum na literatura. Os mapas gerados pelos diversos filtros da camada convolucional são empilhados, formando um tensor cuja profundidade é igual ao número de filtros. Esse tensor será oferecido como entrada para a próxima camada como mostrado na Figura 3.6. Note que, como a primeira camada convolucional gera um tensor $64 \times 64 \times 4$, os filtros da segunda camada terão que ter profundidade 4. Caso adicionássemos uma terceira camada convolucional, os filtros teriam que ter profundidade 5.

3.4.3. Pooling

É comum reduzir a dimensão espacial dos mapas ao longo das camadas da rede. Essa redução em tamanho é chamada de *pooling* sendo a operação de máximo *maxpooling* comumente empregada. Essa operação tem dois propósitos: em primeiro lugar, o custo computacional, pois como a profundidade dos tensores, d , costuma aumentar ao longo das camadas, é conveniente reduzir a dimensão espacial dos mesmos. Em segundo, reduzindo o tamanho das imagens obtemos um tipo de composição de banco de filtros multi-resolução que processa imagens em diferentes espaços-escala. Há estudos a favor de não utilizar pooling, mas aumentar o stride nas convoluções [49], o que produz o mesmo efeito redutor.

3.4.4. Camadas fully connected (FC)

Já mencionamos o uso de camadas FC, que são camadas presentes em redes neurais MLP. Nesse tipo de camada cada neurônio possui um peso associado a cada elemento do vetor de entrada. Em CNNs utiliza-se camadas FC posicionadas após múltiplas camadas convolucionais. A transição entre uma camada convolucional (que produz um tensor) e uma camada FC, exige que o tensor seja vetorizado. Por exemplo, se a camada convolucional antes de uma camada FC gera um tensor $4 \times 4 \times 40$, redimensionamos esses dados de forma que ele possua tamanho $1 \times (4 \times 4 \times 40) = 1 \times 640$. Assim, cada neurônio na camada FC deverá possuir 640 pesos de forma a produzir uma combinação linear do vetor.

Como descrito anteriormente, arquiteturas mais recentes utilizam camadas FC ocultas com função de ativação ReLU, e a camada de saída (classificador) com função de ativação softmax.

3.4.5. Arquiteturas de CNNs e seus parâmetros

CNNs tradicionais são combinação de blocos de camadas convolucionais (Conv) seguidas por funções de ativação, eventualmente utilizando também *pooling* (Pool) e então uma série de camadas completamente conectadas (FC), também acompanhadas por funções de ativação, da seguinte forma:

$$\text{CNN} \equiv P \times [C \times (\text{Conv} \rightarrow \text{AF}) \rightarrow \text{Pool}] \rightarrow F \times [\text{FC} \rightarrow \text{AF}]$$

Para criar uma CNN, deve-se definir os seguintes hiper-parâmetros: número de camadas convolucionais C (para cada camada, o número de filtros, seu tamanho e o tamanho do passo dado durante a convolução), número de camadas de *pooling* P (sendo nesse caso necessário escolher também o tamanho da janela e do passo que definirão o fator de subamostragem), o número de camadas totalmente conectadas F (e o número de neurônios contidos em cada uma dessas camadas).

Note no entanto que algumas redes mais recentes também tem empregado a pré-ativação (a função AF é aplicada nos dados de entrada, antes da convolução ou camada FC).

O número de parâmetros em uma CNN está relacionado basicamente, aos valores a serem aprendidos em todos os filtros nas camadas convolucionais, os pesos das camadas totalmente conectadas e os bias.

—*Exemplo*: considere uma arquitetura para analisar imagens RGB com dimensão $64 \times 64 \times 3$ cujo objetivo é classificar essas imagens em 5 classes. Essa arquitetura será composta por três camadas convolucionais, duas *max pooling*, e duas camadas totalmente conectadas, da seguinte forma:

- Conv.L 1: 10 filtros $5 \times 5 \times 3$, saída: tensor de dimensão $64 \times 64 \times 10$
- *Max pooling* 1: subamostragem com fator 4 (janela de tamanho 2×2 e stride 2), saída: tensor de dimensão $16 \times 16 \times 10$
- Conv.L2: 20 filtros $3 \times 3 \times 10$, saída: tensor de dimensão $16 \times 16 \times 20$

- Conv.L3: 40 filtros $1 \times 1 \times 20$, saída: tensor de dimensão $16 \times 16 \times 40$
- *Max pooling* 2: subamostragem com fator 4 (janela de tamanho 2×2 e stride 2), saída: tensor de dimensão $4 \times 4 \times 40$
- FC.L1: 32 neurônios, saída: 32 valores
- FC.L2 (saída da rede): 5 neurônios (um por classe), saída: 5 valores

Considerando que cada um dos filtros das três camadas convolucionais tem $p \times q \times d$ parâmetros, além do bias, e que as camadas totalmente conectadas possuem pesos e o termo bias associado com cada valor do vetor recebido da camada anterior, então o número total de parâmetros nessa arquitetura é:

$$\begin{aligned}
 & (10 \times [5 \times 5 \times 3 + 1] = 760) && [\text{Conv.L1}] \\
 & + (20 \times [3 \times 3 \times 10 + 1] = 1820) && [\text{Conv.L2}] \\
 & + (40 \times [1 \times 1 \times 20 + 1] = 840) && [\text{Conv.L3}] \\
 & + (32 \times [640 + 1] = 20512) && [\text{FC.L1}] \\
 & + (5 \times [32 + 1] = 165) && [\text{FC.L2}] \\
 & = 24097
 \end{aligned}$$

É possível perceber que, apesar de ser uma arquitetura relativamente pequena, o número de parâmetros a serem aprendidos pode ser grande e cresce consideravelmente quanto maior a arquitetura utilizada.

3.4.6. Implementação de CNN para o caso MNIST

Voltando ao exemplo da classificação de dígitos usando a base MNIST, poderíamos projetar camadas convolucionais de forma a extrair representações com base na estrutura espacial das imagens. Para isso, mostramos na Listagem 3.3 linhas de código para criar uma camada convolucional: na linha 2 criamos a matriz \mathbf{W}_1 utilizando 4 filtros de tamanho $5 \times 5 \times 3$, definimos stride 1 na linha 5 e a convolução 2d na linha 6, com uso da função ReLU como ativação na linha 7, produzindo o tensor \mathbf{x}_2 .

Listagem 3.3. Implementação de camadas convolucionais

```

1 # inicializacao dos parametros W e B da camada convolucional 1
2 W1 = tf.Variable(tf.truncated_normal([5, 5, 3, 4], stddev=0.1))
3 B1 = tf.Variable(tf.ones([4])/10) # 2 e' o numero de mapas de saida da camada
4
5 stride = 1 # mantem a imagem no tamanho original
6 Xconv1 = tf.nn.conv2d(X1, W1, strides=[1, stride, stride, 1], padding='SAME')
7 X2 = tf.nn.relu(Xconv1 + B1)

```

Utilizando uma CNN com 3 camadas convolucionais com a seguinte configuração, na sequência, conv1: 8 filtros 5×5 stride 1, conv2: 16 filtros 3×3 stride 2, conv3: 32 filtros 3×3 stride 2, FC1 oculta com 256 neurônios, FC2 de saída com 10 neurônios, é possível alcançar acurácias próximas a 99%. No entanto, sempre que ajustamos demais o modelo nos dados de treinamento — e isso ocorre particularmente em Deep Learning pois o número de parâmetros é muito grande — há um sério risco do processo

de treinamento resultar na memorização dos exemplos que foram utilizados nessa etapa, gerando um efeito conhecido por *overfitting*. Iremos discutir esse ponto na Seção 3.5.1 como umas das limitações dos métodos baseados em DL. Por enquanto veremos como realizar o treinamento da melhor forma possível, buscando evitar esse efeito e atingindo uma convergência aceitável do modelo de forma a ser útil nas tarefas que dispomos.

3.4.7. Algoritmos de otimização

Com uma função de custo definida, precisa-se então ajustar os parâmetros de forma que o custo seja reduzido. Para isso, em geral, usa-se o algoritmo do Gradiente Descendente em combinação com o método de backpropagation, que permite obter o gradiente para a sequência de parâmetros presentes na rede usando a regra da cadeia. Existem diversos materiais disponíveis que apresentam explicações detalhadas sobre o Gradiente Descendente e como funciona o backpropagation. Assim, assume-se que o leitor esteja familiarizado com conceitos fundamentais de ambos os algoritmos, focando em seu funcionamento para CNNs.

Como o cálculo de $\mathcal{L}(W)$ é feito baseado em uma amostra finita da base de dados, calcula-se estimativas de Montecarlo da distribuição real que gera os parâmetros. Além disso, é importante lembrar que CNNs possuem muitos parâmetros que precisam ser aprendidos fazendo com que seja necessário treiná-la usando milhares, ou até milhões, de imagens (diversas bases de dados atualmente possuem mais de 1TB de dados). Entretanto, realizar a otimização usando milhões de instâncias torna a utilização de Gradiente Descendente inviável, uma vez que esse algoritmo calcula o gradiente para todas as instâncias individualmente. Essa dificuldade fica clara quando se pensa que para executar uma época (i.e., executar o algoritmo para todas as instâncias na base de treinamento) seria necessário carregar todas as instâncias para uma memória limitada, o que não seria possível. Algumas alternativas foram propostas para superar esse problema. Algumas dessas alternativas são descritas abaixo: SGD, Momentum, AdaGrad, RMSProp e Adam.

Gradiente Descendente Estocástico (do inglês Stochastic Gradient Descent, SGD) uma forma de acelerar o treinamento é utilizando métodos que oferecem aproximações do Gradiente Descendente, por exemplo usando amostras aleatórias dos dados ao invés de analisando todas as instâncias existentes. Por esse motivo, o nome desse método é Gradiente Descendente Estocástico, já que ao invés de analisar todos dados disponíveis, analisa-se apenas uma amostra, e dessa forma, adicionando aleatoriedade ao processo. Também é possível calcular o Gradiente Descendente usando apenas uma instância por vez (método mais utilizado para analisar fluxos de dados ou aprendizagem online). Na prática, o mais comum é utilizar os chamados *mini-batches* (amostra aleatória dos dados) com um tamanho fixo B . Após executar diversas iterações (sendo que cada iteração irá adaptar os parâmetros usando as instâncias no mini-batch atual), espera-se obter uma aproximação do método do Gradiente Descendente.

$$W_{t+1} = W_t - \eta \sum_{j=1}^B \nabla \mathcal{L}(W; x_j^B),$$

na qual η é o parâmetro que define a taxa de aprendizado (em inglês *learning rate*), ou seja, esse parâmetro é utilizado para definir o tamanho do passo que será dado na direção apontada pelo gradiente. É comum utilizar valores altos para η no começo do treinamento e fazer com ele decaia exponencialmente em função do número de iterações executadas.

Devido ao seu fator aleatório, SGD fornece uma aproximação grosseira do Gradiente Descendente, assim, fazendo com que a convergência não seja suave. Por esse motivo, outras variantes foram propostas buscando compensar esse fato, tais como AdaGrad (*Adaptive Gradient*) [9], AdaDelta (*Adaptive learning rate*) [56] and Adam (*Adaptive moment estimation*) [24]. Tais variantes baseiam-se nos conceitos de momentum e normalização, que serão descritos abaixo.

Momentum adiciona um novo hiper-parâmetro que permite controlar a velocidade das mudanças nos parâmetros W da rede. Isso é feito criando um fator de *momentum*, que dá peso para a atual direção do gradiente, e previne que uma nova atualização dos parâmetros W_{t+1} se desvie muito da atual direção de busca no espaço dos parâmetros:

$$W_{t+1} = W_t + \alpha(W_t - W_{t-1}) + (1 - \alpha)[- \eta \nabla \mathcal{L}(W_t)],$$

onde $\mathcal{L}(W_t)$ é a perda calculada usando algumas instâncias (usualmente um mini-batch) e os parâmetros atuais W_t . É importante notar como o tamanho do passo na iteração $t + 1$ agora é limitado pelo passo dado na iteração anterior, t .

AdaGrad busca dar mais importância a parâmetros pouco utilizados. Isso é feito mantendo um histórico de quanto cada parâmetro influenciou o custo, acumulando os gradientes de forma individual $g_{t+1} = g_t + \nabla \mathcal{L}(W_t)^2$. Essa informação é então utilizada para normalizar o passo dado em cada parâmetro:

$$W_{t+1} = W_t - \frac{\eta \nabla \mathcal{L}(W_t)^2}{\sqrt{g_{t+1}} + \epsilon},$$

como o gradiente é calculado com base no histórico e para cada parâmetro de forma individual, parâmetros pouco utilizados terão maior influência no próximo passo a ser dado.

RMSProp calcula médias da magnitude dos gradientes mais recentes para cada parâmetro e as usa para modificar a taxa de aprendizado individualmente antes de aplicar os gradientes. Esse método é similar ao AdaGrad, porém, nele g_t é calculado usando uma média com decaimento exponencial e não com a simples soma dos gradientes:

$$g_{t+1} = \gamma g_t + (1 - \gamma) \nabla \mathcal{L}(W_t)^2$$

g é chamado o momento de segunda ordem de $\nabla \mathcal{L}$ (o termo momento tem a ver com o gradiente não confundir com o efeito *momentum*). A atualização dos parâmetros é então

feita adicionando-se um tipo de momentum:

$$W_{t+1} = W_t + \alpha(W_t - W_{t-1}) + (1 - \alpha) \left[-\frac{\eta \nabla \mathcal{L}(W_t)}{\sqrt{g_{t+1}} + \epsilon} \right],$$

Adam utiliza uma idéia similar ao AdaGrad e ao RMSProp, contudo o *momentum* é usado para tanto para o momento (novamente, não confundir com *momentum*) de primeira quanto o de segunda ordens, tendo assim α e γ para controlar W e g , respectivamente. A influência de ambos diminui com o tempo de forma que o tamanho do passo diminua conforme aproxima-se do mínimo. Uma variável auxiliar m é usada para facilitar a compreensão:

$$\begin{aligned} m_{t+1} &= \alpha_{t+1} g_t + (1 - \alpha_{t+1}) \nabla \mathcal{L}(W_t) \\ \hat{m}_{t+1} &= \frac{m_{t+1}}{1 - \alpha_{t+1}} \end{aligned}$$

m é o momento de primeira ordem de $\nabla \mathcal{L}$ e \hat{m} é m após a aplicação do fator de decaimento. Então, precisa-se calcular os gradientes g usado para normalização:

$$\begin{aligned} g_{t+1} &= \gamma_{t+1} g_t + (1 - \gamma_{t+1}) \nabla \mathcal{L}(W_t)^2 \\ \hat{g}_{t+1} &= \frac{g_{t+1}}{1 - \gamma_{t+1}} \end{aligned}$$

g é o momento de segunda ordem de $\nabla \mathcal{L}$. A atualização dos parâmetros é então calculada da seguinte forma:

$$W_{t+1} = W_t - \frac{\eta \hat{m}_{t+1}}{\sqrt{\hat{g}_{t+1}} + \epsilon}$$

3.4.8. Aspectos importantes no treinamento de CNNs

Inicialização a inicialização dos parâmetros é importante para permitir a convergência da rede. Atualmente, se utiliza números aleatórios sorteados a partir de uma distribuição Gaussiana $\mathcal{N}(\mu, \sigma)$ para inicializar os pesos. Pode-se utilizar um valor fixo como o $\sigma = 0.01$ utilizado nos nossos exemplos anteriores. Porém o uso desse valor fixo pode atrapalhar a convergência [26]. Como alternativa, recomenda-se usar $\mu = 0$, $\sigma = \sqrt{2/n_l}$, onde n_l é o número de conexões na camada l , e inicializar vetores bias com valores constantes, conforme fizemos nos nossos exemplos ou ainda iguais a zero [19].

Tamanho do Minibatch devido ao uso de SGD e suas variantes, é preciso definir o tamanho do minibatch de exemplos a ser utilizado em cada iteração no treinamento. Essa escolha deve levar em consideração restrições de memória mas também os algoritmos de otimização empregados. Um tamanho de batch pequeno pode tornar mais difícil a minimização do custo, mas um tamanho muito grande também pode degradar a velocidade de convergência do SGD para funções objetivo convexas [30].

Apesar disso, foi demonstrado que até certo ponto um valor maior para o tama-

nho do batch B ajuda a reduzir a variância das atualizações em cada iteração do SGD (pois essa usa a média do custo dos exemplos do batch), permitindo que possamos utilizar tamanhos de passo maiores [3]. Ainda, minibatches maiores são interessantes para o caso de treinamento usando GPUs, gerando maior throughput pelo uso do algoritmo de backpropagation com reuso dos dados por meio da multiplicação entre matrizes (em contrapartida ao uso de várias multiplicações vetor-matriz). Via de regra, escolhe-se B de forma a ocupar toda a memória disponível na GPU, e a maior taxa de aprendizado possível.

Olhando as arquiteturas mais populares (VGGNet [48], ResNet [18], Inception [51, 50]), notamos o uso desde 32 até 256 exemplos por batch. Num caso mais extremo, um artigo recente mostra o uso de $B = 8192$, o que foi alcançado com uso de 256 GPUs em paralelo e uma regra de ajuste de escala para a taxa de aprendizado. Com isso os autores conseguiram treinar uma ResNet na base ImageNet em apenas 1 hora [16].

Regularização quando usamos uma função de custo para realizar o treinamento de uma rede neural, como apresentado anteriormente, alguns problemas podem surgir. Um caso típico é existência de diversos parâmetros W que façam com que o modelo classifique corretamente o conjunto de treinamento. Como há múltiplas soluções, isso torna mais difícil encontrar bons parâmetros.

Um termo de regularização adicionado à função de custo auxilia a penalizar essa situação indesejada. A regularização mais comumente utilizada é a de norma L2, que é a soma dos quadrados dos pesos. Como queremos minimizar também essa norma em adição à função de custo, isso desencoraja a existência de alguns poucos valores altos nos parâmetros, fazendo com que as funções aprendidas aproveitem todo o espaço de parâmetros na busca pela solução. Escrevemos a regularização na forma:

$$\mathcal{L}(W) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \ell(y_j, f(x_j; W)) + \lambda R(W).$$

$$R(W) = \sum_k \sum_l W_{k,l}^2$$

onde λ é um hiper-parâmetro utilizado para ponderar a regularização, ditando o quanto permitimos que os parâmetros em W possam crescer. Valores para λ podem ser encontrados realizando testes por validação cruzada no conjunto de treinamento.

Dropout é uma técnica para minimizar overfitting proposta em [20] que, na fase de treinamento e durante o passo de propagação dos dados pela rede, aleatoriamente desativa com probabilidade p a ativação de neurônios (em particular neurônios de camadas FC).

Esse procedimento pode ser considerado uma forma de regularização pois, ao desativar aleatoriamente neurônios, perturba os feature maps gerados a cada iteração por meio da redução da complexidade das funções (já que a composição utiliza menos ativações). Ao longo das iterações isso dá um efeito que minimiza a variância e aumenta o

viés das funções, e por isso foi demonstrado que o *dropout* tem relações com o método de ensemble Bagging [54]. A cada iteração do SGD, cria-se uma rede diferente por meio da subamostragem das ativações. Na fase de teste, no entanto, não se utiliza dropout, e as ativações são re-escaladas com fator p para compensar as ativações que foram desligadas durante a fase de treinamento.

Batch normalization (BN) as CNNs do estado da arte (em particular Inception [51, 50] e ResNet [18]) utilizam a normalização de batches (BN, Batch normalization) [23].

Como alternativa, na saída de cada camada pode-se normalizar o vetor de formas diferentes. O método canal-por-canal normaliza os mapas, considerando cada feature map individualmente ou considerando também mapas vizinhos. Podem ser empregadas normalizações L1, L2 ou variações. Porém esses métodos foram abandonados em favor do BN.

BN também tem efeito regularizador, normalizando as ativações da camada anterior em cada batch de entrada, mantendo a ativação média próxima a 0 (centralizada) e o desvio padrão das ativações próximo a 1, e utilizando parâmetros γ e β para compor a transformação linear do vetor normalizado:

$$\text{BN}_{\gamma,\beta}(x_i) = \gamma \left(\frac{x_i - \mu_B}{\sqrt{\sigma_B^2 + \epsilon}} \right) + \beta. \quad (3)$$

Note que γ e β podem ser incluídos no modelo de forma a serem ajustados/aprendidos durante o backpropagation [23], o que pode ajustar a normalização a partir dos dados, e até mesmo cancelar essa normalização, i.e. se esses forem ajustados para $\gamma = \sqrt{\sigma_B^2}$ e $\beta = \mu_B$.

BN se tornou um método padrão nos últimos anos, tendo substituído o uso de regularização e em alguns casos até mesmo tornando desnecessário o uso de dropout.

Data-augmentation como mencionado anteriormente, redes profundas possuem um espaço de parâmetros muito grande a ser otimizado. Isso faz com que seja necessário dispor de um número muitas vezes proibitivo de exemplos rotulados. Assim, podem ser empregados métodos de *data augmentation*, i.e. geração de uma base de treinamento aumentada. Isso é feito comumente aplicando operações de processamento de imagens em cada imagem da base gerando 5, 10 (ou um mais) novas imagens por imagem original existente.

Alguns métodos para geração de imagens incluem [5]: (i) corte da imagem de entrada em diferentes posições — tirando vantagem do fato de que as imagens possuem resolução superior à entrada comumente esperada pelas CNNs (e.g. 224×224), ao invés de redimensionarmos uma imagem para esse valor, cortamos a imagem original de maior resolução em diversas subimagens de tamanho 224×224 ; (ii) girar a imagem horizontalmente, e também verticalmente caso faça sentido no contexto das imagens de entrada, como por exemplo é o caso de imagens astronômicas, de sensoriamento remoto, etc.; (iii)

adicionando ruído às imagens de entrada [37]; (iv) criando imagens por meio da aplicação de Análise de Componentes Principais (PCA) nos canais de cor, como no método Fancy PCA [26].

Pre-processamento é possível pré-processar as imagens de entrada de diversas formas. As mais comuns incluem: (i) computar a imagem média para todo o conjunto de treinamento e subtrair essa média de cada imagem; (ii) normalização z -score, (iii) PCA *whitening* que primeiramente tenta descorrelacionar os dados projetando os dados originais centrados na origem em uma auto-base (em termos dos auto-vetores), e então dividindo os dados nessa nova base pelos auto-valores relacionados de maneira a normalizar a escala.

O método z -score é o mais utilizado dentre os citados (centralização por meio da subtração da média, e normalização por meio da divisão pelo desvio padrão), o que pode ser visto como uma forma de realizar *whitening* [29].

3.4.9. Utilizando modelos pré-treinados: fine-tuning e extração de características

Comumente dispomos de um conjunto de dados pequeno, inviáveis para permitir o treinamento de uma CNN a partir do zero, mesmo empregando métodos de data augmentation (note que a geração de imagens apenas cria versões perturbadas das mesmas imagens). Nesse caso é muito útil utilizar um modelo cujos parâmetros já foram encontrados para um conjunto de dados grande (como por exemplo para a base ImageNet [8] que possui mais de um milhão de imagens de 1000 classes).

O processo de **fine-tuning** consiste basicamente de continuar o treinamento a partir dos pesos iniciais, mas agora utilizando um subconjunto de sua base de dados. Note que é provável que essa nova base de dados tenha outras classes (em contrapartida por exemplo às 1000 classes da ImageNet). Assim se você deseja criar um novo classificador será preciso remover a última camada e adicionar uma nova camada de saída com o número de classes desejado, a qual deverá ser treinada do zero a partir de uma inicialização aleatória.

A partir disso, há várias abordagens para realizar fine-tuning, que incluem por exemplo (i) permitir que o algoritmo ajuste todos os pesos da rede com base nas novas imagens, (ii) congelar algumas camadas e permitir que o algoritmo ajuste apenas os parâmetros um subconjunto de camadas – por exemplo podemos ajustar apenas os pesos da última camada criada, ou apenas os pesos das FCs, etc, (iii) criar novas camadas adicionais com números e tamanhos de filtros diferentes.

O mais comum é a abordagem (ii), congelando das primeiras camadas (em geral convolucionais) e permitindo que as camadas mais profundas se adaptem.

Para obter **extração de características**, mesmo sem realizar fine-tuning, oferece-se como entrada as imagens desejadas, e utilizamos como vetor de características a saída de uma das camadas da rede (antes da camada de saída). Comumente se utiliza a penúltima camada: por exemplo na VGGNet [48] a FC2 tem 4096 neurônios, gerando um vetor de 4096 elementos, já na Inception V3 [51] temos 2048 elementos na penúltima camada. Caso a dimensionalidade seja alta, é possível utilizar algum método de redução de dimensionalidade ou quantização baseada por exemplo em PCA [43] ou Product

Quantization [4].

3.5. Porque Deep Learning funciona?

Ao longo desse capítulo esperamos que o leitor tenha compreendido com clareza o funcionamento dos métodos de DL, incluindo os componentes básicos das redes profundas (tipos de camadas, representações, funções de ativação, funções de custo etc.) e os algoritmos e técnicas fundamentais (otimização, regularização, normalização, etc.). Mostramos que, combinando uma arquitetura adequada em termos do número de camadas, quantidade de neurônios por camada, e atentando para detalhes no processo de otimização, é possível alcançar excelentes resultados na regressão e classificação de sinais de alta dimensionalidade. No entanto resta a dúvida: porque esses métodos funcionam tão bem? É justificada a grande atenção atualmente dispensada a esses métodos, e a expectativa que os cerca em termos da solução de outros problemas? Quais as garantias teóricas que embasam seu funcionamento?

Nas seções anteriores mostramos que a hipótese para o sucesso dos métodos de DL está na composição de funções, que realiza transformações sucessivas a partir do vetor de entrada. No entanto, analisar esses algoritmos é difícil devido à falta de estrutura para compreensão das suas invariantes, bem como das transformações intrínsecas.

O papel da profundidade : há alguns estudos que se dedicam a demonstrar porque redes profundas são melhores do que redes superficiais a partir de teoremas de aproximação. Um dos trabalhos nessa direção é o de Kolmogorov (1936) [25] que demonstrou um limite superior para a aproximação de funções contínuas por meio de subespaços de funções, seguido por Warren (1968) que encontrou limites para a aproximação por meio de polinômios, em termos de graus polinomiais e dimensão da função alvo, provando a dimensão VC de polinômios [55]. O refinamento desses resultados veio com teoremas de hierarquia de profundidade em complexidade de circuitos [22], demonstrando a diferença entre circuitos com uma certa profundidade de circuitos de menor profundidade. Esse resultado é uma das bases para o estudo de redes neurais profundas [35] [52] [31].

Entre os resultados obtidos [31] demonstra que o custo de achatarmos o grafo formado pela rede neural para um determinado problema é comumente proibitivo, relacionando o uso de múltiplas camadas com algoritmos de divisão e conquista. Um exemplo apontado pelos autores é a Transformada Rápida de Fourier (FFT), que basicamente faz uso de uma fatorização esparsa da matriz da Transformada Discreta de Fourier (DFT), resultando em $O(n \log n)$ elementos não-nulos na matrix, em contraste com os n^2 elementos não nulos na matriz da DFT. Assim, se imaginarmos a FFT como operações organizadas em um grafo (rede), achatar as operações em uma única camada irá aumentar a contagem de $n \log n$ para n^2 .

Telgarsky (2016) [52] vai além das analogias e mostra que para qualquer inteiro positivo k , existem redes neurais com $\Theta(k^3)$ camadas, cada qual com $\Theta(1)$ nós e $\Theta(1)$ parâmetros distintos, que não podem ser aproximadas por redes neurais com $O(k)$ camadas, a não ser que essas tenham uma quantidade de neurônios exponencialmente grande, da ordem de $\Omega(2^k)$ neurônios. Esse resultado é provado para portas semi-algébricas, as quais incluem funções como ReLU, operadores de máximo (como *maxpooling*), e funções po-

linomiais por partes. Isso permitiu estabelecer o papel fundamental da profundidade tanto em redes neurais convencionais quanto convolucionais que utilizam ReLU e operações de máximo. Abaixo a reprodução do teorema.

Teorema 3.1. *Seja qualquer inteiro $k \geq 1$ e qualquer dimensão $d \geq 1$. Existe uma função $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ computada por uma rede neural com portas ReLU em $2k^3 + 8$ camadas, com $3k^3 + 12$ neurônios no total, e $4 + d$ parâmetros distintos de forma que:*

$$\inf_{g \in \mathcal{C}} \int_{[0,1]^d} |f(x) - g(x)| dx \geq \frac{1}{64},$$

onde \mathcal{C} é a união dos seguintes dois conjuntos de funções:

- (1) *funções computadas por redes compostas por portas (t, α, β) -semi-algébricas com número de camadas $\leq k$ e número de neurônios $2^k / (t\alpha\beta)$ — como é o caso de redes que utilizam funções ReLU ou redes convolucionais com funções ReLU e portas de maximização;*
- (2) *funções computadas por combinações lineares de um número de árvores de decisão $\leq t$ com $2^{k^3} / t$ neurônios — como as funções utilizadas em boosted decision trees.*

O nome porta semi-algébrica vem de conjuntos semi-algébricos, definidos por uniões e intersecções de desigualdades polinomiais, e denota uma função que mapeia algum domínio em \mathbb{R} . Em redes neurais o domínio da função deve ser particionado em três argumentos: o vetor de entrada entrada, o vetor de parâmetros, e o vetor de números reais advindos de neurônios predecessores.

A prova do Teorema é feita em três etapas, demonstrando: (1) que funções com poucas oscilações aproximam de forma pobre funções com mais oscilações, (2) que funções computadas por redes neurais com menos camadas possuem menos oscilações, (3) que funções computadas por redes com mais camadas podem ter mais oscilações. A prova vem do teorema de hierarquia de profundidade para circuitos booleanos do trabalho seminal de Håstad [22] que estabelece não ser possível aproximar funções de paridade de circuitos profundos por circuitos menos profundos a não ser que o tamanho desses últimos seja exponencial. Por questões de espaço recomendamos a leitura do artigo completo de Telgarsky [52].

Propriedades de contração e separação Segundo Mallat (2016) [34], o funcionamento das CNN está ligado à eliminação de elementos/variáveis não informativas, via contração ou redução da dimensão espacial nas direções mais apropriadas a um certo problema. O autor define o problema de aprendizado supervisionado, que computa uma aproximação $\hat{f}(\mathbf{x})$ de uma função $f(\mathbf{x})$ por meio de um conjunto de treinamento $\mathbf{X} \in \Omega$, sendo que o domínio de Ω é um subconjunto aberto de alta dimensionalidade de \mathbb{R}^d (e não um manifold de baixa dimensão). Então os conceitos de separação e linearização são apresentados.

Idealmente, deseja-se reduzir a dimensão de um vetor de entrada \mathbf{x} computando um vetor de menor dimensão $\phi(\mathbf{x})$. Assim, $\phi()$ é um operador de contração que reduz o intervalo de variações de \mathbf{x} e que, ao mesmo tempo, separa diferentes valores da função f (classificador ou regressor), ou seja, $\phi(\mathbf{x}) \leq \phi(\mathbf{x}')$ se $f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}')$. Assim, ϕ **separa**

f , encontrando uma projeção linear de \mathbf{x} em algum espaço \mathcal{V} de menor dimensão k , que separa f .

Como estratégia alternativa, as variações de f podem ser linearizadas de forma a reduzir a dimensionalidade. Nesse cenário um projetor linear de baixa dimensionalidade de \mathbf{x} pode separar os valores de f se essa permanecer constante na direção do espaço linear de alta dimensão. Após encontrar $\phi(\mathbf{x})$ que realize essa linearização mantendo $f(\mathbf{x})$ constante, a dimensão é reduzida aplicando projeção linear em $\phi(\mathbf{x})$.

Redes neurais profundas progressivamente contraem o espaço e lineariza transformações ao longo das quais f permanece aproximadamente constante, de forma a preservar a separação. A combinação de canais (feature maps) provêm a flexibilidade necessária para estender translações para maiores grupos de simetrias locais. Assim, as redes são estruturadas de forma a fatorizar grupos de simetrias, em que todos os operadores lineares são convoluções.

Assim como em [32], Mallat [34] faz conexões com conceitos de física, demonstrando que redes hierárquicas multiescala computam convoluções de forma que as classes sejam preservadas. Os pesos geram repostas fortes a padrões particulares e são invariantes a uma série de transformações e os filtros são adaptados para produzir representações esparsas de vetores de suporte multiescala. Esses vetores proveriam então um código distribuído que define uma memorização de padrões invariante. A interpretação de geometria diferencial é a de que os pesos são transportados ao longo de um maço de fibras (conceito matemático que estaria relacionado a atualização dos filtros). Conforme a contração aumenta, aumenta o número de vetores de suporte necessários para realizar a separação o que indicaria um incremento também no número de fibras permitindo explicar simetrias e invariâncias suficientemente estáveis para a obtenção de transferência de aprendizado. Isso possibilita importante interpretação do aprendizado e abre espaço para pesquisas teóricas na área.

3.5.1. Limitações de Deep Learning e Considerações Finais

Técnicas de Deep Learning tem conseguido atingir resultados estatisticamente impressionantes em particular, como demonstrado, pelo uso de múltiplas camadas. Entretanto, existem limitações no uso de redes neurais profundas pois essas são basicamente uma forma de aprender uma série de transformações a serem aplicadas ao vetor de entrada. Essas transformações são dadas por um grande conjunto de pesos (parâmetros) que são atualizados durante a etapa de treinamento de forma a minimizar a função de custo. A primeira limitação para que seja possível realizar o treinamento, é que tais transformações precisam ser deriváveis, isso é, o mapa entre a entrada e saída da rede deve ser contínuo e idealmente suave [6].

A segunda limitação diz respeito à abstração e adaptação: redes neurais profundas precisam de quantidades massivas de dados rotulados para aprender conceitos simples; em contrapartida, seres humanos são capazes de aprender um conceito a partir de pequenas quantidades de exemplos. No problema de classificação de dígitos, é necessário fornecer milhares de exemplos de dígitos, escritos por pessoas diferentes para que a rede possa aprender a diferenciá-los, enquanto um humano seria capaz de aprender os mesmos conceitos com alguns poucos exemplos escritos por uma única pessoa. Humanos também

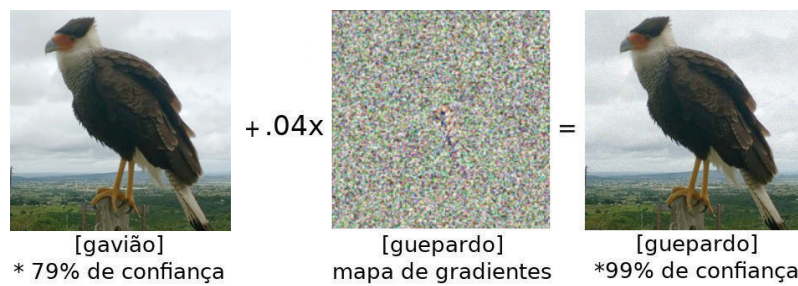


Figura 3.7. Imagem gerada pela adição de 4% do gradiente de features de guepardo em uma imagem de um gavião, que é então classificada como guepardo com alta confiança pela CNN.

conseguem adaptar facilmente esses conceitos com o passar do tempo.

Mesmo considerando tarefas a princípio solucionáveis via Deep Learning, existem diversos estudos mostrando falhas que fazem duvidar da real capacidade de generalização desses modelos, em particular: (i) perturbações nos dados de entrada, tais como ruído, podem impactar significativamente os resultados [37], (ii) o uso de imagens invertidas na fase de teste faz com que as redes errem completamente os resultados [21], (iii) é possível criar imagens que visualmente parecem conter somente ruído aleatório, mas que fazem com que CNNs as classifiquem com 99% de certeza [38], (iv) é possível desenvolver perturbações imperceptíveis a humanos (em torno de 4%) que fazem redes produzirem saídas completamente erradas [39], conforme mostramos na Figura 3.7, um exemplo adaptado adicionando informações do gradiente de uma imagem de guepardo a uma imagem de um falcão, o que faz com que a imagem seja classificada com alta confiança como guepardo por uma CNN do estado da arte. Para aliviar o impacto dessa fragilidade dos métodos de Deep Learning a ataques, estudos recentes recomendam a inclusão de exemplos adversários no conjunto de treinamento ou o aumento da capacidade (em termos de filtros/neurônios por camada), aumentando o número de parâmetros e assim a complexidade do espaço de funções permitidas pelos modelo [45],[33].

Ao analisar os cenários citados do ponto de vista da Teoria do Aprendizado Estatístico [53], podemos criar a hipótese de que esses métodos estão de fato aprendendo um modelo baseado em memória. Eles funcionariam bem em diversos casos pois são treinados em milhões de exemplos, fazendo com que imagens nunca vistas se encaixem nas informações memorizadas. Estudos recentes incluem a análise tensorial de representações [7] e incertezas [12] para tentar esclarecer o comportamento do aprendizado das redes neurais profundas. Ainda [34] e [31] publicaram resultados teóricos importantes, com interpretações que podem dar novas direções à compreensão e ao estudo das garantias teóricas e limites, mas ainda há muito a percorrer do ponto de vista do embasamento teórico relacionado ao aprendizado supervisionado e não supervisionado utilizando redes profundas.

Para maiores detalhes, aplicações, e outros modelos de redes incluindo Autoencoders e Modelos Gerativos sugerimos a leitura do survey recente sobre Deep Learning em Visão Computacional [44], bem como o livro de Goodfellow et al. disponível online [14].

É inegável o impacto positivo de Deep Learning para diversas áreas em que o aprendizado de máquina é empregado para busca de soluções. Compreendendo suas limi-

tações e funcionamento, é possível continuar a explorar esses métodos e alcançar avanços notáveis em diversas aplicações.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio da FAPESP (processos #2016/16411-4 e #2015/05310-3)

Referências

- [1] Shai Ben-David and Shai Shalev-Shwartz. *Understanding Machine Learning: from theory to algorithms*. Cambridge, 2014.
- [2] Yoshua Bengio, Aaron Courville, and Pascal Vincent. Representation learning: A review and new perspectives. *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.*, 35(8):1798–1828, August 2013.
- [3] Léon Bottou, Frank E Curtis, and Jorge Nocedal. Optimization methods for large-scale machine learning. *arXiv preprint arXiv:1606.04838*, 2016.
- [4] T Bui, L Ribeiro, M Ponti, and John Collomosse. Compact descriptors for sketch-based image retrieval using a triplet loss convolutional neural network. *Computer Vision and Image Understanding*, 2017.
- [5] Ken Chatfield, Karen Simonyan, Andrea Vedaldi, and Andrew Zisserman. Return of the devil in the details: Delving deep into convolutional nets. In *British Machine Vision Conference (BMVC)*, page 1405.3531, 2014.
- [6] F. Chollet. *Deep Learning with Python*. Manning, 2017.
- [7] Nadav Cohen, Or Sharir, and Amnon Shashua. On the expressive power of deep learning: A tensor analysis. In *Conference on Learning Theory*, pages 698–728, 2016.
- [8] J. Deng, W. Dong, R. Socher, L.-J. Li, K. Li, and L. Fei-Fei. ImageNet: A Large-Scale Hierarchical Image Database. In *CVPR09*, 2009.
- [9] John Duchi, Elad Hazan, and Yoram Singer. Adaptive subgradient methods for online learning and stochastic optimization. *Journal of Machine Learning Research*, 12(Jul):2121–2159, 2011.
- [10] Asja Fischer and Christian Igel. Training restricted boltzmann machines: An introduction. *Pattern Recognition*, 47(1):25–39, 2014.
- [11] Kunihiro Fukushima. Neocognitron: A hierarchical neural network capable of visual pattern recognition. *Neural networks*, 1(2):119–130, 1988.
- [12] Yarín Gal and Zoubin Ghahramani. Dropout as a bayesian approximation: Representing model uncertainty in deep learning. In *International Conference on Machine Learning*, pages 1050–1059, 2016.

- [13] Rafael Gonzalez and Richard Woods. *Digital Image Processing*. Pearson, 3 edition, 2007.
- [14] Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, and Aaron Courville. *Deep Learning*. MIT Press, 2016. <http://www.deeplearningbook.org>.
- [15] Ian J. Goodfellow, Jean Pouget-Abadie, Mehdi Mirza, Bing Xu, David Warde-Farley, Sherjil Ozair, Aaron Courville, and Yoshua Bengio. Generative adversarial nets. In *Advances in Neural Information Processing Systems 27*, 2014.
- [16] P. Goyal, P. Dollar, R. Girshick, P. Noordhuis, L. Wesolowski, A. Kyrola, A. Tulloch, Y. Jia, and K. He. Accurate, large minibatch SGD: Training imagenet in 1 hour.
- [17] Alex Graves, Abdel-rahman Mohamed, and Geoffrey Hinton. Speech recognition with deep recurrent neural networks. In *IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)*, pages 6645–6649, 2013.
- [18] Kaiming He, Xiangyu Zhang, Shaoqing Ren, and Jian Sun. Deep residual learning for image recognition. *CoRR*, abs/1512.03385, 2015.
- [19] Kaiming He, Xiangyu Zhang, Shaoqing Ren, and Jian Sun. Delving deep into rectifiers: Surpassing human-level performance on imagenet classification. In *Proceedings of the IEEE international conference on computer vision*, pages 1026–1034, 2015.
- [20] Geoffrey E Hinton, Nitish Srivastava, Alex Krizhevsky, Ilya Sutskever, and Ruslan R Salakhutdinov. Improving neural networks by preventing co-adaptation of feature detectors. *arXiv preprint arXiv:1207.0580*, 2012.
- [21] Hossein Hosseini and Radha Poovendran. Deep neural networks do not recognize negative images. *arXiv preprint arXiv:1703.06857*, 2017.
- [22] Johan Håstad. *Computational Limitations of Small Depth Circuits*. PhD thesis, MIT, 1986.
- [23] Sergey Ioffe and Christian Szegedy. Batch normalization: Accelerating deep network training by reducing internal covariate shift. In *International Conference on Machine Learning*, pages 448–456, 2015.
- [24] Diederik Kingma and Jimmy Ba. Adam: A method for stochastic optimization. In *3rd International Conference on Learning Representations (ICLR)*, 2015.
- [25] AN Kolmogorov. The representation of continuous functions of several variables by superpositions of continuous functions of a smaller number of variables. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, 108(2):179–182, 1956.
- [26] Alex Krizhevsky, Ilya Sutskever, and Geoffrey E. Hinton. Imagenet classification with deep convolutional neural networks. In *Advances in Neural Information Processing Systems 25: 26th Annual Conference on Neural Information Processing Systems.*, pages 1106–1114, 2012.

- [27] Hugo Larochelle, Michael Mandel, Razvan Pascanu, and Yoshua Bengio. Learning algorithms for the classification restricted boltzmann machine. *Journal of Machine Learning Research*, 13(Mar):643–669, 2012.
- [28] Yann LeCun, Léon Bottou, Yoshua Bengio, and Patrick Haffner. Gradient-based learning applied to document recognition. *Proceedings of the IEEE*, 86(11):2278–2324, 1998.
- [29] Yann A LeCun, Léon Bottou, Genevieve B Orr, and Klaus-Robert Müller. Efficient backprop. In *Neural networks: Tricks of the trade*, pages 9–48. Springer, 2012.
- [30] Mu Li, Tong Zhang, Yuqiang Chen, and Alexander J Smola. Efficient mini-batch training for stochastic optimization. In *Proceedings of the 20th ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining*, pages 661–670. ACM, 2014.
- [31] Henry W Lin, Max Tegmark, and David Rolnick. Why does deep and cheap learning work so well? *Journal of Statistical Physics*, pages 1–25, 2016.
- [32] Fayao Liu, Chunhua Shen, Guosheng Lin, and Ian Reid. Learning depth from single monocular images using deep convolutional neural fields. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 38(10):2024–2039, 2016.
- [33] Aleksander Madry, Aleksandar Makelov, Ludwig Schmidt, Dimitris Tsipras, and Adrian Vladu. Towards deep learning models resistant to adversarial attacks. *arXiv preprint arXiv:1706.06083*, 2017.
- [34] Stéphane Mallat. Understanding deep convolutional networks. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 374(2065):20150203, 2016.
- [35] H.N. Mhaskar and T. Poggio. Deep vs. shallow networks: An approximation theory perspective. *Analysis and Applications*, 14(06):829–848, 2016.
- [36] Vinod Nair and Geoffrey E. Hinton. Rectified linear units improve restricted boltzmann machines. In Johannes Fürnkranz and Thorsten Joachims, editors, *Proceedings of the 27th International Conference on Machine Learning (ICML-10)*, pages 807–814. Omnipress, 2010.
- [37] T. Nazare, G. Paranhos da Costa, W. Contato, and M. Ponti. Deep convolutional neural networks and noisy images. In *Iberoamerican Conference on Pattern Recognition (CIARP)*, 2017.
- [38] Anh Nguyen, Jason Yosinski, and Jeff Clune. Deep neural networks are easily fooled: High confidence predictions for unrecognizable images. In *IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, pages 427–436, 2015.
- [39] Nicolas Papernot, Patrick McDaniel, Somesh Jha, Matt Fredrikson, Z Berkay Celik, and Ananthram Swami. The limitations of deep learning in adversarial settings. In *IEEE European Symposium on Security and Privacy (EuroS&P)*, pages 372–387. IEEE, 2016.

- [40] Razvan Pascanu, Tomas Mikolov, and Yoshua Bengio. On the difficulty of training recurrent neural networks. In *International Conference on Machine Learning*, pages 1310–1318, 2013.
- [41] Moacir Ponti, Elias S Helou, Paulo Jorge SG Ferreira, and Nelson DA Mascarenhas. Image restoration using gradient iteration and constraints for band extrapolation. *IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing*, 10(1):71–80, 2016.
- [42] Moacir Ponti, Josef Kittler, Mateus Riva, Teófilo de Campos, and Cemre Zor. A decision cognizant Kullback–Leibler divergence. *Pattern Recognition*, 61:470–478, 2017.
- [43] Moacir Ponti, Tiago S Nazaré, and Gabriela S Thumé. Image quantization as a dimensionality reduction procedure in color and texture feature extraction. *Neurocomputing*, 173:385–396, 2016.
- [44] Moacir Ponti, Leonardo S.F. Ribeiro, Tiago S. Nazare, Tu Bui, and John Collo-mosse. Everything you wanted to know about deep learning for computer vision but were afraid to ask. In *SIBGRAPI — Conference on Graphics, Patterns and Images Tutorials (SIBGRAPI-T 2017)*, pages 1–26, 2017.
- [45] Andras Rozsa, Manuel Günther, and Terrance E Boulton. Are accuracy and robustness correlated. In *Machine Learning and Applications (ICMLA), 2016 15th IEEE International Conference on*, pages 227–232. IEEE, 2016.
- [46] Olga Russakovsky, Jia Deng, Hao Su, Jonathan Krause, Sanjeev Satheesh, Sean Ma, Zhiheng Huang, Andrej Karpathy, Aditya Khosla, Michael Bernstein, Alexander C. Berg, and Li Fei-Fei. ImageNet Large Scale Visual Recognition Challenge. *International Journal of Computer Vision (IJCV)*, 115(3):211–252, 2015.
- [47] Ruslan Salakhutdinov and Geoffrey Hinton. Deep boltzmann machines. In *Artificial Intelligence and Statistics*, pages 448–455, 2009.
- [48] K. Simonyan and A. Zisserman. Very deep convolutional networks for large-scale image recognition. *CoRR*, abs/1409.1556, 2014.
- [49] Jost Tobias Springenberg, Alexey Dosovitskiy, Thomas Brox, and Martin Riedmiller. Striving for simplicity: The all convolutional net. In *ICLR (workshop track)*, 2015.
- [50] Christian Szegedy, Sergey Ioffe, Vincent Vanhoucke, and Alexander A Alemi. Inception-v4, inception-resnet and the impact of residual connections on learning. In *AAAI*, pages 4278–4284, 2017.
- [51] Christian Szegedy, Vincent Vanhoucke, Sergey Ioffe, Jon Shlens, and Zbigniew Wojna. Rethinking the inception architecture for computer vision. In *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, pages 2818–2826, 2016.

- [52] Matus Telgarsky. Benefits of depth in neural networks. *arXiv preprint arXiv:1602.04485*, 2016.
- [53] Vladimir Vapnik. *The nature of statistical learning theory*. Springer science & business media, 2013.
- [54] David Warde-Farley, Ian J Goodfellow, Aaron Courville, and Yoshua Bengio. An empirical analysis of dropout in piecewise linear networks. In *ICLR 2014*, 2014.
- [55] Hugh E Warren. Lower bounds for approximation by nonlinear manifolds. *Transactions of the American Mathematical Society*, 133(1):167–178, 1968.
- [56] Matthew D Zeiler. Adadelta: an adaptive learning rate method. *arXiv preprint arXiv:1212.5701*, 2012.
- [57] Shuai Zheng, Sadeep Jayasumana, Bernardino Romera-Paredes, Vibhav Vineet, Zhizhong Su, Dalong Du, Chang Huang, and Philip Torr. Conditional random fields as recurrent neural networks. In *International Conference on Computer Vision (ICCV)*, 2015.

Sobre os Autores



Moacir A. Ponti é professor Doutor no Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC) da Universidade de São Paulo (USP), em São Carlos/SP, Brasil. Possui Doutorado (2008) e Mestrado (2004) pela Universidade Federal de São Carlos. Foi pesquisador visitante no Centre for Vision, Speech and Signal Processing (CVSSP), University of Surrey, onde realizou estágio pós-doutoral em 2016. Coordenador de projetos de pesquisa nas áreas de Visão Computacional e Reconhecimento de Padrões financiado por agências públicas (FAPESP, CNPq), institutos e empresas (Google, UGPN). Autor de mais de 40 artigos publicados em conferências e periódicos com revisão por pares. Atua nas áreas de Processamento de Sinais, Imagens e Videos, com ênfase em problemas inversos, aprendizado e extração de características com aplicações.



Gabriel B. Paranhos da Costa é doutorando no Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC) da Universidade de São Paulo (USP), em São Carlos/SP, Brasil, com período sanduíche na Universidade de Edimburgo, Reino Unido. Possui Bacharelado em Ciências da Computação (2012) e Mestrado (2014) pelo ICMC/USP. Realiza pesquisas na área de Processamento de Imagens e Reconhecimento de Padrões, tendo como principal foco detecção de anomalias e aprendizado e extração de características para aplicações de aprendizado de máquina.