Notas de aula da disciplina Visão Computacional

Cesar Henrique Comin

Departamento de Ciência da Computação, Universidade Federal de São Carlos

Neste documento estão descritos conceitos importantes para o entendimento dos códigos da disciplina. Cada seção possui o conceito apresentado e entre parênteses o módulo (códigos) ao qual o conceito está associado. Seções e notas de rodapé começando com * são conceitos mais avançados ou que podem ser ignorados em uma primeira leitura. A Seção I pode ser lida de forma independente da Seção II. A partir da Seção IV praticamente todas as figuras foram obtidas do livro *Understanding Deep Learning* do Simon J.D. Prince.

CONTEÚDO

I. Conceitos de modelagem probabilística e otimização (módulo 2) 3
A. Função de verossimilhança 3
B. Verossimilhança no contexto de redes neurais 9
C. Entropia cruzada 10
*Equação geral da entropia cruzada 13

II. Conceitos de cálculo diferencial (módulo 2) 14
A. Derivada de funções univariadas 14
B. Derivada de funções univariadas compostas 15
C. Derivada de funções multivariadas 18
1. *Camada linear de uma rede neural 21
2. *Derivada de uma camada linear de uma rede neural 22
D. *Derivada de funções multivariadas compostas 24

III. Regularização e weight decay (módulo 5) 27

IV. Figuras sobre conceitos de Visão Computacional e Aprendizado de Máquina 29
A. Figuras sobre regressão linear e logística (módulos 2 e 3) 29
1. Capacidade de uma rede 30
2. Otimização 32
B. Figuras sobre redes neurais convolucionais (módulos 4, 5, 6 e 7) 33

A. Símbolos 38

I. CONCEITOS DE MODELAGEM PROBABILÍSTICA E OTIMIZAÇÃO (MÓDULO 2)

A. Função de verossimilhança

Suponha que temos um dado de seis lados (Figura 1) que parece estar enviesado. Como verificamos matematicamente se o dado está de fato enviesado?

Figura 1: Um dado enviesado?

Nosso modelo inicial, que chamaremos de $\mathcal{M}$ será que o dado não está enviesado, ou seja, cada lado possui probabilidade $p = 1/6$ de ocorrer. Com isso, podemos calcular o seguinte: dado o modelo $\mathcal{M}$, qual a probabilidade $\mathcal{P}$ de obter uma sequência específica de valores? Vamos supor que jogamos o dado n vezes e tivemos como resultado a sequência $s = \{2, 1, 1, 3, 5, 6, 1, 3, \dots\}$. Podemos obter a probabilidade que essa sequência seja obtida pelo nosso modelo. Ela é dada pelo produto das probabilidades p_i de obter cada valor

$$\mathcal{P}(s) = \prod_i^n p_i \tag{1.1}$$

Segundo o nosso modelo, a probabilidade de obter cada valor é igual a $1/6$. Portanto, temos que

$$\mathcal{P}(s) = \prod_i^n 1/6 = \frac{1}{6^n} \tag{1.2}$$

Nesse caso o nosso modelo não possui nenhum parâmetro e não há nada interessante que podemos fazer com $\mathcal{P}$. Casos mais interessantes surgem quando o modelo possui parâmetros. Nesses casos, $\mathcal{P}$ possibilita compararmos diferentes versões de um modelo, e encontrarmos o parâmetro que leva ao modelo mais provável. Para analisar essa situação, vamos considerar que temos um novo modelo. Nesse modelo, supomos que o valor 1 ocorre com uma probabilidade diferente dos demais valores, ou seja, o valor 1 ocorre com probabilidade p_1 ao

invés de 1/6, e os demais valores ocorrem com probabilidade p. Note que as probabilidades precisam somar 1, o que implica $p_1 + 5p = 1$. Portanto o modelo possui apenas 1 parâmetro, já que dado p_1 temos $p = (1 - p_1)/5$.

Dada a mesma sequência de valores acima, temos que

$$s = \{2, 1, 1, 3, 5, 6, 1, 3, \dots\} \tag{1.3}$$

$$\mathcal{P}(s; p_1) = p \times p_1 \times p_1 \times p \times p \times p \times p_1 \times p \dots \tag{1.4}$$

onde $\mathcal{P}(s; p_1)$ representa a probabilidade de obter a sequência s para um modelo com parâmetro p_1[1]. A probabilidade p_1 aparece quando o valor 1 é obtido, e p aparece quando os valores 2 a 6 são obtidos. Podemos escrever $\mathcal{P}(s; p_1)$ de forma mais sucinta como

$$\mathcal{P}(s; p_1) = p_1^{n_1} p^{n - n_1} \tag{1.5}$$

onde n_1 representa o número de vezes que o valor 1 foi obtido.

Agora temos uma situação mais interessante! Podemos supor diferentes valores de p_1 para o modelo e verificar qual valor de p_1 leva ao maior valor de $\mathcal{P}$. Se $\mathcal{P}$ for máximo para $p_1 = 1/6$, quer dizer que o dado provavelmente não é enviesado para esse valor.

Suponha que jogamos o dado $n = 40$ vezes e obtivemos a seguinte sequência de valores:

$$s = \{2, 1, 1, 3, 5, 6, 1, 3, 3, 3, 1, 6, 4, 5, 4, 6, 6, 1, 4, 3, 5, 1, 4, 3, 2, 5, 1, 1, 4, 3, 1, 5, 2, 4, 1, 4, 1, 1, 2, 5\}$$

O valor 1 ocorre $n_1 = 12$ vezes nessa sequência. Considerando o nosso modelo de que o valor 1 ocorre com uma probabilidade diferente dos demais, qual a probabilidade que o modelo gere essa sequência de valores? Caso o modelo esteja correto, qual o valor ideal de p_1 que melhor explica os dados? Para responder essas perguntas, na Figura 2 é mostrado o valor da Equação 1.5 para diferentes valores de p_1.

Vemos na figura que o máximo ocorre para $p_1 = 0.3$. Ou seja, o modelo que melhor se ajusta aos dados obtidos é o modelo para o qual $p_1 = 0.3$ e $p = (1 - 0.3)/5 = 0.14$. Portanto, o modelo indica que o dado está enviesado. Note que o valor absoluto de $\mathcal{P}(s; p_1)$ não é relevante para a discussão, estamos interessados apenas na comparação entre valores de $\mathcal{P}(s; p_1)$ para diferentes p_1.

---

[1] É comum a notação $\mathcal{P}(s|p_1)$ também ser utilizada.

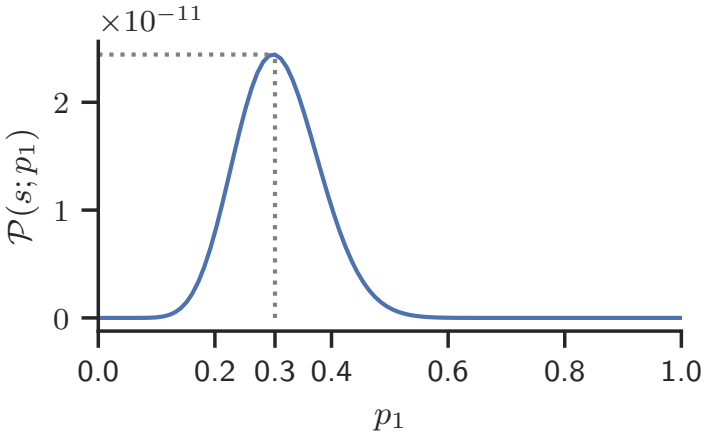


Figura 2: Probabilidade de obter a sequência s para diferentes probabilidades p_1 do valor 1 de um dado de seis lados.

Podemos fazer a mesma análise supondo diferentes probabilidades $p_1, p_2, \ldots, p_6$ para cada valor do dado. Nesse caso, o modelo passará a depender de 6 variáveis. É comum representarmos essas variáveis como um vetor $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \ldots, p_6)$. Podemos então calcular $\mathcal{P}(s; \mathbf{p})$ para diferentes combinações de $\mathbf{p}$ e verificar qual valor de $\mathbf{p}$ leva ao modelo mais provável. Para um dado não enviesado o máximo de $\mathbf{p}$ deve ocorrer para $\mathbf{p} = (1/6, 1/6, \ldots, 1/6)$.

De forma geral, a função $\mathcal{P}$ é chamada de função de verossimilhança, do inglês *likelihood function*. É comum essa função ser na verdade representada por L ao invés de $\mathcal{P}$, e os parâmetros da função são em geral representados por θ. Um modelo $\mathcal{M}$ é matematicamente representado por uma função $f(x; \theta)$[2] que atribui uma probabilidade para cada elemento de um conjunto de dados[3]. Portanto, dada uma função $f(x; \theta)$ representando um modelo, a chance (*likelihood*) de obter um conjunto específico de valores $s = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ é dada por

$$L(s; \theta) = \prod_i^n f(x_i; \theta) \tag{1.6}$$

Em problemas de aprendizado de máquina, queremos sempre encontrar os parâmetros do modelo θ que maximizam essa função. Note que o valor de n, a quantidade de dados, está relacionado com o nível de confiabilidade do modelo. Idealmente queremos o maior número

[2] *Essa função pode ser uma rede neural. Nesse caso, θ são os parâmetros da rede. Mas para a discussão desta seção não é necessário pensar em redes neurais.

[3] No nosso exemplo do dado de seis lados, $f(1) = p_1$, $f(2) = p_2$, ...

n de exemplos possível para testar o modelo, mas em problemas reais n tende a ser limitado.

Um detalhe importante é que L é o produto de valores pequenos (entre 0 e 1) e, portanto, tende a possui um valor extremamente baixo. Por exemplo, no caso do modelo não enviesado do dado de seis lados calculamos uma probabilidade de $1/6^n$ (Equação 1.2). Valores pequenos são problemáticos para computadores e também para interpretação dos resultados. Portanto, é extremamente comum que seja utilizado o logaritmo[4] da função de verossimilhança (do inglês *log-likelihood*). Como o logaritmo de produtos se torna uma soma, temos que

$$\log(L(s;\theta)) = \sum_{i}^{n} \log(f(x_i;\theta)) \tag{1.7}$$

No caso do dado de seis lados, temos que $\log(L) = -n\log(6)$. Outro detalhe importante é que $f(x;\theta)$ é sempre menor ou igual a 1 (pois é uma probabilidade), mas o logaritmo de um valor entre 0 e 1 é sempre negativo (ou zero). Por isso, é comum que seja utilizado o negativo da função de verossimilhança. Com isso, finalmente podemos definir a função que usualmente é utilizada para otimizar algoritmos de aprendizado de máquina, a chamada *negative log-likelihood*. No decorrer do texto utilizaremos a notação $\mathcal{L}$ para representar o negativo do logaritmo da função de verossimilhança, ou seja

$$\mathcal{L}(s;\theta) = -\sum_{i}^{n} \log(f(x_i;\theta))^{5} \tag{1.8}$$

O menor valor possível para essa função é 0, que consiste no caso em que o modelo retorna o valor 1 para todos os dados.

O objetivo de algoritmos de aprendizado de máquina é encontrar um modelo que minimize o valor de $\mathcal{L}(s;\theta)$, ou seja, um modelo que represente bem o processo real que gerou os dados observados. Em redes neurais, $f(x;\theta)$ é representado por uma rede com parâmetros θ que recebe uma entrada x e retorna uma probabilidade.

Para vermos um exemplo mais concreto, vamos supor que nos foi dado um conjunto de 100 valores $s = \{x_1, x_2, \ldots, x_{100}\}$. Ao calcular o histograma desses valores, observamos a distribuição mostrada na Figura 3(a)[6]. Essa distribuição é muito parecida com a distribuição

---

[4] O logaritmo natural (na base e, que é o número Euler) é comumente utilizado, pois $e^{\log(x)} = x$.

[5] Note que dado um valor de $\mathcal{L}(s;\theta)$, podemos encontrar a probabilidade de obter a sequência de dados como $\mathcal{P} = e^{-\mathcal{L}(s;\theta)}$.

[6] *Esse histograma é parecido com a curva mostrada na Figura 2, mas os gráficos representam conceitos distintos. Acontece que a quantia $\mathcal{P}(s;p_1)$ pode ser modelada como uma variável aleatória, e para n suficientemente grande a distribuição de $\mathcal{P}(s;p_1)$ tende a uma distribuição normal, o que ressalta a importância dessa distribuição.

normal, também chamada de Gaussiana, que ocorre em muitas situações em problemas reais. Essa distribuição possui a seguinte equação

$$f(x;\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \tag{1.9}$$

o termo θ representa os parâmetros da função, que nesse caso são dados por $\theta = (\mu, \sigma)$. μ é a posição do pico da distribuição e σ está relacionado com a largura do pico. Na Figura 3(b) são mostrados dois exemplos para diferentes valores de μ e σ.

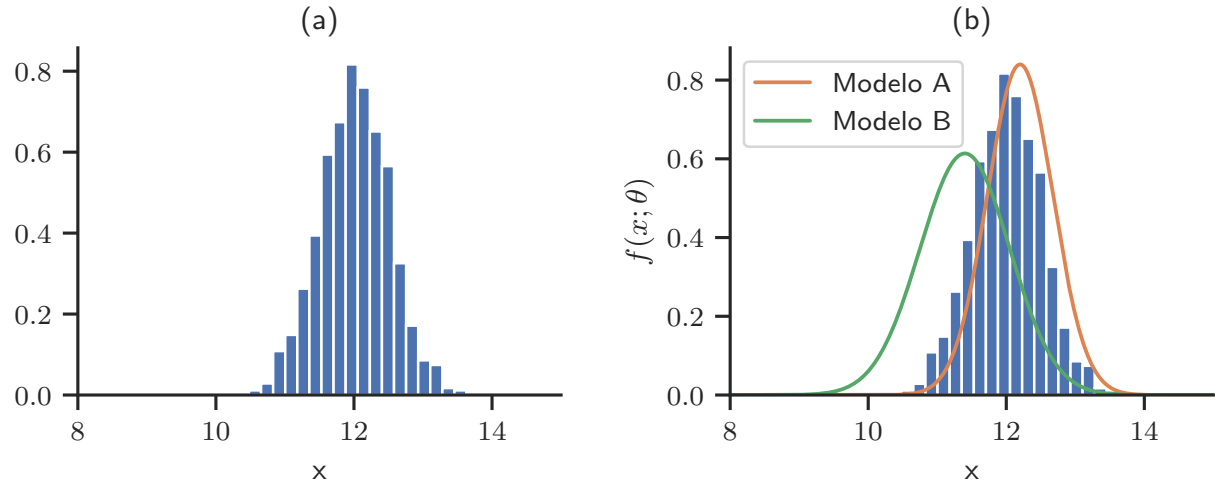


Figura 3: (a) Histograma de um conjunto de dados. (b) Dois possíveis modelos para a distribuição de probabilidades dos dados.

Queremos encontrar quais os valores de θ que levam ao melhor modelo possível dos dados, ou seja, à distribuição que de fato gerou esses dados. Para isso, podemos realizar o seguinte procedimento:

1. Definimos um valor específico para θ, que chamaremos de $\theta^* = (\mu^*, \sigma^*)$;
2. Para cada valor de x_i calculamos o valor de $f(x_i;\theta^*)$ utilizando a Equação 1.9;
3. Calculamos o valor $\mathcal{L}$ da função de verossimilhança dado pela Equação 1.8;
4. Repetimos os itens 1 a 3 para diferentes parâmetros θ^*, e armazenamos os parâmetros que levaram ao menor valor de $\mathcal{L}$.

Esse processo não é muito eficiente, teremos que testar diversos valores de θ para encontrar um modelo apropriado. Uma opção mais eficiente é *otimizar* a função de verossimilhança

para encontrar os melhores parâmetros. Um método que pode ser utilizado para isso é o *gradiente descendente*, que consiste em alterar os parâmetros de acordo com o gradiente da função. Portanto, podemos realizar o seguinte procedimento:

1. Definimos um valor inicial para θ, por exemplo, $\theta^* = (\mu^*, \sigma^*) = (0, 1)$;
2. Para cada valor de x_i calculamos o valor de $f(x_i; \theta^*)$ utilizando a Equação 1.9;
3. Calculamos o valor da função de verossimilhança $\mathcal{L}(s; \theta)$ (Equação 1.8);
4. Calculamos o gradiente $\nabla_{\theta^*}\mathcal{L} = (\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mu^*}, \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \sigma^*})$[7] da função de verossimilhança;
5. Usando o método de gradiente descendente, atualizamos os parâmetros do modelo como $\theta^* = \theta^* - lr\nabla_{\theta^*}\mathcal{L}$, onde lr é a taxa de aprendizado;
6. Repetimos os itens 1 a 5 por um número E de passos ou até que o valor de $\mathcal{L}$ não modifique mais.

Esse procedimento é conhecido em alguns contextos como *expectation-maximization*, pois no passo 3 calculamos o valor da função de verossimilhança (*expectation*), e nos passos 4 e 5 otimizamos a função (*maximization*, mas nesse caso estamos minimizando).

No caso da distribuição normal, é possível calcular o gradiente de forma analítica, ou seja, encontrar a equação de $\nabla_{\theta^*}\mathcal{L}$ e utilizar ela diretamente na otimização, o que torna o processo mais rápido. Para um modelo geral, como é o caso de redes neurais, calculamos o gradiente computacionalmente.

Ainda mais interessante é o fato de que para distribuições normais o resultado do algoritmo acima também é conhecido analiticamente. É possível mostrar que os melhores parâmetros possíveis para o modelo são

$$\mu = \frac{1}{n}\sum x_i \tag{1.10}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{n}\sum (x_i - \mu)^2 \tag{1.11}$$

As equações 1.10 e 1.11 simplesmente representam a média e a variância dos dados.

---

[7] A Seção II explica como fazer isso.

B. Verossimilhança no contexto de redes neurais

Em redes neurais, a função $f(x;\theta)$ é representada por uma sequência de camadas. Cada camada l mapeia a entrada x^{l-1} advinda da camada anterior para um novo valor x^l. A última camada da rede é especial, ela mapeia a entrada em um valor que é garantido de estar entre 0 e 1[8]. Portanto, a rede se comporta exatamente como a função que vimos nesta seção, ela recebe uma entrada e retorna uma probabilidade. O grande desafio está em calcular o gradiente da função. Mas desde que seja possível calcular o gradiente de cada camada, podemos utilizar a regra da cadeia (Seção II D) para calcular o gradiente de toda a rede! Com isso, temos um procedimento geral para encontrar qualquer modelo $f(x;\theta)$ que represente um conjunto de dados $s = \{x_1, x_2, \ldots x_n\}$, descrito pelo Algoritmo 1.

Algoritmo 1 Otimização da função de verossimilhança.

---

1. Criamos uma rede neural com L camadas. Essa rede representa uma função $f(x;\theta)$. Os parâmetros θ da rede são inicializados de forma aleatória com valores $\theta = \theta^*$;

2. Aplicamos a rede em cada item x_i, obtendo uma probabilidade para cada item;

3. Calculamos o valor da função de verossimilhança $\mathcal{L}(s;\theta^*)$ (Equação 1.8) utilizando os resultados da rede;

4. Calculamos o gradiente $\nabla_{\theta^*}\mathcal{L}$ da função de verossimilhança;

5. Usando o método de gradiente descendente, atualizamos os parâmetros do modelo como $\theta^* = \theta^* - lr\nabla_{\theta^*}\mathcal{L}$;

6. Repetimos os itens 1 a 5 por um número E de passos ou até que o valor de $\mathcal{L}$ não modifique mais.

O passo 4 é o mais custoso no processo de otimização de redes neurais. Ele é feito pelo método .backward() da biblioteca Pytorch.

---

[8] Utilizando uma função sigmoide ou softmax.

C. Entropia cruzada

A seção anterior considerou a situação na qual queremos criar um modelo que represente de forma fiel o processo de criação dos dados no mundo real. Por exemplo, no caso do dado de seis lados que gera valores entre 1 e 6, o modelo consiste em criar uma função $f(x;\theta)$ que represente o processo de geração dos valores realizado pelo dado. Focaremos agora em tarefas de classificação de dados, isto é, o processo de associar uma classe y_i para cada item x_i, sendo que a classe deve ser um valor entre 1 e C, onde C é o número de classes do problema. No caso de classificação de imagens, queremos associar uma classe y_i para cada imagem x_i de entrada. As classes podem ser, por exemplo, "cachorro", "gato", "cavalo", etc, representadas pelos valores $1, 2, 3, \ldots C$.

Suponha que temos um conjunto de treinamento composto por uma sequência de n imagens e os respectivos rótulos $s = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots (x_n, y_n)\}$. Nesse caso, podemos considerar que para cada imagem estamos afirmando: com probabilidade 1 a imagem x_i é da classe y_i, ou seja, temos absoluta certeza que a imagem x_i deve ser classificada pelo modelo na classe y_i [9]. Portanto, queremos desenvolver um modelo que receba como entrada uma imagem e retorne como saída um vetor de C valores. Quando a imagem for da classe 1, queremos que o modelo retorne o vetor $\mathbf{q} = (1, 0, 0, \ldots 0)$. Quando a imagem for da classe 2, queremos que o modelo retorne $\mathbf{q} = (0, 1, 0, \ldots 0)$. Quando a imagem for da classe C, queremos que o modelo retorne $\mathbf{q} = (0, 0, 0, \ldots 1)$.

Como iremos utilizar uma rede neural para representar esse modelo, que consiste numa sequência de multiplicações e somas, o modelo não será perfeito. Por exemplo, ao invés de retornar o vetor $\mathbf{q} = (1, 0, 0, \ldots 0)$ para uma imagem da classe 1 o modelo irá retornar o vetor $\mathbf{r} = (7, 2.1, 1.2, \ldots, 2.4)$, ou seja, um valor alto para a classe 1 e baixo para as demais classes. Esse vetor é útil para classificar a imagem, afinal, basta encontrarmos o índice do elemento possuindo o maior valor[10], mas é interessante transformarmos esse vetor em probabilidades para que seja possível interpretar seus valores como sendo a probabilidade de imagem pertencer a cada classe. Isso também possibilitará utilizarmos a função de

---

[9] *Pode parecer exagero pensar no problema dessa forma, mas esse conceito é importante porque é possível também atribuirmos probabilidades diferentes de 1 para as classes. Por exemplo, seria possível considerarmos que a imagem x_i possui probabilidade 0.8 de ser da classe 1, 0.15 de ser da classe 2 e 0.05 de ser da classe 3. Esse é um problema de classificação multirrótulo. A forma mais geral da entropia cruzada inclui esse caso, mas para simplificar estamos considerando apenas uma única classe para cada imagem.

[10] Operação argmax() do Pytorch.

verossimilhança para encontrar o melhor modelo possível para os dados.

Uma operação simples que podemos fazer é normalizar os valores pela soma, ou seja, definir

$$\mathbf{p}(i) = \frac{\mathbf{r}(i)}{\sum_{i=1}^{C} \mathbf{r}(i)} \tag{1.12}$$

Nesse caso, garantimos que os valores de $\mathbf{p}$ são entre 0 e 1, e também garantimos que a soma dos valores é 1[11]. Isso permite interpretar $\mathbf{p}$ como um vetor contendo as probabilidades da imagem pertencer a cada classe.

Curiosamente, um outro tipo de normalização costuma ser mais utilizada, a chamada *função softmax*, dada por

$$\mathbf{p}(i) = \frac{e^{\mathbf{r}(i)}}{\sum_{i=1}^{C} e^{\mathbf{r}(i)}} \tag{1.13}$$

mas o propósito dela é o mesmo da Equação 1.12, transformar os valores em probabilidades. Por isso é comum que a saída da rede seja normalizada pela função softmax para que seja possível interpretar os valores como probabilidades.

Um *addendum*, em tarefas de classificação em duas classes, chamada de classificação binária, podemos usar o mesmo procedimento, ou seja, ter um modelo cuja saída é um vetor de dois valores $\mathbf{r} = (r_1, r_2)$ e aplicar a função softmax. Por outro lado, também é possível, e muito comum, utilizar um modelo que possui como saída apenas um valor r_1, e considerar que se o valor for positivo a imagem é classificada na classe 1, e se o valor for negativo a imagem é classificada na classe 2. Nesse caso utilizamos a função sigmoide para normalizar os valores entre 0 e 1

$$p_1 = \frac{1}{1 + e^{-r_1}} \tag{1.14}$$

Segundo essa equação, quando $r_1 < 0$ temos que $0 \leq p_1 < 0.5$ e quando $r_1 > 0$ temos que $0.5 < p_1 \leq 1$. Portanto, o resultado da função pode ser interpretado como sendo a probabilidade de que a imagem seja da classe 1. Se essa probabilidade for maior que 0.5,

---

[11] Utilizaremos a notação $\mathbf{r}(i)$ para representar um elemento do vetor $\mathbf{r}$. Isso porque a notação $\mathbf{r}_i$ já está sendo utilizada para representar a saída associada à imagem i.

classificamos a imagem na classe 1. Portanto, em um problema de classificação binária basta que o modelo retorne um único valor.

Tendo os valores normalizados podemos retornar ao nosso problema original do começo desta seção. Lembrando que temos um conjunto de treinamento composto por uma sequência de n imagens e os respectivos rótulos $s = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots (x_n, y_n)\}$. O nosso modelo é representado por uma função $\mathbf{f}(x; \theta)$, e consideraremos que ele inclui a função softmax e portanto retorna um vetor $\mathbf{p}$ de tamanho C contendo probabilidades para cada classe.

Para cada item x_i pertencente à classe y_i queremos que o vetor $\mathbf{p}_i$ retornado pelo modelo seja o mais próximo possível do "vetor ideal" $\mathbf{q}_i$ dado por um vetor de zeros exceto na posição y_i que possui o valor 1. Para isso, precisamos definir um critério de similaridade entre os vetores. Se tivermos esse critério, será possível otimizarmos o modelo para minimizar o critério.

De longe o critério mais comum utilizado em classificação é a entropia cruzada, do inglês *cross entropy*. Ela é definida para cada imagem i como

$$E_i = -\log(\mathbf{p}_i(y_i)) \tag{1.15}$$

Na equação, $\mathbf{p}_i(y_i)$ representa o valor na posição y_i do vetor $\mathbf{p}_i$. Em outras palavras, a entropia cruzada para a imagem i é o valor na y_i-ésima posição do vetor de probabilidades retornado pelo modelo. Quanto mais próximo de 1 for o valor de $\mathbf{p}_i(y_i)$, mais próximo de zero serão os demais valores, pois a soma deve ser 1. Portanto, quanto maior for o valor de $\mathbf{p}_i(y_i)$, mais próximo o vetor $\mathbf{p}_i$ estará do vetor ideal $\mathbf{q}_i$!

A entropia cruzada para todas as imagens da base s é então calculada como

$$E(s) = -\sum_{i}^{n} \log(\mathbf{p}_i(y_i)) \tag{1.16}$$

Lembrando que $\mathbf{p}$ é a saída do nosso modelo, podemos reescrever a equação como

$$E(s; \theta) = -\sum_{i}^{n} \log(\mathbf{f}(x_i; \theta)(y_i)) \tag{1.17}$$

Note que essa equação é basicamente a Equação 1.8. Na seção anterior vimos que a função de verossimilhança é dada pelo negativo do logaritmo da probabilidade. Portanto, a entropia cruzada nada mais é do que a função de verossimilhança calculada para as probabilidades das classes "corretas" da base. Portanto, o procedimento de otimização para encontrar o modelo

ideal $\mathbf{f}(x;\theta)$ é o mesmo que o visto no Algoritmo 1 da Seção I B. Também é importante notar que $E(s;\theta)$ representa um único valor para toda a base de dados.

**Equação geral da entropia cruzada*

Na discussão acima consideramos que a distribuição que queremos modelar consiste no vetor $\mathbf{q}$ possuindo apenas valores 0 e 1. Mas em geral é possível considerar que o vetor pode possuir qualquer valor de probabilidade para as classes. Isso ocorre em tarefas de classificação multirrótulo, na qual queremos associar diversas possíveis classes às imagens, e também na técnica chamada de *label smoothing*, que consiste em associar um valor menor do que 1 à classe correta, com a ideia de que o modelo não precisa ser perfeito, basta que a classe correta seja a mais provável.

Nesse caso, a entropia cruzada de uma imagem i é dada por

$$E_i = -\sum_{i}^{C} \mathbf{q}(y_i) \log(\mathbf{p}_i(y_i)) \tag{1.18}$$

A entropia cruzada pode ser entendida como uma medida de dissimilaridade entre as distribuições. Quando $\mathbf{p}_i(y_i) \approx 0$, o termo $-\log(\mathbf{p}_i(y_i))$ tenderá a um valor muito alto. Mas se $\mathbf{q}(y_i)$ também for próximo de zero, os termos "se cancelam" e a entropia resulta em um valor baixo.

II. CONCEITOS DE CÁLCULO DIFERENCIAL (MÓDULO 2)

Nesta seção desenvolveremos os conceitos necessários para calcular o gradiente da função de verossimilhança $\mathcal{L}(s;\theta)$.

A. Derivada de funções univariadas

A derivada de uma função $f(x)$[12] indica a *taxa de variação* da função. Por exemplo, suponha que estamos enchendo uma garrafa de água em um bebedouro, e a função $f(t)$ representa o volume de água na garrafa ao longo do tempo. A derivada de $f(t)$, representada por df/dt, indica a taxa de variação da quantidade de água na garrafa, ou seja, quão rápido a garrafa está enchendo. Essa taxa de variação também representa o fluxo de água do bebedouro.

Considere a função $f(x) = 3x$. Para cada unidade 1 que a variável x é aumentada, a função $f(x)$ cresce por uma quantia 3. Por exemplo, se $x_1 = 3$ temos que $f(x_1) = 9$. Se $x_2 = x_1 + 1 = 4$, temos que $f(x_2) = 12$ e portanto $f(x_2) = f(x_1) + 3$. Por isso, a derivada de $f(x)$ é dada por $df/dx = 3$. A Tabela I apresenta algumas derivadas relevantes.

Função	Derivada
$f(x) = a$	$df/dx = 0$
$f(x) = x$	$df/dx = 1$
$f(x) = ax + b$	$df/dx = a$
$f(x) = x^2$	$df/dx = 2x$
$f(x) = e^x$	$df/dx = e^x$

Tabela I: Algumas derivadas relevantes. a e b são constantes.

Em geral as derivadas que encontramos ao trabalhar com redes neurais são simples. A dificuldade aparece no fato de que em geral as funções envolvidas possuem várias variáveis e são compostas, isto é, funções são aplicadas no resultado de outras funções sucessivamente.

[12] A função $f(x)$ é chamada de univariada porque possui apenas uma variável.

B. Derivada de funções univariadas compostas

A saída de uma função f pode ser utilizada como entrada de outra função g, isso é chamado de composição de funções. Nesse caso, podemos escrever $h(x) = g(f(x))$. Mais importante, dado uma função f, podemos *decompor* essa função em funções intermediárias. Por exemplo, a função $f(x) = (x-5)^2 + 8$ pode ser escrita como $f(g) = g^2 + 8$, sendo que $g(x) = x - 5$. Podemos ir além e escrever $f(x)$ como $f(h) = h + 8$, onde $h(g) = g^2$.

Para calcular a derivada de uma função complexa, basta escrevermos cada parte da função como uma nova função, e derivar cada função à parte. O produto de todas as derivadas calculadas resulta na derivada da função original. Essa é a chamada *regra da cadeia*. Por exemplo, se quisermos encontrar a derivada da função $f(x) = (x-5)^2+8$, podemos escrever $f(h) = h + 8$, $h(x) = (x-5)^2$. Nesse caso, a derivada de f em relação à x será dada por

$$\frac{df}{dx} = \frac{df}{dh}\frac{dh}{dx} \tag{2.1}$$

Calculamos cada derivada à parte. No cálculo de df/dh, tratamos h como uma variável de f, o que resulta em $df/dh = 1$. Para calcular dh/dx podemos escrever h como $h(g) = g^2$, $g(x) = x - 5$, e portanto

$$\frac{dh}{dx} = \frac{dh}{dg}\frac{dg}{dx} \tag{2.2}$$

Para calcular dh/dg usamos a regra da potência, obtendo $dh/dg = 2g$. Temos também que $dg/dx = 1$. Com isso, conseguimos calcular o valor de df/dx. Em resumo, temos a seguinte decomposição da função $f(x) = (x-5)^2 + 8$:

$$\begin{aligned} g(x) = x - 5 \quad &\rightarrow \quad dg/dx = 1 \\ h(g) = g^2 \quad &\rightarrow \quad dh/dg = 2g \\ f(h) = h + 8 \quad &\rightarrow \quad df/dh = 1 \end{aligned}$$

A derivada de $f(x)$ é dada por

$$\begin{aligned}\frac{df}{dx} &= \frac{df}{dh}\frac{dh}{dg}\frac{dg}{dx} \\ &= 1 \times 2g \times 1 \\ &= 2g \\ &= 2(x-5) \\ &= 2x - 10\end{aligned} \tag{2.3}$$

Um exemplo mais complexo, podemos derivar a função $f(x) = a(x-b)^2 - c$, onde a, b e c são constantes. Nesse caso temos

$$\begin{aligned} l(x) = x - b \quad &\rightarrow \quad dl/dx = 1 \\ g(l) = l^2 \quad &\rightarrow \quad dg/dl = 2l \\ h(g) = ag \quad &\rightarrow \quad dh/dg = a \\ f(h) = h - c \quad &\rightarrow \quad df/dh = 1 \end{aligned}$$

A derivada é dada por

$$\begin{aligned}\frac{df}{dx} &= \frac{df}{dh}\frac{dh}{dg}\frac{dg}{dl}\frac{dl}{dx} \\ &= 1 \times a \times 2l \times 1 \\ &= a2(x-b)\end{aligned} \tag{2.4}$$

Portanto, qualquer função, por mais complexa que seja, pode ser derivada se soubermos derivar cada operação individual realizada pela função. No exemplo acima, basta sabermos derivar uma função linear do tipo $f(x) = ax + b$ e uma função quadrática do tipo $f(x) = x^2$.

Agora vamos ver um exemplo no qual temos uma sequência de funções aplicadas em uma entrada. Uma rede neural funciona dessa forma. Vamos considerar as seguintes operações:

$$\begin{aligned} a_1(x) &= w_1 x + b_1 \\ a_2(a_1) &= w_2 a_1 + b_2 \\ a_3(a_2) &= w_3 a_2 + b_3 \\ a_4(a_3) &= (a_3 - w_4)^2 \end{aligned} \tag{2.5}$$

onde w_i e b_i são constantes e a_i são funções que recebem uma entrada e geram uma saída[13]. Queremos encontrar o valor de da_4/dx, ou seja, a derivada da saída em relação à entrada. Para isso, decompomos a função em operações atômicas. Iremos definir alguns valores intermediários q_i para as operações:

$$\begin{aligned}
q_1 &= w_1 x && \rightarrow && dq_1/dx = w_1 \\
a_1 &= q_1 + b_1 && \rightarrow && da_1/dq_1 = 1 \\
q_2 &= w_2 a_1 && \rightarrow && dq_2/da_1 = w_2 \\
a_2 &= q_2 + b_2 && \rightarrow && da_2/dq_2 = 1 \\
q_3 &= w_3 a_2 && \rightarrow && dq_3/da_2 = w_3 \\
a_3 &= q_3 + b_3 && \rightarrow && da_3/dq_3 = 1 \\
q_4 &= a_3 - w_4 && \rightarrow && dq_4/da_3 = 1 \\
a_4 &= q_4^2 && \rightarrow && da_4/dq_4 = 2q_4
\end{aligned}$$

A derivada é calculada como

$$\begin{aligned}
\frac{da_4}{dx} &= \frac{a_4}{dq_4}\frac{dq_4}{da_3}\frac{da_3}{dq_3}\frac{dq_3}{da_2}\frac{da_2}{dq_2}\frac{dq_2}{da_1}\frac{da_1}{dq_1}\frac{dq_1}{dx} \\
&= 2q_4 w_3 w_2 w_1
\end{aligned} \tag{2.6}$$

Note uma questão interessante. Para calcular a saída da função a_4 aplicamos as funções a_1, a_2, a_3 e a_4 em ordem. Para calcular a derivada da saída em relação à entrada multiplicamos as derivadas na *ordem contrária*. Por isso esse algoritmo é conhecido como *backpropagation*. Temos a operação *forward* que calcula o resultado da função, e a operação *backward* que faz o caminho contrário e calcula a derivada da saída em relação à entrada.

As bibliotecas Pytorch, Tensorflow e Jax implementam a chamada *diferenciação automática*. Essa técnica consiste em dividir qualquer operação complexa em operações atômicas simples de derivar. Para calcular a derivada de uma expressão complexa, basta multiplicar todas as derivadas das operações atômicas.

---

[13] Essas funções serão as camadas de uma rede neural.

C. Derivada de funções multivariadas

Uma função de duas variáveis $f(x, y)$ possui duas derivadas: em relação às variáveis x e y. Chamamos essas derivadas de *parciais*, pois cada derivada descreve parcialmente a taxa de variação da função. Representamos as derivadas parciais por $\partial f/\partial x$ e $\partial f/\partial y$. Por exemplo, para a função $f(x, y) = xy + x$ temos

$$\frac{\partial f}{\partial x} = y + 1 \tag{2.7}$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = x \tag{2.8}$$

Em geral, uma função pode depender de m variáveis. Nesse caso, representamos as variáveis por um vetor $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots x_m)$[14], e escrevemos a função como $f(\mathbf{x})$. Essa função admite m derivadas parciais. O conjunto de derivadas parciais de uma função é chamado de gradiente, e é representado por ∇f:

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots \frac{\partial f}{\partial x_m} \right) \tag{2.9}$$

O gradiente é sempre um vetor, e indica a direção de maior crescimento de uma função. A magnitude do gradiente (tamanho do vetor) indica a taxa de crescimento da função na direção do gradiente. Por exemplo, considere a função $f(\mathbf{x}) = 6x_1 + 3x_2$. Essa função varia a uma taxa igual a 6 em relação à x_1 e a uma taxa igual a 3 em relação à x_2. Com isso, dizemos que a função varia a uma taxa de 6 na direção de x_1 e uma taxa de 3 na direção de x_2. Isso dito, qual a direção na qual a função varia na maior taxa possível? Essa direção é representada pelo vetor $(6, 3)$, e a taxa de variação nessa direção é dada pela magnitude do vetor, que é $\sqrt{6^2 + 3^2} \approx 6.7$.

É importante salientar, enquanto que a entrada de uma função pode ser múltiplas variáveis (um vetor), *a saída de uma função escalar sempre é um único valor.*

No restante desta seção analisaremos um tipo particular de função que é relevante para redes neurais, que são funções do tipo

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_m x_m \tag{2.10}$$

---

[14] Vetores sempre serão representados utilizando a versão em negrito de um caractere. Note a diferença entre x e $\mathbf{x}$. Caso tenha dúvidas se um caractere representa um vetor ou não, veja o Apêndice A

Essa função possui m parâmetros $\mathbf{w} = (w_1, w_2, \ldots, w_m)$ e recebe como entrada um vetor de m variáveis $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_m)$. A saída da função é uma *combinação linear* dos valores $\mathbf{x}$ ponderados pelos valores $\mathbf{w}$. Essa função pode ser escrita de duas outras formas equivalentes

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{m} w_i x_i \tag{2.11}$$

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \mathbf{w}\mathbf{x} \tag{2.12}$$

Na Equação 2.12 escrevemos a função como um *produto escalar* dos vetores $\mathbf{x}$ e $\mathbf{w}$. Essa é uma notação muito mais compacta que vai facilitar as contas quando trabalharmos com matrizes.

Como vimos, o gradiente de $f(\mathbf{x}, \mathbf{w})$ em relação à $\mathbf{x}$[15] consiste nas derivadas parciais $\partial f / \partial x_i$ em relação a cada variável x_i. Portanto temos

$$\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \left(\frac{\partial f(\mathbf{x}, \mathbf{w})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\mathbf{x}, \mathbf{w})}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial f(\mathbf{x}, \mathbf{w})}{\partial x_m} \right) \tag{2.13}$$

$$= (w_1, w_2, \ldots, w_m) \tag{2.14}$$

$$= \mathbf{w} \tag{2.15}$$

É interessante que o uso de vetores permite escrever o cálculo do gradiente de forma bem similar ao caso de uma função de apenas uma variável, isto é, o gradiente "elimina" a variável $\mathbf{x}$.

Note que também podemos tratar o vetor $\mathbf{w}$ como sendo as variáveis da função, e considerar a entrada $\mathbf{x}$ como uma constante. Isso possibilita calcular o gradiente em relação aos parâmetros $\mathbf{w}$:

$$\nabla_{\mathbf{w}} f(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = (x_1, x_2, \ldots, x_m) \tag{2.16}$$

$$= \mathbf{x} \tag{2.17}$$

A notação em vetores facilita a representação de cálculos quando temos múltiplas variáveis, mas em redes neurais as operações em geral envolvem o produto de uma matriz por

---

[15] Para deixar explícito a variável que está sendo usada para calcular o gradiente, em alguns casos utilizaremos a notação $\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}, \mathbf{w})$.

um vetor. Por isso teremos que aprimorar um pouco a nossa notação para incluir o uso de matrizes. Vamos definir dois tipos de vetores: vetores linha e vetores coluna. Um vetor linha é exatamente o vetor que usamos até agora, os seus valores são representados um ao lado do outro na direção horizontal. No vetor coluna, representamos o vetor com um valor abaixo do outro, na direção vertical. Por exemplo, podemos transformar o vetor $\mathbf{x}$ em um vetor coluna fazendo

$$\mathbf{x}^T = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} \tag{2.18}$$

O símbolo ^{T} representa o transposto do vetor $\mathbf{x}$. A ideia é que um vetor linha irá representar uma *linha* de uma matriz e um vetor coluna irá representar uma *coluna*. De forma alternativa, podemos pensar que um vetor linha é uma matriz de uma linha, e um vetor coluna uma matriz de uma coluna. Isso irá facilitar a construção de matrizes com os resultados dos nossos cálculos. No restante desta seção, todos os vetores serão linha ou coluna, e teremos que tomar cuidado para que as operações que fazemos com esses vetores seja válida. Por exemplo, *o produto* $\mathbf{wx}$ *não é mais válido!* Esse produto representa multiplicar uma matriz de tamanho $1 \times m$ por outra matriz de tamanho $1 \times m$. Pela regra de multiplicação matricial, o número de colunas da primeira matriz deve ser igual ao número de linhas da segunda matriz.

Para calcular o valor de $f(\mathbf{x}, \mathbf{w})$ agora temos que utilizar

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \mathbf{w}\mathbf{x}^T \tag{2.19}$$

ou de forma equivalente podemos utilizar

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \mathbf{x}\mathbf{w}^T \tag{2.20}$$

Na Equação 2.19 temos o produto de uma matriz $1 \times m$ por outra matriz $m \times 1$. Então está tudo certo, e o resultado é dado por uma matriz de tamanho 1×1, que é simplesmente um valor escalar.

1. *Camada linear de uma rede neural

A camada linear de uma rede neural consiste em um *conjunto* de n funções, cada uma aplicada em um mesmo vetor de m variáveis de entrada. Novamente, as variáveis de entrada são representadas por um vetor linha $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_m)$. Cada função realiza a combinação linear das variáveis de entrada e possui parâmetros próprios. Iremos representar uma função específica i como $f_i(\mathbf{x}, \mathbf{w}_i)$. Portanto podemos escrever as operações realizadas por uma camada linear[16] como

$$\begin{aligned} f_1(\mathbf{x}, \mathbf{w}_1) &= w_{11}x_1 + w_{12}x_2 + \cdots + w_{1m}x_m \\ f_2(\mathbf{x}, \mathbf{w}_2) &= w_{21}x_1 + w_{22}x_2 + \cdots + w_{2m}x_m \\ &\vdots \\ f_n(\mathbf{x}, \mathbf{w}_n) &= w_{n1}x_1 + w_{n2}x_2 + \cdots + w_{nm}x_m \end{aligned} \tag{2.21}$$

Na equação utilizamos w_{ij} para representar os parâmetros das funções. w_{ij} representa o j-ésimo parâmetro da i-ésima função.

Podemos representar esse sistema de n equações como um produto matriz-vetor. Para isso, basta definirmos uma matriz W[17]

$$W = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & \ldots & w_{1m} \\ w_{21} & w_{22} & \ldots & w_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{n1} & w_{n2} & \ldots & w_{nm} \end{bmatrix} \tag{2.22}$$

Tendo a matriz W, podemos escrever o conjunto de equações 2.21 como

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, W) = W\mathbf{x}^T \tag{2.23}$$

A Equação 2.23 representa uma operação bem complexa. Ela representa o resultado da aplicação de um conjunto de n funções, cada uma com m parâmetros em um vetor de m variáveis de entrada. É importante salientar que, como temos várias funções, o resultado

---

[16] Nesta discussão desconsideraremos o chamado *bias* da camada, que consiste em somar um valor constante b_i em cada equação $f_i(\mathbf{x}, \mathbf{w}_i)$.

[17] Matrizes serão sempre representadas por letras maiúsculas.

da equação será um vetor, pois temos o produto de uma matriz de tamanho $n \times m$ por um vetor de tamanho $m \times 1$. O resultado terá tamanho $n \times 1$ e será um vetor coluna.

Uma forma equivalente da Equação 2.23 é

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, W) = \mathbf{x}W^T \tag{2.24}$$

Note que nesse caso o resultado será um vetor linha.[18]

2. *Derivada de uma camada linear de uma rede neural[19]

Considere o conjunto de funções $\mathbf{f}(\mathbf{x}, W) = \mathbf{x}W^T$ representando uma camada de uma rede neural. Queremos calcular a derivada das funções em relação a cada parâmetro w_{ij}. Isso permitirá otimizar a rede neural para realizar qualquer tarefa (como descrito na Seção I). Utilizando as equações 2.21 vemos por exemplo que

$$\frac{df_1(\mathbf{x}, \mathbf{w}_1)}{\partial w_{11}} = x_1 \tag{2.25}$$

De maneira geral, a derivada da função $f_i(\mathbf{x}, \mathbf{w}_i)$ em relação ao parâmetro w_{ij} é dada por

$$\frac{df_i(\mathbf{x}, \mathbf{w}_i)}{\partial w_{ij}} = x_j \tag{2.26}$$

A derivada de uma função $f_i(\mathbf{x}, \mathbf{w}_i)$ em relação a um parâmetro w_{kj} que não pertence à função ($k \neq i$) é igual a 0. Com isso, a derivada das funções pode ser escrita como

$$\frac{d\mathbf{f}(\mathbf{x}, W)}{dw_{ij}} = \left(\frac{df_1(\mathbf{x}, \mathbf{w}_1)}{dw_{ij}}, \frac{df_2(\mathbf{x}, \mathbf{w}_2)}{dw_{ij}}, \ldots, \frac{df_i(\mathbf{x}, \mathbf{w}_i)}{dw_{ij}}, \ldots, \frac{df_n(\mathbf{x}, \mathbf{w}_n)}{dw_{ij}} \right) \tag{2.27}$$

$$= (0, 0, \ldots, x_j, \ldots, 0) \tag{2.28}$$

$$= \boldsymbol{\delta}_i x_j \tag{2.29}$$

O vetor $\boldsymbol{\delta}_i$ é formado por n valores 0 exceto na posição i, na qual ele possui o valor 1[20].

---

[18] *Essa forma de multiplicação é comum em bibliotecas como o Pytorch pois a entrada da camada é formada por diversos vetores $\mathbf{x}$ (um batch). Manter a entrada no lado esquerdo da equação garante que as dimensões das matrizes continuam válidas para o produto.

[19] Esta seção é bem complexa e envolve conceitos avançados de cálculo multivariado. Mas o entendimento das equações possibilita entender todo o processo de treinamento de uma rede neural. Portanto, é importante que seja feito um esforço para entender o conteúdo. Para isso, também é importante que o conteúdo das seções anteriores esteja bem entendido.

[20] Uma forma de interpretar a Equação 2.29 é que os índices ij de w_{ij} representam a seleção de um valor na posição j de $\mathbf{x}$ e a alocação desse valor na posição i de um novo vetor. Utilizando numpy essa operação seria `v=np.zeros(n); v[i]=x[j]`.

Também será necessário calcularmos a derivada de cada função em $\mathbf{f}(\mathbf{x}, W)$ em relação aos valores de $\mathbf{x}$. Podemos fazer o processo passo-a-passo utilizando as equações 2.21. Por exemplo, a derivada da função $f_1(\mathbf{x}, \mathbf{w}_1)$ em relação à variável x_1 é dada por

$$\frac{\partial f_1(\mathbf{x}, \mathbf{w}_1)}{\partial x_1} = w_{11} \tag{2.30}$$

De forma geral, a derivada da função $f_i(\mathbf{x}, \mathbf{w}_i)$ em relação à variável x_j é dada por

$$\frac{\partial f_i(\mathbf{x}, \mathbf{w}_i)}{\partial x_j} = w_{ij} \tag{2.31}$$

Agrupando todas as derivadas em uma matriz temos

$$\frac{d\mathbf{f}(\mathbf{x}, W)}{d\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(\mathbf{x},\mathbf{w}_1)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(\mathbf{x},\mathbf{w}_1)}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1(\mathbf{x},\mathbf{w}_1)}{\partial x_m} \\ \frac{\partial f_2(\mathbf{x},\mathbf{w}_2)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\mathbf{x},\mathbf{w}_2)}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2(\mathbf{x},\mathbf{w}_2)}{\partial x_m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(\mathbf{x},\mathbf{w}_n)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n(\mathbf{x},\mathbf{w}_n)}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n(\mathbf{x},\mathbf{w}_n)}{\partial x_m} \end{bmatrix} \tag{2.32}$$

Essa matriz é chamada de *matriz Jacobiana*. Ela é usada sempre que temos a derivada de um conjunto de valores (os resultados das funções $\mathbf{f}(\mathbf{x}, W)$) em relação a um outro conjunto de valores (o vetor de entrada $\mathbf{x}$). Em outras palavras, ela representa a derivada de um vetor em relação a outro vetor![21]. Mas calculando cada derivada dessa matriz vemos que a matriz é exatamente igual a W. Portanto temos que

$$\frac{d\mathbf{f}(\mathbf{x}, W)}{d\mathbf{x}} = W \tag{2.33}$$

Resumindo o que derivamos nesta seção, dado um conjunto de funções lineares $\mathbf{f}(\mathbf{x}, W)$ representando uma camada linear de uma rede neural, temos que

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, W) = \mathbf{x}W^T \tag{2.34}$$

$$\frac{d\mathbf{f}(\mathbf{x}, W)}{d\mathbf{x}} = W \tag{2.35}$$

$$\frac{d\mathbf{f}(\mathbf{x}, W)}{dw_{ij}} = \boldsymbol{\delta}_i x_j \tag{2.36}$$

[21] Usualmente a matriz Jacobiana é representada pelo símbolo J em artigos e livros.

Uma propriedade interessante, e muito importante, de redes neurais é que dado os parâmetros W de uma camada, o resultado da camada é computado pela matriz W^T e a derivada da saída em relação à entrada é simplesmente o transposto dessa matriz. Dessa forma, o cálculo da saída da camada e da derivada são praticamente idênticos.

D. *Derivada de funções multivariadas compostas

Na seção anterior consideramos uma camada linear de uma rede neural. Tipicamente, uma rede neural é composta por L camadas. Representaremos por $\mathbf{f}^l(\mathbf{x}, W_l)$ a l-ésima camada de uma rede neural. A rede neural em si será representada por $\mathcal{N}(x; \mathbb{W})$. O símbolo $\mathbb{W}$ representa o conjunto de todos os parâmetros de uma rede neural, ou seja, o conjunto de valores de todas as matrizes $W_1, W_2, \ldots, W_L$.

Uma rede neural consiste em aplicar sucessivamente cada camada em dados de entrada. A l-ésima camada recebe a saída de camada $l-1$. Por exemplo, a aplicação da primeira camada da rede dará um resultado $\mathbf{a}_1 = \mathbf{f}^1(\mathbf{x}, W_1)$. Os valores $\mathbf{a}_1$ são chamados de *ativações* da rede. A aplicação da segunda camada nas ativações da primeira dará um resultado $\mathbf{a}_2 = \mathbf{f}^2(\mathbf{a}_1, W_2)$, e assim por diante, até a última camada.

Em qualquer tarefa de treinamento de rede neural, o objetivo é otimizar os parâmetros $\mathbb{W}$ de forma que a rede dê um resultado esperado de acordo com o conjunto de treinamento. Para isso é necessário encontrar a derivada da saída da rede $\mathcal{N}(x; \mathbb{W})$ em relação aos parâmetros $\mathbb{W}$. Essas derivadas são calculadas pela regra da cadeia.

A derivada da saída da rede em relação a um parâmetro w_{ij}^l[22] é calculada como

$$\frac{\partial \mathcal{N}(x; \mathbb{W})}{\partial w_{ij}^l} = \frac{d\mathbf{a}_L}{d\mathbf{a}_{L-1}} \frac{d\mathbf{a}_{L-1}}{d\mathbf{a}_{L-2}} \cdots \frac{d\mathbf{a}_{l+1}}{d\mathbf{a}_l} \frac{d\mathbf{a}_l}{dw_{ij}^l} \tag{2.37}$$

Cada termo $d\mathbf{a}_i / d\mathbf{a}_{i-1}$ é uma matriz Jacobiana que descreve a variação da saída da camada em relação à entrada, ou seja,

$$\frac{\partial \mathcal{N}(x; \mathbb{W})}{\partial w_{ij}^l} = J_L J_{L-1} \ldots J_{l+1} \frac{d\mathbf{a}_l}{dw_{ij}^l} \tag{2.38}$$

onde J_i são as matrizes Jacobianas das camadas. Para camadas lineares, cada elemento

[22] Estamos ficando sem espaço para símbolos! Para deixar claro, l representa uma camada e ij representa a posição na linha i e coluna j da matriz W_l contendo os parâmetros da camada.

do gradiente pode ser calculado pelas equações 2.35 e 2.36, começando da derivada mais à esquerda.

Como descrito na Seção I, a partir da saída da rede é calculada a função de verossimilhança $\mathcal{L}(x; \mathbb{W})$ para medir a performance da rede, e o processo de otimização consiste em calcular o gradiente da função em relação aos parâmetros. O gradiente é formado pela derivada em relação à cada parâmetro w_{ij}^l. Portanto temos que

$$\frac{\partial \mathcal{L}(x; \mathbb{W})}{\partial w_{ij}^l} = \frac{\partial \mathcal{L}(x; \mathbb{W})}{d\mathbf{a}_L} \frac{\partial \mathcal{N}(x; \mathbb{W})}{\partial w_{ij}^l} \tag{2.39}$$

Note que $\partial \mathcal{L}(x; \mathbb{W}) / \partial w_{ij}^l$ é um valor, pois estamos calculando a derivada de um valor em relação a um outro valor. Para interpretar essa equação, no caso de camadas lineares podemos reescrevê-la como

$$\frac{\partial \mathcal{L}(x; \mathbb{W})}{\partial w_{ij}^l} = \nabla_{\mathbf{a}_L} \mathcal{L}(x; \mathbb{W}) J_L J_{L-1} \dots J_{l+1} \frac{d\mathbf{a}_l}{dw_{ij}^l} \tag{2.40}$$

$$= \nabla_{\mathbf{a}_L} \mathcal{L}(x; \mathbb{W}) W_L W_{L-1} \dots W_{l+1} \boldsymbol{\delta}_i^T a^{l-1} \tag{2.41}$$

Portanto, para encontrar as derivadas, primeiramente é calculado o gradiente da função de verossimilhança em relação à saída da rede, o que resulta em um vetor. Em sequência, é realizada uma série de multiplicações entre vetores e matrizes. Por fim, o vetor $\boldsymbol{\delta}_i$ seleciona uma posição específica do resultado, que é multiplicado pelo valor de entrada da camada a_j^{l-1}[23][24].

Calculamos a Jacobiana apenas de camadas lineares. Em geral, após cada camada linear de uma rede há uma camada não linear. Mas todo o processo de calcular a saída da rede e as derivadas é o mesmo. Basta que a matriz Jacobiana da camada seja adicionada à Equação 2.38.

É importante salientar que todo esse processo é feito de forma totalmente automatizada por bibliotecas como Pytorch, Tensorflow e Jax. Mas conhecer o funcionamento do processo ajuda a entender alguns conceitos importantes. Por exemplo, como todo o processo envolve multiplicações matriciais, ele é altamente paralelizável. Vemos também que para calcular o gradiente de uma camada linear é preciso armazenar a entrada da camada. Isso implica que

---

[23] A primeira camada possui índice $l = 1$, nesse caso $a_j^{l-1} = x_j$, que é a entrada da rede.

[24] Uma implementação da Equação 2.41 pode ser encontrada em neste endereço.

todas as ativações de entrada de uma camada linear são armazenadas quando uma rede é aplicada em um dado de entrada, o que causa um grande uso de memória. Mas após o cálculo do gradiente da camada l as ativações das camadas posteriores não são mais necessárias e é possível desalocar os valores.

III. REGULARIZAÇÃO E WEIGHT DECAY (MÓDULO 5)

A regularização L2 consiste em adicionar uma penalidade na função de loss para que os parâmetros do modelo não tenham valores muito altos. A ideia é que valores altos de parâmetros possibilitam derivadas altas na função, o que facilita que a função tenha um sobreajuste nos dados de treinamento. Ao forçar que os parâmetros tenham valores pequenos, a função tenderá a ser mais suave, o que tende a levar a uma melhor generalização.

A regularização L2 consiste em definir a loss

$$L = E_{ce} + \lambda \sum_i w_i^2 \tag{3.1}$$

onde E_{ce} é a entropia cruzada usual e λ uma constante. O segundo termo da equação representa uma penalidade caso algum parâmetro seja muito alto. Portanto, é bem simples implementar a regularização L2. Mas podemos fazer uma implementação ainda mais eficiente se notarmos que

$$\nabla L(\mathbf{w}) = \nabla E_{ce}(\mathbf{w}) + 2\lambda \mathbf{w} \tag{3.2}$$

Isto é, o gradiente da loss é dado pelo gradiente usual da entropia cruzada somado ao termo $2\lambda\mathbf{w}$. O método gradiente descendente consiste em realizar a otimização

$$\theta^* = \theta^* - lr \nabla L(\mathbf{w}) \tag{3.3}$$

$$= \theta^* - lr \nabla E_{ce}(\mathbf{w}) - lr 2\lambda \mathbf{w} \tag{3.4}$$

O termo $-lr2\lambda\mathbf{w}$ representa uma subtração de uma fração do valor de $\mathbf{w}$ a cada passo do gradiente descendente. Isso tem o efeito de manter os parâmetros em valores pequenos. É mais eficiente implementar a regularização L2 como uma simples subtração de uma fração do parâmetro do que utilizar a Equação 3.1 e ter que derivar a loss em relação aos parâmetros. Por isso os otimizadores do Pytorch aceitam como parâmetro o valor de λ, que é chamado de *weight_ decay*.

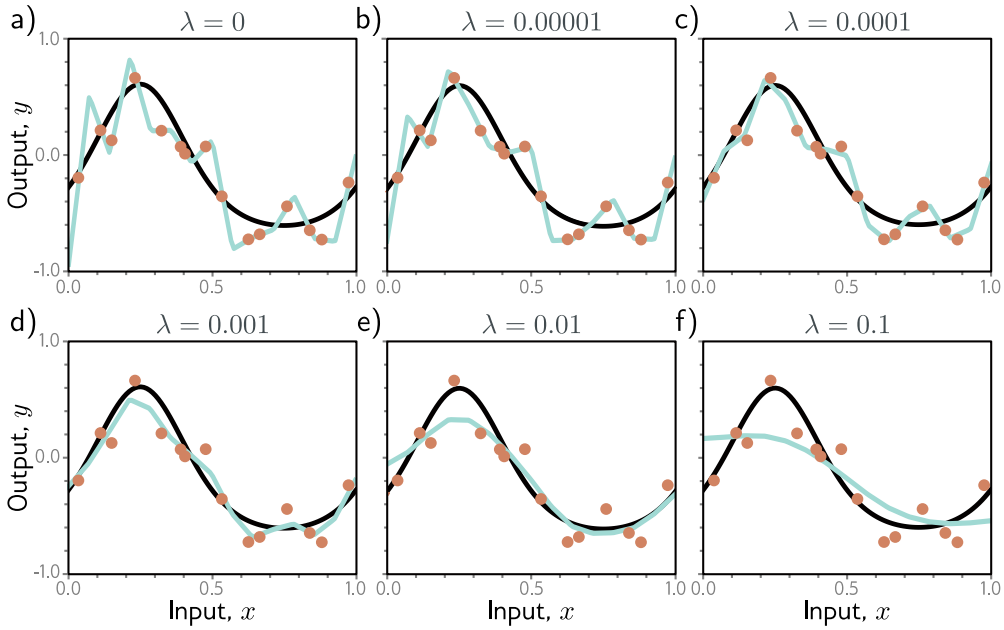


Figura 4: Influência da regularização L2 no ajuste de um modelo. Quanto maior a regularização (valor de λ), mais suave é a função.

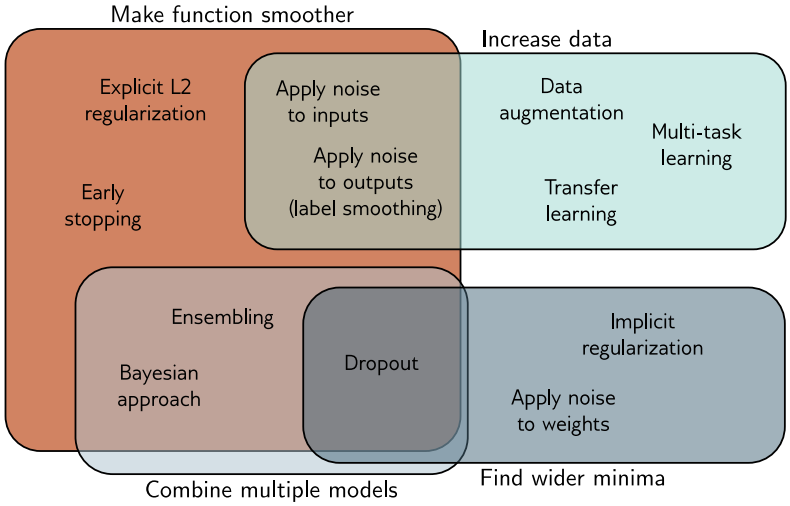


Figura 5: Visão geral de diferentes técnicas de regularização.

IV. FIGURAS SOBRE CONCEITOS DE VISÃO COMPUTACIONAL E APRENDIZADO DE MÁQUINA

A. Figuras sobre regressão linear e logística (módulos 2 e 3)

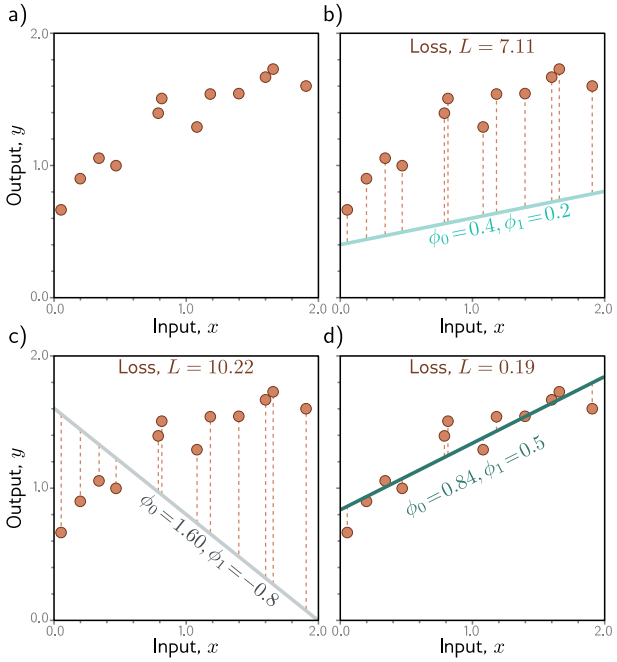


Figura 6: Cada gráfico mostra um exemplo de modelo linear com parâmetros ϕ_0 e ϕ_1. As linhas tracejadas indicam a qualidade do ajuste para cada ponto.

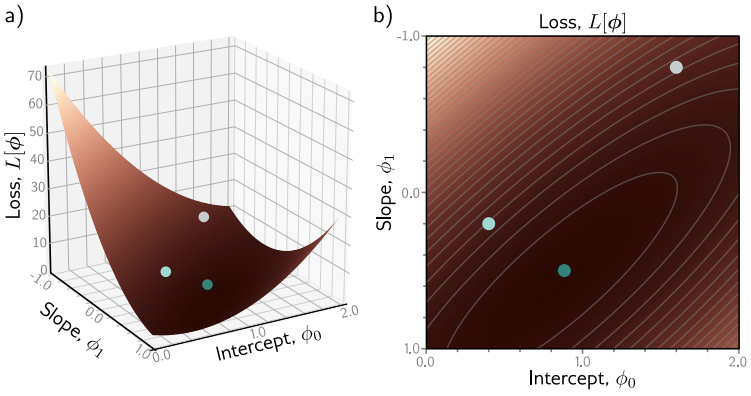


Figura 7: Erro quadrático em função do coeficiente angular e linear do modelo.

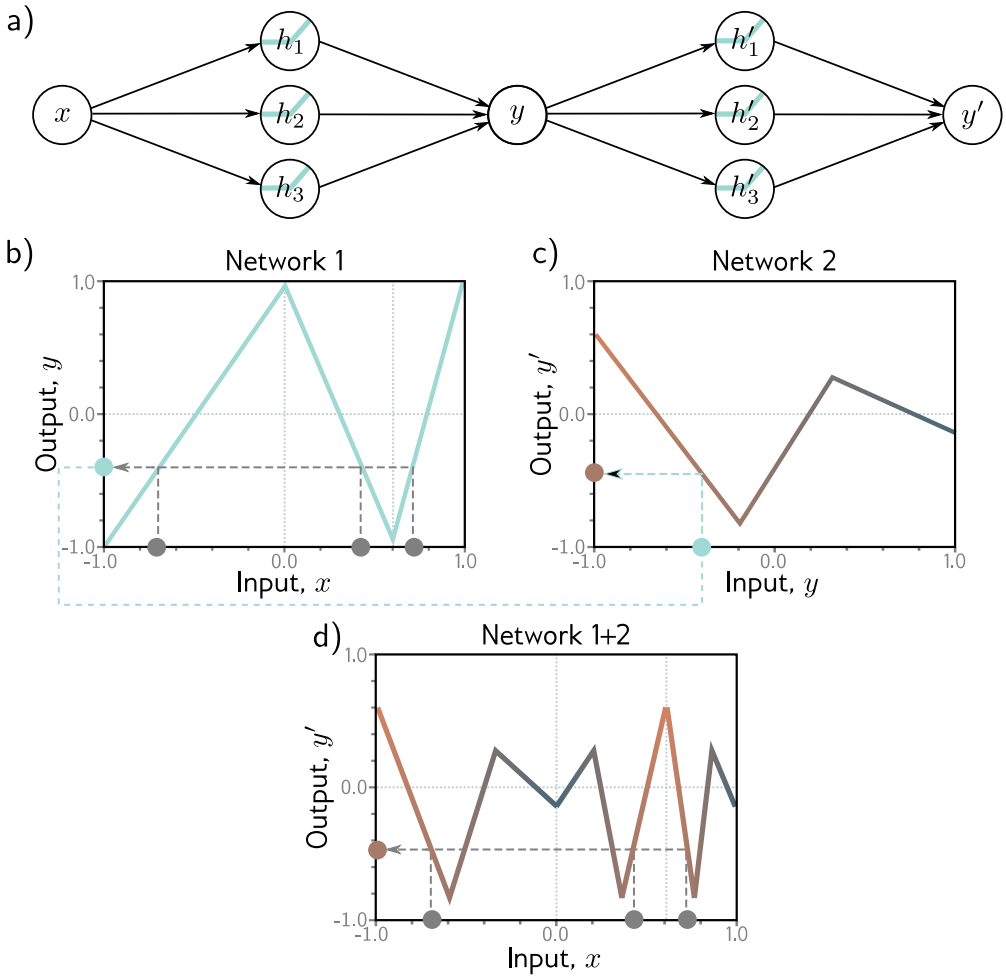


Figura 8: Exemplos de funções que podem ser criadas por camadas de uma rede neural. Cada neurônio dessa rede realiza a operação $f(e) = a_i e + b_i$, onde e é a entrada e a_i e b_i são parâmetros do neurônio i. A subrede 1 (network 1) recebe um valor x e retorna três ativações que são somadas para formar y. A subrede 2 realiza a mesma operação, mas com o valor y de entrada. Cada subrede pode criar no máximo 3 regiões lineares. A combinação das duas redes em uma única rede possibilita criar 9 regiões lineares.

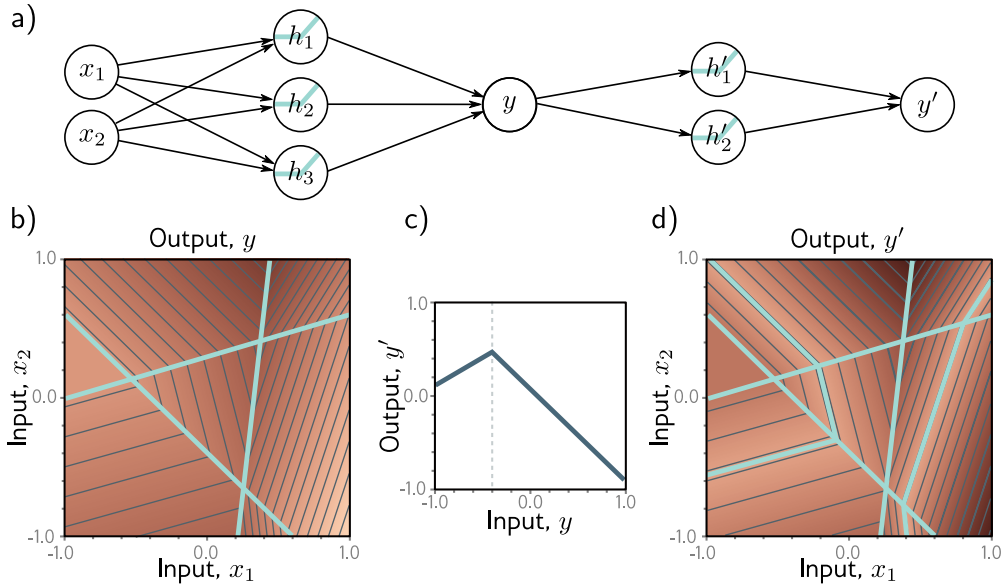


Figura 9: Exemplos de funções criadas quando há dois atributos de entrada. A primeira subrede consegue criar apenas 7 regiões (b). A rede inteira consegue criar muito mais (d).

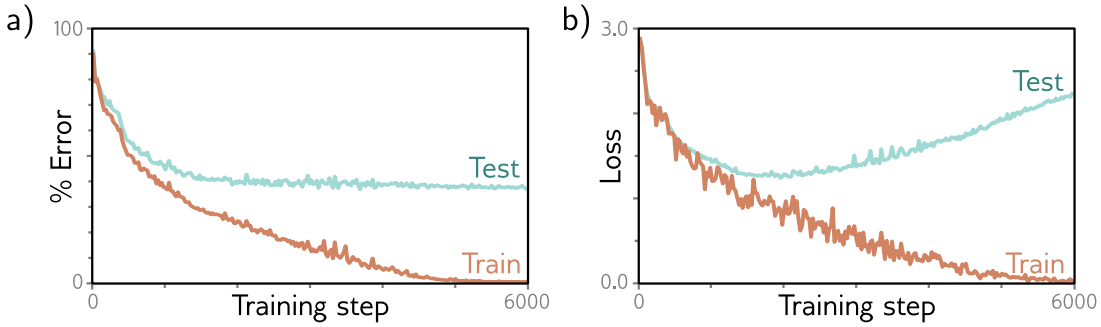


Figura 10: (a) Performance típica de um modelo que convergiu. (b) Performance típica de overfitting. Note que o overfit ocorre quando a loss de teste ou validação começa a aumentar.

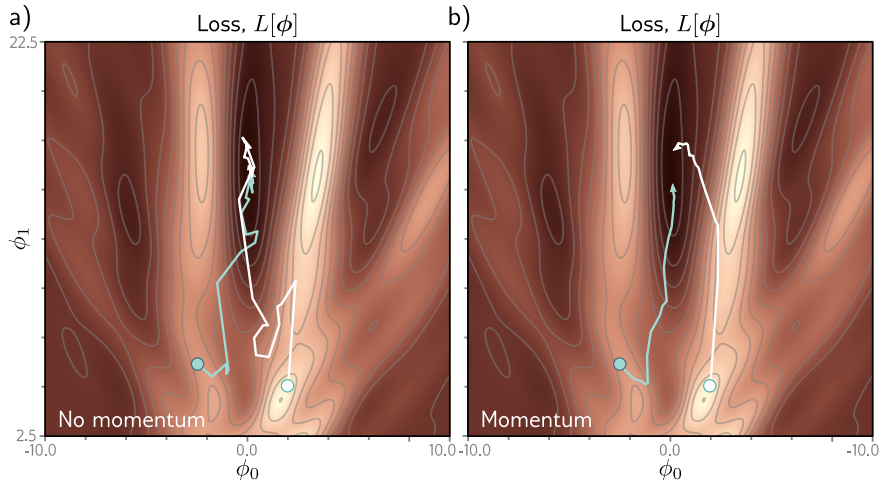


Figura 11: Influência do uso de momento no gradiente descendente. Podemos pensar que quanto maior o momento, o ponto evoluindo ao longo das épocas possui mais "peso" ao percorrer o caminho indicado pelo gradiente.

B. Figuras sobre redes neurais convolucionais (módulos 4, 5, 6 e 7)

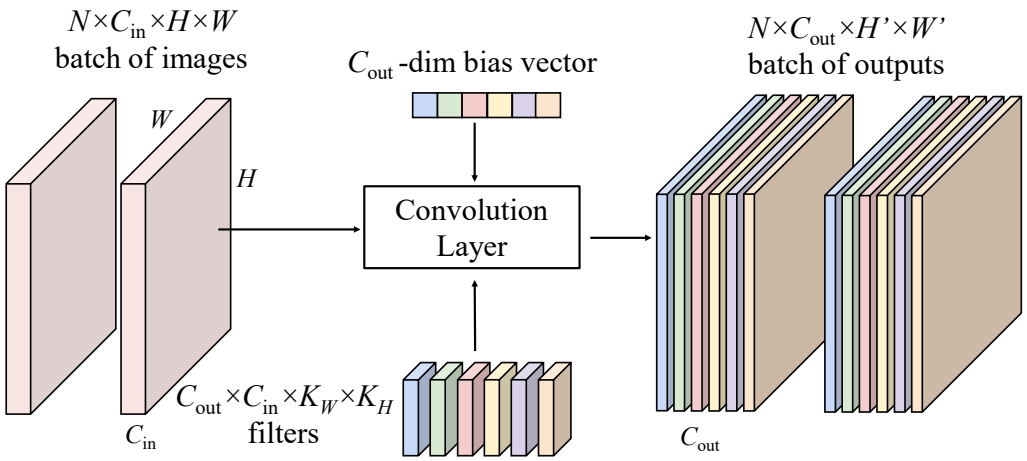


Figura 12: Uma camada de convolução. A entrada da camada é um batch de N imagens. Na ilustração está representado um batch de 2 imagens. Cada imagem possui C_{in} canais e tamanho $H \times W$. O batch é um único tensor com tamanho $N \times C_{in} \times H \times W$. A camada de convolução possui C_{out} filtros, cada um com tamanho $C_{in} \times K_W \times K_H$. A camada também possui um valor de bias para cada filtro. Todos os filtros são alocados em um único tensor de tamanho $C_{out} \times C_{in} \times K_W \times K_H$ (note que a primeira dimensão é o número de filtros). Os valores de bias são um tensor com tamanho C_{out}. Cada filtro "desliza" pelas posições espaciais de cada imagem de entrada, realizando a convolução. O resultado de cada convolução é somado com o respectivo valor de bias. O resultado da camada é um batch de N imagens. Cada imagem possui C_{out} canais e tamanho $H' \times W'$. O tamanho da imagem de saída depende do padding usado e do stride do filtro. O número de canais C_{out} em geral é bem alto, por exemplo, 64, 128, 256, etc.

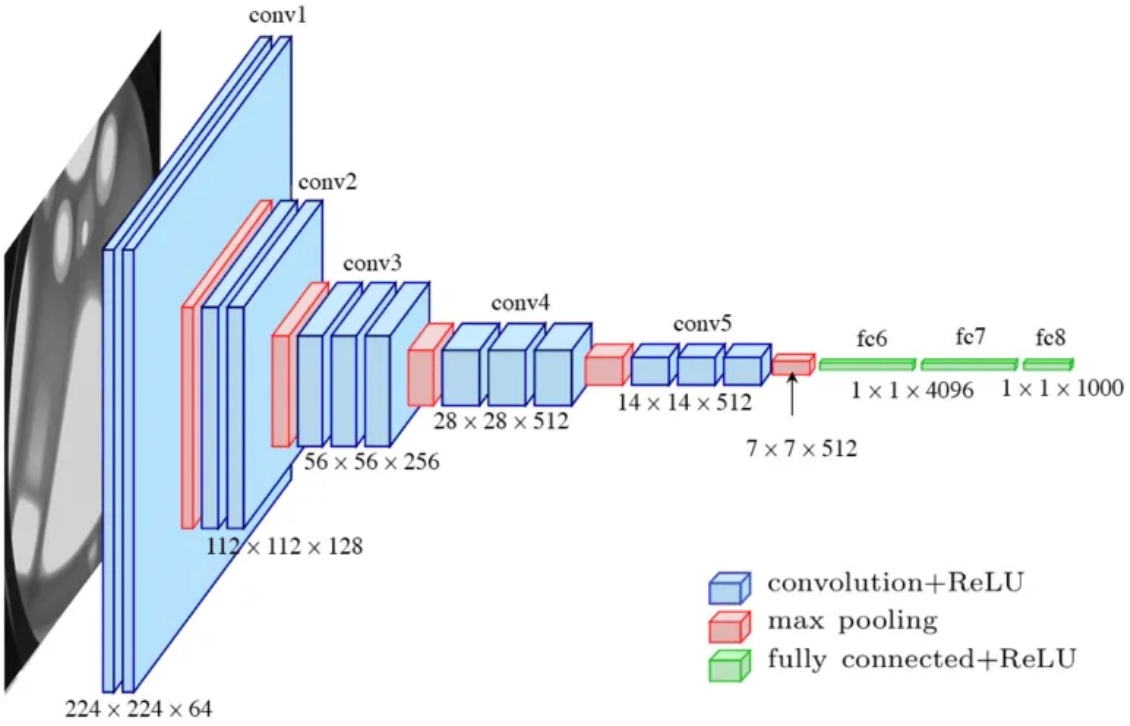
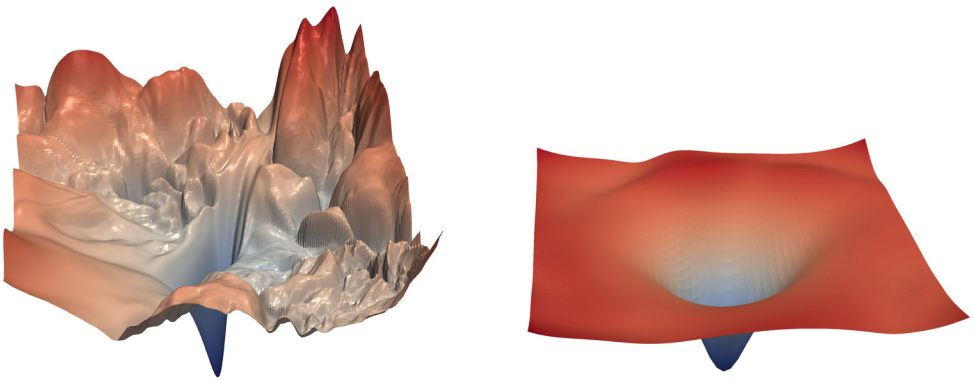


Figura 13: Exemplo de uma arquitetura de rede neural convolucional para classificação de imagens. Convoluções são aplicadas em uma imagem de tamanho 224×224. Após algumas convoluções, é realizado max pooling para redução do tamanho da imagem. A última saída de uma camada convolucional possui tamanho $7 \times 7 \times 512$. Após isso, são aplicadas camadas lineares. A última camada linear retorna 1000 valores que serão utilizados para classificar a imagem em uma das 1000 classes da base.

Figura 14: Visualização das 9 regiões de imagens que mais ativaram filtros específicos de uma CNN treinada no dataset ImageNet. São mostradas regiões para filtros de diferentes camadas da rede, começando da mais próxima da entrada (camada 1) até a camada mais próxima da saída (camada 5). Para a camada 1 são mostradas as regiões de 9 filtros distintos. Para as camadas 2 e 3 são mostradas regiões de 16 filtros. Para as camadas 4 e 5 é mostrado o resultado para 10 filtros. Note que os filtros iniciais possuem maior resposta para detalhes locais das imagens como bordas e cores. Filtros mais profundos detectam atributos de maior escala como rostos, objetos circulares ou animais. Figura adaptada de *M.D. Zeiler, Visualizing and understanding convolutional networks, 2014.*



(a) without skip connections (b) with skip connections

Figura 15: Efeito de caminhos residuais na função de perda (loss). (a) Visualização da função de perda sem caminhos residuais. (b) Visualização da mesma função com caminhos residuais. Li, Hao, et al. Visualizing the loss landscape of neural nets. Advances in neural information processing systems 31 (2018).

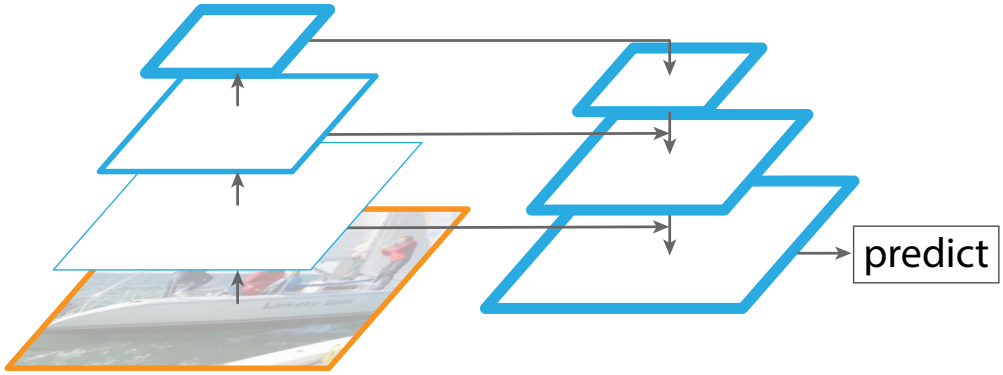


Figura 16: Ilustração de uma Feature Pyramid Network. O lado esquerdo mostra os mapas de ativação de um encoder qualquer. Convoluções 1×1 são utilizadas para ajustar o número de canais de cada ativação para um valor fixo C_{pyr}. Começando da última ativação do codificador, a ativação é interpolada e somada com a ativação do estágio anterior. Uma convolução 3×3 é aplicada no resultado. O processo é repetido para cada estágio do codificador. Caso o primeiro estágio do codificador tenha uma ativação de tamanho menor que a imagem de entrada, a ativação final do decodificador é interpolada para ter o tamanho da imagem.

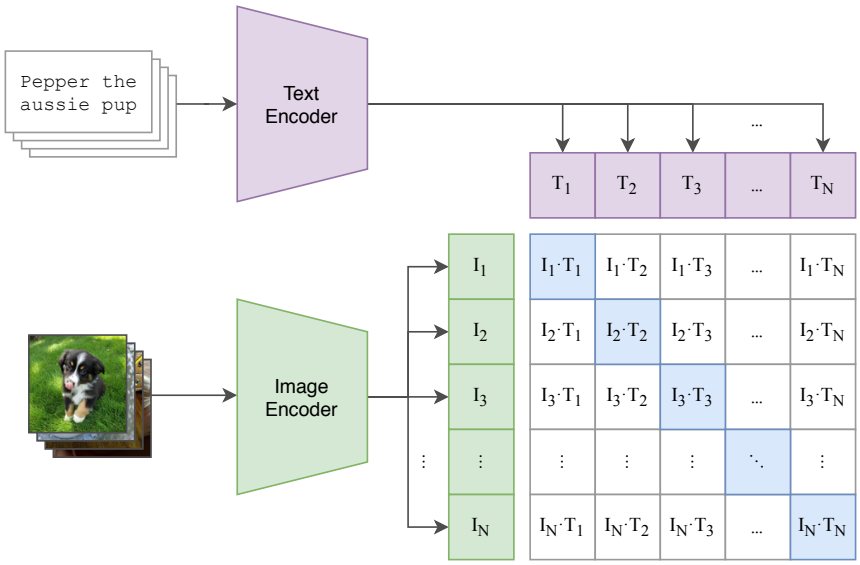


Figura 17: Ilustração do modelo CLIP. O modelo recebe como entrada um batch de imagens e respectivos textos descrevendo cada imagem. Um codificador de imagens (ResNet, ViT, etc) gera vetores de atributos visuais para as imagens e um codificador de texto (Transformer) gera vetores de atributos textuais. A similaridade de cosseno entre cada par de vetores é calculada. Uma função de loss apropriada recompensa valores altos na diagonal e valores baixos fora da diagonal, o que leva o modelo a gerar uma função de similaridade entre imagens e texto.

Apêndice A: Símbolos

Escalar	Vetor
x	$\mathbf{x}$
w	$\mathbf{w}$
f	$\mathbf{f}$
a	$\mathbf{a}$
r	$\mathbf{r}$
q	$\mathbf{q}$
p	$\mathbf{p}$

Tabela II: Esta tabela mostra a tipografia dos caracteres usados para representar valores e vetores. Por exemplo, o caractere x é usado para representar um valor, enquanto que o caractere $\mathbf{x}$ é usado para representar um vetor. Você pode consultar esta tabela caso tenha dúvidas no texto se alguma variável é escalar ou vetor.