Computação Bio-Inspirada / Inteligência Artificial

Fabrício Olivetti de França

01 de fevereiro de 2020





Topics

- 1. Redes Neurais
- 2. Aprendendo com Exemplos
- 3. Classificação
- 4. Neurônio Artificial
- 5. Retropropagação
- 6. Vanishing Gradient

Redes Neurais

Redes Neurais

Desde os primórdios da área de IA, busca-se por um modelo computacional que aprendesse por conta própria.

Uma inspiração óbvia era a forma como os seres vivos aprendem, ou como o cérbro funciona.

Por que estudar as Redes Neurais?

A computação neuronal pode nos ajudar a compreender como o cérebro biológico funciona.

Da mesma forma, conseguindo modelar a rede neural computacionalmente, podemos criar algoritmos que aprendam de forma acelerada.

Sistema Nervoso

O cérebro e o sistema nervoso atuam como um processador de informação nos seres vivos.

No ser humano ele é composto por cerca de 10 bilhões de neurônios.

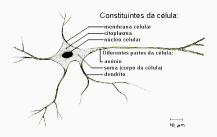
Cada neurônio está interligado a cerca de 5000 outros neurônios através de estruturas conhecidas como **sinapses** .

Neurônio

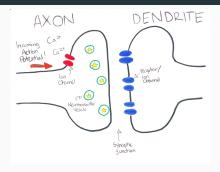
Dendritos : recebe estímulo de outros neurônios

Somma: combina as informações recebidas

Axônio : envia estímulos para outros neurônios



Sinapse



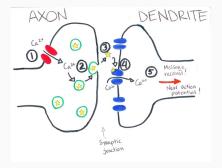
http://thebraingeek.blogspot.com.br/2012/04/synapse-2-synaptic-junction.html

O cálcio (Ca2+) com potencial positivo abre as portas no axônio.

Com o aumento na quantidade de Ca2+ as vesículas são abertas.

Neurotransmissores fluem até a junção.

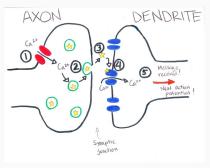
Sinapse



Neurotransmissores se juntam aos receptores e abrem as portas deixando entrar cálcio, sódio e outros íons positivos no dendrito.

Sinapse

O neurônio destino fica carregado positivamente causando um impulso elétrico ativando o neurônio.



Redes Neurais Artificiais

A tarefa mais comum para as Redes Neurais Artificiais é o **Aprendizado Supervisionado** em que ela observa exemplos de entrada e saída e tenta aprender uma generalização.

Aprendendo com Exemplos

Uma das formas de aprendizado de máquina é definido como um conjunto de dados na forma $\{(\mathbf{x},y)\}$, com $\mathbf{x}\in\mathbb{R}^d$ um vetor de atributos e $y\in\mathbb{R}$ uma variável alvo, queremos descobrir um mapa entre um certo \mathbf{x} para seu valor y correspondente:

$$f: \mathbf{x} \to y$$
.

Vamos tomar como exemplo um corretor que quer aprender a avaliar o valor de um imóvel.

Cada imóvel pode ser representado por diversas características como:

- Metragem quadrada
- Vagas na garagem
- Andar
- Bairro
- etc.

Para aprender a avaliar novos imóveis ele investiga pelo classificado do jornal vários exemplos:

m^2	vagas	andar	valor
80	1	2	100.000,00
120	2	5	400.000,00
100	1	10	350.000,00

O objetivo é aprender:

$$f(m^2, vagas, andar) = valor,$$

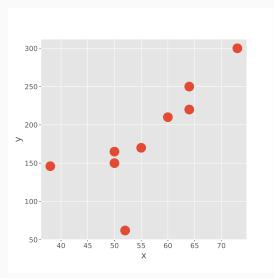
para quaisquer valores de m^2 , vagas e andar.

<2-> Isso caracteriza o Aprendizado Supervisionado.

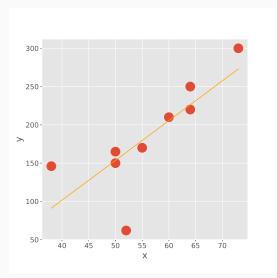
Reduzindo nossa tabela para duas variáveis, temos:

СС	mil \$
52	62
38	146
50	150
50	165
55	170
60	210
64	220
64	250
73	300

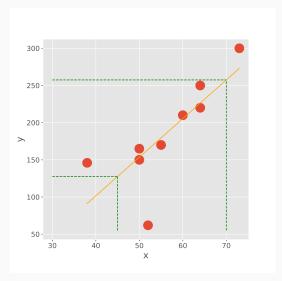
Com duas variáveis é simples verificar a relação visualmente:



Com duas variáveis é simples verificar a relação visualmente:



Com essa reta podemos determinar novos valores:



Esse método é conhecido como regressão linear.

Ele pode ser usado quando nossas variáveis apresentam uma correlação linear entre elas!

Dado um conjunto com n exemplos $\{(\mathbf{x_i}, y_i)\}$, com $\mathbf{x_i} \in \mathbb{R}^d, y \in \mathbb{R}$. Queremos encontrar $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$, tal que:

$$f(\mathbf{x_i}) \approx \mathbf{w} \cdot \mathbf{x_i} + b = y_i$$

$$f(\mathbf{x_i}) = y_i$$

$$\mathbf{w} \cdot \mathbf{x_i} + b = y_i$$

$$w_1 \cdot x_{i,1} + w_2 \cdot x_{i,2} + w_3 \cdot x_{i,3} + b = y_i$$

Definindo $w_0 = b$ e $x_{i,0} = 1$ para todo i, podemos escrever:

$$w_0 \cdot x_{i,0} + w_1 \cdot x_{i,1} + w_2 \cdot x_{i,2} + w_3 \cdot x_{i,3} = y_i$$

 $\mathbf{w} \cdot \mathbf{x_i} = y_i$

ou seja, y é o produto interno entre \mathbf{w} e $\mathbf{x_i}$.

Dados os n exemplos, podemos escrever na forma matricial, $X \in \mathbb{R}^{n \times (d+1)}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^{n \times 1}$:

$$X \cdot w = y$$
,

 $com \mathbf{w} \in \mathbb{R}^{(d+1)\times 1}$.

O nosso problema consiste em determinar ${\bf w}$ de tal forma a minimizar o erro de aproximação:

$$e(\mathbf{w}) = (y - X \cdot \mathbf{w})^T (y - X \cdot \mathbf{w}).$$

Para determinar a solução, calculamos a derivada e igualamos a zero para encontrar o mínimo local:

$$\frac{\partial \mathbf{e}(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} = \frac{\partial (\mathbf{y} - \mathbf{X} \cdot \mathbf{w})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X} \cdot \mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}}.$$

Calcule:

$$\frac{\partial e(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} = \frac{\partial (y - X \cdot \mathbf{w})^T (y - X \cdot \mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}}.$$

$$\frac{\partial e(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} = \frac{\partial (y - X \cdot \mathbf{w})^T (y - X \cdot \mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}}$$

$$\frac{\partial e(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} = \frac{\partial (yy^T - (X\mathbf{w})^T y - y^T X \mathbf{w} + (Xw)^T X w}{\partial \mathbf{w}}$$

$$\frac{\partial e(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} = \frac{\partial (yy^T - 2\mathbf{w}^T X^T y + \mathbf{w}^T X^T X \mathbf{w}}{\partial \mathbf{w}}$$

$$\frac{\partial e(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} = -2X^T y + 2X^T X w$$

$$-2X^{T}y + 2X^{T}Xw = 0$$
$$2X^{T}Xw = 2X^{T}y$$
$$X^{T}Xw = X^{T}y$$
$$w = (X^{T}X)^{-1}X^{T}y$$

Temos então que:

$$w = (X^T X)^{-1} X^T y,$$

com $(X^TX)^{-1}X^T$ sendo a pseudo-inversa de X.

Para dimensões grandes de X o custo da multiplicação de matrizes pode se tornar proibitivo.

Gradiente Descendente

Uma outra forma de resolver o problema é utilizando métodos de gradiente para otimização.

Dada uma função f(x) definida e diferenciável em torno de um ponto x_0 , sabemos que ela decresce mais rapidamente na direção oposta do gradiente $\nabla f(x_0)$.

Gradiente Descendente

Ou seja, fazendo:

$$x^{t+1} = x^t - \alpha \cdot \nabla f(x^t).$$

Temos que $f(x^{t+1}) \le f(x^t)$, para um α pequeno.

Gradiente Descendente

Temos então que:

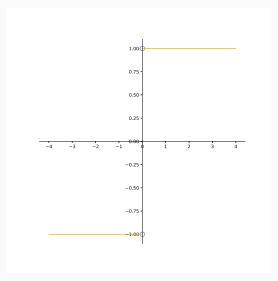
$$f(x^0) \ge f(x^1) \ge f(x^2) \ge \ldots \ge f(x^t).$$

Estamos interessados na minimização da aproximação de $f(\mathbf{x})$ com y:

$$e(\mathbf{w}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |y_i - \mathbf{x_i} \cdot \mathbf{w}|,$$

por exemplo.

Porém, a derivada da função valor absoluto é indefinida no ponto 0:



35

Por outro lado, a função quadrática apresenta uma única solução ótima, e é bem definida:

$$e(\mathbf{w}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \mathbf{x_i} \cdot \mathbf{w})^2,$$

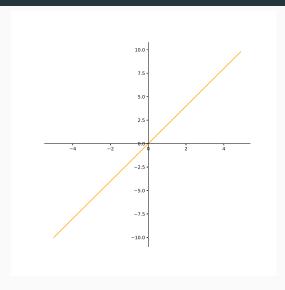


Figura 2: image

Temos então que:

$$\nabla e(\mathbf{w}) = -\frac{2}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \mathbf{x_i} \cdot \mathbf{w}) \cdot x_i,$$

Ou com o mesmo ótimo:

$$\nabla e(\mathbf{w}) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \mathbf{x_i} \cdot \mathbf{w}) \cdot x_i,$$

O novo valor para w pode ser calculado como:

$$\mathbf{w^{t+1}} = \mathbf{w^t} + \alpha E((y_i - \mathbf{x_i} \cdot \mathbf{w}) \cdot x_i),$$

Escolha de α A escolha do valor de passo de atualização de ${\bf w}$ é importante pois um valor muito baixo ocasiona uma demora para atingir o ponto de convergência, por outro lado um valor muito alto faz com que o método do gradiente ultrapasse o ponto de ótimo levando a divergência.

Gradiente Descendente Estocástico (online)

Para bases de dados muito grande, podemos aproximar o cálculo do gradiente para uma seleção aleatória de nossa base.

Esse algoritmo é conhecido como **Gradiente Descendente Estocástico**.

Gradiente Descendente Estocástico (online)

- Embaralhamos a ordem das amostras aleatoriamente
- Para cada amostra *i* fazemos:

$$\mathbf{w}^{t+1} = \mathbf{w}^{t} - \alpha(y_i - \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{w}) \cdot x_i,$$

Embaralhamos novamente a base de dados e repetimos o processo

Gradiente Descendente Estocástico (online)

Esse método permite calcular cada passo de iteração mais rapidamente porém reduz a taxa de convergência do algoritmo.

Uma variação desse método chamada *mini-batch*, utilizamos uma amostra aleatória do conjunto de dados para executar o passo do gradiente.

Classificação

Problema de Classificação

■ Temos um conjunto de dados na forma $\{(\mathbf{x}, y)\}$, com $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ um vetor de atributos e $y \in \mathbb{Y}$ uma variável alvo que define um conjunto finito de possíveis classificações, agora queremos descobrir uma função de probabilidade:

$$P(Y = y \mid \mathbf{x}).$$

Problema de Classificação

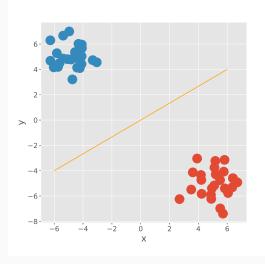
Exemplos de Problemas de Classificação

- Se um e-mail é spam ou não.
- Qual espécie é uma planta.
- Que tipo de doença um paciente tem.
- Classificadores Lineares

Discriminador Linear

- Pensando apenas no caso de classificação binária, em que temos apenas duas classes: -1 e +1.
- Podemos definir uma função:
 - $f(\mathbf{x}) = \mathbf{w} \cdot \mathbf{x}$ tal que se $\mathbf{w} \cdot \mathbf{x} < \theta$, \mathbf{x} pertence a classe -1; e se $\mathbf{w} \cdot \mathbf{x} > \theta$, \mathbf{x} pertence a classe +1.
- O caso $\mathbf{w} \cdot \mathbf{x} = \theta$ resulta em uma falha de classificação.

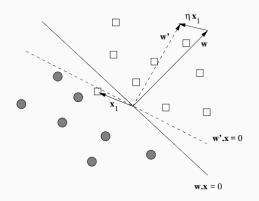
Discriminador Linear



 Só é capaz de classificar quando a separação de classes também é linear.

- O problema se torna encontrar o vetor de pesos ${\bf w}$ e o parâmetro de limiar θ que maximiza a classificação correta.
 - Diferentes regras, diferentes algoritmos
- Supondo $\theta = 0$, nos limitamos em encontrar **w**.

- Seja η a taxa de aprendizado: $0 \le \eta \le 1$ e $y \in \{-1,1\}$
- 1. Inicie w aleatoriamente
- 2. Pegue um objeto (x, y) classificado incorretamente:
 - 2.1 Seja $\Delta \mathbf{w} = \eta \mathbf{x} \mathbf{y}$
 - 2.2 Atualize $\mathbf{w} = \mathbf{w} + \Delta \mathbf{w}$



• retirado de Mining Massive Datasets - Ulman et al.

- Embora exista garantia de convergência quando as classes são linearmente separáveis, se não for o caso o vetor w irá ser atualizado em um ciclo.
- O ciclo é difícil de perceber computacionalmente sem um alto custo.

- Critérios de parada:
 - Após um número de iterações.
 - Quando o número de classificações incorretas não alterar (passo a classificar +1 corretamente e +1 incorretamente).
- Separe uma base de validação e pare quando não houver melhoras.

Algoritmo de Winnow

- Para os casos de um vetor de atributos binários (ex.: texto), podemos aplicar o algoritmo de Winnow:
 - Se $\mathbf{w} \cdot \mathbf{x} \leq \theta$ e y = +1, para todo $x_i = 1$ faça $w_i = 2 \cdot w_i$.
 - Se $\mathbf{w} \cdot \mathbf{x} \ge \theta$ e y = -1, para todo $x_i = 1$ faça $w_i = w_i/2$.

Algoritmo de Winnow

- Podemos inserir θ no vetor de atributos com o valor -1, com isso ajustamos também seu valor.
- Ao atualizar ${\bf w}$ na posição de ${\boldsymbol \theta}$, fazemos o oposto da ação feita para as posições de ${\bf x}$.

Abordagem probabilística

* A pessoa abaixo terá um ataque cardíaco?

Idade	Sexo	Pressão Sanguínea	Colesterol	Peso
40	М	130/85	240	70

Abordagem probabilística

* A pessoa abaixo terá um ataque cardíaco?

Idade	Sexo	Pressão Sanguínea	Colesterol	Peso
40	М	130/85	240	70

- Difícil dizer sim ou não
 - Não temos todos os dados necessários
 - Função não necessariamente é determinística

$$f(\mathbf{x}) = P(+1|\mathbf{x}) \in [0,1]$$

Dados ideais

Dados ideais

•
$$y_1 = 0, 9 = P(+1|\mathbf{x}_1)$$

•
$$y_2 = 0, 2 = P(+1|\mathbf{x}_1)$$

• $y_N = 0, 6 = P(+1|\mathbf{x}_1)$

Dados reais

Dados reais

•
$$y_1 = +1 \sim P(y|\mathbf{x}_1)$$

•
$$y_2 = -1 \sim P(y|\mathbf{x}_1)$$

 $y_N = -1 \sim P(y|\mathbf{x}_1)$

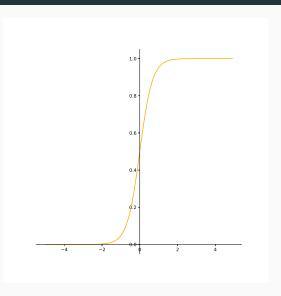
Hipótese logística

• Seja $\mathbf{x} = (x_0, x_1, \dots x_M)$ os atributos do paciente, podemos computar um *valor de risco ponderado*:

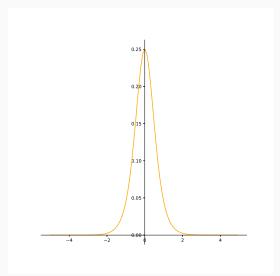
$$s = \mathbf{w}^T \mathbf{x} = \sum_{m=0}^{M} w_m x_m$$

 e depois convertemos esse valor em uma probabilidade usando a função logística

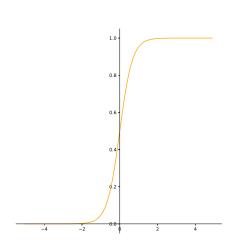
$$\theta(s) = \hat{y} = \frac{e^s}{1 + e^s} = \frac{1}{1 + e^{-s}}$$



• E a derivada $\hat{y} \cdot (1 - \hat{y})$:



Note que devemos alterar os valores representantes da classe para $y_i \in \{0,1\}$.



• A regressão logística tenta aproximar a função alvo $f(\mathbf{x}) = P(+1|\mathbf{x})$, usando

$$h(\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + e^{(-\mathbf{w}^T \mathbf{x})}}$$

Note como, apesar do nome, é um modelo de classificação

Considere a hipótese logística que aproxima $P(+1|\mathbf{x})$.

- Podemos fazer uma classificação binária usando sign $(h(x) \frac{1}{2})$. Qual seria uma fórmula alternativa para a classificação binária?
 - 1. $\operatorname{sign}(\mathbf{w}^T\mathbf{x} \frac{1}{2})$
 - 2. $sign(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$
 - 3. $\operatorname{sign}(\mathbf{w}^T\mathbf{x} + \frac{1}{2})$
 - 4. nenhuma das anteriores

Considere a hipótese logística que aproxima $P(+1|\mathbf{x})$.

- Podemos fazer uma classificação binário usando sign $(h(\mathbf{x}) \frac{1}{2})$. Qual seria uma fórmula alternativa para a classificação binária?
 - (2) $sign(\mathbf{w}^T \mathbf{x})$
 - $\mathbf{w}^T \mathbf{x} = 0 \rightarrow h(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}$

A função de erro deve ser definida como:

$$e(y, \hat{y}) = egin{cases} -\log{(\hat{y})}, & ext{se } y = 1 \ -\log{(1-\hat{y})}, & ext{se } y = 0 \end{cases}$$

• A função de erro deve ser definida como:

$$e(y, \hat{y}) = egin{cases} -\log{(\hat{y})}, & ext{se } y = 1 \\ -\log{(1-\hat{y})}, & ext{se } y = 0 \end{cases}$$

- Para y = 1:
 - Se $\hat{y} \rightarrow 1$, temos que $-\log(\hat{y}) \rightarrow 0$.
 - Se $\hat{y} \to 0$, temos que $-\log(\hat{y}) \to \infty$.

• A função de erro deve ser definida como:

$$e(y, \hat{y}) = egin{cases} -\log{(\hat{y})}, & ext{se } y = 1 \\ -\log{(1-\hat{y})}, & ext{se } y = 0 \end{cases}$$

- Para y = 0:
 - Se $\hat{y} \to 1$, temos que $-\log(1-\hat{y}) \to \infty$.
 - Se $\hat{y} \rightarrow 0$, temos que $-\log\left(1-\hat{y}\right) \rightarrow 0$.

• Como $y \in \{0,1\}$, podemos reescrever a função como:

$$e(y, \hat{y}) = -[y \cdot \log(\hat{y}) + (1 - y) \cdot \log(1 - \hat{y})]$$

■ E o erro médio:

$$E(e(y, \hat{y})) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} [y_i \cdot \log(\hat{y}_i) + (1 - y_i) \cdot \log(1 - \hat{y}_i)]$$

Exercício

Mostre que

$$e(y, \hat{y}) = egin{cases} -\log{(\hat{y})}, & ext{se } y = 1 \ -\log{(1-\hat{y})}, & ext{se } y = 0 \end{cases}$$

е

$$e(y, \hat{y}) = -[y \cdot \log(\hat{y}) + (1 - y) \cdot \log(1 - \hat{y})]$$

são equivalentes.

■ A derivada parcial em função de *w_j* fica:

$$\frac{\partial e(y,\hat{y})}{\partial w_j} = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i) \cdot x_{i,j}$$

E o gradiente:

$$\nabla e(y,\hat{y}) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i) \cdot x_i$$

Em posse do gradiente, podemos aplicar gradiente descendente

$$\mathbf{w}^{(t+1)} = \mathbf{w}^{(t)} - \eta \nabla e(y, \hat{y})$$

Regressão Logística: Problemas multi-classe

 Para K classes, precisamos de K w's, conhecido como classificador softmax

$$P(y_k|\mathbf{x}) = \frac{e^{\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x}}}{\sum_{k=1}^K e^{\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x}}}, \forall k \in \{1, \dots, K\}$$

- Estratégia One vs All (outra possibilidade seria One vs One)
- Possível fazer usando apenas K-1 w's, usando uma classe como referência e o fato da probabilidade somar 1:

$$P(y_K|\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \sum_{k=1}^{K-1} e^{\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x}}}$$

Regressão Logística: Softmax

$$P(y_k|\mathbf{x}) = \frac{e^{\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x}}}{\sum_{k=1}^K e^{\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x}}}, \forall k \in \{1, \dots, K\}$$

- Embora simples, essa função pode trazer problemas numéricos, em especial quando $\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x}$ é grande
- Normalmente usa-se o truque logsumexp:

$$m = \max \mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x}$$
 In $P(y_k | \mathbf{x}) = \mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x} - (m + \ln \sum_{k=1}^K e^{\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x} - m})$

LogSumExp

$$S = \ln \sum_{k=1}^{K} e^{\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x}} \to e^S = \sum_{k=1}^{K} e^{\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x}}$$

$$e^{-m} e^S = e^{-m} \sum_{k=1}^{K} e^{\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x}}$$

$$e^{S-m} = \sum_{k=1}^{K} e^{-m} e^{\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x}}$$

$$S - m = \ln \sum_{k=1}^{K} e^{\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x} - m}$$

$$S = m + \ln \sum_{k=1}^{K} e^{\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x} - m}$$

Neurônio Artificial

Neurônio Artificial

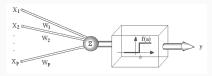
Para:

- Tentar entender o funcionamento do neurônio no processamento de informação e;
- Tentar utilizar esse modelo para processamento de informação computacional.

O neurofisiologista McCulloch e o matemático Walter Pitts criaram um modelo matemático/computacional.

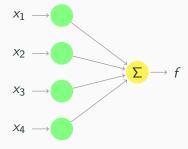
Neurônio Artificial

Esse neurônio permitia múltiplas entradas de valores binários (simulando pulsos elétricos) e uma saída (resultado do processamento da informação).



Podemos criar um neurônio artificial como um *nó* de um Grafo que recebe múltiplas entradas e emite uma saída.

A saída é definida como a aplicação de uma função de ativação na soma dos valores de entrada.

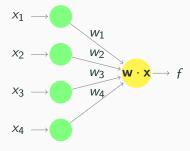


Pensando em entradas com valores reais entre 0 e 1, o neurônio é ativado sempre que a soma das entradas for maior que um determinado τ , ou seja, a função f é:

$$f(z) = \begin{cases} 0, & \text{se } z < \tau \\ g(z), & \text{c. c.} \end{cases},$$

com g(z) a função de ativação que determinar o pulso a ser enviado e z a soma dos estímulos de entrada.

Também é possível ponderar a importância dos estímulos de entrada do neurônio através de um vetor de pesos \mathbf{w} , substituindo a somatória pelo produto interno $\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}$:



O Neurônio Artificial é conhecido como Percéptron. Esse tipo de modelo é dito **paramétrico** pois é descrito por um número finito de parâmetros (**w**).

Esse modelo consegue descrever apenas relações lineares.

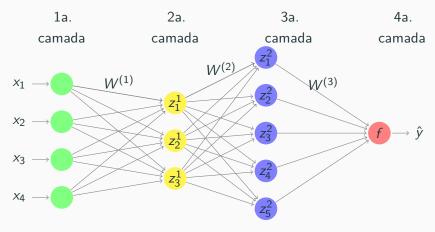
Percéptron de Múltiplas Camadas

Conhecido como **Multi-Layer Perceptron** (MLP) ou **Feedforward Neural Network**.

Rede composta de vários neurônios conectados por camadas.

Percéptron de Múltiplas Camadas

O uso de camadas permite aproximar funções não-lineares.



Percéptron de Múltiplas Camadas

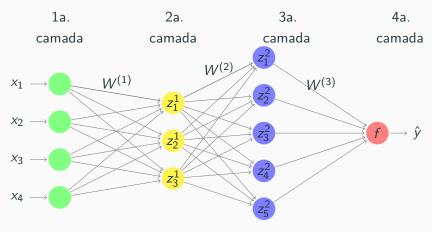
Essa é uma forma de Aprendizagem Profunda (Deep Learning).

Quanto mais camadas, mais profunda é a rede.

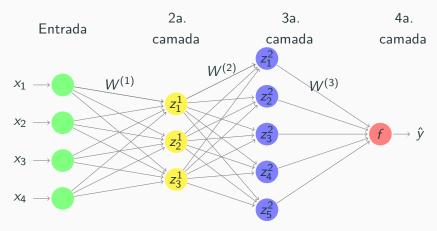
Cada camada tem a função de criar novos atributos mais complexos.

Essa rede define um modelo computacional.

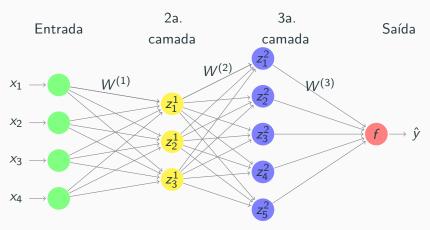
Cada conjunto de nós é denominado como uma camada.



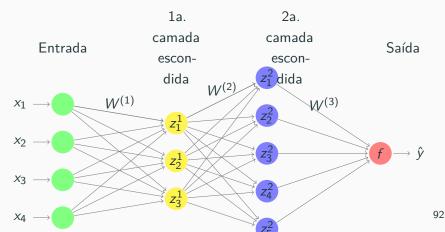
A primeira camada é conhecida como entrada.



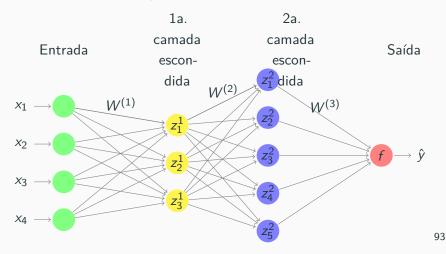
A última camada é a saída ou resposta do sistema.



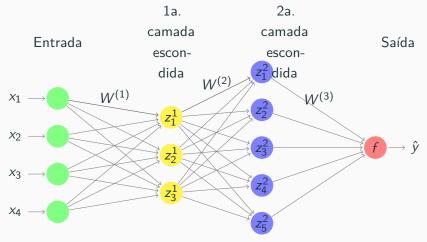
As camadas restantes são numeradas de 1 a *m* e são conhecidas como *camadas escondidas* ou *hidden layers*. Esse nome vem do fato de que elas não apresentam um significado explícito de nosso problema.



Duas camadas vizinhas costumam ser totalmente conectadas formando um grafo bipartido (em algumas variações podemos definir menos conexões).



Esse grafo é ponderado e os pesos são definidos por uma matriz W de dimensão $n_o \times n_d$, com n_o sendo o número de neurônios da camada de origem e n_d da de destino.



94

Assumindo que as entradas são representadas por um vetor linha \mathbf{x} , o processamento é definido como: $\mathbf{z}^1 = f^{(1)}(\mathbf{x} \cdot W^{(1)})$.

Exercício

Dado que a camada i tem m neurônios e a camada j tem n neurônios. Determine as dimensões de z^i , $W^{(j)}$, e z^j .

A camada seguinte calcula a próxima saída como $\mathbf{z}^2 = f^{(2)}(\mathbf{z}^1 \cdot W^{(2)})$, e assim por diante.

Processamento em Lote

Se temos uma matriz de dados $X \in \mathbb{R}^{n \times d}$ e quiséssemos obter uma saída $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ em uma Rede Neural com duas camadas escondidas contendo h1 e h2 neurônios, qual seria a sequência de processamento?

(quais cálculos temos que fazer?)

Processamento em Lote

Se temos uma matriz de dados $X \in \mathbb{R}^{n \times d}$ e quiséssemos obter uma saída $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ em uma Rede Neural com duas camadas escondidas contendo h1 e h2 neurônios, qual seria a sequência de processamento?

$$Z^{(1)} = f^{(1)}(X \cdot W^{(1)})$$

$$Z^{(2)} = f^{(2)}(Z^{(1)} \cdot W^{(2)})$$

$$y = f^{(3)}(Z^{(2)} \cdot W^{(3)})$$

Funções de Ativação

As funções de ativação comumente utilizadas em Redes Neurais são:

- Linear: f(z) = z, função identidade.
- **Logística:** $f(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$, cria uma variável em um tipo sinal, com valores entre 0 e 1.
- Tangente Hiperbólica: $f(z) = \tanh(z)$, idem ao anterior, mas variando entre -1 e 1.
- Rectified Linear Units: $f(z) = \max(0, z)$, elimina os valores negativos.
- **Softmax:** $f(z_i) = \frac{e^{z_i}}{\sum_j e^{z_j}}$, faz com que a soma dos valores de z seja igual a 1.

Retropropagação

Ajustando os Parâmetros

Para determinar os valores corretos dos pesos, utilizamos o Gradiente Descendente, assim como nos algoritmos de Regressão Linear e Logística.

Ajustando os Parâmetros

Note porém que o cálculo da derivada da função de erro quadrático é igual aos casos já estudados apenas na última camada.

Ajustando os Parâmetros

Para as outras camadas precisamos aplicar o algoritmo de **Retropropagação** que aplica a regra da cadeia.

Retropropagação

O algoritmo segue os seguintes passos:

- Calcula a saída para uma certa entrada.
- Calcula o erro quadrático.
- Calcula o gradiente do erro quadrático em relação a cada peso.
- Atualiza pesos na direção oposta do gradiente.
- Repita.

Determine os valores mínimos e máximos das derivadas das seguintes funções de ativação:

- Logistica: $\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$ cuja derivada é $\sigma'(z) = \sigma(z)(1-\sigma(z))$.
- Tangente Hiperbólica: tanh(z) cuja derivada é tanh'(z) = 1 − tanh²(z).
- RELU: relu(z) = max(0, z) cuja derivada é relu'(z) = 1, 0, se z > 0 ou caso contrário, respectivamente.

Como $0 \le \sigma(z) \le 1$, temos que o valor mínimo da derivada é quando $\sigma(z) = \{0,1\}$ em que $\sigma'(z) = 0$.

O valor máximo ocorre quando $\sigma(z) = 0.5$ e $\sigma'(z) = 0.25$.

Como $-1 \le \tanh(z) \le 1$, temos que o valor mínimo da derivada é quando $\tanh(z) = \{-1, 1\}$ em que $\tanh'(z) = 0$.

O valor máximo ocorre quando tanh(z) = 0 e tanh'(z) = 1.

Como *relu'* assume apenas dois valores, temos diretamente que o mínimo e máximo são 0 e 1, respectivamente.

O gradiente de cada camada quando utilizamos a função logística, terá o valor de no máximo 25% da camada seguinte, ou seja, quanto mais camadas, menores os valores de gradientes das primeiras camadas.

Isso é conhecido como *Vanishing Gradient* e é possível remediar utilizando outras funções de ativação como *tanh* e RELU.

Dicas para Melhorar o desempenho do ajuste

- Utilize tanh como função sigmoidal.
- Utilize softmax para multi-classes.
- Escale as variáveis de saída para a mesma faixa de valores da segunda derivada da função de ativação (ex.: para tanh deixe as variáveis entre -1 e 1).

Dicas para Melhorar o desempenho do ajuste

- Ajuste os parâmetros utilizando mini-batches dos dados de treinamento.
- Inicialize os pesos como valores aleatórios uniformes com média zero e desvio-padrão igual a ¹/_{√m}, com m sendo o número de nós da camada anterior.