

Redes Neurais Artificiais

Pedro H A Konzen

6 de fevereiro de 2024

Licença

Este trabalho está licenciado sob a Licença Atribuição-CompartilhaIgual 4.0 Internacional Creative Commons. Para visualizar uma cópia desta licença, visite http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.pt_BR ou mande uma carta para Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

Prefácio

Nestas notas de aula são abordados tópicos introdutórios sobre redes neurais artificiais. Como ferramenta computacional de apoio, vários exemplos de aplicação de códigos `Python`+`PyTorch` são apresentados.

Agradeço a todas e todos que de modo assíduo ou esporádico contribuem com correções, sugestões e críticas. :)

Pedro H A Konzen

Conteúdo

Capa	i
Licença	ii
Prefácio	iii
Sumário	v
1 Introdução	1
2 Perceptron	3
2.1 Unidade de Processamento	3
2.1.1 Um problema de classificação	4
2.1.2 Problema de regressão	10
2.1.3 Exercícios	14
2.2 Algoritmo de Treinamento	15
2.2.1 Método do Gradiente Descendente	16
2.2.2 Método do Gradiente Estocástico	19
2.2.3 Exercícios	22
3 Perceptron Multicamadas	23
3.1 Modelo MLP	23
3.1.1 Treinamento	24
3.1.2 Aplicação: Problema de Classificação XOR	25
3.1.3 Exercícios	28
3.2 Aplicação: Problema de Classificação Binária	29
3.2.1 Dados	29
3.2.2 Modelo	30
3.2.3 Treinamento e Teste	31

CONTEÚDO

v

3.2.4	Verificação	33
3.2.5	Exercícios	35
3.3	Aplicação: Aproximação de Funções	35
3.3.1	Função unidimensional	35
3.3.2	Função bidimensional	38
3.3.3	Exercícios	41
3.4	Diferenciação Automática	41
3.4.1	Autograd MLP	47
3.4.2	Exercícios	50
4	Redes Informadas pela Física	53
4.1	Aplicação: Equação de Poisson	53
4.1.1	Exercícios	57
4.2	Aplicação: Equação do Calor	57
4.3	PINN com Parâmetro a Determinar	62
4.3.1	Exercícios	67
	Respostas dos Exercícios	69
	Bibliografia	70

Capítulo 1

Introdução

Uma rede neural artificial é um modelo de aprendizagem profunda (**deep learning**), uma área da aprendizagem de máquina (**machine learning**). O termo tem origem no início dos desenvolvimentos de inteligência artificial, em que modelos matemáticos e computacionais foram inspirados no cérebro biológico (tanto de humanos como de outros animais). Muitas vezes desenvolvidos com o objetivo de compreender o funcionamento do cérebro, também tinham a intensão de emular a inteligência.

Nestas notas de aula, estudamos um dos modelos de redes neurais usualmente aplicados. A **unidade básica de processamento** data do modelo de neurônio de McCulloch-Pitts (McCulloch and Pitts, 1943), conhecido como **perceptron** (Rosenblatt, 1958, 1962), o primeiro com um algoritmo de treinamento para problemas de classificação linearmente separável. Um modelo similar é o ADALINE (do inglês, *adaptive linear element*, Widrow and Hoff, 1960), desenvolvido para a predição de números reais. Pela questão histórica, vamos usar o termo **perceptron** para designar a unidade básica (o neurônio), mesmo que o modelo de neurônio a ser estudado não seja restrito ao original.

Métodos de aprendizagem profunda são técnicas de treinamento (calibração) de composições em múltiplos níveis, aplicáveis a problemas de aprendizagem de máquina que, muitas vezes, não têm relação com o cérebro ou neurônios biológicos. Um exemplo, é a rede neural que mais vamos explorar nas notas, o **perceptron multicamada** (MLP, em inglês *multilayer perceptron*), um modelo de progressão (em inglês, *feedforward*) de rede profunda em que a informação é processada pela composição de camadas de perceptrons. Embora a ideia de fazer com que a informação seja processada através

da conexão de múltiplos neurônios tenha inspiração biológica, usualmente a escolha da disposição dos neurônios em uma MLP é feita por questões algorítmicas e computacionais. I.e., baseada na eficiente utilização da arquitetura dos computadores atuais.

Capítulo 2

Perceptron

2.1 Unidade de Processamento

A **unidade básica de processamento** (neurônio artificial) que exploramos nestas notas é baseada no **perceptron** (Fig. 2.1). Consiste na composição de uma **função de ativação** $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ com a **pré-ativação**

$$z := \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + b \quad (2.1)$$

$$= w_1x_1 + w_2x_2 + \cdots + w_nx_n + b \quad (2.2)$$

onde, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ é o **vetor de entrada**, $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$ é o **vetor de pesos** e $b \in \mathbb{R}$ é o **bias**. Escolhida uma função de ativação, a **saída do neurônio** é dada por

$$y = \mathcal{N}(\mathbf{x}; (\mathbf{w}, b)) \quad (2.3)$$

$$:= f(z) = f(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + b) \quad (2.4)$$

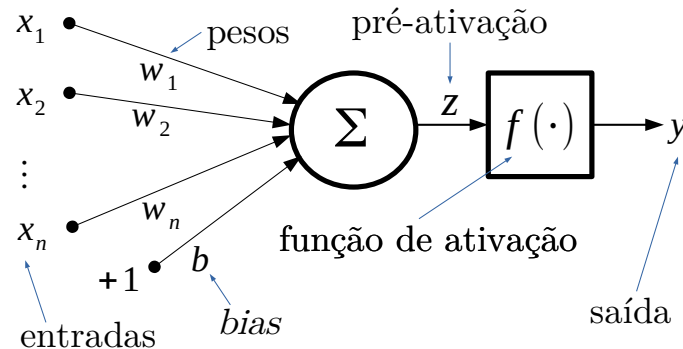


Figura 2.1: Esquema de um perceptron: unidade de processamento.

O **treinamento** (calibração) consiste em determinar os parâmetros (\mathbf{w}, b) de forma que o neurônio forneça as saídas y esperadas com base em um critério predeterminado.

Uma das vantagens deste modelo de neurônio é sua generalidade, i.e. pode ser aplicado a diferentes problemas. Na sequência, vamos aplicá-lo na resolução de um problema de classificação e noutro de regressão.

2.1.1 Um problema de classificação

Vamos desenvolver um perceptron que emule a operação \wedge (e-lógico). I.e., receba como entrada dois valores lógicos A_1 e A_2 (V, verdadeiro ou F, falso) e forneça como saída o valor lógico $R = A_1 \wedge A_2$. Segue a tabela verdade do \wedge :

A_1	A_2	R
V	V	V
V	F	F
F	V	F
F	F	F

Modelo

Nosso **modelo de neurônio** será um perceptron com duas **entradas** $\mathbf{x} \in \{-1, 1\}^2$ e a função sinal

$$f(z) = \text{sign}(z) = \begin{cases} 1 & , z > 0 \\ 0 & , z = 0 \\ -1 & , z < 0 \end{cases} \quad (2.5)$$

como função de ativação, i.e.

$$y = \mathcal{N}(\mathbf{x}; (\mathbf{w}, b)), \quad (2.6)$$

$$= \text{sign}(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + b), \quad (2.7)$$

onde $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^2$ e $b \in \mathbb{R}$ são parâmetros a determinar.

Pré-processamento

Uma vez que nosso **modelo recebe valores** $\mathbf{x} \in \{-1, 1\}^2$ e retorna $y \in \{-1, 1\}$, precisamos (pre)processar os dados do problema de forma a utilizá-los. Uma forma, é assumir que todo **valor negativo está associado ao valor lógico F (falso) e positivo ao valor lógico V (verdadeiro)**. Desta forma, os dados podem ser interpretados como na tabela abaixo.

x_1	x_2	y
1	1	1
1	-1	-1
-1	1	-1
-1	-1	-1

Treinamento

Agora, nos falta **treinar nosso neurônio para fornecer o valor de y esperado para cada dada entrada \mathbf{x}** . Isso **consiste em um método para escolhermos os parâmetros (\mathbf{w}, b)** que sejam adequados para esta tarefa. Vamos explorar mais sobre isso na sequência do texto e, aqui, apenas escolhemos

$$\mathbf{w} = (1, 1), \quad (2.8)$$

$$b = -1. \quad (2.9)$$

Com isso, nosso perceptron é

$$\mathcal{N}(\mathbf{x}) = \text{sign}(x_1 + x_2 - 1) \quad (2.10)$$

Verifique que ele satisfaz a tabela verdade acima!

Implementação

Código 2.1: perceptron.py

```
1 import torch
2
3 # modelo
4 class Perceptron(torch.nn.Module):
5     def __init__(self):
6         super().__init__()
7         self.linear = torch.nn.Linear(2,1)
8
9     def forward(self, x):
10         z = self.linear(x)
11         y = torch.sign(z)
12         return y
13
14 model = Perceptron()
15 W = torch.Tensor([[1., 1.]])
16 b = torch.Tensor([-1.])
17 with torch.no_grad():
18     model.linear.weight = torch.nn.Parameter(W)
19     model.linear.bias = torch.nn.Parameter(b)
20
21 # dados de entrada
22 X = torch.tensor([[1., 1.],
23                  [1., -1.],
24                  [-1., 1.],
25                  [-1., -1.]])
26
27 print(f"\nDados de entrada\n{X}")
28
29
30 # forward (aplicação do modelo)
31 y = model(X)
```

```

32
33 print(f"Valores estimados\n{y}")

```

Interpretação geométrica

Empregamos o seguinte modelo de neurônio

$$\mathcal{N}(\mathbf{x}; (\mathbf{w}, b)) = \text{sign}(w_1x_1 + w_2x_2 + b) \quad (2.11)$$

Observamos que

$$w_1x_1 + w_2x_2 + b = 0 \quad (2.12)$$

corresponde à equação geral de uma reta no plano $\tau : x_1 \times x_2$. Esta reta divide o plano em dois semiplanos

$$\tau^+ = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 : w_1x_1 + w_2x_2 + b > 0\} \quad (2.13)$$

$$\tau^- = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 : w_1x_1 + w_2x_2 + b < 0\} \quad (2.14)$$

O primeiro está na direção do vetor normal à reta $\mathbf{n} = (w_1, w_2)$ e o segundo no sentido oposto. Com isso, o problema de treinar nosso neurônio para o problema de classificação consiste em encontrar a reta

$$w_1x_1 + w_2x_2 + b = 0 \quad (2.15)$$

de forma que o ponto $(1, 1)$ esteja no semiplano positivo τ^+ e os demais pontos no semiplano negativo τ^- . Consultamos a Figura 2.2.

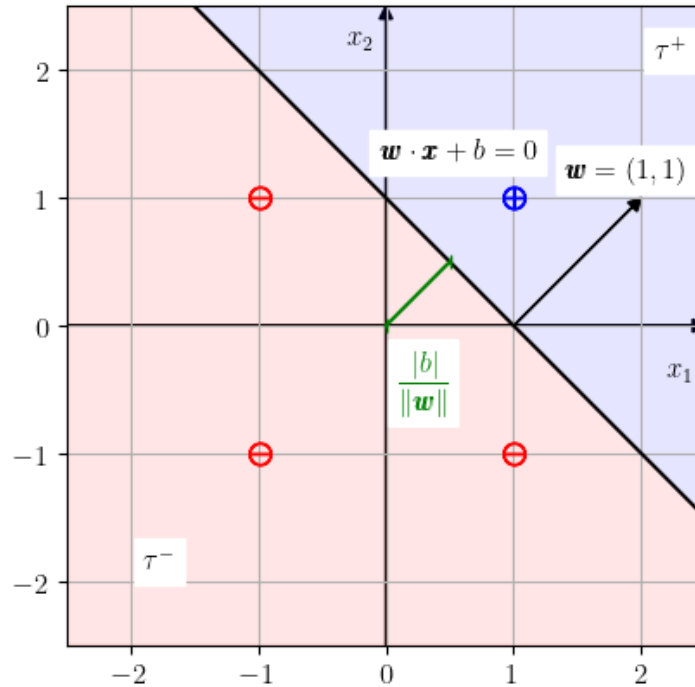


Figura 2.2: Interpretação geométrica do perceptron aplicado ao problema de classificação relacionado à operação lógica \wedge (e-lógico).

Algoritmo de treinamento: perceptron

O algoritmo de treinamento perceptron permite calibrar os pesos de um neurônio para fazer a classificação de dados linearmente separáveis. Trata-se de um algoritmo para o **treinamento supervisionado** de um neurônio, i.e. a calibração dos pesos é feita com base em um dado **conjunto de amostras de treinamento**.

Seja dado um **conjunto de treinamento** $\{\mathbf{x}^{(s)}, y^{(s)}\}_{s=1}^{n_s}$, onde n_s é o número de amostras. O algoritmo consiste no seguinte:

1. $\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{0}$, $b \leftarrow 0$.
2. Para $e \leftarrow 1, \dots, n_e$:
 - (a) Para $s \leftarrow 1, \dots, n_s$:
 - i. Se $y^{(s)} \mathcal{N}(\mathbf{x}^{(s)}) \leq 0$:

$$\text{A. } \mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} + y^{(s)} \mathbf{x}^{(s)}$$

$$\text{B. } b \leftarrow b + y^{(s)}$$

onde, n_e é um dado número de épocas¹.

Código 2.2: perceptron_train.py

```
1 import torch
2
3 # modelo
4
5 class Perceptron(torch.nn.Module):
6     def __init__(self):
7         super().__init__()
8         self.linear = torch.nn.Linear(2,1)
9
10    def forward(self, x):
11        z = self.linear(x)
12        y = torch.sign(z)
13        return y
14
15 model = Perceptron()
16 with torch.no_grad():
17     W = model.linear.weight
18     b = model.linear.bias
19
20 # dados de treinamento
21 X_train = torch.tensor([[1., 1.],
22                          [1., -1.],
23                          [-1., 1.],
24                          [-1., -1.]])
25 y_train = torch.tensor([1., -1., -1., -1.]).reshape(-1,1)
26
27 ## número de amostras
28 ns = y_train.size(0)
29
30 print("\nDados de treinamento")
31 print("X_train =")
32 print(X_train)
33 print("y_train = ")
```

¹Número de vezes que as amostras serão percorridas para realizar a correção dos pesos.

```

34 print(y_train)
35
36 # treinamento
37
38 ## num max épocas
39 nepochs = 100
40
41 for epoch in range(nepochs):
42
43     # update
44     not_updated = True
45     for s in range(ns):
46         y_est = model(X_train[s:s+1,:])
47         if (y_est*y_train[s] <= 0.):
48             with torch.no_grad():
49                 W += y_train[s]*X_train[s,:]
50                 b += y_train[s]
51                 not_updated = False
52
53     if (not_updated):
54         print('Training ended.')
55         break
56
57 # verificação
58 print(f'W =\n{W}')
59 print(f'b =\n{b}')
60 y = model(X_train)
61 print(f'y =\n{y}')

```

2.1.2 Problema de regressão

Vamos treinar um perceptron para resolver o problema de regressão linear para os seguintes dados

s	$x^{(s)}$	$y^{(s)}$
1	0.5	1.2
2	1.0	2.1
3	1.5	2.6
4	2.0	3.6

Modelo

Vamos determinar o perceptron²

$$\tilde{y} = \mathcal{N}(x; (w, b)) = wx + b \quad (2.16)$$

que melhor se ajusta a este conjunto de dados $\{(x^{(s)}, y^{(s)})\}_{s=1}^{n_s}$, $n_s = 4$.

Treinamento

A ideia é que o perceptron seja tal que minimize o erro quadrático médio (MSE, do inglês, *Mean Squared Error*), i.e.

$$\min_{w, b} \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} (\tilde{y}^{(s)} - y^{(s)})^2 \quad (2.17)$$

Vamos denotar a **função erro** (em inglês, *loss function*) por

$$\varepsilon(w, b) := \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} (\tilde{y}^{(s)} - y^{(s)})^2 \quad (2.18)$$

$$= \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} (wx^{(s)} + b - y^{(s)})^2 \quad (2.19)$$

Observamos que o problema (2.17) é equivalente a um problema linear de **mínimos quadrados**. A solução é obtida resolvendo-se a equação normal³

$$M^T M \mathbf{c} = M^T \mathbf{y}, \quad (2.20)$$

onde $\mathbf{c} = (w, p)$ é o vetor dos parâmetros a determinar e M é a matriz $n_s \times 2$ dada por

$$M = \begin{bmatrix} \mathbf{x} & \mathbf{1} \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

Implementação

²Escolhendo $f(z) = z$ como função de ativação.

³Consulte o Exercício 2.1.4.

Código 2.3: perceptron_mq.py

```
1 import torch
2
3 # modelo
4 class Perceptron(torch.nn.Module):
5     def __init__(self):
6         super().__init__()
7         self.linear = torch.nn.Linear(1,1)
8
9     def forward(self, x):
10         z = self.linear(x)
11         return z
12
13 model = Perceptron()
14 with torch.no_grad():
15     W = model.linear.weight
16     b = model.linear.bias
17
18 # dados de treinamento
19 X_train = torch.tensor([0.5,
20                         1.0,
21                         1.5,
22                         2.0]).reshape(-1,1)
23 y_train = torch.tensor([1.2,
24                         2.1,
25                         2.6,
26                         3.6]).reshape(-1,1)
27
28 ## número de amostras
29 ns = y_train.size(0)
30
31 print("\nDados de treinamento")
32 print("X_train =")
33 print(X_train)
34 print("y_train = ")
35 print(y_train)
36
37 # treinamento
38
39 ## matriz
```

```
40 M = torch.hstack((X_train,
41                     torch.ones((ns,1))))
42 ## solução M.Q.
43 c = torch.linalg.lstsq(M, y_train)[0]
44 with torch.no_grad():
45     W = c[0]
46     b = c[1]
47
550 48 # verificação
49 print(f'W =\n{W}')
50 print(f'b =\n{b}')
51 y = model(X_train)
500 52 print(f'y =\n{y}')
```

Resultado

Nosso perceptron corresponde ao modelo

$$\mathcal{N}(x; (w, b)) = wx + b \quad (2.22)$$

com pesos treinados $w = 1.54$ e $b = 0.45$. Ele corresponde à reta que melhor se ajusta ao conjunto de dados de $\{x^{(s)}, y^{(s)}\}_{s=1}^4$ dado na tabela acima. Consultamos a Figura 2.3.

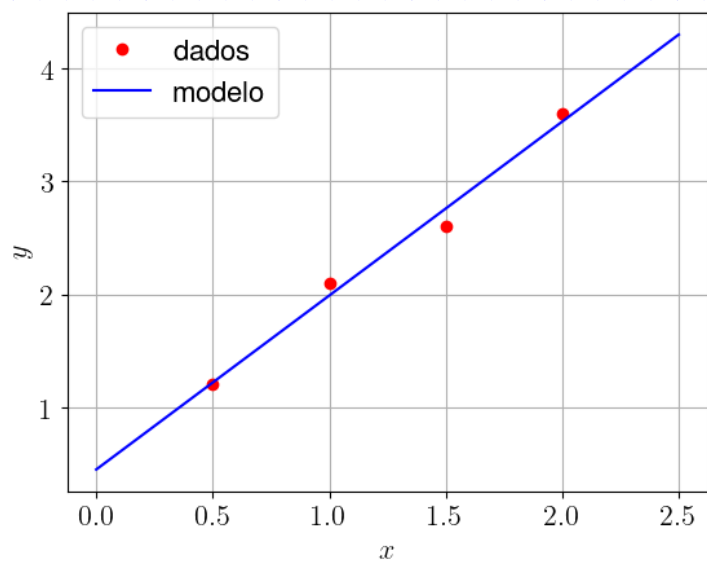


Figura 2.3: Interpretação geométrica do perceptron aplicado ao problema de regressão linear.

2.1.3 Exercícios

E.2.1.1. Crie um perceptron que emule a operação lógica do \vee (ou-lógico).

A_1	A_2	$A_1 \vee A_2$
V	V	V
V	F	V
F	V	V
F	F	F

E.2.1.2. Busque criar um perceptron que emule a operação lógica do **xor**.

A_1	A_2	$A_1 \text{ xor } A_2$
V	V	F
V	F	V
F	V	V
F	F	F

É possível? Justifique sua resposta.

E.2.1.3. Assumindo o modelo de neurônio (2.16), mostre que (2.18) é função convexa.

E.2.1.4. Mostre que a solução do problema (2.17) é dada por (2.20).

E.2.1.5. Crie um perceptron com função de ativação $f(x) = \tanh(x)$ que melhor se ajuste ao seguinte conjunto de dados:

s	$x^{(s)}$	$y^{(s)}$
1	-1,0	-0,8
2	-0,7	-0,7
3	-0,3	-0,5
4	0,0	-0,4
5	0,2	-0,2
6	0,5	0,0
7	1,0	0,3

2.2 Algoritmo de Treinamento

Na seção anterior, desenvolvemos dois modelos de neurônios para problemas diferentes, um de classificação e outro de regressão. Em cada caso, utilizamos algoritmos de treinamento diferentes. Agora, vamos estudar algoritmos de treinamentos mais gerais⁴, que podem ser aplicados a ambos os problemas.

Ao longo da seção, vamos considerar o **modelo** de neurônio

$$\tilde{y} = \mathcal{N}(\mathbf{x}; (\mathbf{w}, b)) = f(\underbrace{\mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + b}_z), \quad (2.23)$$

com dada função de ativação $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, sendo os vetores de entrada \mathbf{x} e dos pesos \mathbf{w} de tamanho n_{in} . A pré-ativação do neurônio é denotada por

$$z := \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + b \quad (2.24)$$

Fornecido um **conjunto de treinamento** $\{(\mathbf{x}^{(s)}, y^{(s)})\}_1^{n_s}$, com n_s amostras, o objetivo é calcular os parâmetros (\mathbf{w}, b) que minimizam a **função erro**

⁴Aqui, vamos explorar apenas algoritmos de treinamento supervisionado.

quadrático médio

$$\varepsilon(\mathbf{w}, b) := \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} \left(\tilde{y}^{(s)} - y^{(s)} \right)^2 \quad (2.25)$$

$$= \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} \varepsilon^{(s)} \quad (2.26)$$

onde $\tilde{y}^{(s)} = \mathcal{N}(\mathbf{x}^{(s)}; (\mathbf{w}, b))$ é o **valor estimado** pelo modelo e $y^{(s)}$ é o **valor esperado** para a s -ésima amostra. A função erro para a s -ésima amostra é

$$\varepsilon^{(s)} := \left(\tilde{y}^{(s)} - y^{(s)} \right)^2. \quad (2.27)$$

Ou seja, o treinamento consiste em resolver o seguinte **problema de otimização**

$$\min_{(\mathbf{w}, b)} \varepsilon(\mathbf{w}, b) \quad (2.28)$$

Para resolver este problema de otimização, vamos empregar o Método do Gradiente Descendente.

2.2.1 Método do Gradiente Descendente

O **Método do Gradiente Descendente** (GD, em inglês, *Gradient Descent Method*) é um **método de declive**. Aplicado ao nosso modelo de Perceptron consiste no seguinte algoritmo:

1. (\mathbf{w}, b) aproximação inicial.

2. Para $e \leftarrow 1, \dots, n_e$:

$$(a) \quad (\mathbf{w}, b) \leftarrow (\mathbf{w}, b) - l_r \frac{\partial \varepsilon}{\partial (\mathbf{w}, b)}$$

onde, n_e é o **número de épocas**, l_r é uma dada **taxa de aprendizagem** (l_r , do inglês, *learning rate*) e o **gradiente** é

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial (\mathbf{w}, b)} := \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial w_1}, \dots, \frac{\partial \varepsilon}{\partial w_{n_{in}}}, \frac{\partial \varepsilon}{\partial b} \right) \quad (2.29)$$

O cálculo do gradiente para os pesos \mathbf{w} pode ser feito como segue⁵

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{w}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} \left[\frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} \varepsilon^{(s)} \right] \quad (2.30)$$

$$= \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} \frac{\partial \varepsilon^{(s)}}{\partial \tilde{y}^{(s)}} \frac{\partial \tilde{y}^{(s)}}{\partial \mathbf{w}} \quad (2.31)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{w}} = \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} \frac{\partial \varepsilon^{(s)}}{\partial \tilde{y}^{(s)}} \frac{\partial \tilde{y}^{(s)}}{\partial z^{(s)}} \frac{\partial z^{(s)}}{\partial \mathbf{w}} \quad (2.32)$$

Observando que

$$\frac{\partial \varepsilon^{(s)}}{\partial \tilde{y}^{(s)}} = 2 \left(\tilde{y}^{(s)} - y^{(s)} \right) \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial \tilde{y}^{(s)}}{\partial z^{(s)}} = f' \left(z^{(s)} \right) \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial z^{(s)}}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{x}^{(s)} \quad (2.35)$$

obtemos

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{w}} = \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} 2 \left(\tilde{y}^{(s)} - y^{(s)} \right) f' \left(z^{(s)} \right) \mathbf{x}^{(s)} \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial b} = \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} \frac{\partial \varepsilon^{(s)}}{\partial \tilde{y}^{(s)}} \frac{\partial \tilde{y}^{(s)}}{\partial z^{(s)}} \frac{\partial z^{(s)}}{\partial b} \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial b} = \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} 2 \left(\tilde{y}^{(s)} - y^{(s)} \right) f' \left(z^{(s)} \right) \cdot 1 \quad (2.38)$$

Aplicação: Problema de Classificação

Na Subseção 2.1.1, treinamos um perceptron para o problema de classificação do e-lógico. A função de ativação $f(x) = \text{sign}(x)$ não é adequada para a aplicação do Método GD, pois $f'(x) \equiv 0$ para $x \neq 0$. Aqui, vamos usar

$$f(x) = \tanh(x). \quad (2.39)$$

⁵Aqui, há um abuso de linguagem ao não se observar as dimensões dos operandos matriciais.

Código 2.4: perceptron_gd.py

```
1 import torch
2
3 # modelo
4
5 class Perceptron(torch.nn.Module):
6     def __init__(self):
7         super().__init__()
8         self.linear = torch.nn.Linear(2,1)
9
10    def forward(self, x):
11        z = self.linear(x)
12        y = torch.tanh(z)
13        return y
14
15 model = Perceptron()
16
17 # treinamento
18
19 ## otimizador
20 optim = torch.optim.SGD(model.parameters(), lr=5e-1)
21
22 ## função erro
23 loss_fun = torch.nn.MSELoss()
24
25 ## dados de treinamento
26 X_train = torch.tensor([[1., 1.],
27                          [1., -1.],
28                          [-1., 1.],
29                          [-1., -1.]])
30 y_train = torch.tensor([1., -1., -1., -1.]).reshape(-1,1)
31
32 print("\nDados de treinamento")
33 print("X_train =")
34 print(X_train)
35 print("y_train = ")
36 print(y_train)
37
38 ## num max épocas
39 nepochs = 1000
```

```
40 tol = 1e-3
41
42 for epoch in range(nepochs):
43
44     # forward
45     y_est = model(X_train)
46
47     # erro
48     loss = loss_fun(y_est, y_train)
49
50     print(f'{epoch}: {loss.item():.4e}')
51
52     # critério de parada
53     if (loss.item() < tol):
54         break
55
56     # backward
57     optim.zero_grad()
58     loss.backward()
59     optim.step()
60
61
62 # verificação
63 y = model(X_train)
64 print(f'y_est = {y}')
```

2.2.2 Método do Gradiente Estocástico

O **Método do Gradiente Estocástico** (SGD, do inglês, *Stochastic Gradient Descent Method*) é uma variação do Método GD. A ideia é atualizar os parâmetros do modelo com base no gradiente do erro de cada amostra (ou um subconjunto de amostras⁶). A estocasticidade é obtida da randomização com que as amostras são escolhidas a cada época. O algoritmo consiste no seguinte:

1. \mathbf{w} , b aproximações iniciais.
2. Para $e \leftarrow 1, \dots, n_e$:

⁶Neste caso, é conhecido como Batch SGD.

1.1. Para $s \leftarrow \text{random}(1, \dots, n_s)$:

$$(\mathbf{w}, b) \leftarrow (\mathbf{w}, b) - l_r \frac{\partial \varepsilon^{(s)}}{\partial (\mathbf{w}, b)} \quad (2.40)$$

Aplicação: Problema de Classificação

Código 2.5: perceptron_sgd.py

```

1 import torch
2 import numpy as np
3
4 # modelo
5
6 class Perceptron(torch.nn.Module):
7     def __init__(self):
8         super().__init__()
9         self.linear = torch.nn.Linear(2,1)
10
11     def forward(self, x):
12         z = self.linear(x)
13         y = torch.tanh(z)
14         return y
15
16 model = Perceptron()
17
18 # treinamento
19
20 ## otimizador
21 optim = torch.optim.SGD(model.parameters(), lr=5e-1)
22
23 ## função erro
24 loss_fun = torch.nn.MSELoss()
25
26 ## dados de treinamento
27 X_train = torch.tensor([[1., 1.],
28                          [1., -1.],
29                          [-1., 1.],
30                          [-1., -1.]])
31 y_train = torch.tensor([1., -1., -1., -1.]).reshape(-1,1)
32

```

```
33 ## num de amostras
34 ns = y_train.size(0)
35
36 print("\nDados de treinamento")
37 print("X_train =")
38 print(X_train)
39 print("y_train = ")
40 print(y_train)
41
42 ## num max épocas
43 nepochs = 5000
44 tol = 1e-3
45
46 for epoch in range(nepochs):
47
48     # forward
49     y_est = model(X_train)
50
51     # erro
52     loss = loss_fun(y_est, y_train)
53
54     print(f'{epoch}: {loss.item():.4e}')
55
56     # critério de parada
57     if (loss.item() < tol):
58         break
59
60     # backward
61     for s in torch.randperm(ns):
62         loss_s = (y_est[s,:] - y_train[s,:])**2
63         optim.zero_grad()
64         loss_s.backward()
65         optim.step()
66         y_est = model(X_train)
67
68
69 # verificação
70 y = model(X_train)
71 print(f'y_est = {y}')
```

2.2.3 Exercícios

E.2.2.1. Calcule a derivada da função de ativação

$$f(x) = \tanh(x). \quad (2.41)$$

E.2.2.2. Crie um perceptron para emular a operação lógica \wedge (e-lógico). No treinamento, use como otimizador:

- a) Método GD.
- b) Método SGD.

E.2.2.3. Crie um perceptron para emular a operação lógica \vee (ou-lógico). No treinamento, use como otimizador:

- a) Método GD.
- b) Método SGD.

E.2.2.4. Crie um perceptron que se ajuste ao seguinte conjunto de dados:

s	$x^{(s)}$	$y^{(s)}$
1	0.5	1.2
2	1.0	2.1
3	1.5	2.6
4	2.0	3.6

No treinamento, use como otimizador:

- a) Método GD.
- b) Método SGD.

Capítulo 3

Perceptron Multicamadas

3.1 Modelo MLP

Uma perceptron multicamadas (MLP, do inglês, *multilayer perceptron*) é um tipo de rede neural artificial formada por composições de camadas de perceptrons. Consultamos a Figura 3.1.

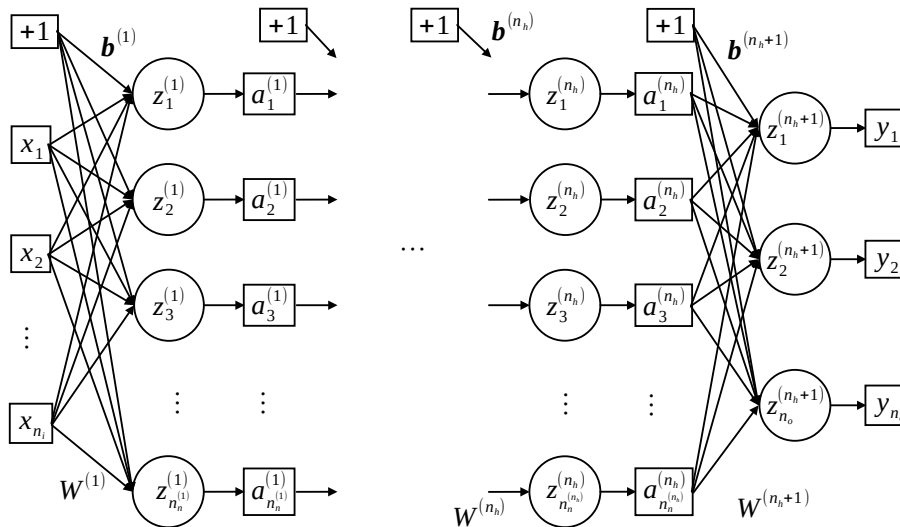


Figura 3.1: Arquitetura de uma rede do tipo perceptron multicamadas (MLP).

Denotamos uma MLP de n_l camadas por

$$\mathbf{y} = \mathcal{N}\left(\mathbf{x}; \left(W^{(l)}, \mathbf{b}^{(l)}, f^{(l)}\right)_{l=1}^{n_h+1}\right), \quad (3.1)$$

onde $(W^{(l)}, \mathbf{b}^{(l)}, f^{(l)})$ é a tripa de pesos, biases e função de ativação da l -ésima camada da rede, $l = 1, 2, \dots, n_h + 1$. Uma rede com essa arquitetura é dita ter uma camada de entrada, n_h camadas escondidas e uma camada de saída.

A saída da rede é calculada por iteradas composições das camadas, i.e.

$$\mathbf{a}^{(l)} = f^{(l)}\left(\underbrace{W^{(l)}\mathbf{a}^{(l-1)} + \mathbf{b}^{(l)}}_{\mathbf{z}^{(l)}}\right), \quad (3.2)$$

para $l = 1, 2, \dots, n_h + 1$, denotando a entrada por $\mathbf{x} =: \mathbf{a}^{(0)}$ e a saída por $\mathbf{y} =: \mathbf{a}^{(n_h+1)}$.

3.1.1 Treinamento

Em um treinamento supervisionado, tem-se um dado conjunto de treinamento $\{\mathbf{x}^{(s)}, \mathbf{y}^{(s)}\}_{s=1}^{n_s}$, com n_s amostras. O treinamento da rede consiste em resolver o problema de minimização

$$\min_{(W, \mathbf{b})} \left\{ \varepsilon := \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} \varepsilon^{(s)}(\tilde{\mathbf{y}}^{(s)}, \mathbf{y}^{(s)}) \right\} \quad (3.3)$$

onde ε é uma dada função erro (em inglês, *loss function*) e $\varepsilon^{(s)}$ é uma medida do erro da saída estimada $\tilde{\mathbf{y}}^{(s)}$ da saída esperada $\mathbf{y}^{(s)}$.

O problema de minimização pode ser resolvido por um método de declive e, de forma geral, consiste em:

1. W, \mathbf{b} aproximações iniciais.

2. Para $e \leftarrow 1, \dots, n_e$:

(a) $(W, \mathbf{b}) \leftarrow (W, \mathbf{b}) - l_r \mathbf{d}(\nabla_{W, \mathbf{b}} \varepsilon)$

onde, n_e é o **número de épocas**, l_r é uma dada **taxa de aprendizagem** (em inglês, *learning rate*) e $\mathbf{d} = \mathbf{d}(\nabla_{W, \mathbf{b}} \varepsilon)$ é o vetor direção, onde

$$\nabla_{W, \mathbf{b}} \varepsilon := \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial W}, \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{b}} \right) \quad (3.4)$$

$$= \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} \left(\frac{\partial \varepsilon^{(s)}}{\partial W}, \frac{\partial \varepsilon^{(s)}}{\partial \mathbf{b}} \right) \quad (3.5)$$

O cálculo dos gradientes pode ser feito por **retropropagação** (em inglês, *backward*). Para os pesos da última camada, temos¹

$$\frac{\partial \varepsilon^{(s)}}{\partial W^{(n_h+1)}} = \frac{\partial \varepsilon^{(s)}}{\partial \mathbf{y}} \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{z}^{(n_h+1)}} \frac{\partial \mathbf{z}^{(n_h+1)}}{\partial W^{(n_h+1)}} \quad (3.6)$$

$$= \frac{\partial \varepsilon^{(s)}}{\partial \mathbf{y}} f' \left(W^{(n_h+1)} \mathbf{a}^{(n_h)} + \mathbf{b}^{(n_h+1)} \right) \mathbf{a}^{(n_h)}. \quad (3.7)$$

Para os pesos da penúltima camada, temos

$$\frac{\partial \varepsilon^{(s)}}{\partial W^{(n_h)}} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{y}} \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{z}^{(n_h+1)}} \frac{\partial \mathbf{z}^{(n_h+1)}}{\partial W^{(n_h)}}, \quad (3.8)$$

$$= \frac{\partial \varepsilon^{(s)}}{\partial \mathbf{y}} f' \left(\mathbf{z}^{(n_h+1)} \right) \frac{\partial \mathbf{z}^{(n_h+1)}}{\partial \mathbf{a}^{(n_h)}} \frac{\partial \mathbf{a}^{(n_h)}}{\partial \mathbf{z}^{(n_h)}} \frac{\partial \mathbf{z}^{(n_h)}}{\partial W^{(n_h)}} \quad (3.9)$$

$$= \frac{\partial \varepsilon^{(s)}}{\partial \mathbf{y}} f' \left(\mathbf{z}^{(n_h+1)} \right) W^{(n_h+1)} f' \left(\mathbf{z}^{(n_h)} \right) \mathbf{a}^{(n_h-1)} \quad (3.10)$$

e assim, sucessivamente para as demais camadas da rede. Os gradientes em relação aos *biases* podem ser calculados de forma análoga.

3.1.2 Aplicação: Problema de Classificação XOR

Vamos desenvolver uma MLP que faça a operação **xor** (ou exclusivo). A rede recebe como entrada dois valores lógicos A_1 e A_2 (V, verdadeiro ou F, falso) e fornece como saída o valor lógico $R = A_1 \text{ xor } A_2$. Consultamos a tabela verdade:

A_1	A_2	R
V	V	F
V	F	V
F	V	V
F	F	F

¹Com um certo abuso de linguagem devido à álgebra matricial envolvida.

Assumindo $V = 1$ e $F = -1$, podemos modelar o problema tendo entradas $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ e saída y como na seguinte tabela:

x_1	x_2	y
1	1	-1
1	-1	1
-1	1	1
-1	-1	-1

Modelo

Vamos usar uma MLP de estrutura $2 - 2 - 1$ e com funções de ativação $f^{(1)}(\mathbf{x}) = \tanh(\mathbf{x})$ e $f^{(2)}(\mathbf{x}) = id(\mathbf{x})$. Ou seja, nossa rede tem duas entradas, uma **camada escondida** com 2 unidades (função de ativação tangente hiperbólica) e uma camada de saída com uma unidade (função de ativação identidade).

Treinamento

Para o treinamento, vamos usar a função **erro quadrático médio** (em inglês, *mean squared error*)

$$\varepsilon := \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} |\tilde{y}^{(s)} - y^{(s)}|^2, \quad (3.11)$$

onde $\tilde{y}^{(s)} = \mathcal{N}(\mathbf{x}^{(s)})$ são os valores estimados e $\{\mathbf{x}^{(s)}, y^{(s)}\}_{s=1}^{n_s}$, $n_s = 4$, o conjunto de treinamento conforme na tabela acima.

Implementação

O seguinte código implementa a **MLP com Método do Gradiente Descendente (DG)** como otimizador do algoritmo de treinamento.

Código 3.1: mlp_xor.py

```
1 import torch
2
3 # modelo
4
5 model = torch.nn.Sequential()
```

```
6 model.add_module('layer_1', torch.nn.Linear(2,2))
7 model.add_module('fun_1', torch.nn.Tanh())
8 model.add_module('layer_2', torch.nn.Linear(2,1))
9
10
11 # treinamento
12
13 ## otimizador
14 optim = torch.optim.SGD(model.parameters(),
15                           lr=5e-1)
16
17 ## dados de treinamento
18 X_train = torch.tensor([[1., 1.],
19                          [1., -1.],
20                          [-1., 1.],
21                          [-1., -1.]])
22 y_train = torch.tensor([-1., 1., 1., -1.]).reshape(-1,1)
23
24 print("\nDados de treinamento")
25 print("X_train =")
26 print(X_train)
27 print("y_train = ")
28 print(y_train)
29
30 ## num max épocas
31 nepochs = 5000
32 tol = 1e-3
33
34 for epoch in range(nepochs):
35
36     # forward
37     y_est = model(X_train)
38
39     # função erro
40     loss = torch.mean((y_est - y_train)**2)
41
42     print(f'{epoch}: {loss.item():.4e}')
43
44     # critério de parada
45     if (loss.item() < tol):
```



```
46         break
47
48     # backward
49     optim.zero_grad()
50     loss.backward()
51     optim.step()
52
53
54 # verificação
55 y = model(X_train)
56 print(f'y_est = {y}')
```

3.1.3 Exercícios

E.3.1.1. Faça uma nova versão do Código , de forma que a MLP tenha tangente hiperbólica como função de ativação na sua saída.

E.3.1.2. Faça uma nova versão do Código usando o método do gradiente estocástico (SGD) como otimizador no algoritmo de treinamento.

E.3.1.3. Crie uma MLP para emular a operação lógica \wedge (e-lógico). No treinamento, use como otimizador:

- a) Método GD.
- b) Método SGD.

E.3.1.4. Crie uma MLP para emular a operação lógica \vee (ou-lógico). No treinamento, use como otimizador:

- a) Método GD.
- b) Método SGD.

E.3.1.5. Considere uma MLP com $n_l = 3$ camadas escondidas. Sendo ε uma dada função erro, calcule:

1. $\frac{\partial \varepsilon}{\partial W_{n_l-2}}.$

$$2. \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{b}^{n_l-2}}.$$

3.2 Aplicação: Problema de Classificação Binária

Em construção

Vamos estudar uma aplicação de redes neurais artificiais em um problema de classificação binária não linear.

3.2.1 Dados

Em construção

Vamos desenvolver uma rede do tipo Perceptron Multicamadas (MLP) para a classificação binária de pontos, com base nos seguintes dados.

```
1 from sklearn.datasets import make_circles
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 plt.rcParams.update({
5     "text.usetex": True,
6     "font.family": "serif",
7     "font.size": 14
8 })
9
10 # data
11 print('data')
12 n_samples = 1000
13 print(f'n_samples = {n_samples}')
14 # X = points, y = labels
15 X, y = make_circles(n_samples,
16                     noise=0.03, # add noise
17                     random_state=42) # random seed
18
19 fig = plt.figure()
20 ax = fig.add_subplot()
21 ax.scatter(X[:,0], X[:,1], c=y, cmap=plt.cm.coolwarm)
```

```
22 ax.grid()
23 ax.set_xlabel('$x_1$')
24 ax.set_ylabel('$x_2$')
25 plt.show()
```

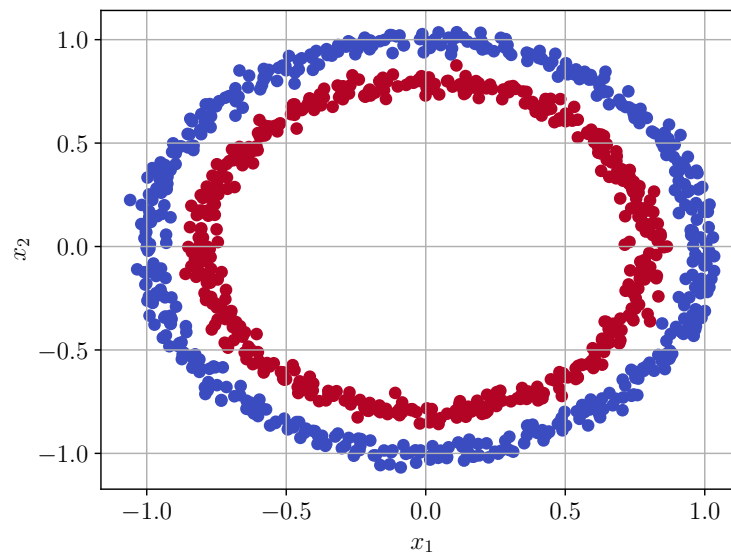


Figura 3.2: Dados para a o problema de classificação binária não linear.

3.2.2 Modelo

Em construção

Vamos usar uma MLP de estrutura 2-10-1, com função de ativação

$$\text{elu}(x) = \begin{cases} x & , x > 0 \\ \alpha(e^x - 1) & , x \leq 0 \end{cases} \quad (3.12)$$

na camada escondida e

$$\text{sigmoid}(x) = \frac{1}{1 + e^x} \quad (3.13)$$

na saída da rede.

Para o treinamento e teste, vamos randomicamente separar os dados em um conjunto de treinamento $\{\mathbf{x}_{\text{train}}^{(k)}, y_{\text{train}}^{(k)}\}_{k=1}^{n_{\text{train}}}$ e um conjunto de teste $\{\mathbf{x}_{\text{test}}^{(k)}, y_{\text{test}}^{(k)}\}_{k=1}^{n_{\text{test}}}$, com $y = 0$ para os pontos azuis e $y = 1$ para os pontos vermelhos.

3.2.3 Treinamento e Teste

Em construção

Código 3.2: mlp_classbin.py

```

1 import torch
2 from sklearn.datasets import make_circles
3 from sklearn.model_selection import train_test_split
4 import matplotlib.pyplot as plt
5
6 # data
7 print('data')
8 n_samples = 1000
9 print(f'n_samples = {n_samples}')
10 # X = points, y = labels
11 X, y = make_circles(n_samples,
12                     noise=0.03, # add noise
13                     random_state=42) # random seed
14
15 ## numpy -> torch
16 X = torch.from_numpy(X).type(torch.float)
17 y = torch.from_numpy(y).type(torch.float).reshape(-1,1)
18
19 ## split into train and test datasets
20 print('Data: train and test sets')
21 X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X,
22                                                     y,
23                                                     test_size=0.2,
24                                                     random_state=42)
25 print(f'n_train = {len(X_train)}')
26 print(f'n_test = {len(X_test)}')
27 plt.close()
28 plt.scatter(X_train[:,0], X_train[:,1], c=y_train,
29             marker='o', cmap=plt.cm.coolwarm, alpha=0.3)

```

```
30 plt.scatter(X_test[:,0], X_test[:,1], c=y_test,
31             marker='*', cmap=plt.cm.coolwarm)
32 plt.show()
33
34 # model
35 model = torch.nn.Sequential(
36     torch.nn.Linear(2, 10),
37     torch.nn.ELU(),
38     torch.nn.Linear(10, 1),
39     torch.nn.Sigmoid()
40 )
41
42 # loss fun
43 loss_fun = torch.nn.BCELoss()
44
45 # optimizer
46 optimizer = torch.optim.SGD(model.parameters(),
47                               lr = 1e-1)
48
49 # evaluation metric
50 def accuracy_fun(y_pred, y_exp):
51     correct = torch.eq(y_pred, y_exp).sum().item()
52     acc = correct/len(y_exp) * 100
53     return acc
54
55 # train
56 n_epochs = 10000
57 n_out = 100
58
59 for epoch in range(n_epochs):
60     model.train()
61
62     y_pred = model(X_train)
63
64     loss = loss_fun(y_pred, y_train)
65
66     acc = accuracy_fun(torch.round(y_pred),
67                        y_train)
68
69     optimizer.zero_grad()
```

```
70     loss.backward()
71     optimizer.step()
72
73     model.eval()
74
75     #testing
76     if ((epoch+1) % n_out == 0):
77         with torch.inference_mode():
78             y_pred_test = model(X_test)
79             loss_test = loss_fun(y_pred_test,
80                                 y_test)
81             acc_test = accuracy_fun(torch.round(y_pred_test),
82                                     y_test)
83
84     print(f'{epoch+1}: loss = {loss:.5e}, accuracy = {acc:.2f}%')
85     print(f'\ttest: loss = {loss:.5e}, accuracy = {acc:.2f}%\n')
```

3.2.4 Verificação

Em construção

Para a verificação, testamos o modelo em uma malha uniforme de 100×100 pontos no domínio $[-1, 1]^2$. Consulte a Figure 3.3.

Notas de Aula - Pedro Konzen */* Licença CC-BY-SA 4.0

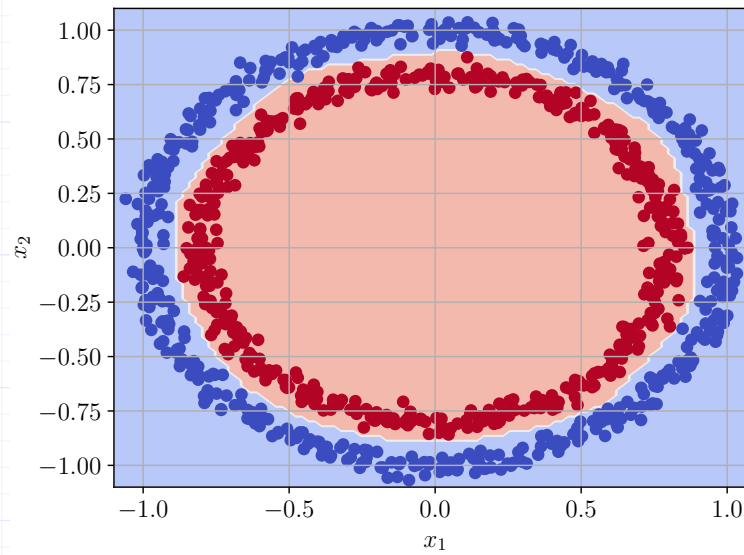


Figura 3.3: Verificação do modelo de classificação binária.

```

1 # malha de pontos
2 xx = torch.linspace(-1.1, 1.1, 100)
3 Xg, Yg = torch.meshgrid(xx, xx)
4
5 # valores estimados
6 Zg = torch.empty_like(Xg)
7 for i, xg in enumerate(xx):
8     for j, yg in enumerate(xx):
9         z = model(torch.tensor([[xg, yg]])).detach()
10        Zg[i, j] = torch.round(z)
11
12 # visualização
13 fig = plt.figure()
14 ax = fig.add_subplot()
15 ax.contourf(Xg, Yg, Zg, levels=2, cmap=plt.cm.coolwarm, alpha=0.5)
16 ax.scatter(X[:,0], X[:,1], c=y, cmap=plt.cm.coolwarm)
17 plt.show()

```

3.2.5 Exercícios

Em construção

3.3 Aplicação: Aproximação de Funções

Redes Perceptron Multicamadas (MLPs) são aproximadoras universais.

Nesta seção, vamos aplicá-las na aproximação de funções uni- e bidimensionais.

3.3.1 Função unidimensional

Vamos criar uma MLP para aproximar a função

$$y = \sin(\pi x), \quad (3.14)$$

para $x \in [-1, 1]$.

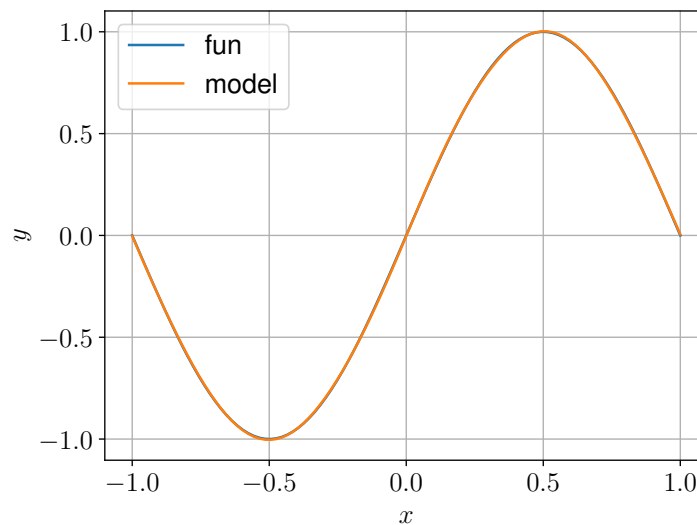


Figura 3.4: Aproximação da MLP da função $y = \sin(\pi x)$.

Código 3.3: mlp_apfun_1d

```
1 import torch
```

Notas de Aula - Pedro Konzen */* Licença CC-BY-SA 4.0


```
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 # modelo
5
6 model = torch.nn.Sequential()
7 model.add_module('layer_1', torch.nn.Linear(1,25))
8 model.add_module('fun_1', torch.nn.Tanh())
9 model.add_module('layer_2', torch.nn.Linear(25,25))
10 model.add_module('fun_2', torch.nn.Tanh())
11 model.add_module('layer_3', torch.nn.Linear(25,1))
12
13 # treinamento
14
15 ## fun obj
16 fun = lambda x: torch.sin(torch.pi*x)
17 a = -1.
18 b = 1.
19
20 ## otimizador
21 optim = torch.optim.SGD(model.parameters(),
22                           lr=1e-1, momentum=0.9)
23
24 ## num de amostras por época
25 ns = 100
26 ## num max épocas
27 nepochs = 5000
28 ## tolerância
29 tol = 1e-5
30
31 ## amostras de validação
32 X_val = torch.linspace(a, b, steps=100).reshape(-1,1)
33 y_vest = fun(X_val)
34
35 for epoch in range(nepochs):
36
37     # amostras
38     X_train = (a - b) * torch.rand((ns,1)) + b
39     y_train = fun(X_train)
40
41     # forward
```

```
42     y_est = model(X_train)
43
44     # erro
45     loss = torch.mean((y_est - y_train)**2)
46
47     print(f'{epoch}: {loss.item():.4e}')
48
49     # backward
50     optim.zero_grad()
51     loss.backward()
52     optim.step()
53
54     # validação
55     y_val = model(X_val)
56     loss_val = torch.mean((y_val - y_val)**2)
57     print(f'\tloss_val = {loss_val.item():.4e}')
58
59     # critério de parada
60     if (loss_val.item() < tol):
61         break
62
63
64 # verificação
65 fig = plt.figure()
66 ax = fig.add_subplot()
67
68 x = torch.linspace(a, b,
69                     steps=100).reshape(-1,1)
70
71 y_esp = fun(x)
72 ax.plot(x, y_esp, label='fun')
73
74 y_est = model(x)
75 ax.plot(x, y_est.detach(), label='model')
76
77 ax.legend()
78 ax.grid()
79 ax.set_xlabel('x')
80 ax.set_ylabel('y')
81 plt.show()
```

3.3.2 Função bidimensional

Vamos criar uma MLP para aproximar a função bidimensional

$$y = \text{sen}(\pi x_1) \text{sen}(\pi x_2), \quad (3.15)$$

para $(x_1, x_2) \in \mathcal{D} := [-1, 1]^2$.

Vamos usar uma arquitetura de rede $2 - n_n \times 3 - 1$ (duas entradas, 3 camadas escondidas com n_n neurônios e uma saída). Nas $n_h = 3$ camadas escondidas, vamos usar a tangente hiperbólica como função de ativação.

Para o treinamento, vamos usar o erro médio quadrático como função erro

$$\varepsilon = \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} |\tilde{y}^{(s)} - y^{(s)}|^2, \quad (3.16)$$

onde, a cada época, n_s pontos randômicos² $\{\mathbf{x}^{(s)}\} \subset \mathcal{D}$ são usados para gerar o conjunto de treinamento $\{(\mathbf{x}^{(s)}, y^{(s)})\}_{s=1}^{n_s}$.

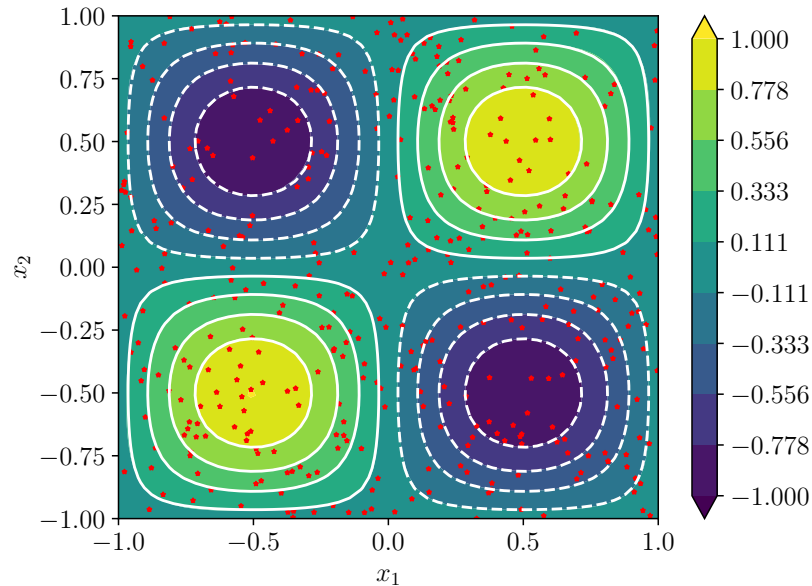


Figura 3.5: Aproximação MLP da função $y = \text{sen}(\pi x_1) \text{sen}(\pi x_2)$. Linhas: isolinhas da função. Mapa de cores: MLP. Estrelas: pontos de treinamentos na última época.

²Em uma distribuição uniforme.

Código 3.4: mlp_apfun_2d

```
1  import torch
2
3  # modelo
4  nn = 50
5  model = torch.nn.Sequential()
6  model.add_module('layer_1', torch.nn.Linear(2,nn))
7  model.add_module('fun_1', torch.nn.Tanh())
8  model.add_module('layer_2', torch.nn.Linear(nn,nn))
9  model.add_module('fun_2', torch.nn.Tanh())
10 model.add_module('layer_3', torch.nn.Linear(nn,nn))
11 model.add_module('fun_3', torch.nn.Tanh())
12 model.add_module(f'layer_4', torch.nn.Linear(nn,1))
13
14 # treinamento
15
16 ## fun obj
17 def fun(x1, x2):
18     return torch.sin(torch.pi*x1) * \
19         torch.sin(torch.pi*x2)
20
21 x1_a = -1.
22 x1_b = 1
23
24 x2_a = -1.
25 x2_b = 1.
26
27
28 ## otimizador
29 optim = torch.optim.SGD(model.parameters(),
30                          lr=1e-1, momentum=0.9)
31
32 ## num de amostras por época
33 ns = 20
34 ## num max épocas
35 nepochs = 50000
36 ## tolerância
37 tol = 1e-4
38
39 ## amostras de validação
```

```
40     n_val = 50
41     x1 = torch.linspace(x1_a, x1_b, steps=n_val)
42     x2 = torch.linspace(x2_a, x2_b, steps=n_val)
43     X1_val, X2_val = torch.meshgrid(x1, x2, indexing='ij')
44     X_val = torch.hstack((X1_val.reshape(n_val**2,1),
45                             X2_val.reshape(n_val**2,1)))
46     Y_vest = fun(X1_val, X2_val).reshape(-1,1)
47
48     for epoch in range(nepochs):
49
50         # amostras
51         X1 = (x1_b - x1_a) * torch.rand(ns**2, 1) + x1_a
52         X2 = (x2_b - x2_a) * torch.rand(ns**2, 1) + x2_a
53         # X1, X2 = torch.meshgrid(x1, x2, indexing='ij')
54         X_train = torch.hstack((X1, X2))
55         Y_train = fun(X1, X2).reshape(-1,1)
56
57
58         # forward
59         Y_est = model(X_train)
60
61         # erro
62         loss = torch.mean((Y_est - Y_train)**2)
63
64         if (epoch % 100 == 0):
65             print(f'{epoch}: {loss.item():.4e}')
66
67         # backward
68         optim.zero_grad()
69         loss.backward()
70         optim.step()
71
72         # validação
73         if (epoch % 100 == 0):
74             Y_val = model(X_val)
75             loss_val = torch.mean((Y_val - Y_vest)**2)
76
77             print(f"\tloss_val = {loss_val.item():.4e}")
78
79         # critério de parada
```

```
80         if (loss_val.item() < tol):  
81             break
```

3.3.3 Exercícios

E.3.3.1. Crie uma MLP para aproximar a função gaussiana

$$y = e^{-x^2} \quad (3.17)$$

para $x \in [-1, 1]$.

E.3.3.2. Crie uma MLP para aproximar a função $y = \sin(x)$ para $x \in [-\pi, \pi]$.

E.3.3.3. Crie uma MLP para aproximar a função $y = \sin(x) + \cos(x)$ para $x \in [0, 2\pi]$.

E.3.3.4. Crie uma MLP para aproximar a função gaussiana

$$z = e^{-(x^2+y^2)} \quad (3.18)$$

para $(x, y) \in [-1, 1]^2$.

E.3.3.5. Crie uma MLP para aproximar a função $y = \sin(x_1) \cos(x_2)$ para $(x_1, x_2) \in [0, \pi] \times [-\pi, 0]$.

E.3.3.6. Crie uma MLP para aproximar a função $y = \sin(x_1) + \cos(x_2)$ para $(x_1, x_2) \in [-2\pi, 2\pi]$.

3.4 Diferenciação Automática

Diferenciação automática é um conjunto de técnicas para a computação de derivadas numéricas em um programa de computador. Explora-se o fato de que um programa computacional executa uma sequência de operações aritméticas e funções elementares, podendo-se computar a derivada por aplicações da **regra da cadeia**.

PyTorch computa o **gradiente** (derivada) de uma função $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ a partir de seu **grafo computacional**. Os gradientes são computados por

retropropagação. Por exemplo, para a computação do gradiente

$$\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}_0) = \left. \frac{df}{d\mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0}, \quad (3.19)$$

primeiramente, propaga-se a entrada \mathbf{x}_0 pela função computacional f , obtendo-se $y = f(\mathbf{x}_0)$. Então, o gradiente é computado por retropropagação.

Exemplo 3.4.1. Consideramos a função $f(x) = \text{sen}(\pi x)$ e vamos computar

$$f'(x_0) = \left. \frac{df}{dx} \right|_{x=0} \quad (3.20)$$

por diferenciação automática.

Antes, observamos que, pela regra da cadeia, denotamos $u = \pi x$ e calculamos

$$\frac{df}{dx} = \frac{d}{du} \text{sen}(u) \cdot \frac{du}{dx} \quad (3.21)$$

$$= \cos(u) \cdot \pi \quad (3.22)$$

$$= \pi \cos(\pi x) \quad (3.23)$$

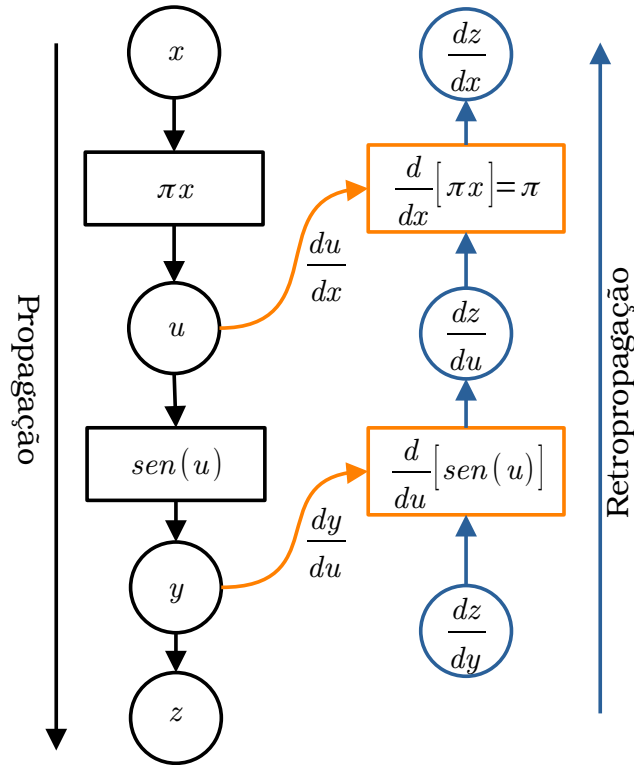


Figura 3.6: Grafo computacional da diferenciação automática de $f(x) = \text{sen}(\pi x)$.

Agora, observamos que a computação de $f(x)$ pode ser representada pelo grafo de propagação mostrado na Figura 3.6. Para a computação do gradiente, adicionamos uma variável fictícia $z = y$. Na retropropagação, computamos

$$\text{a. } \frac{dz}{dy} = 1 \quad (3.24a)$$

$$\begin{aligned} \text{b. } \frac{dz}{du} &= \frac{dy}{du} \frac{dz}{dy} \\ &= \frac{d}{du} [\text{sen}(u)] \cdot 1 \\ &= \cos(u) \end{aligned} \quad (3.24b)$$

$$c. \frac{dz}{dx} = \frac{du}{dx} \frac{dz}{du} \quad (3.24c)$$

$$= \frac{d}{dx} [\pi x] \cos(u) \quad (3.24d)$$

$$= \pi \cos(\pi x) = \frac{dy}{dx}. \quad (3.24e)$$

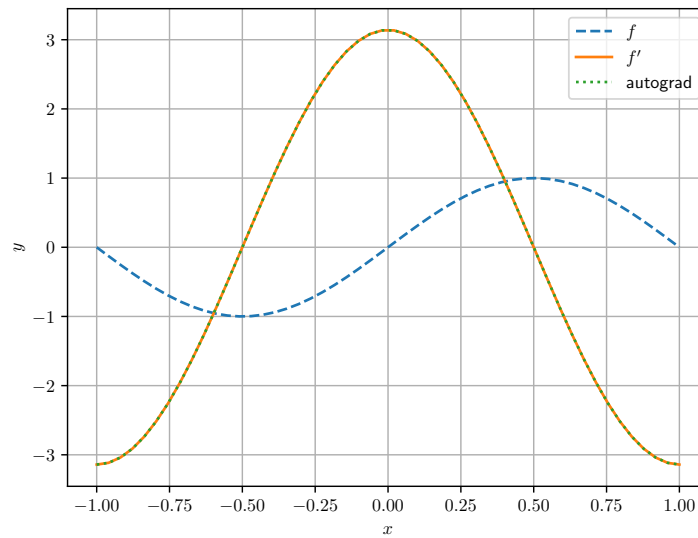


Figura 3.7: Comparação entre as diferenciações analítica (f') e automática (autograd).

Código 3.5: mlp_autograd_df1d

```
1 import torch
2
3 # input
4 x = torch.linspace(-1., 1., steps=50).reshape(-1,1)
5 # requires grad
6 x.requires_grad = True
7
8 # output
9 y = torch.sin(torch.pi*x)
10
11 # compute gradients
```

```
12 y.backward(gradient=torch.ones_like(y))
13
14 #  $dy/dx$ 
15 dydx = x.grad
```

A computação do gradiente também acaba por construir um novo grafo (consulte Figura 3.6). Este, por sua vez, pode ser usado para a computação da diferenciação automática de segunda ordem, i.e. para a derivação de segunda ordem.

Exemplo 3.4.2. Consideramos a função $y = \sin(\pi x)$. No exemplo anterior, computamos $dy/dx = \pi \cos(\pi x)$ por diferenciação automática. No Código 3.5, os gradientes foram computados com o comando

```
1 y.backward(gradient=torch.ones_like(y))
2 dudx = x.grad
```

Alternativamente, podemos usar

```
1 dydx = torch.autograd.grad(
2     y, x,
3     grad_outputs=torch.ones_like(y),
4     retain_graph=True,
5     create_graph=True)[0]
```

Este comando computa dy/dx , mas avisa o [PyTorch](#) que os grafos computacionais sejam mantidos e que um novo grafo seja gerado da retropropagação. Com isso, podemos computar o gradiente do gradiente, como no código abaixo.

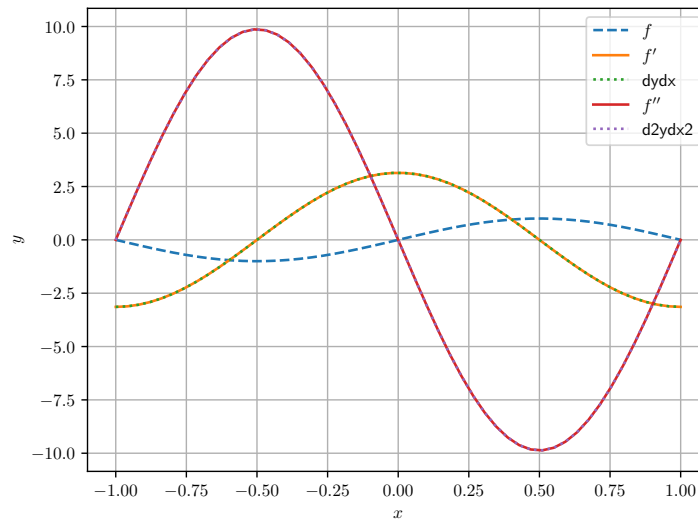


Figura 3.8: Comparação entre as diferenciações analítica (f' , f'') e automática (dydx, d2ydx2).

Código 3.6: mlp_autograd_d2f1d

```

1 import torch
2
3 # input
4 x = torch.linspace(-1., 1., steps=50).reshape(-1,1)
5 # requires_grad
6 x.requires_grad = True
7
8 # output
9 y = torch.sin(torch.pi*x)
10
11 # compute gradients
12 dydx = torch.autograd.grad(
13     y, x,
14     grad_outputs=torch.ones_like(y),
15     retain_graph=True,
16     create_graph=True)[0]
17
18 d2ydx2 = torch.autograd.grad(
19     dydx, x,
20     grad_outputs=torch.ones_like(dydx))[0]

```

3.4.1 Autograd MLP

Os conceitos de diferenciação automática (**autograd**) são diretamente estendidos para redes do tipo Perceptron Multicamadas (MLP, do inglês, *Multilayer Perceptron*). Uma MLP é uma composição de funções definidas por parâmetros (pesos e *biases*). Seu treinamento ocorre em duas etapas³:

1. **Propagação (*forward*)**: os dados de entrada são propagados para todas as funções da rede, produzindo a saída estimada.
2. **Retropropagação (*backward*)**: a computação do gradiente do erro⁴ em relação aos parâmetros da rede é realizado coletando as derivadas (gradientes) das funções da rede. Pela regra da cadeia, essa coleta é feita a partir da camada de saída em direção a camada de entrada da rede.

No seguinte exemplo, exploramos o fato de MLPs serem aproximadoras universais e avaliamos a derivada de uma MLP na aproximação de uma função.

Exemplo 3.4.3. Vamos criar uma MLP

$$\tilde{y} = \mathcal{N}\left(x; \left(W^{(l)}, \mathbf{b}^{(l)}, f^{(l)}\right)_{l=1}^n\right), \quad (3.25)$$

que aproxima a função

$$y = \text{sen}(\pi x), \quad x \in [-1, 1]. \quad (3.26)$$

Em seguida, computamos, por diferenciação automática, o gradiente

$$\frac{d\tilde{y}}{dx} = \nabla_x \mathcal{N}(x) \quad (3.27)$$

e comparamos com o resultado esperado

$$\frac{dy}{dx} = \pi \cos(\pi x). \quad (3.28)$$

³Para mais detalhes, consulte a Subseção 3.1.1.

⁴Medida da diferença entre o valor estimado e o valor esperado.

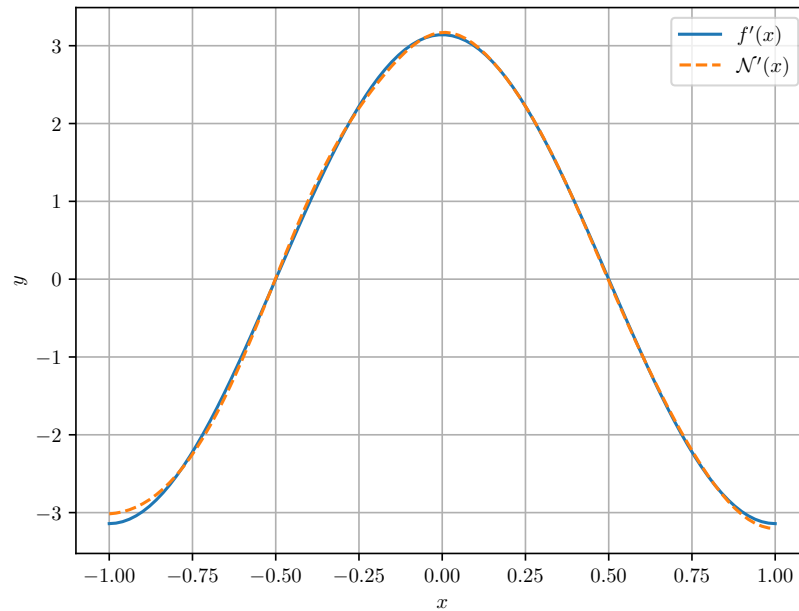


Figura 3.9: Comparação da diferenciação automática da MLP com a derivada analítica $f'(x) = \pi \cos(\pi x)$.

Código 3.7: mlp_autograd_apfun1d.py

```
1 import torch
2 from torch import nn
3 from torch import autograd
4
5 # modelo
6
7 model = torch.nn.Sequential()
8 model.add_module('layer_1', torch.nn.Linear(1,25))
9 model.add_module('fun_1', torch.nn.Tanh())
10 model.add_module('layer_2', torch.nn.Linear(25,25))
11 model.add_module('fun_2', torch.nn.Tanh())
12 model.add_module('layer_3', torch.nn.Linear(25,1))
13
14 # treinamento
15
16 ## fun obj
17 fun = lambda x: torch.sin(torch.pi*x)
```

```
18 a = -1.
19 b = 1.
20
21 ## otimizador
22 optim = torch.optim.SGD(model.parameters(),
23                           lr=1e-1, momentum=0.9)
24
25 ## num de amostras por época
26 ns = 100
27 ## num max épocas
28 nepochs = 5000
29 ## tolerância
30 tol = 1e-5
31
32 ## amostras de validação
33 X_val = torch.linspace(a, b, steps=100).reshape(-1,1)
34 y_vest = fun(X_val)
35
36 for epoch in range(nepochs):
37
38     # amostras
39     X_train = (a - b) * torch.rand((ns,1)) + b
40     y_train = fun(X_train)
41
42     # forward
43     y_est = model(X_train)
44
45     # erro
46     loss = torch.mean((y_est - y_train)**2)
47
48     print(f'{epoch}: {loss.item():.4e}')
49
50     # backward
51     optim.zero_grad()
52     loss.backward()
53     optim.step()
54
55     # validação
56     y_val = model(X_val)
57     loss_val = torch.mean((y_val - y_vest)**2)
```

```
58     print(f"\tloss_val = {loss_val.item():.4e}")
59
60     # critério de parada
61     if (loss_val.item() < tol):
62         break
63
64 # autograd MLP
65 X_val.requires_grad = True
66 # forward
67 y_val = model(X_val)
68 # gradient
69 dydx = autograd.grad(
70     y_val, X_val,
71     grad_outputs=torch.ones_like(y_val))[0]
```

3.4.2 Exercícios

E.3.4.1. Por diferenciação automática, compute o gradiente (a derivada) das seguintes funções

- a) $f(x) = x^2 - 2x + 1$ para valores $x \in [-2, 2]$.
- b) $g(x) = \cos^2(x)$ para valores $x \in [0, 2\pi]$.
- c) $h(x) = \ln(x - 1)$ para valores $x \in (-1, 2]$.
- d) $u(t) = e^{-t^2} \sin(t)$ para valores $t \in [-\pi, \pi]$.

Em cada caso, compare os valores computados com os valores esperados.

E.3.4.2. Em cada item do Exercício 3.4.1, faça um fluxograma dos grafos computacionais da propagação e da retropropagação na computação dos gradientes.

E.3.4.3. Em cada item do Exercício 3.4.1, compute a derivada de segunda ordem da função indicada. Compare os valores computados com os valores esperados.

E.3.4.4. Por diferenciação automática, compute os gradientes das seguintes funções:

a) $f(x, y) = x^2 + y^2$ para valores $(x, y) \in [-1, 1]^2$.

b) $g(x, y) = e^x \sin(xy)$ para valores $(x, y) \in (-1, 2) \times (0, \pi)$.

Em cada caso, compare os valores computados com os valores esperados.

E.3.4.5. Para as funções de cada item do Exercício 3.4.6, compute:

a) $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$.

b) $\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$.

c) $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$.

Compare os valores computados com os valores esperados.

E.3.4.6. Em cada item do Exercício 3.4.6, compute o laplaciano $\Delta = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)$ da função indicada. Compare os valores computados com os valores esperados.

E.3.4.7. Seja a função $\mathbf{f} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ definida por

$$\mathbf{f}(x, y) = \begin{bmatrix} xy^2 - x^2y + 6 \\ x + x^2y^3 - 7 \end{bmatrix} \quad (3.29)$$

no domínio $\mathcal{D} = [-1, 2] \times [1, 3]$. Por diferenciação automática e para valores no domínio da função, compute:

a) $\nabla f_1(x, y)$.

b) $\nabla f_2(x, y)$.

c) $\frac{\partial^2 f_1}{\partial x^2}$.

d) $\frac{\partial^2 f_1}{\partial x \partial y}$.

e) $\frac{\partial^2 f_1}{\partial y^2}$.

f) $\frac{\partial^2 f_2}{\partial x^2}.$

g) $\frac{\partial^2 f_2}{\partial x \partial y}.$

h) $\frac{\partial^2 f_2}{\partial y^2}.$

Capítulo 4

Redes Informadas pela Física

[[tag:construcao]]

Redes neurais informadas pela física (PINNs, do inglês, *physics-informed neural networks*) são métodos de *deep learning* para a solução de equações diferenciais.

4.1 Aplicação: Equação de Poisson

Vamos criar uma **MLP para resolver o problema de Poisson**¹

$$-\Delta u = f, \mathbf{x} \in \mathcal{D} = (-1, 1)^2, \quad (4.1a)$$

$$u = 0, \mathbf{x} \in \partial D, \quad (4.1b)$$

com fonte dada

$$f(x_1, x_2) = \pi^2 \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2). \quad (4.2)$$

No treinamento, vamos usar a **função erro baseada no resíduo da equação de Poisson** (4.1a) e nas condições de contorno (4.1b). Mais especificamente, assumimos a função erro

$$\varepsilon := \underbrace{\frac{1}{n_{s,in}} \sum_{s=1}^{n_{s,in}} \left| \mathcal{R}(\tilde{u}^{(s)}) \right|^2}_{\text{resíduo}} + \underbrace{\frac{1}{n_{s,cc}} \sum_{s=1}^{n_{s,cc}} |\tilde{u}^s|^2}_{\text{c.c.}} \quad (4.3)$$

¹Siméon Denis Poisson, 1781 - 1840, matemático francês. Fonte: [Wikipédia](#).

onde o resíduo é definido por

$$\mathcal{R}(\tilde{u}^{(s)}) := f + \Delta \tilde{u}^{(s)}. \quad (4.4)$$

A cada época, conjuntos de pontos $\{\mathbf{x}^{(s)}\}_{s=1}^{n_{s,in}} \subset \mathcal{D}$ e $\{\mathbf{x}^{(s)}\}_{s=1}^{n_{s,cc}} \subset \partial\mathcal{D}$ são randomicamente gerados com distribuição uniforme.

Observação 4.1.1. O problema de Poisson (4.1) tem solução analítica

$$u(x_1, x_2) = \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2). \quad (4.5)$$

É importante observar que o treinamento da MLP não depende de conhecermos a solução. Aqui, vamos usá-la apenas para compararmos a solução MLP com a analítica.

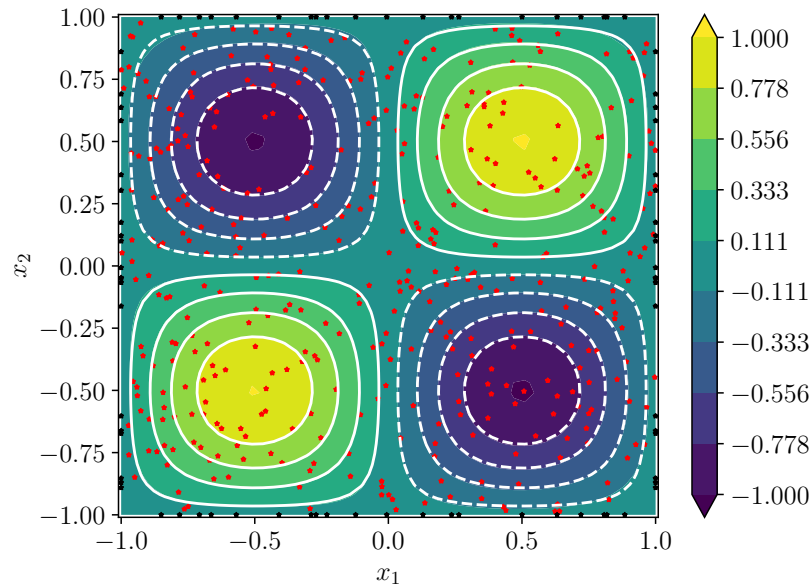


Figura 4.1: Aproximação MLP da função solução do problema de Poisson (4.1). Linhas: isolinhas da solução analítica. Mapa de cores: solução MLP. Estrelas: pontos de treinamentos na última época.

Código 4.1: py_pinn_poisson

```
1 import torch
```

Notas de Aula - Pedro Konzen */* Licença CC-BY-SA 4.0

```
2  from torch import pi, sin
3
4  # modelo
5  nn = 50
6  model = torch.nn.Sequential()
7  model.add_module('layer_1', torch.nn.Linear(2,nn))
8  model.add_module('fun_1', torch.nn.Tanh())
9  model.add_module('layer_2', torch.nn.Linear(nn,nn))
10 model.add_module('fun_2', torch.nn.Tanh())
11 model.add_module('layer_3', torch.nn.Linear(nn,nn))
12 model.add_module('fun_3', torch.nn.Tanh())
13 model.add_module('layer_4', torch.nn.Linear(nn,1))
14
15 # otimizador
16 optim = torch.optim.SGD(model.parameters(),
17                           lr = 1e-3, momentum=0.9)
18
19 # fonte
20 def f(x1, x2):
21     return 2.*pi**2*sin(pi*x1)*sin(pi*x2)
22
23 # treinamento
24 ns_in = 400
25 ns_cc = 20
26 nepochs = 50000
27 tol = 1e-3
28
29 ## pontos de validação
30 ns_val = 50
31 x1_val = torch.linspace(-1., 1., steps=ns_val)
32 x2_val = torch.linspace(-1., 1., steps=ns_val)
33 X1_val, X2_val = torch.meshgrid(x1_val, x2_val, indexing='ij')
34 X_val = torch.hstack((X1_val.reshape(ns_val**2,1),
35                               X2_val.reshape(ns_val**2,1)))
36
37 for epoch in range(nepochs):
38
39     # forward
40     X1 = 2.*torch.rand(ns_in, 1) - 1.
41     X2 = 2.*torch.rand(ns_in, 1) - 1.
```

```
42     X = torch.hstack((X1, X2))
43     X.requires_grad = True
44
45     U = model(X)
46
47     # gradientes
48     D1U = torch.autograd.grad(
49         U, X,
50         grad_outputs=torch.ones_like(U),
51         retain_graph=True,
52         create_graph=True)[0]
53     D2UX1 = torch.autograd.grad(
54         D1U[:,0:1], X,
55         grad_outputs=torch.ones_like(D1U[:,0:1]),
56         retain_graph=True,
57         create_graph=True)[0]
58     D2UX2 = torch.autograd.grad(
59         D1U[:,1:2], X,
60         grad_outputs=torch.ones_like(D1U[:,1:2]),
61         retain_graph=True,
62         create_graph=True)[0]
63
64     # fonte
65     F = f(X1, X2)
66
67     # loss pts internos
68     lin = torch.mean((F + D2UX1[:,0:1] + D2UX2[:,1:2])**2)
69
70     # contornos
71     ## c.c. 1
72     X1 = 2.*torch.rand(ns_cc, 1) - 1.
73     Xcc1 = torch.hstack((X1, -torch.ones((ns_cc,1))))
74     Ucc1 = model(Xcc1)
75
76     ## c.c. 3
77     Xcc3 = torch.hstack((X1, torch.ones((ns_cc,1))))
78     Ucc3 = model(Xcc3)
79
80     ## c.c. 4
81     X2 = 2.*torch.rand(ns_cc, 1) - 1.
```

```

82     Xcc4 = torch.hstack((-torch.ones((ns_cc,1)), X2))
83     Ucc4 = model(Xcc4)
84
85     ## c.c. 2
86     Xcc2 = torch.hstack((torch.ones((ns_cc,1)), X2))
87     Ucc2 = model(Xcc2)
88
89     # loss cc
90     lcc = 1./(4.*ns_cc) * torch.sum(Ucc1**2 + Ucc2**2 + Ucc3**2 + Ucc4**2)
91
92     # loss
93     loss = lin + lcc
94
95     if ((epoch % 500 == 0) or (loss.item() < tol)):
96         print(f'{epoch}: loss = {loss.item():.4e}')
97
98         if (loss.item() < tol):
99             break
100
101     optim.zero_grad()
102     loss.backward()
103     optim.step()

```

4.1.1 Exercícios

E.4.1.1. Crie uma MLP para resolver

$$-\Delta u = 0, \mathbf{x} \in D = (0, 1)^2, \quad (4.6)$$

$$u(x_1, 0) = x_1(1 - x_1), 0 \leq x_1 \leq 1, \quad (4.7)$$

$$u(1, x_2) = x_2(1 - x_2), 0 < x_2 \leq 1, \quad (4.8)$$

$$u(x_1, 1) = x_1(1 - x_1), 0 \leq x_1 < 1, \quad (4.9)$$

$$u(0, x_2) = x_2(1 - x_2), 0 < x_2 < 1. \quad (4.10)$$

4.2 Aplicação: Equação do Calor

Em construção

Consideramos o problema

$$u_t = u_{xx} + f, (t, x) \in (0, 1] \times (-1, 1), \quad (4.11a)$$

$$u(0, x) = \sin(\pi x), x \in [-1, 1], \quad (4.11b)$$

$$u(t, -1) = u(t, 1) = 0, t \in (t_0, tf], \quad (4.11c)$$

onde $f(t, x) = (\pi^2 - 1)e^{-t} \sin(\pi x)$ é a fonte. Este problema foi manufacturado a partir da solução

$$u(t, x) = e^{-t} \sin(\pi x). \quad (4.12)$$

Código 4.2: mlp_calor_autograd.py

```

1 import torch
2 from torch import pi, sin, exp
3 from collections import OrderedDict
4 import matplotlib.pyplot as plt
5
6 # modelo
7 hidden = [50]*8
8 activation = torch.nn.Tanh()
9 layerList = [('layer_0', torch.nn.Linear(2, hidden[0])),
10              ('activation_0', activation)]
11 for l in range(len(hidden)-1):
12     layerList.append((f'layer_{l+1}',
13                      torch.nn.Linear(hidden[l], hidden[l+1])))
14     layerList.append((f'activation_{l+1}', activation))
15 layerList.append((f'layer_{len(hidden)}', torch.nn.Linear(hidden[-1],
16 #layerList.append((f'activation_{len(hidden)}', torch.nn.Sigmoid()))
17 layerDict = OrderedDict(layerList)
18 model = torch.nn.Sequential(OrderedDict(layerDict))
19
20 # otimizador
21 # optim = torch.optim.SGD(model.parameters(),
22 #                           lr = 1e-3, momentum=0.85)
23 optim = torch.optim.Adam(model.parameters(),
24                           lr = 1e-2)
25 scheduler = torch.optim.lr_scheduler.ReduceLROnPlateau(optim,
26                                                         factor=0.1,
27                                                         patience=100)

```

```
28
650 29 # treinamento
30 nt = 10
31 tt = torch.linspace(0., 1., nt+1)
32 nx = 20
600 33 xx = torch.linspace(-1., 1., nx+1)
34 T,X = torch.meshgrid(tt, xx, indexing='ij')
35 tt = tt.reshape(-1,1)
550 36 xx = xx.reshape(-1,1)
37
38 Sic = torch.hstack((torch.zeros_like(xx), xx))
39 Uic = sin(pi*xx)
500 40
41 Sbc0 = torch.hstack((tt[1:,:], -1.*torch.ones_like(tt[1:,:])))
42 Ubc0 = torch.zeros_like(tt[1:,:])
43
450 44 Sbc1 = torch.hstack((tt[1:,:], 1.*torch.ones_like(tt[1:,:])))
45 Ubc1 = torch.zeros_like(tt[1:,:])
46
400 47 tin = tt[1:,:]
48 xin = xx[1:-1,:]
49 Sin = torch.empty((nt*(nx-1), 2))
50 Fin = torch.empty((nt*(nx-1), 1))
350 51 s = 0
52 for i,t in enumerate(tin):
53     for j,x in enumerate(xin):
54         Sin[s,0] = t
300 55         Sin[s,1] = x
56         Fin[s,0] = (pi**2 - 1.)*exp(-t)*sin(pi*x)
57         s += 1
250 58 tin = torch.tensor(Sin[:,0:1], requires_grad=True)
59 xin = torch.tensor(Sin[:,1:2], requires_grad=True)
60 Sin = torch.hstack((tin,xin))
61
200 62 nepochs = 50001
63 tol = 1e-4
64 nout = 100
65
150 66 for epoch in range(nepochs):
67
```



```
68     # loss
69
70     ## c.i.
71     Uest = model(Sic)
72     lic = torch.mean((Uest - Uic)**2)
73
74     ## residual
75     U = model(Sin)
76     U_t = torch.autograd.grad(
77         U, tin,
78         grad_outputs=torch.ones_like(U),
79         retain_graph=True,
500     create_graph=True)[0]
81     U_x = torch.autograd.grad(
82         U, xin,
83         grad_outputs=torch.ones_like(U),
450     retain_graph=True,
85     create_graph=True)[0]
86     U_xx = torch.autograd.grad(
87         U_x, xin,
88         grad_outputs=torch.ones_like(U_x),
400     retain_graph=True,
89     create_graph=True)[0]
350     res = U_t - U_xx - Fin
92     lin = torch.mean(res**2)
93
94     ## c.c. x = -1
95     Uest = model(Sbc0)
96     lbc0 = torch.mean(Uest**2)
97
98     ## c.c. x = 1
99     Uest = model(Sbc1)
100     lbc1 = torch.mean(Uest**2)
101
102     loss = lin + lic + lbc0 + lbc1
103
104     lr = optim.param_groups[-1]['lr']
105     print(f'{epoch}: loss = {loss.item():.4e}, lr = {lr:.4e}')
150
106
107     # backward
```

```
108     scheduler.step(loss)
109     optim.zero_grad()
110     loss.backward()
111     optim.step()
112
113
114     # output
115     if ((epoch % nout == 0) or (loss.item() < tol)):
116         plt.close()
117         fig = plt.figure(dpi=300)
118         nt = 10
119         tt = torch.linspace(0., 1., nt+1)
120         nx = 20
121         xx = torch.linspace(-1., 1., nx+1)
122         T,X = torch.meshgrid(tt, xx, indexing='ij')
123         Uesp = torch.empty_like(T)
124         M = torch.empty(((nt+1)*(nx+1),2))
125         s = 0
126         for i,t in enumerate(tt):
127             for j,x in enumerate(xx):
128                 Uesp[i,j] = exp(-t)*sin(pi*x)
129                 M[s,0] = t
130                 M[s,1] = x
131                 s += 1
132         Uest = model(M)
133         Uest = Uest.detach().reshape(nt+1,nx+1)
134         l2rel = torch.norm(Uest - Uesp)/torch.norm(Uesp)
135
136         ax = fig.add_subplot()
137         cb = ax.contourf(T, X, Uesp,
138                         levels=10)
139         fig.colorbar(cb)
140         cl = ax.contour(T, X, Uest,
141                        levels=10, colors='white')
142         ax.clabel(cl, fmt='%.1f')
143         ax.set_xlabel('$t$')
144         ax.set_ylabel('$x$')
145         plt.title(f'{epoch}: loss = {loss.item():.4e}, l2rel = {l2rel:.4e}')
146         plt.savefig(f'./results/sol_{{epoch//nout}:0>6}.png')
147
```

```

148     if ((loss.item() < tol) or (lr < 1e-6)):
149         break

```

4.3 PINN com Parâmetro a Determinar

Em construção

Vamos considerar uma **equação diferencial**

$$L(u; \lambda) = f, \quad \mathbf{x} \in D \subset \mathbb{R}^n, \quad (4.13)$$

onde L é um operador em funções $u = u(\mathbf{x})$, $\lambda \in \mathbb{R}$ é um **parâmetro a determinar** e f uma dada função fonte. Assumimos conhecidas condições inicial e de contorno, bem como um **conjunto de amostras**

$$\mathcal{D} := \left\{ (\mathbf{x}^{(s)}, u^{(s)}) \right\}_{s=1}^{n_s}, \quad (4.14)$$

com $\mathbf{x}^{(s)} \in D$ e $u^{(s)} = u(\mathbf{x}^{(s)})$.

Uma rede informada pela física (**PINN**, do inglês, *Physics-informed neural network*) **com parâmetro a determinar** é uma rede neural

$$\tilde{u} = \mathcal{N}(\mathbf{x}; \lambda), \quad (4.15)$$

em que \tilde{u} é a solução estimada do modelo dado pela equação diferencial (4.13) com dadas condições inicial e de contorno, em que **o parâmetro λ é estimado tal que**

$$\tilde{u}^{(s)} \approx u^{(s)}, \quad (\mathbf{x}^{(s)}, u^{(s)}) \in \mathcal{D}. \quad (4.16)$$

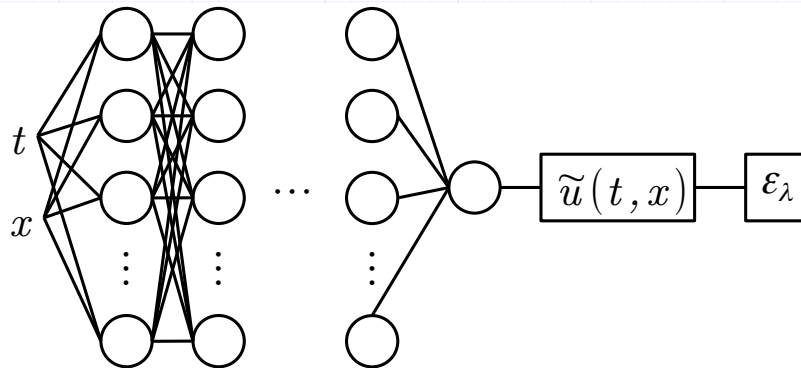


Figura 4.2: Esquema de uma PINN $\tilde{u} = \mathcal{N}(\mathbf{x}; \lambda)$.

Considerando uma rede do tipo perceptron multicamadas (MLP, do inglês, *multilayer perceptron*, consulte Fig. 4.2), seus pesos e *biases* são treinados em conjunto com parâmetro λ de forma a minimizar a **função de perda**

$$\begin{aligned} \varepsilon_\lambda := & \underbrace{\frac{1}{n_{\text{in}}} \sum_{s=1}^{n_{\text{in}}} \left| \mathcal{R}_\lambda \left(\mathbf{x}_{\text{in}}^{(s)} \right) \right|^2}_{\text{pts. internos}} \\ & + \underbrace{\frac{1}{n_{\text{cc}}} \sum_{s=1}^{n_{\text{cc}}} \left| \tilde{u}_{\text{cc}} - u_{\text{cc}} \right|^2}_{\text{c.i. \& c.c.}} \\ & + \underbrace{\frac{p}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} \left| \tilde{u}^{(s)} - u^{(s)} \right|^2}_{\text{amostras}}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

onde $p \geq 0$ é uma **penalidade** e

$$\mathcal{R}_\lambda(\mathbf{x}) := f - L(u; \lambda) \quad (4.18)$$

é o **resíduo** de (4.13).

Exemplo 4.3.1. Consideramos a equação de Fisher²

$$u_t = u_{xx} + \lambda u(1 - u), \quad (t, x) \in (0, t_f) \times (0, 1), \quad (4.19)$$

com o parâmetro $\lambda > 0$ a determinar. Assumimos dadas condição inicial

$$u(0, x) = \frac{1}{\left(1 + e^{\sqrt{\frac{\lambda}{6}}x}\right)^2}, \quad x \in [0, 1], \quad (4.20)$$

e condições de contorno

$$u_x(t, 0) = \frac{1}{\left(1 + e^{-\frac{5}{6}\lambda t}\right)^2}, \quad (4.21)$$

$$u_x(t, 1) = \frac{1}{\left(1 + e^{\sqrt{\frac{\lambda}{6}} - \frac{5}{6}\lambda t}\right)^2}. \quad (4.22)$$

²Ronald Aylmer Fisher, 1890-1962, biólogo inglês. Fonte: [Wikipédia](#).

Este problema tem solução analítica [1]

$$u_a(t, x) = \frac{1}{\left(1 + e^{\sqrt{\frac{\lambda}{6}}x - \frac{5}{6}\lambda t}\right)^2}. \quad (4.23)$$

Como exemplo de aplicação de uma PINN com parâmetro a determinar, vamos assumir o seguinte conjunto de amostras

$$\mathcal{D} = \left\{ \left(\left(t^{(s)}, x^{(s)} \right), u^{(s)} \right) \right\}_{s=1}^{n_s}, \quad (4.24)$$

com $(t^{(s)}, x^{(s)}) \in \{0.1, 0.2, 0.3\} \times \{0.25, 0.5, 0.75\}$ e $u^{(s)} = u_a(t^{(s)}, x^{(s)})$.

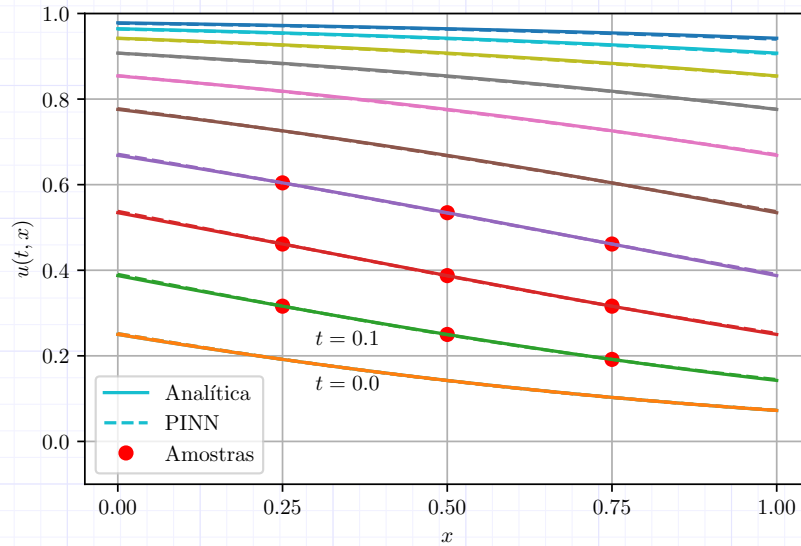


Figura 4.3: Solução PINN *versus* analítica para $\lambda = 6$.

Código 4.3: ex_pinn_fisher.py

```
1 import torch
2
3 # modelo
4 nh = 4
5 nn = 50
6 fun = torch.nn.Tanh()
```

```
7 model = torch.nn.Sequential()
8 model.add_module('layer_1', torch.nn.Linear(2, nn))
9 model.add_module('fun_1', fun)
10 for l in range(2, nh+1):
11     model.add_module(f'layer_{l}', torch.nn.Linear(nn, nn))
12     model.add_module(f'fun_{l}', fun)
13 model.add_module(f'layer_{nh+1}', torch.nn.Linear(nn, 1))
14
15 # parâmetro
16 rgn = [5., 7]
17 model.lambda = torch.nn.Parameter(
18     data=(rgn[1]-rgn[0])*torch.rand(1)+rgn[0])
19
20 # otimizador
21 optim = torch.optim.Adam(model.parameters(), lr=0.001)
22
23 # parâmetros do problema
24 tf = 1.
25
26 # solução analítica
27 lambda = torch.tensor([6.])
28 def ua(t,x, lambda=lambda):
29     return 1./(1.+torch.exp(torch.sqrt(lambda/6.)*x-5./6*lambda*t))**2
30
31 # condição inicial
32 def u0(x, lambda=lambda):
33     return 1./(1.+torch.exp(torch.sqrt(lambda/6)*x))**2
34
35 # amostras
36 ts = torch.tensor([0.1, 0.2, 0.3])
37 xs = torch.tensor([0.25, 0.5, 0.75])
38 T, X = torch.meshgrid(ts, xs, indexing='ij')
39 Ss = torch.hstack((T.reshape(-1,1), X.reshape(-1,1)))
40 Us_exp = ua(T, X).reshape(-1,1)
41
42 # treinamento
43 nepochs = 50000
44 tol = 1e-5
45
46 eout = 100
```

```
47
48 sin = 50
49 penalty = 1e1
50
51 for epoch in range(nepochs):
52     # forward
53
54     ## pts internos
55     tsin = tf*torch.rand(sin, 1)
56     xsin = torch.rand(sin, 1)
57     Sin = torch.hstack((tsin, xsin))
58     Sin.requires_grad = True
59
60     Uin = model(Sin)
61
62     ## loss pts internos
63     DUin = torch.autograd.grad(
64         Uin, Sin,
65         torch.ones_like(Uin),
66         create_graph=True,
67         retain_graph=True)[0]
68     Uin_t = DUin[:,0:1]
69     Uin_x = DUin[:,1:2]
70
71     Uin_xx = torch.autograd.grad(
72         Uin_x, Sin,
73         torch.ones_like(Uin_x),
74         create_graph=True,
75         retain_graph=True)[0][:,1:2]
76
77     lin = torch.mean((Uin_t - Uin_xx \
78         - model.lmbda*Uin*(1-Uin))**2)
79
80     ## cond. inicial
81     S0 = torch.hstack((torch.zeros_like(xsin), xsin))
82
83     U0 = model(S0)
```

```

87     ## loss cond. inicial
88     l0 = torch.mean((U0 - u0(xsin))**2)
89
90     ## cond. de contorno
91     Sbc0 = torch.hstack((tsin, torch.zeros_like(xsin)))
92     Sbc1 = torch.hstack((tsin, torch.ones_like(xsin)))
93     Sbc = torch.vstack((Sbc0, Sbc1))
94
95     Ubc_exp = ua(Sbc[:,0:1], Sbc[:,1:2])
96     Ubc_est = model(Sbc)
97
98     ## loss cond. de contorno
99     lbc = torch.mean((Ubc_est - Ubc_exp)**2)
100
101     ## amostras
102     Us_est = model(Ss)
103
104     ## loss amostras
105     ls = torch.mean((Us_est - Us_exp)**2)
106
107     ## loss total
108     loss = lin + l0 + lbc + penalty*ls
109
110     if ((epoch % eout == 0) or (loss.item() < tol)):
111         print(f'epoch: {epoch}, '\
112               + f'loss={loss.item():.4e}, '\
113               + f'lmbda={model.lmbda.item():.3f}')
114
115     if (loss.item() < tol):
116         break
117
118     optim.zero_grad()
119     loss.backward()
120     optim.step()

```

4.3.1 Exercícios

Em construção

Notas de Aula - Pedro Konzen */* Licença CC-BY-SA 4.0

Exemplo 4.3.2. Considere o seguinte problema de valor inicial

$$-u'' = \lambda \sin(\pi x), \quad 0 < x < 1, \quad (4.25a)$$

$$u(0) = u(1) = 0, \quad (4.25b)$$

onde $\lambda > 0$ é um parâmetro a determinar. Dadas as amostras

$$\mathcal{D} = \left\{ \left(\frac{1}{6}, \frac{1}{2} \right), \left(\frac{1}{4}, \sqrt{22} \right), \left(\frac{1}{3}, \sqrt{33} \right) \right\}, \quad (4.26)$$

crie uma PINN

$$\tilde{u} = \mathcal{N}(x; \lambda) \quad (4.27)$$

para estimar o parâmetro λ e a solução em todo o domínio $0 \leq x \leq 1$.

Exemplo 4.3.3. Considere o problema de Poisson³

$$-\nabla u = \lambda, \quad (x, y) \in D = (-1, 1)^2, \quad (4.28a)$$

$$u = 0, \quad (x, y) \in \partial D, \quad (4.28b)$$

onde $\lambda > 0$ é um parâmetro a determinar. Dado que $u(1/2, 1/2) = 1/8$, crie uma PINN

$$\tilde{u} = \mathcal{N}(x, y; \lambda) \quad (4.29)$$

para estimar o parâmetro λ e a solução em todo o domínio D .

Exemplo 4.3.4. Considere o problema de calor

$$u_t = \lambda u_{xx} + (\pi^2 - 1)e^{-t} \sin(\pi x), \quad (t, x) \in (0, 1)^2, \quad (4.30a)$$

$$u(0, x) = \sin(\pi x), \quad x \in [0, 1], \quad (4.30b)$$

$$u(t, 0) = u(t, 1) = 0, \quad t \in [0, 1], \quad (4.30c)$$

onde o coeficiente de difusão $\lambda > 0$ é um parâmetro a determinar. Sabendo que o problema tem solução analítica

$$u(t, x) = e^{-t} \sin(\pi x), \quad (4.31)$$

escolha um conjunto de amostras $\mathcal{D} = \left\{ \left((t^{(s)}, x^{(s)}), u^{(s)} \right) \right\}_{s=1}^{n_s}$ tal que seja possível estimar λ com uma PINN

$$\tilde{u} = \mathcal{N}(t, x; \lambda). \quad (4.32)$$

³Siméon Denis Poisson, 1781 - 1840, matemático francês. Fonte: [Wikipédia](#).

Resposta dos Exercícios

E.2.1.3. Dica: verifique que sua matriz hessiana é positiva definida.

E.2.1.4. Dica: consulte a ligação [Notas de Aula: Matemática Numérica: 7.1 Problemas lineares](#).

E.2.2.1. $(\tanh x)' = 1 - \tanh^2 x$

E.4.1.1. Dica: solução analítica $u(x_1, x_2) = x_1(1 - x_1) - x_2(1 - x_2)$.

E.4.3.0. $\lambda = \pi^2$

E.4.3.0. $\lambda = 1$

E.4.3.0. $\lambda = 1$

Bibliografia

- [1] Ağirseven, D., Öziş, T.. *An analytical study for Fisher type equations by using homotopy perturbation method*, Computers and Mathematics with Applications, vol. 60, p. 602-609, 2010. DOI: [10.1016/j.camwa.2010.05.006](https://doi.org/10.1016/j.camwa.2010.05.006)
- [2] Goodfellow, I., Bengio, Y., Courville, A.. Deep learning, MIT Press, Cambridge, MA, 2016.
- [3] Neural Networks: A Comprehensive Foundation, Haykin, S.. Pearson:Delhi, 2005. ISBN: 978-0020327615.
- [4] Raissi, M., Perdikaris, P., Karniadakis, G.E.. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational Physics 378 (2019), pp. 686-707. DOI: [10.1016/j.jcp.2018.10.045](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045).
- [5] Mata, F.F., Gijón, A., Molina-Solana, M., Gómez-Romero, J.. Physics-informed neural networks for data-driven simulation: Advantages, limitations, and opportunities. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications 610 (2023), pp. 128415. DOI: [10.1016/j.physa.2022.128415](https://doi.org/10.1016/j.physa.2022.128415).