THIAGO SOTORIVA LERMEN

CURSO DE MACHINE LEARNING

PHOTO BY PIETRO JENG ON UNSPLASH

.PET Computação

Universidade Federal Do Rio Grande Do Sul

Instituto De Informática

CURSO DE MACHINE LEARNING

Autor: Thiago Sotoriva Lermen

PET Computação UFRGS

Baseado em:

Machine Learning (Coursera) | Stanford University [12]

Deep Learning Lecture Series 2020 | DeepMind & University College London [17]

Reinforcement Learning Course | DeepMind & University College London [9]

CS229: Machine Learning | Stanford University [11]

CS230: Deep Learning | Stanford University [2]

CS231n: Convolutional Neural Networks for Visual Recognition | Stanford University [6]

CS224n: Natural Language Processing with Deep Learning | Stanford University [5]

CS234: Reinforcement Learning | Stanford University [4]

UFRGS
UNIVERSIDADE FEDERAL
DO RIO GRANDE DO SUL

Agradecimentos

Agradeço aos colegas do PET Computação UFRGS, Bernardo Beneduzi Borba, Bruno Correa Zimmermann, Eduardo Fantini, Heric Leite Rodrigues, João Pedro Silveira E Silva, Jordi Pujol Ricarte, Mayra Camargo Cademartori, Victoria Avelar Duarte e Vinícius Carra pelo apoio, incentivo e revisões para a construção deste curso.

Agradeço à tutora do PET Computação UFRGS, Érika Fernandes Cota, pelo apoio, conhecimento e paciência, tornando possível este projeto. Agradeço, também, aos colegas do Instituto De Informática, em especial, ao Gabriel Couto Domingues pelas críticas, revisão e incentivo.

Agradeço à Rosália Galiazzi Schneider e ao Leonardo Piletti Chatain pela mentoria, conhecimento, apoio, críticas, sugestões e incentivos.

Por final, quero agradecer à minha família, à minha namorada Raya Allawy, aos meus amigos Arthur Carvalho Balejo, João Pedro Pompeo e Isadora Holtermann Peralta pelo apoio e incentivo, e a todos que, com o tempo depositado, críticas e incentivo, tornaram possível a realização deste projeto, que, com certeza será muito importante para o desenvolvimento acadêmico de futuros estudantes com interesse no campo de Inteligência Artificial.

Sumário

Parte I

Introdução

1 Visão geral

Nesta seção serão introduzidos os conceitos básicos para fazer uma máquina aprender usando dados, sem, necessariamente, ser explicitamente programada.

1.1 O que é *Machine Learning*?

Machine Learning (*M.L*) é um campo de estudo da área de Inteligência Artificial (I.A.) que dá ao computador a habilidade de aprender ser ser explicitamente programado [15].

Em uma definiçao mais moderna, "Um programa de computador aprende com a experiência E com relação a alguma classe de tarefas T e medida de desempenho P, se seu desemprenho nas tarefas T, conforme medido por P, melhora com a experiência E." [10].

Em geral, qualquer problema de *M.L.* pode ser atribuído a uma dessas duas classificações gerais:

- Aprendizado Supervisionado (*Supervised Learning*);
- Aprendizado Não-Supervisionado (*Unsupervised Learning*)

Antes de detalharmos cada uma dessas classificações, é importante definir como medimos a inteligência de uma máquina, quando tratamos de *machine learning*. Essa definição será especificada em detalhes na seção seguinte.

1.2 O que inteligência?

Uma dúvida que pode surgir ao definirmos *machine learning* é "O que é inteligência?". Essa dúvida se tornou muito comum em diversas áreas de pesquisa relacionadas à IA.

Recentemente, a definição usada é a seguinte: "A inteligência mede a capacidade de um agente de atingir objetivos em uma ampla variedade de ambientes" [8]. Essa definição implica na construção de um modelo matemático para a inteligência de uma máquina. Com essa definição podemos comparar máquinas inteligentes através de dados concretos - números. A seguir, está definida a medida de inteligência de uma máquina.

$$\boxed{\underbrace{\Upsilon(\pi)}_{\text{Medida de inteligência}} := \sum_{\underbrace{\mu \in E}_{\text{Soma sobre os ambientes}}} \underbrace{2^{-K(\mu)}}_{\text{Penalidade de complexidade}} \underbrace{V_{\mu}^{\pi}}_{\text{Valor alcançado}}}$$

A equação acima é a definição formal da inteligência de uma máquina, também conhecida como "inteligência universal" de um agente - máquina - π. Ela descreve a medida de inteligência, $\Upsilon(\pi)$, de um agente π como o somatório dos valores de pontuação de inteligência, V_{μ}^{π}, do agente π em cada um dos ambientes μ. Para cada um desses ambientes define-se um valor de distribuição de probabilidade universal, $2^{-K(\mu)}$, onde K é a função de complexidade de Kolmogorov [8], que penaliza a complexidade de cada um dos ambientes. .

1.3 *Supervised Learning*

No método de aprendizado supervisionado, é dado como entrada um conjunto de dados que já temos conhecimento do resultado. Então, nosso objetivo nesse tipo de problema é treinar uma máquina, a fim de fazer com que ela generalize esses resultados para entradas que ainda não foram vistas.

Problemas de aprendizado supervisionado são separados em problemas de classificação e regressão. No problema de classificação, tentamos prever um resultado em uma saída discreta, ou seja, tentamos mapear variáveis de entrada - em valores complexos - para categorias mais simples e generalizadas. Nos problemas de regressão, tentamos prever resultados em uma saída contínua, ou seja, tentamos mapear as variáveis de entrada para uma função contínua.

Podemos exemplificar um problema de regressão da seguinte forma: dado uma foto de uma pessoa, tentamos prever a sua idade com base na imagem. De outra maneira, podemos exemplificar um problema de classificação da seguinte forma: dado um paciente com um tumor, tentamos prever se o tumor é maligno ou benigno.

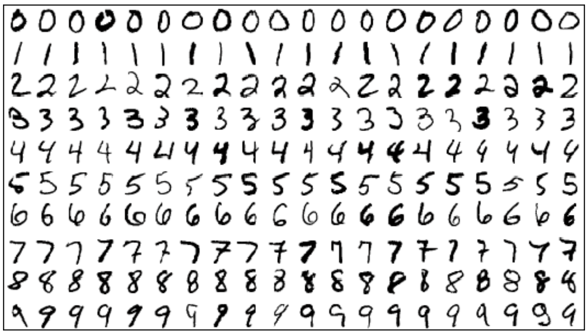
Indo um pouco mais fundo, um dos maiores exemplos dessa área é a base de dados MNIST [7] e processamento de linguagem natural *Natural Language Processing* através de *Generative Pre-trained Transformer 2* (GPT-2) [14] representados na Figura 1. Essa base de dados foi usada para a implementação de um algoritmo de reconhecimento de dígitos manuscritos com a utilização de redes neurais.

1.4 *Unsupervised Learning*

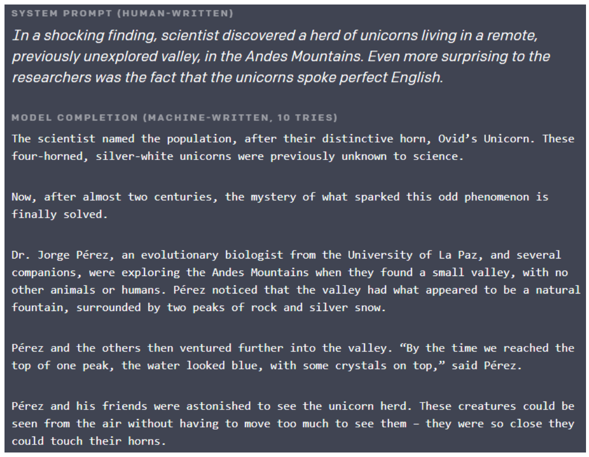
O aprendizado não-supervisionado nos possibilita aproximar problemas que temos pouca ou nenhuma ideia de como seus resultados devem ser. Nós podemos derivar esta estrutura utilizando o método de *clustering* nos dados baseados nos relacionamentos com as variáveis nos dados

Podemos exemplificar a técnica de *clustering* da seguinte forma: ao pegar uma coleção de um milhão de genes diferentes, encontramos uma forma de agrupá-los, de modo que os genes de cada grupo compartilhem determinada semelhança, como por exemplo, tempo de vida, localização, funções, etc.

Recentemente, foi desenvolvido pela DeepMind uma inteligência artifical que joga o jogo Go no mais alto nível de performance. AlphaGo [16] combina diferentes técnicas de redes neurais profundas para realizar o treinamento. Uma rede neural escolhe o melhor movimento a ser realizado a partir de um estado de tabuleiro e a outra realiza uma previsão do vencedor do jogo através de modelos probabilísticos. Utiliza-se de métodos de *unsupervised learning* como por exemplo *reinforcement learning* e *Monte Carlo Search* que escolhe a melhor jogada a partir de jogadas prévias. Na Figura 2 está representado um modelo de *unsupervised learning* utilizado na implementação do AlphaGo.



(a) Banco de dados MNIST para reconhecimento de dígitos manuscritos. Muito usado em sistemas de processamento de imagens. Essa base de dados foi usada para a implementação de um algoritmo de reconhecimento de dígitos manuscritos com a utilização de redes neurais



SYSTEM PROMPT (HUMAN-WRITTEN)

In a shocking finding, scientist discovered a herd of unicorns living in a remote, previously unexplored valley, in the Andes Mountains. Even more surprising to the researchers was the fact that the unicorns spoke perfect English.

MODEL COMPLETION (MACHINE-WRITTEN, 10 TRIES)

The scientist named the population, after their distinctive horn, Ovid's Unicorn. These four-horned, silver-white unicorns were previously unknown to science.

Now, after almost two centuries, the mystery of what sparked this odd phenomenon is finally solved.

Dr. Jorge Pérez, an evolutionary biologist from the University of La Paz, and several companions, were exploring the Andes Mountains when they found a small valley, with no other animals or humans. Pérez noticed that the valley had what appeared to be a natural fountain, surrounded by two peaks of rock and silver snow.

Pérez and the others then ventured further into the valley. "By the time we reached the top of one peak, the water looked blue, with some crystals on top," said Pérez.

Pérez and his friends were astonished to see the unicorn herd. These creatures could be seen from the air without having to move too much to see them – they were so close they could touch their horns.

(b) Representação de uma das funções da inteligência GPT-2 desenvolvida pela OpenAI (2019), onde a partir de um texto de entrada. É uma inteligência que foi treinada para traduzir textos, responder perguntas, resumir passagens de textos e gerar um texto de saída que se similariza com o nível de escrita humano.

Figura 1

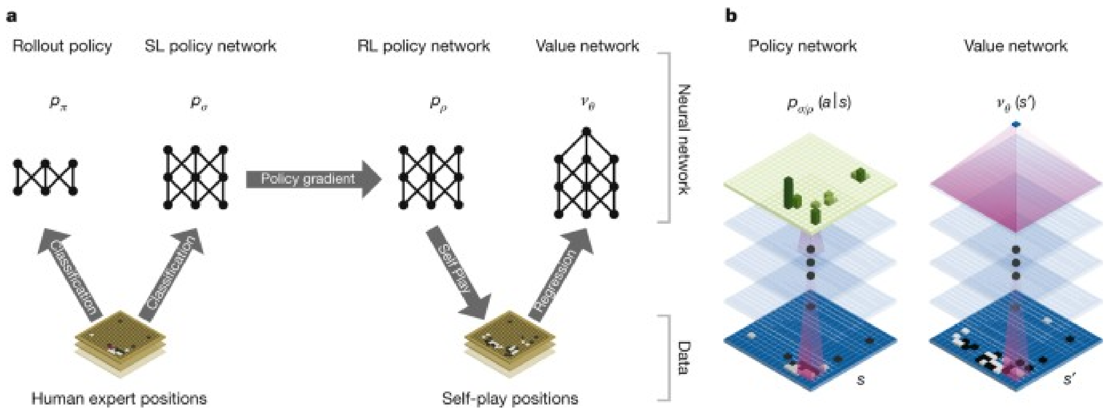


Figura 2: Representação dos da arquitetura dos métodos de aprendizado implementados para o AlphaGo. Percebe-se que foram utilizados métodos de *supervised learning* e *unsupervised learning* a fim de definnir a melhor possível jogada dentre as milhões possibilidades a partir de um dado estado de jogo.

Parte II

Supervised Learning

2 Representação de modelos

A fim de representação futura, podemos utilizar a notação $x^{(i)}$ para denotar as variáveis de entrada (*input*) e $y^{(i)}$ para denotar as variáveis de saída (*output*). O par $(x^{(i)}, y^{(i)})$ é chamado de exemplo de treino e o conjunto de dados (*dataset*) que está sendo utilizado para análise é uma lista com m exemplos de treino $(x^{(i)}, y^{(i)}); i = 1, ...m$ chamado conjunto de treino (*training set*).

Podemos usar essa notação para descrever o método de aprendizado supervisionado de uma forma mais formal, na qual, dado um *training set*, aprender uma função $h : X \to Y$ de forma que $h(x)$ seja um "bom" preditor para o valor correspondente de y. Historicamente, a função h é conhecida como hipótese (*hypothesis*). Podemos analisar a seguinte definição através da Figura 3.

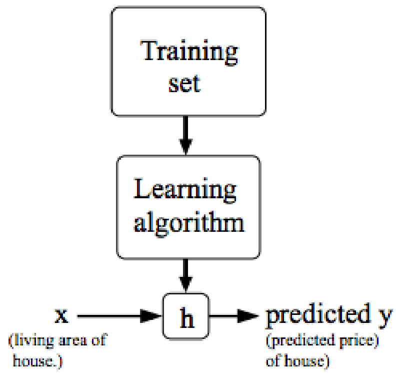


Figura 3: Processo de treino utilizando Supervised Learning. Dado um conjunto de treino como entrada, o nosso algoritmo de aprendizado tenta prever um valor y de saída que tenha relação com o valor x de entrada. Essa previsão é calculada atrvés da função hipótese h.

3 Regressão linear

Regressão é um método que modela um valor de destino com base em preditores independentes. Este método é usado, principalmente, para prever e descobrir a relação de causa e efeito entre as variáveis.

Uma regressão linear simples é um tipo de regressão que analisa, a partir de um conjunto de variáveis independentes de entrada x, a relação entre essas variáveis com os seus respectivos valores esperados y. Na Figura 4, abaixo, a linha vermelha representa a melhor reta que aproxima melhor cada um dos pontos representados em azul. Ou seja, baseado em um conjunto de dados, tentamos gerar uma reta que modela cada um desses dados de forma ótima.

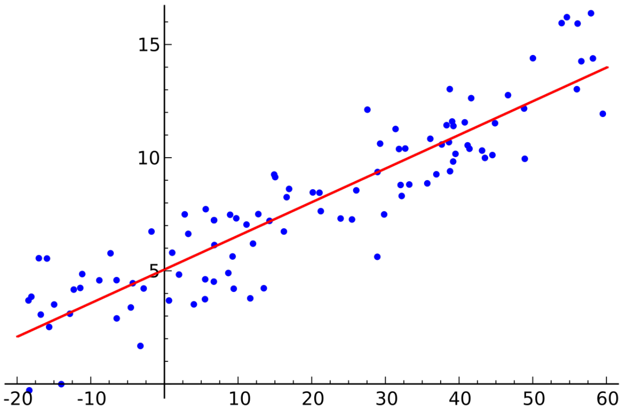


Figura 4: Representação de uma reta gerada a partir do método de regressão linear. A reta em vermelho representa a melhor aproximação de cada um dos pontos representados em azul, que são os dados de entrada.

A reta gerada pela regressão linear pode ser modelada a partir da equação linear abaixo:

$$y = \theta_0 + \theta_1 x$$

Portanto, o objetivo do algoritmo de regressão linear é encontrar os melhores valores de θ_0 e θ_1.

Os métodos utilizados para calcularmos esses parâmetros serão apresentados nas seções seguintes.

4 Função Custo (*Cost Function*)

A função custo - também chamada de *loss function* - pode ser utilizada para medir a precisão da nossa função hipótese $h : X \rightarrow Y$. A função custo utiliza da diferença média de todos os resultados da função hipótese com todos *inputs* de x e *outputs* de y, como representado na Figura 5.

$$\boxed{J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} (\widehat{y}_i - y_i)^2 = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} (h_\theta(x_i) - y_i)^2}$$

Através dessa expressão podemos perceber que o objetivo principal da função custo é minimzar a diferença entre o resultado esperado a função hipótese e o valor de y através das entradas θ_0 e θ_1. Essa função também é conhecida como *Squared error function* ou *Mean squared error*.

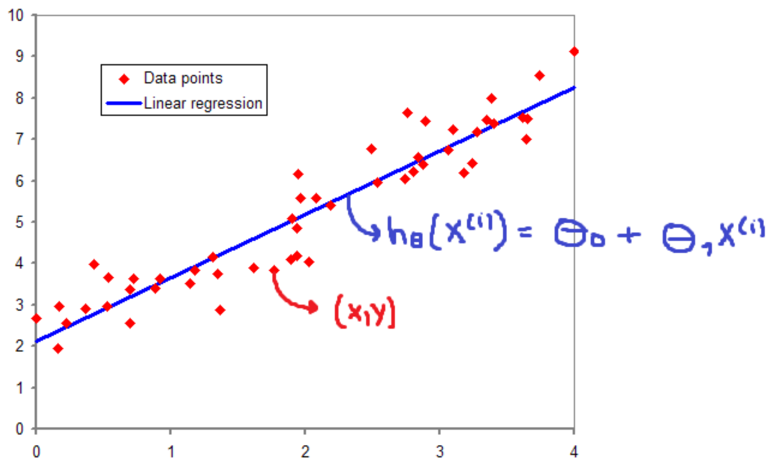


Figura 5: Representação da função custo

Dessa forma, temos quatro pré-definições básicas:

- Hipótese: $h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x$;
- Parâmetros: θ_0, θ_1;
- Função Custo: $J(\theta_0, \theta_1) = \dfrac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x_i) - y_i)^2$;
- Objetivo: $\min_{\theta_0,\theta_1} J(\theta_0, \theta_1)$

Podemos utilizar linhas de contorno para representar a função de duas variáveis $J(\theta_0, \theta_1)$ em apenas duas dimensões como representado nas Figuras 6 e 7.

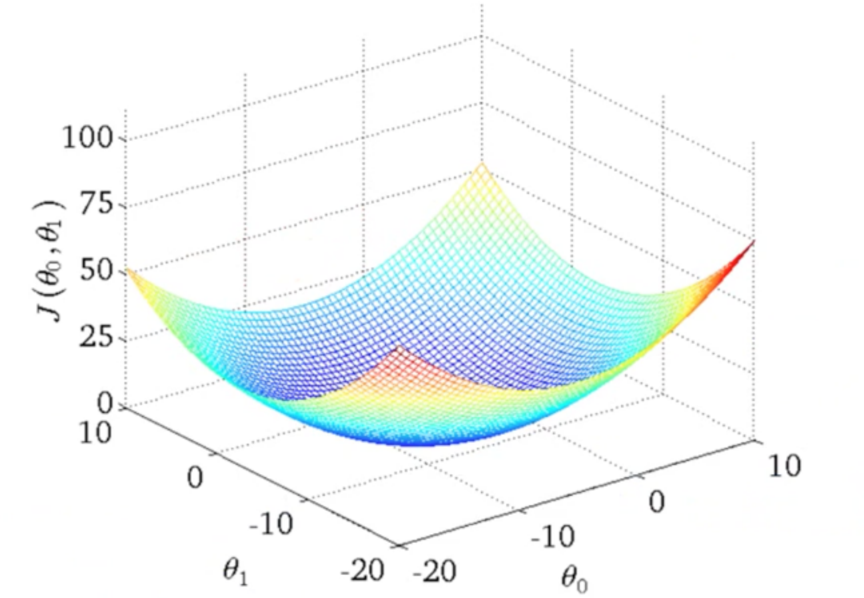


Figura 6: Representação da função custo através de visualização 3D

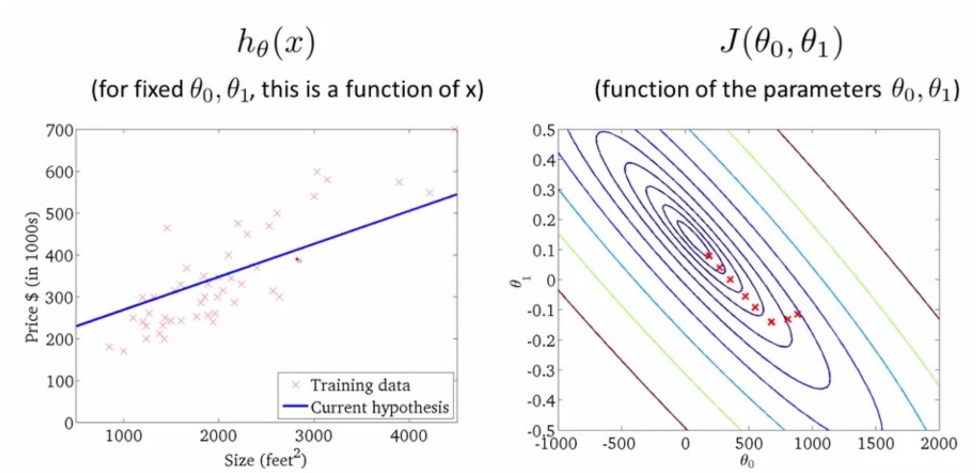


Figura 7: Representação da função custo através de linha de contorno

Os gráficos da Figura 7 minimizam a função custo ao máximo. O resultado de θ_0 e θ_1 tende a ficar em torno de 250 e 0.12, respectivamente. Em outras palavras, a melhor aproximação da função custo está mais no centro das linhas de contorno. Chamamos o método de minimização da função custo de método do gradiente descendente que será discutido na Seção 5.

5 Gradiente Descendente (*Gradient Descent*)

O método do gradiente descendente pode ser utilizado para minimizar o valor de uma função. Utilizaremos esse método a fim de minimizar a função $J(\theta_0, \theta_1)$.

Podemos representar esse método a partir de um gráfico em três dimensões, onde θ_0 está no eixo x, θ_1 está no eixo y e o valor da função $J(\theta_0, \theta_1)$ está no eixo z, conforme está representado na Figura 8. Os pontos no gráfico são os resultados da função custo utilizando a função hipótese $h(x)$ com as entradas θ_0 e θ_1.

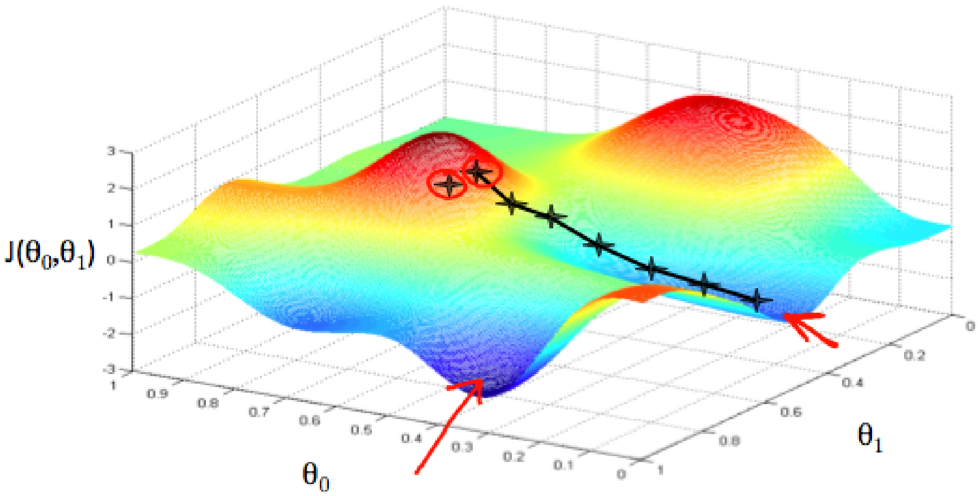


Figura 8: Representação da função gradiente descendente

O método de minimização utilizando a função gradiente descendente pode ser pensado como um algoritmo, que para cada ponto, a partir do inicial, dado como entrada, escolhe a descida mais íngrime do valor de $J(\theta_0, \theta_1)$ na função através de derivadas parciais e um valor α (*learning rate*) que determinará a distância entre cada descida. Obtemos sucesso, quando a função custo estiver em um dos mínimos do gráfico, como representado pelas setas vermelhas na Figura 8.

5.1 Algoritmo Gradiente Descendente

Algorithm 1 Algoritmo Gradiente Descendente

1: **procedure**
2:     **repeat**
3:         $\theta_j := \theta_j - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta_0, \theta_1)$ ▷ (para $j = 0...n$)
4:     **until** *convergir*
5: **end procedure**

Enquanto o método de gradiente descendente não convergir para o mínimo da função, a cada iteração, atualizamos simultaneamente os valores de $\theta_1, \theta_2, ..., \theta_n$ fazendo com que esses valores se aproximem cada vez mais ao mínimo da função.

Podemos perceber que o valor de α tem um certo impacto na atualização dos valores de θ. Valores de α pequenos, a convergência do método gradiente descendente é mais lenta. E para valores de α muito grandes, a a convergência do método gradiente pode ultrapassar o mínimo, o que pode impossibilitar a convergência da função.

5.2 Gradiente Descendente para Regressão Linear

Podemos utilizar o método de gradiente descendente para minimizar a função *Mean squared error* utilizada no algoritmo de regressão linear, subsitituido a função $J(\theta_0, \theta_1)$ por nossa função hipótese. Dessa forma, o algoritmo de gradiente descendente para a minimização da função J terá a seguinte estrutura:

Algorithm 2 Algoritmo Gradiente Descendente Para Minimização Da Função J

1: **procedure**
2: **repeat**
3: $\theta_0 := \theta_0 - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)} \right)$
4: $\theta_1 := \theta_1 - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)} \right) \cdot x^{(i)}$
5: **until** *convergir*
6: **end procedure**

Onde m é o tamanho do conjunto de treino; θ_0 uma constante que será atualizada simultaneamente com θ_1; e $x^{(i)}$, $y^{(i)}$ são valores dados no conjunto de treino.

Esse algoritmo é aplicado para todos os valores dados no conjunto de treino, chamamos isso de *batch gradient descent*. Dessa forma, quando aplicamos o algoritmo, a função J possui apenas um mínimo global (sem outros mínimos locais). Portanto, a função de gradiente descendente sempre converge para regressões lineares, pois J é uma função quadrática convexa.

Nas próximas seções, veremos alguns métodos de otimização desse algoritmo utilizando álgebra linear.

6 Álgebra linear

Nesta seção, serão revisados, brevemente, alguns conceitos básicos da álgebra linear, como por exemplo operações com matrizes, inversa e transposta de matrizes e suas propriedades.

6.1 Matrizes e vetores

Matrizes são *arrays* bidimensionais.

$$M_3 = \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix}$$

A matriz acima é considerada uma matrix 3x3.

Vetores são matrizes com apenas uma coluna e diversas linhas (matriz coluna).

$$v = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}$$

Como podemos perceber, vetores são um subconjunto de matrizes, e o vetor acima é uma matriz 3x1.

Dessa forma, podemos definir algumas notações referentes à matrizes e vetores.

- A_{ij} se refere ao elemento que se encontra na *i-ésima* linha e na *j-ésima* coluna;
- Um vetor com 'n' linhas é um vetor 'n'-dimensional;
- v_i se refere ao *i-ésimo* elemento do vetor;

6.2 Operações básicas com matrizes e vetores

A adição e subtração de vetores são operações unitárias referentes a cada linha do vetor.

$$v + u = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 + u_1 \\ v_2 + u_2 \\ v_3 + u_3 \end{bmatrix}$$

Para multiplicarmos ou dividirmos um valor escalar por um vetor é usada a mesma lógica.

$$v \cdot x = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} \cdot x = \begin{bmatrix} v_1 \cdot x \\ v_2 \cdot x \\ v_3 \cdot x \end{bmatrix}$$

6.3 Multiplicação entre matrizes e vetores

Para realizar a multiplicação entre uma matriz e um vetor, realizamos a multiplicação no sentido "linha x coluna" conforme a expressão abaixo:

$$M_2 \times v = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \times v_1 + b \times v_2 \\ c \times v_1 + d \times v_2 \end{bmatrix}$$

Ao multiplicarmos uma matriz A_{ij} por um vetor v com j linhas, teremos como resultado uma matriz B_{i1}.

6.4 Multiplicação entre duas matrizes

Para realizar a multiplicação entre duas matrizes seguimos a mesma lógica apresentada na Seção 6.3 multiplicando no sentido "linha x coluna".

$$A_2 \times B_2 = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} a_2 & b_2 \\ c_2 & d_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 \times a_2 + b_1 \times c_2 & a_1 \times b_2 + b_1 \times d_2 \\ c_1 \times a_2 + d_1 \times c_2 & c_1 \times b_2 + d_1 \times d_2 \end{bmatrix}$$

Ao multiplicarmos duas matrizes A_{mxn} e B_{nxo} teremos uma matriz C_{mxo}. Dessa forma, podemos definir algumas propriedades relacionadas às operações com matrizes:

- Multiplicação de matrizes não são comutativas, ou seja, $A \times B \neq B \times A$
- Multiplicação de matrizes são associativas, ou seja, $(A \times B) \times C = A \times (B \times C)$

6.5 Matriz identidade, inversa e transposta

A matriz identidade é aquela que, ao ser multiplicada por uma outra matriz de mesma dimensão, resulta na matriz original. Em outras palavras, é uma matriz onde há apenas '1's' na sua diagonal principal.

$$I_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

A inversa de uma matriz, denotada por A^{-1} é aquela que, ao ser multiplicada por A, resulta na matriz identidade I de A. Em outras palavras:

$$A \times A^{-1} = I$$

A matriz transposta da matriz A_{ij} é a matriz A_{ji}^{T}. Trata-se da matriz que vamos obter quando reescrevemos a matriz A_{ij} trocando de posição as linhas e colunas, transformando a primeira linha de A_{ij} na primeira coluna de A_{ji}^{T}, a segunda linha de A_{ij} na segunda coluna de A_{ji}^{T}, e assim sucessivamente.

$$A_{ij} = A_{ji}^{T}$$

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \\ e & f \end{bmatrix}, \; A^{T} = \begin{bmatrix} a & c & e \\ b & d & f \end{bmatrix}$$

7 Regressão Linear com múltiplas variáveis

Nesta seção iremos introduzir os conceitos básicos para a aplicação do algoritmo de regressão linear para multiplas entradas. Em outras palavras, iremos tentar estimar o valor da saída y a partir de diversos parâmetros de entrada.

7.1 Múltiplos parâmetros de entrada

Precisamos definir algumas notações que serão utilizadas.

- $x_j^{(i)}$ = valor do parâmetro j no *i-ésimo* exemplo de treino;
- $x^{(i)}$ = valor dos parâmetros no *i-ésimo* exemplo de treino (vetor);
- m = número de exemplos de treino;
- n = número de parâmetros;

Com isso, podemos definir a função hipótese para múltiplos parâmetros da seguinte forma:

$$\boxed{h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_3 x_3 + ... + \theta_n x_n}$$

Sendo θ_i os parâmetros de entrada da função

Podemos utilizar as definições de matrizes anteriormente vistas na Seção 6 para definir a função hipótese de múltiplas variáveis da seguinte forma:

$$h_\theta(x) = \begin{bmatrix}\theta_0 & \theta_1 & \theta_2 & ... & \theta_n\end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ ... \\ x_n \end{bmatrix} = \theta^T x$$

É importante mencionar que o valor de $x_0^{(i)} = 1$ para $(i \in 1, ..., m)$ por convenção.

7.2 Gradiente Descendente com múltiplas variáveis

Da mesma forma apresentada na Seção 4, teremos as seguintes pré-definições das funções que serão utilizadas a fim de minimizar o custo da função J com múltiplas variáveis de entrada.

- Hipótese: $h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_3 x_3 + ... + \theta_n x_n$;
- Parâmetros: $\theta_0, \theta_1, ..., \theta_n$ (vetor (n+1)-dimensional);
- Função Custo: $J(\theta_0, \theta_1, ..., \theta_n) = \dfrac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} (h_\theta(x_i) - y_i)^2$;

O algoritmo gradiente descendente, em geral, tem a mesma estrutura para os diferentes problemas. Nós apenas temos que iterar sobre os n parâmetros de entrada, atualizando-os simultaneamente.

Algorithm 3 Algoritmo Gradiente Descendente Para Múltiplas Variáveis

procedure
    repeat
        $\theta_j := \theta_j - \alpha \dfrac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}\right) \cdot x_j^{(i)}$ ▷ para $j := 0...n$
    until *convergir*
end procedure

Podemos otimizar o algoritmo gradiente descendente colocando todos os parâmetros no mesmo intervalo. Esse tipo de operação é muito importante para evitar que o gradiente trabalhe com valores muito grandes que possam causar "explosão", ou muito pequenos que possam ser zero, o que pode se tornar um problema para o treinamento do algoritmo de aprendizado.

Para isso, utilizaremos da técnica de normalização média (*mean normalization* ou *feature scaling*). *Feature scaling* envolve dividir os dados de entrada por um intervalo (desvio padrão, ou uma subtração entre o maior e o menor valor das variáveis de entrada) resultando em um valor próximo de 1. *Mean normalization* envolve subtrair o valor médio das variáveis de entrada de cada variável de entrada. Dessa forma, teremos a seguinte fórmula:

$$\boxed{x_i = \frac{x_i - \mu_i}{s_i}}$$

onde μ_i é a média de todos os parâmetros de entrada e s_i é a variação dos valores de entrada $(max - min)$, ou o desvio padrão.

Com isso, teremos os valores de entrada em um mesmo intervalo, sem valores discrepantes para o cálculo da função custo e da otimização pelo gradiente descendente. Com os valores normalizados, evitamos diversos problemas que foram acima mencionados e o custo computacional para o cálculo das derivadas parciais é diminuído.

Para ter certeza que o método do gradiente descendente está funcionando corretamente, o valor de $J(\theta)$ deve diminuir a cada iteração e convergir para um valor próximo de zero. Caso o valor de $J(\theta)$ não esteja convergindo, podemos tentar um valor menor de α.

8 Equação Normal (*Normal Equation*)

É um outro método de minimização da função J, assim como o método de gradiente descendente. Essa forma de implementação, muitas vezes pode otimizar o tempo de processamento da função de minimização através de derivadas da função J a respeito aos $\theta_j's$ igualando-os a zero. Isso nos permite encontrar o valor ótimo para θ sem iterações. Fórmula da equação normal é dada abaixo:

$$\theta = (X^T X)^{-1} X^T y$$

onde X é uma matriz na qual a coluna zero tem todos os elementos iguais a 1.

Dessa forma, podemos comparar as duas formas de implementação que temos: *Gradient Descent* e *Normal Equation*.

Tabela 1: Comparação entre os métodos *Gradient Descent* e *Normal Equation*

Gradient Descent	Normal Equation
É necessário definir o valor de α	Não é necessário definir o valor de α
Muitas iterações são necessárias	Não são necessárias iterações
$O(kn^2)$	$O(n^3)$, pois precisa calcular a inversa de $X^T X$
Funciona bem quando o valor de n é grande	Lento quando o valor de n é grande

9 Classificação

9.1 Problemas de classificação

O método de classificação tem como objetivo classificar um conjunto de dados entre estados ou tipos distintos. Um bom exemplo de um problema de classificação é quando queremos prever se um tumor é maligno ou benigno baseando-se apenas no tamanho do tumor.

Podemos usar o algoritmo de regressão linear para classificar uma base de dados em dois diferentes grupos, como por exemplo, para valores de $h(x) > 0.5$ e para valores $h(x) \leq 0.5$. Contudo, essa forma de implementação não funciona muito bem, pois os problemas de classificação, geralmente, não cabem em problemas de regressão linear.

De outra forma, gostaríamos de classificar nossa base de dados em saídas discretas. Como base, iremos nos focar nos problemas de classificação binários (*binary classification problems*), os quais os valores de y podem assumir apenas dois valores: zero ou um, em outras palavras $y \in 0, 1$.

Podemos representar um problema de classificação através da imagem a seguir na Figura 9

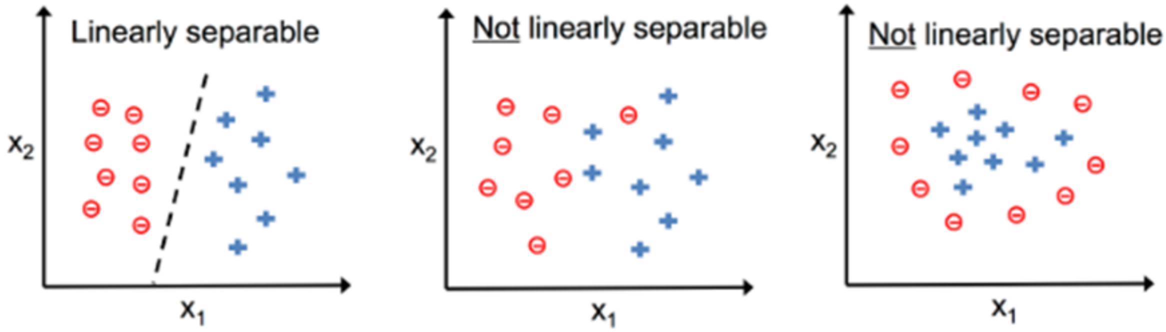


Figura 9: Representação de um problema de classificação

Podemos perceber que na Figura 9 temos dois tipos de classificações: linearmente separáveis e não linearmente separáveis. Nesta seção iremos discutir os problemas binários linearmente separáveis sem necessidade de regularização da função.

9.2 Representação da hipótese

Podemos utilizar o nosso antigo algoritmo de regressão linear para prever um valor de y discreto dado um valor de x. Mas como foi mencionado anteriormente, essa não é uma boa solução para problemas de classificação e para isso, devemos modificar a função hipótese a fim de satisfazer a saída discreta dos problemas de classificação, ou seja, $0 \geq h_\theta(x) \geq 1$.

Uma boa modificação seria basear a nossa função hipótese na função logística (*Logistic Function*) de forma que possamos nos basear na função sigmoide conforme representada na Figura 10. Em outras palavras, teremos:

$$\boxed{h_\theta(x) = g(\theta^T x), \quad z = \theta^T x, \quad g(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}}$$

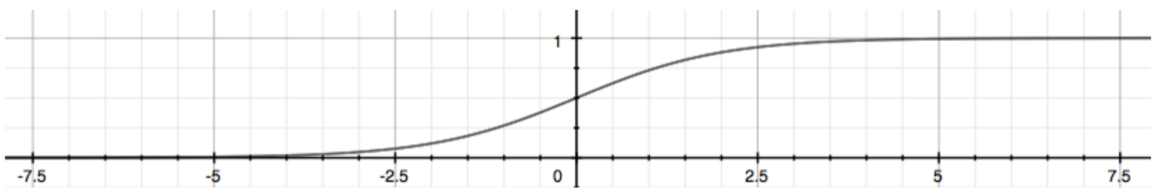


Figura 10: Representação da função sigmoide

A função sigmoide mapeia um valor real em um valor no intervalo $(0, 1)$ fazendo com que seja a melhor forma de implementação de problemas de classificação.

Dessa forma, podemos chegar a algumas conclusões e interpretações dessa nova forma de implementação da função hipótese:

- $h_\theta(x)$ nos dá a probabilidade da nossa saída ser 1.

- $h_\theta(x) = P(y = 1|x; \theta) = 1 - P(y = 0|x; \theta)$
  $P(y = 0|x; \theta) + P(y = 1|x; \theta) = 1$

9.3 Limite de decisão (*Decision Boundary*)

É uma forma de encontrarmos o limite entre os valores discretos que temos na saída da função hipótese. Em outras palavras, podemos traduzir este pensamento da seguinte forma:

$$h_\theta(x) \geq 0.5 \rightarrow y = 1$$

$$h_\theta(x) < 0.5 \rightarrow y = 0$$

pois nossa função sigmoite se comporta de tal forma que quando a entrada $z \geq 0$ o valor da função $g(z) \geq 0.5$.

Então, se a entrada da função g é igual a $\theta^T x$ então isso significa que $h_\theta(x) = g(\theta^T x) \geq 0.5$ quando $\theta^T x \geq 0$. Logo, temos que $\theta^T x \geq 0 \rightarrow y = 1$ e $\theta^T x < 0 \rightarrow y = 0$.

Dessa forma, o limite de decisão é a linha que separa a área entre os valores classificados, ou como $y = 0$, ou como $y = 1$. Esses valores discretos representam as duas classes do problema de classificação binário. Em outras palavras, o limite de decisão é uma curva que separa essas duas classes.

Podemos utilizar outras estruturas de funções para gerarmos diferentes limites de decisão de acordo com a nossa base de dados. Por exemplo se nossos parâmetros dividem areas circulares, podemos utilizar uma função $z = \theta_0 + \theta_1 x_1^2 + \theta_2 x_2^2$.

9.4 Classificação Multiclasse

A classificação multiclasse é uma definição para quando temos além de apenas uma saída binária na função hipótese. Ou seja, podemos classificar os nossos dados em mais de duas classificações. A Figura 11 representa um problema de classificação multiclasse utilizando o método *one-vs-all*.

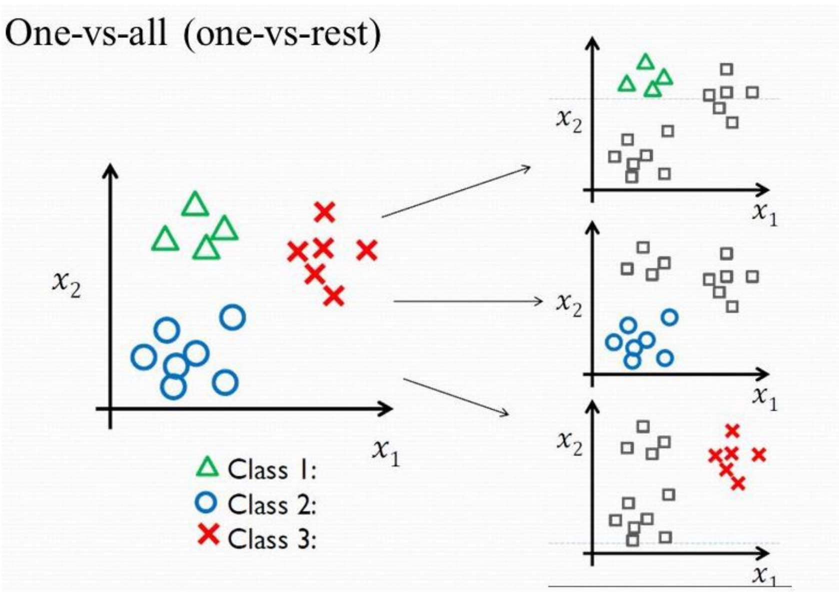


Figura 11: Representação de um problema de classificação multiclasse

No método *one-vs-all*, para cada classe distinta aplicamos uma regressão logística binária e utilizamos o valor retornado da função hipótese para classificar os dados. Em outras palavras, geramos um limite de decisão aplicando a regressão logística para cada classe de acordo com as outras. Então, se temos k classes de entrada, roda-se o algoritmo de regressão logística k vezes para cada uma dessas classes, retornando k valores distintos de h para cada uma das classes.

10 Regressão Logística (*Logistic Regression*)

10.1 Função Custo (*Cost Function*)

Nas seções anteriores, discutimos a implementação da função custo para a regressão linear. Porém, para a regressão logística não é possível utilizar a mesma equação para determinar o custo da função. Como vimos na Figura 8, a função possui diversos mínimos locais e, por conta disso, a função custo da regressão linear não consegue determinar qual é o valor mínimo global. Assim, devemos manipular a função custo a fim de gerarmos uma outra implementação que satisfaça o objetivo de encontrar o mínimo global da função.

$$J(\theta) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} Cost(h_\theta(x^{(i)}), y^{(i)}))$$

$$Cost(h_\theta(x^{(i)}), y) = -log(h_\theta(x)) \qquad se \qquad y = 1$$

$$Cost(h_\theta(x^{(i)}), y) = -log(1 - h_\theta(x)) \qquad se \quad y = 0$$

Dessa forma, podemos ter duas diferentes funções para a representação da função custo para a regressão logística. Como podemos ver na Figura 12 temos duas representações para $y = 1$ em azul e para $y = 0$ em vermelho.

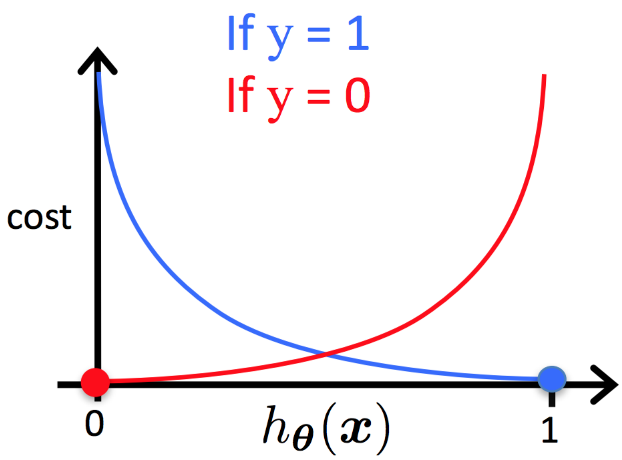


Figura 12: Representação da função custo da regressão logística

$$Cost(h_\theta(x^{(i)}), y) = 0 \quad se \quad h_\theta(x) = y$$

$$Cost(h_\theta(x^{(i)}), y) \to \infty \quad se \quad y = 0 \quad e \quad h_\theta(x) \to 1$$

$$Cost(h_\theta(x^{(i)}), y) \to \infty \quad se \quad y = 1 \quad e \quad h_\theta(x) \to 0$$

Podemos perceber que quando o valor da função custo é zero, então o valor da função hipótese é igual a y. Além disso, quando a função custo tende ao infinito e o valor de y é igual a zero, o valor da função hipótese tende a um e se o valor de y é igual a um, a função hipótese tende a zero.

A fim de simplificar a função custo, podemos reescrevê-la da seguinte forma sem alterar o valor do resultado:

$$Cost(h_\theta(x), y) = -y \cdot log(h_\theta(x)) - (1-y) \cdot log(1-h_\theta(x))$$

Com isso, podemos generalizar a função custo de acordo com a expressão abaixo:

$$\boxed{J(\theta) = -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left[y^{(i)} \cdot log(h_\theta(x^{(i)})) + (1-y^{(i)}) \cdot log(1-h_\theta(x^{(i)}))\right]}$$

10.2 Gradiente Descendente para Regressão Logística

Da mesma forma que o método de regressão linear, o algoritmo do gradiente descendente funciona iterando sobre os valores de θ e derivando a função custo J em ralação a θ.

Assim, podemos descrever o método através do seguinte algoritmo:

Algorithm 4 Algoritmo Gradiente Descendente Para Regressão Logística

1: **procedure**
2:     **repeat**
3:         $\theta_j := \theta_j - \frac{\alpha}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}\right) \cdot x_j^{(i)}$ ▷ Atualiza simultaneamente todos θ_j
4:     **until** *convergir*
5: **end procedure**

ou através da forma vetorizada:

$$\theta := \theta - \frac{\alpha}{m}X^T(g(X\theta) - \vec{y})$$

Dessa forma, podemos utilizar dos métodos vistos anteriormente para implemetar o algoritmo de regressão logística. Contudo, ainda podemos utilizar de técnicas de computação numérica para otimizar os algoritmos. Como por exemplo *Conjugate gradient*, *BFGS* e *L-BFGS* que podemos utilizar a fim de otimizar o método de gradiente descendente.

11 *Underfitting* e *overfitting*

Quando tentamos prever um valor y a partir de um conjunto de treino, podem-se ocorrer alguns problemas relacionados a função de hipótese. Esses problemas são chamados de *underfitting* e *overfitting*. Para explicá-los, podemos nos basear na Figura 13

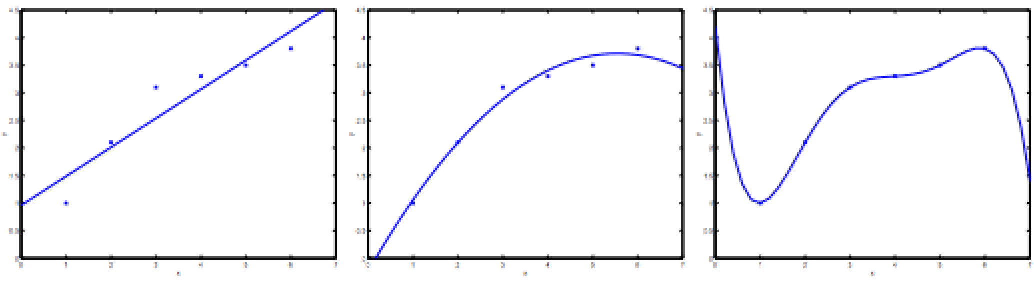


Figura 13: Representação dos problemas de *underfitting* e *overfitting*

Como podemos perceber, na figura mais à esquerda, temos uma função linear do tipo $y = \theta_0 + \theta_1 x$ que não seja ajusta adequadamente com a nossa base de treino. Na figura do centro temos uma função quadrática do tipo $y = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$, que aparentemente se adapta muito bem a nossa base de dados. E na figura mais à direita, temos um polinômio de grau cinco que atinge todos os pontos da nossa base de dados.

Com isso, podemos dizer que a figura mais à esquerda apresenta o problema de sobajuste (*underfitting* ou *high bias*) e a figura mais à direita apresenta o problema de sobreajuste (*overfitting* ou *high variance*).

O problema de *underfitting* ocorre quando a função hipótese h não consegue mapear com consistência os valores da saída pois uma função muito simples é utilizada ou foram utilizados poucos parâmetros de entrada.

De outra forma, o problema de *overfitting* ocorre quando a função hipótese se adapta perfeitamente a nossa base de treino, mas não consegue generalizar os resultados das entradas. Isso ocorre pois uma função muito complexa foi utilizada ou o número de parâmetros utilizados como entrada da função é muito alto.

Assim, temos alguns métodos que podemos utilizar para evitar esse tipo de problema. Dois são principais e estão listados abaixo:

1. Reduzir o número de parâmetros:
   - Manualmente selecionar os parâmetros a serem removidos;
   - Usar algoritmo de modelo de seleção.
2. Regularização (*Regularization*):
   - Manter todos os parâmetros mas reduzir a magnitude dos parâmetros de θ_j;

11.1 Função custo em casos de *overfitting*

Em casos de *overfitting* na função hipótese, podemos reduzir o peso dos termos de maior grau, aumentando o seu custo.

Para isso, podemos utilizar do método de regularização para aumentar o custo de determinadas variáveis. Por exemplo, se tivermos uma função hipótese com quatro parâmetros, teremos uma função de grau quatro do tipo $\theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 + \theta_3 x^3 + \theta_4 x^4$. Através da regularização, podemos reduzir o problema tornando-a mais quadrática eliminando os termos de grau três e quatro sem efetivamente eliminá-los.

Podemos modificar a função custo a fim de reduzir os valores de θ_3 e θ_4 e aumentar os valores de θ_1 e θ_2 da seguinte forma:

$$min_\theta \quad \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}\right)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{n}\theta_j^2$$

Chamamos a expressão acima de função custo regularizada. O valor de λ representa o parâmetro de regularização e determina o quanto os custos dos parâmetros de θ serão inflados. Caso selecionarmos um valor muito alto para λ, a função custo resultará em *underfitting*. Para isso devemos escolher estrategicamente o valor de λ.

Para exemplificar o método de regulzarização em casos de *overfitting*, podemos analisar a Figura 14. Podemos perceber que a função em azul ocorre o problema de *overfitting* e a função em verde - regularizada - evita esse problema.

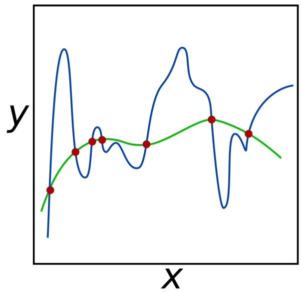


Figura 14: Representação da regularização de uma função

11.2 Regressão linear regularizada

Podemos utilizar o conceito de regularização para evitar problemas de *overfitting* no método de regressão linear.

É possível modificar o método gradiente descendente de forma que consigamos reularizar a atualização do valor de θ conforme visto na Seção 5:

Algorithm 5 Algoritmo Gradiente Descendente Para Regressão Linear Regularizado

1: **procedure**
2: **repeat**
3: $\theta_0 := \theta_0 - \frac{\alpha}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}\right) \cdot x_0^{(i)}$
4: $\theta_j := \theta_j - \left[\left(\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}) \cdot x_j^{(i)}\right) + \frac{\lambda}{m}\theta_j\right]$ $\triangleright$ $j \in 1, 2, ..., n$
5: **until** *convergir*
6: **end procedure**

Podemos perceber que atualizamos o valor de θ_0 separadamente a fim de focarmos apenas nos termos de maior grau.

Além disso, podemos representar o mesmo algoritmo através da equação normal - descrita na Seção 8 - da seguinte forma:

$$\theta = (X^T X + \lambda \cdot L)^{-1} X^T y$$

$$onde \quad L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

11.3 Regressão logística regularizada

Podemos regularizar a regressão logística da mesma forma que regulzarizamos a funçao J para a regressão linear. Com isso, podemos evitar casos de *overfitting* no método de regressão logística.

Assim, podemos escrever a função $J(\theta)$ da seguinte forma:

$$\boxed{J(\theta) = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left[y^{(i)} log(h_\theta(x^{(i)})) + (1 - y^{(i)}) log(1 - h_\theta(x^{(i)})) \right] + \frac{\lambda}{2m} \sum_{j=1}^{n} \theta_j^2}$$

Com isso, da mesma forma que na regressão linear, podemos escrever o algoritmo gradiente descendente com a regularização da função J.

Algorithm 6 Algoritmo Gradiente Descendente Para Regressão Logística Regularizado

1: **procedure**
2:     **repeat**
3:         $\theta_0 := \theta_0 - \frac{\alpha}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)} \right) \cdot x_0^{(i)}$
4:         $\theta_j := \theta_j - \alpha \left[\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}) \cdot x_j^{(i)} + \frac{\lambda}{m} \theta_j \right]$ $\triangleright$ $j \in 1, 2, ..., n$
5:     **until** *convergir*
6: **end procedure**

Parte III

Redes Neurais

12 Redes Neurais: Representação

12.1 Definição básica

Redes neurais (NNs - do inglês *Neural Networks*) são sistemas de computação com nós interconectados que funcionam como os neurônios do cérebro humano. Usando algoritmos, elas podem reconhecer padrões escondidos e correlações em dados brutos, agrupá-los e classificá-los, e – com o tempo – aprender e melhorar continuamente.

12.2 Hipótese não-linear

Nesta seção iremos discutir os principais fundamentos da hipótese não linear e as motivações para a criação de sistemas de redes neurais.

Como vimos nas seções anteriores, para um um problema de classificação não linear podemos expandir a nossa função hipótese para mais termos e, para isso, devemos usar métodos de regularização para manter o treino consistente e sem problemas de *overfitting*.

Problemas de redes neurais são utilizados para modelar problemas da vida real. Um bom exemplo seria quando, a partir de um conjunto de fotos, queremos determinar se uma foto é de um carro ou não. Um algoritmo utlizando redes neurais analisa cada pixel da foto e compara com os valores adquiridos no treino. Esse tipo de problema também é um algoritmo de classificação, porém, agora, utilizando redes neurais devido à sua complexidade.

12.3 Os Neurônios e o Cérebro

Problemas utilizando redes neurais são relativamente antigos, tendo sua origem entre os anos 80 e 90. O objetivo era, basicamente, modelar o cérebro humano através de algoritmos. Por exemplo, uma função hipótese seria modelar o córtex auditivo a fim de reconhecimento de áudio, ou a área de associação visual responsável pela visão.

Biologicamente, o cérebro humano é composto por estruturas nervosas chamadas de neurônios. Neurônios são células responsáveis pela transmissão dos impulsos nervosos e constituem cerca de 10% do tecido nervoso. Eles são constituídos basicamente por três estruturas: corpo celular, dendritos e axônio, como está representado na Figura 15.

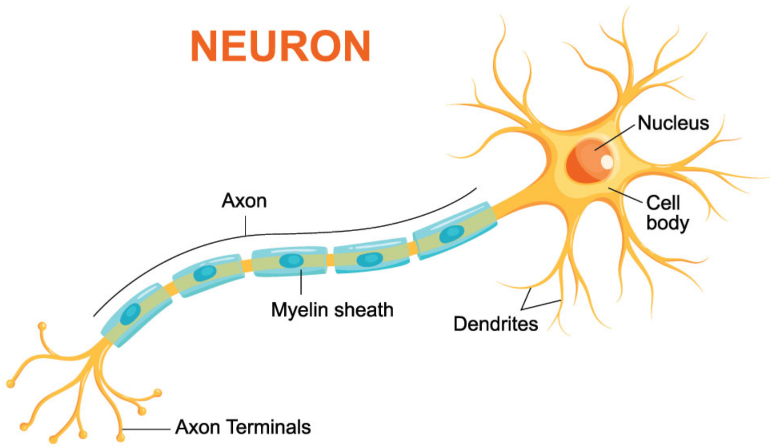


Figura 15: Representação estrutural de um neurônio humano.

Baseando-se nessa estrutura, as redes neurais tem como objetivo modelar computacionalmente as funções especificadas dos neurônios, como por exemplo, entendimento e geração de texto, análise e classificação de imagens, entre outros.

Na seção seguinte serão apresentadas as modelagens principais das redes neurais artificiais.

12.4 Representação do modelo

A partir de uma análise biológica do cérebro humano, sabemos que dois neurônios se comunicam através de impulsos nervosos chamados de sinapses. A informação recebida por um neuônio passa, primeiramente, pelos dentritos e vai em direção ao axônio. Podemos modelar essas informações a fim de gerar um modelo matemático que represente um neurônio da seguinte forma:

- Dendrito: entrada da função $(x_1, ..., x_n)$;
- Axônio: função hipótese $(h_\theta(x))$;

Nas redes neurais, utilizamos a mesma função utilizada na regressão logística $\frac{1}{1+e^{-z}}$, a qual chamamos de "ativação" da função e os parâmetros Θ são chamados de "pesos". Podemos perceber na Figura 16 que o neurônio possui três camadas, as quais chamamos de camada de entrada (*input layer*), camada escondida (*hidden layer*) e camada de saída (*output layer*). A camada de saída também pode ser chamada de função hipótese h_Θ.

Com isso, devemos adicionar algumas notações relacionadas às redes neurais.

- Chamamos de $x_0, x_1, ..., x_n$ os valores da *input layer*, onde $x_0 = 1$ (*bias unit*);
- $a_i^{(j)}$ é unidade de "ativação" i na camada j;
- $\Theta^{(j)}$ é a matriz de pesos que controla o mapeamento da função da camada j para a camada $j + 1$.

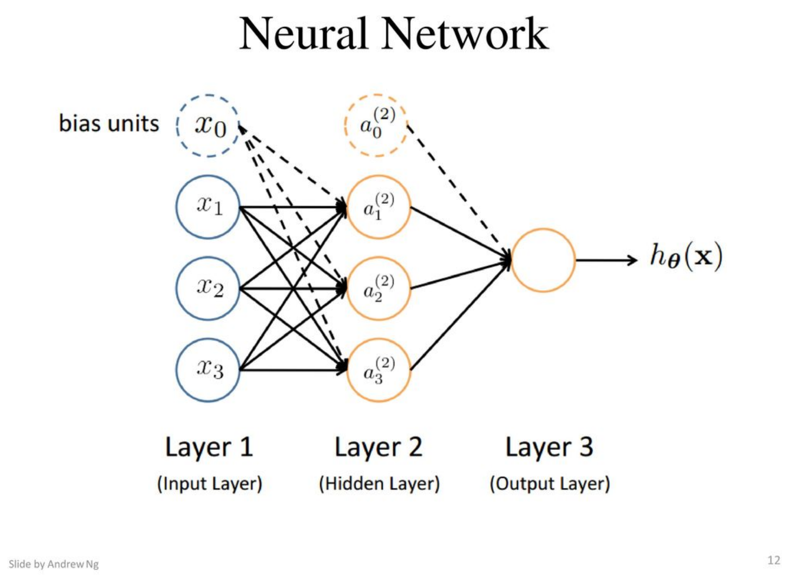


Figura 16: Representação de uma rede neural

Na Figura 16 podemos perceber que para gerar a saída (função hipótese) passamos por uma *input layer* e uma *hidden layer*. Com isso, podemos descrever uma equação para que possamos determinar o valor da saída partindo dos parâmetros acimas identificados.

$$a_1^{(2)} = g(\Theta_{10}^{(1)}x_0 + \Theta_{11}^{(1)}x_1 + \Theta_{12}^{(1)}x_2 + \Theta_{13}^{(1)}x_3)$$
$$a_2^{(2)} = g(\Theta_{20}^{(1)}x_0 + \Theta_{21}^{(1)}x_1 + \Theta_{22}^{(1)}x_2 + \Theta_{23}^{(1)}x_3)$$
$$a_3^{(2)} = g(\Theta_{30}^{(1)}x_0 + \Theta_{31}^{(1)}x_1 + \Theta_{32}^{(1)}x_2 + \Theta_{33}^{(1)}x_3)$$
$$h_\Theta(x) = a_1^{(3)} = g(\Theta_{10}^{(2)}a_0^{(2)} + \Theta_{11}^{(2)}a_1^{(2)} + \Theta_{12}^{(2)}a_2^{(2)} + \Theta_{13}^{(2)}a_3^{(2)})$$

Percebe-se que a matriz Θ é uma matriz de tamanho 3x4 (3 = número de parâmetros na camada dois e 4 = número de parâmetros de entrada). Quando aplicamos a função sigmoide para cada uma das camadas, nós obtemos o nodo de ativação da próxima camada. Assim, a função hipótese é a função logística aplicada na soma dos valores dos nodos de ativação os quais são multiplicados pelo parâmetro da matriz $\Theta^{(2)}$ que contém os valores dos pesos da segunda camada de nodos.

Com isso, temos a seguinte definição:

Se uma rede neural tem s_j unidades na camada j e s_{j+1} unidades na camada $j+1$, então $\Theta^{(j)}$ terá dimensões $s_{j+1} \times (s_j + 1)$.

Com as definições vistas acima, podemos introduzir uma implementação vetorizada das funções vistas. Para isso, iremos definir uma variável $z_k^{(j)}$ que engloba os parâmetros dentro da função g. Assim, teríamos:

$$a_1^{(2)} = g(z_1^{(2)})$$
$$a_2^{(2)} = g(z_2^{(2)})$$
$$a_3^{(2)} = g(z_3^{(2)})$$

Em outras palavras, para a camada $j = 2$, a função z seria:

$$z_k^{(2)} = \Theta_{k,0}^{(1)} x_0 + \Theta_{k,1}^{(1)} x_1 + \Theta_{k,2}^{(1)} x_2 + ... + \Theta_{k,n}^{(1)} x_n)$$

E a função vetorizada teria a forma:

$$x = \begin{bmatrix} x_0 \\ x_2 \\ ... \\ x_n \end{bmatrix}, \quad z^{(j)} = \begin{bmatrix} z_1^{(j)} \\ z_2^{(j)} \\ ... \\ z_n^{(j)} \end{bmatrix}$$

Com $x = a^{(1)}$ teremos:

$$z^{(j-1)} = \Theta^{(j-1)} a^{(j-1)}$$

Com essas manipulações temos que a função hipótese pode ser definida da seguinte forma:

$$\boxed{h_\Theta(x) = a^{(j+1)} = g(z^{(j+1)})}$$

12.5 Aplicações

Podemos exemplificar a aplicação de uma rede neural através de um exemplo que será visto a seguir:

$$\begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} g(z^{(2)}) \end{bmatrix} \rightarrow h_\Theta(x)$$

Mas afinal, para que uma rede neural pode ser útil? Ao longo das últimas décadas, a área de pesquisa que envolve redes neurais está se desenvolvendo de maneira dignificativa. Apesar desse desenvolvimento ainda estar no começo, já foram descobertas diversas aplicações de redes neurais, como podem ser vistas a seguir:

- *Computer Vision*: reconhecimento de objetos, emoções, etc;
- *Recurrent Neural Network* (RNNs): reconhecimento de discursos e tradução de idiomas;
- *Wavenets* para traduçao "texto-discurso";
- *Deep Q-Network* (DQN) e *Asynchronous Actor-Critic Agents* (A3C) para *reinforcement learning*, como por exemplo Atari;
- AlphaGo [16];
- *Neural Art* e síntese de imagens;
- *Aesthetic quality assessment*

Para o melhor entendimento do tipo de implementação que uma rede neural linear com apenas duas camadas - *input* e *output* - podemos criar um vetor para $\Theta^{(1)}$ para computar a função $x_1 AND x_2$ da seguinte forma:

$$\Theta^{(1)} = \begin{bmatrix} -30 & 20 & 20 \end{bmatrix}$$

Percebemos que no exemplo não temos *hidden layers*. Temos a *input layer* seguida pelo processamento da função hipótese.

Como sabemos que, pela função sigmoide, com uma entrada de duas variáveis x_1 e x_2 teremos valores binários (0 ou 1) na saída da função hipótese $h_\Theta(x) = g(-30 + 20x_1 + 20x_2)$. Essa ideia pode ser representada na tabela a seguir:

Tabela 2: Implementação da rede neural usando portas 'and' $x_1 AND x_2$

x_1	x_2	$h_\Theta(x)$
0	0	$g(-30) \approx 0$
0	1	$g(-10) \approx 0$
1	0	$g(-10) \approx 0$
1	1	$g(10) \approx 1$

Como vimos até agora, representamos redes neurais simples com duas três camadas - *input* e *output*. Contudo, esse tipo de implementação possui diversas limitações. A primeira delas foi observada ao tentar implementar a função *XOR*. Essa limitação potencializou a criação de novas arquiteturas de redes neurais, pois a função *XOR* não é linearmente separável, ou seja, não se pode, de maneira linear - com apenas duas camadas - representá-la em uma rede neural. Uma solução para este problema foi a criação de novas camadas internas, chamadas de *hidden layers*, que foram discutidas na Seção 12, dando origem a um novo campo chamado *Multilayer perceptron* (MLP).

A seguir, iremos discutir as diferentes arquiteturas de redes neurais para diferentes tipos de classificação.

12.6 Classificação Multiclasse

Em problemas que são utilizados redes neurais, comumente são utilizados métodos de resolução desses problemas de forma multiclasse. Em outras palavras, a rede neural não terá apenas uma função hipótese como sáida, $h_\Theta(x)$ nesses casos será um vetor que pertence a $\mathbb{R}^n$.]

Na Figura 17 abaixo podemos perceber que a rede neural foi construída com o objetivo de resolver um problema de classificação multiclasse, pois percebemos que a camada verde, abaixo ("*layer 4*"), que representa a função hipótese, é um vetor que pertence a $\mathbb{R}^4$

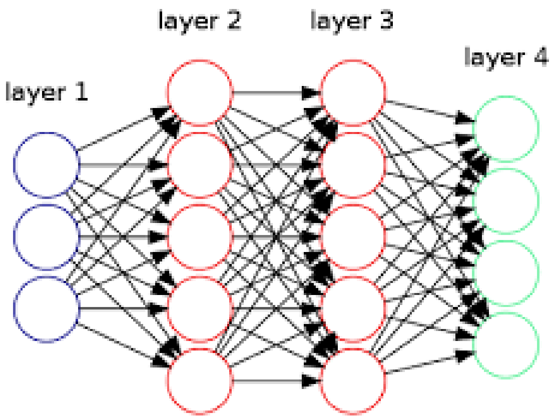


Figura 17: Representação de uma rede neural com classificação multiclasse

É possível escrever um programa de visão computacional para que possamos diferenciar pedestres, carros, motos e caminhões. Assim, teremos quatro nodos na *output layer* que representam cada um dos tipos de automóveis descritos.

$$h_\Theta(x)^1 \approx \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad h_\Theta(x)^2 \approx \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad h_\Theta(x)^3 \approx \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad h_\Theta(x)^4 \approx \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Onde $h_\Theta(x)^1$ representa um pedestre, $h_\Theta(x)^2$ representa um carro, $h_\Theta(x)^3$ representa uma moto e $h_\Theta(x)^4$ representa um caminhão. Dessa forma, a rede neural poderia ser modelada, em forma vetorial, da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} a_0^{(2)} \\ a_1^{(2)} \\ a_2^{(2)} \\ a_3^{(2)} \\ \dots \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} a_0^{(3)} \\ a_1^{(3)} \\ a_2^{(3)} \\ a_3^{(3)} \\ \dots \end{bmatrix} \rightarrow \dots \rightarrow \begin{bmatrix} h_\Theta(x)_1 \\ h_\Theta(x)_2 \\ h_\Theta(x)_3 \\ h_\Theta(x)_4 \end{bmatrix}$$

13 Redes Neurais: Aprendizado

13.1 Estrutura básica

Uma rede neural consiste em uma sequência de camadas nas quais os dados são aplicados a transformações lineares e não lineares. Cada uma dessas camadas são compostas por neurônios (*neurons* ou *units*) e cada um desses neurônios estão conectados com os próximos, presentes na camada seguinte. Essas conexões são chamadas de pesos (*weights*) - um valor numérico. E, além disso, cada camada possui um valor fixo numérico, chamado de *bias*. Assim, os dados passamos como entrada começam na *input layer*, passando por transformações lineares e não lineares nas camadas internas até atingir a *output layer*.

Com isso, o aprendizado de uma rede neural tem como objetivo otimizar a função custo (*loss function*) de acordo com os parâmetros, geralmente através da regra da cadeia ou através do método do gradiente descendente.

Nas próximas subseções iremos discutir os conceitos fundamentais para a estruturação básica de uma rede neural, apresentando os principais modelos e arquiteturas utilizados.

13.1.1 Camada linear

Como foi apresentado nas seções anteriores, uma rede neural possui diversas camadas e cada uma delas executa uma função sobre um dado. A primeira camada que iremos discutir é a camada mais básica, a qual executa transformações lineares sobre os cados. A camada linear - do inglês *linear layer* - realiza o treino das camadas intermediárias da rede neural baseado no método de regressão linear (Seção 3).

A camada linear realiza uma soma ponderada dos dados de entrada, ou seja, realiza uma soma dos resultados de funções afins da seguinte forma:

$$\boxed{y = \sum_i w_i x_i + b}$$

Onde w são as conexões de cada neurônio da camada com os pesos (*weight*), x são os valores dos neurônios conectados, b é o valor numérico *bias* de cada camada (constante), i é o número de conexões e y é o valor de saída do neurônio atual.

Os valores de y retornados irão percorrer toda a rede neural. Para isso, temos camadas de ativação as quais irão adicionar complexidade e dimensionalidade para a rede neural. Essas camadas de ativação podem ter diferentes formas e a mais comum delas é a chamada *dense layer*, a qual todos os neurônios das camadas subsequentes estão, de alguma forma, conectados com os neurônios da camada precedente. A seguir, iremos discutir diferentes implementações da camada de ativação usando diferentes modelos matemáticos

13.1.2 Camada de ativação: *Sigmoid layer*

A camada de ativação - do inglês *activation layer* ou *sigmoid layer* - realiza o cálculo da função sigmoide através de operações ponto a ponto não lineares, como foi visto na Seção 13.1.2. A função sigmoide, assim, tem a seguinte estrutura:

$$\boxed{g(x) = sigmoid(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}}$$

Geralmente, aplicamos a função sigmoide a após realizarmos o cálculo da camada linear, ou seja:

$$\boxed{y = g\left(\sum_i w_i x_i + b\right)}$$

13.1.3 *Cross entropy loss*

Cross entropy loss tem como objetivo calcular o quão discrepante do valor esperado está o valor produzido como saída na rede neural. Como foi visto na Seção 10.1. Essa função tem a seguinte estrutura:

$$\boxed{\ell_{CE}(y, g(z)) = ylog(g(z)) + (1-y)log(1-g(z))}$$

Essa função tem o mesmo objetivo da função custo anteriormente vista e que será detalhada na Seção 13.2.

13.1.4 Camada de ativação: *Softmax layer*

A função *softmax* é uma generalização da função logística para múltiplas dimensões. Essa função é muito utilizada em classificações multiclasse.

Softmax recebe como entrada um vetor x e para cada elemento desse vetor, a função *argmax* é aplicada gerando valores iguais a zero e valores iguais a um (para valores grandes a função retorna 1 e, caso o contrário, a função retorna 0). Em outras palavras:

$$y = f_{SM}(x) = softmax(x), \text{ onde } y_i = \frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^{K} e^{x_j}}$$

Todos os elementos do vetor de saída y são não negativos e a soma deles é igual a 1. Além disso, podemos interpretar a função como a distribuição de probabilidade sobre os índices K de y.

Da mesma forma que a camada de ativação, podemos aplicar a saída dessa função na função *cross entropy loss*.

$$\ell_{CE}(y, g(z)) = -\sum_{j=1}^{k} ylog(f_{SM}(x_j)) = -\sum_{j=1}^{k} y \left[x_j - log \sum_{l=1}^{k} e^{x_l} \right]$$

13.1.5 Camada de ativação: *Rectified Linear layer* (ReLU)

A *Rectified Linear Layer* é uma função de ativação, assim como a função sigmoide que nos retorna *Rectified Linear Units* (ReLUs). É uma das funções de ativação mais utilizadas, atualmente, nas implementações de redes neurais devido ao fato de ser mais simples e mais barata que a função sigmoide.

Podemos implementar a ativação ReLU da seguinte forma:

$$y = f_{relu}(x) = relu(x), \text{ onde } y_i = maximum(0, x_i)$$

Para melhor compreensão, a Figura 18 representa o comportamento da função $relu(x)$ de acordo com os parâmetros x de entrada.

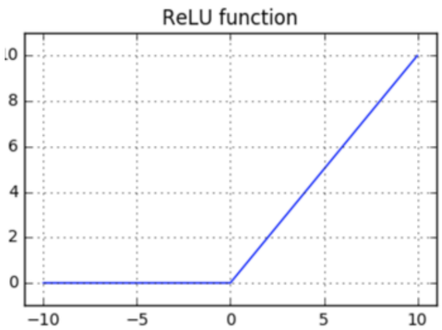


Figura 18: Representação da função ReLU usada para a camada de ativação

13.2 Função Custo (*Cost Function*)

Primeiramente, precisamos definir as variáveis que serão usadas para definir a função custo.

- L = número total de camadas (*layers*) na rede neural;
- s_l = número de unidades na camada l (sem contar a unidade *bias*);
- K = número de unidades/classes de saída (*output layer*).

Com isso podemos definir a função custo que será utilizada para calcular o custo de uma rede neural. Utilizaremos como base a função custo da regressão logística vista na Seção 10.1 a fim de determinarmos o valor da saída da função $J(\Theta)$.

A função custo para redes neurais tem o seguinte formato:

$$J(\Theta) = -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{K}\left[y_k^{(i)}\log((h_\Theta(x^{(i)}))_k) + (1-y_k^{(i)})\log(1-(h_\Theta(x^{(i)}))_k)\right] + \frac{\lambda}{2m}\sum_{l=1}^{L-1}\sum_{i=1}^{s_l}\sum_{j=1}^{s_{l+1}}(\Theta_{j,i}^{(l)})^2$$

Podemos comparar esta equação com a equação da função custo da regressão logística. Assim, percebe-se que adicionamos alguns somatórios. Nos dois primeiros somatórios, de $k = 1$ até K e de $i = 1$ até m, somamos os valores do retorno da função custo da regressão logística para cada nodo da *output layer*. Nos três últimos somatórios, de $j = 1$ até s_{l+1}, de $i = 1$ até s_l e de $l = 1$ até $L-1$, somamos os valores dos quadrados de todos os valores de Θ individuais em toda a rede neural.

13.3 *Backpropagation Algorithm*

O algoritmo de *Backpropagation* é, sem dúvida, o algoritmo mais importante para as redes neurais. É com esse algoritmo que as redes neurais aprendem, essencialmente.

Como foram vistos nas seções anteriores, exitem algoritmos que são usados com o objetivo de minimizar a função custo. Para redes neurais, usa-se um algoritmo chamado *Backpropagation* que tem o mesmo objetivo: minimizar a função custo, ou seja $\min_\Theta J(\Theta)$. A minimzação ocorre após realizarmos o processo de *forward propagation* usando o método de gradiente descencente - visto na Seção 5 -, atualizando os valores das *hidden layers* de acordo com os valores retornados da função custo.

Em geral, algoritmo de *backpropagation* acontece em duas fases principais que serão discutidas em detalhes a seguir. Essas fases são:

1. ***Forward pass***: nossas entradas são passadas através da rede e as previsões de saída são obtidas. Nessa fase, calculamos a função custo e computamos as funções de ativação para cada transição de camada.
2. ***Backward pass***: calculamos o gradiente da função custo na camada final (*output layer*) e usamos esse gradiente para aplicar recursivamente a regra da cadeia para atualizar os pesos da rede neural.

13.3.1 *Forward pass*

O principal objetivo dessa fase é calcular os valores de cada neurônio da nossa rede neural aplicando uma série de *dot products* (multiplicações entre vetores) e funções de ativação a fim de atingirmos a camada final da rede.

Por exemplo, se temos os seguintes valores de entrada x_i e a saída esperada y, de acordo com a tabela a seguir:

Tabela 3: Valores hipotéticos de entrada para a rede neural seguinto uma tupla do tipo (x, y)

x_0	x_1	x_2 (*bias*)	y
0	0	1	0
0	1	1	1
1	0	1	1
1	1	1	0

Cada um desses valores de x_i estarão presentes na *input layer* da rede neural. E para cada um desses valores, serão relizados *dot products* entre as entrdas de cada camada seguido pelo cálculo da função de ativação. Esta ideia está exemplificada na Figura 19 a seguir.

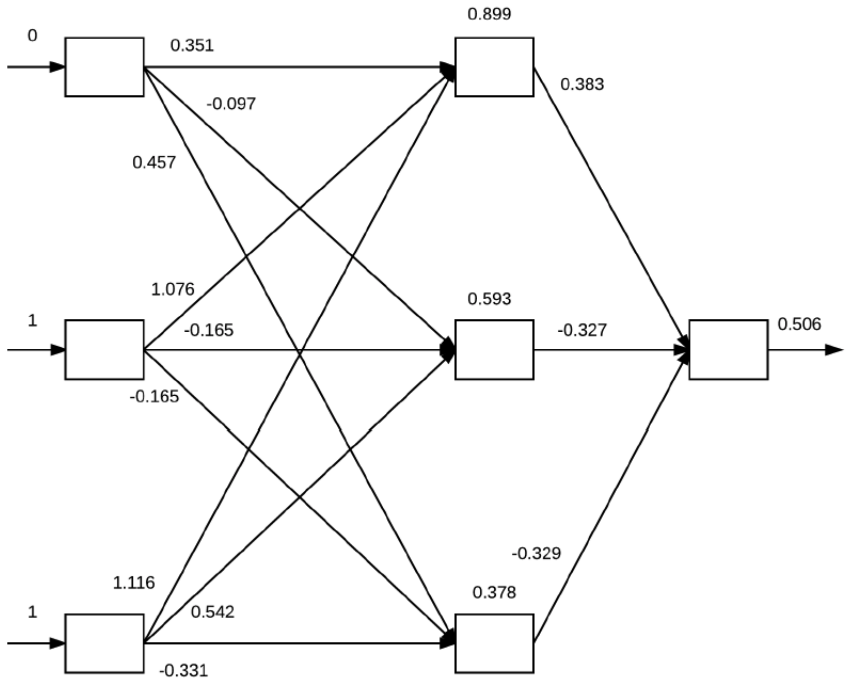


Figura 19: Exemplificação do algoritmo *backpropagation* a partir dos inputs definidos na Tabela 3. Na *input layer* estão os valores de x definidos. Os valores das arestas são inicializados aleatoriamente e representam os pesos. Na *hidden layer* estão os valores calculados a partir dos *dot products* e das aplicações das funções de ativação (neste caso, sigmoide) e na *output layer* o valor calculado pela função custo.

A partir dos valores de entrada baseados na Tabela 3 e os pesos que foram inicializados aleatoriamente, para cada um desses valores executamos as seguintes operações de *dot products* e ativações utilizando a função $g(z)$ sigmoide:

1. $g((0 \times 0.351) + (1 \times 1.076) + (1 \times 1.116)) = 0.899$
2. $g((0 \times 0.097) + (1 \times 0.165) + (1 \times 0.542)) = 0.593$
3. $g((0 \times 0.457) + (1 \times 0.165) + (1 \times 0.331)) = 0.378$

Os valores dos neurônios das *hidden layers* são atualizados de acordo com essas operações e, com eles podemos aplicar mais uma vez as mesmas operações para cada um dos valores atualizados para gerarmos o valor da *output layer*.

$$g((0.899 \times 0.383) + (0.593 \times -0.327) + (0.378 \times -0.329)) = 0.506$$

A saída é, portanto, 0.506, o que representa um valor de probabilidade de 50,6%. Contudo, percebe-se que a rede neural não tem muita confiança a respeito do valor gerado, então, para que a rede neural realmente aprenda precisamos realizar a minimização da função custo através da etapa de *Backward pass*.

13.3.2 *Backward pass*

Para otimizar a função custo, desejamos selecionar pesos que fornecem uma estimativa ótima de uma função que modela nossos dados de treinamento. Ou seja, desejamos encontrar um conjunto de pesos Θ que minimize a saída $J(\Theta)$.

Para aplicar o algoritmo de *backpropagation* a nossa função de ativação deve ser diferenciável, de modo que possamos calcular a derivada aprcial do erro em relação a um dado peso $\Theta^{(L)}$, o custo $\mathcal{L}$, saída do nó $a^{(L)}$ da *hidden layer* e saída da rede $z^{(L)}$.

$$\boxed{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Theta^{(L)}} = \frac{\partial z^{(L)}}{\partial \Theta^{(L)}} \frac{\partial a^{(L)}}{\partial z^{(L)}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a^{(L)}}}$$

A saída dessa equação é uma função composta dos pesos, entrada e funções de ativação.

Podemos, analisar cada um desses termos separadamente.

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a^{(L)}} = 2(a^{(L)} - y),\ \frac{\partial a^{(L)}}{\partial z^{(L)}} = g'(z^{(L)}),\ \frac{\partial z^{(L)}}{\partial \Theta^{(L)}} = a^{(L-1)}$$

Então, seguindo o exemplo da Figura 19, a partir do valor de saída, iremos calcular a derivada da respectiva camada baseando-se em relação aos pesos que nela estão conectados. Essa derivada é uma composição de multiplicações de derivadas do custo calculado em relação a camada anterior, a camada anterior em relação a saída da rede neural e a saída da rede neural em relação aos pesos.

Com isso, podemos minimizar o erro dos pesos seguindo a seguinte ideia:

$$\text{Novo Peso} = \text{Peso Antigo} - \text{Derivada} \times \text{Taxa de aprendizado}$$

Portanto, na prática, *backpropagation* é apenas uma aplicação recursiva da regra da cadeia por toda a rede neural baseando-se nos valores gerados das camadas mais finais até as camadas mais iniciais. Em suma, *backpropagation* das redes neurais é equivalente ao algoritmo de gradiente descendente dos problemas de regressão.

13.3.3 Algoritmo

Agora, podemos verificar como funciona esse algoritmo na prática.

Realizando uma análise do algoritmo, temos que na linha 2 inicializamos $\Delta_{ij}^{(l)}$ com zeros, gerando uma matriz de zeros. No *loop for* inicializamos as variáveis $a^{(1)}$ com os valores da *input layer* e, depois realizamos *forward propagation* para computar os valores de $a^{(l)}$. Para cada valor de $a^{(l)}$ definido, computamos os valores de $\delta^{(l)}$ através de *backpropagation*, na linha 6 e 7 sabendo que

$$\boxed{\delta^{(l)} = ((\Theta^{(l)})^T \delta(l-1)).* a^{(l)}.* (1 - a^{(l)})}$$

Computamos os valores de $\delta^{(l)}$ começando na camada L da rede neural até a camada 2. Utilizamos os valores de delta para armazenar o erro presente em cada um dos vetores dos nodos de ativação $a^{(l)}$.

Por fim, na linha 8, calculamos os valores de $\Theta_{ij}^{(l)}$ e determinamos o valor da derivada de $J(\Theta)$, armazenando em $D_{(ij)}^{(l)}$ nas linhas 11 e 13.

Algorithm 7 *Backpropagation Algorithm*

procedure BACKPROPAGATION(Training set $\left[(x^{(1)}, y^{(1)}), ..., (x^{(m)}, y^{(m)})\right]$)
    Inicializar $\Delta_{ij}^{(l)} = 0$ ▷ para todos l, i, j usado para computar $\frac{\partial}{\partial \Theta_{ij}^{(l)}}$
    for $i = 1$ **to** m **do**
        Inicializar $a^{(1)} = x^{(i)}$
        Realizar *forward propagation* para computar $a^{(l)}$ ▷ para $l = 2, 3, ..., L$
        Usando $y^{(i)}$, computar $\delta^{(L)} = a^{(L)} - y^{(i)}$
        Computar $\delta^{(L-1)}, \delta^{(L-2)}, ..., \delta^{(2)}$
        $\Delta_{ij}^{(l)} := \Delta_{ij}^{(l)} + a_j^{(l)} \delta_i^{(l+1)}$
    end for
    if $j \neq 0$ **then**
        $D_{(ij)}^{(l)} := \frac{1}{m} \Delta_{ij}^{(l)} + \lambda \Theta_{ij}^{(l)}$ ▷ $\frac{\partial}{\partial \Theta_{ij}^{(l)}} J(\Theta) = D_{(ij)}^{(l)}$
    else
        $D_{(ij)}^{(l)} := \frac{1}{m} \Delta_{ij}^{(l)}$
    end if
end procedure

13.4 Otimizadores

Em algumas implementações do gradiente descendente, podemos encontrar diferentes formas de otimizações. A seguir estão listadas algumas formas de implementações.

- Gradient Descent;
- Stochastic Gradient Descent;
- Mini-Batch Gradient Descent;
- Momentum;
- Nesterov Accelerated Gradient;
- AdaGrad;
- Adam;

Esses sistemas de otimização serão abordados e detalhados em seções seguintes.

13.5 Verificação do gradiente

Usamos o método de verificação do gradiente para assegurar que o algoritmo de *backpropagation* está funcionando correntamente.

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial \Theta} \approx \frac{J(\Theta+\epsilon) - J(\Theta-\epsilon)}{2\epsilon}}$$

Usamos a expressão acima para computar todos os valores de Θ_j e para isso usamos valores pequenos para epsilon, como por exemplo, $\epsilon = 10^{-4}$.

Verificamos se os valores armazenados de Θ_j retornados pela expressão se aproxima dos valores de D retornados pelo algoritmo de *backpropagation*. Contudo, uma vez confirmado que o algoritmo funciona corretamente, não precisamos verificar novamente, pois o algoritmo de verificação é muito lento.

13.6 Inicialização aleatória

Para o melhor funcionamento do algoritmo de *backpropagation* devemos inicializar os vetores $\Theta_{ij}^{(l)}$ aleatoriamente de forma que $\Theta_{ij}^{(l)} \in [-\epsilon, \epsilon]$.

Nota-se que o valor de ϵ utilizado é o mesmo valor que foi utilizado no método de verificação do gradiente.

Com essa inicialização, garantimos que os valores de teta são simétricos e adaptados para o melhor funcionamento do algoritmo de *backpropagation*.

13.7 Organização do conhecimento

Como foi visto até agora, nós temos três tipos de estruturas básicas em uma arquitetura de uma rede neural:

- Número de unidades de entrada (*input units*): dimensão do vetor de entradas x;
- Número de unidades de saída (*output units*): dimensão do vetor de saída (classes);
- Numero de unidades intermediárias (*hidden units*) por camada: são definidas a partir da complexidade do problema e, geralmente, quando temos mais de uma camada, cada uma delas devem ter o mesmo número de unidades.

A partir dessas definições mencionadas, podemos, novamente, estrutural a lógica que deve ser seguida ao realizarmos o treino de uma rede neural. Abaixo, estão divididos em passos o algoritmo de treino utilizando *backpropagation*.

1. Aleatoriamente inicializar os pesos $\Theta_{ij}^{(l)}$ (Seção 13.6);
2. Implementar o método de *forward propagation* para computar os valores da função hipótese $h_\Theta(x^{(i)})$ para todos os valores de $x^{(i)}$ (Seção 13);
3. Implementar a função custo (Seção 13.2);
4. Implementar o método de *backpropagation* para computar os valores das derivadas parciais $\frac{\partial}{\partial\Theta}$ (Seção 13.3);
5. Utilizar o método de verificação do gradiente para confirmar que o método de *backpropagation* está funcionando corretamente. Após executar uma vez, desabilitamos a verificação (Seção 13.5);
6. Utilizar o algoritmo de gradiente descendente ou algum outro método de minimização mais otimizado para minimizarmos a função custo utilizando os valores de teta (Seção 13.4).

14 Aplicação de algoritmos de *machine learning*

14.1 Valoração de algoritmos de aprendizagem

Muitas vezes, podemos ter alguns problemas durante o teste das funções de treino. Para isso, é possível realizar alguns levantamentos a respeito do problema realizando as seguintes atividades:

- Aumentar o número de exemplos de treino;
- Diminuir o números de parâmetros;
- Adicionar parâmetros;
- Tentar parâmetros polinomiais;
- Aumentar ou diminuir o valor de λ.

Existem outros métodos que podem ser utilizados para valorar a função hipótese, ou seja, verificar a acurácia dos conjuntos de treino e teste. Assim, para cada um dos conjuntos teremos duas funções custo; uma para o conjunto de treino: $J_{treino}(\theta)$; e outra para o conjunto de teste $J_{test}(\theta)$.

Com isso, para regressão linear e para algoritmos de classificação, temos as seguintes equações para computar o erro de cada um dos dois métodos.

1. Para regressão linear:

   $J_{test}(\theta) = \frac{1}{2m_{test}} \sum_{i=1}^{m_{test}} (h_\theta(x_{test}^{(i)}) - y_{test}^{(i)})^2$

2. Para classificação:

   $$err(h_\theta(x), y) = \begin{cases} 1 & \text{se } h_\theta(x) \geq 0.5 \text{ e } y = 1 \text{ ou } h_\theta(x) < 0.5 \text{ e } y = 1 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Calculamos a média do erro do conjunto de teste:

$TesteErro = \frac{1}{m_{test}} \sum_{i=1}^{m_{test}} err(h_\theta(x_{test}^{(i)}) - y_{test}^{(i)})$

Cada uma dessas formas nos retorna a proporção que os nossos dados foram erroneamente classificados.

Usualmente, dividimos o *dataset* em três diferentes conjuntos:

- Conjunto de treino (60%);
- Conjunto de *cross validation* (20%);
- Conjunto de teste (20%).

Podemos calcular os os erros para cada um desses três conjuntos, resultando em três diferentes valores: $J_{train}(\theta)$, $J_{cv}(\theta)$ e $J_{test}(\theta)$. Com isso, usamos os valores dos erros de $J_{cv}(\theta)$ para ajustarmos o grau do polinômio a fim de que possamos atingir o menor erro possível para $J_{test}(\theta)$.

14.2 Curvas de aprendizado

Nesta seção iremos interpretar gráficos que representam curvas de aprendizado analisando os valores de $J_{train}(\theta)$, $J_{cv}(\theta)$ e $J_{test}(\theta)$ para concluir se o treino está bem ajustado, com *overfitting* ou *underfitting*.

Em primeira análise, sabemos que para pequenos valores de entrada o valor do erro esperado é próximo de zero. Porém, quando aumentamos o tamanho do conjunto de treino este erro tende a aumentar. Para isso, podemos analisar dois tipos de situações esperadas: *high bias* e *high variance*.

Na representação a seguir que representa o erro da função J para casos de treino e teste de acordo com o grau do polinômio d. Percebe-se que quanto maior o grau do polinômio, menor é a taxa de erro no conjunto de treino e maior é a taxa de erro no conjunto de teste, e quanto menor o grau do polinômio maior é a taxa de erro do conjunto de treino e maior é a taxa de erro do conjunto de teste. Assim, devemos ajustar o gradu do polinômio de forma que ele seja grande suficiente para evitar os casos de *underfitting* e *overfitting*.

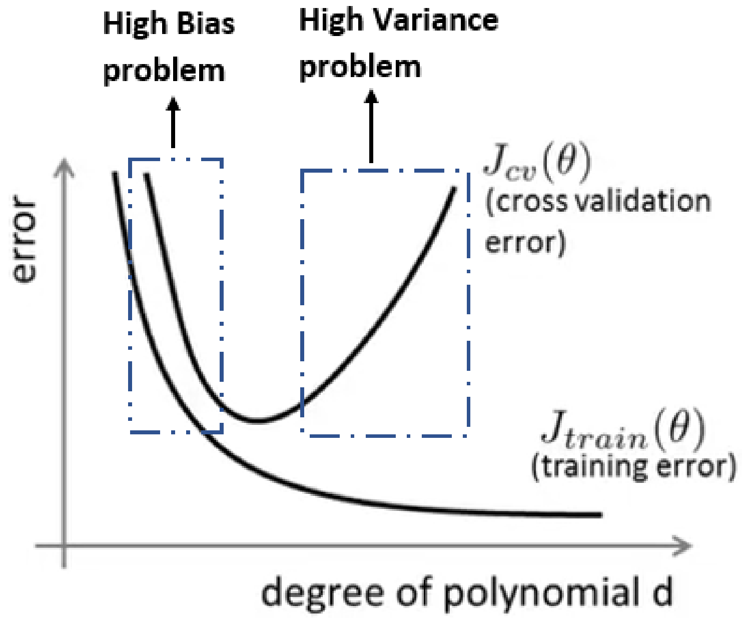


Figura 20: Representação das curvas $J_{cv}(\theta) e J_{train}(\theta)$ relacionando o grau do polinômio d com a taxa de erro de cada uma dessas funções.

14.2.1 *High Bias*

Em casos de *underfitting* teremos a seguinte situação apresentada na Figura 21

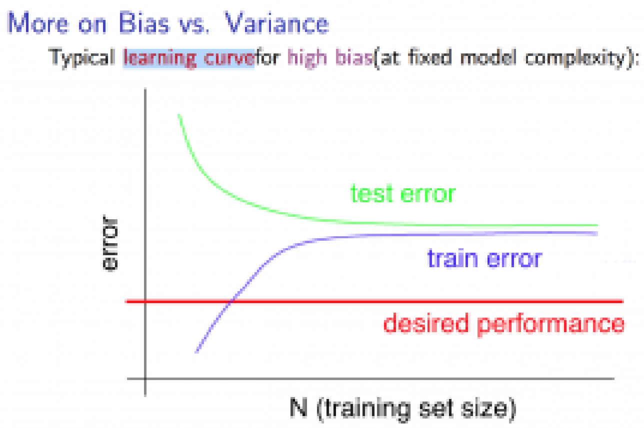


Figura 21: Representação da curva de aprendizado para o caso de *high bias*

14.2.2 *High Variance*

Em casos de *overfitting* teremos a seguinte situação apresentada na Figura 22

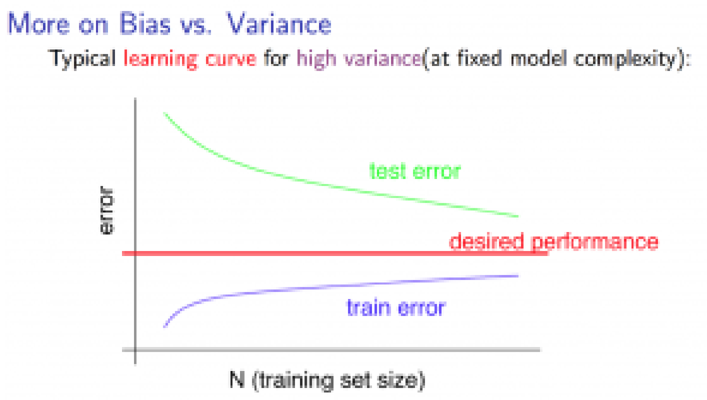


Figura 22: Representação da curva de aprendizado para o caso de *high variance*

14.3 Decisões a serem tomadas

Caso desejamos ajustar o nosso algoritmo de treino da melhor forma possível, podemos dividir a tomada de decisão a repeito de que tipo de ajuste devemos realizar da seguinte forma:

- Aumentar o número de exemplos de treino: ajusta em casos de *high variance*;
- Diminuir o números de parâmetros: ajusta em casos de *high variance*;
- Adicionar parâmetros: ajusta em casos de *high bias*;
- Tentar parâmetros polinomiais: ajusta em casos de *high bias*;
- Diminuir o valor de λ: ajusta em casos de *high bias*;
- Aumentar o valor de λ: ajusta em casos de *high variance*;

14.4 Diagnosticando Redes Neurais

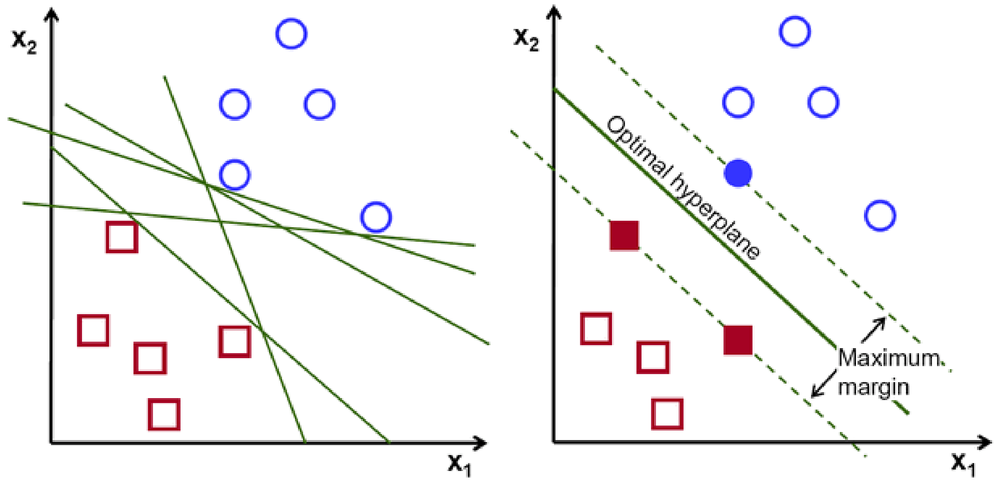
Como foi visto nas seções anteriores, os problemas de *underfitting* e *overfitting* podem acontecer por diversos motivos e discutimos maneiras de podermos solucioná-los.

Em uma rede neural, esses problemas também podem ocorrer. O primeiro caso está relacionado à possibilidade de *underfitting*, e geralmente isso ocorre devido ao fato da baixa quantidade de parâmetros (computacionalmente mais barato). O segundo caso está relacionado com a possibilidade de *overfitting*, e geralmente isso ocorre devido ao fato da grande quantidade de parâmetros (computacionalmente mais caro), porém, neste caso, o problema pode ser facilmente corrigito através de regularização.

14.5 *Support Vector Machines* (SVMs)

Support Vector Machines, ou SVMs, podem ser usadas para tanto para problemas de regressão quanto problemas de classificação. O objetivo principal de uma SVM é encontrar um hiperplano em um espaço N-dimensional, sendo N o número de parâmetros, que classifica de forma distinta cada um dos dados.

Na Figura 23 a seguir, podemos perceber a funcionalidade de uma SVM na busca de um hiperplano ótimo (imagem à direita).



(a) (b)

Figura 23: Exemplificação da utilização de uma SVM para encontrar o hiperplano ótimo que divide duas classes distintas de dados. Na imagem à esquerda temos todos os hiperplanos possíveis que distinguem as duas classes de dados e na imagem à direita temos o hiperplano ótimo que as distinguem.

Nosso objetivo é encontrar um lano que possui a margem máxima, ou seja, que possui a máxima distância entre os pontos de ambas as classes.

Hiperplanos são limites de decisão que ajudam a classificar as classes de dados. Além disso, a dimensão de um hiperplano depende do número de parâmetros.

Com isso, temos a definição de *support vectors*. *Support vectors* são pontos que estão mais próximos ao hiperplano e influenciam a posição e a orientação desse hiperplano. Usando-os, podemos maximizar a margem do classificador

Parte IV

Unsupervised Learning

15 *Clustering*

Clustering é um método de aprendizado não supervisionado. A principal diferença entre *supervised learning* e *unsipervised learning* é que no método não supervisionado não passamos dados previamente classificado, em outras palavras, uma entrada para um algoritmo sem supervisão seria apenas o conjunto de treino $x_1, x_2, ..., x_n$.

As principais aplicações de *clustering* são:

- Segmentação de mercado;
- Análise de redes sociais;
- Organização de *clusters* de computadores (*datacenters*);
- Análise de dados astronômicos.

O primeiro algoritmo de aprendizado não supervisionado que iremos discutir é chamado de *K-Means Algorithm* que será apresnetado na seção seguinte.

15.1 *K-Means Algorithm*

K-Means Algorithm é um dos algoritmos mais populares e são amplamente utilizados a fim de, automaticamente, agrupar dados em subgrupos denominados *clusters*.

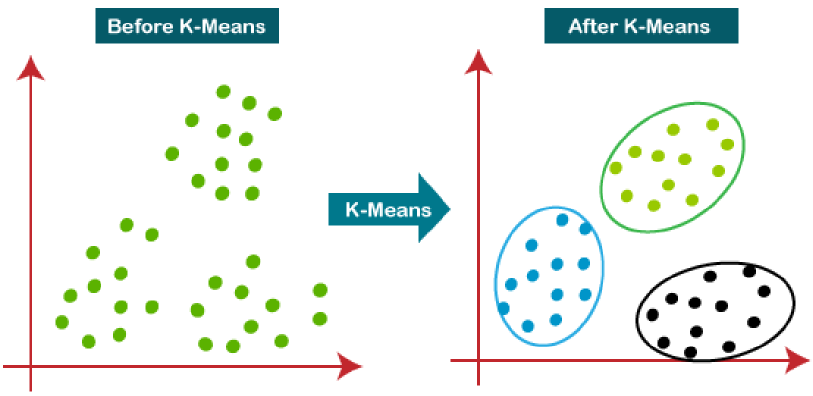


Figura 24: Representação de *clustering* através do algoritmo de *K-Means*. Percebe-se que, com a aplicação do algoritmos os dados passam a formar conjuntos diferentes, na figura, representados pelas cores azul, verde e preto.

Antes de discutir o algoritmo, podemos generalizar o funcionamento desse método de *machine learning*.

1. Randomicamente inicializar dois pontos no conjunto de dados. Esses pontos serão chamados de *cluster centroids*;

2. Atribuição do *cluster*: atribua todos os exemplos em um dos dois grupos baseado em qual *centroid* os exemplos então mais próximos;
3. Mover os *centroids*: computar as médias de todos os pontos dentro de cada um dos dois *centroids*, e mover os *centroids* para os pontos que representam as médias;
4. Executar os passos (2) e (3) até convergir.

Para o algoritmo, teremos as seguintes variáveis principais:

- K: número de *clusters*;
- $x^{(1)}, x^{(2)}, ..., x^{(m)}$: conjunto de treino, onde $x^{(i)} \in \mathbb{R}^n$,

Algorithm 8 Algoritmo *K-Means*

procedure
    Randomicamente inicializar K *cluster centroids* $\mu_1, \mu_2, ..., \mu_K \in \mathbb{R}^n$
    repeat
        for $i = 1$ **to** m **do**
            $c^{(i)}$:= índice (de 1 até K) do *cluster centroid* mais perto de $x^{(i)}$
        end for
        for $k = 1$ **to** K **do**
            μ_k := média dos pontos atribuidos ao cluster k
        end for
    until *convergir*
end procedure

No algoritmo, percebemos que existem dois *loops*. O primeiro, realiza a etapa (2) descrita acima da seguinte forma:

$$c^{(i)} = argmin_k||x^{(i)} - \mu_k||^2 == ||(x_1^i - \mu_{1(k)})^2 + (x_2^i - \mu_{2(k)})^2 + ...||$$

No segundo *loop* realiza a etapa (3) e pode ser descrita da seguinte forma:

$$\mu_k = \frac{1}{n}[x^{(k_1)} + x^{(k_2)} + ... + x^{(k_n)}]$$

Onde cada valor de $x^{(k_1)}, x^{(k_2)}, ..., x^{(k_n)}$ são os exemplos de treino atribuidos por μ_k

Depois de um número de iterações, o algoritmo irá convergir e as posições dos *centroids* não serão mais alteradas.

15.2 Otimização

Através dos parâmetros apresentados na seção anterior, podemos definir a função custo.

$$J(c^{(i)}, ..., c^{(m)}, \mu_1, ..., \mu_k) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}||x^{(i)} - \mu_{(c^{(i)})}||^2$$

Nosso objetivo de otimização é minimizar todos o parâmetros da função custo descrita acima, em outras palavras, desejamos

$$min_{c,\mu}J(c, \mu)$$

15.3 Inicialização

Um método recomendado para o algoritmo $K-Means$ é inicializar aleatoriamente os *cluster centroids*. Para isso, devemos considerar os seguintes requisitos:

- $K < m$: O número de *clusters* deve ser menor que o número de exemplos de treino;
- Aleatoriamente escolher K exemplos de treinos;
- Definir $\mu_1, ..., \mu_K$ serem iguais aos K exemplos.

Para escolher o número de *clusters*, usa-se um método chamado *elbow method*, o qual se analisa a curva da função custo J e o número de *clusters* K. A função custo deve decrescer de acordo com o aumento do número de *clusters* até tender a zero. Escolhemos um valor para K no ponto em que a função custo começa a se estabilizar.

Uma outra forma de escolher o número de *clusters* é de acordo com o objetivo que desejamos atingir com o uso deles.

16 Redução de dimensionalidade

16.1 Compressão de dados

Em um conjunto de dados, muitas vezes podemos ter diversos dados redundantes e, para isso, devemos reduzir a quantidade desses dados a fim de facilitar a compreensão do conjunto o qual estamos trabalhando.

Assim, nós selecionamos dados que estão correlacionados e os colocamos em uma única linha que possa descrever o comportamento de ambos. Com redução de dimensionalidade, podemos reduzir o total de dados guardados aumentando a memória disponível e, muitas vezes, acelerando o processamento do algoritmo de aprendizagem.

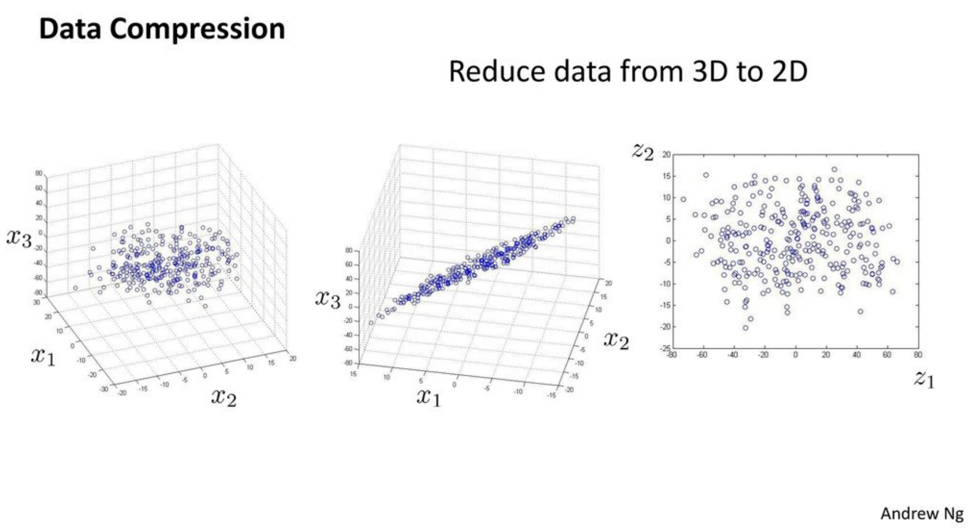


Figura 25: Representação de uma compressão de dados. Na figura, percebe-se que houve a redução na dimensionalidade dos dados. Os dados previamente em três dimensões foram convertidos para duas dimensões. Essa conversão se dá através de um algoritmo que será apresentado nas seções seguintes chamado PCA.

16.2 Visualização

Quando realizamos redução de dimensionalidade dos dados, desejamos visualizá-los em duas ou, no máximo, três dimensões. Para isso, precisamos encontrar novos valores z_1, z_2 (ou z_3) para que possamos resumir esses dados efetivamente em menos dimensões.

16.3 Análise do componente principal (PCA)

O algoritmo de análise do componente proncipal (do inglês, *Principal Component Analysis Algorithm* (PCA)) é um algoritmo de redução de dimensionalidade de dados. Como está representado na Figura 25, o algoritmo busca comprimir os dados relacionando cada um dos dados em uma só semelhança, em outras palavras, busca reduzir a média de todas as distâncias de cada um dos valores em relação a linha projetada. Essa redução é chamada de erro de projeção.

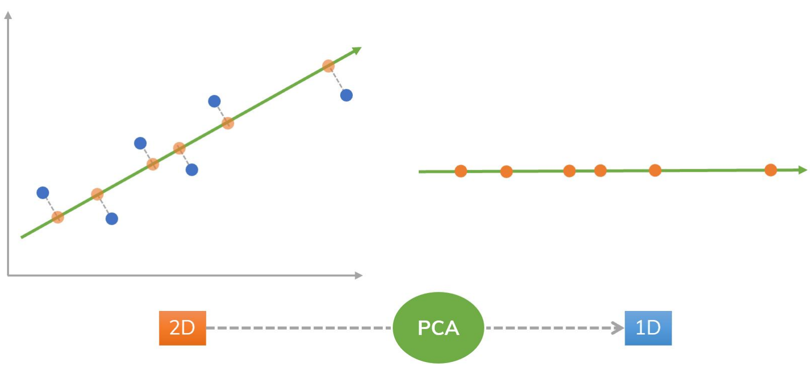


Figura 26: Representação da aplicação do algoritmo de PCA. Percebe-se que o algoritmo busca encontrar uma relação entre os pontos e fim de projetar os dados sobre essa relaçao. Na figura, os pontos em azuis são relacionados e projetados sobre a reta em verde, gerando os pontos em laranja sobre a reta.

17 Aprendizado por reforço (*Reinforcement learning*)

17.1 Visão geral

Nesta seção será apresentado mais um método de aprendizado de máquina chamado aprendizado por reforço (do inglês, *Reinforcement Learning* (RL)). RL ensina um agente a como escolher uma ação que faça sentido de acordo com o ambiente que ele esteja inserido (e.g. escolher uma movimentação de peça adequada em um jogo de tabuleiro) a fim de maximizar a recompesa que esse agente recebe ao longo do tempo.

Para isso, precisamos definir alguns elementos essenciais para a implementação de um algoritmo de RL (representado na Figura 27).

- Agente: o que o programa esta exatamente treinando a fim de realizar alguma tarefa específica;
- Ambiente: o mundo, real ou virtual, no qual o agente realiza as suas ações;
- Ação: um movimento realizado pelo agente. Essa movimentação muda o estado do ambiente;
- Recompensa: a valoração de uma ação realizada pelo agente. Essa valoração pode ser positiva ou negativa.

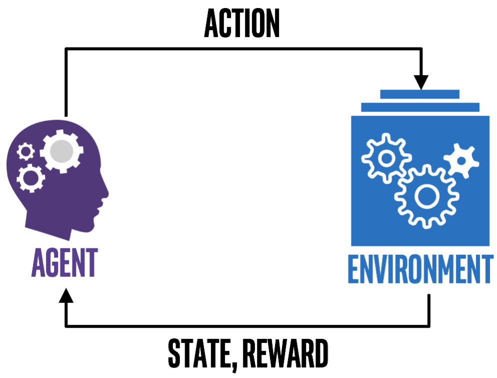


Figura 27: Representação de um esquema básico de um algoritmo de RL. Percebe-se que o agente através de ações realizadas sobre um ambiente determinado atualiza o estado do ambiente e recebe recompensas (positivas ou negativas) de acordo com a ação realizada.

Com essa definições, percebe-se que o processo de aprendizado do agente se dá por meio de tomada de decisões baseadas no ambiente e nas recompensas. Na próxima seção será apresentada as ideias fundamentais de exploração do ambiente em RL.

17.2 *Exploration* e *Exploitation*

Quando o agente realiza explorações no ambiente a fim de conhecer o território no qual ele está inserido, ele realiza dois tipos de ações que são determinantes para o seu aprendizado: *exploration* e *exploitation*.

Apesar de parecerem redundantes, os dois termos possuem uma grande diferença. Quando o agente toma decisões baseadas em *exploration*, o agente toma decisões puramente aleatórias, com o intuito de encontrar melhores ações para o estado no qual ele se encontra. Isso é importante para possibilitar ao agente descoberta de novas estratégias, podendo, assim, expandir o seu leque de opções de ações. Em *exploitation* o agente toma decisões baseadas em valorações que foram previamente estabelecidas de estados previamente alcançados. Isso é importante para maximizar a tomada de decisão do agente, pois ele saberá se determinado estado é "bom" ou "ruim" ao longo da compreensão do ambiente.

17.3 *Markov Process*

Nesta seção iremos discutir o princípio de formação dos métodos que envolvem *Reinforcement Learning*: *Markov process*. Contudo, antes disso, é necessário introduzir alguns conceitos chaves desse processo: a Propriedade de Markov e a Cadeia de Markov.

17.3.1 Propriedade de Markov

Na teoria das probabilidades e estatística, o termo "propriedade de Markov" se refere à propriedade sem memória de um processo estocástico, em outras palavras, em um processo aleatoriamente determinado.

Para o melhor entendimento da Propriedade de Markov, podemos descrevê-la da seguinte forma:

$$P(X(t+1)=j|X(0)=i_0,X(1)=i_1,...,X(t)=i)=P(X(t+1)=j|X(t)=i)$$

A equação acima representa uma situação de um estado X no tempo $t+1$ que depende apenas do estado precedente, o estado X no tempo t.

17.3.2 Cadeia de Markov

A Cadeia de Markov é um modelo estocástico que descreve uma sequência de possíveis eventos os quais são dependentes de uma possibilidade de ocorrência. E essa possibilidade só depende do evento prévio a esta ação.

Quando usamos a Propriedade de Markov em um processo aleatório, chamamos esse uso de Cadeia de Markov, podendo ser definida da seguinte forma:

A Cadeia de Markov é uma tupla (S, P) onde:

- S é um conjunto de estados;
- $P(s, s')$ é uma transição de estado cujo peso é a probabilidade. A probabilidade de transição do estado s no tempo t para o estado s' no tempo $t+1$.

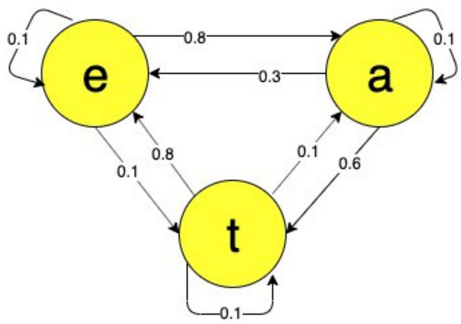


Figura 28: Representação de uma Cadeia de Markov com os estados e, a, t onde cada aresta representa uma transação de estado e seus pesos representam a probabilidade de transição.

17.4 *Markov Decision Processes* (MDPs)

MDP é um dos tópicos mais importantes para o entendimento de RL. MDP é um método que resolve a maioria dos problemas de RL com tomadas de decisões discretas. Com esse método, um agente atinge uma política ótima para receber o maior número de recompensas ao longo do processo de exploração do ambiente.

Como foi apresentado na seção anterior na qual discutimos as definições de Propriedade e Cadeia de Markov, uma Cadeia de Markov trabalha com as trasições entre os estados e as probabilidades de transição relacionadas aos mesmos. MDP difere da Cadeia de Markov pois, agora, os estados não dependem apenas do estado imediatamente posterior, mas sim, de todas as ações que foram executadas a partir do estado atual.

Com isso, o objetivo principal do MDP é treinar um agente a fim de encontrar a melhor política possível acumulando o maior número de recompensas a partir de tomadas de decisões em um ou mais estados. Podemos definir, formalmente MDP da seguinte forma:

MDP é uma 5-upla (S, A, P, R, γ), onde:

- S: conjunto de estados;
- A: conjunto de ações;
- $P(s, a, s')$: probabilidade de uma ação a no estado s levar ao estado s' no tempo $t + 1$;
- $R(s, a, s')$: recompensa recebida imediatamente após a transição do estado s para o s' a partir de uma ação a;
- γ: fator de desconto o qual é usado para gerar uma recompensa relativa. Esse valor está entre 0 e 1 e quantifica a diferença de importância de recompensas imediatas e recompensas futuras.

Em outras palavras, MDP pode ser escrito como

$$\sum_{t=0}^{t=\infty} \gamma^t r(x(t), a(t))$$

17.4.1 Busca pela poítica ótima com MDP

Com MDP podemos fazer com que o nosso agente selecione a decisão ótima para determinado estado de ambiente. Iremos maximizar a recompensa do agente ao longo do tempo a fim de fazer com que ele atinga a política ótima, i.e. determinaremos qual é a melhor ação a ser tomada em cada estado.

Para determinar a melhor ação a ser tomada, iremos usar a equação de Bellman (*Bellman Optimality Equation* [3]) que nos possibilita estimar o valor ótimo para cada estado. A equação estima o valor de um estado computando as recompensas esperadas que cada estado pode gerar.

Abaixo está definida a equação de Bellman recursiva

$$V^*(s) = max_a \sum_{s'} P(s, a, s') \left[R(s, a, s') + \gamma V(s')\right]$$

Onde:

- $P(s, a, s')$ é a probabilidade da transição do estado s para o s' a partir da escolha da ação a;
- $R(s, a, s')$ é a recompensa imediata do estado s para o s' quando o agente escolhe a ação a;
- γ é o fator de desconto (recursivo).

17.5 Monte-Carlo e *Temporal-Difference Learning*

Nesta seção serão apresentados dois métodos chaves de aprendizado de máquina atrvés de RL: aprendizado de *Monte-Carlo* (MC) e *Temporal-Difference Learning* (TD).

17.5.1 Valoração de Monte-Carlo

O método de Monte-Carlo faz com que o agente aprenda interagindo com o ambiente e coletando diversas amostras. Essa coleção de amostras estão relacionadas as distribuições de probabilidades mencionadas $R(s, a, s')$ e $R(s, a, s')$.

Entretanto, Valoração de MC é uma forma de aprendizado baseado em testes, em outras palavras, um MDP sem a tupla P pode aprender por tentativa e erro, por meio de muitas repetições.

Nesse cenário, cada "tentativa" é chamado de episódio, e ele termina quando o estado final do MDP é atingido. No final, todos os valores de recompensa são atualizados na recompensa G_t, final de cada estado. Abaixo está representada a equação de Monte-Carlo que atualiza o valor de cada estado.

$$V(S_t) \leftarrow V(S_t) + \alpha \left[G_t - V(S_t)\right]$$

Onde:

- $V(S_t)$ é o valor do estado que desejamos estimar. Esse valor pode ser inicializado aleatoriamente ou baseado em alguma estratégia;
- G_t pode ser calculado da seguinte forma, onde T é o tempo de terminação:

$$G_t = R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \gamma^2 R_{t+3} + ... + \gamma^{T-1} R_T$$

- α é um parâmetro que influencia a convergência.

Sendo assim, temos diversas formas de atualizarmos os valores dos estados do amabiente. Essas atualizações são significantes para determinar a política do agente e otimizar a escolha da ação. Essas formas estão relacionadas ao momento de visita de cada estado, ou seja, como devemos atualizar o valor de um estado na primeira visita e em cada vez que atingimos o mesmo estado.

17.5.2 TD *Learning*

Como vimos na seção anterior, o método de Monte-Carlo exige que nós esperamos até o fim do episódio para determinar o valor do estado $V(S_t)$. No método de *Temporal-Difference*, esperamos até o próximo passo a ser tomado. Em outras palavras, no tempo $t+1$, o método TD utilizado da recompensa observada R_{t+1} e, imediatamente, gera um valor, chamado *TD target* $R(t+1)+V(S_{t+1})$, atualizando o valor do estado $V(S_t)$ através do erro, chamado *TD error* $R(t+1)+V(S_{t+1})-V(S_t)$.

Com isso, podemos definir a equação $TD(\lambda)$ na qual substituímos o valor de *TD target* por G_t da seguinte forma:

$$V(S_t) \leftarrow V(S_t) + \alpha \left[G_t^{(\lambda)} - V(S_t)\right]$$

Onde:

$$G_t^{(\lambda)} = (1-\lambda) \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^{n-1} G_t^{(n)}$$

Assim, com essas duas equações, Monte-Carlo(MC) e *Temporal-Difference*(TD) podemos definir um método de aprendizado por reforço que é uma combinação das duas, chamado de $Q - Learning$.

17.6 *Q-Learning*

Q-Learning é uma combinação entre os métodos de MC e TD vistos na seção anteriores. Nesse método, a cada passo, tomamos uma decisão gananciosa que tem como objetivo maximizar o valor da variável $Q(S_{t+1}, a)$, como está representado abaixo:

$$\boxed{Q(S_t, a) \leftarrow Q(S_t, a) + \alpha \left[R_{t+1} + \gamma max_a Q(S_{t+1}, a) - Q(S_t, a)\right]}$$

Para a implementação desse método, precisamos de dois faotres princiais: a atualização do valor de Q - chamado de *Q-value* e um lugar para salvar esses valores, chamado de *Q-table*.

Em *Q-learning*, a cada pasos tomamos a melhor decisão possível para o agente, ou seja, a decisão que terá o melhor impacto na atualização de *Q-value*. Esse tipo de tomada de decisão se chama ϵ-*greedy-policy*, onde ϵ é o grau de ganância do nosso agente, em outras palavras, quanto mais alto o seu valor, maior a quantidade de ações realizadas aleatoriamente.

No início da exploração, o agente toma decisçoes puramente aleatórias a fim de conhecer o ambiente no qual ele está inserido. E a cada tomada de decisão, atualiza-se o valor de cada estado *Q-value* na tabela *Q-table*. Portanto, é comum começar a exploração com um valor alto de ϵ, como, por exemplo, igual a 1, a fim de fazer com que o agente tome decisões 100% aleatórias.

Ao longo da exploração, o agente começa a conhecer melhor o ambiente, então podemos diminuir o valor de ϵ gradativamente ao longo do treino.

Contudo, a utilização desse tipo de implementação não é escalável, ou seja, para modelos extremamente complexos, é extremamente ioneficiente a valoração dos estados e a busca pela poítica ótima. Para resolver esse tipo de problema, métodos derivados foram desenvolvidos utilizando redes neurais e o principal deles se chama *Deep Q-Learning* que será discutido na Seção 24.

Parte V

Otimizações no Aprendizado

18 Detecção de anomalias

18.1 Motivação

Suponha que tenhamos um conjunto de dados de treino $x^{(1)}, x^{(2)}, ..., x^{(m)}$. E dado um novo exemplo de treino x_{test} queremos saber se esse dado pode ser considerado anormal ou anômalo.

Para isso, nós definimos uma espécie de "modelo" $p(x)$ que nos diz a probabilidade do exemplo não ser anômalo. Usamos, também uma *flag* ϵ (epsilon) que serve como uma divisão no nosso conjunto de dados que diferencia os dados anômalos e não anômalos.

Uma aplicação comum de detecção de anomalias é a detecção de fraudes:

- $x^{(i)}$ = dados das atividades do usuário i
- Modelo $p(x)$ dos dados
- Identifica usuários não usuais checando se $p(x) < \epsilon$

Assim, caso o exemplo $x^{(i)}$ seja considerado anômalo, o valor de $p(x) < \epsilon$, caso contrário $p(x) \geq \epsilon$.

Caso o detector de anomalias esteja detectando muitos exemplos anômalos, devemos diminuir o valor da *flag* ϵ.

18.2 Distribuição Gaussiana

A Distribuição Gaussiana, ou Distribuição Normal, é uma forma de distribuição uniforme em formato de sino que pode ser descrita através de uma função $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$. Onde, dado um valor x, $x \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$, representa a probabilidade na distribuição de x, com média μ e variância σ^2.

A Distribuição Gaussia, então, é parametrizada pela média e pela variância do conjunto de dados (Figura 29).

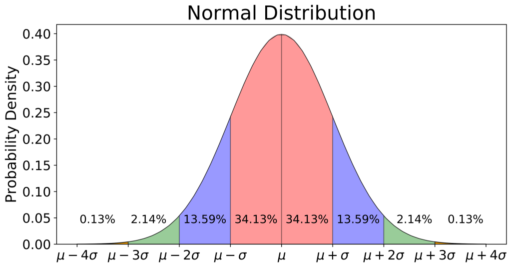
Além disso, μ representa o centro da curva (média) e a largura da distribuição é descrita por σ (desvio padrão).

A função da Distribuição Gaussiana é definida da seguinte forma:

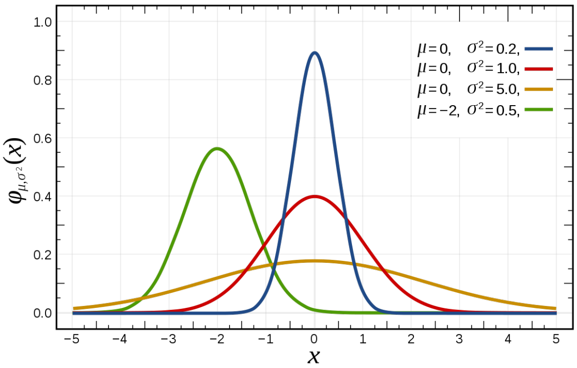
$$\boxed{p(x; \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sigma\sqrt{(2\pi)}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{x-\mu}{\sigma})^2}}$$

Podemos estimar o parâmetro μ de um dado conjunto de dados apenas calculando a média do todos os exemplos:

$$\boxed{\mu = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x^i}$$



(a) Representação da Distribuição Gaussiana. O eixo x representa os valores dos exemplos de acordo com a média e com a variância e o eixo y representa a densidade de probabilidade o exemplo.



(b) Representação de diferentes estruturas distribuições gaussianas de acordoc om os valores dos parâmtros μ e σ^2. Podemos perceber o efeito da alteração desses parâmetros nas estruturas das curvas.

Figura 29

Da mesma forma, podemos estimar o parâmetro σ^2 através da fórmula de erro quadrático a qual já estamos familiarizados.

$$\boxed{\sigma^2 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x^i - \mu)^2}$$

18.3 Algoritmo

Dado um conjunto de exemplos de treino $\{x^{(1)}, x^{(2)}, ..., x^{(m)}\}$ onde cada exemplo é um vetor $x \in \mathbb{R}^n$.

$$p(x) = p(x_1; \mu_1, \sigma_1^2)p(x_2; \mu_2, \sigma_2^2)...p(x_n; \mu_n, \sigma_n^2)$$

Isso é chamado, na estatística de suposição de independência dos dados dentro do exemplo de treino x.

De outra forma, podemos escrever a expressão acima em forma de produtório, como segue:

$$p(x) = \prod_{j=1}^{n} p(x_j; \mu_j, \sigma_j^2)$$

Com isso, podemos definir o algoritmo de detecção de anomalias através desses valores de probabilidade.

1. Escolher os valores x_i que possam ser indicativos de exemplos de anomalia
2. Ajustar os parâmetros $\mu_1, \mu_2, ..., \mu_n, \sigma_1^2, \sigma_2^2, ..., \sigma_n^2$
3. Calcular $\mu_j = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x_j^{(i)}$
4. Calcular $\sigma^2 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x_j^i - \mu_j)^2$
5. Dado um novo exemplo x, calcular $p(x) = \prod_{j=1}^{n} p(x_j; \mu_j, \sigma_j^2) = \prod_{j=1}^{n} \frac{1}{\sigma_j\sqrt{(2\pi)}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{x_j - \mu_j}{\sigma_j})^2}$
6. Caso o valor de $p(x)$ seja menor que ϵ, então o exemplo x é uma anomalia.

19 Aprendizado em larga escala

Na maioria das vezes, trabalhar com um grande conjunto de dados é muito melhor para qualquer tipo de problema que envolva aprendizado de máquina. Por isso, muitas vezes, iremos trabalhar com conjuntos de dados de tamanhos como $m = 100.000.000$ e, neste caso, o algoritmo de gradiente descendente terá que realizar operações com todos os 100 milhões de dados - o que torna esse método extremamente ineficiente e complexo. Queremos evitar tentar evitar isso criando algoritmos mais otimizados que serão descritos e detalhados nas seções seguintes.

19.1 *Batch Normalization*

Quando falarmos em normalização, estamos nos referindo à compactação de uma gama diversa de números em uma gama fixa, como foi visto, por exemplo, na Seção 18.2 quando falamos de Distribuição Normal.

Por exemplo, quando temos entradas com uma variância muito alta, desejamos normalizar esses valores a fim de gerarmos uma distribuição mais simples de trabalhar, colocando os valores em um mesmo alcance. Isso se chama, *input normalization*.

Redes neurais profundas, geralmente possuem uma sequência de camadas que, muitas vezes, somam milhares de neurônios. De camada a camada, esses valores podem se distinguir através das sequencias operações, dificultando que as camadas da rede neural consigam fazer o trabalho de manter esses valores bem distribuídos e estáveis.

Outro problema é quando a escala de diferentes parâmetros da rede neural estão vinculados às atualizações do gradiente, o que pode levar ao problema de explosão e desaparecimento dos gradientes. Esses problemas estão relacionados, respectivamente ao crescimento descontrolado e infinito dos valores do, ou à queda descontrolada tendendo à zero dos valores do gradiente.

Geralmente, para evitar esse tipo de problema, desejamos desacoplar a escala dos parâmetros da rede neural das atualizações do gradiente e, para isso, podemos usar funções de ativação mais robustas e estáveis, como por exemplo, ReLU (Seção 13.1.5), escolhendo taxas de aprendizado ótimas e inicializando os parâmetros das redes neurais cuidadosamente. Todavia, quanto mais tarefas adicionamos, aumentamos a complexidade da rede neural, o que, muitas vezes, pode ser um problema.

Para solucionar esses problemas, utilizamos um método chamado *Batch Normalization*. Esse método tem como objetivo evitar gradientes instáveis, reduzir os efeitos da inicialização da rede neural na convergência do algoritmo de otimização e possibilitar o uso de taxas de aprendizado mais rápidas para acelerar a convergência do algoritmo de otimização do gradiente.

Para isso, devemos normalizar cada camada intermediária da rede neural de acordo com as entradas de cada camada, calculando a média e o desvio padrão de cada uma delas.

Assim, podemos, finalmente descrever o algoritmo de normalização *Batch Normalization*.

No algoritmo acima, as primeiras três equações calculam a média e o desvio padrão e depois normalizam as entradas, respectivamente. O valor de ϵ é um número que ajuda na estabilidade numérica,

Algorithm 9 Algoritmo *Batch Normalization* (BN)

1: **procedure** (Valores de x sobre um *mini-batch*: $\mathcal{B} = \{x_1, ..., m\}$,
Parâmetros a serem aprendidos: γ, β)

2: $\mu_{\mathcal{B}} \leftarrow \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} x_i$ ▷ Média *mini-batch*

3: $\sigma^2_{\mathcal{B}} \leftarrow \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (x_i - \mu_{\mathcal{B}})^2$ ▷ Variância *mini-batch*

4: $\widehat{x}_i \leftarrow \frac{x_i - \mu_{\mathcal{B}}}{\sqrt{\sigma^2_{\mathcal{B}} + \epsilon}}$ ▷ Normalização

5: $y_i = \gamma \widehat{x}_i + \beta \equiv BN_{\gamma,\beta}(x_i)$ ▷ Escala e *shift*

6: **end procedure**

evitando que seja efetuada uma divisão por zero. A principal característica desse algoritmo é que a notmalização acontece para cada um dos inputs no *batch* separadamente.

Na última equação, temos dois novos parâmetros, γ e β, que representam respectivamente o *scaling* e o *shift* dos valores. Isso limita o alcance dos valores, facilitando com que a próxima camada trabalhe com eles de forma mais simples. Esses valores são aprendidos pela rede neural e, assim, podemos ajustar esses valores de acordo com a distribuição.

19.2 *Stochastic Gradient Descent* (SGD)

SGD é uma alternativa mais eficiente e escalável ao método clássico de otimização gradiente descendente.

SGD pode ser escrito de maneira muito similar ao método de gradiente descendente clássico.

$$cost(\theta, (x^{(i)}, y^{(i)})) = \frac{1}{2}(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})^2$$

A equação acima, analisa cada exemplo de treino individualmente antes de calcular o valor da função custo.

Com isso, podemos definir a função custo da seguinte forma:

$$J_{train}(\theta) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} cost(\theta, (x^{(i)}, y^{(i)}))$$

J_{train}, agora, é apenas a média dos custos aplicado a todos os exemplos de treino.

Podemos visualizar na Figura 30 as diferenças entre as etapas de aprendizado entre o método clássico do gradiente descendente e o método estocástico. Percebemos, que SGD é mais "barulhento" em relação ao método clássico, porém, como não precisamos calcular as derivadas para cada um dos m exemplos de treino por iteração, o SGD acaba sendo mais eficiente.

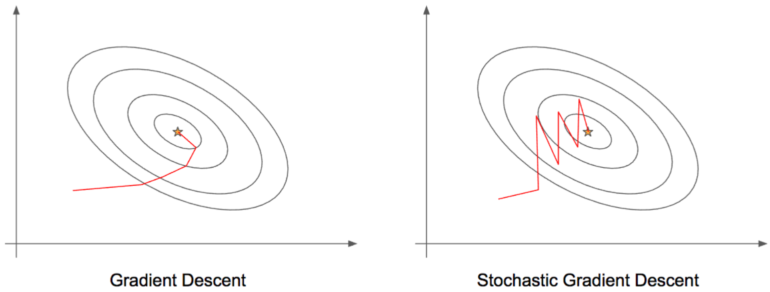


Figura 30

O algoritmo de SGD é muito similar ao algoritmo clássico, iremos atualizar os parâmetros Θ_j ao longo do aprendizado de acordo com a função custo, como segue:

Algorithm 10 Algoritmo *Stochastic Gradient Descent* (SGD)

1: **procedure**
2: Aleatoriamente,"misturar" o conjunto de dados
3: **for** $i = 1$ **to** m **do**
4: $\theta_j := \theta_j - \alpha(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}) \cdot x_j^{(i)}$
5: **end for**
6: **end procedure**

Esse algoritmo, diferentemente do método clássico, ajustará um exemplo de treino por vez. Com isso, podemos prosseguir com o algoritmo de gradiente descendente, sem, necessariamente examinar todos os m exemplos de treino antes.

Um dos problemas desse algoritmo é que, muitas vezes, ele não convergirá para o mínimo global do problema e, ao invés disso, irá vagar aleatoriamente ao redor desse mínimo, porém, na maioria das vezes, produz um retorno muito próximo ao esperado. Normalmente, o SGD varre o conjunto de dados entre uma ou dez vezes antes de chegar próximo ao mínimo global. Como podemos perceber na Figura 31, o SGD pode acabar travado em um mínimo local e isso resulta em dificuldade em otimizar ao máximo a função custo, pois o algoritmo não irá convergir para o mínimo global.

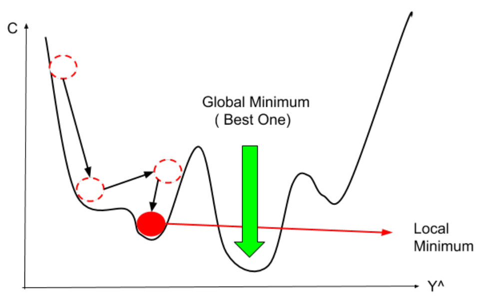


Figura 31: Representação da dificuldade de convergência do algoritmo SGD. Percebe-se que a minimização da função custo atinge um mínimo local devido às "voltas" que o algoritmo dá ao redor do mínimo global.

Podemos evitar esse tipo de problema incentivando a convergência do algoritmo. Para isso, podemos escolher valores de α diferentes a cada iteração, diminuindo o seu valor.

Com uma taxa de aprendizado menor, o algoritmo irá oscilar de maneira mais suave, sem grandes pulos em torno do mínimo global. Dessa forma, uma estratégia seria diminuir o valor de α a cada iteração, como segue:

$$\alpha = \frac{const1}{iterationNumber + const2}$$

Todavia, esse método não é muito utilizado devido a quantidade extra de parâmetros que devem ser ajustados.

19.3 *Mini-batch Gradient Descent*

Mini-batch Gradient Descent muitas vezes, pode ser mais eficiente que o SGD. Ao invés de usarmos todos os m exemplos de treino, como no método clássico, ou apenas um exemplo no SGD, usaremos algo entre essas duas opções. Selecionaremos b exemplos de treino. O valor de b, geralmente está entre 2-100.

Na figura a seguir, podemos verificar as diferenças entre o SGD e o *Mini-batch Gradient Descent*. Na imagem, percebe-se que o método *Mini-batch* converge mais rapidamente, principalente devido ao fato de processar os dados em *batches* de forma vetorizada.

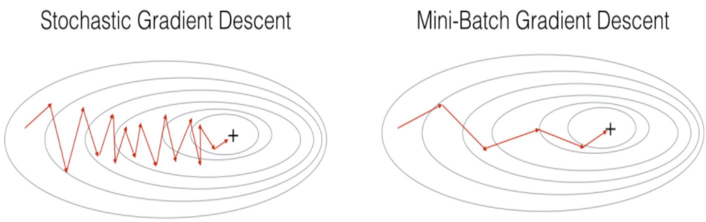


Figura 32

Por exemplo, se $b = 10$ e $m = 1000$, teremos o seguinte algoritmo:

Algorithm 11 Algoritmo *Mini-batch Gradient Descent*

procedure
    Aleatoriamente,"misturar" o conjunto de dados
    for $i = 1, 11, 21, 31..., 991$ **do**
        $\theta_j := \theta_j - \alpha \frac{1}{10} \sum_{k=i}^{i+9} (h_\theta(x^{(k)}) - y^{(k)}) \cdot x_j^{(k)}$
    end for
end procedure

Nesse algoritmo, estamos simplesmente somando dez exemplos por vez. A principal vantagem em computar mais de um exemplo por vez (em *batches*) é que podemos usar implementações vetorizadas sobre os exemplos em b.

19.4 SGD + *Momentum*

Como foi explicado, um dos problemas do SGD é que muitas vezes, o algoritmo pode ficar "preso" em um mínimo local próximo do global e não convergir de forma adequada para o nosso problema.

Para isso, uma forma de otimização foi utilizar *momentum* a fim de incentivar a convergência.

Uma boa definição para o *momentum* é que é uma média móvel dos nossos movimentos, ous seja, como determinado corpo se comporta em determinado terreno de acordo com a velocidade e a aceleração proporcionada pelo mesmo. Dessa forma, a cada etapa do processo de otimização da função custo, tetermos vetores que representam o *momentum* do ponto em determinada parte do "terreno" da função custo, e esses vetores proporcionarão uma velocidade maior de convergência na direção a qual ele está apontando.

Podemos diferenciar os dois modelos de otimização da forma que segue:

Tabela 4: Comparação entre os métodos *Gradient Descent* e *Normal Equation*

SGD	SGD + Momentum
$x_{t+1} = x_t - \alpha\nabla f(x_t)$	$v_{t+1} = \rho v_t + \nabla f(x_t)$
	$x_{t+1} = x_t - \alpha v_{t+1}$

Onde x_i representa os parâmetros a serem atualizados, v_i representa o *momentum* do ponto em determinada parte, $\nabla f(x_i)$ representa o gradiente da função custo e ρ representa o atrito do ponto em determinada parte (geralmente esse parâmetro é definido como 0.9 ou 0.99).

19.5 Nesterov *Momentum*

Nesse método de otimização da função custo, primeiros olhamos para o onde o o vetor atual *momentum* está apontando para, com ele, calcularmos o gradiente partindo desse ponto, como podemos verificar na Figura 33.

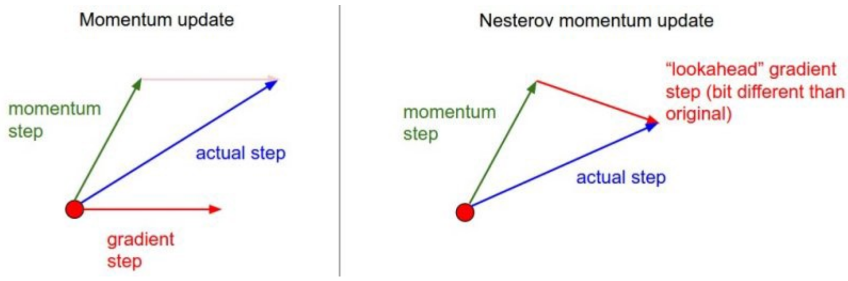


Figura 33: Representação da atualização dos vetores *moimentum* utilizando o método de Nesterov. Na imagem à esquerda, verificamos a atualização do vetor *momentum* a partir de um determinado ponto. Na figura à direitam verificamos a atualização do vetor *momentum* atrvés do método de Nesterov, a partir do ponto onde o vetor está apontando.

Nesterov *momentum* pode ser definido da seguinte forma:

Seja $\widetilde{x}_t = x_t + \rho v_t$

$$v_{t+1} = \rho v_t - \alpha\nabla f(\widetilde{x}_t)$$

$$\widetilde{x}_{t+1} = \widetilde{x}_t - \rho v_t + (1+\rho)v_{t+1}$$

$$= \widetilde{x}_t - \rho v_{t+1} + \rho(v_{t+1} - v_t)$$

Assim, com a aplicação do método de Nesterov *Momentum*, o algoritmo de otimização da função converge muito mais rapidamente, evitando o problema de aproximação ruim da convergência no SGD.

19.6 AdaGrad

Outro método de otimização é chamado de *Adaptive Gradient Algorithm* (Adagrad). Esse método adapta a taxa de aprendizado aos parâmetros, realizando atualizações menores nos parâmetros, diminuindo o "barulho" das atualizações.

Como não precisamos definir uma taxa de aprendizado α, a convergência é mais rápida e confiável. O método adapta as atualizações e a taxa de aprendizado automaticamente de acordo com os níveis da superfície, impossibilitando que as atualizações sejam muito oscilativas em superfícies mais instáveis.

Essa atualização, ocorre da seguinte forma:

$$\theta_{t+1,i} = \theta_{t,i} - \frac{\eta}{\sqrt{G_{t,ii} + \epsilon}} \cdot g_{t,i}$$

Atualizamos os parâmetros θ, multiplicando a taxa de aprendizado η pelo gradiente do ponto, e dividimos esse valor pela raiz quadrada dos somatórios dos quadrados dos gradientes para cada iteração t. Além disso, $\epsilon \cong 10^{-7}$.

19.7 Adam

Adaptative Moment Estimation (Adam) é outro método de otimização que computa taxas de aprendizado adaptativas para cada parâmetro, assim como AdaGrad. Adam, decai a média dos antigos valores dos gradientes m_t exponencialmente, similar ao *momentum*.

Enquanto *momentum*, nós podemos pensar em uma bola descendo uma curva em direção ao ponto mínimo, Adam se comporta como se fosse uma bolsa pesada com atrito descendo essa superfície. Essa forma de minimização faz com que o erro de minização seja o menor possível, ao mesmo tempo que o tempo de convergência seja pequeno.

A intuição da implementação do Adam é dividida em três etapas: *momentum*, correção de *bias* e AdaGrad.

Na primeira etapa - *momentum* - computamos as médias vetores *momentum* passados m_t e, na terceira etapa, os quadrados dos gradientes passados v_t, respectivamente, como segue:

$$m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) g_t$$

$$v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2) g_t^2$$

Onde m_t e v_t são, respectivamente, o *momentum* acumulado e o gradiente acumulado até um período t.

Como, m_t e v_t são previamente, inicializados com 0's, foi observado que essas atualizações, principalmente nas etapas iniciais, tendem à zero e, especialmente quando a taxa de decaimento é baixa (ou seja, quando β_1 e β_2 estão próximos de 1).

Para isso, na segunda etapa neutralizamos essas tendências não previstas através de *bias-correction*. Para isso utilizamos dos valores de m_t e v_t e os atualizamos da seguinte forma:

$$\widehat{m}_t = \frac{m_t}{1 - \beta_1^t}$$

$$\widehat{v}_t = \frac{v_t}{1 - \beta_2^t}$$

Só basta calcular as atualizações dos parâmetros θ utilizando, por exemplo AdaGrad.

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{\sqrt{\widehat{v}_t} + \epsilon}\widehat{m}_t$$

Com isso, a otimização funcionaria corretamente com os parâmetros propostos para $\beta_1 = 0.9$ e $\beta_2 = 0.999$ e taxa de aprendizado $\eta = 10^{-3}$ ou $5x10^{-4}$

Na figura abaixo, podemos perceber as diferenças entre os modelos de otimizações discutidos. Adam combina cada um dos modelos vistos anteriores a fim de otimizar a função custo.

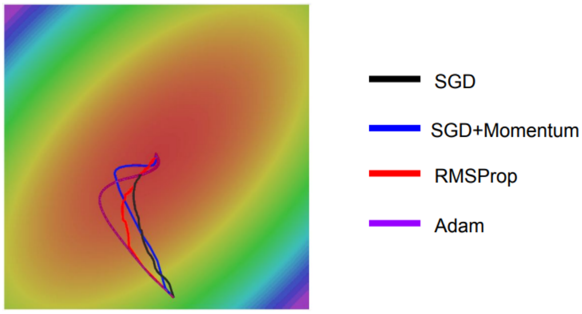


Figura 34: Comparação entre os modelos de otimização vistos. Percebe-se que Adam combinas os diferentes métodos.

19.8 *Mapreduce* e Paralelismo de Dados

Muitas vezes, iremos trabalhar com grandes quantidades de dados e para isso, iremos dividir os o conjunto de dados processado no algoritmo de otimização em subconjuntos para que possamos processar cada um deles em diferentes máquinas e, assim, treinar o nosso algoritmo em paralelo.

Podemos dividir o nosso conjunto de treino em z subconjuntos, onde z corresponde ao número de máquinas que podemos usar em paralelo. Para cada uma dessas máquinas, calculamos

$$\sum_{i=p}^{q} (h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}) \cdot x_j^{(i)}$$

Com isso, *Mapreduce* irá utilizar desses dados mapeados a cada máquina, e "reduzir" eles calculando:

Algorithm 12 Algoritmo *Mapreduce*

```
procedure
    for i = 0 to n do
        θ: = θj − α(1/z)(temp_j^(1) + temp_j^(2) + ... + temp_j^(z))
    end for
end procedure
```

Onde o valor de $temp_j$ representa a função custo calculada em cada uma das máquinas. *Mapreduce* calcula a média, multiplicando pela taxa de aprendizado α e atualizando os valores de θ.

Parte VI

Tópicos avançados

20 Redes neurais convolucionais (*Convolutional neural networks*)

20.1 Visão geral

Redes neurais convolucionais (CNNs ou ConvNets) são muito similares as redes neurais vistas nas Seções 12 e 13. Cada neurônio recebe *inputs* e executam funções lineares e não lineares de uma extremidade a outra da rede neural através da função custo. CNN é uma classe de rede neural artificial do tipo feed-forward, que vem sendo aplicada no processamento e análise de imagens digitais.

A principal diferença entre NNs e CNNs é que, basicamente, uma CNN pode ser pensada como uma rede neural que possui várias cópias do mesmo neurônio. Esse tipo de implementação nos permite trabalhar com modelos computacionalmente grandes enquanto mantém o número de parâmetros atuais.

20.2 Camadas de uma ConvNet

Como foi descrito acima, uma ConvNet é uma sequência de camadas que transforma um volume de ativações em outro através de uma função de diferenciação. Para isso, utilizamos camadas específicas para realizar o treinamento de uma ConvNet, dentre elas: *Convolutional layer*, *Pooling layer* e *Fully-connected layer*. Esta última, exatamente como uma rede neural regular.

A principal diferença entre uma *dense layer* e uma *convolutional layer* é que as camadas densas detectam padrões globais, enquanto camadas convolucionais detectam padrões locais.

Para a melhor compreensão será utilizado um exemplo CIFAR-10 [1] o qual consiste em uma base de dados com 60 mil imagens de tamanho 32x32 separadas em 10 classes. O conjunto de dados é separado em 50 mil para usado para treino e 10 mil para teste.

Uma ConvNet para classificar as imagens de CIFAR-10 tem a seguinte estrutura, detalhada abaixo:

- *Input* [32x32x3]: recebe um vetor dos valores dos *pixels* da imagem. Neste caso a imagem tem largura 32, altura 32 com três canais de cores (RGB);

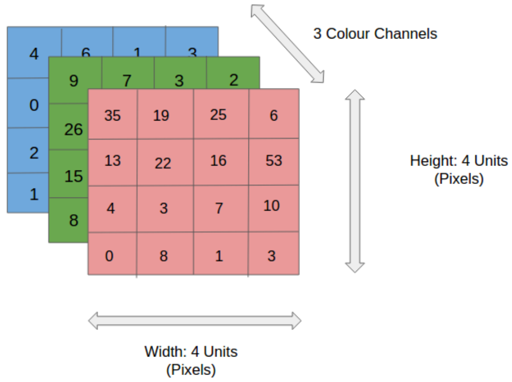


Figura 35: Representação de uma camada de *input* de uma rede neural convolucional. Podemos perceber, que na imagem representada temos uma imagem de tamanho 4x4 com três canais de cores RGB e cada valor de cada pixel corresponde a um valor em cada uma dessas escalas de cores.

- *Conv Layer*: computa a saída dos neurônios que estão conectados a regiões de entrada. Cada um computa um produto escalar entre os pesos e a uma região as quais eles estão conectados no volume de entrada. Isso pode resultar em um volume como [32x32x12] se desejarmos utilizar 12 filtros *kernel*. Este filtro possui um tamanho que varre a imagem através de *strides* - distância entre duas varreduras do filtro - gerando uma nova imagem de mesmo tamanho, porém com esse filtro aplicado;

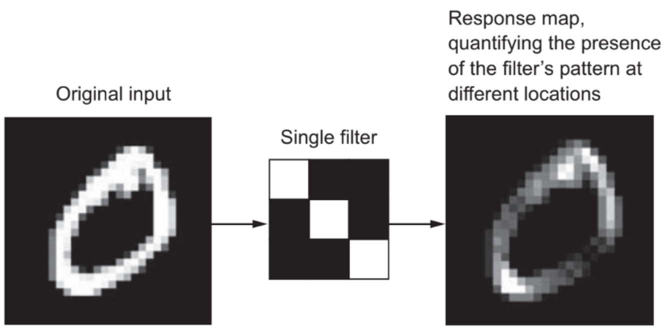


Figura 36: Representação da utilização de um filtro (*kernel*) para mapear os valores da imagem dada como entrada. Percebe-se que o filtro utilizado mantém as bordas da imagem de entrada.

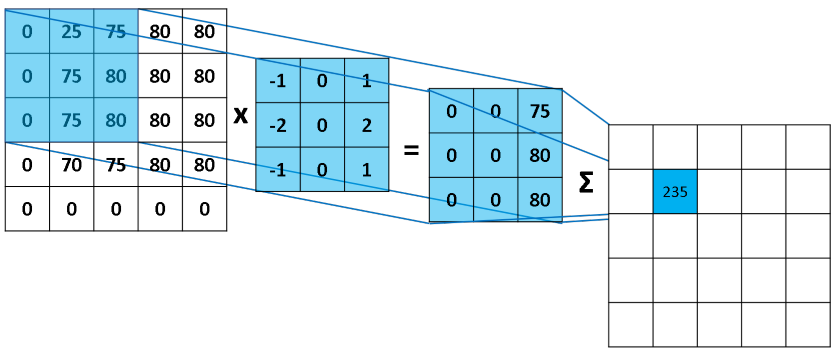


Figura 37: Representação das operações realizadas por um filtro a partir de uma imagem. O filtro (3x3) multiplica os valores da imagem (5x5) pelos seus respectivos valores até gerar uma saída correspondente de tamanho 3x3. Esses valores retornados são somados e adicionados ao respectivo pixel da imagem (5x5) camada seguinte com o filtro aplicado.

- *ReLU Layer*: computa a função de ativação;
- *Pool Layer*: computa uma operação de redução da reolução ao longo das dimensões, resultando em um volume como [16x16x12];

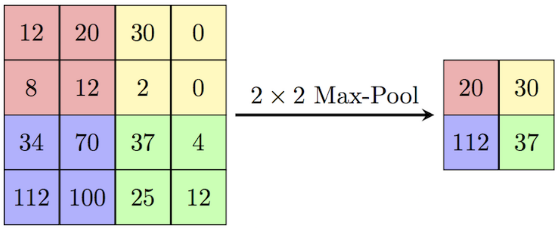


Figura 38: Representação de uma operação de *pooling*. Na figura, utiliza-se o método de *max-pooling* com um filtro de tamanho 2x2 o qual escolhe o maior valor do pixel que se encontra dentro do filtro.

- *FC Layer*: computa as pontuações das classes, resultando em um volume de tamanho [1x1x10], onde cada um dos 10 números representa uma categoria da base de dados CIFAR-10

Abaixo, na Figura 39 está representado, esquematicamente uma ConvNet voltada para a base de dados CIFAR-10. Nela, percebemos as operações que foram realizar ao longo do processamento de convolução e de aprendizado da classificação.

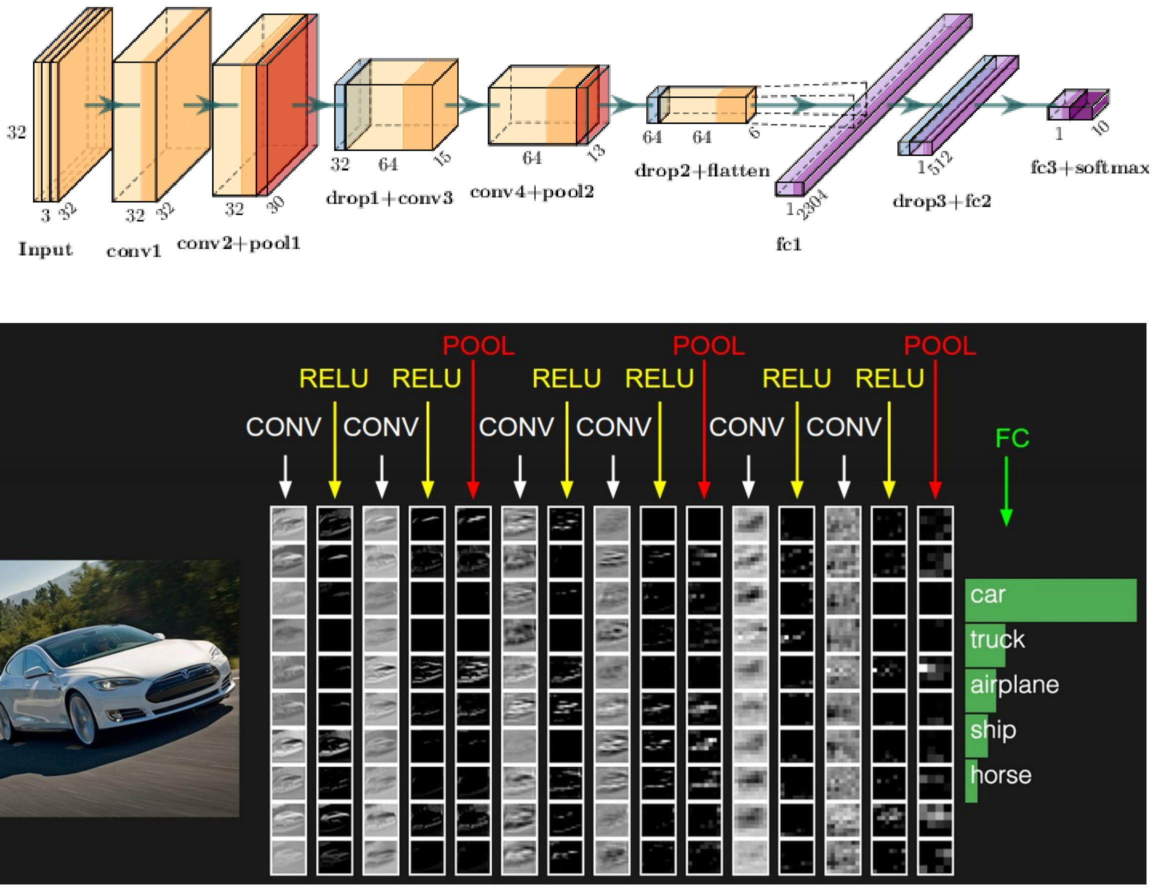


Figura 39: Representação de uma ConvNet para a base de dados CIFAR-10

Além disso, uma camada de convolução de uma ConvNet recebe alguns outros parâmetros que serão descritos a seguir:

- Aceita um volume de tamanho: $W_1 \times H_1 \times D_1$;
- Requer cinco hiperparâmetros:
  1. Número de filtros (*kernels*): K
  2. Tamanho do filtro: F
  3. *Stride* (distância entre duas posições consecutivas do filtro): S
  4. Tamanho da borda (*zero-padding*): P
- Produz um volume de: $W_2 \times H_2 \times D_2$ onde:
  - $W_2 = \frac{(W_1 - F + 2P)}{S+1}$
  - $H_2 = \frac{(H_1 - F + 2P)}{S+1}$
  - $D_2 = K$

Geralmente, uma inicialização comum para esses parâmetros é $F = 3$, $S = 1$ e $P = 1$, porém esses parâmetros podem ser modificados de acordo com a intenção de treino da ConvNet.

Da mesma forma, uma camada de *pooling* de uma ConvNet recebe alguns parâmetros a seguir descritos:

- Aceita um volume de tamanho: $W_1 \times H_1 \times D_1$;
- Requer dois hiperparâmetros:
  1. Tamanho do filtro: F
  2. *Stride*: S
- Produz um volume de: $W_2 \times H_2 \times D_2$ onde:
  - $W_2 = \frac{(W_1 - F)}{S+1}$
  - $H_2 = \frac{(H_1 - F)}{S+1}$
  - $D_2 = D_1$

Assim, percebemos que uma ConvNet é simplesmente uma lista de camadas que transformam um volume de entrada (neste caso uma imagem) e um outro volume de saída (neste caso os valores das classes).

20.3 Técnicas de otimização de treino

Em muitos casos, o conjunto de dados que desejamos utilizar para treinar o nosso modelo não é grande o suficiente para potencializar a acurácia do modelo para casos de teste. Para isso, nesta seção serão apresentadas algumas técnicas de manipulação de dados que possam ser úteis para otimização do treino utilizando milhares de imagens.

20.3.1 *Data Augmentation*

Essa técnia é utlizada para aumentar o tamanho do conjunto de dados e evitar casos de *overfitting*. Essa técnica realiza transformações nas imagens que serão usadas para serem treinadas a fim de potencializar a generalização do modelo. Essas transformações podem ser compressões, rotações, alongamentos e algumas mudanças de cor.

20.3.2 Modelos pré-treinados

Nesta seção, iremos discutir sobre modelos de ConvNets previamente treinados a fim de aumentarmos a acurárcia do nosso modelo. Em outras palavras, iremos utilizar um modelo que foi treinado com milhões de imagens que estão relacionadas com o nosso modelo. Isso nos garante em ter camadas de convolução extremamente eficazes.

Dessa forma, podemos treinar o nosso modelo com um conjunto de dados pequeno, pois a camada de convolução já foi treinada anteriormente com um conjunto de dados muito maior, podendo, portando aumentar a confiabilidade dos resultados de teste do nosso modelo.

20.3.3 *Fine tuning*

Após utilizar um modelo pré-treinado, devemos ajustar as camadas finais para se adaptarem com o nosso modelo. Fazemos isso, pois as camadas inicias conseguem classificar muito bem dados de baixo nível, como bordas, linhas e contornos em uma imagem. Assim, se ajustarmos as camadas finais, podemos procurar apenas recursos relevantes para o nosso problema que está relacionado ao nosso conjunto de treino.

20.4 Detecção e Segmentação

Detecção de objetivos é um problema multi-tarefa que usa algoritmos de classificação e localização a fim de saber qual objeto é e qual a sua localização. Na Figura 40 temos uma representação de uma imagem que os objetos presentes foram classificados e localizados.

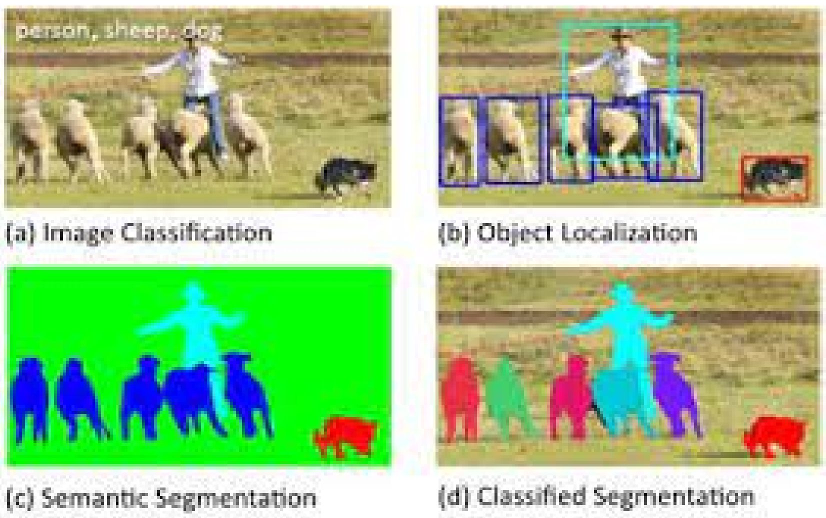


Figura 40: Representação de uma imagem que seus objetov foram devidamente classificados e localizados. Em (a) está representada a classificação da imagem, em (b) a localização dos objetos, em (c) a segmentação semântica da imagem e em (d) a segmentação classificada dos objetos e suas determinadas localizações.

Este tipo de estudo é muito recorrente na área de visão computacional, principalmente usado para a detecção de rostos através de imagens e em carros autônomos através de imagens e vídeos.

20.4.1 Segmentação Semântica

Dada uma imagem, desejamos classificar cada pixel dessa imagem em diferentes categorias. Podemos verificar na Figura 41 que dadas imagens de entradas, classificamos cada pixel em cinco diferentes categorias: céu, árvores, grama, gato ou vaca.

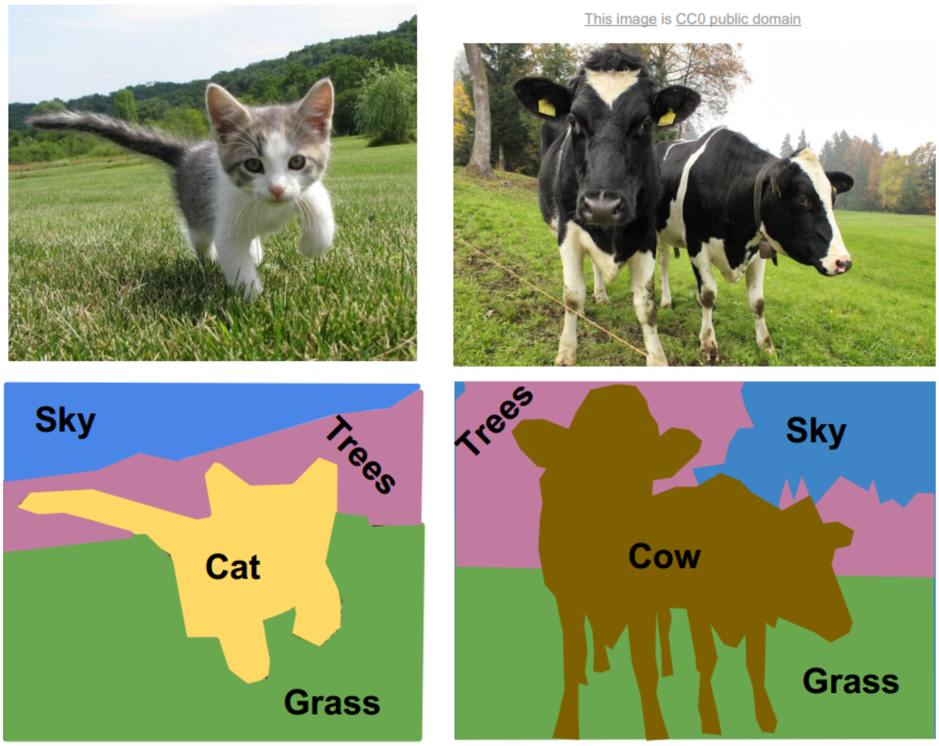


Figura 41: Representação de segmentação semântica. Na coluna da esquerda, percebemos que classificamos a imagem de um gato em quatro categorias representadas pelas cores azul, rosa, verde e amarelo. Na coluna da direita classificamos a imagem em quatro categorias representadas pelas cores azul, rosa, verde e marrom.

Para a implementação desse método, utilizamos de ConvNets que trabalham de forma muito específica: diminuindo e aumentando a resolução da imagem usando *pooling* e *upsampling* ou *unpooling*.

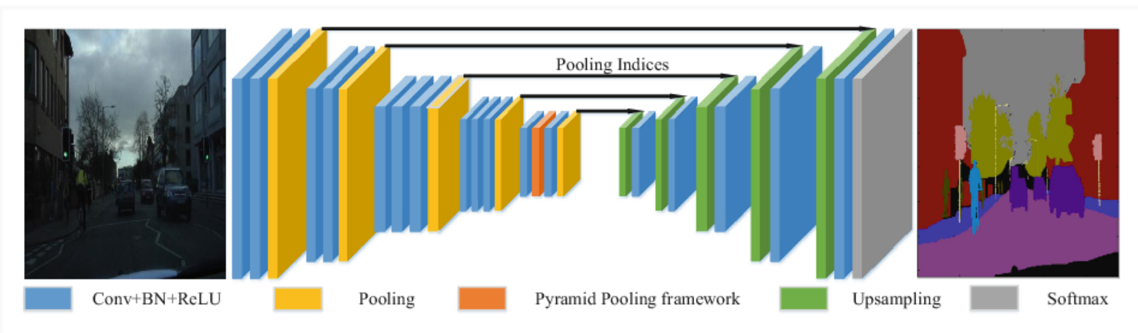


Figura 42: Representação de uma ConvNet de segmentação semântica. Percebemos que existem dois tipos de alteração da resolução da imagem: usando *pooling*, que diminui a reolução da imagem e *upsampling* que aumenta a resolução da imagem.

Com essa implementação, podemos promover o aprendizado da rede neural centrado em cada pixel da imagem e, assim, classificar cada pixel em diferentes classes.

20.4.2 Localização

Dada uma imagem, desejamos localizar onde está determinado objeto na imagem. Para isso, temos dois tipos de localização: localização com apenas um objeto na imagem e localização com mais de um objeto.

Podemos verificar como funciona a localização de objetos em imagens na Figura 43

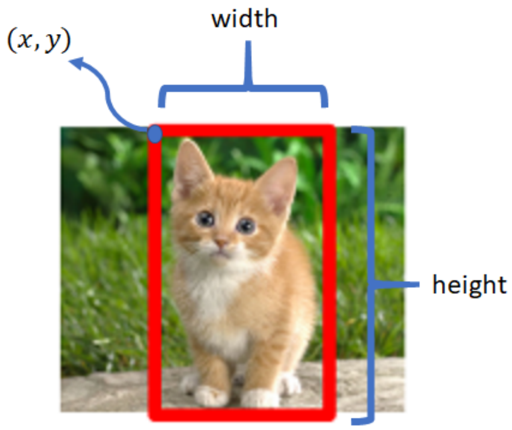


Figura 43: Representação de uma localização de objetos. Percebemos que a partir de uma coordenada (x, y) prevemos os valores da altura e da largura da *bounding box* que limita a figura do gato, neste caso.

Para o problema de localização de objetos, trataremos esse problema como um problema de regressão, que dado uma coordenada (x, y) de uma *bounding box*, desejamos prever as outras coordenadas dessa *bounding box* de acordo com a classificação gerada pela ConvNet. Assim, o resultado da função de localização será uma tupla do tipo (x, y, w, h) onde x e y são as coordenadas iniciais da *bounding box* e w e h são, respectivamente a largura e a altura da *bounding box*.

20.4.3 Detecção de Objetos

Dada uma imagem que contém múltiplos objetos, desejamos classificar e localizar cada um desses objetos presentes na imagem.

Podemos verificar na Figura 44 como funciona a detecção de objetos.

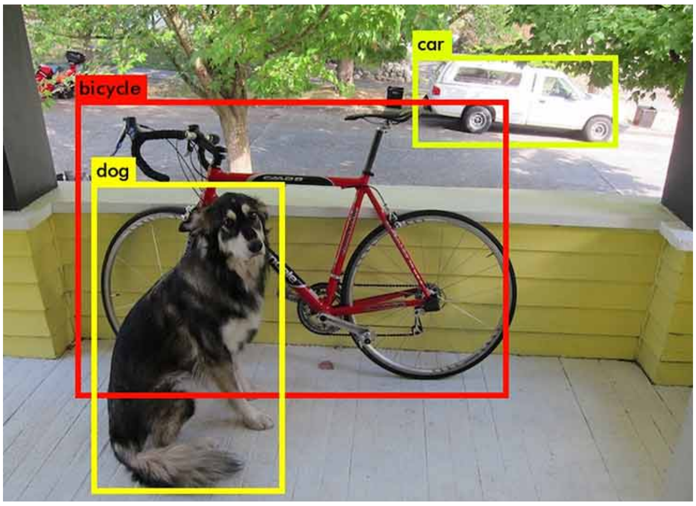


Figura 44: Representaçào de detecção de objetos. Percebe-se que, para cada um dos objetos na imagem, existe uma *bounding box* localizando cada um dos objetos e para cada uma dessas *bouding boxes*, sua classificação.

Para isso, foram criados dois métodos principais de detecção de objetos em imagens *You Only Look Once* (YOLO) e *Single Shot Detector* (SSD).

Para YOLO, o método é essencialmente regressão, o qual usa uma imagem para aprender as possibilidades das classes de acordo com as coordenadas das *bounding boxes*. YOLO divide cada imagem em uma rede *SxS* e cada rede prevê *N bounding boxes* e a confiança da precisão se cada *bounding box* realmente está contornando um objeto (Figura 45). Então, são previstas um total de *SxSxN bounding boxes* que, em sua maiora têm pontuações de confiança baixas e, portanto, podemos nos livrar delas.

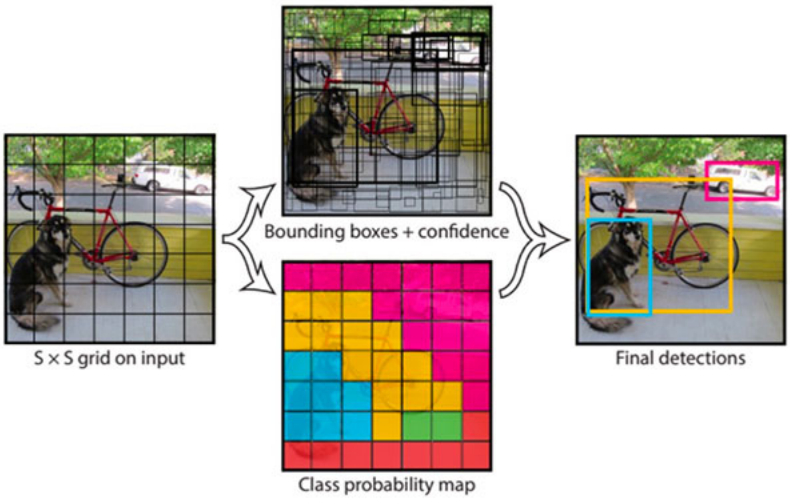


Figura 45: Representação de um algoritmo de detecção de objetos usando o método YOLO. A partir de uma imagem de entrada, a dividimos em uma rede de tamanho *SxS* e, através de um algoritmo de regressão, encontramos as coordenadas das *bounding boxes* e a confiança de que cada uma delas possui um objeto.

Por outro lado, SSD atinge um melhor equilíbrio entre rapidez e precisão. O SSD executa uma ConvNet na imagem de entrada apenas uma vez e calcula um mapa de recursos (*feature map*). Agora, executamos a convolução com um *kernel* 3x3 para prever as *bounding boxes* e as probabilidades de categorização.

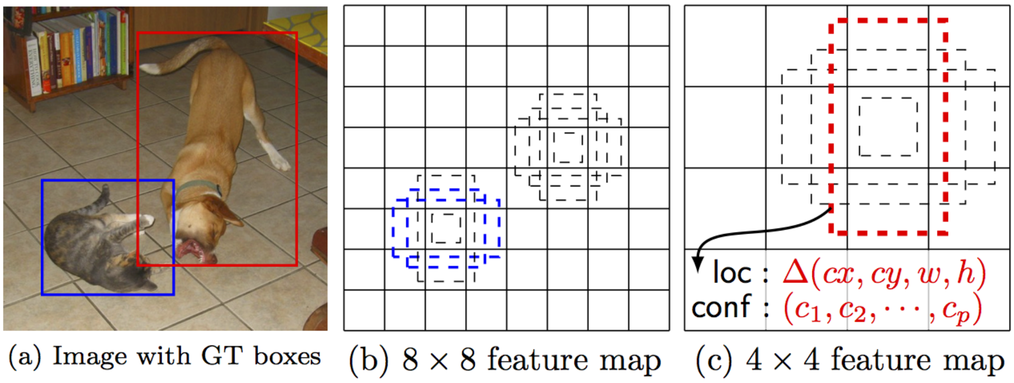


Figura 46: Representação de um algiritmo de detecção de imagens usando SSD. A partir de uma imagem de entrada, através de uma ConvNet prevemos as coordenadas das *bounding boxes* com suas respectivas probabilidades, através de apenas uma passagem pela rede para cada objeto.

20.4.4 Segmentação de Instâncias

Assim, como detecção de objetos, desejamos localizar e classificar objetos em uma dada imagem, porém, além de apenas definir uma *bounding box* para cada um dos objetos, desejamos segmentar a imagem de acordo com cada objeto encontrado e classificá-los, como pode-se perceber na Figura 47

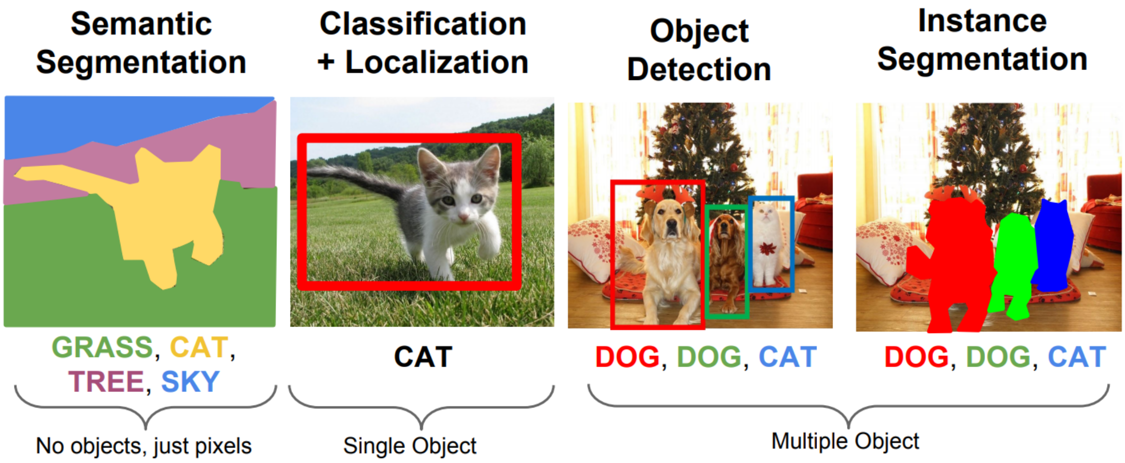


Figura 47: Comparação entre os diferentes tipos de detecção e segmentação de objetos em imagens.

21 Redes neurais recorrentes (*Recurrent neural networks*)

21.1 Visão geral

Redes neurais recorrentes, ou RNNs, são um tipo de rede neurais que usam dados sequenciais ou dados de séries temporais. Os algoritmos mais conhecidos utilizados estão relacionados a tradução de linguagens, processamento de linguagem natual (*Natural Language Processing* (NLP)), reconhecimento de discursos e legenda de imagens.

Assim como *feedforward* e redes neurais convolucionais, RNNs utilizam de dados de treino para aprender, ou seja, é um tipo de aprendizagem supervisionada. A principal diferença de uma RNN é que ela possui uma espécie de memória que guarda as informações prévias de *input* que influenciam nas próximas camadas da rede neural (Figura 48). Além disso, RNNs dependem dos elementos posteriores dentro da sequência.

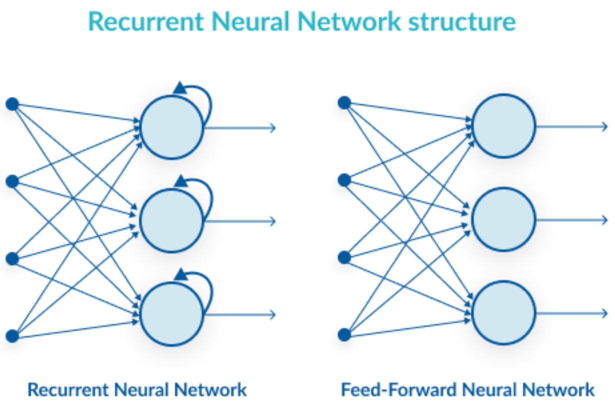


Figura 48: Representação da comparação estrutural de umas rede neural recorrente e uma rede neural tradicional do tipo *feedforward*.

Para representação de uma RNN podemos utilizar dois métodos: *rolled* e *unrolled* mostradas na Figura 49.

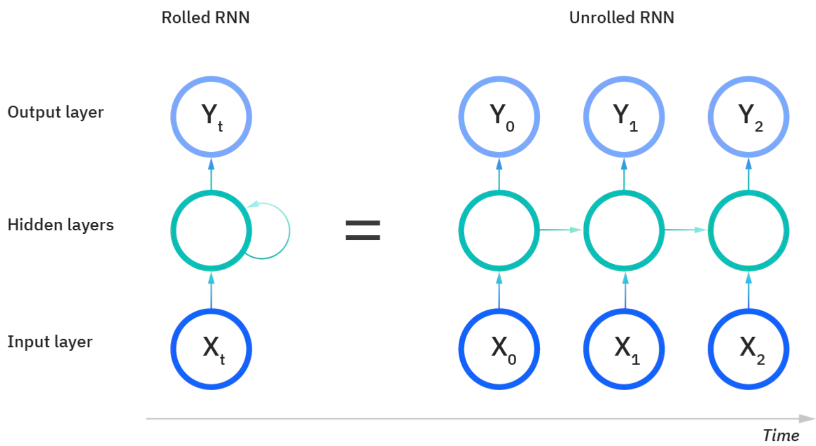


Figura 49: Duas formas básicas de representação de uma RNN. A forma *rolled* representa a rede neural inteira, focando apenas da saída. Na forma *unrolled* representa as camadas individuiais com seus respectivos parâmetros.

Outra importante diferença em uma RNN em relação a uma rede neural do tipo *feedforward* é que no caso das RNNs, seus nodos compartilham dos mesmos parâmetros ao logo de cada camada da rede, enquanto em uma rede *feedforward* possui diferentes parâmetros (pesos) em cada nodo.

21.2 Vetores de palavras (*word embeddings*)

Como foi mencionado, uma das principais utilizações de RNNs é para o processamento de linguagem natural. Contudo, uma rede neural não consegue distinguir diferenças semânticas entre frases e impactos de determinadas palavras apenas pelo contexto. Sabemos que uma rede neural trabalha com valores numéricos e, para isso, devemos codificar essas palavras e frases de forma que o nosso modelo possa reconhecer e processar essas diferenças entre elas.

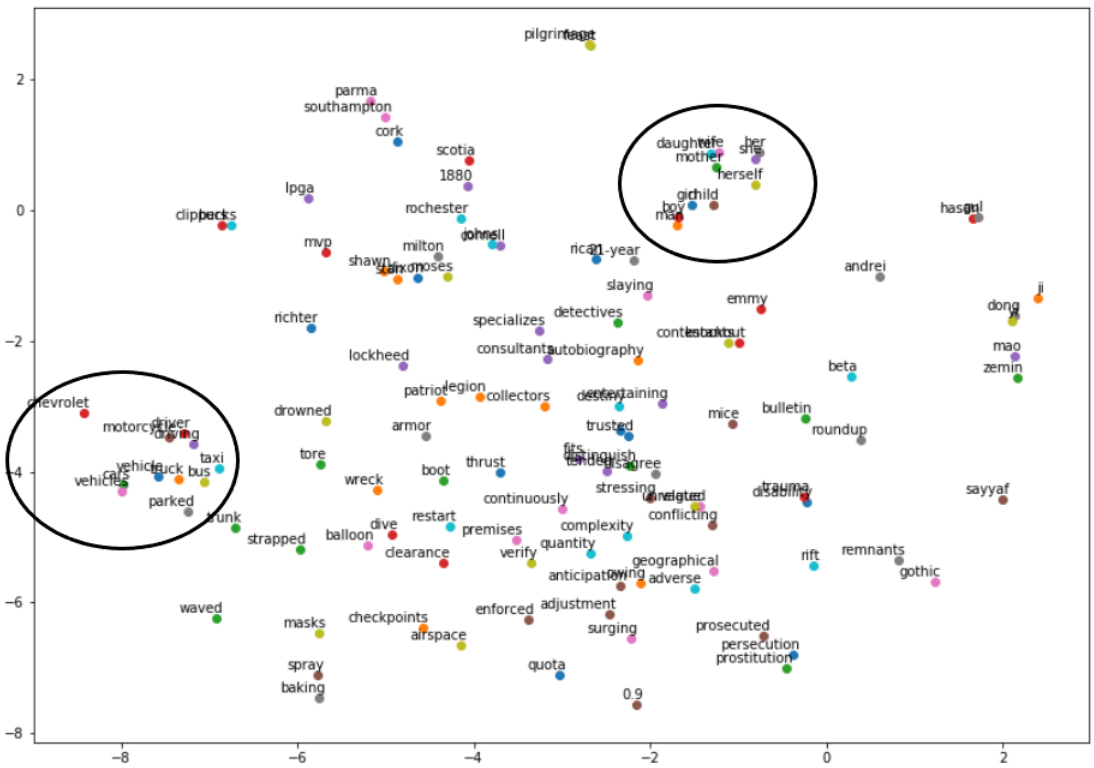


Figura 50: Representação de um espaço vetorial formado pelas *word embeddings*. Podemos verificar as similaridades das palavras dentro de um mesmo círculo e a diferenças entre elas quando não pertencem ao mesmo grupo.

Dessa forma, palavras podem ser diferenciadas em um espaço vetorial de acordo com o ângulo que geram entre elas. Por exemplo, palavras com significados opostos tendem a gerar um ângulo maior, enquanto palavras com significados similares geram um ângulo menor. Podemos verificar isso, na Figura 51, a seguir.

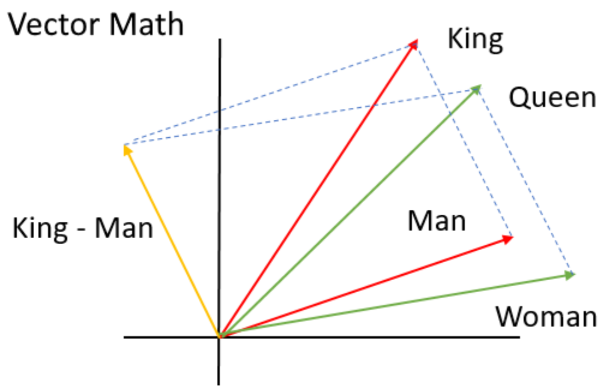


Figura 51: Representação da diferenciação de palavras através de vetores. Percebe-se que palavras com significado similar, possuem um ângulo menor, como por exemplo, as palavras 'King' e 'Queen', enquanto palavras com significados distintos como 'Woman' e 'King' possuem um ângulo maior.

Nesta seção, serão apresentadas formas de pré-processamento de dados em forma de texto a fim de alimentar a nossa rede neural. Para convertermos esse texto para valores numéricos, utilizaremos um métodos chamados *one-hot encoding* e *word vectors*.

21.2.1 *One-hot encoding*

One-hot encoding representa cada palavra coimo um vetor de tamanho V, onde V é o número de palavras únicas no nosso conjunto de dados. Cada palavra é codificada em um vetor binário no qual o valor 1 é um índice único para cada palavra e o valor 0 para o restante das palavras. Para visualizar isso melhor, podemos pensar nas duas frases: "Redes Neurais são difíceis" e "Redes Neurais são fáceis", como estão exemplificadas na Figura 52.

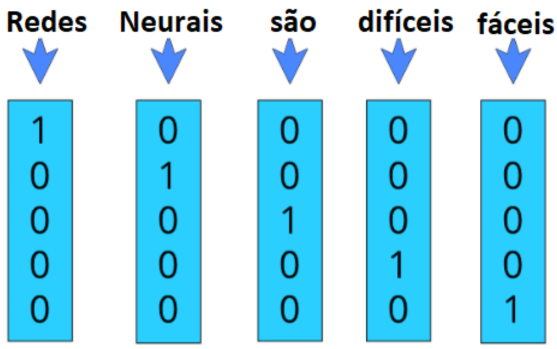


Figura 52: Exemplo da codificação *one-hot* em um vocabulário de cinco palavras, ou seja, $V = 5 \rightarrow$ ['Redes', 'Neurais', 'são', 'difíceis', 'fáceis'] .

Essa codificação mapeia cada palavra a um vetor único em que cada posição representa uma palavra distinta do vocabulário. Esse método converte qualquer palavra em valores numéricos de uma maneira muito simples.

Todavia, com essa codificação temos dois problemas principais: uso de memória inutilizada e perda semântica da frase. Primeiramente, teremos um vetor codificado para cada uma das palavras que aumenta o tamanho de acordo com a complexidade do vocabulário, então teremos um vetor enorme, composto basicamente por zeros, para representar uma só palavra o que pode levar a um uso excessivo e desnecessário de memória. Além disso, esse tipo de codificação não guarda o significado semântico de cada palavra. Para isso, gostaríamos de representar um vetor que representasse o valor semântico de cada palavra e similaridade entre elas, por exemplo, as palavras "fáceis" e "difíceis", gostaríamos que fossem dois vetores completamente distintos, enquanto "errado" e "incorreto" gostaríamos que fossem vetores semelhantes.

Para isso, utilizamos de outro método de codificação chamado *word2Vec* que resolve os dois problemas citados acima.

21.2.2 Word2Vec

Em word2Vec, existem dois tipos de arquiteturas: *Continuous Bag Of Words* (CBOW) e *Skip Gram*. Primeiro iremos discutir a arquitetura Skip Gram para depois discutirmos CBOW.

Iremos fazer com que os dados nos digam quais palavras estão ocorrendo próximo de uma outra palavra. Usamos um método chamado "janela de contexto" para nos dizer isso.

Se utilizarmos como exemplo a seguinte frase "Deep Learning is very hard and fun". Primeiro devemos definir o tamanho da janela (*window size*), que pode ser, por exemplo igual a 2. Precisamos iterar sobre todas as palavras presentes nos nossos dados - nesse caso é apenas uma frase. Como o tamanho da janela é dois iremos considerar duas palavras antes e duas palavras depois da palavra que estamos analisando, como percebe-se na Figura 53. E iremos repetir isso até que todas as palavras sejam coletadas em forma de pares.

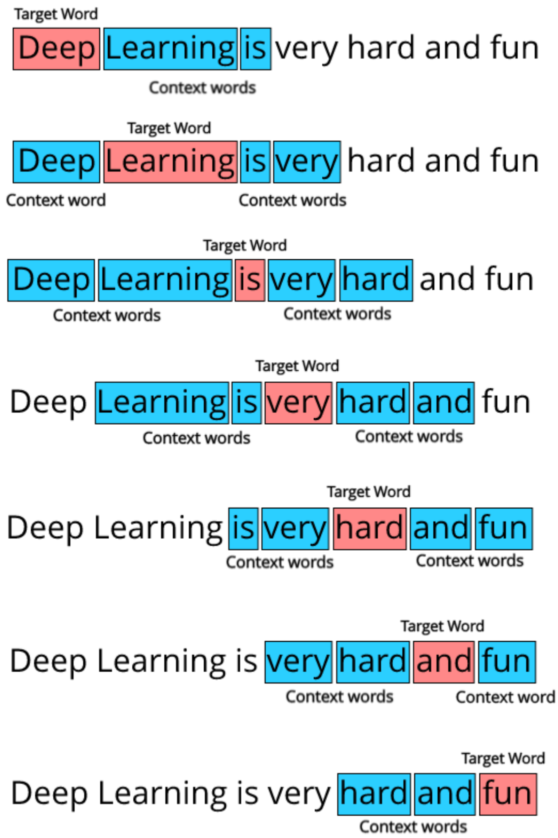


Figura 53: Representação da formação de uma "janela de contexto".

Com isso feito, podemos formar pares entre as palavras dos dados verificados de forma que a palavra que estamos verificando esteja relacionada com uma palavra que pertence ao contexto dela, ou seja, buscaremos pares ordenados do tipo (target word, context word). Para a frase do exemplo teremos os seguintes pares.

1. (Deep, Learning), (Deep, is)
2. (Learning, Deep), (Learning, is), (Learning, very)
3. (is, Deep), (is, Learning), (is, very), (is, hard)
4. (very, learning), (very, is), (very, hard), (very, and)
5. (hard, is), (hard, very), (hard, and), (hard, fun)
6. (and, very), (and, hard), (and, fun)
7. (fun, hard), (fun, and)

Esses dados podem ser considerados os nossos dados de treino para *word2Vec*.

O modelo *Skip Gram* tenta prever o contexto de cada palavra dada uma palavra que irá ser focada. Usamos uma rede neural para a previsão dessa tarefa. A entrada da rede neural será a versão codificada *one-hot* das palavras, onde o tamanho V do vetor será o tamanho do vocabulário. A arquitetura da rede está exemplificada na Figura 54, abaixo.

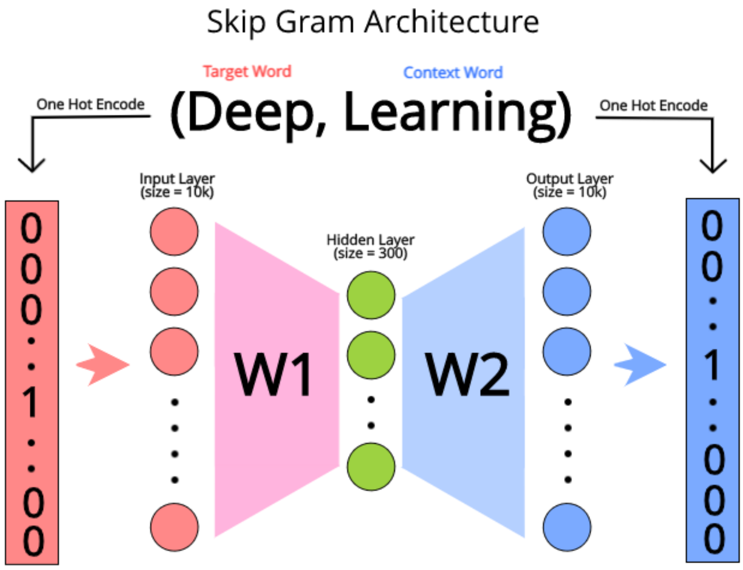


Figura 54: Representação de uma rede neural para a codificação Skip Gram a partir da entrada (Deep, Learning), onde "Deep" é a *target word* e "Learning" é a *context word*. A partir da *target word*, treinamos a rede neural para prever a *context word*, sendo que a saída e a entrada da rede estão na forma *one-hot encoding*.

Para CBOW, a única diferenç é que nós tentamos prever a *target word* dada a *context word*, então, basicamente, invertemos o modelo *Skip Gram* para gerarmos o modelo CBOW, como está representado na Figura 55.

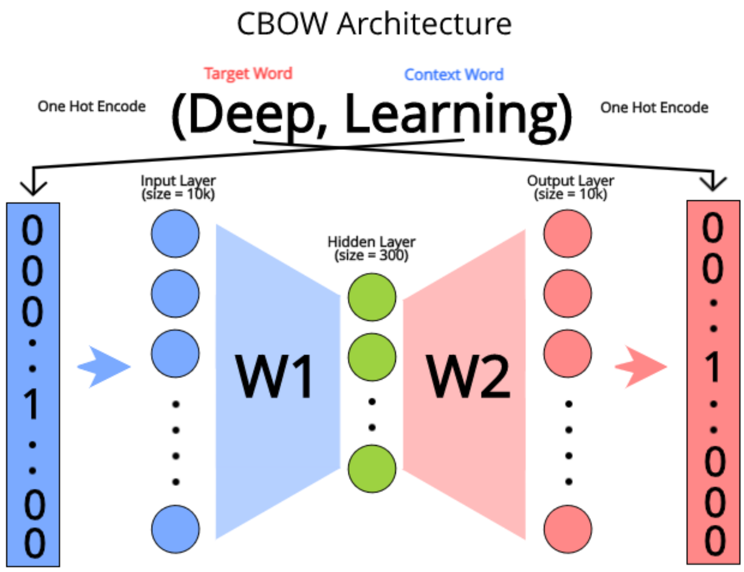


Figura 55: Representação de uma rede neural para a codificação CBOW a partir da entrada (Deep, Learning), onde "Deep" é a *target word* e "Learning" é a *context word*. A partir da *context word*, treinamos a rede neural para prever a *target word*, sendo que a saída e a entrada da rede estão na forma *one-hot encoding*.

Em geral, CBOW é mais rápido e tem melhor representações para palavras mais frequentes. Então, com isso podemos gerar uma identificação semântica de cada palavra e seus relacionamentos umas com as outras.

21.3 Arquitetura de uma RNN

Como foi explicado na Seção 21.1, uma RNN é uma classe de redes neurais que permite que as saídas anteriores sejam usadas como entradas, embora tenham estados ocultos. Com isso podemos determinar uma arquitetura básica desse tipo de rede neural e definir os seus parâmetros e suas funções de ativação que podem ser, potencialmente, utilizadas.

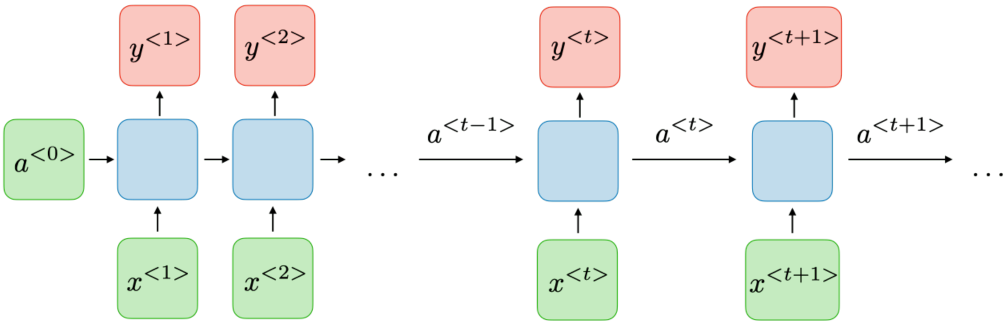


Figura 56

Na Figura 56 está representada uma estrutura básica de uma RNN. Nela, para cada pedaço de tempo t, a ativação $a^{<t>}$ e a saída $y^{<y>}$ são expressos da seguinte forma:

$$\boxed{a^{<t>} = g_1(W_{aa}a^{<t-1>} + W_{ax}x^{<t>} + b_a)}$$

$$\boxed{y^{<t>} = g_2(W_{ya}a^{<t-1>} + b_y)}$$

Onde W_{ax}, W_{aa}, W_{ya}, b_a, b_y são coeficientes que são temporariamente compartilhados e g_1 e g_2 são as funções de ativação.

Os prós e contras de uma RNN estão descritos abaixo:

Tabela 5: Comparação entre os prós e contras de uma RNN

Prós	Contras
Possibilidade de processamento de entrada de qualquer tamanho	Computação lenta
O tamanho do modelo não aumenta de acordo com o tamanho da entrada informações de tempo muito distante	Dificuldade de acessar
A computação leva em consideração informações históricas nenhuma entrada futura para o atual estado	Não consegue levar em consideração
Os pesos são compartilhados ao longo do tempo	

21.4 Aplicações

Os modelos de RNN são muito utilizados, como foi mencionado, em áreas como processamento de linguagem natural, reconhecimento de discurso e geração de música. As diferentes aplicações serão representadas a seguir com suas respectivas arquiteturas.

21.4.1 *One-to-one*

O tipo de RNN *one-to-one* é uma rede neural muito simples, na qual $T_x = T_y = 1$. Esse tipo de RNN é muito utilizada em redes neurais tradicionais vistas anteriormente.

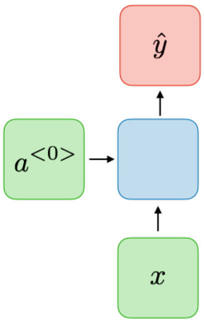


Figura 57: Representação de uma RNN do tipo *one-to-one*.

21.4.2 *One-to-many*

O tipo de RNN *one-to-many* é uma rede neural, na qual $T_x = 1$, $T_y > 1$. Esse tipo de RNN é muito utilizada em geração de música.

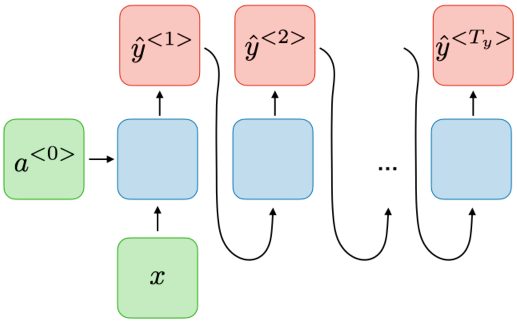


Figura 58: Representação de uma RNN do tipo *one-to-many*.

21.4.3 *Many-to-one*

O tipo de RNN *many-to-one* é uma rede neural, na qual $T_x > 1$, $T_y = 1$. Esse tipo de RNN é muito utilizada em classificação de sentimento.

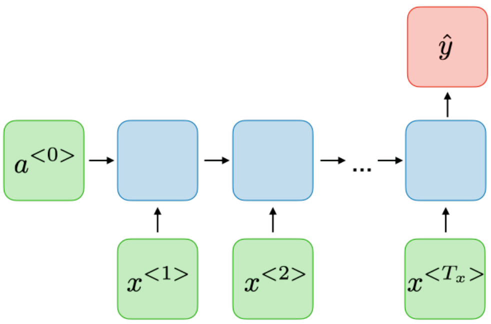


Figura 59: Representação de uma RNN do tipo *many-to-one*.

21.4.4 *Many-to-many*

O tipo de RNN *many-to-many* é uma rede neural, na qual $T_x = T_y$. Esse tipo de RNN é muito utilizada em nome de reconhecimento de entidade.

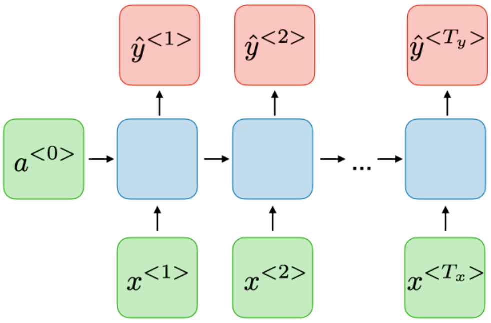


Figura 60: Representação de uma RNN do tipo *many-to-many* com saídas e entradas em números iguais.

A outra forma de representação desse tipo de RNN é na forma $T_x \neq T_y$, também chamada de *sequence-to-sequence*, que é realiza a codificação da entrada usando a arquitetura *many-to-one* e a produção da saída realizada por uma única entrada do tipo *one-to-many*, como se pode perceber na Figura 61. Esse tipo de RNN é muito utilizada em tradução de máquina.

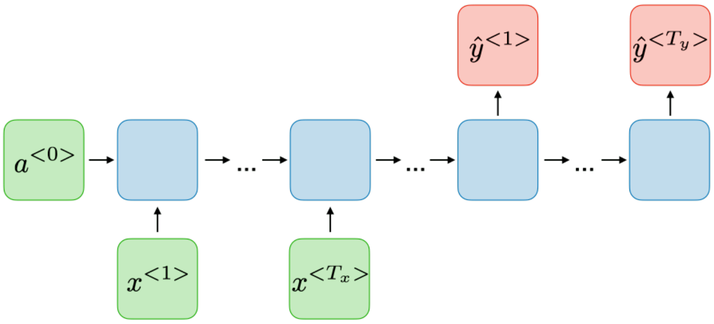


Figura 61: Representação de uma RNN do tipo *many-to-many* com saídas e entradas em números diferentes.

21.5 Função custo (*Cost function*)

Como foi visto nas seções anteriores, a função custo de uma rede neural tem como objetivo calcular o erro entre os valores de entrada a cada passo de tempo. A função custo está representada abaixo.

$$\mathcal{L}_\theta(y, \hat{y}) = -\sum_{t+1}^{T_y} \mathcal{L}_\theta(y^{<t>}, \hat{y}^{<t>})$$

Onde:

$$\mathcal{L}_\theta(y, \hat{y})_t = -y_t log \hat{y}_t$$

21.6 *Backpropagation*

O algoritmo de *backpropagation* é feito a cada ponto em um período de tempo. No tempo T, da derivada da função custo $\mathcal{L}$ a respeito de uma matriz de pesos W é expressa como segue:

$$\frac{\partial \mathcal{L}^{(T)}}{\partial W} = \sum_{t=1}^{T} \frac{\partial \mathcal{L}^{(T)}}{\partial W}\Big|_{(t)}$$

Para realizar essa computação, realizamos as atualizações dos parâmetros *feedforward*, a cada passo de tempo, e ao computar a função custo, realizamos a *backpropagation*. Contudo,como esse tipo de rede neural processa os dados sequencialmente, realizar o cálculo das derivadas de forma sequencial pode ser uma tarefa pouco eficiente e, para isso, a computação da *backpropagation* se dá de forma truncada (*truncated backpropagation*), utilizando apenas uma parte da rede neural por período de tempo (*mini-batches*) para computá-la, ao invés da sequência inteira.

21.7 Funções de ativação e propriedades

Como vimos nas seções anteriores, para cada trasição de camada, precisamos de uma função de ativação para atualizar os valores dos respectivos nodos da camada seguinte a partir dos nodos da camada anterior. Para RNNs, temos basicamente três tipos de funções de ativação:

1. *Sigmoid*:

$$\boxed{g(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}}$$

2. tanh:

$$\boxed{g(z) = \frac{e^{z}-e^{-z}}{e^{z}+e^{-z}}}$$

3. *ReLU*:

$$\boxed{g(z) = max(0, z)}$$

21.7.1 Gradiente de desaparecimento e explosão

Esse fenômeno ocorre quando o gradiente, no contexto das RNNs, não consegue calcular valores profundos da rede neural devido às sucessivas multiplicações. Muitas vezes essas multiplicações pondem ser exponenciais, decrementando ou incrementando, os valores dos parâmetros de acordo com o número de camadas da rede neural.

A fim de evitar o problema de explosão, usa-se a técnica de "recorte do gradiente" (*gradient clipping*) na qual limita o valor do gradiente calculado a fim de evitar explosões que eventualmente podem ocorrer na *backpropagation*. Este método está represenatdo na Figura 62.

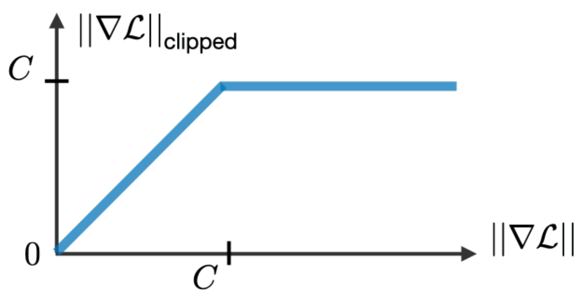


Figura 62: Representação da técnica de "recorte do gradiente". No eixo y está representado o valor do gradiente após a realização do corte de acordo ccom o crescimento do valor do gradiente, representado no eixo x.

De outra forma, para evitar o problema de desaparecimento, usa-se tipos específicos de portões (*gates*) para alguns tipos de RNNs. A equação de *gate* está representada abaixo.

$$\Gamma = \sigma(Wx^{<t>} + Ua^{<t-1>} + b)$$

Onde W, U, b são os coeficientes específicos de cada *gate* e σ é a função sigmoide.

21.8 *Gated Recurrent Unit* (GRU) e *Long Short-Term Memory Units* (LSTM)

As arquiteturas de GRU e LSTM são utilizadas para resolver os problemas de desaparecimento do gradiente, quando realizamos multiplicações sucessivas ao longo da *backpropagation* por tempos pequenos, o valor da função hipótese tende à zero.

A LSTM é uma RNN que memoriza os valores em intervalos arbitrários, sendo, assim, muito adequada para processar e prever séries de valores temporais com intervalos de tempo de duração desconhecida. Como pode-se verificar na Figura 63, a LSTM possui uma estrutura de cadeia que contém quatro redes neurais e diferentes blocos de memória chamados "células".

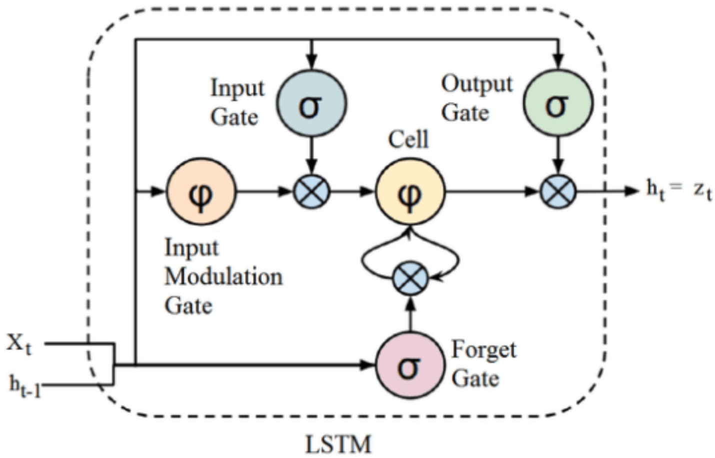


Figura 63: Representação de uma arquitetura LSTM. Percebe-se que existem três *gates* (*input*, *forget* e *output*) e uma célula, onde são realizadas as operações de memorização.

Como LSTM é uma generalização da técnica GRU, nesta seção serão apresentados os métodos de implementação de LSTM. Com isso, temos os seguintes tipos de *gates* principais usados na implementação de uma LSTM:

1. *Forget Gate*: as informações que não são mais úteis no estado da célula são removidas através do *forget gate*. Os valores de $x^{<t>}$ e $a^{<t-1>}$ são alimentadas no *gate* e multiplicadas pelas matrizes W, resultando em um valor binário após a paassagem pela função de ativação. Caso a saída seja 0, o valor é esquecido e caso seja 1 o valor é mantido para uso futuro.

$$f_t^1 = \sigma(W_{f^1} \cdot [a^{<t-1>}x^{<t>}] + b_{f^1})$$

2. *Input Gate*: as informações úteis para o estado da célula é feita pelo *input gate*. Primeiro, a informação é regulada através da função sigmoide, filtrando os valores, e, depois um vetor de valores criados usando a função tanh retorna valores entre -1 a 1, que contém todos os valores possíveis para $x^{<t>}$ e $a^{<t-1>}$. Em seguida, os valores do vetor e os valores regulados são multiplicados para obter as informações úteis.

$$f_t^1 = \sigma(W_{f^2} \cdot [a^{<t-1>} x^{<t>}] + b_{f^1}) \odot \tanh(W_{f^2} \cdot [a^{<t-1>} x^{<t>}] + b_{f^2})$$

3. *Output Gate*: as informações úteis da célula atual que podem ser usadas nos estados seguintes são extraídas através do *output gate*. Um vetor é, primeiramente, gerado aplicando a função tanh na célula e, depois, essa informação é regulada através da função sigmoide filtrando os valores a serem lembrados. Os valores do vetor e dos valores regulados são multiplicados e são enviados como saída para a célula seguinte.

$$h'_t = \sigma(W_{h'_t} \cdot [a^{<t-1>} x^{<t>}] + b_{h'_t}) \odot \tanh(c_t)$$

No entanto, LSTMs possuem um problema similar aos modelos de RNNs. Quando as sentenças são muito grandes, LSTMs não funcionam muito bem. Isso acontece porque o valor de uma célula muito anterior à célula atual decresce exponencialmente e isso potencializa a perda de informação e a falta de controle do processo. Em geral, RNNs e LSTMs possuem três problemas:

(a) A computação sequencial inibe a paralelização. Em outras palavras não podemos paralelizar tarefas em uma RNN ou em uma LSTM devido ao fato de que seu processamento é sequencial;

(b) Sem modelagem explícita de dependências de longo e curto alcance;

(c) A distância entre as posições é linear.

21.9 Attention

Para resolver esses problemas mencionados na seção anterior, foram criadas técnicas para prestar atenção a palavras específicas. Por exemplo, quando traduzimos uma frase, prestamos atenção na palavra que estamos querendo traduzir. Uma RNN pode realizar isso, através de uma técnica chamada *attention*.

Em uma RNN, ao invés de codificar toda a sentença um um estado interno da rede neural, cada palavra corresponde a um estado interno que é passado até o estágio de decodificação, como está representado na Figura 64.

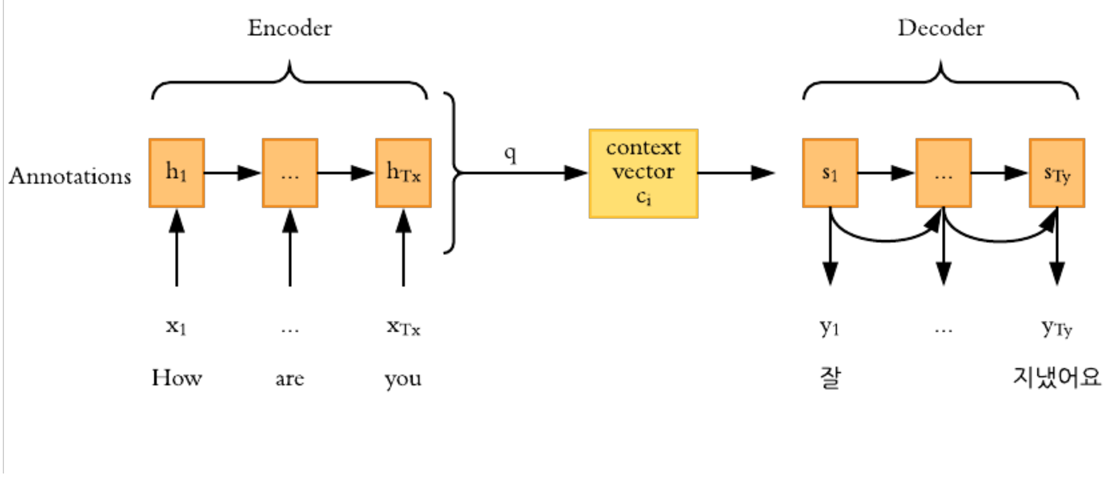


Figura 64: Representação de um processo de *encoding-decoding*. Percebe-se que os valores de x_i são os valores de *input* de cada célula. Esses valores são codificados a fim de serem decodificados no final da operação. No caso da imagem, foi realizada a tradução de uma sentença em inglês para coreano. Essa tradução é realizada através do *decoder* que presta atenção em cada uma das palavras especificamente em cada célula.

Para exemplificar o processo de *attention* e como relaciona cada um dos estados nos processos de *encoding-decoding*, podemos pensar na tradução da frase "L'accord sur la zone économique européenne a été signé en août 1992.", em francês para o inglês, como está representado na Figura 65.

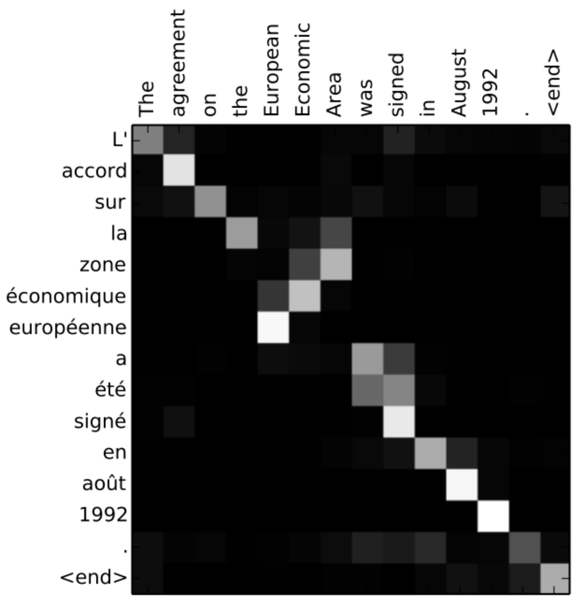


Figura 65: Representação de um processo de tradução da frase "L'accord sur la zone économique européenne a été signé en août 1992." escrita em francês para o inglês. A tonalidade de cada um dos quadrados significa o quanto de atenção foi prestada a cada passo do processamento de tradução em relação aos dados de entrada.

Contudo, apesar da alta significância dessa técnica, ainda não conseguimos resolver o problema de processarmos os dados de entrada em paralelo. Para uma entrada longa, o tempo de processamento dessa técnica é aumentado significativamente.

21.10 Redes neurais convolucionais

CNNs (Seção 20) podem ajudar a resolver esse problema. Como veremos na seção seguinte, podemos utilizar desse tipo de arquitetura juntamente com um outro método chamado *transoformer* a fim de resolvermos o problema da paralelização.

Com CNNs podemos realizar as seguintes operações facilmente:

- Paralelização de operações;
- Explorar dependencias locais;
- Distância entre as posições é logaritmica.

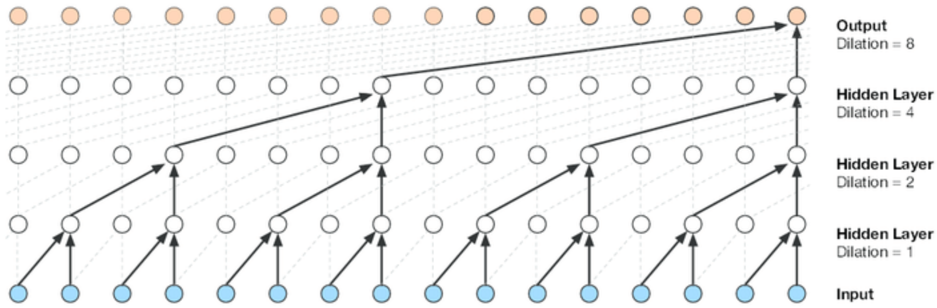


Figura 66: Representação de uma CNN voltada para transdução de sequências. Modelo Wavenet e Bytenet [13]

A razão pela qual uma CNN pode funcionar em paralelo é que cada palavra de entrada pode ser processada ao mesmo tempo e não depende necessariamente da palavra anterior já estar traduzida. Além disso, a distância entre o *output* e cada *input* de uma CNN está na ordem de $log(N)$, o que é muito melhor que uma RNN cuja distância está na ordem linear (N).

21.11 *Transformers*

Para resolver o problema da paralelização, os *transormers* usam CNNs jutamente com modelos de *attention*. *Attention*, mais especificamente, *self-attention*, aumenta a velocidade de que o modelo pode traduzir uma sequência para a outra.

Um *transformer* possui uma arquitetura similar aos modelos previamente vistos. Ele consiste num conjunto de seis *encoders* e seis *decoders*, como podemos visualizar nas Figura 67 e 68.

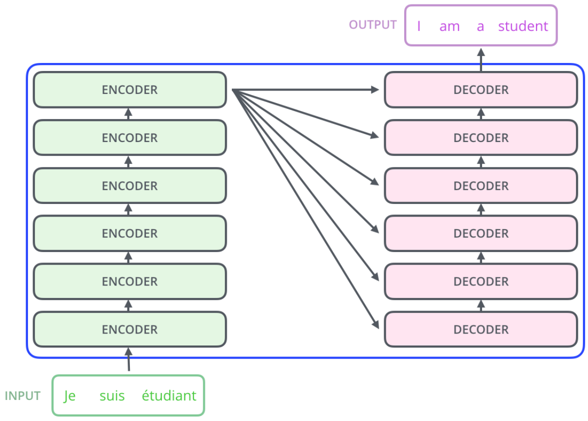
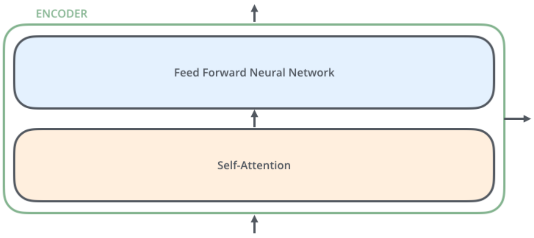
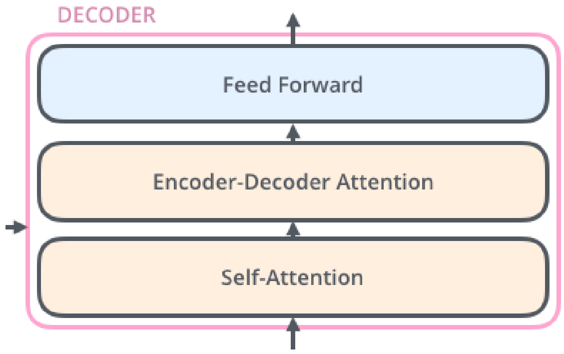


Figura 67: Representação de uma estrutura básica de um *transformer*. Percebe-se que a aprtir de uma dada entrada, as palavras passam por uma sequência de seis *encoders* e no final da codificação, são redirecionadas para os *decoders* para a geração da saída.



(a) Representação de um *encoder* de um *transformer*. Percebe-se que é dividido em duas partes: *self-attention*, onde são realizadas as operações de otimização e atenção e rede neural *feedforward* onde são processadas as informações geradas na etapa de *self-attention*. A saída do *encoder* é redirecionada para as entradas dos respectivos *decoders*.



(b) Representação de um *decoder* de um *transformer*. Percebe-se que é dividido em três partes e duas delas estão também presentes no *encoder*. Entre as duas camadas iguais, existe uma camada intermediária de *attention* que ajuda o *decoder* a focar em partes relevantes da sentença de entrada.

Figura 68

22 Modelos generativos (*Generative models*)

22.1 Visão geral

Tanto o mundo real quanto o mundo digital são composto por uma quantidade enorme de informações e tudo isso está disponível de forma acessível. Todavia, é um problema desenvolver modelos e algoritmos que possam analisar e entender essa quantidade absurda de dados.

Nesse sentido, os modelos generativos são uma das abordagens mais promissoras no subconjunto de *unsupervised learning*. Para treinar esse tipo de modelo, coletamos uma grande quantidade de dados de algum domínio (e.g. imagens, frases, sons, etc.) que chamaremos de $p_{data}(x)$ e, então, treinamos um modelo para gerar dados semelhantes aos de entrada, ou seja, geraremos $p_{model}(x)$ tal que é semelhante a $p_{data}(x)$.

A principal ideia é que as redes neurais que usamos como modelos generativos têm um número de parâmetros significativamente menor do que a quantidade de dados em que os treinamos, de modo que os modelos são forçados a descobrir e internalizar com eficiência a essência dos dados para gerá-los.

22.2 Aplicações

Com modelos generativos podemos criar amostras extremamente realistas como por exemplo modelos de arte, imagens, tarefas como *super-resolution* e colorização.

Figura 69: Exemplos de modelos generativos. Na primeira imagem estão representados modelos de arte gerados a partir de ambientes. Na segunda imagem estão representadas imagens em alta resolução geradas a partir de identificação de rostos. Na terceira imagem estão representados exemplos de colorização de imagens a partir de uma "croqui" e imagens de treino.

Além disso, modelos generativos podem ser aplicados em outras áreas de *unsupervised learning*, como por exemplo simulações e planejamentos usando *reinforcement learning*.

Com isso, temos três formas de modelarmos esse tipo de distribuição de modelos generativos: através de *Auto-regressive Models*, *Auto-encoders* e GANs. Iremos discutir, separadamente, nas seções seguintes modelos como PixelRNN, PixelCNN, *Variational Autoencoder* e GANs.

22.3 *Auto-Regressive Models*

Antes mesmo de definirmos *Generative Adversarial Networks* (GANs) é importante mencionar que a principal diferença entre uma GAN e *Auto-regressive models* é que uma GAN aprende uma distribuição implícita dos dados, enquanto o último aprende uma distribuição explícita governada por uma estrutura de modelo imposta.

As principais vantagens da utilização de *Auto-regressive models* estão listadas a seguir:

1. **Fornece uma maneira de calcular a probabilidade:** esses modelos tem a vantagem de retornar probabilidades explícitas das densidades, tornando-o simples de aplicar em domínios como compressão e planejamento e explorações baseadas em probabilidade.
2. **O treino é estável:** existe um algoritmo estável que treina um *Auto-regressive model*
3. **Funciona tanto para dados discretos quanto contínuos**

Um dos problemas mais conhecidos de *unsupervised learning* é o de modelar a distribuição de imagens naturais. Para resolver esse problema, precisamos de um modelo tratável e escalonável. PixelRNN e PixelCNN fazem parte da classe de *Auto-regerssive models* que atendem essas condições.

Esses tipos de modelos são, preferencialmente usados no preenchimento de imagens. A razão para isso é poruqe eles tem um desempenhos melhor do que outros modelos generativos nesse tipo de problema.

22.3.1 PixelRNN

Através da utilização de modelos probabilísticos de densidade, como por exemplo Distribuição Normal, consegue gerar imagens começando através de um canto e calculando qual é o valor do próximo pixel que mais faz sentido de acordo com os pixels previamente gerados e com um valor de probabilidade.

Para processar a relação entre geração do pixel e valor de probabilidade, utilizamos de modelos que funcionam bem com sequências, como por exemplo, Redes Neurais recorrentes (RNNs).

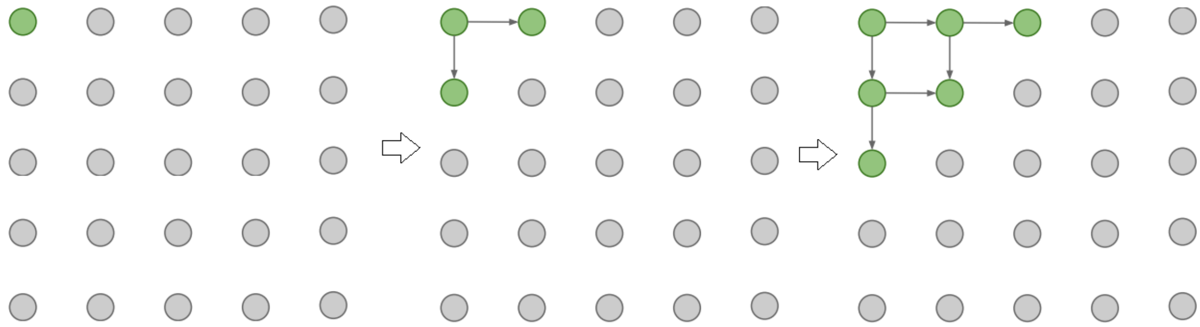


Figura 70: Geração de pixels utilizando PixelRNN. A partir de um pixel do canto da imagem, o modelo começa a gerar, sequencialmente outros pixels baseados nos valores de probabilidade e nos valores dos pixels previamente gerados.

A rede neural "varre" a imagem gerando, linha a linha e pixel a pixel a cada período de tempo, o que pode ser, muitas vezes, muito demorado. Os valores dos pixels são gerados baseando-se nos valores de probabilidade gerados através de uma distribuição que é escrita a partir do produto condicional das distribuições e os valores gerados são compartilhados através da imagem.

O objetivo, então é calcular a probabilidade $p(x)$ para cada pixel da imagem de tamanho nxn. Assim, a probabilidade pode ser escrita da seguinte forma:

$$p(x) = \prod_{i=1}^{n^2} p(x_i|x_1, ..., x_{i-1})$$

A equação acima é a probabilidade dp i-ésimo pixel dada a probabilidade de todos os pixels previamente gerados. Essa geraçãao se dá linha a linha e pixel por pixel. Além disso, cada pixel x_i é juntamente determinado por todos os três canais de cores RGB. Assim, a probabiliade condicional do i-ésimo pixel se torna:

$$p(x_{i,R}|X_{<i})p(x_{i,G}|X_{<i}, x_{i,R})p(x_{i,B}|X_{<i}, x_{i,R}, x_{i,G})$$

Portanto, cada cor é condicionada sobre as outras cores e os pixels previamente gerados.

Contudo, um dos principais problemas desse tipo de implementação é a velocidade. Como geramos cada pixel sequencialmente, isso pode ser extremamente lento de acordo com a complexidade da saída. Para resolver esse problema de otimização, podemos utilizar um método similar e paralelizável utilizando ConvNets, chamado PixelCNN.

22.3.2 PixelCNN

Como vimos, a utilização do método PixelRNN, pode, muitas vezes, ser mais lento que o desejável, para isso, podemos adicionar camadas de convolução no nosso modelo. PixelCNN usa esse tipo de camada com o objetivo de paralelizar as operações de geração de pixel, preservando a resolução espacial da imagem gerada.

Da mesma forma que PixelRNN, PixelCNN gera a imagem a partir de um canto da imagem, porém, agora, utilizando de uma ConvNet para paralelizar esse processo.

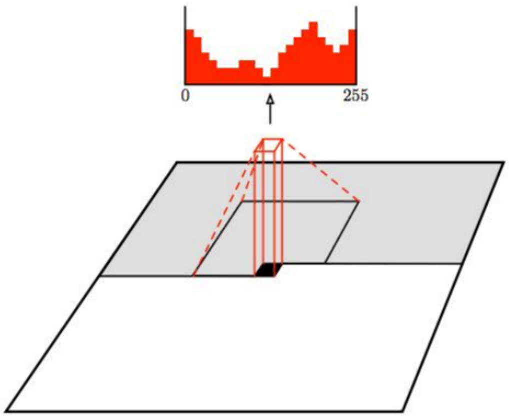


Figura 71: Geração de uma imagem através do método PixelCNN. Podemos perceber que os valores dos pixels são gerados sequencialmente através de uma camada de convolução. Os pixels previamente gerados estão representados em cinza e os valores de probabilidade sãp calculados paralelamente através da convolução.

Como a geração dos pixels contnua sequencial, isso pode ser um ponto negativo que, muitas vezes, pode tornar a geração da imagem, ainda muito lenta. Para isso, nas próximas seções iremos discutir métodos mais eficientes para realizar esse procedimento.

22.4 *Variational Autoencoders* (VAE)

Como vimos até agora, PixelCNNs definem a função de densidade travável e otimiza a probabilidade de dados de treinamento. De outra forma, VAEs definem funções de probabilidade intratáveis de acordo com um valor z que é chamado de espaço latente e será definido posteriormente.

Dessa forma, um VAE é um *Autoencoder* cuja distribuição de codificações é regularizada durante o treinamento, a fim de garantir que seu espaço latente tenha boas propriedade, o que nos permite gerar novos dados

Em geral, *Autoencoders* são redes neurais para redução de dimensionalidade. A estrutura básica de um *Autoencoder* está representada na Figura 72 Essas redes neurais tem como objetivo aprender o mlehor esquema de codificação-decodificação usando um processo de otimização iterativo.

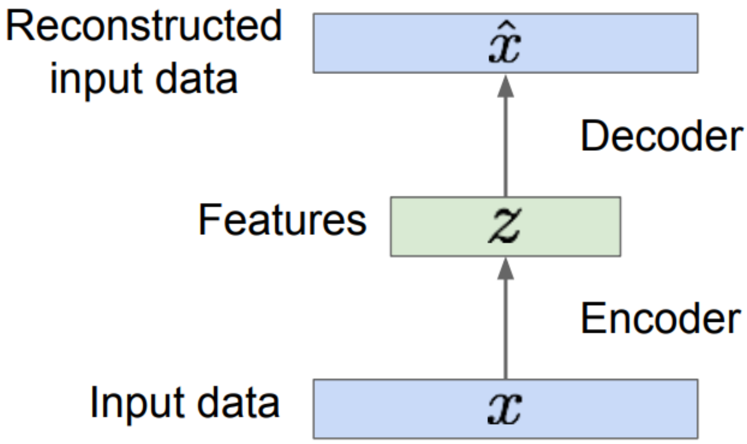


Figura 72: Através de dados de entrada x treinamos o nosso modelo de forma que possamos recontruir os dados originais através do *Autoencoder*. Dessa forma, z são os dados de entrada codificados através de algoritmos de redução de dimensionalidade e $\widehat{x}$ é o conjunto de dados decodificado a partir de z.

Assim, a arquitetura geral de um *Autoencoder* cria um gargalo de dados que carante que apenas a parte estruturada principal da informação possa ser reconstruída. Os codificadores e decodificadores são transformações lineares simples que podem ser expressas como matrizes, da mesma forma que o algoritmo PCA funciona e no final, adicionamos não-linearidade.

Autoencoders são, portanto arquiteturas de codificador-decodificador que podem ser treinadas utilizando um algoritmo de otimização como, por exemplo, gradiente descendente.

Finalmente, podemos definir um VAE. VAE é uma arquitetura composta por um codificador e um decodificador treinada para minimzar o erro de reconstrução entre os dados decodificados e os dados iniciais. Assim, podemos treinar o modelo da seguinte forma:

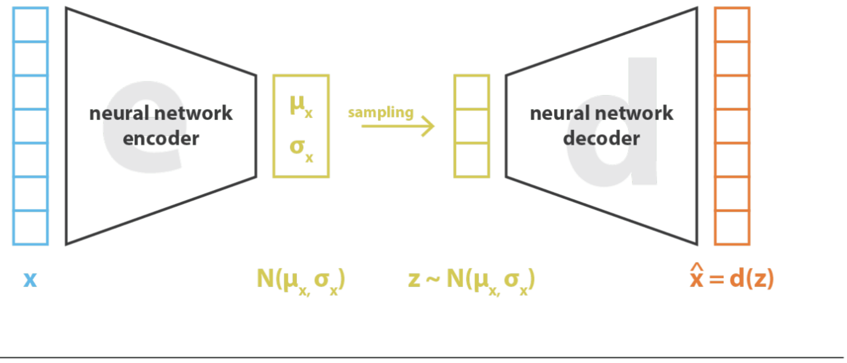
1. A entrada é codificada como distribuição do espaço latente z
2. Um ponto do espaço latente é amostrado a partir dessa distribuição
3. O ponto amostrado é decodificado e o erro de reconstrução pode ser calculado
4. *Backpropagation* utilizando o erro de reconstrução

Na Figura 73 a seguir, está esquematizado o processo de treino do modelo, sabendo que x representa os dados de entrada, z o espaço latente e $d(z)$ a reconstrução da entrada.

Figura 73

Com isso, a função custo que é minimizada ao treinar um VAE é composta por um "termo de reconstrução" que torna o esquema de codificação-decodificação mais eficiente e um "termo de regularização" que regulariza a organização do espaço latente, tornando-a mais próxima da Distribuição Normal Padrão. Esse termo é expresso como a divergência de Kullback-Leibler, que sua definição não faz parte do escopo deste curso.

A seguir, na Figura 74 está esquematizada uma estrutura básica de um VAE com a definição da sua função custo, que são dependentes dos valores de entrada x, da distribuição do espaço latente $\mathcal{N}(\mu_x, \sigma_x^2)$ e da aproximação gerada a aprtir do espaço latente $\widehat{x} = d(z)$.



$$\text{loss} = \| x - \hat{x} \|^2 + \text{KL}[\, N(\mu_x, \sigma_x), N(0, I)\,] = \| x - d(z) \|^2 + \text{KL}[\, N(\mu_x, \sigma_x), N(0, I)\,]$$

Figura 74

Portanto, através de VAEs podemos utilizar amostras usadas no espaço latente para gerar dados similares através do decodificador. A figura abaixo mostra os dados gerados a aprtir de uma rede decodificadora de um VAE treinada a partir da base de dados MNIST. Além disso, um dos pontos negativos da utilização de VAEs é que as amostras geradas são embaçadas e de baixa qualidade. Portanto para a melhoria da qualidade utilizamos GANs, que serão descritas a seguir.

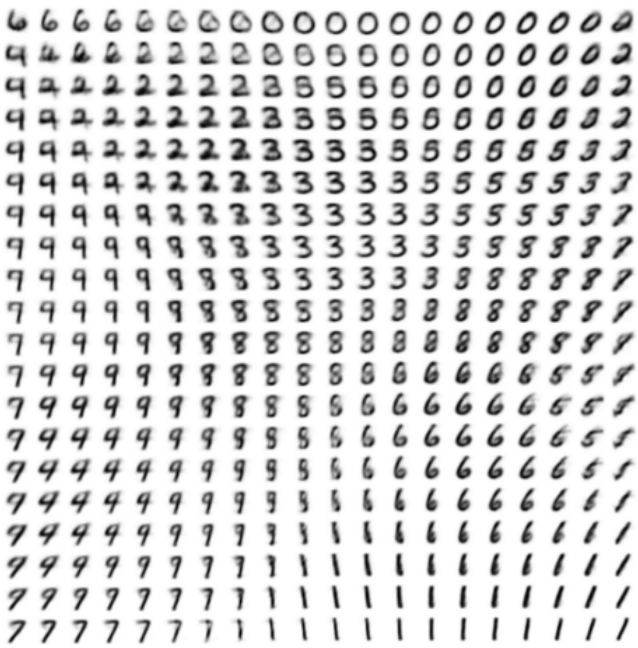


Figura 75: Nesta imagem estão representados os dígitos gerados por uma rede VAE através do decodificador. A imagem tem esse padrão devido a forma bidimensional da Distribuição Normal. Como se pode perceber, os digitos distintos estão em diferentes regiões da imagem devido ao espaço latente.

22.5 *Generative Adversarial Networks* (GANs)

Até agora, trabalhamos com funções de densidade de probabilidade explícita, como foram vistas em PixelCNNs e VAEs. No caso das GANs, não trabalhamos com funções explícitas de probabilidade, usamos aproximações probabilísticas baseadas na Teoria Dos Jogos, aprendendo a gerar dados a partir da distribuição de treinamento através do jogo de dois jogadores.

Com GANs, o que desejamos é a partir de uma entrada inicializada aleatoriamente, através de uma rede neural geradora, geramos uma amostra baseada na distribuição de treino, como mostra a Figura 76.

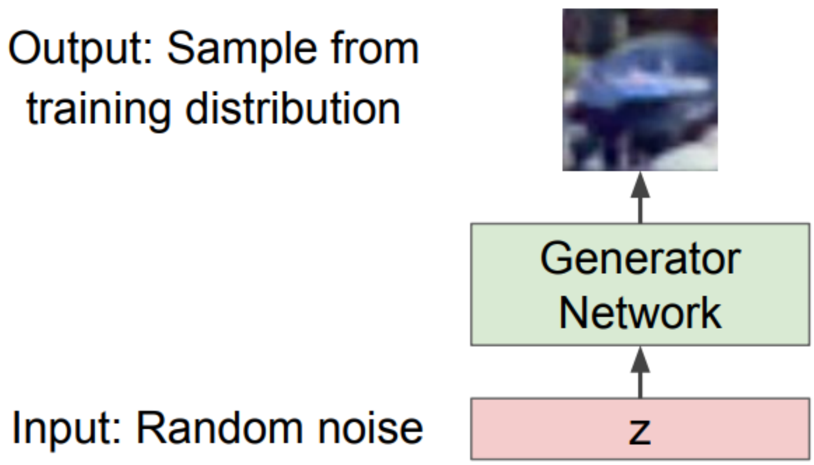


Figura 76

A seguir iremos descever o processo de treino de GANs.

22.5.1 Treinamento: Jogo de dois jogadores

A forma que iremos treinar e fazer com que o nosso modelo aprenda a geração de dados é através da visualização desse problema como um jogo de dois jogadores. Existem dois jogadores: a rede neural geradora e a rede neural discriminadora.

A rede neural geradora (ou *Generator network*) tenta enganar o discriminador gerando imagens de aparência real. E a rede neural disciminadora (ou *Discriminator network*) tenta distinguir imagens reais e falsas. A representação desse "jogo" mostrada a seguir na Figura 77.

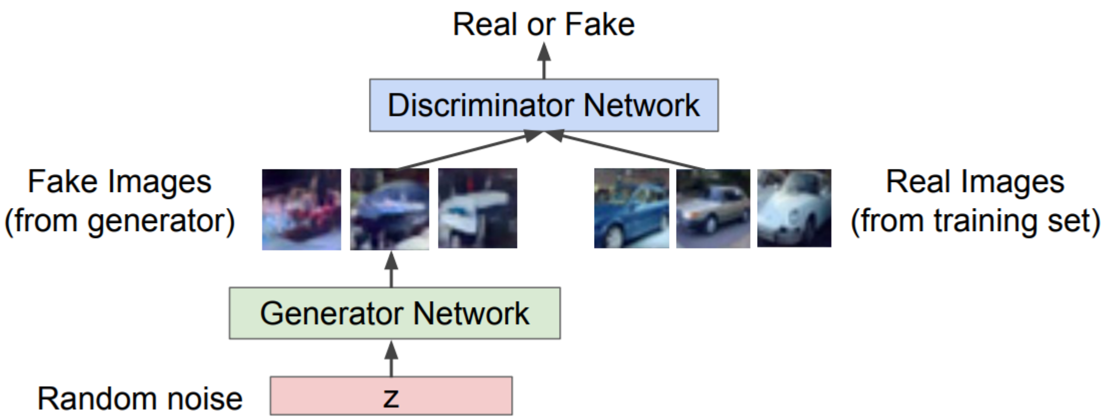


Figura 77: A partir de uma imagem inicializada aleatoriamente z, uma rede neural gerado, representada em verde, gera imagens falsas, porém muito semelhantes às reais e uma rede neural discriminadora, representada em azul, tenta distinguir se as imagens dadas como entrada para essa rede neural são falsas ou reais.

Utilizamos o algoritmo Minimax para realizar o treinamento de uma GAN, cuja função principal está descrita a seguir.

$$\min_{\theta_g} \max_{\theta_d} \left[\mathbb{E}_{x \sim p_{data}} log \underbrace{D_{\theta_d}(x)}_{\substack{\text{Saída do} \\ \text{discriminador} \\ \text{para dados} \\ \text{reais } x}} + \mathbb{E}_{z \sim p_z} log(1 - \underbrace{D_{\theta_d}(G_{\theta_g}(z)))}_{\substack{\text{Saída do} \\ \text{discriminador} \\ \text{para dados} \\ \text{falsos gerados} G(z)}} \right]$$

Com essa equação, desejamos maximizar o objetivo do discriminador θ_d, de forma que $D(x)$ é próximo de 1 (imagem real) e $D(G(z))$ é próximo de 0 (imagem falsa). E desejamos minimizar o objetivo do gerador θ_g de forma que $D(G(z))$ é próximo de 1 (discriminador é enganado a pensar que G(z) é real).

Com isso, utilizamos métodos de maximizar e minimizar os discriminadores e geradores, respectivamente. Usamos o método de gradiente ascendente para o discriminador

$$\max_{\theta_d} \left[\mathbb{E}_{x \sim p_{data}} log D_{\theta_d}(x) + \mathbb{E}_{z \sim p_z} log(1 - D_{\theta_d}(G_{\theta_g}(z))) \right]$$

e o método de gradiente descendente para minimizar a perda do gerador, porém, como desejamos "enganar" o discriminador, também podemos usar gradiente ascendente para o gerador

$$\max_{\theta_g} \mathbb{E}_{z \sim p_z} log(1 - D_{\theta_d}(G_{\theta_g}(z)))$$

Com isso, podemos descrever o seguinte algoritmo para o treinamento de GANs:

Após o treinamento, podemos usar a rede neural geradora para gerar novas imagens. Podemos perceber na Figura 78 alguns exemplos de imagens geradas por uma GAN.

Algorithm 13 Algoritmo de treino de uma GAN

procedure
    for numero de iterações de treino **do**
        for $i = 1$ **to** k **do**
            Crie amostras *minibatch* de m amostras inicializadas aleatoriamente $\{z^{(1)}, ..., z^{(m)}\}$ a partir de $p_g(z)$
            Crie amostras *minibatch* de m exemplos $\{x^{(1)}, ..., x^{(m)}\}$ a partir da geração de dados pela distribuição $p_{data}(x)$
            Atualize o discriminador pelo gradiente ascendente
            $\nabla_{\theta_d} \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left[log D_{\theta_d}(x^{(i)}) + log(1 - D_{\theta_d}(G_{\theta_g}(z^{(i)}))) \right]$
        end for
        Crie amostras *minibatch* de m amostras inicializadas aleatoriamente $\{z^{(1)}, ..., z^{(m)}\}$ a partir de $p_g(z)$
        Atualize o gerador pelo gradiente ascendente
        $\nabla_{\theta_g} \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} log(D_{\theta_d}(G_{\theta_g}(z^{(i)})))$
    end for
end procedure

Figura 78: Imagens geradas a partir do treinamento de uma GAN. As imagens contornadas em amarelo são imagens do conjunto de treino e, portanto as imagens da mesma linha são as vizinhas mais próximas.

22.5.2 GANs através de CNNs

GANs implementadas através de CNNs, ou também chamadas de *Deep Convolutional GANs* são redes neurais com filtros de convolução, como pode-se perceber na Figura 79

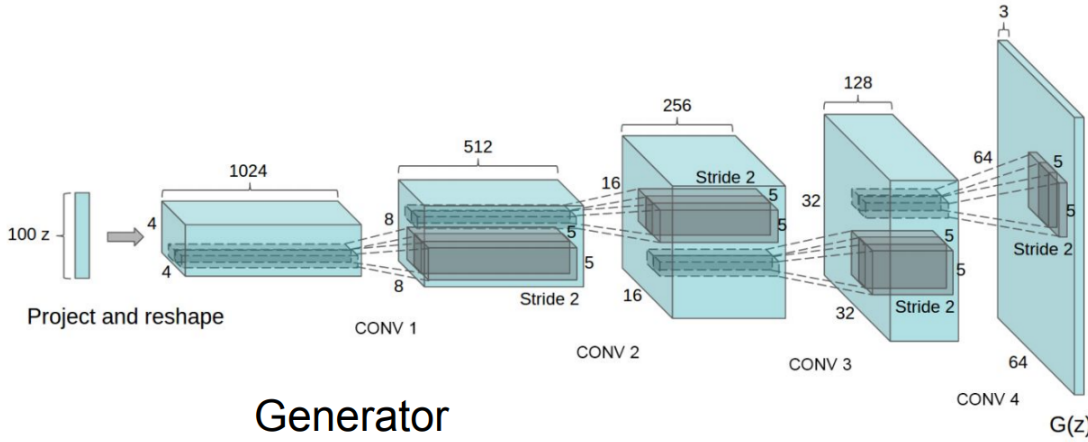


Figura 79: Representação de uma *Deep Convolutional GAN* no processo de geração de uma imagem. Percebe-se o aumento de resolução atarvés de camadas de convolução utilizando *upsampling*.

Com esse tipo de arquitetura, podemos gerar imagens de alta qualidade, como pode-se perceber na Figura 80.

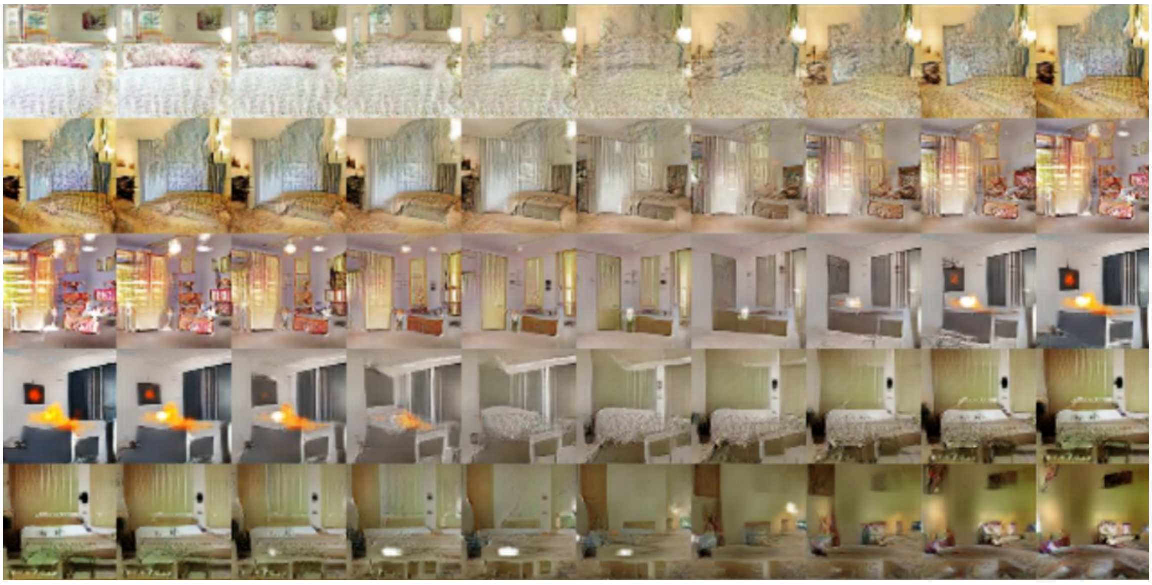


Figura 80: Exemplos de imagens geradas por *Deep Convolutional GANs*. Percebe-se que as imagens geradas são de alta resolução.

23 Busca de Monte Carlo

24 *Deep Q-Learning*

Referências

[1] Vinod Nair Alex Krizhevsky e Geoffrey Hinton. *THE CIFAR-10 DATABASE*. https://www.cs.toronto.edu/~kriz/cifar.html. 2012.

[2] Kian Katanforoosh Andrew Ng. *Stanford University CS230 Deep Learning*. URL: http://cs230.stanford.edu/.

[3] Richard Bellman. *Dynamic Programming*. Dover Publications, 1957. ISBN: 9780486428093.

[4] Emma Brunskill. *Stanford University CS234 Reinforcement Learning*. URL: http://web.stanford.edu/class/cs234/index.html.

[5] John Hewitt Christopher Manning. *Stanford University CS224n: Natural Language Processing with Deep Learning*. URL: http://web.stanford.edu/class/cs224n/index.html#schedule.

[6] Serena Yeung Fei-Fei Li Justin Johnson. *Stanford University CS231n: Convolutional Neural Networks for Visual Recognition*. URL: http://cs231n.stanford.edu/.

[7] Yann LeCun. *THE MNIST DATABASE of handwritten digits*. http://yann.lecun.com/exdb/mnist/. 1998.

[8] Shane Legg e Marcus Hutter. *Universal Intelligence: A Definition of Machine Intelligence*. 2007. arXiv: 0712.3329 [cs.AI].

[9] DeepMind & University College London. *Reinforcement learning course 2020*. URL: https://www.youtube.com/playlist?list=PLqYmG7hTraZBKeNJ-JE_eyJHZ7XgBoAyb.

[10] Tom M. Mitchell. *Machine Learning*. New York: McGraw-Hill, 1997. ISBN: 978-0-07-042807-2.

[11] Andrew Ng. *Stanford University CS229 Machine Learning*. URL: http://cs229.stanford.edu/.

[12] Andrew Ng. *Stanford University Machine Learning*. URL: https://www.coursera.org/learn/machine-learning?.

[13] Aaron van den Oord et al. *WaveNet: A Generative Model for Raw Audio*. arxiv:1609.03499. 2016. URL: http://arxiv.org/abs/1609.03499.

[14] Alec Radford et al. "Language Models are Unsupervised Multitask Learners". Em: (2019).

[15] A. L. Samuel. "Some Studies in Machine Learning Using the Game of Checkers". Em: *IBM Journal of Research and Development* 3.3 (1959), pp. 210–229. DOI: 10.1147/rd.33.0210.

[16] David Silver et al. "Mastering the game of Go with deep neural networks and tree search". Em: *Nature* 529 (2016), pp. 484–503. URL: http://www.nature.com/nature/journal/v529/n7587/full/nature16961.html.

[17] Sander Dieleman Viorica Patraucean James Martens Marta Garnelo Felix Hill Alex Graves Andriy Mnih Mihaela Rosca Irina Higgins Jeff Donahue Iason Gabriel Chongli Qin Thore Graepel Wojtek Czarnecki. *DeepMind & University College London Deep learning lecture series 2020*. URL: https://www.youtube.com/playlist?list=PLqYmG7hTraZCDxZ44o4p3N5Anz3lLRVZF.