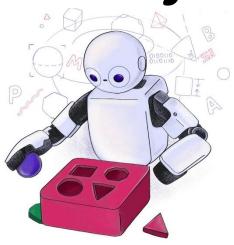
T320 - Introdução ao Aprendizado de Máquina II:

Redes Neurais Artificiais (Parte II)

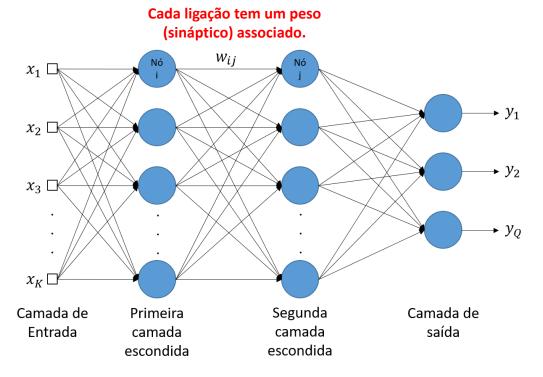




Felipe Augusto Pereira de Figueiredo felipe.figueiredo@inatel.br

Recapitulando

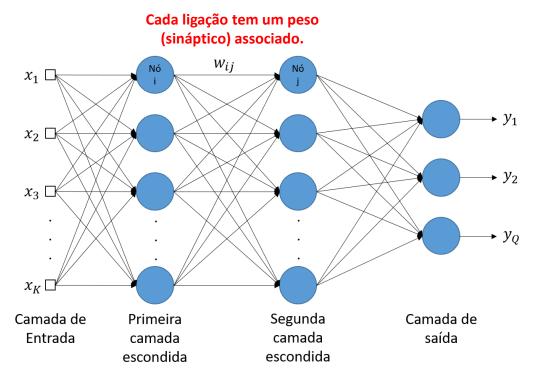
- Fizemos uma analogia entre um neurônio e os modelos de McCulloch e Pitts e do Perceptron.
- Vimos a evolução do modelo de McCulloch e Pitts para o Perceptron.
- Aprendemos suas características, diferenças e como ambos funcionam.
- Verificamos que um Perceptron é semelhante ao regressor logístico.
- Constatamos que um *único* Perceptron não é capaz de separar classes não-lineares, como, por exemplo, o problema da lógica XOR.
- Porém, quando combinamos vários deles, conseguimos criar um separador não-linear.
- Neste tópico, veremos que esta união de Perceptrons origina o que chamamos de *redes neurais artificiais (RNAs)*.



- Nó, unidade ou neurônio.
- → Ligação entre i-ésimo e j-ésimo nó.

 W_{ij} Peso da ligação entre *i*-ésimo e *j*-ésimo nó.

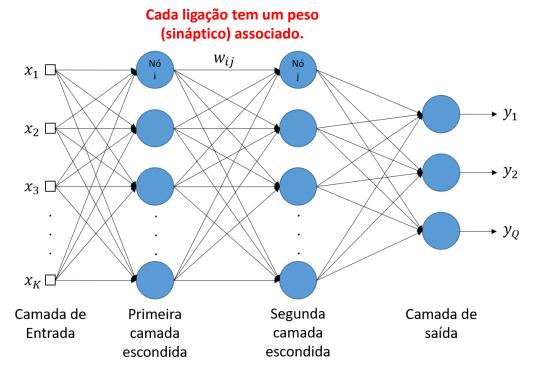
- Uma rede neural nada mais é do que uma combinação de neurônios conectados entre si através de ligações direcionadas (ou seja, as conexões têm uma direção associada).
 - Neurônios também são chamados de nós ou unidades.
 - Cada ligação entre nós possui um peso (sináptico) associado.
- As propriedades da rede neural são determinadas por sua arquitetura, i.e., como os neurônios estão conectados, quantidade neurônios e de camadas escondidas, função de ativação, etc.



- Algumas das limitações dos perceptrons (e.g., classificação apenas de classes linearmente separáveis) podem ser superadas adicionando-se camadas intermediárias de perceptrons.
- As camadas intermediárias são também chamadas de ocultas ou escondidas.

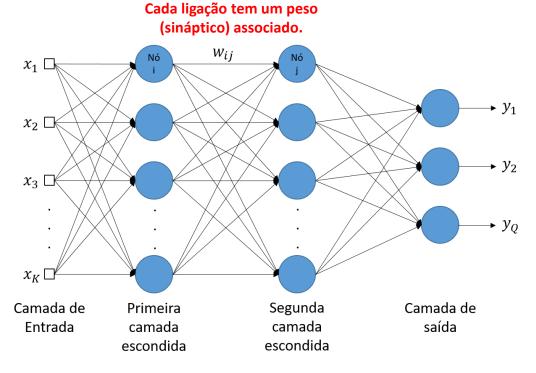
- Nó, unidade ou neurônio.
- → Ligação entre i-ésimo e j-ésimo nó.

 W_{ij} Peso da ligação entre *i*-ésimo e *j*-ésimo nó.



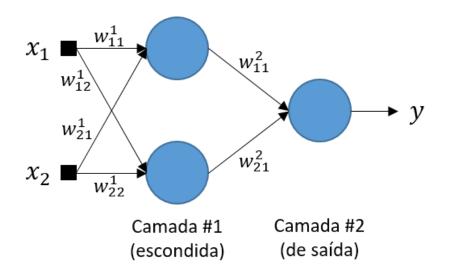
- Nó, unidade ou neurônio.
- → Ligação entre *i*-ésimo e *j*-ésimo nó.
- W_{ij} Peso da ligação entre *i*-ésimo e *j*-ésimo nó.

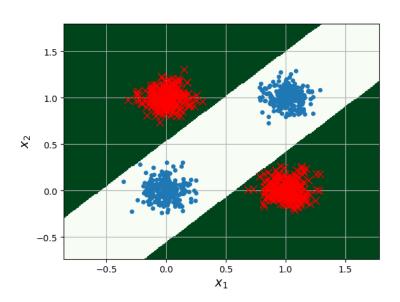
- A rede ao lado é do tipo *densamente* conectada e de alimentação direta.
 - Cada uma das saídas de uma camada se conecta a todos os nós da camada seguinte através de pesos sinápticos.
 - Os dados fluem através da rede em uma única direção, da camada de entrada para a camada de saída, sem ciclos ou loops de retroalimentação.
- Essa rede é chamada de perceptron de múltiplas camadas (do inglês, Multilayer Perceptron - MLP) ou de rede densamente conectada (de alimentação direta) (do inglês, Dense Neural Network - DNN).



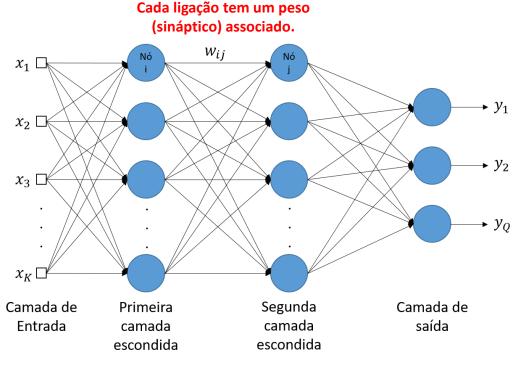
- Nó, unidade ou neurônio.
- → Ligação entre i-ésimo e j-ésimo nó.
- W_{ij} Peso da ligação entre *i*-ésimo e *j*-ésimo nó.

- As RNAs são o coração do *deep learning* ou aprendizado profundo.
- O termo "*profundo*" vem fato de que essas redes podem possuir *muitas* camadas ocultas.
- Em geral, quando uma RNA tem duas ou mais camadas ocultas, ela pode ser chamada de rede neural profunda (ou em inglês, Deep Neural Network - DNN).
- A rede MLP ao lado possui duas camadas ocultas e, portanto, poderia ser chamada de DNN.



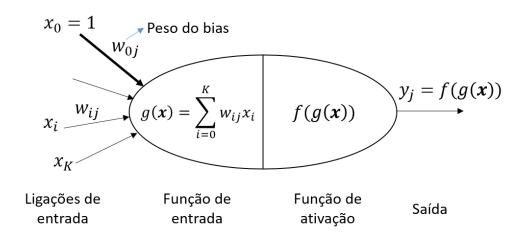


- Em particular, uma MLP com uma camada oculta com dois nós e uma camada de saída com um nó pode resolver o problema da lógica XOR.
- Lembrem-se que um único *perceptron* não é capaz de realizar essa tarefa.
- Os dois nós da camada oculta aprendem separadores lineares que são combinados para obter a separação não linear resultante.



- Nó, unidade ou neurônio.
- → Ligação entre i-ésimo e j-ésimo nó.
- $W_{i,i}$ Peso da ligação entre *i*-ésimo e *j*-ésimo nó.

- Considerando qualquer dois nós da rede, a ligação do i-ésimo nó para o jésimo nó é feita através do peso w_{i i}.
- A ligação propaga o sinal de saída do iésimo nó para o j-ésimo nó.
 - O *sinal de saída* do *i*-ésimo nó é denotado por x_i .
- O valor do *peso* determina a *força* e o *sinal* da *ligação*.
- A ligação pode ser excitatória ou inibitória dependendo do sinal do peso.

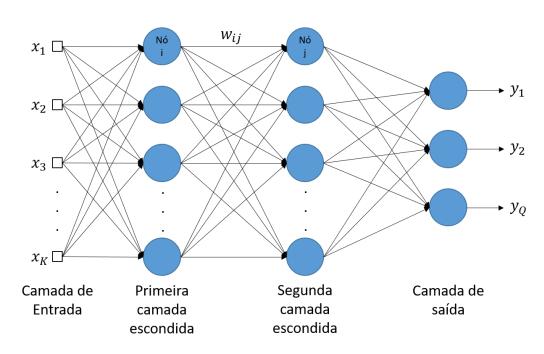


- Cada nó tem a entrada x_0 (i.e., o atributo de bias) sempre com valor igual a 1 e um peso associado w_{0i} , chamado de peso de bias.
 - Ou seja, a entrada x_0 não está conectada a nenhum outro nó.
- O j-ésimo $n\acute{o}$ calcula a $soma\ ponderada$ de suas entradas, x_i

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i=0}^K w_{ij} x_i = \mathbf{w}^T \mathbf{x},$$

e, em seguida, aplica uma função de ativação (i.e., de limiar), f(.), à soma para gerar sua saída

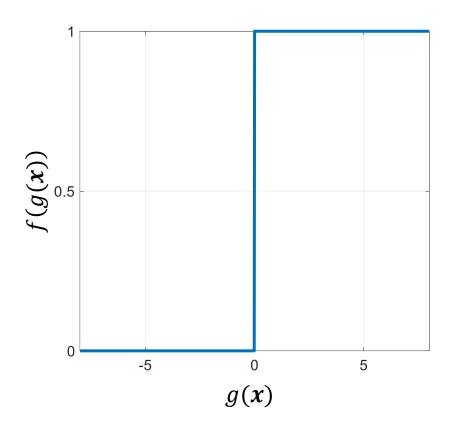
$$y_i = f(g(\mathbf{x})).$$



- Nó, unidade ou neurônio.
- → Ligação entre i-ésimo e j-ésimo nó.
- $W_{i,i}$ Peso da ligação entre *i*-ésimo e *j*-ésimo nó.

- Existem vários tipos de *funções de ativação* que podem ser utilizadas pelos *nós* de uma rede neural.
- Cada camada pode usar funções de ativação diferentes.
- Porém, em geral, todos os nós de uma camada usam a mesma função de ativação.

Funções de ativação



- Devido a suas características, não se utiliza a função degrau como função de ativação em redes neurais.
 - Derivada sempre igual a zero, exceto na origem, onde ela é indeterminada.
- Até o surgimento das redes neurais
 profundas, a regra era utilizar as funções
 logística ou tangente hiperbólica, que são
 versões suavizadas da função degrau.
 - Essas funções são contínuas e possuem derivada definida e diferente de 0 em todos os pontos.

Função logística

 A saída de um nó com função de ativação logística (ou sigmoide) tem a seguinte expressão

$$y_j = f(g(\mathbf{x})) = \frac{1}{1 + e^{-g(\mathbf{x})}},$$

onde g(x) é a combinação linear das entradas do nó.

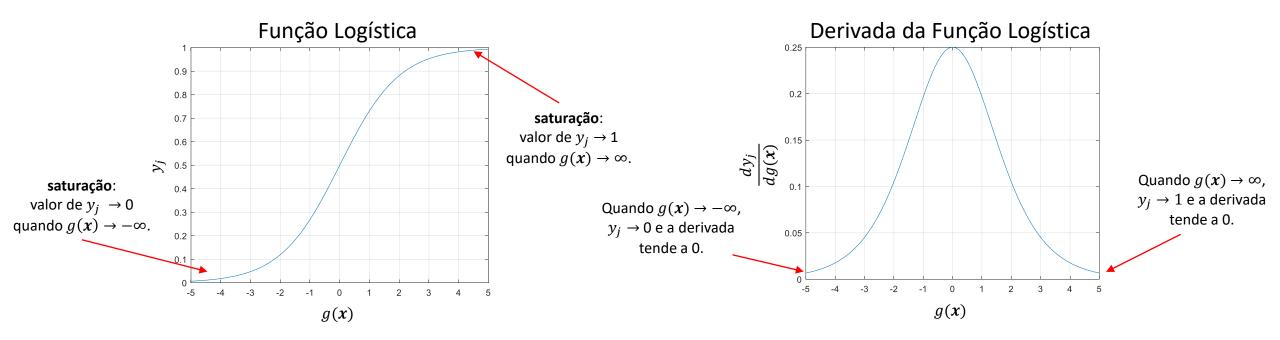
• Sua derivada é dada por

$$\frac{dy_j}{dg(\mathbf{x})} = \frac{df(g(\mathbf{x}))}{dg(\mathbf{x})} = y_j(1 - y_j) \ge 0.$$

• A derivada será importante durante o processo de aprendizado da rede neural.

Função logística e sua derivada

• Percebam que o valor da derivada sempre será menor do que 1, sendo no máximo igual a 0.25 quando g(x)=0.



Função tangente hiperbólica

 A saída de um nó com função de ativação tangente hiperbólica tem sua expressão dada por

$$y_j = f(g(\mathbf{x})) = \tanh(g(\mathbf{x})) = \frac{e^{g(\mathbf{x})} - e^{-g(\mathbf{x})}}{e^{g(\mathbf{x})} + e^{-g(\mathbf{x})}}.$$

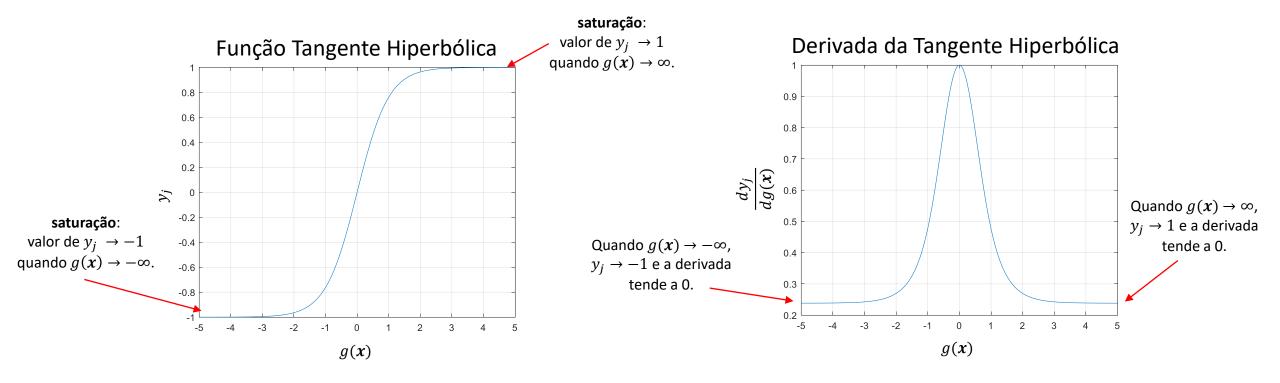
onde g(x) é a combinação linear das entradas do nó.

• Sua derivada é dada por

$$\frac{dy_j}{dg(\mathbf{x})} = \frac{df(g(\mathbf{x}))}{dg(\mathbf{x})} = 1 - \tanh^2(g(\mathbf{x})) \ge 0.$$

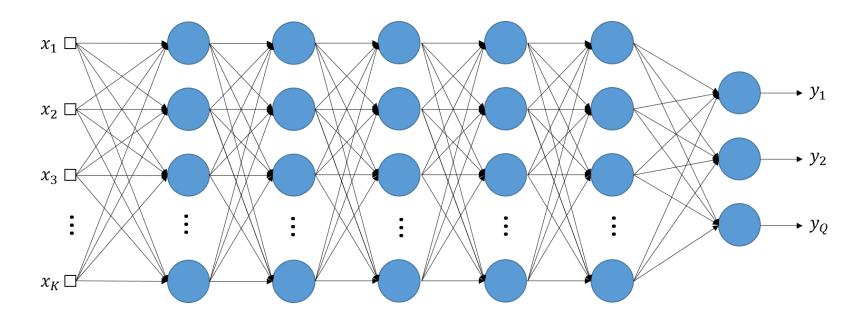
Função tangente hiperbólica e sua derivada

• A derivada é no máximo igual a 1 exatamente quando quando g(x) = 0, sendo menor do que 1 para todos os outros valores de g(x).



Na sequência, veremos que esses valores de derivadas menores do que 1 causam um problema no aprendizado de redes com muitas camadas, i.e., redes profundas.

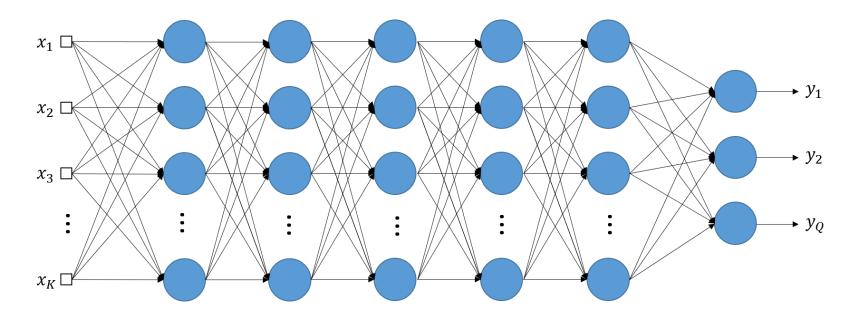
• É um problema encontrado quando treinamos *redes neurais profundas*, ou seja, com muitas camadas ocultas, com *métodos de aprendizado baseados no gradiente descendente* e nós usando *funções de ativação sigmoide ou tangente hiperbólica*.



- Ocorre devido à natureza do *algoritmo de retropropagação*, que é usado para treinar a rede neural.
 - Para atualizar os pesos de nós das camadas ocultas, calcula-se a derivada do erro de saída em relação àquele peso e, para isso, usamos a regra da cadeia.
 - Ou seja, o algoritmo propaga o erro de saída para as camadas ocultas usando a regra da cadeia.



• Em suma, problema da dissipação do gradiente faz com que o vetor gradiente se torne cada vez menor conforme ele é calculado para as camadas próximas à entrada da rede, levando a uma atualização muito pequena ou até inexistente dos pesos destas camadas.



Regra da cadeia

- Durante o treinamento, para *atualizar os pesos dos nós de cada camada* da rede, o *algoritmo de retropropagação* calcula os vetores gradiente em relação aos pesos dessas camadas através da *regra da cadeia*.
- Vejamos o exemplo abaixo com 3 nós e pesos das ligações iguais a 1.
 - **OBS**.: As funções f(.), g(.), e(h(.)) podem ser interpretadas como sendo as funções de ativação dos nós.

$$x \longrightarrow h(.) \xrightarrow{h(x)} g(.) \xrightarrow{g(h(x))} f(.) \longrightarrow y = f(g(h(x)))$$

• Como calculamos a derivada de y em relação à x?

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial f(g(h(x)))}{\partial x} = \frac{\partial f(g(h(x)))}{\partial g(h(x))} \frac{\partial g(h(x))}{\partial h(x)} \frac{\partial h(x)}{\partial x}.$$

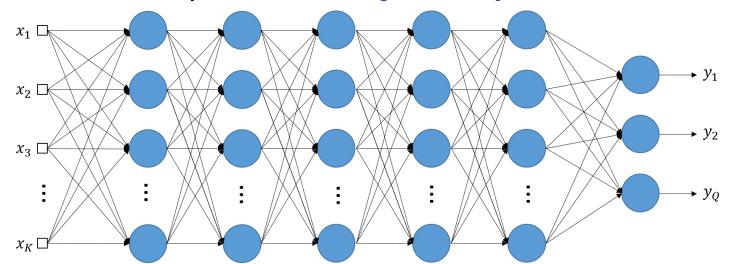
Regra da cadeia

• Em outras palavras, devido à regra da cadeia, o vetor gradiente para a atualização dos pesos de uma dada camada da rede inclui o produto das derivadas das funções de ativação dos nós desde a camada de saída até a camada desejada.

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial f(g(h(x)))}{\partial x} = \frac{\partial f(g(h(x)))}{\partial g(h(x))} \frac{\partial g(h(x))}{\partial h(x)} \frac{\partial h(x)}{\partial x}.$$

- Lembrem-se que as *funções de ativação*, como *tangente hiperbólica* ou *logística*, têm derivadas no intervalo de 0 até 1.
- Portanto, a multiplicação de vários termos menores do que 1 tende a 0 conforme o número de camadas da rede aumenta.

- Em uma rede com M camadas, a retropropagação tem o efeito de multiplicar até M valores pequenos (i.e., derivadas parciais das funções de ativação) para calcular os vetores gradiente das primeiras camadas.
- O que significa que o *gradiente diminui exponencialmente com M*.
- Assim, os nós das camadas iniciais aprendem muito mais lentamente do que os nós das camadas finais, pois o vetor gradiente daquelas camadas é muito pequeno, fazendo com que a atualização dos pesos também seja pequena.



Dissipação do gradiente

$$x(i) = \underbrace{\begin{array}{c} 1 \\ w_1 \\ f(.) \end{array}}_{1} \underbrace{\begin{array}{c} 2 \\ f(.) \\ \end{array}}_{2} \hat{y}(i)$$

Considerações:

- 2 x neurônios com função de ativação sigmoide, f(.).
- $g_1 = xw_1 \rightarrow \text{entrada}$ (i.e., ativação) do primeiro neurônio.
- $z_1 = f(xw_1) \rightarrow \text{saída do primeiro neurônio.}$
- $g_2 = z_1 w_2 = f(xw_1)w_2 \rightarrow \text{entrada (i.e., ativação) do segundo neurônio.}$
- $\hat{y} = f(f(xw_1)w_2) \rightarrow \text{saida do segundo neurônio.}$
- **Objetivo**: minimizar o erro quadrático médio, $J_e = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (\hat{y}(i) y(i))^2$.

Dissipação do gradiente

• As *regras de atualização* dos dois pesos são dadas por

$$w_2 = w_2 - \alpha \frac{\partial J_e}{\partial w_2},$$

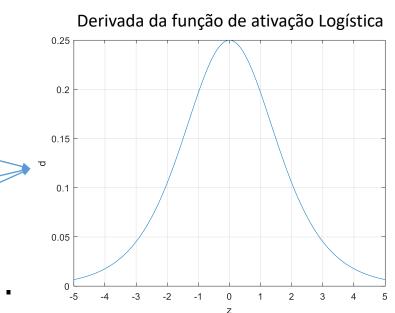
$$w_1 = w_1 - \alpha \frac{\partial J_e}{\partial w_1}.$$

• Usando a regra da cadeia, obtemos as derivadas $\frac{\partial J_e}{\partial w_1}$ e $\frac{\partial J_e}{\partial w_2}$

$$\frac{\partial J_e}{\partial w_2} = \frac{\partial J_e}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial g_2} \frac{\partial g_2}{\partial w_2},$$

$$\frac{\partial J_e}{\partial w_1} = \frac{\partial J_e}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial g_2} \frac{\partial g_2}{\partial z_1} \frac{\partial z_1}{\partial g_1} \frac{\partial g_1}{\partial w_1}.$$

Dissipação do gradiente



- A derivada da função sigmoide é no máximo igual a 0.25.
- Assim, por exemplo, a primeira camada de uma rede neural com M camadas, terá as derivadas parciais da função de erro em relação a seus pesos compostas pela multiplicação de M termos no máximo iguais a 0.25.
- Isso faz com que as primeiras camadas aprendam lentamente ou nem aprendam, pois têm derivadas muito pequenas, tendendo a zero.

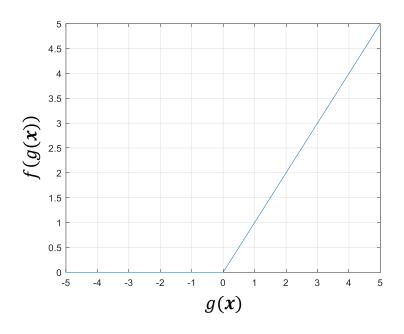
Explosão do gradiente

$$x(i) = \underbrace{\begin{array}{c} w_1 \\ f(.) \end{array}}^{1} \underbrace{\begin{array}{c} w_2 \\ f(.) \end{array}}^{2} \underbrace{\begin{array}{c} \partial g_1 \\ \partial z_1 \end{array}} = \underbrace{\begin{array}{c} \partial f(xw_1)w_2 \\ \partial f(xw_1) \end{array}} = w_2$$

$$\frac{\partial J_e}{\partial w_1} = \underbrace{\begin{array}{c} \partial J_e \\ \partial \hat{y} \end{array}}^{1} \underbrace{\begin{array}{c} \partial g_2 \\ \partial g_2 \end{array}}^{1} \underbrace{\begin{array}{c} \partial g_1 \\ \partial g_1 \end{array}}^{2} \underbrace{\begin{array}{c} \partial g_1 \\ \partial g_1 \end{array}}$$

- Usando ReLUs, reduzimos o problema do desaparecimento do gradiente.
- Porém, caso os pesos sejam inicializados (em geral, de forma aleatória) com valores maiores do que 1, haverá a multiplicação de vários valores assim, resultando em valores de gradiente muito grandes.
- Consequentemente, os pesos da rede podem sofrer atualizações extremamente grandes, o que leva a instabilidades numéricas e a um treinamento ineficaz ou até mesmo à divergência.

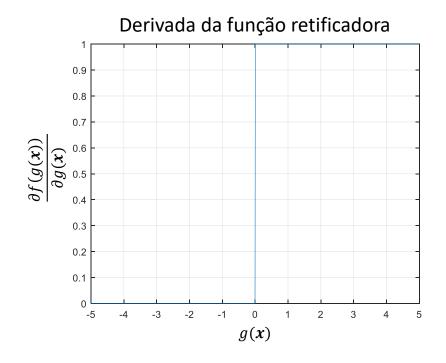
Função de ativação retificadora



$$\hat{y} = f(g(\mathbf{x})) = \max(0, g(\mathbf{x}))$$

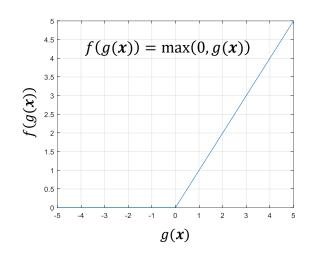
- Com o surgimento das redes neurais profundas, e, consequentemente, do problema do desaparecimento do gradiente, uma outra função de ativação, conhecida como Rectified Linear Unit (ReLU), passou a ser a bastante utilizada.
- É uma função não-linear onde sua saída é igual 0 quando $g(x) \le 0$ e o próprio g(x) quando g(x) > 0.
- É uma das funções mais amplamente utilizadas em redes neurais.

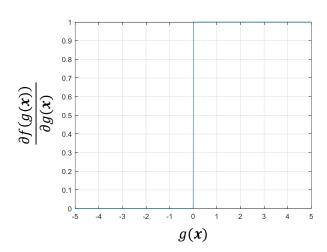
Função de ativação retificadora



- Suas principais *vantagens* são a sua *simplicidade e eficiência computacional*.
 - Ela e sua derivada são mais rápidas de se calcular do que as funções logística e tangente hiperbólica.
- Além disso, ajuda a *minimizar o problema* do desaparecimento de gradiente, pois sua derivada é igual a 1 para g(x) > 0.
- Sua derivada é dada por $\frac{dy_j}{dg(x)} = \frac{df(g(x))}{dg(x)} = \begin{cases} 0, \text{ se } g(x) < 0 \\ 1, \text{ se } g(x) > 0 \end{cases}$
- A derivada é indeterminada para g(x) = 0.

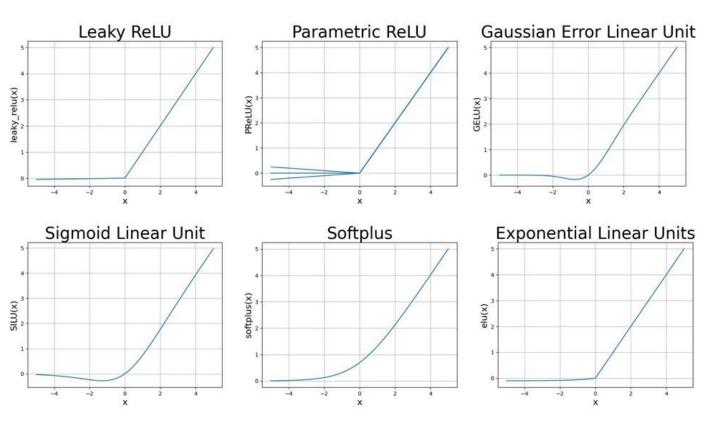
Função de ativação retificadora





- Uma desvantagem é que ela causar o problema conhecido como *ReLU agonizante*.
- Esse problema ocorre durante o treinamento da rede, quando a ativação do nó, g(x), é negativa.
- Isso faz com que sua saída e, consequentemente, a derivada parcial da função de ativação sejam iguais a 0.
- Quando isso ocorre, o *nó não tem seus pesos atualizados* durante o treinamento, *permanecendo inalterados*.

Variantes da função de ativação retificadora



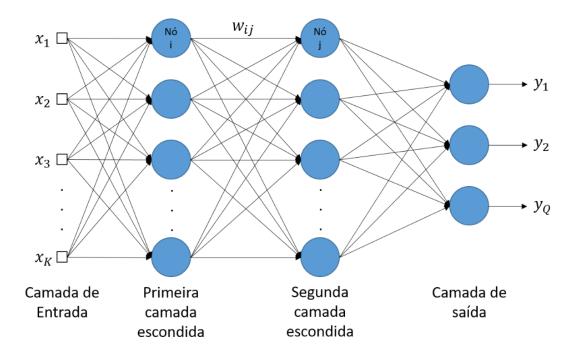
- Para resolver o problema das *ReLUs agonizantes*, usa-se variantes da função ReLU que possuam gradiente diferente de zero para g(x) < 0, como, por exemplo,
 - Leaky ReLU,
 - Parametric ReLU (PReLU),
 - Gaussian Error Linear Unit (GELU),
 - etc.

Outras formas de se minimizar a dissipação e a explosão do gradiente

- Além do uso de funções de ativação ReLU ou de suas variantes, outras formas de se minimizar esses problemas são:
 - Inicialização apropriada dos pesos: garante que as variâncias das ativações permaneça a mesma ao longo de todas as camadas. Isso garante que o gradiente retropropagado não tenha multiplicações com valores muito pequenos ou muito grandes em qualquer camada, ajudando a mitigar ambos os problemas.
 - Normalização de batch: padroniza as ativações das camadas da rede e, na sequência, as desloca e escalona, mantendo-as dentro de intervalos que minimizam ambos os problemas.
 - Poda do gradiente: *limita (poda) os valores dos gradientes* durante o treinamento para que eles excedam algum limite pré-definido, mitigando apenas o problema da explosão do gradiente.

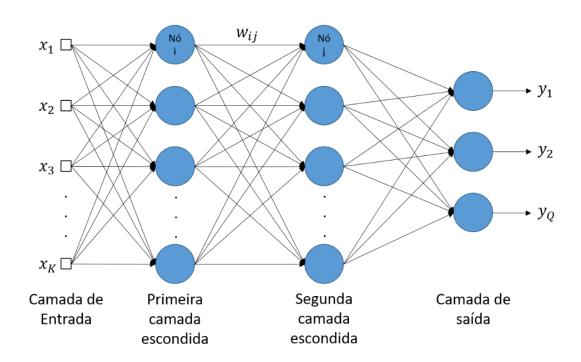
Tarefa

• Quiz: "T320 - Quiz — Redes Neurais Artificiais (Parte III)" que se encontra no MS Teams.



- Nó, unidade ou neurônio.
- → Ligação entre i-ésimo e j-ésimo nó.
- W_{ij} Peso da ligação entre *i*-ésimo e *j*-ésimo nó.

- Os neurônios de uma rede neural podem ser conectados de forma acíclica ou cíclica.
- O termo *acíclico* se refere a conexões sem realimentação.
- Isso significa que a *informação flui em uma única direção*, da camada de entrada para a camada de saída.
- A rede ao lado tem conexões acíclicas e é conhecida como rede densa de alimentação direta.



• Esse tipo de rede representa uma função de suas entradas e pesos atuais y = f(x; W),

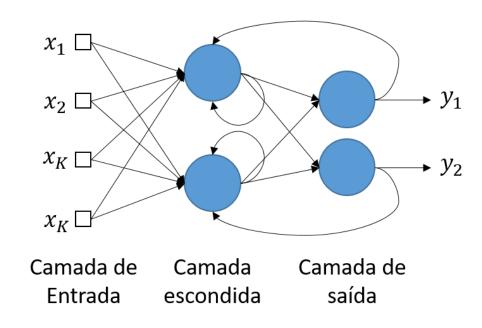
onde W é a matriz contendo todos os pesos da rede.

• Portanto, este tipo de rede *não possui* um estado interno, ou seja, memória.

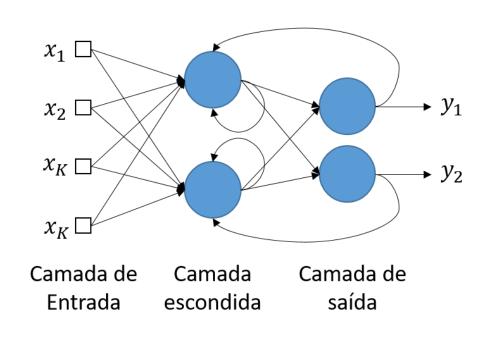
Nó, unidade ou neurônio.

→ Ligação entre *i*-ésimo e *j*-ésimo nó.

 W_{ij} Peso da ligação entre *i*-ésimo e *j*-ésimo nó.

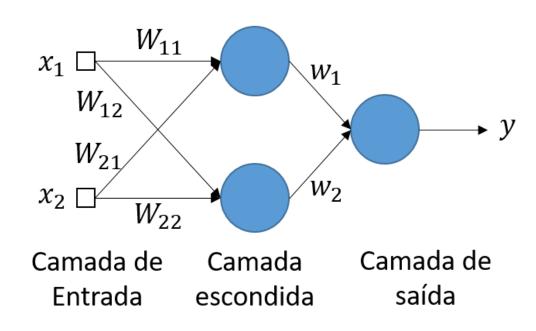


- Já o termo cíclico se refere a conexões que formam ciclos, permitindo a realimentação de informações.
- Redes com esse tipo de conexão são conhecidas como redes recorrentes ou redes com realimentação.
- A figura mostra que os nós da rede têm conexões em duas direções, desta forma, o sinal percorre a rede nas direções direta e reversa.



- Esse tipo de rede forma um sistema dinâmico que pode atingir um estado estável, exibir oscilações ou mesmo um comportamento caótico e divergir.
- Além disso, a saída da rede é função de suas entradas e pesos atuais e de seus estados anteriores, ou seja, de saídas anteriores.
- Portanto, redes recorrentes possuem memória.
- Essas redes são úteis em tarefas que envolvem dependências temporais como previsões de séries temporais (e.g., monitoramento de sinais vitais) e processamento de linguagem natural (e.g., conversão de fala em texto).

Aproximação de funções com redes neurais



 A rede MLP da figura ao lado tem sua saída definida por

$$y = f(\mathbf{w}^T f(\mathbf{W}^T \mathbf{x})),$$
 onde $f(.)$ é a **função de ativação** escolhida para todos os nós, $\mathbf{W} = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \end{bmatrix}$ e $\mathbf{w} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix}.$

 Percebam que a saída da rede é dada pelo aninhamento das saídas de funções de ativação não-lineares.

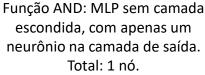
Aproximação de funções com redes neurais

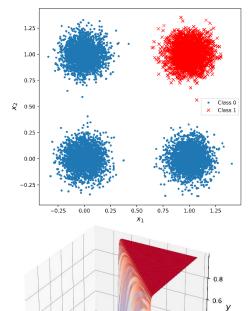
- Portanto, as redes neurais têm a *capacidade de aproximar funções* altamente não-lineares.
- Essa capacidade *depende da sua arquitetura*, incluindo o número de camadas, o número de nós (que corresponde à quantidade de pesos) e as funções de ativação empregadas.
 - A quantidade de pesos de uma rede está associada aos seus graus de liberdade, ou seja, a capacidade da rede de aproximar diferentes tipos de funções.
- Porém, assim como polinômios, que podem aproximar qualquer tipo de função (linear ou não linear) devido a seus graus de liberdade, as redes neurais podem fazer o mesmo, bastando apenas que encontremos sua complexidade ideal, ou seja, sua arquitetura.

Aproximação de funções com redes neurais

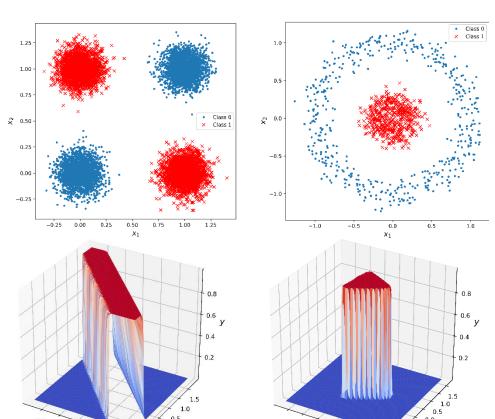
- Por exemplo, uma rede neural com *uma camada oculta* com um número suficientemente grande de nós pode aproximar praticamente qualquer função contínua.
- Com *duas camadas ocultas*, até *funções descontínuas* podem ser *aproximadas*.
- Portanto, dizemos que as redes neurais possuem *capacidade de aproximação universal* de funções.
- Desta forma, as redes neurais podem resolver *problemas de regressão e classificação* e uma grande gama de outros problemas.
- O desafio é encontrar a arquitetura ideal para a aproximação.
- Veremos alguns exemplos desta capacidade de aproximação a seguir.

Aproximação universal de funções em problemas de classificação



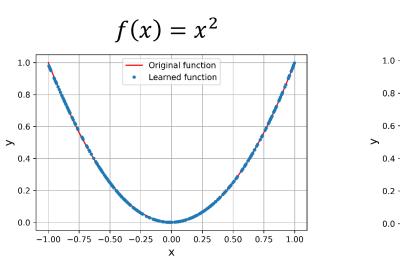


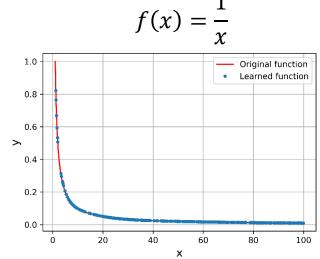
Função XOR: MLP com 1 camada escondida com 2 nós. Total: 3 nós.

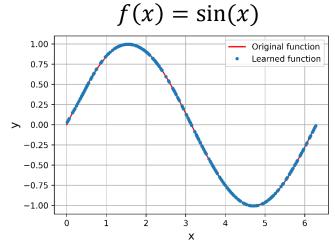


- Círculos concêntricos: MLP com 1 camada escondida com 4 nós. Total: 5 nós.
- Fig. 1: Um nó aproxima uma função de limiar suave.
- Fig. 2: Combinando duas funções de limiar suave com direções opostas, podemos obter uma função com formato de onda.
- Fig. 3: Combinando duas ondas perpendiculares, nós obtemos uma função com formato triangular.

Aproximação universal de funções em problemas de regressão







- Redes neurais podem também ser usadas para aproximar funções como as mostradas abaixo:
 - $f(x) = x^2, -1 \le x \le 1,$
 - $f(x) = \frac{1}{x}, 1 \le x \le 100,$
 - $f(x) = \sin(x)$, $1 \le x \le 2\pi$.

Tarefas

- Quiz: "T320 Quiz Redes Neurais Artificiais (Parte IV)" que se encontra no MS Teams.
- Exercício Prático: Laboratório #7.
 - Pode ser baixado do MS Teams ou do GitHub.
 - Pode ser respondido através do link acima (na nuvem) ou localmente.
 - Instruções para resolução e entrega dos laboratórios.

Obrigado!

People with no idea about AI, telling me my AI will destroy the world Me wondering why my neural network is classifying a cat as a dog..





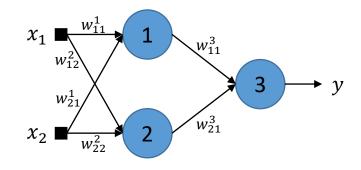


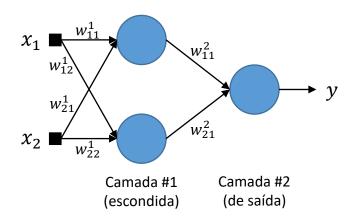


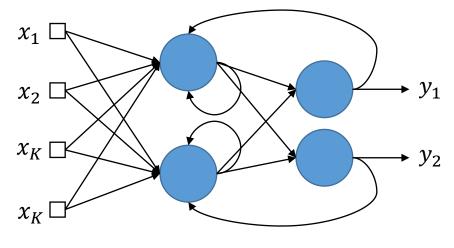




Figuras







Camada de Camada de Entrada escondida saída

O problema da dissipação do gradiente

- Vamos entender esse problema através de um exemplo.
- Dada a simplificação de uma rede neural mostrada na figura abaixo, a qual contém
 - Três nós com as seguintes funções de ativação h(.), g(.) e f(.).
 - Pesos w, 1 e 1, conectando os três nós, respectivamente.
 - Entrada x=1.
- Para atualizarmos o valor do peso w com o gradiente descendente, precisamos encontrar a derivada parcial de y em relação à w.
- Para encontrar a derivada, usamos a regra da cadeia

$$\frac{\partial y}{\partial w} = \frac{\partial f(g(h(w)))}{\partial w} = \frac{\partial f(g(h(w)))}{\partial g(h(w))} \frac{\partial g(h(w))}{\partial h(w)} \frac{\partial h(w)}{\partial w}$$

$$x = 1 \xrightarrow{w} h(.) \xrightarrow{1} g(.) \xrightarrow{g(h(w))} f(.) \longrightarrow y = f(g(h(w)))$$

$$x \longrightarrow h(.) \xrightarrow{h(x)} g(.) \xrightarrow{g(h(x))} f(.) \longrightarrow y = f(g(h(x)))$$