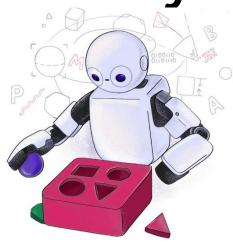
# T320 - Introdução ao Aprendizado de Máquina II:

Redes Neurais Artificiais (Parte III)





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

#### Recapitulando

- Na última aula, fomos apresentados às redes neurais.
- Vimos que elas são formadas por camadas de perceptrons que se conectam através dos pesos sinápticos.
- Aprendemos que as funções de ativação sigmóide e tangente hiperbólica causam o problema do desaparecimento do gradiente, o qual pode ser solucionado usando-se a função retificadora.
- Vimos algumas topologias diferentes de redes neurais.
- E aprendemos que as redes neurais são aproximadoras universais de funções.
- Nesta aula, veremos como as redes neurais aprendem, ou seja, são treinadas.

- Consideramos agora, o processo de otimização, ou seja, de atualização dos pesos sinápticos.
- Assim como vimos anteriormente, o processo de otimização corresponde a um **problema de minimização** de uma **função custo**, J(w), com respeito a um vetor de pesos w.
- Portanto, o problema de aprendizado em redes neurais pode ser formulado como

$$\min_{\mathbf{w}} J(\mathbf{w})$$

- Normalmente, esse processo de otimização é conduzido de forma iterativa, o que dá um sentido mais natural à noção de aprendizado (como um processo gradual).
- Existem vários métodos de otimização aplicáveis, mas, sem dúvida, os mais utilizados são aqueles baseados nas derivadas da função custo, J(w).

- Dentre esses métodos, existem os de *primeira ordem* e os de *segunda ordem*.
- Os métodos de primeira ordem são baseados nas derivadas parciais de primeira ordem da função custo, agrupadas no vetor gradiente:

$$\nabla J(\mathbf{w}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial J(\mathbf{w})}{\partial w_1} \\ \frac{\partial J(\mathbf{w})}{\partial w_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial J(\mathbf{w})}{\partial w_K} \end{bmatrix}$$

 Como já vimos, o gradiente aponta na direção de maior crescimento da função e portanto, caminhar em sentido contrário a ele é uma forma adequada de se buscar iterativamente a minimização da função de custo.

• Desta maneira, temos a seguinte equação de atualização dos pesos

$$\mathbf{w}(k+1) \leftarrow \mathbf{w}(k) - \alpha \nabla J(\mathbf{w}(k)),$$

onde  $\alpha$  é o *passo de aprendizagem* e k é a iteração de atualização.

 Já os métodos de segunda ordem, são baseados na informação trazida pela derivada parcial de segunda ordem da função custo. Essa informação está contida na matriz Hessiana, H:

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{w}) = \nabla^2 J(\boldsymbol{w}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w})}{\partial w_1^2} & \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w})}{\partial w_1 \partial w_2} & \cdots & \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w})}{\partial w_1 \partial w_K} \\ \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w})}{\partial w_2 \partial w_1} & \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w})}{\partial w_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w})}{\partial w_2 \partial w_K} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w})}{\partial w_K \partial w_1} & \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w})}{\partial w_K \partial w_2} & \cdots & \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w})}{\partial w_K^2} \end{bmatrix}.$$

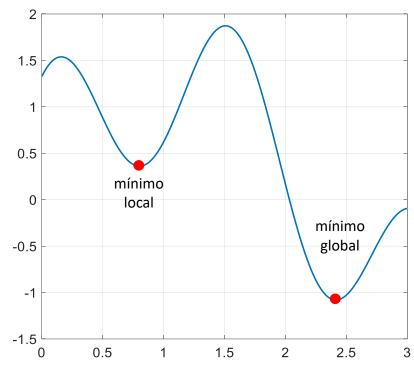
• De posse da *matriz Hessiana*, é possível fazer uma aproximação de Taylor de segunda ordem da *função de custo*, o que leva à seguinte expressão para adaptação dos pesos:

$$\mathbf{w}(k+1) \leftarrow \mathbf{w}(k) - \alpha \mathbf{H}^{-1}(\mathbf{w}(k)) \nabla J(\mathbf{w}(k)).$$

- Essa expressão requer que a *matriz Hessiana* seja *inversível* e *definida positiva* a cada iteração, k, i.e.,  $\mathbf{z}^T H \mathbf{z} > 0 \ \forall \mathbf{z} \neq \mathbf{0}$  (vetor nulo).
- A aproximação de Taylor com informação de segunda ordem é mais precisa que a fornecida por métodos de primeira ordem.
- Portanto, a tendência é que métodos de *segunda ordem* convirjam em menos passos que métodos de *primeira ordem*.
- Entretanto, o cálculo exato da *matriz Hessiana* pode ser complicado em vários casos práticos.
- Porém, há um conjunto de métodos de segunda ordem que evitam esse cálculo direto, como os métodos quase-Newton ou os métodos de gradiente escalonado.

#### Mínimos Locais, Globais, Pontos de Sela e Platôs

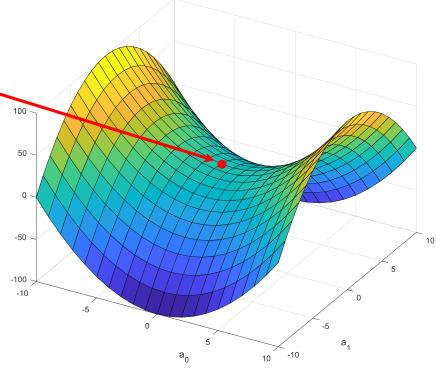
- É importante ressaltarmos que todos esses métodos são métodos de *busca local*, ou seja, eles têm convergência assegurada para *mínimos locais*.
- Para relembrarmos o que é um mínimo local, vejamos a figura ao lado onde existem dois mínimos:
  - Um deles é uma solução ótima em relação a seus vizinhos, ou seja, um *mínimo local*.
  - O outro também é uma solução ótima em relação a seus vizinhos (*mínimo local*), mas também em relação a todo o domínio considerado. Este é um *mínimo global*.
- Por serem formadas pela combinação de vários nós com funções de ativação não-lineares, as superfícies de erro de redes neurais não são convexas, podendo ter vários mínimos locais.



Para muitos problemas envolvendo redes neurais, quase todos os mínimos locais têm um valor muito semelhante ao do mínimo global e, portanto, encontrar um mínimo local já é bom o suficiente.

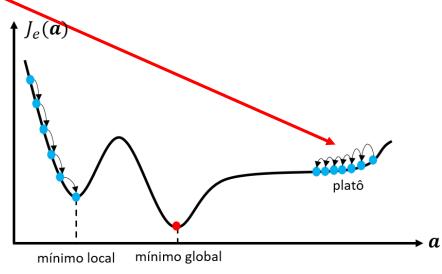
#### Mínimos Locais, Globais, Pontos de Sela e Platôs

- Outra irregularidade que podemos encontrar são os chamados *pontos de sela*:
  - Um ponto que é um mínimo ao longo de um eixo, mas um máximo ao longo de outro.
- O algoritmo de minimização pode passar um longo período de tempo sendo atraído por eles, o que prejudica seu desempenho.
- Para escapar destes pontos, usa-se métodos de segunda ordem ou versões ruidosas do gradiente descendente, como, por exemplo, o Gradiente Descendente Estocástico.



### Mínimos Locais, Globais, Pontos de Sela e Platôs

- Outro tipo de irregularidade são os *platôs*: regiões planas, mas com erro elevado.
  - Como a inclinação nesta região é próxima de zero (gradiente próximo de zero) o algoritmo pode levar muito tempo para atravesá-la.
- Para se escapar destas regiões, usa-se métodos de aprendizado adaptativo como AdaGrad, RMSProp, Adam, etc.
- Portanto, como garantir que o mínimo encontrado é bom o suficiente?
  - Treina-se o modelo várias vezes, sempre inicializando os *pesos aleatoriamente*, com a esperança de que em alguma dessas vezes ele inicialize mais próximo do mínimo global ou de um bom mínimo local.



#### Tarefa

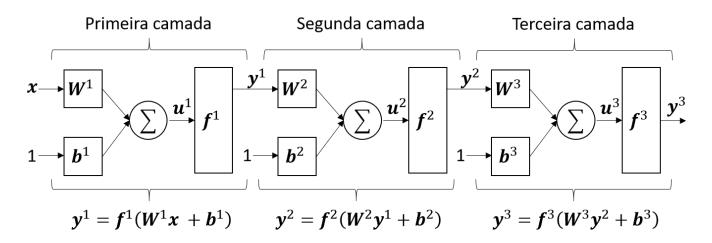
• Quiz: "T320 - Quiz — Redes Neurais Artificiais (Parte V)" que se encontra no MS Teams.

- Conforme nós discutimos anteriormente, os métodos fundamentais de aprendizado para redes neurais são baseados no cálculo das derivadas parciais da função de erro (ou de custo) com relação aos pesos sinápticos.
- Esses métodos buscam, fundamentalmente, encontrar o *conjunto de pesos* que minimize a *medida de erro* escolhida.
- A ideia é encontrar uma maneira de se calcular o vetor gradiente da função de custo com respeito aos pesos sinápticos das várias camadas de uma rede neural.
- Essa tarefa pode parecer óbvia, mas não é o caso.
- Foram necessários 17 anos desde a criação do *Perceptron* até que se "*descobrisse*" uma forma de treinar RNAs.

- Para que entendamos melhor o porquê, nós iremos considerar uma notação que será muito útil a seguir:
  - O peso sináptico,  $w_{i,j}^m$ , corresponde ao j-ésimo peso do i-ésimo nó da m-ésima camada da rede neural e  $W^m$  é a matriz com todos os pesos da m-ésima camada.

  - A ativação,  $u_i^m$ , corresponde à **combinação linear** das entradas do *i*-ésimo **nó** da m-ésima camada da **rede neural** e  $u^m$  é o vetor de ativações com as **combinações lineares** das entradas de todos os nós da m-ésima camada.
  - $f^m(.)$  é a função de ativação da m-ésima camada da rede neural.
  - Com essa notação, obter o *vetor gradiente* significa calcular, de maneira genérica,  $\frac{\partial J(w)}{\partial w_{i,i}^{m}}$ , ou seja, calcular essa derivada para todos os pesos de todos os *nós*.

 A figura abaixo apresenta um exemplo de como uma rede MLP pode ser descrita segundo essa notação.



• O mapeamento realizado pela rede MLP acima é dado por:

$$y^3 = f^3(W^3f^2(W^2f^1(W^1x + b^1) + b^2) + b^3).$$

 Para facilitar nosso trabalho, iremos supor, sem nenhuma perda de generalidade, que a função de custo escolhida é o erro quadrático médio (MSE).

• Nós vamos assumir que a última camada da rede MLP (denotada como a M-ésima camada) tenha uma quantidade genérica,  $N_M$ , de  $\pmb{nós}$ .

$$J(\mathbf{w}) = \frac{1}{N_{\text{dados}} N_{M}} \sum_{n=1}^{N_{\text{dados}}} \sum_{j=1}^{N_{M}} e_{j}^{2}(n)$$

$$= \frac{1}{N_{\text{dados}} N_{M}} \sum_{n=1}^{N_{\text{dados}}} \sum_{j=1}^{N_{M}} \left( d_{j}(n) - y_{j}^{M}(n) \right)^{2},$$

onde  $N_{\rm dados}$  é o número de exemplos e  $d_j(n)$  é o valor desejado da j-ésima saída (rótulo) correspondente ao n-ésimo exemplo de entrada.

- Devemos derivar a *função custo* com respeito aos *pesos*.
- Entretanto, os *pesos não aparecem explícitamente* na expressão de J(w).

- Para fazer com que a dependência dos pesos apareça de maneira clara na expressão acima, nós precisamos recorrer a aplicações sucessivas da regra da cadeia.
- Usando a notação de *Leibniz*, essa regra nos mostra que:

$$\frac{df(g(x))}{dx} = \frac{df(g(x))}{dg(x)} \frac{dg(x)}{dx}.$$

- Por exemplo, considerem que  $f(g(x)) = e^{x^2}$  e que queremos obter  $\frac{df(g(x))}{dx}$ .
- Nós podemos fazer  $g(x) = x^2$  e usar a *regra da cadeia*:

$$\frac{df(g(x))}{dx} = \frac{df(g(x))}{dg(x)} \frac{dg(x)}{dx} = e^{g(x)} 2x = 2xe^{x^2}.$$

$$J(w) = \frac{1}{N_{\text{dados}} N_M} \sum_{n=1}^{N_{\text{dados}}} \sum_{j=1}^{N_M} \left( d_j(n) - y_j^M(n) \right)^2$$

- Agora voltamos à equação do MSE e vemos que as saídas dá última camada da rede aparecem de maneira direta na equação.
- Isso significa que é simples se obter as derivadas com respeito aos pesos da camada de saída.
- Porém, quando precisamos avaliar as derivadas com respeito aos pesos das camadas anteriores, a situação fica mais complexa, pois não existe uma dependência direta.
- Portanto surge a pergunta, como podemos atribuir a cada nó de uma camada anterior da rede sua devida influência na composição dos valores de saída e do erro?
  - Propaga-se o erro calculado na saída da rede neural para suas camadas anteriores até a primeira camada oculta usando-se um algoritmo, baseado na regra da cadeia, conhecido como backpropagation ou retropropagação do erro.

- A seguir, veremos de maneira mais sistemática como a retropropagação do erro é realizada.
- Inicialmente, nós devemos observar um fato fundamental. O cálculo da derivada do MSE com respeito a um peso qualquer é dada por:

$$\frac{\partial J}{\partial w_{i,j}^m} = \frac{\partial \sum_{n=1}^{N_{\text{dados}}} \sum_{j=1}^{N_{M}} e_j^2(n)}{\partial w_{i,j}^m} = \sum_{n=1}^{N_{\text{dados}}} \sum_{j=1}^{N_{M}} \frac{\partial e_j^2(n)}{\partial w_{i,j}^m}.$$

- OBS.1: Operação da derivada parcial é distributiva.
- OBS.2: A divisão pelo número de amostras é omitida pois não afeta a otimização.
- A equação acima mostra que é necessário se calcular o gradiente apenas para o n-ésimo exemplo, pois o gradiente médio será uma média de **gradientes particulares** (ou **locais**) associados a cada exemplo.

## Retropropagação: Algumas noções básicas

• Considerando novamente a derivada geral  $\frac{\partial J}{\partial w_{i,j}^m}$  (i.e., um elemento genérico do gradiente) e usando a **regra da cadeia**, podemos reescrevê-la como:

$$\frac{\partial J}{\partial w_{i,j}^m} = \frac{\partial J}{\partial u_i^m} \frac{\partial u_i^m}{\partial w_{i,j}^m}.$$

- A primeira derivada após a igualdade é a derivada da **função de custo** com respeito à **ativação**,  $u_i^m$ , do i-ésimo **nó** da m-ésima camada.
- Essa grandeza será chamada de **sensibilidade** e é denotada pela letra grega  $\delta$ . Desta forma:

$$\delta_i^m = \frac{\partial J}{\partial u_i^m}.$$

- O termo  $\delta_i^m$  é único para cada  $\emph{no}$  da m-ésima camada.
- O outro termo, por sua vez, varia ao longo das entradas do  $\it n\acute{o}$  em questão. Como adotamos o modelo do  $\it tipo$   $\it perceptron$ , a ativação,  $\it u_i^m$ , é uma  $\it combinação$   $\it linear$  das entradas:

$$u_i^m = \sum_{j \in \text{entradas}} w_{i,j}^m y_j^{m-1} + b_i^m$$

## Retropropagação: Algumas noções básicas

Assim

Saída da camada anterior. 
$$\frac{\partial u_i^m}{\partial w_{i,j}^m} = y_j^{m-1}.$$

• Caso a derivada seja em relação ao termo de **bias**,  $b_i^m$ , teremos o seguinte resultado  $\frac{\partial u_i^m}{\partial b_i^m} = 1.$ 

• Desta forma, vemos que todas as derivadas da função de custo com respeito aos pesos (sinápticos/bias) são produtos de um valor delta,  $\delta_i^m$ , por uma entrada (ou, no caso dos termos de bias, pela unidade).

$$\frac{\partial J}{\partial w_{i,j}^m} = \frac{\partial J}{\partial u_i^m} \frac{\partial u_i^m}{\partial w_{i,j}^m} = \delta_i^m y_j^{m-1},$$

ou, para o beso de bias,  $b_i^m$ 

$$\frac{\partial J}{\partial b_i^m} = \frac{\partial J}{\partial u_i^m} \frac{\partial u_i^m}{\partial b_i^m} = \delta_i^m.$$

• São os valores, de **sensibilidade**,  $\delta_i^m$ , que trazem mais dificuldades em seu cálculo, pois a derivada  $\frac{\partial u_i^m}{\partial w_i^m}$  é trivial (ela é apenas o valor de uma entrada daquele nó).

### Retropropagando o erro

- Portanto, a estratégia de otimização adotada para atualização dos pesos (sinápticos/bias) da rede neural é a seguinte:
  - 1. Começa-se pela saída, onde o erro é calculado.
  - 2. Encontra-se uma *regra recursiva* que gere os valores de *sensibilidade* para os *nós* das camadas anteriores até a primeira camada oculta.
- Esse processo é chamado de retropropagação do erro ou backpropagation.
- Para facilitar a *retropropagação do erro*, nós vamos inicialmente agrupar todas as *sensibilidades*,  $\delta_i^m$ , de uma camada em um vetor  $\delta^m$ .
- ullet Em seguida, vamos encontrar uma regra que fará a transição  $oldsymbol{\delta}^m o oldsymbol{\delta}^{m-1}$
- Ou seja, a partir da **sensibilidade** da camada m, iremos encontrar a **sensibilidade** da camada anterior, m-1.

#### Retropropagando o erro

- Em resumo, o processo de *retropropagação do erro* é iniciado calculando-se o **vetor de sensibilidade** da última camada,  $\boldsymbol{\delta}^{M}$ , e, de maneira **recursiva**, obtém os vetores de sensibilidade de todas as camadas anteriores.
- Para calcular  $\boldsymbol{\delta}^M$  consideramos  $N_M$  saídas e, assim, temos que o i-ésimo elemento de  $\boldsymbol{\delta}^M$ é dado por:

$$\delta_i^M = \frac{\partial e_j^2}{\partial u_i^M} = \frac{\partial \left(d_j - y_j^M\right)^2}{\partial u_i^M} = \frac{\partial \left(d_j - y_j^M\right)^2}{\partial y_j^M} = \frac{\partial \left(d_j - y_j^M\right)^2}{\partial u_i^M} = -2\left(d_j - y_j^M\right) \frac{\partial y_j^M}{\partial u$$

onde

$$y_j^M = f^M(u_i^M),$$
$$f'^M(u_i^M) = \frac{\partial f^M(u_i^M)}{\partial u_i^M}.$$

 $\frac{\partial f(u)}{\partial u} = f(u) (1 - f(u))$ 

Função tangente hiperbólica

$$\frac{\partial f(u)}{\partial u} = \left(1 - \tanh^2(u)\right)$$

#### Retropropagando o erro

• Matricialmente nós podemos expressar  $oldsymbol{\delta}^M$  como:

$$\boldsymbol{\delta}^{M} = -2\boldsymbol{F}^{\prime M}(\boldsymbol{u}^{M})(\boldsymbol{d} - \boldsymbol{y}),$$

onde a matriz  $m{F}'^M(m{u}^M)$  é uma matriz diagonal definida como

$$\mathbf{F}^{\prime M}(\mathbf{u}^{M}) = \begin{bmatrix} f^{\prime M}(u_{1}^{M}) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & f^{\prime M}(u_{2}^{M}) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & f^{\prime M}(u_{N_{M}}^{M}) \end{bmatrix}.$$

• Desta forma, a aplicação sucessiva da *regra da cadeia* leva a uma recursão que, em termos matriciais, é simples e dada por

$$\boldsymbol{\delta}^m = \boldsymbol{F}'^m(\boldsymbol{u}^m)(\boldsymbol{W}^{m+1})^T \boldsymbol{\delta}^{m+1}.$$

#### Tarefa

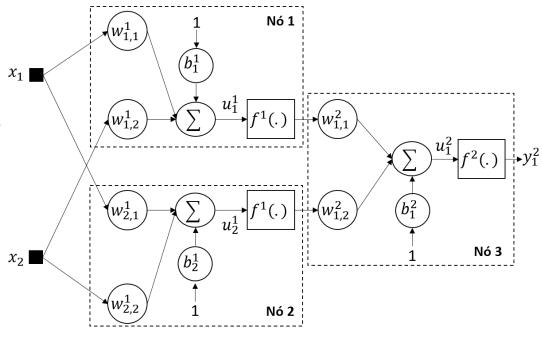
• Encontrem o vetor gradiente para todos os pesos do nó 1 da rede neural

do próximo slide.

$$\begin{vmatrix} \frac{\partial J}{\partial w_{1,1}^1} \\ \frac{\partial J}{\partial w_{1,2}^1} \\ \frac{\partial J}{\partial b_1^1} \end{vmatrix} = ?$$

 Podem deixar as derivadas parciais em função da derivada da função de ativação.

- Considerem uma rede MLP com uma camada intermediária e uma camada de saída com um nó, portanto M=2.
- Devemos começar calculando  $\delta^2$ .
- Percebam que essa sensibilidade é um escalar pois há apenas um nó na camada de saída.
- Vamos considerar um exemplo com entrada  $\mathbf{x} = [x_1, x_2]$  e saída desejada d.
- Supomos que a rede tem uma certa configuração inicial de pesos, de modo que, quando a entrada for apresentada à rede, será possível calcular todos os sinais pertinentes ao longo dela até sua saída.
- Essa é a etapa *direta* (ou do inglês, *forward*).



• Portanto, temos então a saída  $y_1^2$ , onde o erro pode ser calculado como:

$$e = d - y_1^2.$$

• De posse do erro, podemos calcular o delta do *nó* da camada de saída:

$$\delta^2 = -2(d - y_1^2)f'^2(u_1^2).$$

• Temos, portanto, nossa primeira *sensibilidade*. Agora, usamos a recursão para *retropropagar* o erro até a camada anterior. A fórmula nos diz:

$$\boldsymbol{\delta}^1 = \boldsymbol{F}^{\prime 1}(\boldsymbol{u}^1)(\boldsymbol{W}^2)^T \delta^2,$$

onde  $(\mathbf{W}^2)^T = [w_{1,1}^2, w_{1,2}^2]^T$ e

$$\mathbf{F}^{\prime 1}(\mathbf{u}^1) = \begin{bmatrix} f^{\prime 1}(u_1^1) & 0 \\ 0 & f^{\prime 1}(u_2^1) \end{bmatrix}.$$

**OBS**.: Notem que  $.^2$  aqui não significa "ao quadrado", mas sim a indicação de que se trata de uma saída da camada m=2.

Portanto,

$$\boldsymbol{\delta}^{1} = \begin{bmatrix} w_{1,1}^{2} f'^{1}(u_{1}^{1}) \\ w_{1,2}^{2} f'^{1}(u_{2}^{1}) \end{bmatrix} \delta^{2}.$$

- Agora, para calcularmos o gradiente, multiplicamos as *sensibilidades* pelas entradas correspondentes.
- Por exemplo, as derivadas parciais com relação aos pesos do  $\emph{n\'o}~i=1$  da camada m=1 são mostradas abaixo

Os pesos de *bias* estão ligados a entradas com valores constantes iguais a 1. 
$$\frac{\partial J}{\partial w_{1,1}^1} = -2(d-y_1^2)f'^2(u_1^2)w_{1,1}^2f'^1(u_1^1)\begin{bmatrix} x_1\\x_2\\1 \end{bmatrix}.$$

• Se fôssemos calcular as derivadas aplicando a regra da cadeia diretamente, elas seriam calculadas como mostrado abaixo.

liretamente, elas seriam calculadas como mostrado abaixo. 
$$\frac{\partial J}{\partial w_{1,1}^1} = \frac{\partial e^2}{\partial w_{1,1}^1} = \frac{\partial \left(d - f^2(u_1^2)\right)^2}{\partial f^2(u_1^2)} \frac{\partial f^2(u_1^2)}{\partial u_1^2} \frac{\partial u_1^2}{\partial f^1(u_1^1)} \frac{\partial f^1(u_1^1)}{\partial u_1^1} \frac{\partial u_1^1}{\partial w_{1,1}^1} = \frac{\partial u_1^1}{\partial u_1^1} \frac{\partial u_1^1}{\partial u_1^2} \frac{\partial u_1^2}{\partial u_1^2} \frac{\partial f^2(u_1^2)}{\partial u_1^2} \frac{\partial u_1^2}{\partial u_1^2} \frac{\partial f^1(u_1^1)}{\partial u_1^1} \frac{\partial u_1^1}{\partial u_1^1} \frac{\partial u_1^1}{\partial w_{1,2}^1} = \frac{\partial e^2}{\partial b_1^1} = \frac{\partial \left(d - f^2(u_1^2)\right)^2}{\partial f^2(u_1^2)} \frac{\partial f^2(u_1^2)}{\partial u_1^2} \frac{\partial u_1^2}{\partial f^1(u_1^1)} \frac{\partial f^1(u_1^1)}{\partial u_1^1} \frac{\partial u_1^1}{\partial u_1^1} \frac{\partial u_1^1}{\partial b_1^1}$$

#### **Tarefas**

- Quiz: "T320 Quiz Redes Neurais Artificiais (Parte VI)" que se encontra no MS Teams.
- Exercício Prático: Laboratório #8.
  - 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.
  - Atividades podem ser feitas em grupo, mas as entregas devem ser individuais.

# 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



