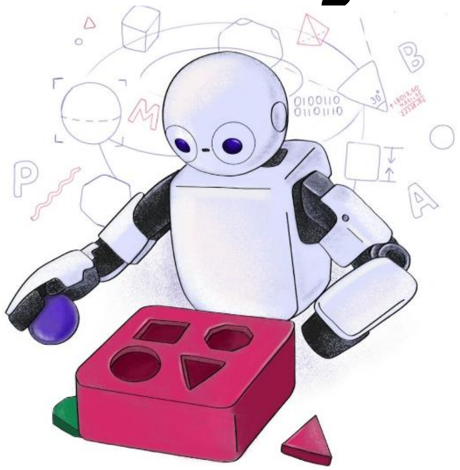
T320 - Introdução ao Aprendizado de Máquina II: *Redes Neurais Artificiais (Parte III)*



Inatel

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

Recapitulando

- No último tópico, vocês foram apresentados às redes neurais.
- Vimos que elas são formadas por ***camadas de neurônios*** que se ***conectam através dos pesos sinápticos***.
- Aprendemos que as ***funções de ativação logística e tangente hiperbólica*** causam o ***problema do desaparecimento do gradiente***, o qual pode ser solucionado usando-se a ***função retificadora ou suas variantes***.
- Discutimos ***duas das arquiteturas de redes*** neurais mais usadas.
- Aprendemos que as redes neurais são ***aproximadoras universais de funções***.
- Neste tópico, veremos ***como as redes neurais aprendem***, ou seja, são treinadas.

Aprendizado em redes neurais

- O ***processo de atualização dos pesos*** de uma rede neural corresponde a um ***problema de minimização*** de uma ***função de erro*** (ou de perda ou custo), $J(\boldsymbol{w})$, com relação a um vetor de pesos $\boldsymbol{w}$.
  - O vetor $\boldsymbol{w}$ contém todos os pesos de uma camada da rede neural.
- Assim, o problema do aprendizado em redes neurais pode ser formulado como

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

- Em geral, esse processo de otimização é ***conduzido de forma iterativa***, o que dá um ***sentido mais natural à noção de aprendizado*** (i.e., um processo gradual).
- Existem ***vários métodos de otimização*** aplicáveis, mas, sem dúvida, os ***mais utilizados*** são os ***baseados nas derivadas da função custo***, $J(\boldsymbol{w})$.

Aprendizado em redes neurais

- Dentre esses métodos, existem os de ***primeira ordem*** e os de ***segunda ordem***.
- Métodos de ***primeira ordem*** são baseados nas ***derivadas parciais de primeira ordem*** da ***função de erro*** e usam versões da seguinte ***equação de atualização dos pesos***

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

onde $\nabla J(\boldsymbol{w}(k)) = \left[\frac{\partial J(\boldsymbol{w}(k))}{\partial w_0} \quad \frac{\partial J(\boldsymbol{w}(k))}{\partial w_1} \quad \cdots \quad \frac{\partial J(\boldsymbol{w}(k))}{\partial w_{K+1}}\right]^T \in \mathbb{R}^{K+1 \times 1}$, α é o passo de aprendizagem e k é a iteração de atualização.

- O gradiente descente e suas várias versões, além das variantes adaptativas e do termo momentum, são exemplos de métodos de primeira ordem.

Aprendizado em redes neurais

- Já os métodos de ***segunda ordem***, além das informações de primeira ordem, utilizam informações fornecidas pelas ***derivadas parciais de segunda ordem*** da ***função de erro***.
- Essa informação está contida na ***matriz Hessiana***, $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{w})$:

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{w}(k)) = \nabla^2 J(\boldsymbol{w}(k)) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w}(k))}{\partial w_0^2} & \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w}(k))}{\partial w_0 \partial w_1} & \cdots & \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w}(k))}{\partial w_0 \partial w_{K+1}} \\ \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w}(k))}{\partial w_1 \partial w_0} & \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w}(k))}{\partial w_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w}(k))}{\partial w_1 \partial w_{K+1}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w}(k))}{\partial w_{K+1} \partial w_0} & \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w}(k))}{\partial w_{K+1} \partial w_1} & \cdots & \frac{\partial^2 J(\boldsymbol{w}(k))}{\partial w_{K+1}^2} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{K+1 \times K+1}.$$

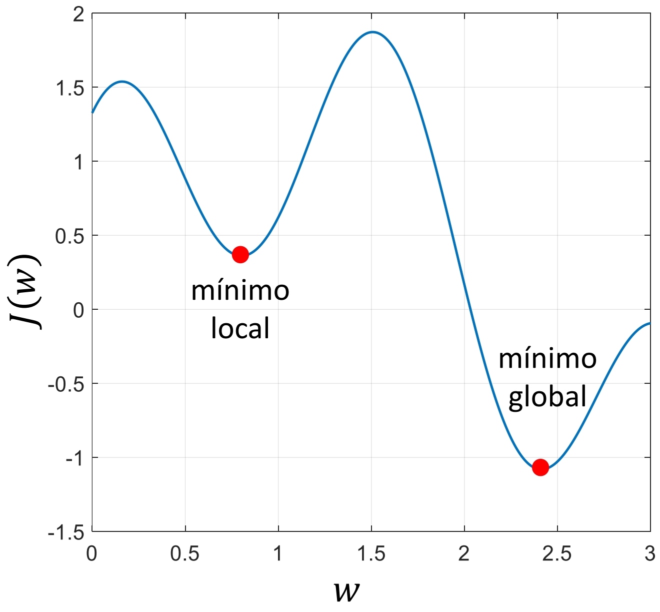
Aprendizado em redes neurais

- Usando uma aproximação de Taylor de segunda ordem da ***função de erro***, resulta na seguinte ***equação de atualização dos pesos***
$$\boldsymbol{w}(k+1) \leftarrow \boldsymbol{w}(k) - \alpha \boldsymbol{H}^{-1}\big(\boldsymbol{w}(k)\big) \nabla J\big(\boldsymbol{w}(k)\big).$$
- Essa expressão requer que a ***matriz Hessiana*** seja ***invertível*** e ***definida positiva*** a cada iteração, k, i.e., $\boldsymbol{z}^T \boldsymbol{H} \boldsymbol{z} > 0, \forall \boldsymbol{z} \neq \boldsymbol{0}$ (vetor nulo).
- A atualização dos pesos utilizando informações de primeira e de segunda ordem é mais precisa do que a fornecida por métodos de primeira ordem.
- Portanto, métodos de ***segunda ordem convergem mais rapidamente*** do que métodos de ***primeira ordem***.

Aprendizado em redes neurais

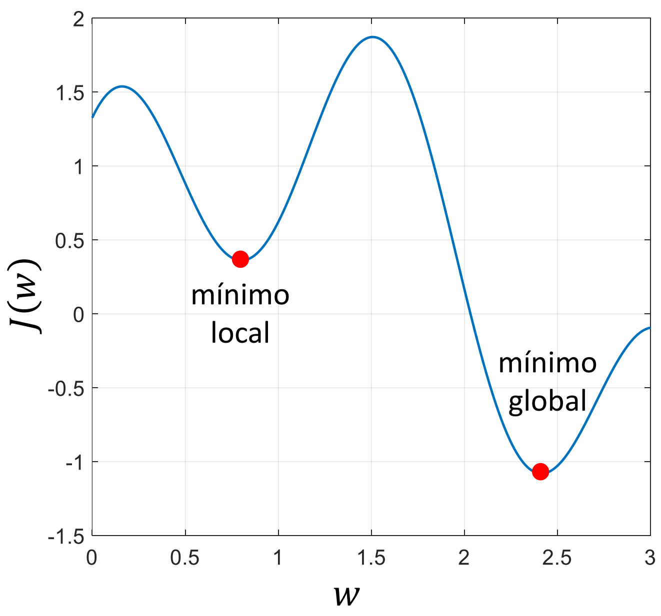
- Entretanto, o cálculo exato da ***matriz Hessiana*** pode ser ***custoso computacionalmente*** em vários casos práticos.
  - Por exemplo, se tivermos $K = 10$ pesos para otimizar, precisamos calcular $10 \times 10 = 100$ derivadas parciais para formar a matriz Hessiana.
  - Além disso, ela precisa ser invertida, o que tem complexidade cúbica, $O(K^3)$.
  - Portanto, essa abordagem direta não é eficiente se o número de pesos for muito grande, o que é o caso quando se usa redes neurais profundas.
- Porém, há um conjunto de métodos de segunda ordem que evitam esse cálculo direto, como os métodos ***quasi-Newton*** ou os métodos de ***gradiente escalonado***, os quais aproximam a matriz Hessiana.
- O algoritmo *limited-memory* BFGS (LBFGS) é um exemplo de método ***quasi-Newton*** implementado pela biblioteca *SciKit-Learn* em algumas de suas classes.

Superfícies de erro irregulares



- Todos os métodos que acabamos de discutir são métodos de ***busca local***, ou seja, eles ***buscam uma solução nas proximidades de onde se encontram***.
- Consequentemente, a ***convergência para um mínimo global não é assegurada***.
- Portanto, dependendo de onde o algoritmo é ***inicializado***, ele pode ***convergir para um mínimo local***.
- A figura apresenta dois mínimos:
  - *Mínimo local*: é uma ***solução ótima*** *apenas* ***em relação aos seus vizinhos***.
  - *Mínimo global*: é uma ***solução ótima em*** ***relação a todo o domínio da função de erro***.

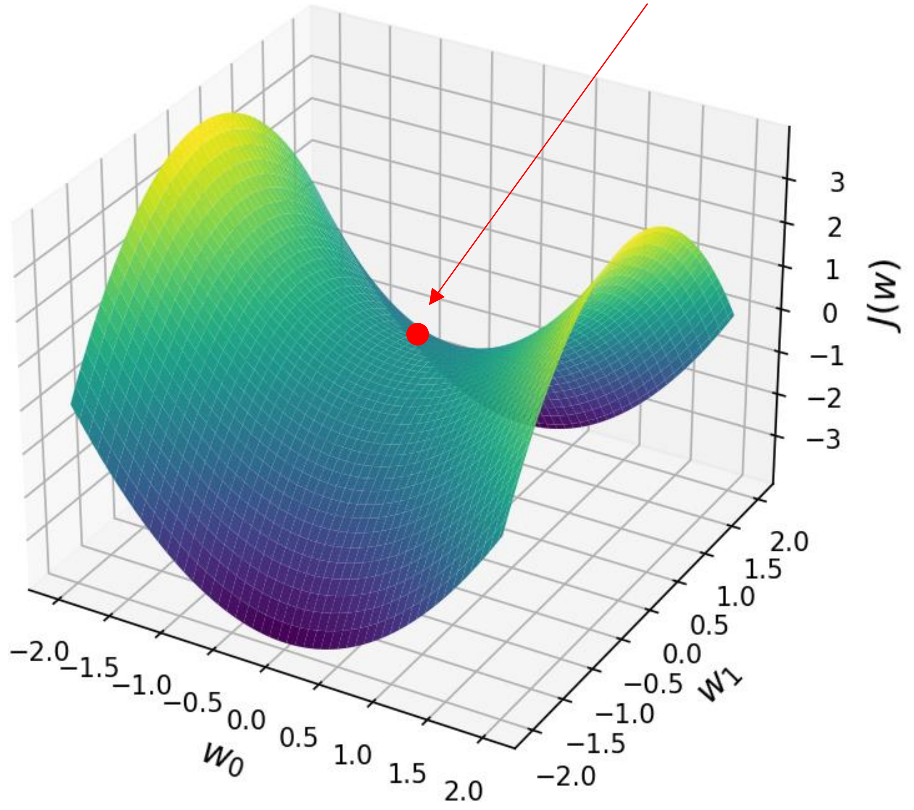
Superfícies de erro irregulares



- Por serem formadas pela ***combinação de vários nós com funções de ativação não-lineares***, as superfícies de erro de redes neurais ***não são convexas***, ou seja, são ***altamente irregulares***, ***podendo conter vários mínimos locais***.
- Entretanto, felizmente, em muitos problemas envolvendo redes neurais, ***quase todos os mínimos locais têm valor de erro próximo ao do mínimo global*** e, portanto, encontrar um mínimo local já é bom o suficiente para um dado problema.
- Além dos mínimos locais e global, as superfícies de erro de redes neurais podem apresentar outras ***irregularidades que dificultam seu aprendizado***.

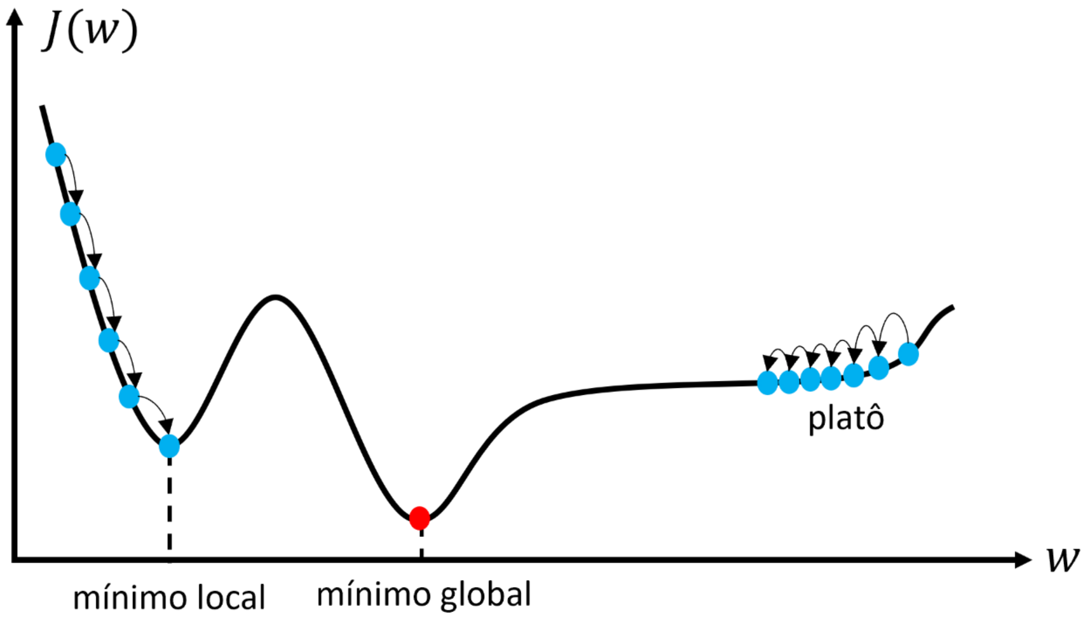
Superfícies de erro irregulares

Superfície com Ponto de Sela



- Uma irregularidade que pode ser encontrada são os ***pontos de sela***:
  - É um ponto que é um ***mínimo ao longo de um eixo***, mas um ***máximo ao longo de outro***.
  - Em algumas direções são ***atratores*** (i.e., alta declividade), mas em outras não.
- O algoritmo de otimização 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 estocásticas (i.e., ruidosas) do gradiente descendente***.

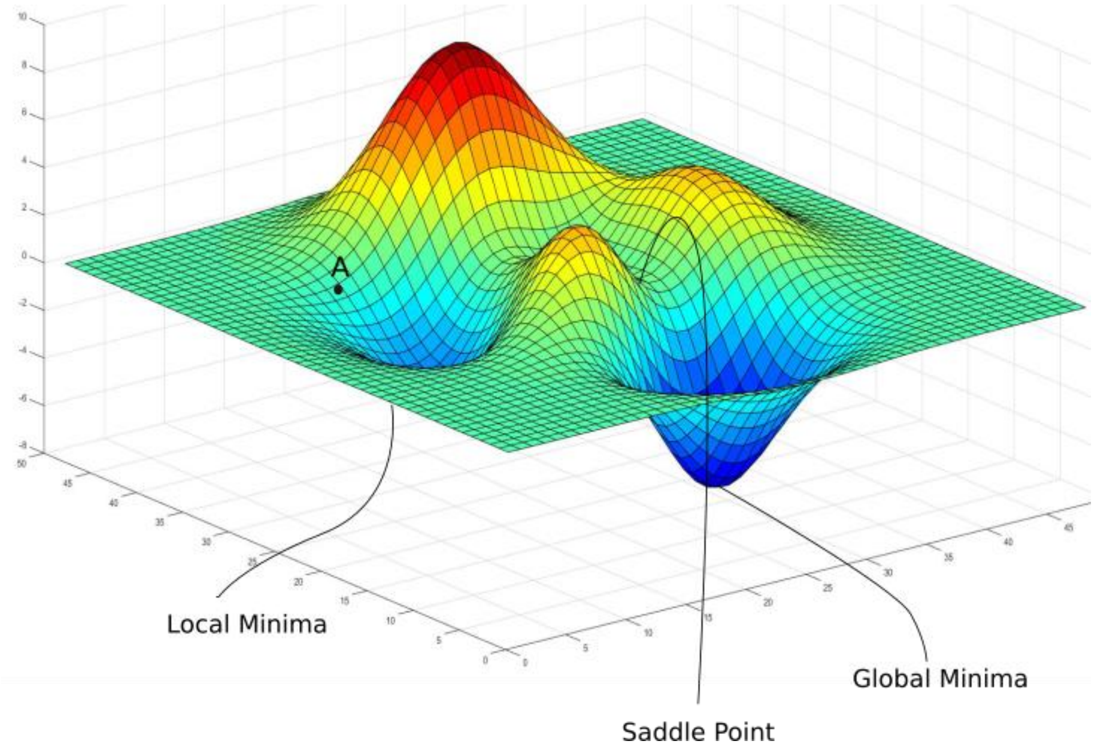
Superfícies de erro irregulares



- Outro tipo de irregularidade são os ***platôs.***
- Eles são ***regiões planas e com erro elevado***.
- Como a ***inclinação da superfície*** nessa região é ***próxima de zero*** (i.e., o gradiente é próximo de zero) o algoritmo pode levar muito tempo para atravessá-la.
- Métodos de ***aprendizado adaptativo***, como AdaGrad, RMSProp, Adam, podem escapar destas regiões.

Superfícies de erro irregulares

Exemplo da superfície de erro de uma rede neural



- Portanto, como garantir que o mínimo encontrado é bom o suficiente?
- Treina-se o modelo várias vezes, sempre ***inicializando os pesos de forma aleatória***, 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.
- **Avaliação Presencial**
  - Data: 16/11/2024 às 10:00 na sala I-20
  - Faremos apenas o exercício #1 do projeto #2.
- **Projeto #2**
  - O projeto estará disponível no github, logo abaixo do laboratório # 7.
  - Tanto o projeto quanto a avaliação presencial podem ser feitos em grupos de no máximo 3 alunos.
  - Entrega do projeto: **08/12/2024 até às 23:59**.
  - Leiam os enunciados e dicas atentamente.

Retropropagação do erro

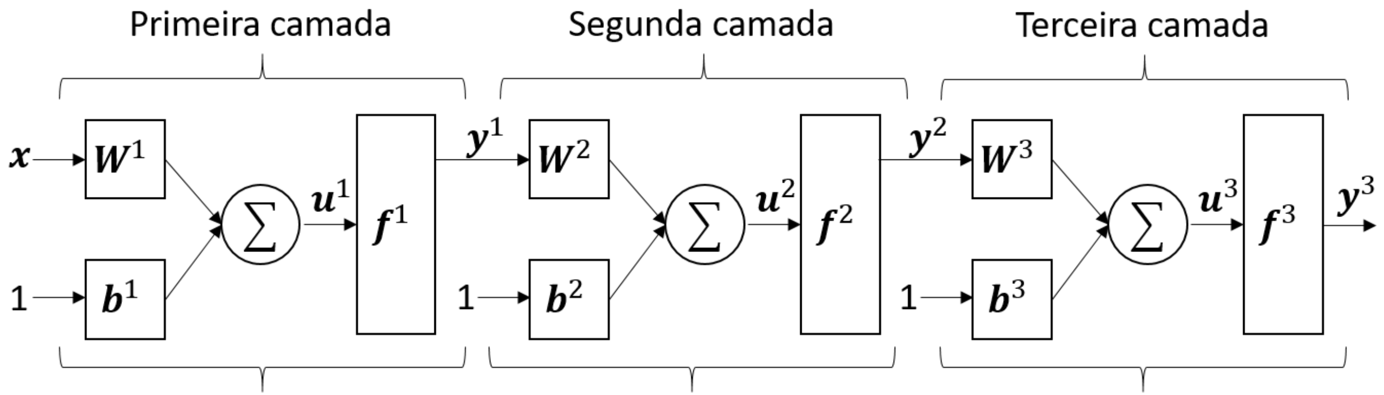
- Conforme nós discutimos antes, os métodos fundamentais de ***aprendizado para redes neurais*** são ***baseados no cálculo das derivadas parciais*** da ***função de erro*** com relação aos seus ***pesos*** (sinápticos e de bias).
- Esses métodos têm como ***objetivo*** encontrar o ***conjunto de pesos*** que ***minimiza a função de erro*** escolhida.
- Assim, é necessário encontrar uma maneira de se calcular o ***vetor gradiente*** da ***função de erro*** ***com respeito aos pesos das várias camadas de uma rede neural***.
- Essa tarefa pode parecer ***trivial***, mas não é o caso.
  - Como podemos calcular a influência dos pesos das camadas ocultas no erro da camada de saída?
- Foram necessários 17 anos desde a criação do ***Perceptron*** até que se "***descobrisse***" uma forma de treinar redes neurais.

Retropropagação do erro

- Para que entendamos melhor o motivo desta tarefa não ser trivial, nós iremos considerar as notações abaixo, as quais serão úteis 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 $\boldsymbol{W}^{m}$ é a matriz com todos os pesos da m-ésima camada.
  - O peso de bias, b_{i}^{m}, corresponde ao peso do i-ésimo ***nó*** da m-ésima camada da ***rede neural*** e $\boldsymbol{b}^{m}$ é o vetor com todos os pesos de bias 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 $\boldsymbol{u}^{m}$ é o ***vetor de ativações*** com as ***combinações lineares*** das entradas de todos os nós da m-ésima camada.
  - $\boldsymbol{f}^{m}(.)$ é a função de ativação da m-ésima camada da ***rede neural***.
- Essas notações nos ajudarão a obter os vetores gradiente para atualizar os pesos de todos os nós da rede neural.

Retropropagação do erro

- Usando as notação definidas, podemos representar uma MLP como



$$\boldsymbol{y}^1 = \boldsymbol{f}^1\left(\underbrace{\boldsymbol{W}^1\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}^1}_{\boldsymbol{u}^1}\right) \qquad \boldsymbol{y}^2 = \boldsymbol{f}^2\left(\underbrace{\boldsymbol{W}^2\boldsymbol{y}^1 + \boldsymbol{b}^2}_{\boldsymbol{u}^2}\right) \qquad \boldsymbol{y}^3 = \boldsymbol{f}^3\left(\underbrace{\boldsymbol{W}^3\boldsymbol{y}^2 + \boldsymbol{b}^3}_{\boldsymbol{u}^3}\right)$$

OBS.: Para facilitar nossa análise, não vamos considerar as entradas como uma camada, apenas as camadas ocultas e de saída.

- O mapeamento realizado pela rede MLP acima é dado pela expressão

$$\boldsymbol{y}^3 = \boldsymbol{f}^3\left(\boldsymbol{W}^3 \underbrace{\boldsymbol{f}^2\left(\boldsymbol{W}^2 \underbrace{\boldsymbol{f}^1(\boldsymbol{W}^1\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}^1)}_{\boldsymbol{y}^1} + \boldsymbol{b}^2\right)}_{\boldsymbol{y}^2} + \boldsymbol{b}^3\right)$$

Retropropagação do erro

- Para facilitar a análise, iremos supor, sem nenhuma perda de generalidade, que a ***função de erro*** escolhida é a função do ***erro quadrático médio*** (MSE).
- Assumiremos que a ***última camada da rede MLP*** (definida como a M-ésima camada) tem uma quantidade genérica de ***nós***, N_M. Assim, o MSE é dado por

$$J = \frac{1}{N_{\text{dados}} N_M} \sum_{n=1}^{N_{\text{dados}}} \sum_{j=1}^{N_M} e_j^2(n)$$

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

onde N_{dados} é o número de exemplos, $d_j(n)$ e $y_j^M(n)$ são o valor desejado da j-ésima saída (i.e., rótulo) e a saída do j-ésimo nó da M-ésima camada, respectivamente, ambos correspondentes ao n-ésimo exemplo de entrada.

Retropropagação do erro

- Para treinar a rede (i.e., atualizar os pesos), devemos derivar a ***função de erro*** com relação aos ***pesos*** (sinápticos e de bias) de todas suas camadas.
- Como as ***saídas dos nós da M-ésima camada*** e, consequentemente, ***seus pesos***, ***aparecem de forma direta na equação do MSE***, é simples se obter as derivadas parciais com relação aos pesos desta camada.

$$J = \frac{1}{N_{\text{dados}} N_M} \sum_{n=1}^{N_{\text{dados}}} \sum_{j=1}^{N_M} \left(d_j(n) - \underbrace{f_j^M \left((\boldsymbol{w}_j^M)^T \boldsymbol{y}^{M-1} + b_j^M \right)}_{y_j^M(n)} \right)^2,$$

onde $\boldsymbol{w}_j^M$ é o vetor de pesos e f_j^M a função de ativação do j-ésimo nó da M-ésima camada.

Retropropagação do erro

- Porém, percebam que os ***pesos dos nós das camadas ocultas*** ***não aparecem explícitamente*** na expressão do erro, J.
- Assim, quando precisamos avaliar as ***derivadas parciais com relação aos pesos das camadas ocultas***, a situação fica mais complexa, pois ***não existe uma dependência direta***.
- Para fazer com que a ***dependência dos pesos apareça de maneira clara*** na expressão do erro, nós precisaremos recorrer a ***aplicações sucessivas da regra da cadeia***.
- Portanto surge a pergunta: Como podemos atribuir aos pesos dos nós das camadas ocultas sua influência no cálculo dos valores de saída e, consequentemente, do erro?

Retropropagação do erro

- Resposta: 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***.
- Portanto, na sequência, veremos de maneira ***sistemática*** como a ***retropropagação do erro*** é realizada para treinar uma rede neural.

Retropropagação do erro

- Inicialmente, nós devemos observar um fato fundamental.
- O cálculo da derivada do erro com relação a um peso qualquer é dado por

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

OBS.: mudei o índice do erro de j para k para não haver confusão com o índice j do peso.

  - **OBS.1**: Operação da derivada parcial é ***distributiva***.
  - **OBS.2**: A divisão pelo número de amostras e saídas é omitida, pois não afeta a otimização por ser um valor constante.
- A equação mostra que é necessário se calcular a derivada parcial apenas do quadrado do erro associado ao n-ésimo exemplo de entrada da k-ésima saída, pois o gradiente será a ***média destes gradientes particulares*** (ou ***locais***).

Algumas noções básicas da retropropagação

- Considerando a derivada parcial do erro em relação a um peso qualquer 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 erro*** em relação à ***ativação*** do i-ésimo ***nó*** da m-ésima camada.
- Essa grandeza será chamada de ***sensibilidade*** e será denotada pela letra grega δ. Desta forma:

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

Sensibilidade do i-ésimo nó da m-ésima camada.

- O termo δ_i^m é único para cada ***nó*** da m-ésima camada.

Algumas noções básicas da retropropagação

- O segundo termo, por sua vez, varia ao longo das entradas do ***nó*** em questão.
- A ativação, u_i^m, é a ***combinação ponderada das entradas mais o peso de bias***

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

- Assim, a derivada em relação ao peso sináptico $w_{i,j}^m$ é dada por

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

Saída da camada anterior.

- Caso a derivada seja em relação ao peso de *bias*, b_i^m, temos

$$\frac{\partial u_i^m}{\partial b_i^m} = 1.$$

Algumas noções básicas da retropropagação

- Desta forma, vemos que todas as derivadas da função de erro em relação aos pesos são produtos de uma sensibilidade, δ_i^m, por uma entrada do i-ésimo nó da rede.

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

ou, no caso do peso de bias, b_i^m, pela unidade

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

- São os valores de ***sensibilidade,*** δ_i^m, que trazem mais dificuldades em seu cálculo, pois a derivada $\frac{\partial u_i^m}{\partial w_{i,j}^m}$ 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 e de bias) da rede neural é a seguinte:
  1. Começa-se pela saída, onde o erro é calculado.
     - Etapa chamada de ***direta***, pois aplica-se as entradas (i.e., atributos) à rede e calcula-se o erro de saída.
  2. Encontra-se uma ***regra recursiva*** que gere os valores de ***sensibilidade*** para os ***nós*** das camadas anteriores até a primeira camada oculta.
     - Etapa chamada de ***reversa***, pois calcula-se a ***contribuição de cada nó*** das camadas ocultas no erro de saída.
- Esse processo é chamado de ***retropropagação do erro*** ou ***backpropagation***.
- Para facilitar a ***retropropagação do erro***, nós vamos inicialmente agrupar todas as ***sensibilidades*** da m-ésima camada, $\delta_i^m, \forall i$, em um vetor, $\boldsymbol{\delta}^m$.
- Em seguida, vamos definir uma regra que fará a transição $\boldsymbol{\delta}^m \rightarrow \boldsymbol{\delta}^{m-1}$.
- Ou seja, a partir do vetor de ***sensibilidades*** da camada m, iremos encontrar o vetor de ***sensibilidades*** da camada anterior, $m-1$.

Retropropagando o erro

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

$$\delta_j^M = \frac{\partial e_j^2}{\partial u_j^M} = \frac{\partial\left(d_j - y_j^M\right)^2}{\partial u_j^M} \overset{\text{Regra da cadeia}}{=} \frac{\partial\left(d_j - y_j^M\right)^2}{\partial y_j^M}\frac{\partial y_j^M}{\partial u_j^M} = -2\left(d_j - y_j^M\right)\frac{\partial y_j^M}{\partial u_j^M}$$
$$= -2\left(d_j - y_j^M\right)f'^M\left(u_j^M\right),$$

onde

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

Função logística
$$\frac{\partial f(u)}{\partial u} = f(u)\left(1 - f(u)\right)$$

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

Retropropagando o erro

- Matricialmente nós podemos expressar o vetor $\boldsymbol{\delta}^M$ como:

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

onde a matriz $\boldsymbol{F}'^M(\boldsymbol{u}^M)$ é uma ***matriz diagonal*** com as derivadas das funções de ativação em relação às ativações dos N_M nós da M-ésima camada,

$$\boldsymbol{F}'^M(\boldsymbol{u}^M) = \begin{bmatrix} f'^M(u_1^M) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & f'^M(u_2^M) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & f'^M(u_{N_M}^M) \end{bmatrix},$$

$\boldsymbol{d}$ e $\boldsymbol{y}$ são vetores coluna de dimensão $N_M \times 1$ com os valores esperados e de saída da rede neural, respectivamente.

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

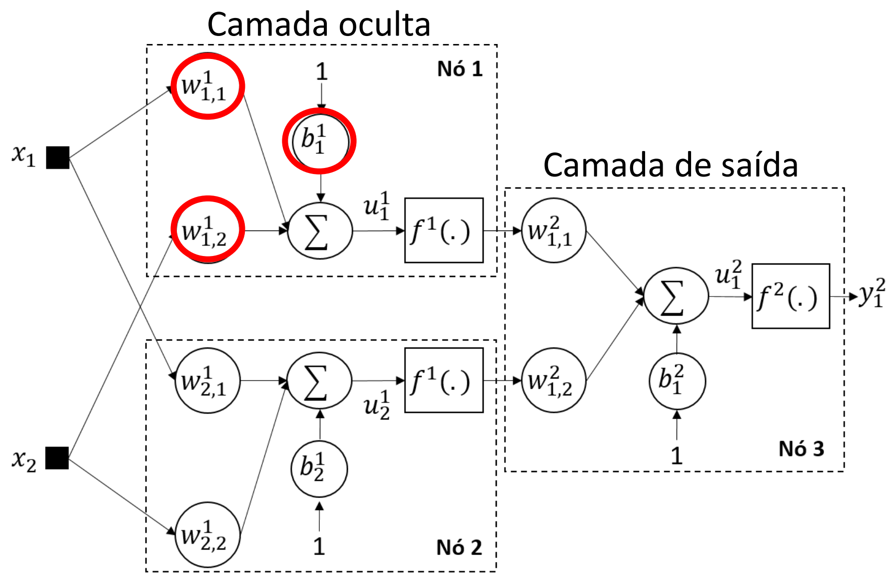
$$\boldsymbol{\delta}^{m-1} = \boldsymbol{F}'^{m-1}(\boldsymbol{u}^{m-1})(\boldsymbol{W}^m)^T\boldsymbol{\delta}^m.$$

Matriz ou vetor com os pesos que conectam a camada $m-1$ à camada m.

Exemplo da aplicação da retropropagação

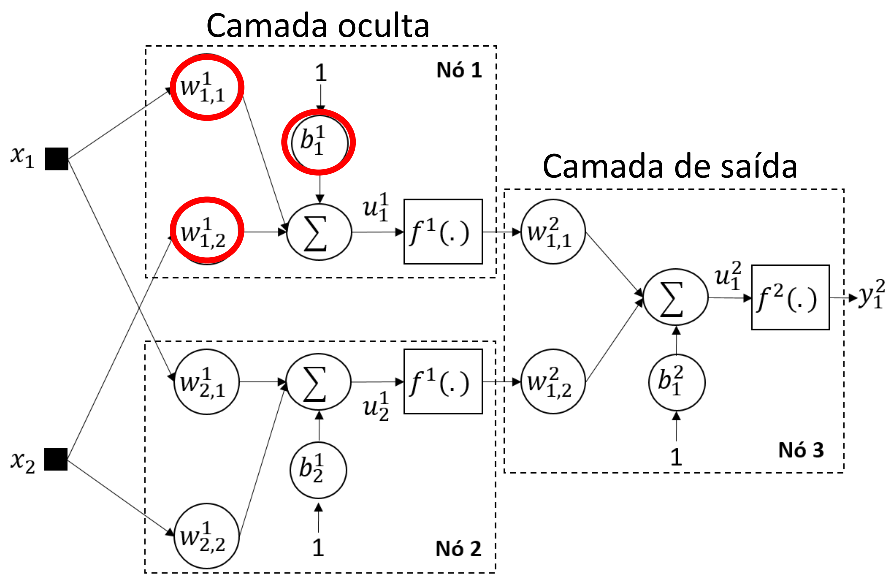
- Encontrar o ***vetor gradiente*** para todos os pesos do nó 1 (camada oculta) da rede neural MLP abaixo.

$$\begin{bmatrix} \dfrac{\partial J}{\partial w_{1,1}^{1}} \\ \dfrac{\partial J}{\partial w_{1,2}^{1}} \\ \dfrac{\partial J}{\partial b_{1}^{1}} \end{bmatrix} = ?$$



- **OBS**.: vamos deixar as derivadas da função de ativação em relação às ativações de forma genérica, ou seja, sem assumir um tipo específico de função de ativação.

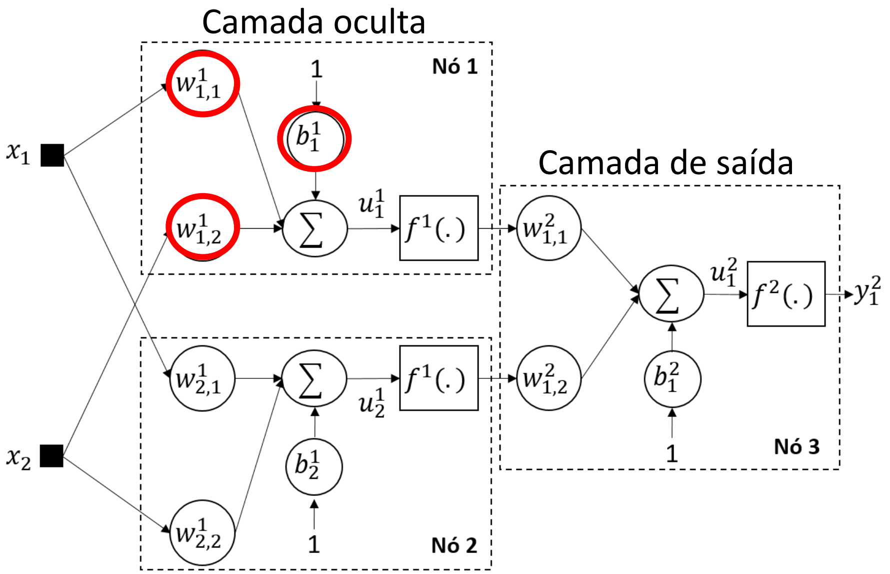
Exemplo da aplicação da retropropagação



- A rede possui uma camada oculta com dois nós e uma ***camada de saída com um único nó***, portanto $M = 2$.
- Devemos começar calculando $\boldsymbol{\delta}^2$.
- Porém, percebam que essa ***sensibilidade*** é na verdade um escalar, pois há apenas um ***nó*** na camada de saída.
- Vamos considerar um ***único exemplo de entrada,*** $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2]$ e a respectiva saída desejada, d. Assim

$$\frac{\partial J}{\partial w_{i,j}^m} = \frac{1}{N_{\text{dados}} N_M} \sum_{n=1}^{N_{\text{dados}}} \sum_{k=1}^{N_M} \frac{\partial e_k^2(n)}{\partial w_{i,j}^m} = \frac{\partial e_1^2(n)}{\partial w_{i,j}^m}$$

Exemplo da aplicação da retropropagação



- Vamos supor que os pesos de todos os nós têm uma certa configuração inicial.
  - Por exemplo, os pesos podem ser inicializados com valores retirados de uma distribuição normal padrão.
- Assim, quando a entrada, $\boldsymbol{x}$, é apresentada à rede, é possível calcular todos os valores de interesse ao longo dela até sua saída.
- Consequentemente, tendo o valor de saída, conseguimos calcular o erro.
- Essa é a etapa ***direta*** (ou do inglês, ***forward***).

Exemplo da aplicação da retropropagação

- Portanto, de posse do valor de saída y_1^2, podemos calcular o erro

$$e_1 = d - y_1^2.$$

- Com o erro, podemos calcular a sensibilidade do ***nó*** da camada de saída

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

- Temos, assim, nossa primeira ***sensibilidade***. Agora, usamos a equação de recursão para ***retropropagar*** o erro até a camada anterior. A equação nos diz:

$$\boldsymbol{\delta}^1 = \boldsymbol{F}'^1(\boldsymbol{u}^1)(\boldsymbol{W}^2)^T\delta^2,$$

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

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

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

Exemplo da aplicação da retropropagação

- Portanto,

$$\boldsymbol{\delta}^1 = \begin{bmatrix} \delta_1^1 \\ \delta_2^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{1,1}^2 f'^1(u_1^1) \\ w_{1,2}^2 f'^1(u_2^1) \end{bmatrix} \delta^2.$$

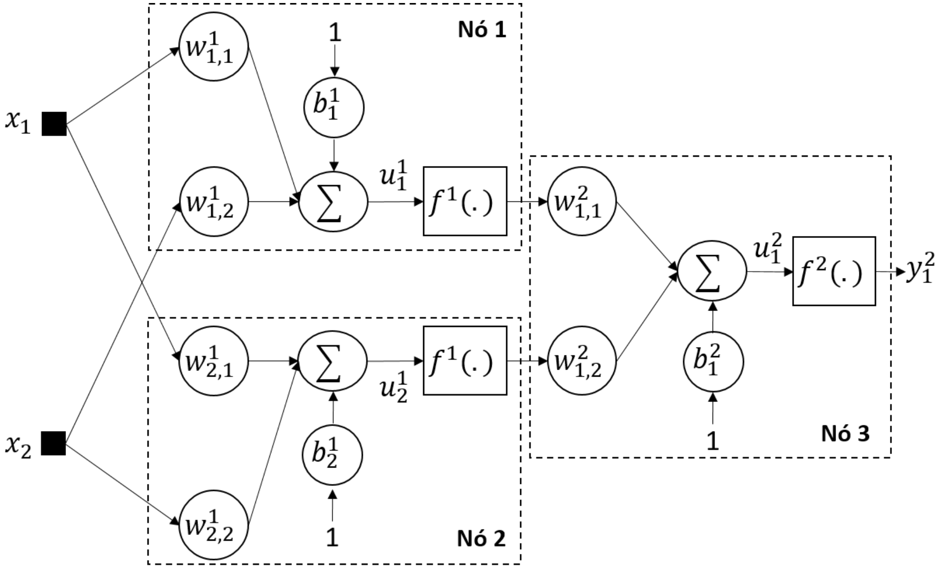
- Em seguida, para obtermos o vetor gradiente, multiplicamos as ***sensibilidades*** pelas entradas correspondentes da camada.
- Por exemplo, as derivadas parciais com relação aos pesos do ***nó*** $i = 1$ da camada $m = 1$ são mostradas abaixo

Escalar

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial J}{\partial w_{1,1}^1} \\ \frac{\partial J}{\partial w_{1,2}^1} \\ \frac{\partial J}{\partial b_1^1} \end{bmatrix} = \delta_1^1 \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ 1 \end{bmatrix} = \delta^2 w_{1,1}^2 f'^1(u_1^1) \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ 1 \end{bmatrix} = -2(d - y_1^2) f'^2(u_1^2) w_{1,1}^2 f'^1(u_1^1) \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Os pesos de ***bias*** estão ligados a entradas com valores constantes iguais a 1.

Exemplo da aplicação da retropropagação



- Se nós fôssemos calcular as derivadas parciais ***aplicando a regra da cadeia diretamente***, elas seriam calculadas como mostrado abaixo.
- Por exemplo, a derivada parcial do erro em relação ao peso $w_{1,1}^1$ é dada por

$$\frac{\partial J}{\partial w_{1,1}^1} = \underbrace{\underbrace{\frac{\partial \left(d - f^2(u_1^2)\right)^2}{\partial f^2(u_1^2)} \frac{\partial f^2(u_1^2)}{\partial u_1^2}}_{\delta^2} \frac{\partial u_1^2}{\partial f^1(u_1^1)} \frac{\partial f^1(u_1^1)}{\partial u_1^1}}_{\delta_1^1} \underbrace{\frac{\partial u_1^1}{\partial w_{1,1}^1}}_{x_1}$$

- Resolvendo as derivadas parciais, temos

$$\frac{\partial J}{\partial w_{1,1}^1} = -2(d - y_1^2) f'^2(u_1^2) w_{1,1}^2 f'^1(u_1^1) x_1$$

Exemplo da aplicação da retropropagação

- Aplicando-se o mesmo procedimento aos outros pesos, obtemos

$$\frac{\partial J}{\partial w_{1,1}^1} = \frac{\partial e^2}{\partial w_{1,1}^1} = \frac{\partial \left(d - f^2(u_1^2)\right)^2}{\partial f^2(u_1^2)} \frac{\partial f^2(u_1^2)}{\partial u_1^2} \frac{\partial u_1^2}{\partial f^1(u_1^1)} \frac{\partial f^1(u_1^1)}{\partial u_1^1} \frac{\partial u_1^1}{\partial w_{1,1}^1}$$

$$\frac{\partial J}{\partial w_{1,2}^1} = \frac{\partial e^2}{\partial w_{1,2}^1} = \frac{\partial \left(d - f^2(u_1^2)\right)^2}{\partial f^2(u_1^2)} \frac{\partial f^2(u_1^2)}{\partial u_1^2} \frac{\partial u_1^2}{\partial f^1(u_1^1)} \frac{\partial f^1(u_1^1)}{\partial u_1^1} \frac{\partial u_1^1}{\partial w_{1,2}^1}$$

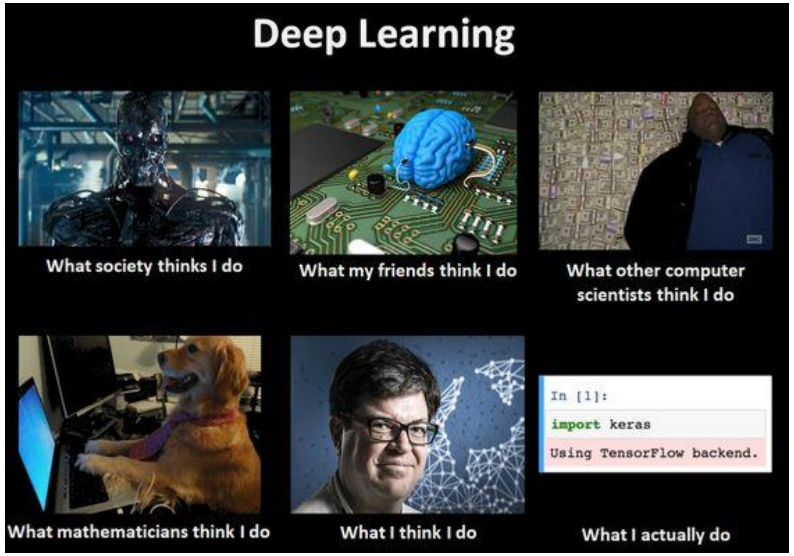
$$\frac{\partial J}{\partial b_1^1} = \frac{\partial e^2}{\partial b_1^1} = \frac{\partial \left(d - f^2(u_1^2)\right)^2}{\partial f^2(u_1^2)} \frac{\partial f^2(u_1^2)}{\partial u_1^2} \frac{\partial u_1^2}{\partial f^1(u_1^1)} \frac{\partial f^1(u_1^1)}{\partial u_1^1} \frac{\partial u_1^1}{\partial b_1^1}$$

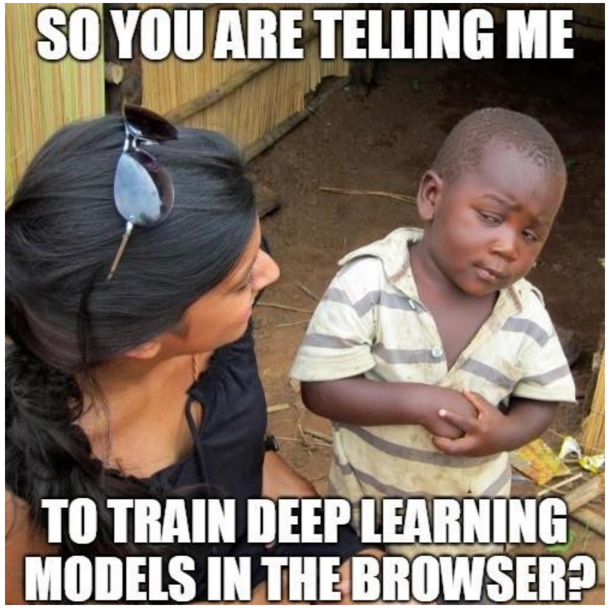
Tarefas

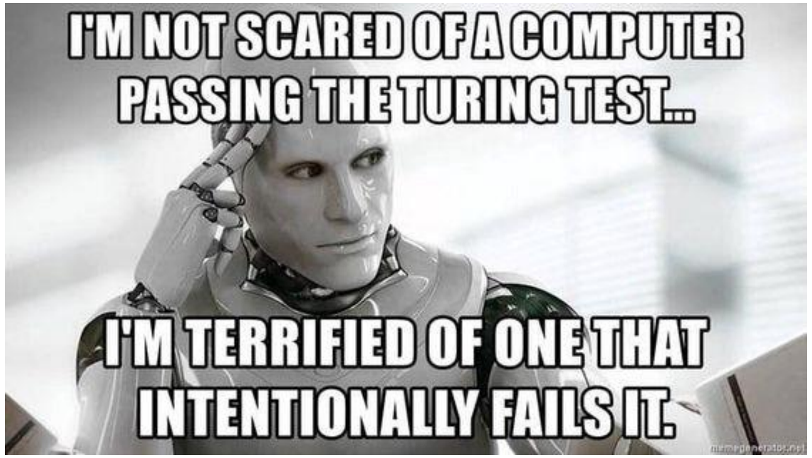
- **Quiz**: *“T320 - Quiz – Redes Neurais Artificiais (Parte VI)”* que se encontra no MS Teams.
- **Avaliação Presencial**
  - Data: 16/11/2024 às 10:00 na sala I-20
  - Faremos apenas o exercício #1 do projeto #2.
- **Projeto #2**
  - Projeto estará disponível no github até segunda e pode ser feito em grupos de no máximo 3 alunos.
  - Entrega: **08/12/2024 até às 23:59**.
  - Leiam os enunciados e dicas atentamente.

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..
Dog


Deep Learning
What society thinks I do
What my friends think I do
What other computer scientists think I do
What mathematicians think I do
What I think I do
In [1]:
import keras
Using TensorFlow backend.
What I actually do

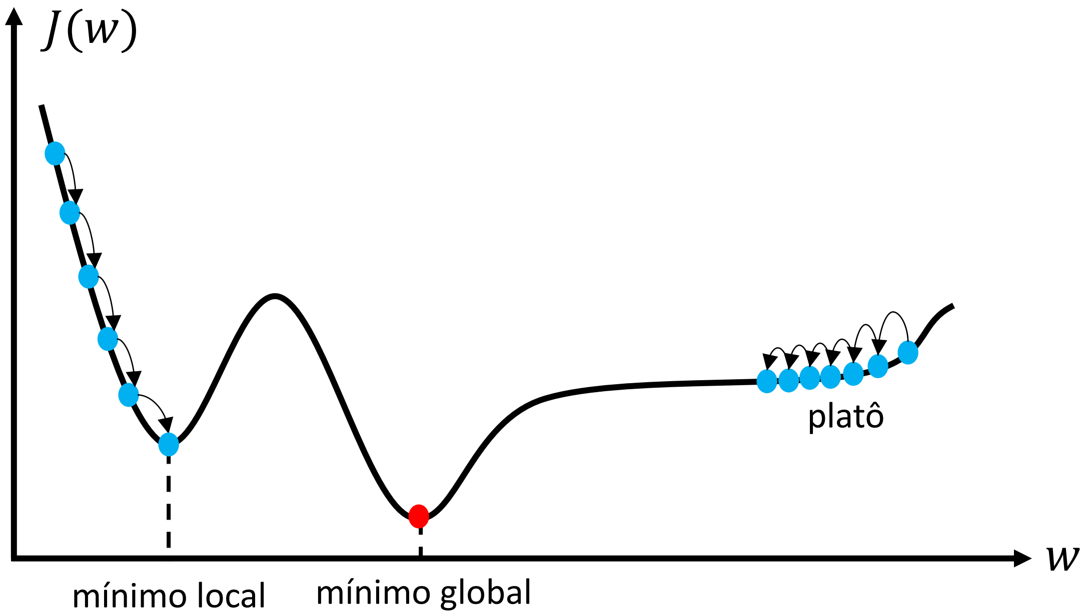

SO YOU ARE TELLING ME
TO TRAIN DEEP LEARNING MODELS IN THE BROWSER?

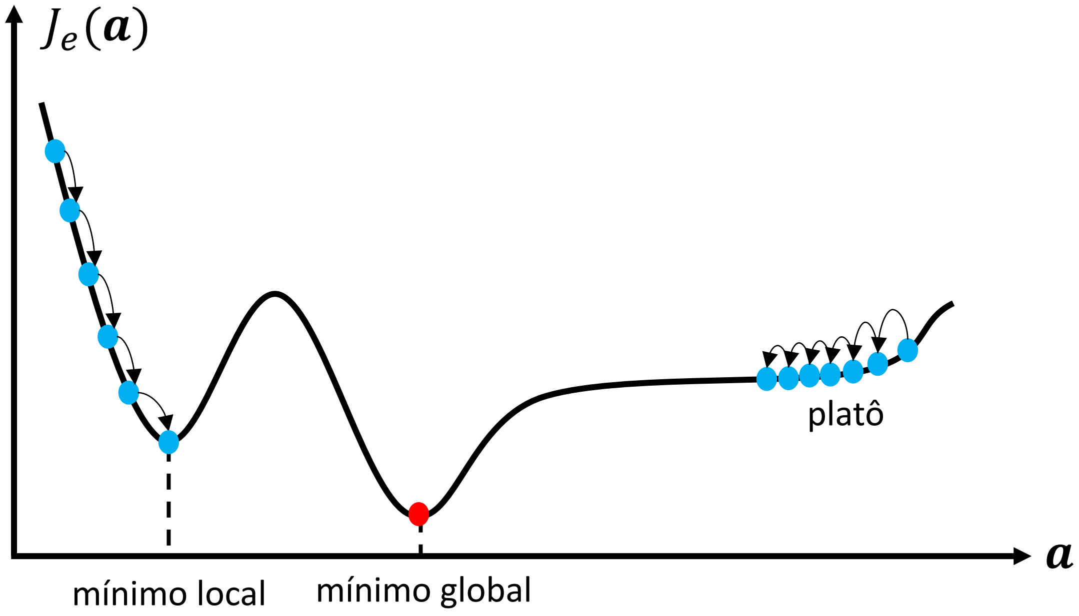

I'M NOT SCARED OF A COMPUTER PASSING THE TURING TEST...
I'M TERRIFIED OF ONE THAT INTENTIONALLY FAILS IT.

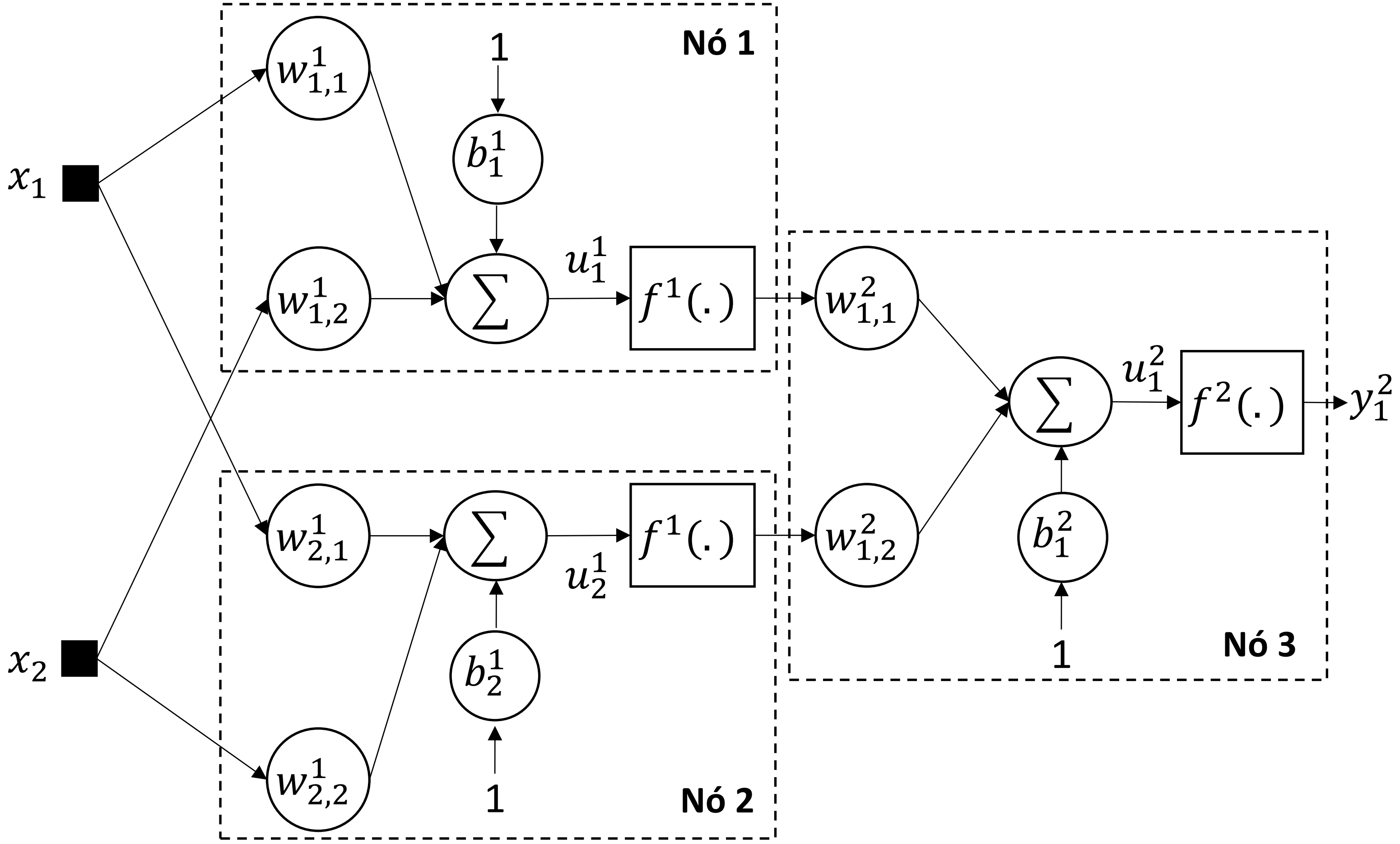

Dog
I NEED GPU FOR MY DUMB NEURAL NETWORK


ONE DOES NOT SIMPLY
GENERATE MEMES USING DEEP LEARNING

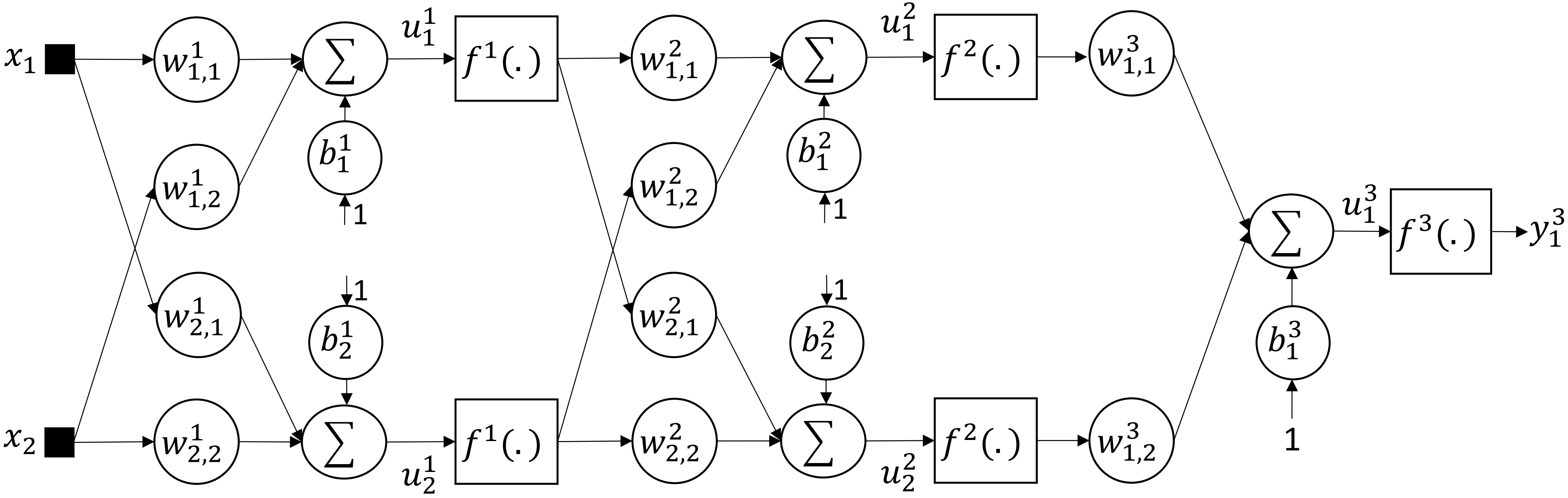
Figuras


$J(w)$
platô
w
mínimo local
mínimo global

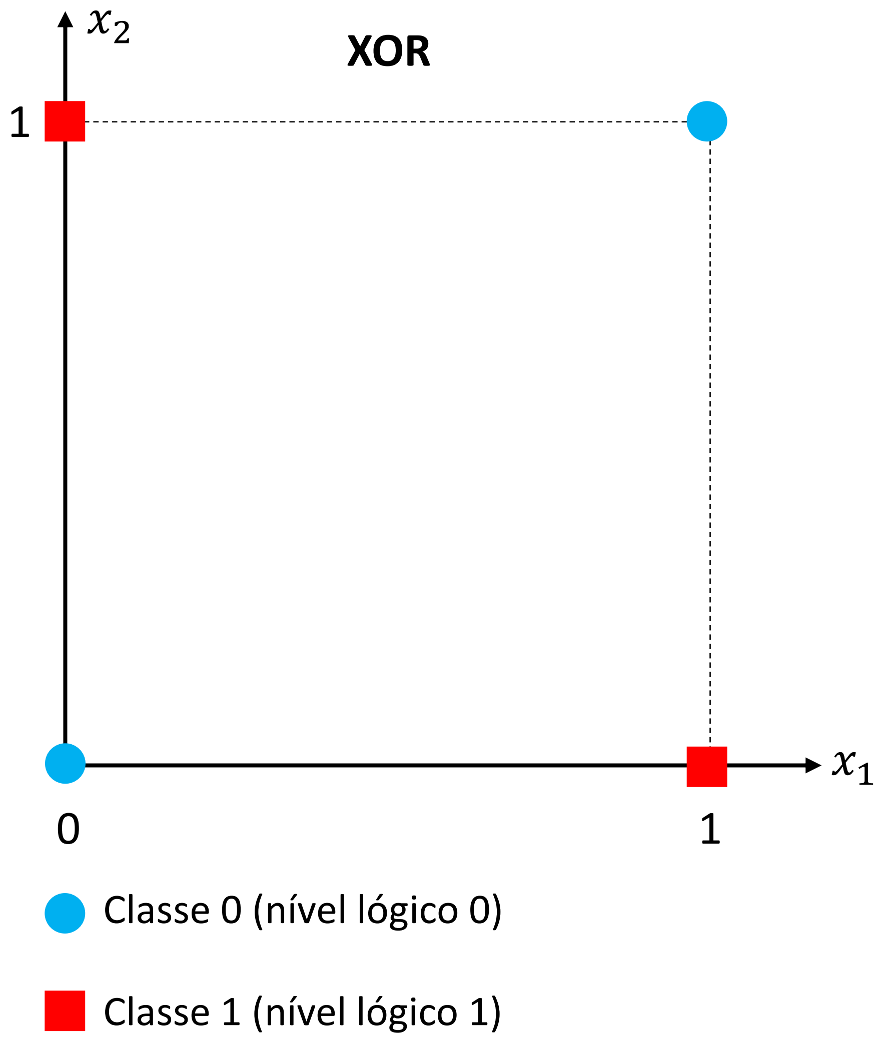

$J_e(\boldsymbol{a})$
platô
$\boldsymbol{a}$
mínimo local
mínimo global



Nó 1
Nó 2
Nó 3
x_1
x_2
$w^1_{1,1}$
$w^1_{1,2}$
$w^1_{2,1}$
$w^1_{2,2}$
$w^2_{1,1}$
$w^2_{1,2}$
b^1_1
b^1_2
b^2_1
1
1
1
$\sum$
$\sum$
$\sum$
u^1_1
u^1_2
u^2_1
$f^1(.)$
$f^1(.)$
$f^2(.)$
y^2_1



x_1
x_2
$w^1_{1,1}$
$w^1_{1,2}$
$w^1_{2,1}$
$w^1_{2,2}$
$\sum$
b^1_1
b^1_2
1
u^1_1
u^1_2
$f^1(.)$
$w^2_{1,1}$
$w^2_{1,2}$
$w^2_{2,1}$
$w^2_{2,2}$
b^2_1
b^2_2
u^2_1
u^2_2
$f^2(.)$
$w^3_{1,1}$
$w^3_{1,2}$
b^3_1
u^3_1
$f^3(.)$
y^3_1


x_2
XOR
1
x_1
0
1
Classe 0 (nível lógico 0)
Classe 1 (nível lógico 1)