Slide 1

TP555 - Inteligência Artificial e Machine Learning:
Redes Neurais Artificiais (Parte II)

Inatel

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

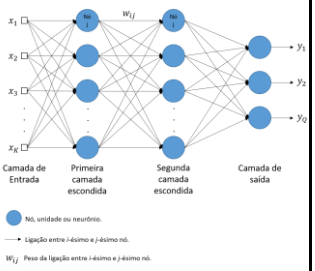
Referências

[1] CYBENKO, G., “Approximation by Superpositions of a Sigmoidal Function”, Mathematics of Control, Signals and Systems, Vol. 2, No. 4, pp. 303 – 314, 1989.
[2] GOODFELLOW, I., BENGIO, Y., COURVILLE, A., Deep Learning, MIT Press, 2016.
HAYKIN, S. Neural Networks and Learning Machines, 3rd edition, Prentice-Hall, 2008.
[3] MAAS, A. L., HANNUN, A. Y., NG, A. Y. “Rectifier Nonlinearities Improve Neural Network Acoustic Models”. Proceedings of the 30th International Conference on Machine Learning (ICML), Atlanta, Georgia, USA, 2013.

Slide 2

Perceptron de Múltiplas Camadas

- Em termos gerais, uma ***rede neural*** nada mais é do que uma coleção de ***neurônios*** (que também são chamados de ***nós*** ou ***unidades***) conectados entre si através de ***ligações direcionadas***.
- As propriedades da ***rede neural*** são determinadas por sua ***topologia*** e pelas propriedades dos ***neurônios***.
- Algumas das limitações do ***perceptrons*** (e.g., classificação apenas de classes linearmente separáveis) podem ser eliminadas adicionando-se camadas intermediárias de ***perceptrons***. A RNA resultante é denominada Perceptron de Múltiplas Camadas (do inglês Multilayer Perceptron - MLP).
- Um exemplo de rede MLP, com duas camadas intermediárias (ou escondidas, ocultas), é mostrado na figura ao lado.
- As RNAs são coração do Deep Learning. Quando uma RNA tem duas ou mais camadas escondidas, ela é chamada ***de rede neural profunda*** (ou do inglês Deep Neural Network - DNN).
- **OBS.**: Em particular, uma MLP pode resolver o problema do XOR (lembre-se que um ***perceptron*** não é capaz de realizar essa tarefa).



Em matemática, mais especificamente na teoria de grafos, um grafo direcionado (ou dígrafo) é um gráfico que é composto de um conjunto de vértices conectados por arestas, onde as arestas têm uma direção associada a eles.

Uma MLP é frequentemente usada para ***classificação***, com cada saída correspondendo a uma classe binária diferente (por exemplo, spam/ham, urgente/não-urgente etc.). Quando as classes são exclusivas (por exemplo, classes 0 a 9 para classificação de dígitos), a camada de saída é tipicamente modificada substituindo as funções de ativação individuais por uma função softmax. A saída de cada neurônio corresponde à probabilidade estimada da classe correspondente. Observe que o sinal flui apenas em uma direção (das entradas às saídas); portanto, essa arquitetura é chamada de rede neural feedforward (FNN).

Perceptron de Múltiplas Camadas

- A ***camada de entrada*** nada mais é que o ponto de passagem dos ***atributos*** à rede.
- As ***camadas intermediárias*** realizam ***mapeamentos não-lineares*** que, idealmente, vão tornando a informação contida nos dados mais ***"explícita"*** do ponto de vista da tarefa que se deseja realizar.
- Por fim, os ***neurônios*** da ***camada de saída*** combinam a informação que lhes é oferecida pela última camada intermediária.
- Redes MLPs são formadas por múltiplas camadas de ***perceptrons***: portanto, naturalmente, tais redes têm por base o ***modelo de neurônio do perceptron***.
- Esse modelo, discutido na aula anterior, é mostrado na figura seguinte.

Slide 4

Perceptron de Múltiplas Camadas

- Uma ***ligação*** do ***nó*** i para o ***nó*** j serve para propagar o sinal de ativação do ***nó*** i para o ***nó*** j. Cada ***ligação*** tem um ***peso*** associado, w_{ij}, que determina a ***força*** e ***sinal*** da ***ligação***.
- Assim como nos modelos de ***regressão linear***, cada ***nó*** tem a entrada 0, x_0, sempre com valor igual a 1 e um peso associado w_{0j}. Ou seja, esta entrada não está conectada a nenhum outro ***nó***.
- Cada ***nó*** j, calcula inicialmente uma soma ponderada de suas entrada da seguinte forma

$$g(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=0}^{K} w_{ij} x_i.$$

- Em seguida, o ***nó*** aplica uma ***função de ativação*** (ou de limiar), $f(.)$, ao somatório acima para obter sua saída

$$y_j = f(g(\boldsymbol{x})) = f\left(\sum_{i=0}^{N} w_{ij} x_i\right) = f(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}).$$

- Veremos a seguir que existem vários tipos de ***funções de ativação***, $f(.)$, que podem ser utilizadas pelos ***nós*** de uma rede MLP.

$$y_j = f\left(\sum_{i=0}^{K} w_{ij} x_i\right),$$

onde x_i é a saída da unidade i e w_{ij} é o peso conectando a saída da unidade i para esta unidade, a unidade j.

Variando-se os pesos das unidades que formam a rede, forma-se um repertório de diferentes tipos de funções com diferentes escalas e orientações. A partir desse repertório, por meio de algoritmos de aprendizado, a rede neural constrói mapeamentos capazes de resolver problemas.

Para que uma rede MLP pudesse ser treinada corretamente, em 1986 D. E. Rumelhart e seus colegas, fizeram uma alteração fundamental na arquitetura do perceptron: substituíram a função step pela função logística (ou sigmoide). Isso foi essencial porque a função step contém apenas segmentos planos, portanto, não há gradiente com o qual se trabalhar (i.e., o algortimo do gradiente descendente não pode se mover em uma superfície plana, ou seja, com gradiente igual a zero), enquanto isso, a função logística possui derivada diferente de zero e bem definida em todos os pontos, permitindo que o algortimo do gradiente descendente faça progresso a cada passo.

Slide 5

Funções de ativação

- Devido às suas caracteristicas, não é comum se empregar a ***função degrau*** como função de ativação em MLPs (possui derivada igual a 0 em todos os pontos, exceto em torno de 0, onde ela é indefinida).
- Até o surgimento das ***redes neurais profundas***, a regra era se utilizar duas funções que são, em essência, versões suavizadas da ***função degrau***: a ***função logística*** ou a ***função tangente hiperbólica***.
- Essas funções possuem derivada definida e diferente de 0 em todos os pontos.
- A ***função logística*** tem a seguinte expressão:

$$y_j = f(z_j) = \frac{e^{pz_j}}{e^{pz_j}+1} = \frac{1}{1+e^{-pz_j}}.$$

- Sua derivada é dada por

$$\frac{dy_j}{dz_j} = py_j(1-y_j) > 0,$$

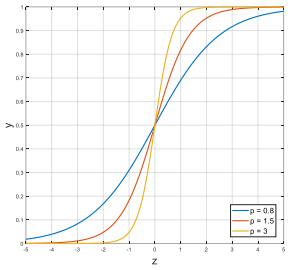
onde p é o ***fator de suavização*** da função de ativação logística.

A derivada será importante, como veremos, no processo de aprendizado da rede neural.

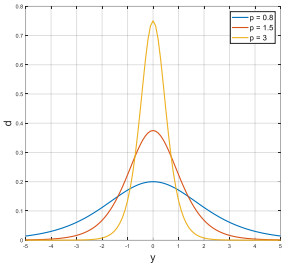
Slide 6

Funções de ativação

- A ***função logística*** e sua derivada são mostradas nas figuras ao lado.



Função Logística.



Derivada da Função Logística.

Slide 7

Funções de ativação

- A ***função tangente hiperbólica*** tem sua expressão dada por:

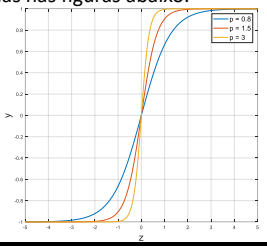
$$y_j = f(z_j) = \tanh(pz_j) = \frac{e^{pz_j} - e^{-pz_j}}{e^{pz_j} + e^{-pz_j}}.$$

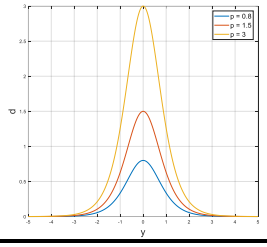
- Sua derivada é dada por

$$\frac{dy_j}{dz_j} = p\left(1 - \tanh^2(pz_j)\right) > 0,$$

onde mais uma vez, o parâmetro p controla a suavidade da função. Essa função e sua derivada são mostradas nas figuras abaixo.

Função Logística.





Derivada da Tangente Hiperbólica.

OBS.: As funções de ativação logística e tangente hiperbólica não podem ser usadas em redes neurais profundas devido ao problema do desvanecimento do gradiente. https://en.wikipedia.org/wiki/Vanishing_gradient_problem

Slide 8

Funções de ativação

- Embora as duas funções apresentadas anteriormente sejam clássicas na área de ***redes neurais***, com o surgimento das **redes neurais profundas**, uma outra função, conhecida como ***função retificadora***, passou a ser a bastante utilizada por uma série de questões numéricas e computacionais.
- A ***função retificadora*** tem sua expressão dada por

$$y_j = f(z_j) = \max(0, z_j).$$

- Sua derivada é dada por

$$\frac{dy_j}{dz_j} = \begin{cases} 0, \text{se } y_j < 0 \\ 1, \text{se } y_j > 0' \end{cases}$$

e indefinido em $y_j = 0$.

- Um ***nó*** que emprega uma ***função de ativação retificadora*** é chamado de ReLU (rectified linear unit).

What are the advantages of ReLU over sigmoid function in deep neural networks? https://stats.stackexchange.com/questions/126238/what-are-the-advantages-of-relu-over-sigmoid-function-in-deep-neural-networks#:~:text=The%20main%20reason%20why%20ReLu,deep%20network%20with%20sigmoid%20activation.

Advantage:

Sigmoid: not blowing up activation
Relu : not vanishing gradient
Relu : More computationally efficient to compute than Sigmoid like functions since Relu just needs to pick max(0,xx) and not perform expensive exponential operations as in Sigmoids
Relu : In practice, networks with Relu tend to show better convergence performance than sigmoid. (Krizhevsky et al.)

Disadvantage:
Sigmoid: tend to vanish gradient (cause there is a mechanism to reduce the gradient as "aa" increase, where "aa" is the input of a sigmoid function. Gradient of Sigmoid: S’(a)=S(a)(1−S(a))S’(a)=S(a)(1−S(a)). When "aa" grows to infinite large , S’(a)=S(a)(1−S(a))=1×(1−1)=0S’(a)=S(a)(1−S(a))=1×(1−1)=0).
Relu : tend to blow up activation (there is no mechanism to constrain the output of the neuron, as "aa" itself is the output)
Relu : Dying Relu problem - if too many activations get below zero then most of the units(neurons) in network with Relu will simply output zero, in other words, die and thereby prohibiting learning.(This can be handled, to some extent, by using Leaky-Relu instead.)

Just complementing the other answers:

Vanishing Gradients

The other answers are right to point out that the bigger the input (in absolute value) the smaller the gradient of the sigmoid function. But, probably an even more important effect is that the derivative of the sigmoid function is **ALWAYS smaller than one**. In fact it is at most 0.25!

The down side of this is that if you have many layers, you will multiply these gradients, and the product of many smaller than 1 values goes to zero very quickly.

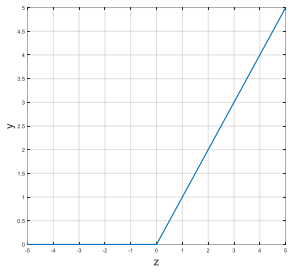
Since the state of the art of for Deep Learning has shown that more layers helps a lot, then this disadvantage of the Sigmoid function is a game killer. **You just can't do Deep Learning with Sigmoid.**

On the other hand the gradient of the ReLu function is
either 00 for a<0a<0 or 11 for a>0a>0. That means that you can put as many layers as you like, because multiplying the gradients will neither vanish nor explode.

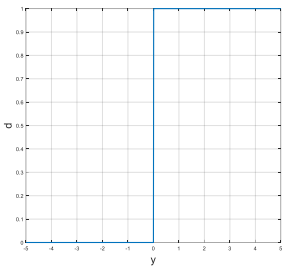
Slide 9

Funções de ativação

- A ***função retificadora*** e sua derivada são mostradas nas figuras ao lado.



Função Logística.



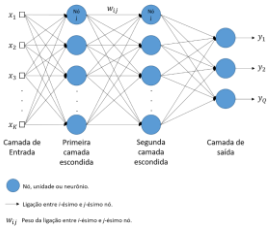
Derivada da Função Retificadora.

Existem vários outros tipos de funções de ativação, cada uma com suas vantagens e desvantagens.
O link abaixo contem uma lista com vários tipos de funções de ativação.
https://en.wikipedia.org/wiki/Activation_function#Comparison_of_activation_functions

Slide 10

Conectando Neurônios

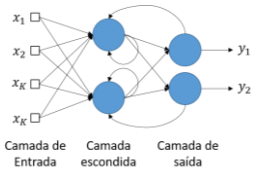
- Existem basicamente duas maneiras distintas para se conectar os ***nós*** (ou ***neurônios***) de uma rede.
- Na figura ao lado, os ***nós*** da rede tem conexões em apenas uma única direção.
- Esse tipo de rede é conhecida como ***rede de alimentação direta*** ou ***sem realimentação***.
- O sinal percorre a rede em uma única direção, da entrada para a saída.
- Os ***nós*** da mesma camada não são conectados.
- Esse tipo de rede representa uma função de suas entradas atuais e, portanto, não possui um estado interno além dos próprios pesos



Slide 11

Conectando Neurônios

- Na figura ao lado, os ***nós*** da rede tem conexões em 2 direções, desta forma, o sinal percorre a rede em duas direções.
- Este tipo de rede é conhecida como ***rede recorrente*** ou ***rede com realimentação***.
- Nessas redes, a saída de alguns ***nós*** alimentam ***nós*** da mesma camada (inclusive o próprio ***nós***) ou de camadas anteriores.
- Isso significa que os níveis de ativação da rede formam um ***sistema dinâmico*** que pode atingir um estado estável, exibir oscilações ou mesmo um comportamento caótico.
- Além disso, a resposta da rede a uma determinada entrada depende do seu estado inicial, que pode depender das entradas anteriores.
- Portanto, ***redes recorrentes*** podem suportar memória de curto prazo.
- Essas redes são úteis para o processamento de dados sequenciais, como som, dados de séries temporais ou linguagem natural.



Slide 12

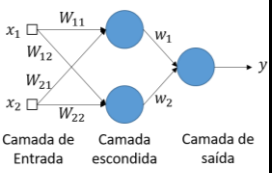
Regressão Não-Linear

- A rede MLP ao lado tem sua saída definida por

$$y = f(f(\boldsymbol{W}\boldsymbol{x})\boldsymbol{w}),$$

onde f é a ***função de ativação*** escolhida.

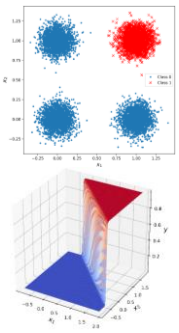
- Perceba que a saída da rede é dada pelo aninhamento das saídas de ***funções de ativação não-lineares***.
- Sendo assim, as funções que uma rede pode representar podem ser altamente não-lineares dependendo da quantidade de camadas e nós.
- Portanto, redes neurais podem ser vistas como ferramentas para a realização de ***regressão não-linear***.
- Com uma única camada oculta suficientemente grande, é possível representar qualquer função contínua das entradas com uma precisão arbitrária.
- Com duas camadas ocultas, até funções descontínuas podem ser representadas.
- Portanto, dizemos que as redes neurais possuem ***capacidade de aproximação universal*** de funções.
- À seguir, eu apresento alguns exemplos.



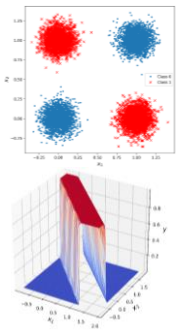
Slide 13

Regressão Não-Linear

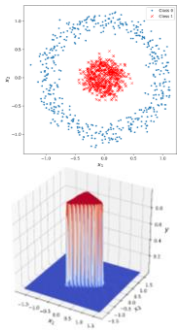
Função AND: MLP com 1 camada escondida. Total: 1 nó.



Função XOR: MLP com 2 camadas escondidas. Total: 3 nós.



Círculos concêntricos: MLP com 2 camadas escondidas. Total: 6 nós.



Aprendizado em Redes Neurais

- Consideramos agora, o processo de otimização, ou seja, de adaptação dos ***pesos sinápticos***.
- Vamos considerar que o processo de otimização corresponde a uma tarefa de minimização de uma ***função custo***, $J(\boldsymbol{w})$, com respeito a um vetor de pesos $\boldsymbol{w}$.
- Portanto, o problema de aprendizado em redes neurais pode ser formulado como

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

- Normalmente, esse processo de otimização é conduzido de forma iterativa, o que dá 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, $J(\boldsymbol{w})$.

Aprendizado em Redes Neurais

- Dentre esses métodos, existem os de ***primeira ordem*** e os de ***segunda ordem***.
- Os métodos de ***primeira ordem*** são baseados nas derivadas de primeira ordem da ***função custo***, **geralmente** agrupadas em um vetor chamado ***vetor gradiente***:

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

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

Aprendizado em Redes Neurais

- Desta maneira, temos a seguinte ***equação de atualização dos pesos***

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

onde α é o ***passo de aprendizagem***.

- Como já discutido anteriormente, a escolha do ***passo de aprendizagem*** é muito importante. Lembrem-se que passos muito grandes podem levar à instabilidade, enquanto passos muito pequenos podem levar a uma convergência muito lenta.
- Já os métodos de ***segunda ordem***, são baseados na informação trazida pela segunda derivada da função custo. Essa informação está contida na ***matriz hessiana*** $\boldsymbol{H}$:

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

Slide 17

Aprendizado em Redes Neurais

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

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

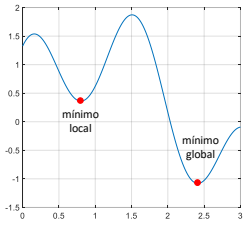
- Essa expressão requer que a ***matriz hessiana*** seja inversível, e também que ela seja ***definida positiva*** a cada iteração.
- Uma vez que a aproximação de Taylor com informação de ordem dois é mais ampla que aquela fornecida por métodos de primeira ordem, a tendência é que um método de ***segunda ordem*** convirja em menos passos que um método 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***, que representam uma espécie de compromisso entre complexidade e desempenho.

Se necessário, há métodos numéricos para “forçar” que a matriz hessiana seja inversível.

Slide 18

Mínimos Locais, Mínimos Globais e Pontos de Sela

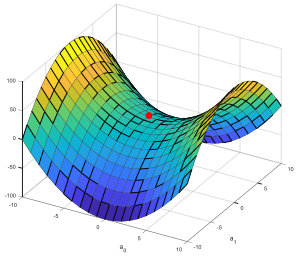
- É importante resaltarmos que todos esses métodos são métodos de ***busca local***, ou seja, eles têm convergência esperada para ***mínimos locais***. Para relembrarmos o que é um mínimo local, vejamos a figura ao lado onde existem dois mínimos:
  - Um deles é uma solução ótima em relação a seus vizinhos, ou seja, um ***mínimo local***.
  - O outro também é uma solução ótima em relação a seus vizinhos e em relação a todo o domínio considerado. Este é um ***mínimo global***.



Slide 19

Mínimos Locais, Mínimos Globais e Pontos de Sela

- Para valores adequados do **passo de adaptação**, α, um ***mínimo local*** tende a atrair o vetor de pesos quando este se encontra em sua vizinhança.
- De maneira mais rigorosa, podemos dizemos que cada mínimo tem sua ***bacia de atração***.
- Outro ponto que se dese mencionar são os chamados ***pontos de sela***, que são pontos que, em algumas direções são ***atratores***, mas em outras não.
- Embora, a longo prazo, o algoritmo não vá convergir para esses pontos, ele pode passar um longo período de tempo sendo atraído por eles, o que prejudica seu desempenho.
- A figura ao lado mostra um exemplo.



Slide 20

Retropropagação do Erro (Error Backpropagation)

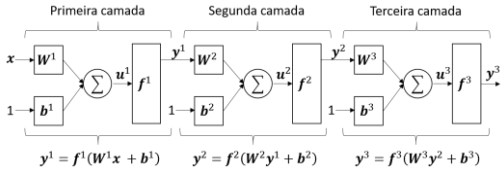
- Conforme discutimos anteriormente, os métodos fundamentais de ***aprendizado*** em ***redes neurais*** são baseados no cálculo de derivadas da ***função custo*** com respeito aos ***pesos sinápticos***.
- Esses métodos buscam, fundamentalmente, encontrar o conjunto de pesos que minimize a medida de erro escolhida.
- A ideia é encontrar uma maneira de calcular o ***vetor gradiente*** da ***função custo*** com respeito aos ***pesos sinápticos***.
- Essa tarefa pode parecer óbvia, mas não é o caso. Para que entendamos melhor o porquê, nós iremos considerar uma notação que será valiosa à seguir:
  - O peso $w_{i,j}^{m}$ corresponde ao j-ésimo peso do i-ésimo ***nó*** (ou ***neurônio***) da m-ésima camada da ***rede neural***.
  - Com essa notação, obter o ***vetor gradiente*** significa calcular, de maneira genérica, $\frac{\partial J}{\partial w_{i,j}^{m}}$, ou seja, calcular essa derivada para todos os pesos de todos os ***nós***.

O processo de ajuste dos pesos da rede neural pode ser resumido da seguinte forma: para cada exemplo de treinamento, o algoritmo de retropropagação primeiro faz uma previsão (passagem direta, ou ***forward***), calcula o erro e em seguida, passa por cada camada no sentido inverso para medir a contribuição do erro de cada conexão (passagem reversa) e, finalmente, o algortimo ajusta ligeiramente os pesos da conexão para reduzir o erro (etapa do gradiente descendente).

Slide 21

Retropropagação do Erro (Error Backpropagation)

- 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:

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

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

Slide 22

Retropropagação do Erro (Error Backpropagation)

- Nós vamos assumir que a última camada da rede MLP (denotada como a M-ésima camada) tenha uma quantidade genérica, N_M, de ***nós***.

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

onde $d_j(n)$ 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***, mas estes não aparecem de maneira explícita na expressão de $J(.)$.
- Para fazer com que sua dependência apareça de maneira clara na expressão acima, nós vamos precisar recorrer a aplicações sucessivas da ***regra da cadeia***.
- Usando a notação de ***Leibniz***, essa regra nos mostra que:

$$\frac{dz}{dx} = \frac{dz}{dy}\frac{dy}{dx}.$$

- Por exemplo, considere que tenhamos $z = e^{x^2}$ e queiramos obter $\frac{dz}{dx}$. Nós podemos fazer $y = x^2$ e usar a regra da cadeia:

$$\frac{dz}{dx} = \frac{dz}{dy}\frac{dy}{dx} = e^y 2x = 2xe^{x^2}.$$

Retropropagação do Erro (Error Backpropagation)

- Agora voltamos à equação do MSE e vemos que as saídas da última camada aparecem de maneira direta.
- Isso significa que é simples obter as derivadas de com respeito aos pesos da camada de saída.
- Porém, quando se busca avaliar as derivadas com respeito aos pesos das camadas anteriores, a situação fica mais complexa, pois não existe mais uma dependência direta.
- Como podemos atribuir a cada ***nó*** de uma camada anterior sua devida influência na composição da saída e do erro?
- Essa "caminhada de trás para a frente", da saída (na qual se gera o erro) para a entrada, tendo por base a ***regra da cadeia***, corresponde ao processo conhecido como ***retropropagação do erro*** (***error backpropagation***, ou simplesmente ***backpropagation***).
- À seguir, nós veremos de maneira mais sistemática como a ***retropropagação do erro*** é realizada.

Slide 24

Retropropagação do Erro (Error Backpropagation)

- Inicialmente, nós devemos observar um fato fundamental. O cálculo da derivada do MSE com respeito a um peso qualquer é dada por:

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

- A equação acima mostra que é necessário calcular a expressão do gradiente apenas para o n-ésimo dado, pois o gradiente médio será uma média de ***gradientes particulares*** (ou ***locais***) associados a cada amostra.

Perceba que, nas equações acima, a divisão pelo número de amostras foi omitida pois isso não afeta a otimização.

Retropropagação: Algumas noções básicas

- Considerando novamente a derivada geral $\frac{\partial J}{\partial w_{i,j}^m}$ (i.e., um elemento genérico do gradiente). Usando a ***regra da cadeia***, podemos escrever o seguinte:

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

- A primeira derivada do produto do segundo membro é a derivada da ***função de custo*** com respeito à ativação do i-ésimo ***nó*** da m-ésima camada. Essa grandeza será chamada de ***sensibilidade*** e é denotada pela letra grega δ (delta). Desta forma:

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

- Esse termo é único para cada ***nó***. O outro termo, por sua vez, varia ao longo das entradas do ***nó*** em questão. Uma vez que vale o modelo ***tipo perceptron***, a ativação é uma ***combinação linear*** das entradas:

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

Slide 26

Retropropagação: Algumas noções básicas

- Assim

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

- 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 com respeito aos pesos sinápticos são produtos de um valor delta, δ_i^m, por uma entrada (ou, no caso de 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

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

- São os valores de ***delta,*** 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 (apenas o valor de uma entrada).
- Portanto, a estratégia de otimização adotada éseguinte: começa-se pela saída (onde o erro é gerado) e encontra-se uma regra recursiva que gere os valores de ***delta*** para os ***nós*** das camadas anteriores até a primeira camada intermediária. Esse processo é chamado de ***retropropagação do erro***.

Retropropagando o erro

- Para facilitar a ***retropropagação do erro***, nós vamos inicialmente agrupar todos os valores δ_i^m de uma camada em um vetor $\boldsymbol{\delta}^m$.
- Em seguida, vamos encontrar uma regra que fará a transição $\boldsymbol{\delta}^m \rightarrow \boldsymbol{\delta}^{m-1}$.
- Ao final, iremos calcular o vetor da última camada $\boldsymbol{\delta}^M$ e, de maneira recursiva, vamos obter os vetores de todas as camadas e portanto, esse é o processo de ***retropropagação*** (ou ***backpropagation***).
- Para calcular $\boldsymbol{\delta}^M$ nós iremos considerar N_M saídas e assim, temos que o i-ésimo elemento é dado por:

$$\delta_i^M = \frac{\partial \sum_{j=1}^{N_M} e_j^2}{\partial u_i^M} = \frac{\partial \sum_{j=1}^{N_M} \left(d_j - y_j^M\right)^2}{\partial u_i^M} = -2\left(d_j - y_j^M\right)\frac{\partial y_i}{\partial u_i^M} = -2\left(d_j - y_j^M\right) f^M\left(u_i^M\right)$$

Retropropagando o erro

- Matricialmente podemos expressar $\boldsymbol{\delta}^M$ 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 definida como

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

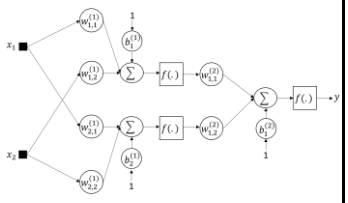
- Desta forma, a aplicação sucessiva da ***regra da cadeia*** leva a uma recursão que, em termos matriciais/vetoriais, é simples e dada por

$$\boldsymbol{\delta}^m = \boldsymbol{F}^m(\boldsymbol{u}^m)(\boldsymbol{W}^{m+1})^T\boldsymbol{\delta}^{m+1}.$$

Slide 29

Exemplo da retropropagação do erro

- Considere uma rede MLP com uma camada intermediária e apenas um ***nó*** na camada de saída, como a mostrada na figura ao lado.
- Temos neste exemplo $M = 2$.
- Devemos começar calculando $\boldsymbol{\delta}^2$. Perceba que essa ***sensibilidade*** é um escalar porque há apenas um neurônio na camada de saída.
- Vamos considerar um único dado com entrada $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2]$ e saída desejada d.
- Inicialmente, temos de supor que a rede terá uma certa configuração 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***).



Slide 30

Exemplo da retropropagação do erro

- 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:

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

- Temos, portanto, nossa primeira ***sensibilidade***. Agora, usaremos a recursão para ***retropropagar*** o erro até a camada anterior. A fórmula 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

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

Note que o $\boldsymbol{u^2}$ aqui não significa “ao quadrado”, mas sim a indicação de que se trata de uma saída da camada $\mathcal{M} = 2$.

Exemplo da retropropagação do erro

- Portanto,

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

- Observe que, para calcular o gradiente, não basta apenas calcular os ***deltas***: é necessário multiplicá-los pelas entradas correspondentes (observando que os ***bias*** estão ligados a entradas com valores constantes iguais a 1).

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado

- Podemos dizer que os elementos básicos do aprendizado através de redes neurais foram apresentados até aqui.
- Porém, existem importantes aspectos práticos que devem ser comentados de modo a deixá-los mais familiarizados com as práticas atuais.
- Começamos falando da questão do cálculo do ***vetor gradiente***.

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado - Estimação: Online, Batch e Minibatch

- Conforme vimos nos slides anteriores, a base para o aprendizado em redes MLP é a obtenção do ***vetor gradiente*** e o estabelecimento de um processo iterativo de busca de ***pesos sinápticos*** que minmizem a ***função de custo***.
- Vimos que a obtenção do ***vetor gradiente*** se dá através de um processo de ***retropropagação*** em que há uma parte direta (***forward***) de apresentação de um dado e obtenção da resposta da rede e uma etapa de ***retropropagação*** em que se calculam as derivadas necessárias.
- Vimos também que se calcula o gradiente associado a cada exemplo de entrada e que a combinação de todos esses gradientes locais leva ao gradiente estimado para o conjunto de dados inteiro.

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

- No entanto, surge aqui um questionamento interessante: o que é melhor, usar o gradiente local e já dar um passo de otimização ou reunir o gradiente completo e então dar um passo único e mais preciso?

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado - Estimação: Online, Batch e Minibatch

- Nesse questionamento, existem duas abordagens: o cálculo ***online*** do gradiente (exemplo-a-exemplo) e o cálculo em ***batch*** (em batelada) do gradiente.
- Vejamos inicialmente a noção geral de ***adaptação dos pesos sinápticos*** com cálculo ***online*** do gradiente, como expressa o seguinte algoritmo, um método clássico de ***primeira ordem***.

- Defina valores iniciais para o vetor de pesos $\boldsymbol{w}$ e um passo de aprendizagem α pequeno.
- Faça $n = 0$, $t = 0$ e calcule $J(\boldsymbol{w}(n))$.
- Enquanto o critério de parada não for atendido, faça:
  - Ordene aleatoriamente os exemplos de entrada/saída.
  - Para l variando de 1 até N, faça:
    - Apresente o exemplo l de entrada à rede.
    - Calcule $J_l(\boldsymbol{w}(t))$ e $\nabla J_l(\boldsymbol{w}(t))$.
    - $\boldsymbol{w}(t+1) = \boldsymbol{w}(t) - \alpha \nabla J_l(\boldsymbol{w}(t))$; $t = t + 1$.
  - $k = k + 1$.
  - Calcule $J(\boldsymbol{w}(n))$.

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado - Estimação: Online, Batch e Minibatch

- O outro extremo seria utilizar todo o conjunto de dados para estimar o gradiente antes de dar o passo do processo iterativo de aprendizagem.
- Essa é a ideia por trás da abordagem em ***batch***. O algoritmo abaixo ilustra a operação correspondente (novamente considerando uma metodologia de ***primeira ordem***).

- Defina valores iniciais para o vetor de pesos $\boldsymbol{w}$ e um passo de aprendizagem α pequeno.
- Faça $n = 0$ e calcule $J(\boldsymbol{w}(n))$.
- Enquanto o critério de parada não for atendido, faça:
  - Para l variando de 1 até N, faça:
    - Apresente o exemplo l de entrada à rede.
    - Calcule $J_l(\boldsymbol{w}(t))$ e $\nabla J_l(\boldsymbol{w}(t))$.
  - $\boldsymbol{w}(k+1) = \boldsymbol{w}(k) - \frac{\alpha}{N}\sum_{l=1}^{N} \nabla J_l(\boldsymbol{w}(n))$.
  - $k = k + 1$.
  - Calcule $J(\boldsymbol{w}(n))$.

Slide 36

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado - Estimação: Online, Batch e Minibatch

- Nas modernas ***redes neurais profundas*** (ou ***deep learning***), usadas com muita frequência em problemas com enormes conjuntos de dados, a regra é adotar o caminho do meio, usando a abordagem com ***mini-batches***.
- Nesse caso, a adaptação dos ***pesos*** é realizada com um gradiente calculado a partir de um meio-termo entre um exemplo e o número total de exemplos (em geral, este é um valor relativamente pequeno em métodos de ***primeira ordem***).
- As amostras que devem compor o ***mini-batch*** são ***aleatoriamente*** tomadas do conjunto de dados. O algoritmo abaixo ilustra isso.

- Defina valores iniciais para o vetor de pesos $\boldsymbol{w}$ e um passo de aprendizagem α pequeno.
- Faça $n = 0$ e calcule $J(\boldsymbol{w}(n))$.
- Enquanto o critério de parada não for atendido, faça:
  - Para l variando de 1 até m, faça:
    - Apresente o exemplo l de entrada, amostrado para compor um ***minibatch***, à rede.
    - Calcule $J_l(\boldsymbol{w}(t))$ e $\nabla J_l(\boldsymbol{w}(t))$.
  - $\boldsymbol{w}(k+1) = \boldsymbol{w}(k) - \frac{\alpha}{\boldsymbol{m}} \sum_{l=1}^{\boldsymbol{m}} \nabla J_l(\boldsymbol{w}(n))$.
  - $k = k + 1$.
  - Calcule $J(\boldsymbol{w}(n))$.

Variações dos algoritmos de otimização dos pesos: Método do Gradiente Estocástico

- Existem vários algoritmos baseados no ***gradiente*** que podem ser empregados para otimizar os ***pesos sinápticos*** de uma rede neural.
- Aqui, vamos nos ater a alguns métodos muito usuais na literatura moderna, que se encontra bastante focada em ***apredizado profundo***.

➢ **Método do Gradiente Estocástico (Stochastic Gradient Descent, SGD)**

- Nos slides anteriores, nós vimos que o método ***online*** utiliza um único exemplo (tomado aleatóriamente) para estimar o gradiente da ***função custo***.
- Este tipo de estimador é o que gera a noção de ***gradiente estocástico***. Caso utilizemos ***mini-batches***, também teremos uma estimativa do ***gradiente***, o qual, a rigor, seria determinístico apenas se usássemos todos os dados (no caso do ***batch***).
- Por esse motivo, métodos de ***primeira ordem***, como os que vimos, são conhecidos como métodos de ***stochastic gradient descent*** (SGD).

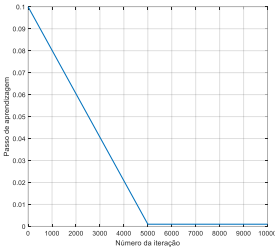
Variações dos algoritmos de otimização dos pesos: Método do Gradiente Estocástico

- A tarefa de escolha do ***passo de aprendizagem*** é complicada e nos remete ao conhecido compromisso entre velocidade de convergência e estabilidade/precisão.
- Pode-se usar um valor fixo, mas geralmente, se adota um método de variação linear decrescente de um valor α_0 a um valor α_τ (i.e., da iteração 0 à iteração τ):

$$\alpha_j = \left(1 - \frac{j}{\tau}\right)\alpha_0 + \frac{j}{\tau}\alpha_\tau,$$

onde j é o número da iteração de treinamento.

- Após a τ-ésima iteração, pode-se deixar o valor do passo de aprendizagem fixo, como mostrado na figura ao lado.
- Naturalmente, a definição dos valores necessários (i.e., α_0 e α_τ) é mais um problema ***a ser tratado caso-a-caso***.



- $N = 10000$
- Tamanho do batch: 100
- Número de épocas: 100
- $\alpha_0 = 0.1$
- $\alpha_\tau = (\frac{1}{100})\alpha_0$
- τ = 5000

Slide 39

Variações dos algoritmos de otimização dos pesos: Momento

➢**Momento**

- O uso de um ***termo de momento*** numa metodologia de gradiente pode ser interessante por trazer, para o ***ajuste de pesos*** em determinada iteração, informação de gradientes anteriores acumulados. Isso, em certas situações, melhora a característica de convergência.
- Vamos partir de um esquema de aprendizado em mini-batch. Seja $\boldsymbol{g}$ o ***gradiente*** calculado para o mini-batch e $\boldsymbol{v}$ um ***termo de velocidade***. O termo $\boldsymbol{v}$ dá a direção e a velocidade na qual os pesos se movem pelo espaço de pesos.
- A ***velocidade*** é atualizada da seguinte forma:

$$\boldsymbol{v} \leftarrow \varphi \boldsymbol{v} - \alpha \boldsymbol{g}.$$

- O hiperparâmetro φ (phi) $\in [0,1)$ determina com que rapidez as contribuições de gradientes anteriores decaem exponencialmente.
- A ***atualização dos pesos*** é dada por

$$\boldsymbol{w} \leftarrow \boldsymbol{w} + \boldsymbol{v}.$$

- O efeito do ***termo de momento*** pode ser visto como algo que se acumula de acordo com a regra de uma progressão geométrica. Portanto, podemos pensar em seu efeito de aceleração no sentido contrário do gradiente à luz do termo $\frac{1}{1-\varphi}$. Valores típicos de φ são 0,5, 0,9 e 0,99.
- Também é possível planejar uma progressão de φ (phi) com o número de iterações.

Embora o gradiente descendente estocástico continue sendo uma estratégia de otimização muito popular, o aprendizado com ele as vezes pode ser lento. O método do momento é projetado para acelerar o aprendizado, especialmente em caso de alta curvatura, gradientes pequenos mas consistentes ou gradientes ruidosos. O algoritmo do momento acumula uma média móvel exponencialmente decadente dos gradientes passados e continua a se mover em sua direção.

Slide 40

Variações dos algoritmos de otimização dos pesos: Momento de Nesterov e Passo de Aprendizado Adaptativo

- **Momento de Nesterov**
  - O método do ***momento de Nesterov*** pode ser visto, essencialmente, como uma variação do ***método do momento*** em que o cálculo do ***vetor gradiente*** não é feito sobre o vetor de pesos $\boldsymbol{w}$, mas sim sobre $\boldsymbol{w} + \varphi \boldsymbol{v}$. Esse termo adicional funciona como um fator de correção que pode beneficiar, em alguns casos, a velocidade de convergência.
- **Modelos com Passo de Aprendizagem Adaptativo**
  - Como discutimos anteriormente, o ***passo de aprendizagem*** é um hiperparâmetro difícil de se ajustar bem e bastante relevante para o sucesso do treinamento de uma rede neural. Isso motivou o surgimento de um conjunto de métodos com mecanismos capazes de modificá-lo dinamicamente. Dentre as técnicas mais populares dessa classe estão o ***AdaGrad***, o ***RMSProp*** e o ***Adam*** (de "adaptive moments").

Para mais informações sobre esses **Modelos com Passo de Aprendizagem Adaptativo** vejam:

[2] GOODFELLOW, I., BENGIO, Y., COURVILLE, A., Deep Learning, MIT Press, 2016.
HAYKIN, S. Neural Networks and Learning Machines, 3rd edition, Prentice-Hall, 2008.

Slide 41

Inicialização dos Pesos

- Uma vez que os métodos de treinamento de ***redes neurais MLP*** são iterativos, eles dependem de uma ***inicialização***.
- Como os métodos são de ***busca local***, a inicialização pode afetar drasticamente a qualidade da solução obtida.
- O ***ponto de inicialização*** pode determinar se o algoritmo converge, sendo alguns pontos iniciais tão instáveis que o algoritmo encontra dificuldades numéricas e falha completamente.
- Também pode haver variações expressivas do ponto de vista da ***velocidade de convergência***.
- Um ponto importante da inicialização é "***quebrar a simetria***" entre os ***nós***, ou seja, se dois ***nós*** ocultos (i.e., ***nós*** de camadas ocultas) com a mesma ***função de ativação*** estiverem conectados às mesmas entradas, esses ***nós*** deverão ter pesos iniciais diferentes. Isso, portanto, sugere uma ***abordagem aleatória***.

O ponto inicial pode determinar se o algoritmo converge, sendo alguns pontos iniciais tão instáveis que o algoritmo encontra dificuldades numéricas e falha completamente.

Se dois nós ocultos com a mesma função de ativação estiverem conectados às mesmas entradas, esses nós deverão ter pesos iniciais diferentes. Se eles tiverem os mesmos pesos iniciais, um algoritmo de aprendizado determinístico aplicado a um custo e modelo determinísticos atualizará constantemente essas duas unidades da mesma maneira. Mesmo que o modelo ou o algoritmo de treinamento seja capaz de usar processos estocásticos para calcular atualizações diferentes para nós diferentes, geralmente é melhor inicializar cada nó para calcular uma função diferente de todas os outros nós.

Inicialização dos Pesos

- Os pesos tipicamente são obtidos de ***distribuições gaussianas*** ou ***uniformes***. A ordem de grandeza desses pesos levanta algumas discussões:
  - Pesos de maior magnitude criam maior distinção entre ***nós*** (i.e., a ***quebra de simetria***). Por outro lado, isso pode causar problemas de instabilidade.
  - Pesos de maior magnitude favorecem a propagação de informação, porém, por outro lado, causam preocupações do ponto de regularização.
  - Pesos de magnitude elevada podem levar os ***nós*** (no caso de ***funções de ativação*** do tipo sigmoide como a tangente hiperbólica e a função logística) a operarem numa região de saturação, comprometendo a convergência do algoritmo.

Slide 43

Inicialização dos Pesos

- Portanto, podemos citar algumas heurísticas para inicializar os pesos.
- Uma primeira seria, para uma camada com m entradas e n saídas, inicializar os pesos com valores retirados da seguinte distribuição:

$$w_{i,j} \sim U\left(-\frac{1}{\sqrt{m}}, \frac{1}{\sqrt{m}}\right),$$

onde $U(.)$ é a ***distribuição uniforme***.

- Outra heurística de inicialização dos pesos seria:

$$w_{i,j} \sim U\left(-\sqrt{\frac{6}{m+n}}, \sqrt{\frac{6}{m+n}}\right).$$

- Uma heurística para a inicialização dos termos de ***bias*** é inicializá-los com ***valores nulos***. Esta heurística se mostra bastante eficiente na maioria dos casos.

Para mais informações sobre a inicialização dos pesos vejam:
[2] GOODFELLOW, I., BENGIO, Y., COURVILLE, A., Deep Learning, MIT Press, 2016.
HAYKIN, S. Neural Networks and Learning Machines, 3rd edition, Prentice-Hall, 2008.

Slide 44

Redes Neurais MLP com SciKit-Learn

- A biblioteca SciKit-Learn disponibiliza algumas classes para o treinamento de redes neurais multi-layer perceptron.
- Entretanto, as implementações desta biblioteca não se destinam à aplicações de larga escala.
- Em particular, a biblioteca scikit-learn não oferece suporte à GPUs. Para implementações muito mais rápidas, baseadas em GPU, bem como estruturas que oferecem muito mais flexibilidade para criar arquiteturas de aprendizado profundo devemos utilizar outras bibliotecas como:
  - ***keras***: uma biblioteca para desenvolvimento de aplicações Deep Learning capaz de rodar sobre o TensorFlow ou o Theano.
  - ***skorch***: uma biblioteca de rede neural compatível com o scikit-learn que ecapsula a biblioteca PyTorch.
  - Entre outras: https://scikit-learn.org/stable/related_projects.html#related-projects

Para mais informações sobre a implementação de redes MLP na biblioteca SciKit-Learn, visite o seguinte site:

https://scikit-learn.org/stable/modules/neural_networks_supervised.html

Slide 45

Detecção de símbolos QPSK com MLPClassifier

```
from sklearn.neural_network import MLPClassifier
import numpy as np

# Number of QPSK symbols to be transmitted.
N = 10000

# ********** Modulation **********
# Generate N binary symbols.
bits = np.random.randint(0,4,(N,1))
# Modulate the binary stream into QPSK symbols.
s = mod(bits)

# ********** AWGN Channel **********
# Generate noise vector.
np.random.seed(seed)
noise = np.sqrt(1.0/2.0)*(np.random.randn(N, 1) + 1j*np.random.randn(N, 1))
# Pass symbols through AWGN channel.
y = s + np.sqrt(0.2)*noise

# ********** Demodulation **********
# Instantiate Multi layer Perceptron Classifier.
clf = MLPClassifier(hidden_layer_sizes=(10,4), activation='logistic', solver='sgd', batch_size=50,
learning_rate='adaptive', random_state=seed, max_iter=4000)
# Split arrays into random train and test subsets.
s_test, s_train, y_test, y_train, b_test, b_train = train_test_split(s, y, bits, random_state=seed)
# SciKit-learn's MLPs do not support complex signals, then we split it into real and imag parts.
Y = np.c_[y_train.real,y_train.imag]
# Fit the MLP model.
clf.fit(Y, toOneHotEncoding(b_train))
# Prediction (detection) with trained MLP.
detected_mlp = clf.predict(np.c_[y_test.real, y_test.imag])
# Detection with optimum detector.
detected_opt = optimumDemod(np.c_[y_test.real, y_test.imag])
```

Importa a classe MLPClassifier

Gera um sequência aleatória de bits para transmissão.

Modula os símbolos QPSK com os bits gerados.

Passa sinal modulado por canal AWGN.

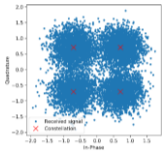
Instancia MLP com 2 camadas escondidas com 10 e 4 neurônios, respectivamente.

Divide o conjunto.

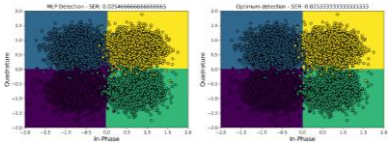
A classe MLP não suporta números complexo, portanto, dividimos y (real,imag) em 2 atributos.

Treina o modelo com codificação one-hot e faz detecção dos símbolos.

Detecção ótima dos símbolos.



$\frac{E_s}{N_0} = 7\ dB$



- As fronteiras de decisão do detector com classificador MLP se aproximam das fronteiras do detector ótimo.
- Qual seria a vantagem em se utilizar um detector baseado em MLP?
  - Se existe um algoritmo ótimo conhecido, uma rede neural treinada nunca poderá superá-lo.

Exemplo: SciKitMLPQPSKClassifier.ipynb

Exemplo: SciKitMLPQPSKClassifier.ipynb

Slide 46

Estimação de fase com MLPRegressor

```
# Import all necessary libraries.
import numpy as np
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.neural_network import MLPRegressor

# Number of QPSK symbols to be transmitted.
N = 100000

# Define Es/N0 value in dB.
EsN0dB = 27
# Tranform into linear value.
EsN0Lin = 10.0**(-(EsN0dB/10.0))
# Generate N binary symbols.
ip = np.random.randint(0,4,(N,1))
# Modulate binary stream into QPSK symbols.
s = mod(ip)
# Generate noise vector.
noise = np.sqrt(1.0/2.0)*(np.random.randn(N, 1) + 1j*np.random.randn(N, 1))
# Add phase error and pass symbols through AWGN channel.
y = s*phase_rnd + np.sqrt(EsN0Lin)*noise
# Phase of received signal.
theta = np.arctan(y.real/y.imag)

# Split arrays into training and validation subsets.
theta_train, theta_test, theta_orig_train, _, _, y_test = train_test_split(theta,
theta_orig.ravel(), y, test_size=0.2)
# Instantiate MLP Regressor.
reg = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(10,5,4), max_iter=2000)

# Train MLP Regressor.
reg.fit(theta_train, theta_orig_train)
# Predict phase over test set.
theta_pred = reg.predict(theta_test).reshape(len(theta_test), 1)
# Correct phase-shift.
y_rec = np.exp(-1j*theta_pred)*y_test
```

Importa a classe MLPRegressor

Es/N0 = 27 dB

Gera um sequência aleatória de bits para transmissão.

Modula os símbolos QPSK com os bits gerados.

Adiciona fase aleatório ao símbolo e passa sinal modulado por canal AWGN.

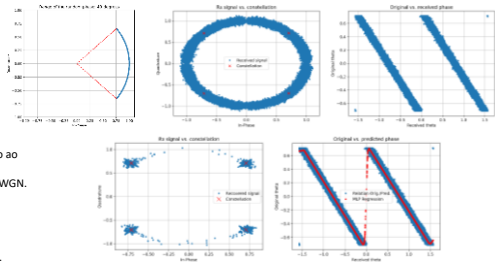
Calcula fase do símbolo recebido.

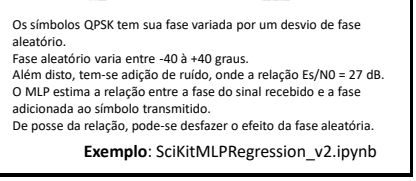
Divide o conjunto.

Instancia MLP com 3 camadas escondidas com 10, 5 e 4 neurônios, respectivamente.

Treina o modelo com fase recebida e original e faz estimação.

Aplica inverso da fase estimada ao símbolo recebido.





- Os símbolos QPSK tem sua fase variada por um desvio de fase aleatório.
- Fase aleatório varia entre -40 à +40 graus.
- Além disto, tem-se adição de ruído, onde a relação Es/N0 = 27 dB.
- O MLP estima a relação entre a fase do sinal recebido e a fase adicionada ao símbolo transmitido.
- De posse da relação, pode-se desfazer o efeito da fase aleatória.

Exemplo: SciKitMLPRegression_v2.ipynb

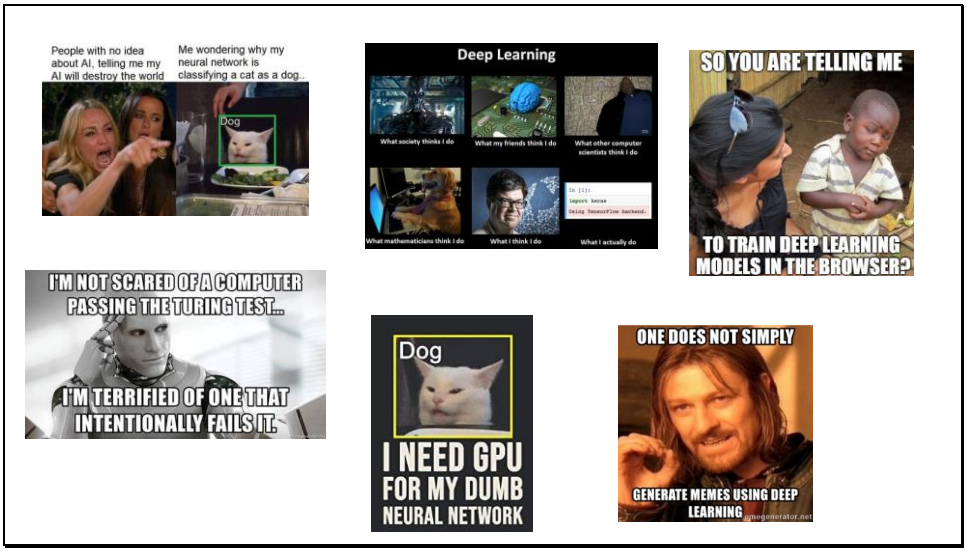
Exemplo: SciKitMLPRegression_v2.ipynb

N0: densidade espectral do ruído.

Slide 47

Obrigado!

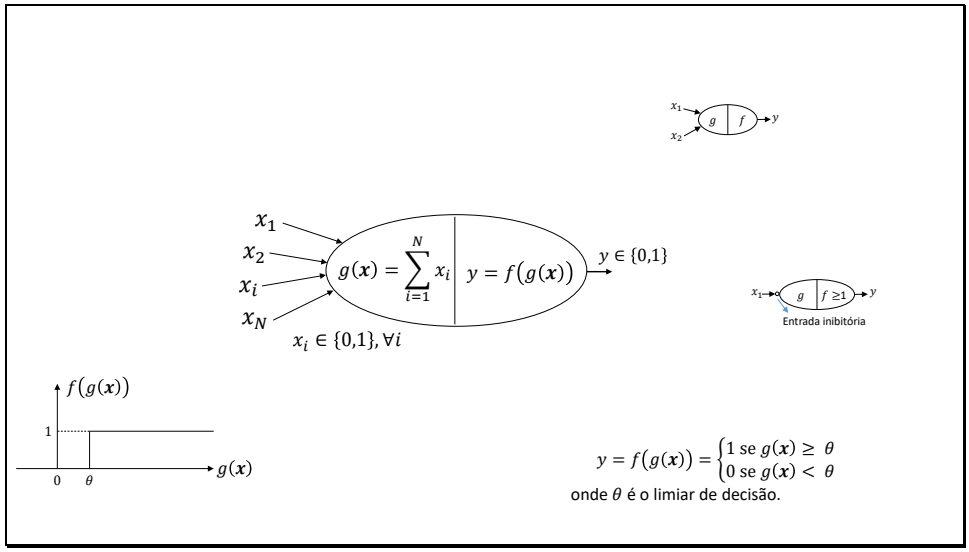
Slide 48


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
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

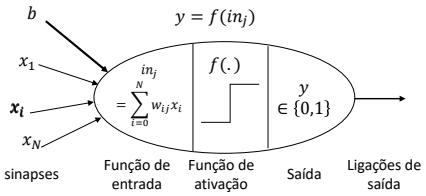
Slide 49

Figuras

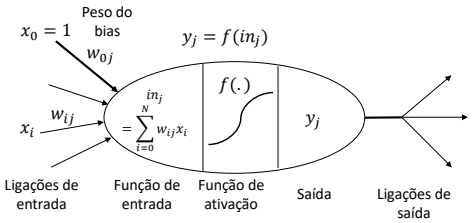
Slide 50


x_1
x_2
x_i
x_N
$g(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{N} x_i$
$y = f(g(\boldsymbol{x}))$
$y \in \{0,1\}$
$x_i \in \{0,1\}, \forall i$
g
f
y
x_1
g
$f \geq 1$
y
Entrada inibitória
$f(g(\boldsymbol{x}))$
1
0
θ
$g(\boldsymbol{x})$
$y = f(g(\boldsymbol{x})) = \begin{cases} 1 \text{ se } g(\boldsymbol{x}) \geq \theta \\ 0 \text{ se } g(\boldsymbol{x}) < \theta \end{cases}$
onde θ é o limiar de decisão.

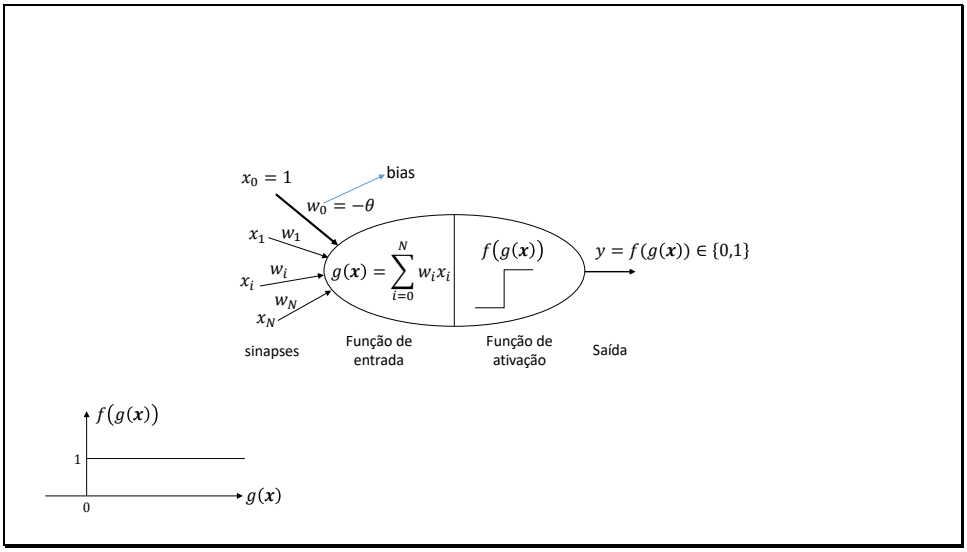
Slide 51


b
$y = f(in_j)$
x_1
x_i
x_N
$in_j = \sum_{i=0}^{N} w_{ij} x_i$
$f(.)$
$y \in \{0,1\}$
sinapses
Função de entrada
Função de ativação
Saída
Ligações de saída

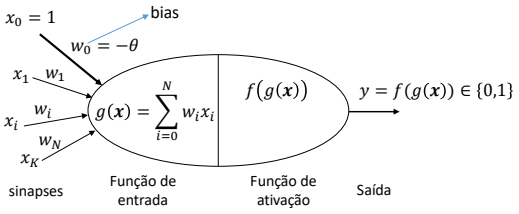
Slide 52


$x_0 = 1$
Peso do bias
w_{0j}
$y_j = f(in_j)$
w_{ij}
x_i
$in_j = \sum_{i=0}^{N} w_{ij} x_i$
$f(.)$
y_j
Ligações de entrada
Função de entrada
Função de ativação
Saída
Ligações de saída

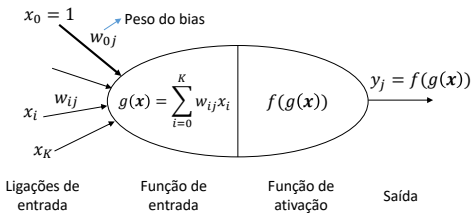
Slide 53


$x_0 = 1$
bias
$w_0 = -\theta$
x_1
w_1
x_i
w_i
w_N
x_N
$g(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=0}^{N} w_i x_i$
$f(g(\boldsymbol{x}))$
$y = f(g(\boldsymbol{x})) \in \{0,1\}$
sinapses
Função de entrada
Função de ativação
Saída
$f(g(\boldsymbol{x}))$
1
0
$g(\boldsymbol{x})$

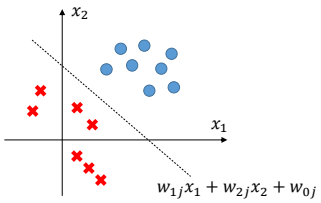
Slide 54


$x_0 = 1$
bias
$w_0 = -\theta$
x_1
w_1
x_i
w_i
w_N
x_K
$g(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=0}^{N} w_i x_i$
$f(g(\boldsymbol{x}))$
$y = f(g(\boldsymbol{x})) \in \{0,1\}$
sinapses
Função de entrada
Função de ativação
Saída

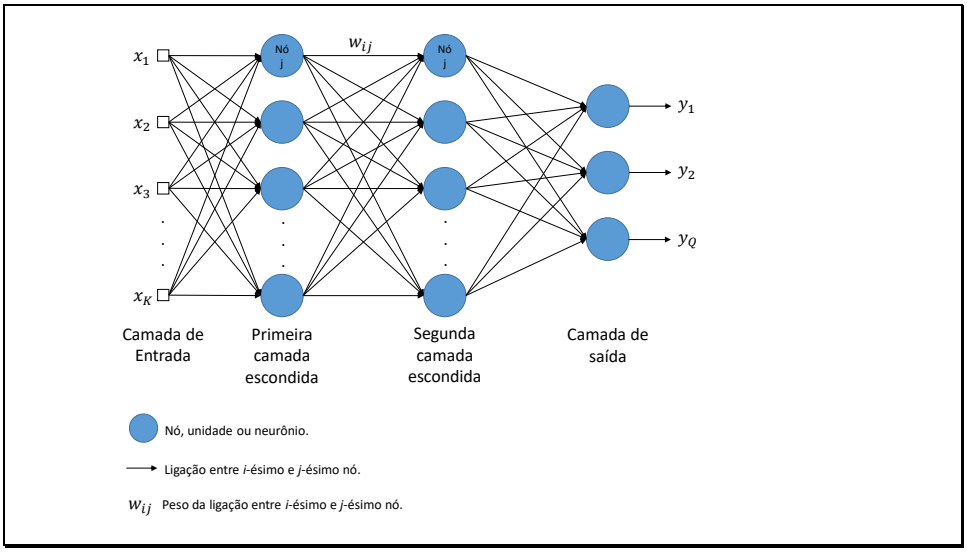
Slide 55


$x_0 = 1$
Peso do bias
w_{0j}
w_{ij}
x_i
x_K
$g(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=0}^{K} w_{ij} x_i$
$f(g(\boldsymbol{x}))$
$y_j = f(g(\boldsymbol{x}))$
Ligações de entrada
Função de entrada
Função de ativação
Saída

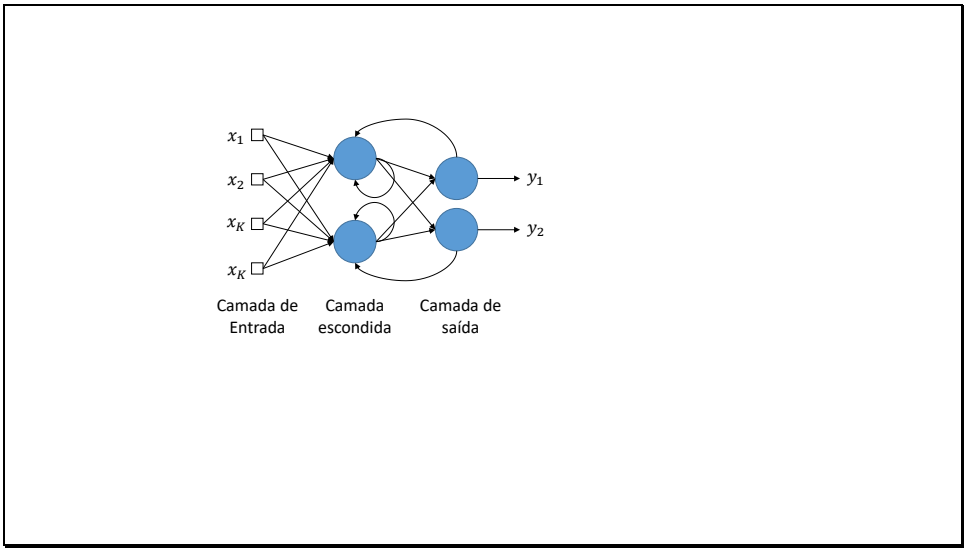
Slide 56



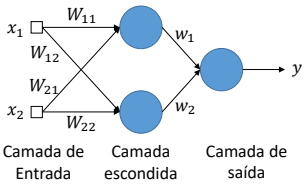
Slide 57


x_1
x_2
x_3
x_K
Nó j
w_{ij}
Nó j
y_1
y_2
y_Q
Camada de Entrada
Primeira camada escondida
Segunda camada escondida
Camada de saída
Nó, unidade ou neurônio.
Ligação entre *i*-ésimo e *j*-ésimo nó.
w_{ij} Peso da ligação entre *i*-ésimo e *j*-ésimo nó.

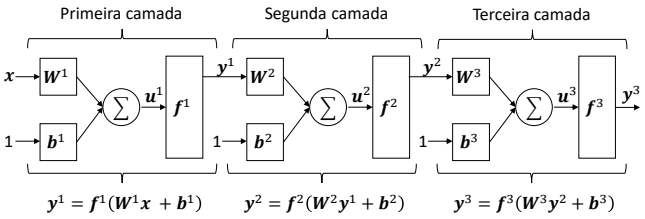
Slide 58


x_1
x_2
x_K
x_K
y_1
y_2
Camada de Entrada
Camada escondida
Camada de saída

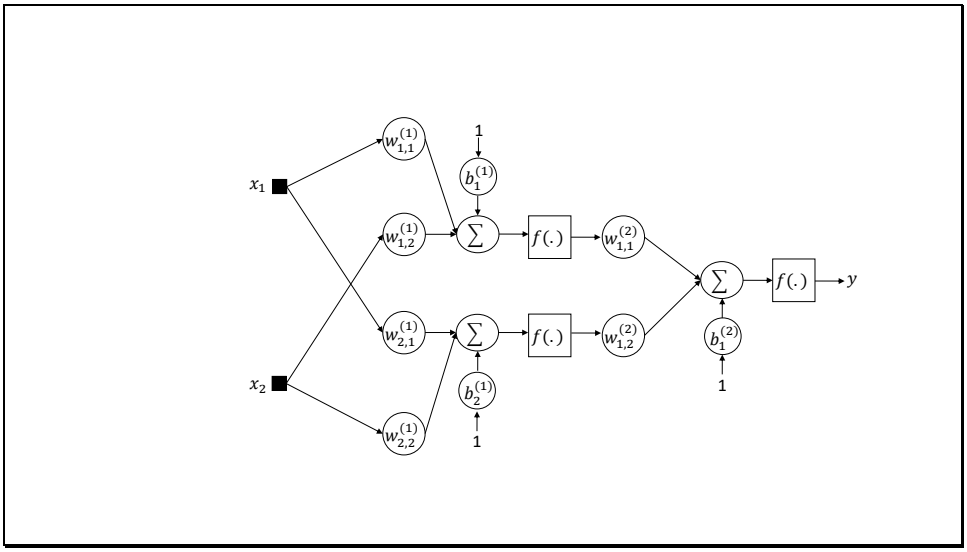
Slide 59


x_1
x_2
W_{11}
W_{12}
W_{21}
W_{22}
w_1
w_2
y
Camada de Entrada
Camada escondida
Camada de saída

Slide 60


Primeira camada
Segunda camada
Terceira camada
x
W^1
b^1
1
u^1
f^1
y^1
W^2
b^2
1
u^2
f^2
y^2
W^3
b^3
1
u^3
f^3
y^3
$y^1 = f^1(W^1x + b^1)$
$y^2 = f^2(W^2y^1 + b^2)$
$y^3 = f^3(W^3y^2 + b^3)$

Slide 61


x_1
x_2
$w_{1,1}^{(1)}$
$w_{1,2}^{(1)}$
$w_{2,1}^{(1)}$
$w_{2,2}^{(1)}$
1
$b_1^{(1)}$
$b_2^{(1)}$
1
$\sum$
$\sum$
$f(.)$
$f(.)$
$w_{1,1}^{(2)}$
$w_{1,2}^{(2)}$
$\sum$
$f(.)$
y
$b_1^{(2)}$
1