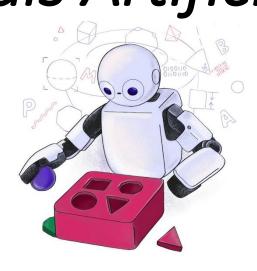
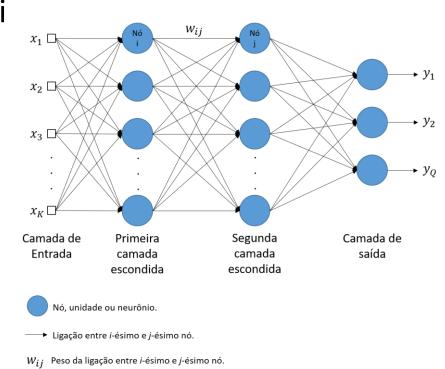
TP555 - Inteligência Artificial e Machine Learning: *Redes Neurais Artificiais (Parte II)*



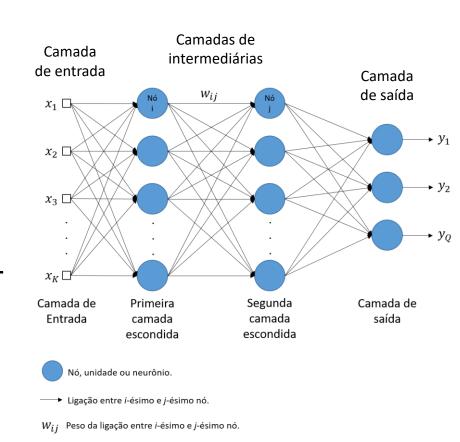


Felipe Augusto Pereira de Figueiredo felipe.figueiredo@inatel.br

- 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* (ou seja, as conexões têm uma direção associada).
- As propriedades da rede neural são determinadas por sua topologia e pelas propriedades dos neurônios (e.g., função de ativação e pesos).
- Algumas das limitações dos 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 o 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).



- 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 para formar as saídas.
- 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.

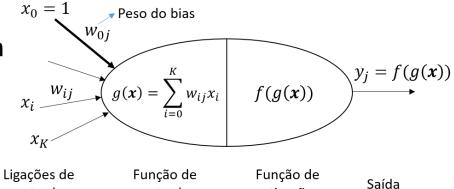
- Uma ligação do nó i para o nó j serve para propagar o sinal de ativação do nó i para o nó j. Cada ligação tem um peso associado, w_{ij} , que determina a força e o sinal da ligação.
- Assim como nos modelos de *regressão linear*, cada *nó* tem a entrada 0, i.e., x_0 , sempre com valor igual a 1 e um 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

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

• Em seguida, o $n\acute{o}$ aplica uma função de ativação (ou de limiar), f(.), ao somatório acima para obter sua saída

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

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



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

entrada

entrada

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.

ativação

- Devido às suas características, não é comum se empregar a função degrau como função de ativação em MLPs pois ela 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

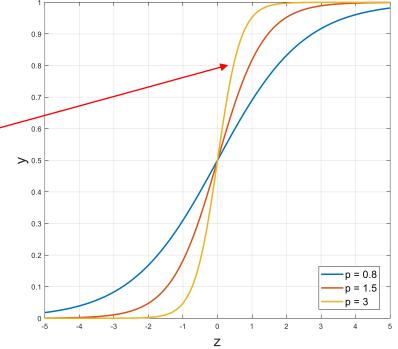
$$\frac{dy_j}{dz_j} = \frac{df(z_j)}{dz_j} = py_j(1 - y_j) > 0,$$

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

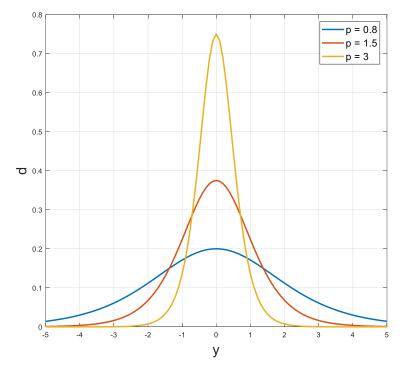
• A derivada será importante, como veremos, no processo de aprendizado da rede neural.

• A *função logística* e sua derivada para alguns valores do *fator de suavização* são mostradas nas figuras ao lado.

OBS.: Quanto maior *p*, mais próxima ela fica da função degrau.



Função Logística.



Derivada da Função Logística.

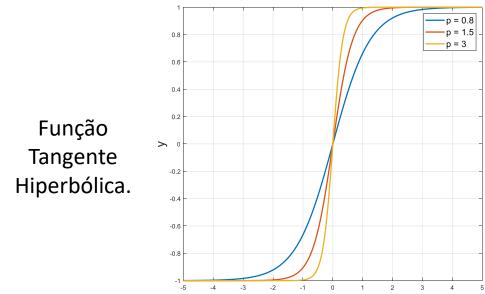
OBS.: tende ao impulso conforme p aumenta.

• A *função tangente hiperbólica* tem sua expressão dada por:
$$y_j = f(z_j) = \tanh(pz_j) = \frac{e^{pz_j} - e^{-pz_j}}{e^{pz_j} + e^{-pz_j}}.$$

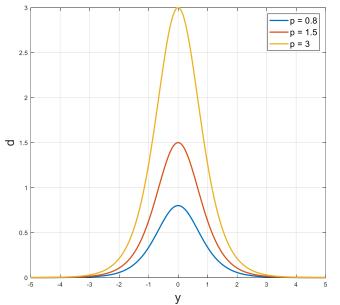
Sua derivada é dada por

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

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



Z



Derivada da Tangente Hiperbólica.

- Embora as duas funções apresentadas anteriormente sejam clássicas, 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

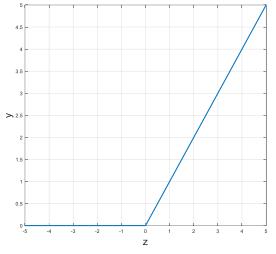
$$y_j = f(z_j) = \max(0, z_j).$$

Sua derivada é dada por

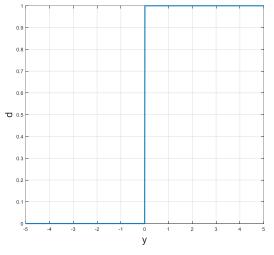
$$\frac{dy_j}{dz_j} = \begin{cases} 0, \text{ se } y_j < 0\\ 1, \text{ se } y_j > 0 \end{cases}$$

e indefinido em $y_j=0$, porém o valor da derivada em zero pode ser arbitrariamente escolhido como 0 ou 1.

- Um *nó* que emprega uma *função de ativação retificadora* é chamado de ReLU (rectified linear unit).
- A *função retificadora* e sua derivada são mostradas nas figuras ao lado.



Função Retificadora.



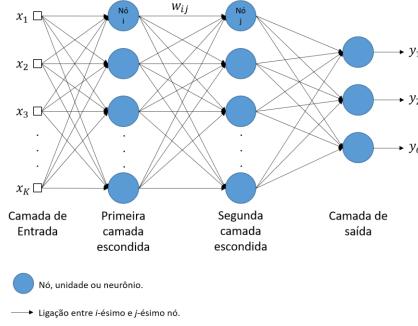
Derivada da Função Retificadora.

- Vantagens da *função retificadora*:
 - A função e sua derivada são mais rápidas de calcular do que a funções logística e tangente hiperbólica.
 - Não sofre com o problema da diminuição do gradiente: o gradiente é multiplicado várias vezes com o algoritmo da *retropropagação*, o que faz com que o gradiente se torne menor para as camadas inferiores, levando a uma mudança muito pequena ou até mesmo nenhuma mudança nos pesos das camadas inferiores.
- Outras funções de ativação são:
 - Identidade ou linear
 - Gaussian Error Linear Unit (GELU)
 - Leaky rectified linear unit (Leaky ReLU)
 - Gaussiana

Conectando Neurônios

 Existem basicamente duas maneiras distintas para se conectar os nós (ou neurônios) de uma rede.

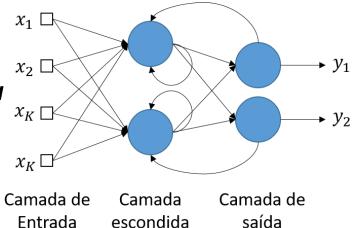
- Na figura ao lado, os nós da rede têm conexões em apenas uma única direção.
- Esse tipo de rede é conhecida como *rede de alimentação direta* (*feedforward*) ou *sem realimentação*.
- O sinal percorre a rede em uma única direção, da entrada para a saída.
- Os *nós* da mesma camada não são conectados.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



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

Conectando Neurônios

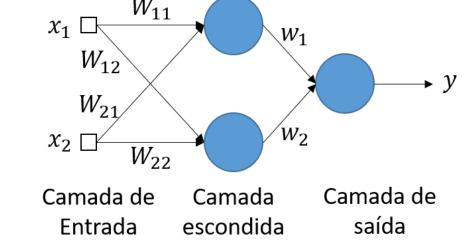
- Na figura ao lado, os nós da rede tem conexões em 2 direções, desta forma, o sinal percorre a rede nas direções direta e reversa.
- Este tipo de rede é conhecida como *rede recorrente* ou *rede com realimentação*.
- Nessas redes, a saída de alguns *nós* alimentam *nós* da mesma camada (inclusive o próprio *nó*) 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, ou seja, divergir.
- 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 (escrita e fala).



Regressão Não-Linear

A rede MLP ao lado tem sua saída definida por

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

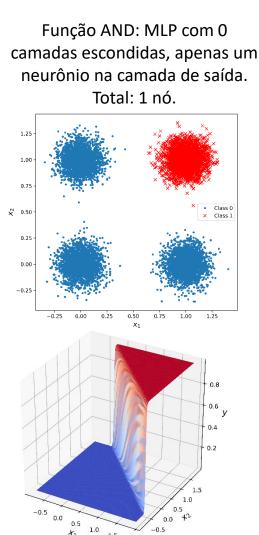


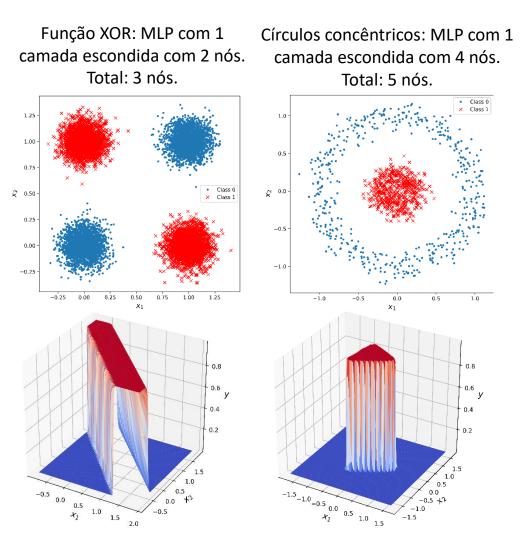
onde f é a **função de ativação** escolhida.

- Percebam 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.
- A seguir, eu apresento alguns exemplos.

Aproximação universal de funções

- Um nó aproxima uma função de limiar suave.
- Combinando duas funções de limiar suave com direções opostas, podemos obter uma função em formato de onda.
- Combinando duas ondas perpendiculares, nós obtemos uma função em formato de cilindro.





- 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(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, geralmente agrupadas em um vetor chamado de 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 e sentido 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 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 derivada parcial de segunda ordem da função custo. Essa informação está contida na matriz Hessiana H:

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

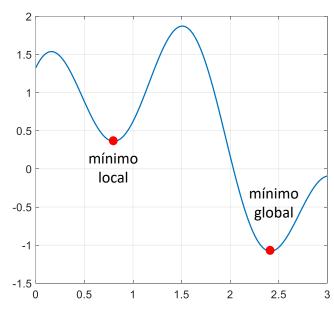
• De posse da *matriz hessiana*, é possível fazer uma aproximação de Taylor de segunda ordem da *função de custo*, o que leva à seguinte expressão para adaptação dos pesos:

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

- Essa expressão requer que a *matriz Hessiana* seja inversível, e também que ela seja *definida positiva* a cada iteração, $z^T Hz > 0 \ \forall z \neq 0$ (vetor nulo).
- Uma vez que a aproximação de Taylor com informação de segunda ordem 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.

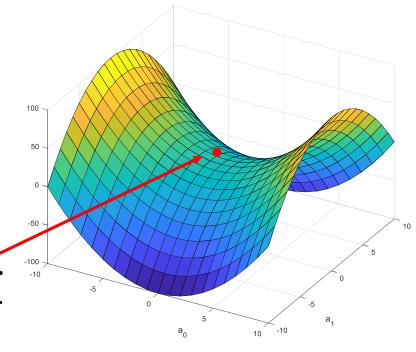
Mínimos Locais, Mínimos Globais e Pontos de Sela

- É importante resaltarmos que todos esses métodos são métodos de *busca local*, ou seja, eles têm convergência 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*.



Mínimos Locais, Mínimos Globais e Pontos de Sela

- Para valores adequados do **passo de aprendizagem**, 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 deve ser mencionado 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 de um ponto de sela.



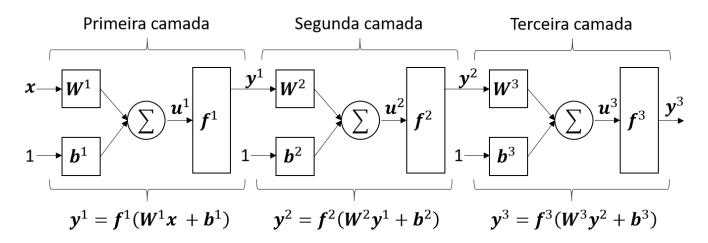
Ponto de sela: um ponto que é um mínimo ao longo de um eixo mas um máximo ao longo de outro eixo.

Retropropagação do Erro (Error Backpropagation)

- Conforme nós discutimos anteriormente, os métodos fundamentais de aprendizado em redes neurais são baseados no cálculo de derivadas parciais da função 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 calcular o vetor gradiente da função de custo com respeito aos pesos sinápticos.
- Essa tarefa pode parecer óbvia, mas não é o caso. Foram necessários 17 anos desde a criação do Perceptron para se "descobrirem" uma forma de treinar as RNAs.
- Para que entendamos melhor o porquê, nós iremos considerar uma notação que será muito útil a seguir:
 - O peso $w_{i,j}^m$ corresponde ao j-ésimo peso do i-ésimo $n\acute{o}$ (ou $neur\^{o}nio$) da m-ésima camada da rede neural e W^m é a matriz com todos os pesos 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, $\frac{\partial J(w)}{\partial w_{i,j}^m}$, ou seja, calcular essa derivada para todos os pesos de todos os **nós**.

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:

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

 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 $d_j(n)$ 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*:

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

- Agora voltamos à equação do MSE e vemos que as saídas da última camada 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 intermediária 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 a n-ésima amostra, pois o gradiente médio será uma média de **gradientes particulares** (ou **locais**) associados a cada amostra.

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 do i-ésimo $n\acute{o}$ da m-ésima camada.
- Essa grandeza será chamada de **sensibilidade** e é denotada pela letra grega δ .
- Desta forma:

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

- O termo δ_i^m é único para cada **nó**.
- 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 são produtos de um valor delta, δ_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**, δ_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 de daquele nó).

Retropropagando o erro

- Portanto, a estratégia de otimização adotada para atualização dos pesos sinápticos 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 intermediária.
- Esse processo é chamado de retropropagação do erro ou backpropagation.
- Para facilitar a *retropropagação do erro*, nós vamos inicialmente agrupar todos os valores δ_i^m de uma camada em um vetor δ^m .
- Em seguida, vamos encontrar uma regra que fará a transição $oldsymbol{\delta}^m
 ightarrow oldsymbol{\delta}^{m-1}$.
- 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, δ^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:

$$\delta_{i}^{M} = \frac{\partial e_{j}^{2}}{\partial u_{i}^{M}} = \frac{\partial (d_{j} - y_{j}^{M})^{2}}{\partial u_{i}^{M}} = -2(d_{j} - y_{j}^{M}) \frac{\partial y_{j}^{M}}{\partial u_{i}^{M}} = -2(d_{j} - y_{j}^{M}) f'^{M}(u_{i}^{M}),$$

onde

$$f'^{M}(u_{i}^{M}) = \frac{\partial f^{M}(u_{i}^{M})}{\partial u_{i}^{M}}.$$

Retropropagando o erro

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

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

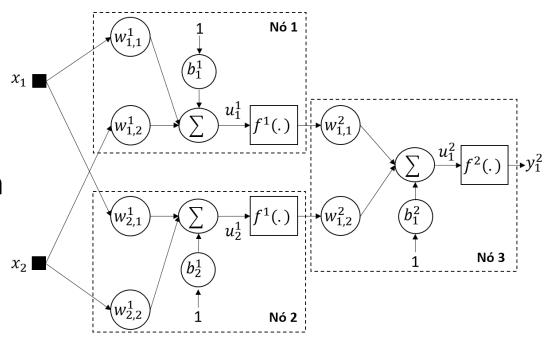
onde a matriz $m{F}'^M(m{u}^M)$ é definida como

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

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

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

- Considerem uma rede MLP com uma camada intermediária e uma camada de saída com um nó, portanto M=2.
- Devemos começar calculando δ^2 .
 - Percebam que essa sensibilidade é um escalar pois há apenas um nó na camada de saída.
- Vamos considerar um exemplo com entrada $x = [x_1, x_2]$ e saída desejada d.
- Supomos que a rede tem uma certa configuração inicial de pesos, de modo que, quando x for apresentado 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:

$$\delta^2 = -2(d - y_1^2)f'^2(u_1^2) = -2(d - y_1^2)\frac{\partial f^2(u_1^2)}{\partial u_1^2}.$$

 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

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

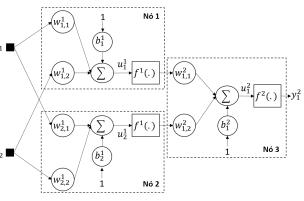
OBS.: Notem que $.^2$ aqui não significa "ao quadrado", mas sim a indicação de que se trata de uma saída da camada m=2.

Portanto,

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

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

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



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

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

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

$$\frac{\partial J}{\partial b_{1}^{1}} = \frac{\partial e^{2}}{\partial b_{1}^{1}} = \frac{\partial \left(d - f^{2}(u_{1}^{2})\right)^{2}}{\partial f^{2}(u_{1}^{2})} \frac{\partial f^{2}(u_{1}^{2})}{\partial u_{1}^{2}} \frac{\partial u_{1}^{2}}{\partial f^{1}(u_{1}^{1})} \frac{\partial f^{1}(u_{1}^{1})}{\partial u_{1}^{1}} \frac{\partial u_{1}^{1}}{\partial b_{1}^{1}}.$$

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado

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

- 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 dos pesos sinápticos que minmizem a função de custo.
- Vimos que a obtenção do *vetor gradiente* se dá através de um processo de *retropropagação do erro* em que existem duas etapas:
 - Etapa direta (*forward*) onde se apresenta um exemplo de entrada, x, e obtém-se a resposta da rede, ou seja, o *erro de saída*.
 - Etapa reversa (*retropropagação/backpropagation*) em que se calculam as derivadas parciais necessárias ao longo das camadas anteriores da rede.

Versões Online, Batch e Minibatch

• 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 total de exemplos.

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

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

- Nesse questionamento, existem duas abordagens: o cálculo *online* do gradiente (ou seja, exemplo-a-exemplo) e o cálculo em batelada (*batch*) do gradiente.
- Vejamos inicialmente a noção geral de adaptação dos pesos sinápticos com o cálculo online do gradiente, como expressa o algoritmo abaixo com um método clássico de primeira ordem.
 - ightharpoonup Defina valores iniciais para o vetor de pesos $oldsymbol{w}$ e um passo de aprendizagem lpha pequeno.
 - Faça k = 0 (épocas), t = 0 (iterações) e calcule J(w(k)).
 - > 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 $J_l(\mathbf{w}(t))$ e $\nabla J_l(\mathbf{w}(t))$.
 - $w(t+1) = w(t) \alpha \nabla J_l(w(t)); t = t+1.$
 - \circ k = k + 1.
 - \circ Calcule J(w(k)).

- O outro extremo seria utilizar todo o conjunto de dados para estimar o gradiente antes de atualizar os pesos sinápticos.
- Essa é a ideia por trás da abordagem em **batelada** (**batch**). O algoritmo abaixo ilustra a operação correspondente (novamente considerando um método de **primeira ordem**).
 - ightharpoonup Defina valores iniciais para o vetor de pesos w e um passo de aprendizagem α pequeno.
 - Faça k = 0 (épocas) e calcule J(w(k)).
 - > Enquanto o critério de parada não for atendido, faça:
 - Para *l* variando de 1 até *N*, faça:
 - lacktriangle Apresente o exemplo l de entrada à rede.
 - Calcule $J_l(\mathbf{w}(k))$ e $\nabla J_l(\mathbf{w}(k))$.
 - $\circ \mathbf{w}(k+1) = \mathbf{w}(k) \frac{\alpha}{N} \sum_{l=1}^{N} \nabla J_{l}(\mathbf{w}(k)).$
 - o k = k + 1.
 - \circ Calcule $J(\mathbf{w}(k))$.

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

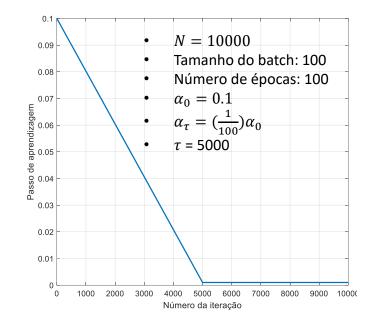
- Existem vários algoritmos baseados no *gradiente* que podem ser empregados para otimizar os *pesos sinápticos* de uma rede neural.
- Aqui, vamos nos ater a alguns métodos muito usuais na literatura moderna, que se encontra bastante focada no apredizado profundo.
- ➤ Método do Gradiente Estocástico (Stochastic Gradient Descent, SGD)
 - Nos slides anteriores, nós vimos que o método online utiliza um único exemplo (que deve ser 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, esses métodos de *primeira ordem*, como o *online*, são conhecidos como métodos de *gradiente descendente estocástico*.

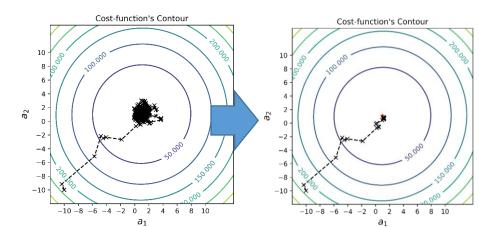
- A escolha do passo de aprendizagem é complicada e nos remete ao conhecido compromisso entre velocidade de convergência e estabilidade/precisão.
- Pode-se usar um valor fixo, mas geralmente, se adota uma variação decrescente de um valor α_0 a um valor α_{τ} (i.e., da iteração 0 à iteração τ):

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

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 hiperparâmetros necessários, α_0 e α_τ , é mais um problema *a ser tratado caso-a-caso*.





Momentum

- O termo momento é adicionado à equação de atualização dos pesos para trazer informação de gradientes anteriores acumulados ao ajuste de pesos.
- Esse termo tem o potencial de melhorar a convergência das versões online e em mini-lotes do gradiente descendente.
- A *atualização dos pesos* com o *termo momento* é dada por

$$w \leftarrow w + v$$
,

onde $oldsymbol{v}$ é a $oldsymbol{velocidade}$, a qual é atualizada da seguinte forma

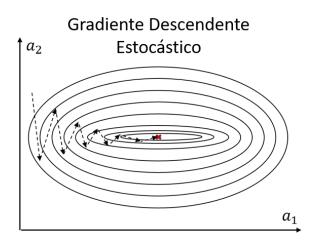
$$\boldsymbol{v} \leftarrow \mu \boldsymbol{v} - \alpha \boldsymbol{q}$$

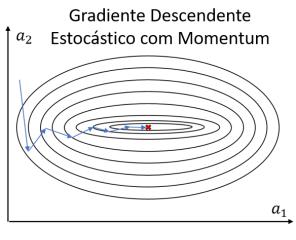
g é o vetor gradiente, α é o passo de aprendizagem e $\mu \in [0,1)$ é o coeficiente de momento e determina com que rapidez as contribuições de gradientes anteriores decaem (ou seja, μ é um termo de memória).

- Quanto maior for μ , maior será a influência de gradientes anteriores na direção atual.
- lacktriangledown v dá a direção e a velocidade na qual os pesos se movem pelo espaço de pesos.

Momentum

- *Momento* em física é igual a *massa de uma partícula vezes* sua velocidade. No algoritmo do momento, assumimos que a massa é unitária, então o vetor velocidade v também pode ser considerado como o momento da partícula.
- O termo momento adiciona uma fração μ de atualizações anteriores dos pesos à atualização corrente.
 - Quando o gradiente aponta na mesma direção por várias iterações, isso aumenta o tamanho dos passos dados em direção ao mínimo.
 - Quando o gradiente muda de direção a cada nova iteração, o termo momento suaviza as variações.
 - Como resultado, temos convergência mais rápida e oscilação reduzida.
- O efeito do algoritmo do momentum no GDE é ilustrado na figura ao lado.





➤ 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 w, mas sim sobre $w + \varphi v$.
- Esse termo adicional funciona como um fator de correção que pode aumentar, em alguns casos, a velocidade de convergência.

➤ Modelos com Passo de Aprendizagem Adaptativo

- O passo de aprendizagem é um hiperparâmetro difícil de se ajustar otimamente 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.
- O passo é ajustado de acordo com o desempenho da rede e, além disso, pode-se ter passos diferentes para cada peso do modelo, os quais são atualizados de forma independente.
- Dentre as técnicas mais populares dessa classe estão AdaGrad, RMSProp e Adam.

Inicialização dos Pesos

https://www.deeplearning.ai/ai-notes/initialization/

- Uma vez que os métodos de treinamento de *redes neurais MLP* são iterativos, eles dependem de uma *inicialização dos pesos*.
- 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 em convergir.
- Também pode haver variações expressivas na velocidade de convergência.
- Um ponto importante da inicialização é "quebrar a simetria" entre os nós, ou seja, nós com a mesma função de ativação e conectados às mesmas entradas, devem ter pesos iniciais diferentes.
- Isso, portanto, sugere uma abordagem aleatória.

Inicialização dos Pesos

- Os pesos são tipicamente 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 vista de regularização.
 - Pesos de magnitude elevada podem levar os nós (no caso de funções de ativação do tipo sigmóide como a tangente hiperbólica e a função logística) a operarem numa região de saturação, comprometendo a convergência do algoritmo.
 - Por outro lado, pesos de magnitude muita reduzida podem reduzir drasticamente o aprendizado das redes neurais.
- Portanto, na sequência listamos algumas heurísticas para inicialização dos pesos.

Inicialização dos Pesos

• Considerando uma camada com m entradas e n saídas, uma heurística para inicializar os pesos de nós com função de ativação **sigmóide** é

$$W_{i,j} \sim U\left(-\frac{1}{\sqrt{m}}, \frac{1}{\sqrt{m}}\right)$$
, Inicialização de Xavier/Glorot

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

• Outra heurística de inicialização dos pesos de nós com função de ativação sigmóide é

$$W_{i,j} \sim U\left(-\sqrt{\frac{6}{m+n}},\sqrt{\frac{6}{m+n}}\right)$$
. Inicialização de Xavier/Glorot Normalizada

• Uma heurística para nós que usam função de ativação *ReLu* é dada por

$$w_{i,j} \sim N\left(0,\sqrt{1/m}
ight)$$
, Inicialização de He

onde N(.) é a *distribuição Gaussiana*.

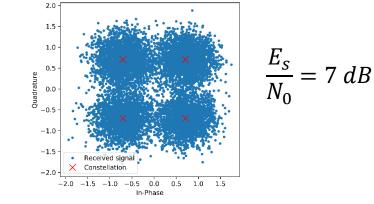
 Uma heurística para a inicialização dos termos de bias é inicializá-los com valores nulos. Esta heurística se mostra bastante eficiente na maioria dos casos.

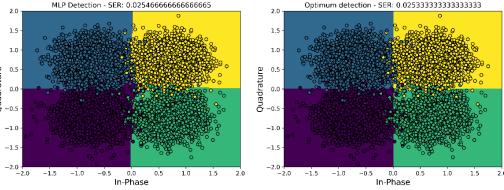
Redes Neurais MLP com SciKit-Learn

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

Detecção de símbolos QPSK com MLPClassifier



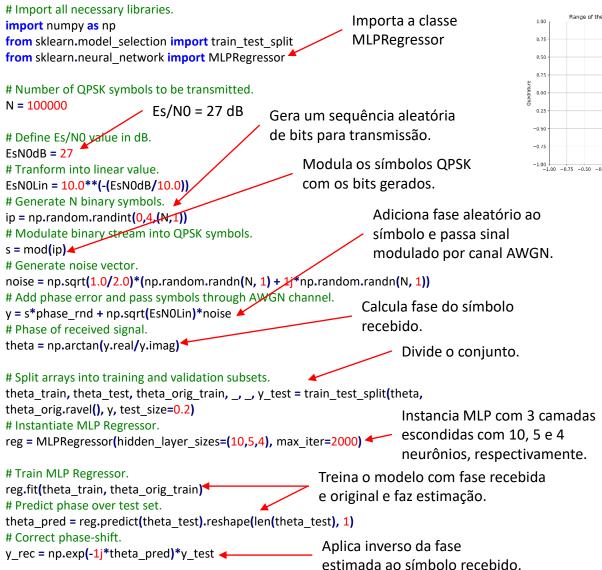


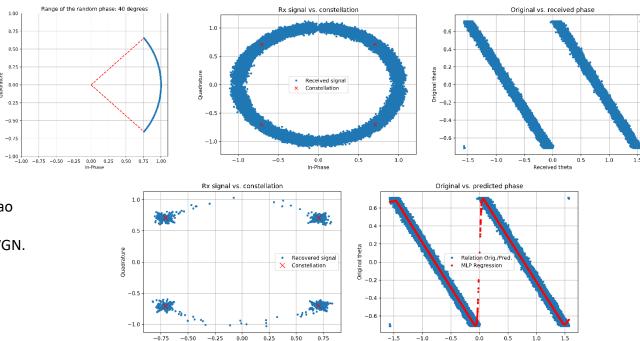


- As fronteiras de decisão do detector com classificador MLP se aproximam das fronteiras do detector ótimo.
- Qual seria a vantagem em se utilizar um detector baseado em MLP?
 - Se existe um algoritmo ótimo conhecido, uma rede neural treinada nunca poderá superá-lo.

Exemplo: SciKitMLPQPSKClassifierv1.ipynb

Estimação de fase com MLPRegressor





- Os símbolos QPSK têm sua fase variada por um desvio de fase aleatório.
- Fase aleatório varia entre -40 a +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_v4.ipynb

Avisos

- Material, exemplos e lista de exercícios #12 já estão disponíveis.
- Apresentação dos trabalhos finais: 25/11/2021
- Prova #2: 27/11/2021

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..





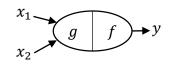


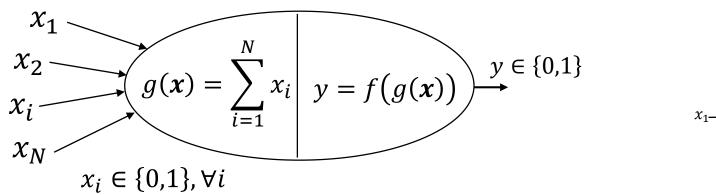






Figuras



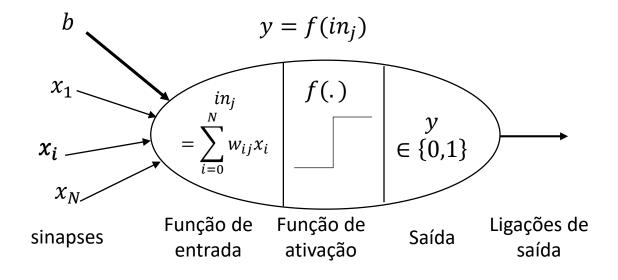


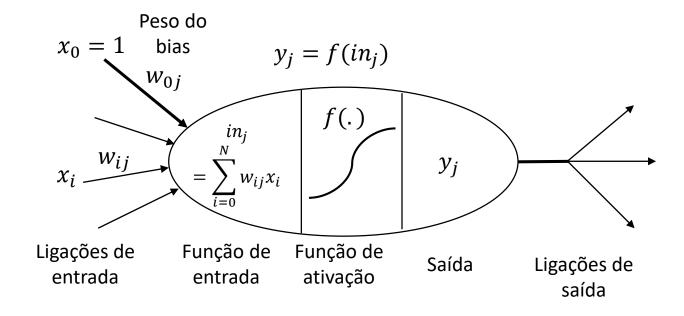


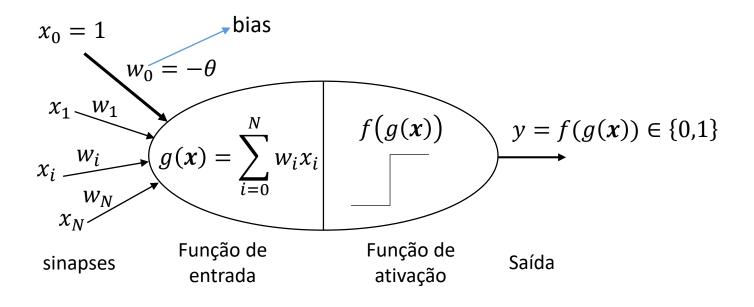
$$\begin{array}{c|c}
 & f(g(x)) \\
 & \downarrow \\$$

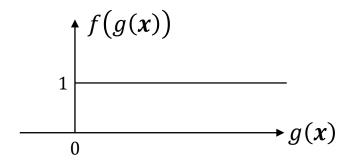
$$y = f(g(x)) = \begin{cases} 1 \text{ se } g(x) \ge \theta \\ 0 \text{ se } g(x) < \theta \end{cases}$$

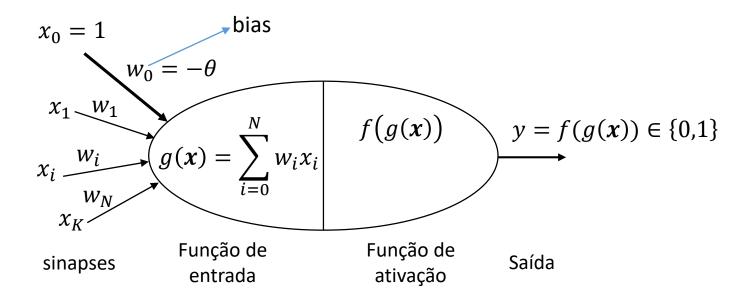
onde θ é o limiar de decisão.

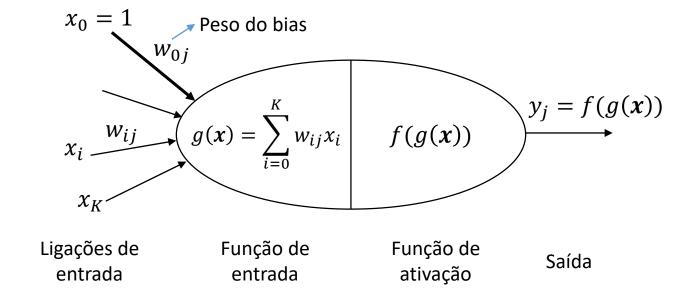


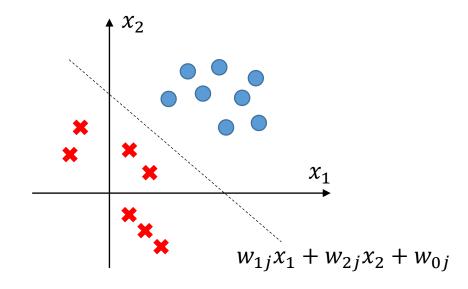


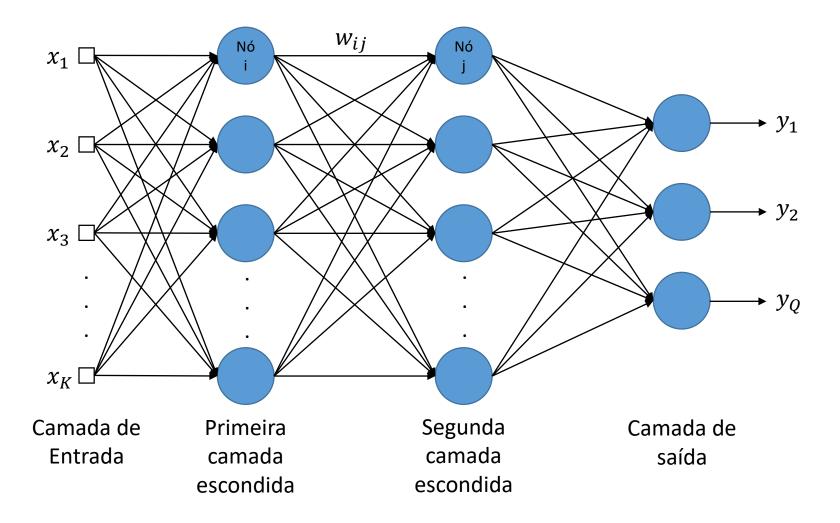


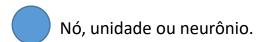












→ Ligação entre *i*-ésimo e *j*-ésimo nó.

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

