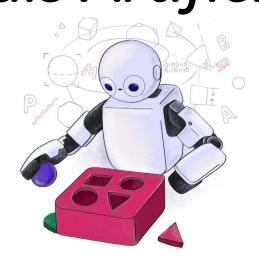
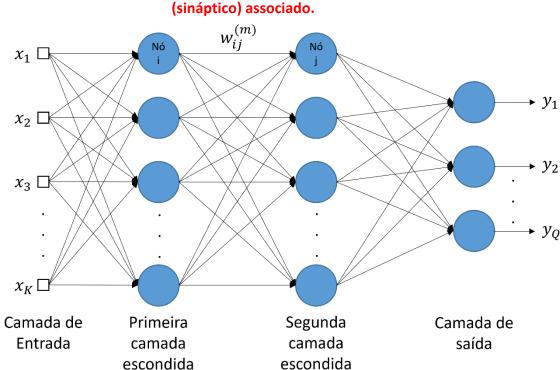
TP555 - Inteligência Artificial e Machine Learning: *Redes Neurais Artificiais (Parte II)*





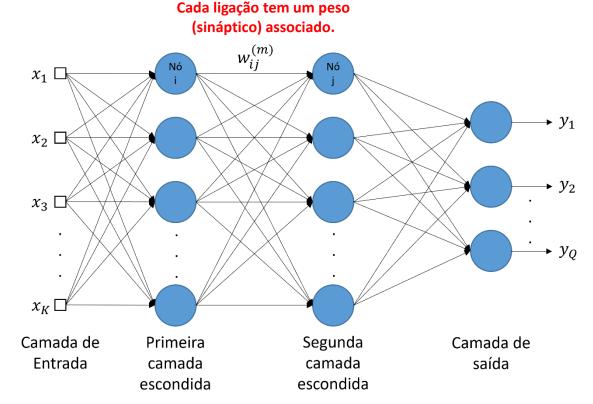
Felipe Augusto Pereira de Figueiredo felipe.figueiredo@inatel.br



Cada ligação tem um peso

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

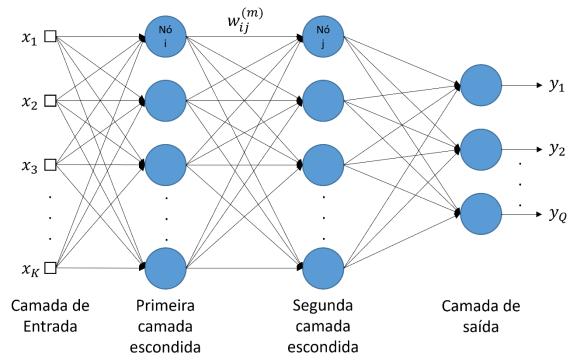
- Uma rede neural artificial (RNA) nada mais é do que uma combinação de neurônios conectados entre si através de ligações direcionadas (i.e., as conexões têm uma direção associada).
 - Neurônios também são chamados de nós ou unidades.
 - Cada ligação entre nós possui um peso (sináptico) associado.
- As RNAs são formadas por uma camada de entrada, zero ou mais camadas intermediárias e uma camada de saída.



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

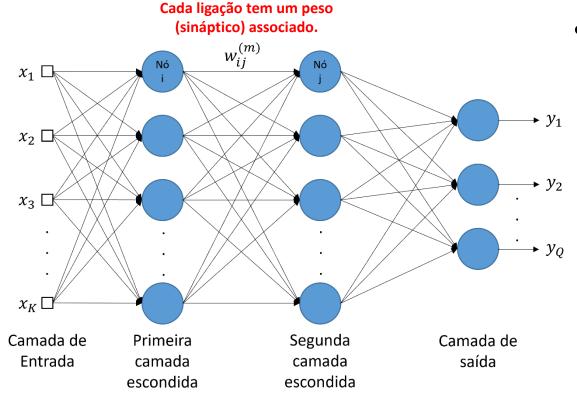
- As camadas intermediárias são também chamadas de ocultas ou escondidas.
- Algumas das *limitações dos perceptrons* (e.g., classificação apenas de classes linearmente separáveis) podem ser
 y_Q superadas adicionando-se camadas intermediárias de perceptrons.
 - O primeiro tipo de rede neural proposto foi o perceptron de múltiplas camadas (do inglês, Multilayer Perceptron - MLP).

Cada ligação tem um peso (sináptico) associado.



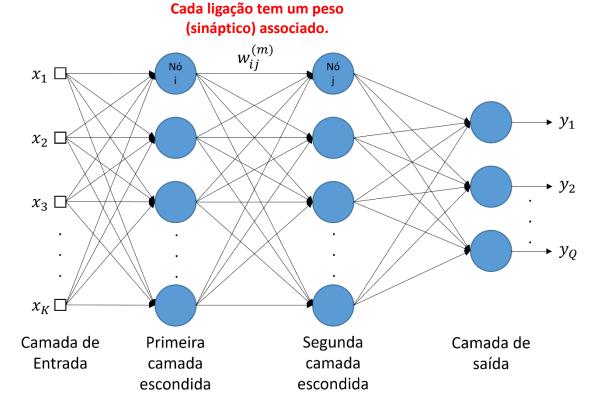
- Nó, unidade ou neurônio.
- Ligação entre i-ésimo e j-ésimo nó.

- Ela também é chamada de *rede densamente conectada e de alimentação direta* (do inglês, *Dense Neural Network*
 DNN).
 - Cada uma das saídas de uma camada se conecta a todos os nós da camada seguinte através de pesos sinápticos.
 - Os dados fluem através da rede em uma única direção, da camada de entrada para a camada de saída, sem ciclos de realimentação.



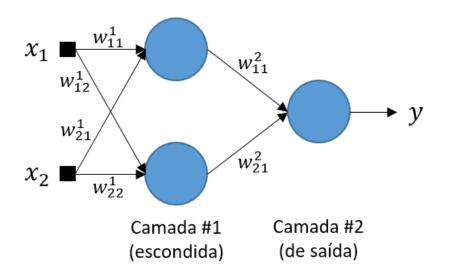
- As *propriedades de uma rede neural* são determinadas por sua *arquitetura*,
 - como os neurônios estão conectados (forma direta ou recursiva),
 - quantidade neurônios,
 - quantidade de camadas escondidas,
 - função de ativação,
 - etc.

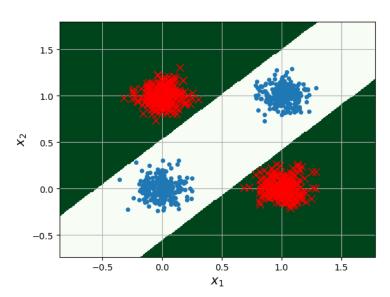
- Nó, unidade ou neurônio.
- Ligação entre i-ésimo e j-ésimo nó.



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

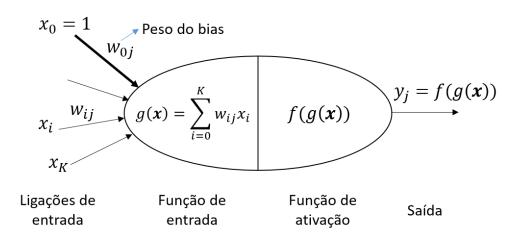
- As RNAs são o coração do *deep learning* ou aprendizado profundo.
- O termo "*profundo*" vem fato de que essas redes podem possuir *muitas* camadas ocultas.
- Em geral, quando uma RNA tem duas ou mais camadas ocultas, ela pode ser chamada de rede neural profunda (ou em inglês, Deep Neural Network -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





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

Os nós das redes neurais artificiais



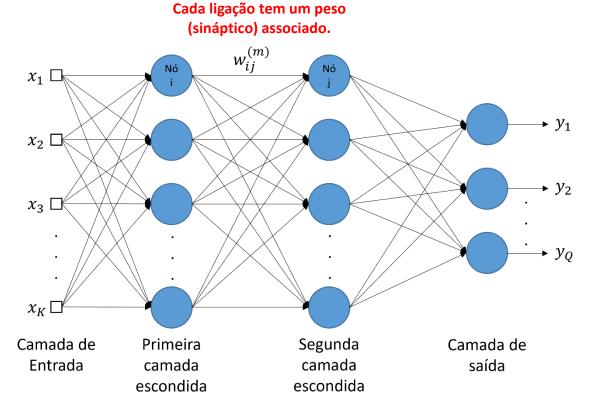
- Cada nó tem a entrada x_0 (i.e., o atributo de bias) sempre com valor igual a 1 e um peso associado w_{0j} , chamado de peso de bias.
 - Ou seja, a entrada x_0 não está conectada a nenhum outro nó.
- O j-ésimo $n\acute{o}$ calcula a $soma\ ponderada$ de suas entradas, x_i

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

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

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

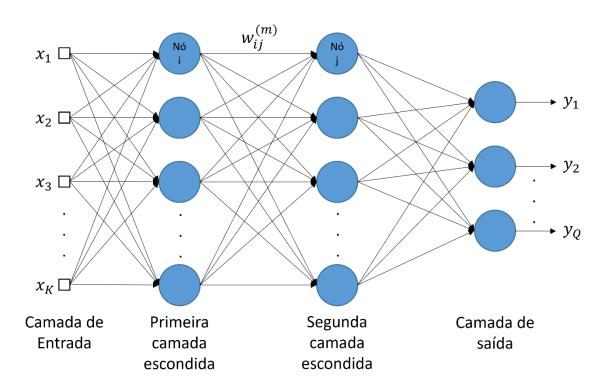
As ligações do nós das redes neurais artificiais



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

- Considerando *qualquer dois nós da* rede, a ligação do i-ésimo $n\acute{o}$ da m-1-ésima camada para o j-ésimo $n\acute{o}$ da m-ésima é feita através do peso $w_{ii}^{(m)}$.
- A ligação propaga o sinal de saída do iésimo nó para o j-ésimo nó.
 - O *sinal de saída* do *i*-ésimo nó é denotado por x_i .
- O valor do *peso* determina a *força* e o *sinal* da *ligação*.
- A ligação pode ser excitatória ou inibitória dependendo dos sinais do peso e de saída do nó anterior.

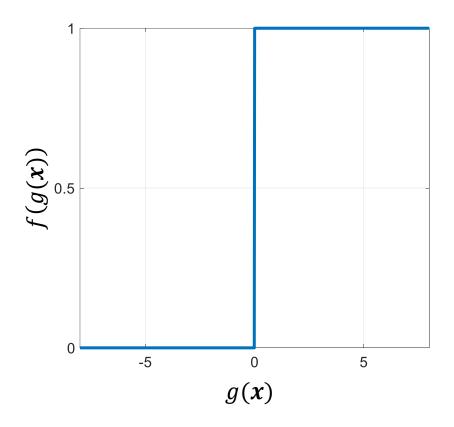
Funções de ativação



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

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

Funções de ativação



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

Função de ativação logística

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

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

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

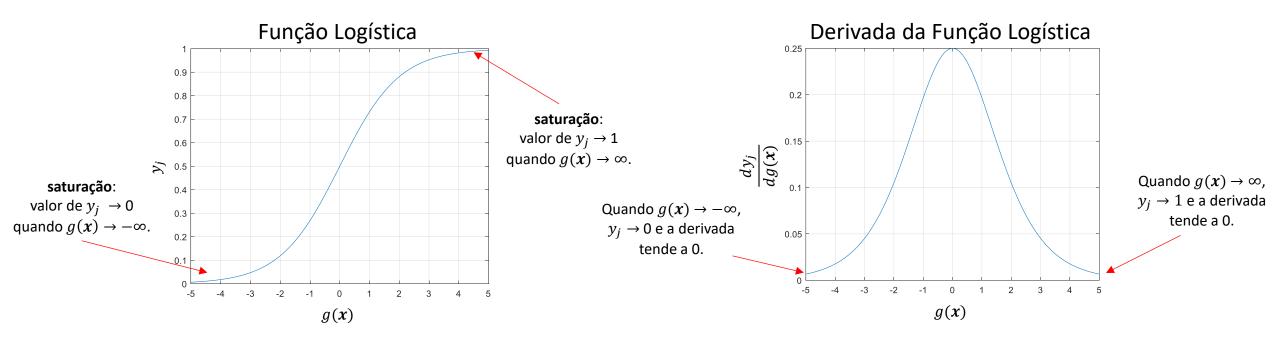
• Sua derivada é dada por

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

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

Função de ativação logística e sua derivada

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



Função de ativação tangente hiperbólica

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

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

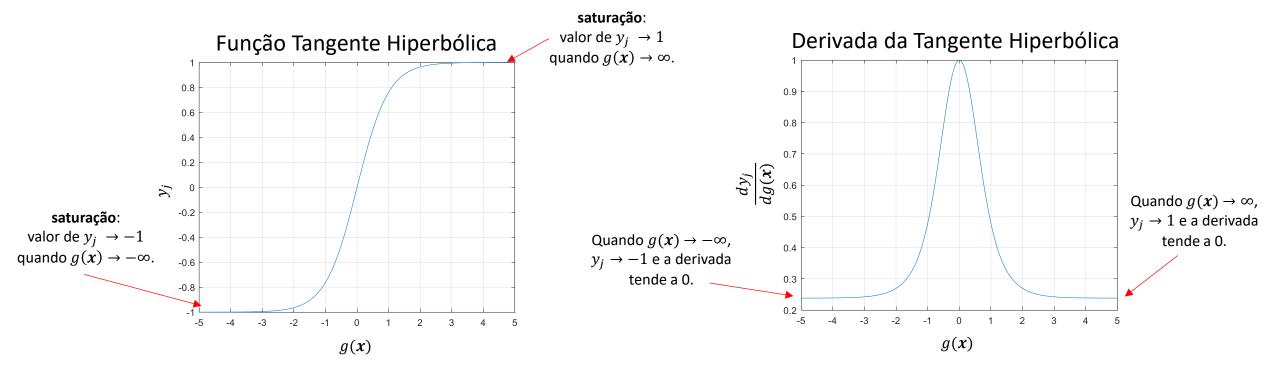
onde g(x) é a combinação linear das entradas do nó.

• Sua derivada é dada por

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

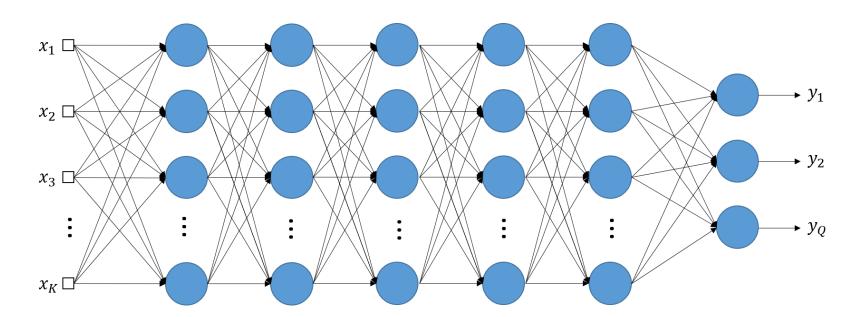
Função de ativação tangente hiperbólica e sua derivada

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



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

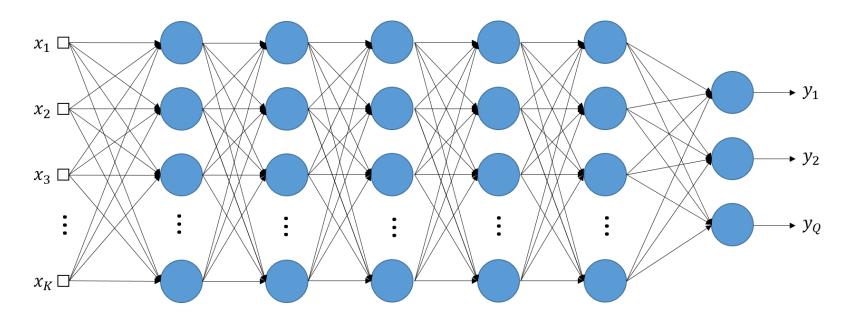
• É um problema encontrado quando treinamos *redes neurais profundas*, ou seja, com muitas camadas ocultas, com *métodos de aprendizado baseados no gradiente descendente* e nós usando *funções de ativação sigmoide ou tangente hiperbólica*.



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



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



Regra da cadeia

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

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

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

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

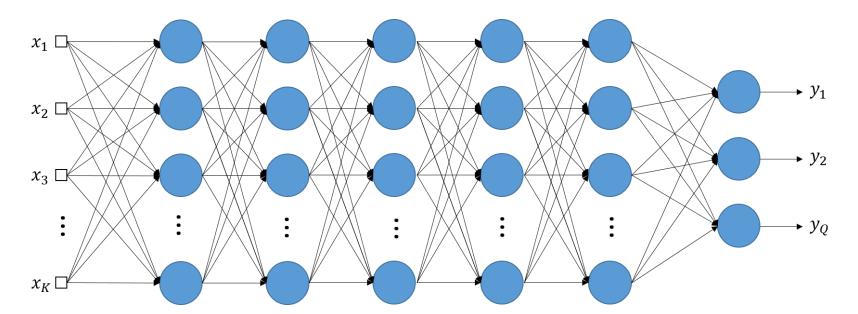
Regra da cadeia

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

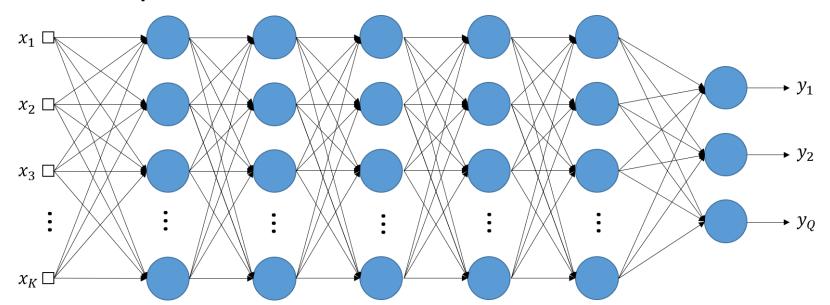
$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial f(g(h(x)))}{\partial x} = \frac{\partial f(g(h(x)))}{\partial g(h(x))} \frac{\partial g(h(x))}{\partial h(x)} \frac{\partial h(x)}{\partial x}.$$

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

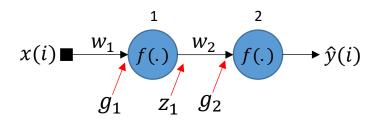
- Em uma rede com M camadas, a *retropropagação* tem o efeito de multiplicar até M valores pequenos (i.e., derivadas parciais das funções de ativação) para calcular os vetores gradiente das primeiras camadas.
- O que significa que o *gradiente diminui exponencialmente com M*.



- Assim, os nós das camadas iniciais aprendem muito mais lentamente do que os nós das camadas finais, pois o vetor gradiente daquelas camadas é muito pequeno, fazendo com que a atualização dos pesos também seja pequena.
- Vejamos um exemplo.



Dissipação do gradiente



Considerações:

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

Dissipação do gradiente

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

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

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

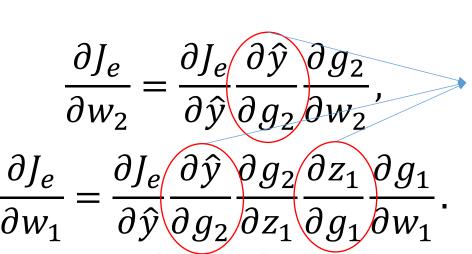
• Usando a regra da cadeia, obtemos as derivadas $\frac{\partial J_e}{\partial w_1}$ e $\frac{\partial J_e}{\partial w_2}$

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

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

Dissipação do gradiente

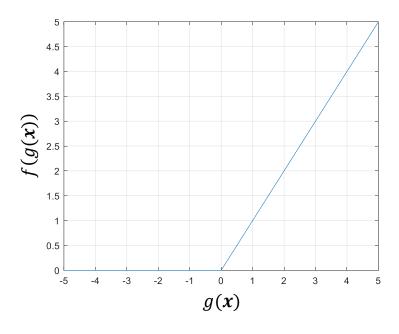
Derivada da função de ativação logística



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

Como mitigar esse problema?

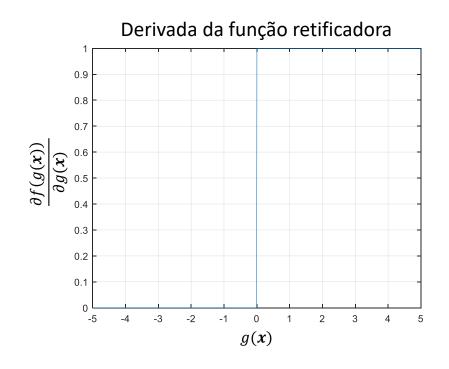
Função de ativação retificadora



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

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

Função de ativação retificadora

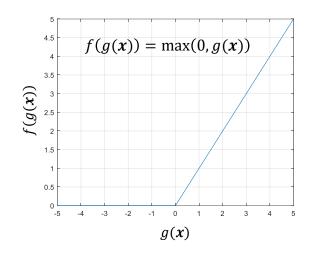


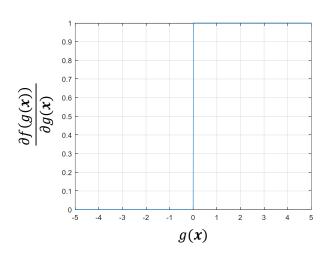
- Suas principais *vantagens* são a sua *simplicidade e eficiência computacional*.
 - Ela e sua derivada são mais rápidas de se calcular do que as funções logística e tangente hiperbólica.
- Além disso, ajuda a *minimizar o problema do* desaparecimento de gradiente, pois sua derivada é igual a 1 para g(x) > 0.
- Sua derivada é dada por

$$\frac{dy_j}{dg(\mathbf{x})} = \frac{df(g(\mathbf{x}))}{dg(\mathbf{x})} = \begin{cases} 0, \text{se } g(\mathbf{x}) < 0 \\ 1, \text{se } g(\mathbf{x}) > 0 \end{cases}.$$

• A derivada é indeterminada para g(x) = 0.

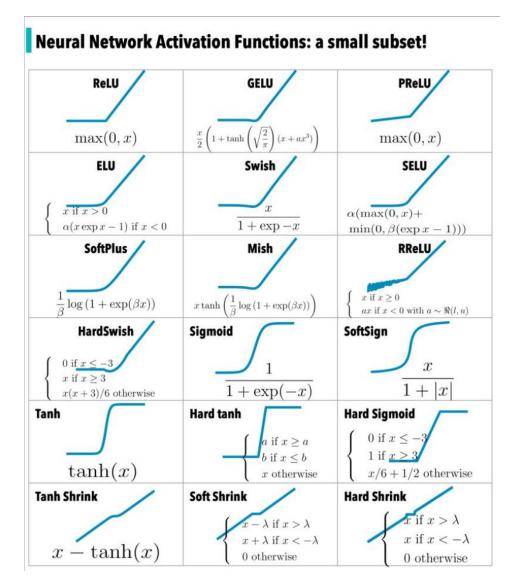
Função de ativação retificadora





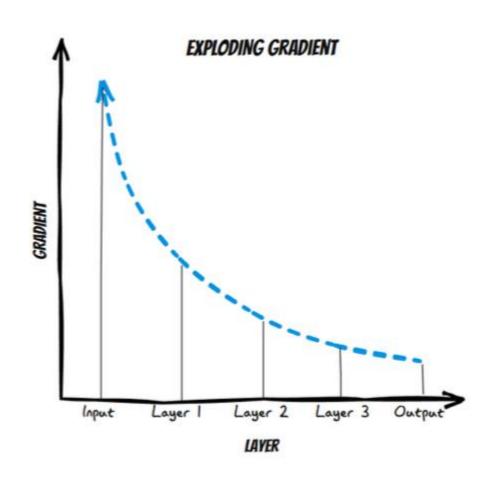
- Uma desvantagem é que ela causa o problema conhecido como *ReLU agonizante*.
- Esse problema ocorre durante o treinamento da rede, quando a ativação do nó, g(x), é negativa.
- Isso faz com que sua saída e, consequentemente, a derivada parcial da função de ativação sejam iguais a 0.
- Quando isso ocorre,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

Variantes da função de ativação retificadora



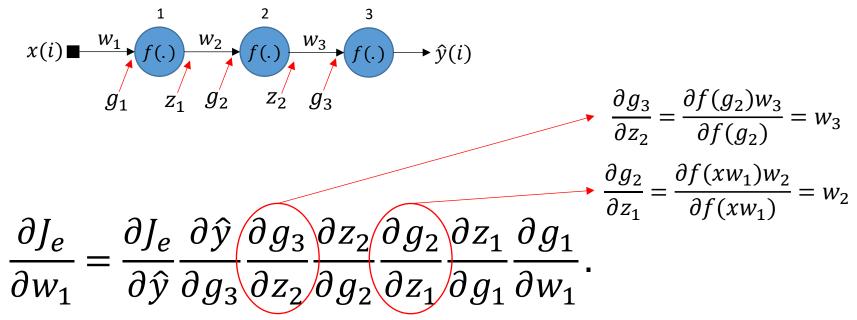
- Para resolver o problema das *ReLUs* agonizantes, usa-se variantes da função *ReLU* que possuam derivada diferente de zero para g(x) < 0, como, por exemplo,
 - Leaky ReLU,
 - Parametric ReLU (PReLU),
 - Gaussian Error Linear Unit (GELU),
 - etc.

Explosão do gradiente



- Usando funções de ativação ReLU, reduzimos o problema do desaparecimento do gradiente.
- Porém, um outro problema surge quando as ativações são positivas e os pesos têm valores maiores do que 1.
- Caso os pesos sejam inicializados (em geral, de forma aleatória) com valores maiores do que 1, haverá a multiplicação de vários valores assim, resultando em valores de gradiente muito grandes nas camadas iniciais.

Explosão do gradiente

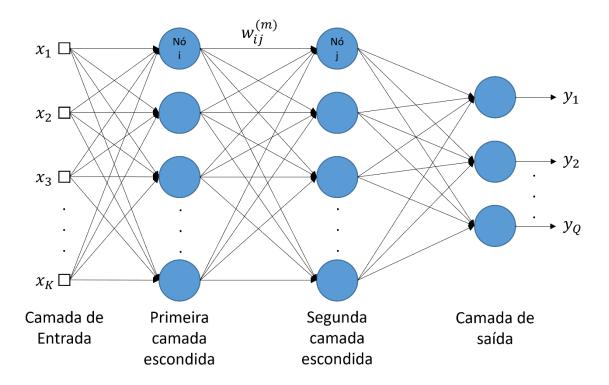


 Se os elementos do vetor gradiente tiverem magnitudes muito grandes, os pesos da rede podem sofrer atualizações extremamente grandes, o que leva a instabilidades numéricas e a um treinamento ineficaz ou até mesmo à divergência.

Formas de se minimizar a dissipação e a explosão do gradiente

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

Conectando neurônios

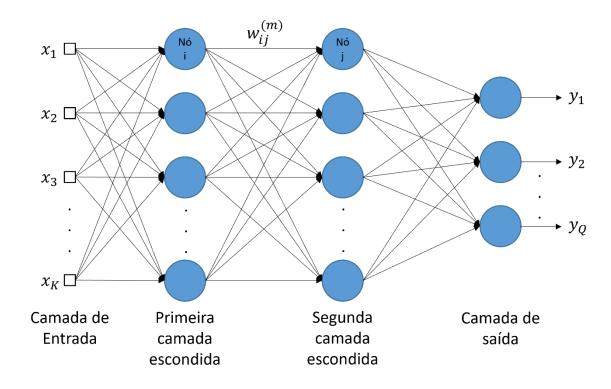


- Nó, unidade ou neurônio.
- Ligação entre i-ésimo e j-ésimo nó.

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

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

Conectando neurônios



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

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

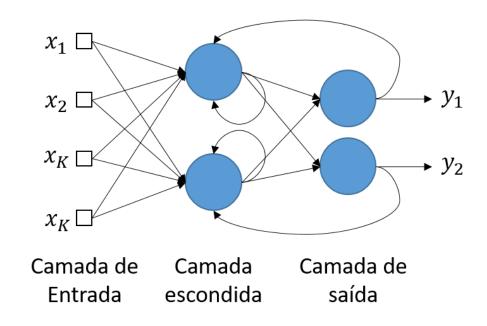
 Portanto, este tipo de rede não possui um estado interno, ou seja, não tem memória.

Nó, unidade ou neurônio.

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

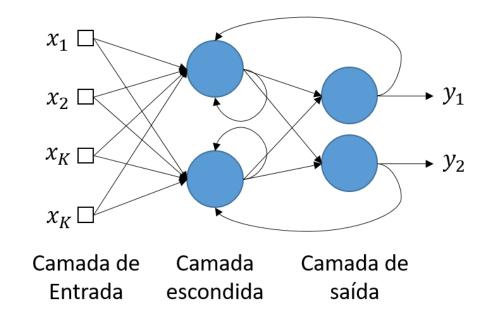
 w_{ij} Peso da ligação entre *i*-ésimo e *j*-ésimo nó.

Conectando neurônios



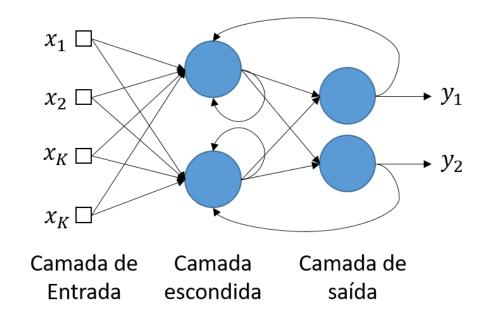
- Já o termo *cíclico* se refere a *conexões que formam ciclos*, permitindo a *realimentação de informações*.
- Redes com esse tipo de conexão são conhecidas como redes recorrentes ou redes com realimentação.
- A figura mostra que os nós da rede têm conexões em duas direções, desta forma, o sinal percorre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

Conectando neurônios



- A saída da rede é função de suas entradas e pesos atuais e de seus estados anteriores, ou seja, de saídas anteriores.
- Esse tipo de rede forma um sistema dinâmico que pode atingir
 - um estado estável,
 - exibir oscilações
 - ou mesmo um comportamento caótico e divergir.

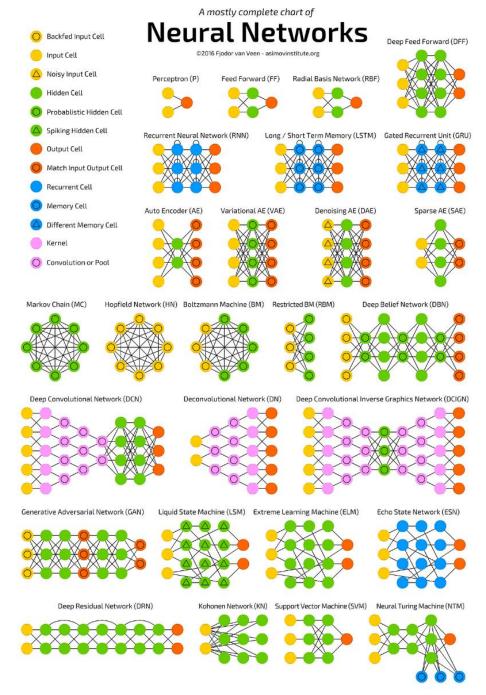
Conectando neurônios

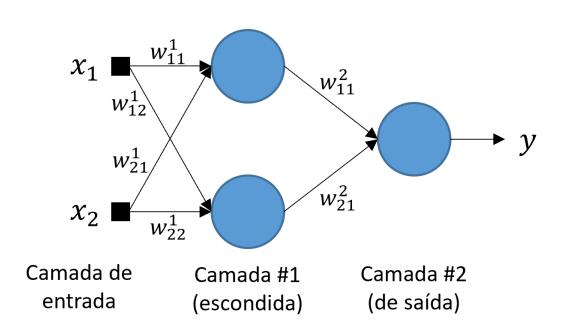


- Portanto, redes recorrentes possuem memória.
- Essas redes são úteis em tarefas que envolvem dependências temporais como
 - Previsões de séries temporais (e.g., monitoramento de sinais vitais, preço de ações, etc.) e
 - Processamento de linguagem natural (e.g., conversão de fala em texto, reconhecimento de palavras, respostas a perguntas, etc.).

Arquiteturas de redes neurais

- Hoje em dia, existem diversas outras formas de conexão entre camadas e nós que dão origem a uma gama imensa de arquiteturas de redes neurais.
- Um compilado dessas arquiteturas pode ser encontrado em
 - https://www.asimovinstitute.org/author/fjo dorvanveen/





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

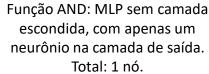
$$y = f(\mathbf{w}^T f(\mathbf{W}^T \mathbf{x})),$$
 onde $f(.)$ é a **função de ativação** escolhida para todos os nós, $\mathbf{W} = \begin{bmatrix} w_{11}^1 & w_{12}^1 \\ w_{21}^1 & w_{22}^1 \end{bmatrix},$
$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} w_{11}^2 \\ w_{21}^2 \end{bmatrix} e \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

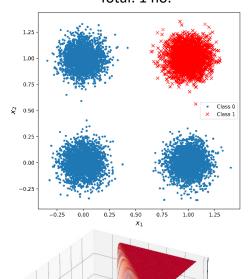
 Percebam que a saída da rede é dada pelo aninhamento das saídas de funções de ativação não-lineares.

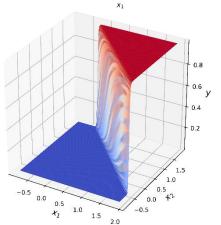
- Portanto, as redes neurais têm a *capacidade de aproximar funções* altamente não-lineares.
- Essa capacidade *depende da sua arquitetura*, incluindo o número de camadas, o número de nós (que corresponde à quantidade de pesos) e as funções de ativação empregadas.
 - A quantidade de pesos de uma rede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

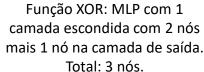
- Por exemplo, uma rede neural com *uma camada oculta* com um número suficientemente grande de nós pode aproximar praticamente qualquer função contínua.
- Com *duas camadas ocultas*, até *funções descontínuas* podem ser *aproximadas*.
- Portanto, dizemos que as redes neurais possuem *capacidade de aproximação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

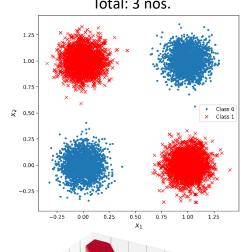
Aproximação universal de funções em problemas de classificação

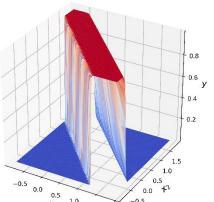




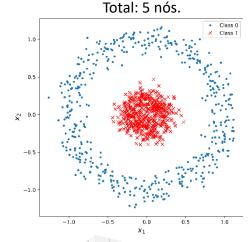


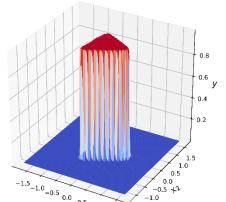






Círculos concêntricos: MLP com 1 camada escondida com 4 nós mais 1 nó na camada de saída.





- Fig. 1: Um nó aproxima uma função de limiar suave.
- Fig. 2: Combinando duas funções de limiar suave com direções opostas, podemos obter uma função com formato de onda.
- Fig. 3: Combinando duas ondas perpendiculares, nós obtemos uma função com formato triangular.

Aproximação universal de funções em problemas de regressão

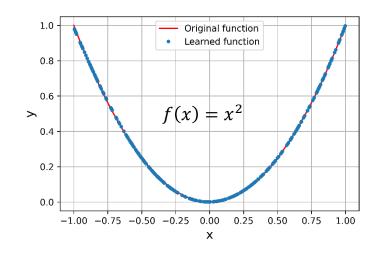
 Redes neurais podem ser usadas para aproximar funções como as apresentadas abaixo:

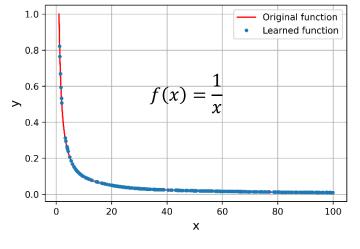
■
$$f(x) = x^2, -1 \le x \le 1$$
,

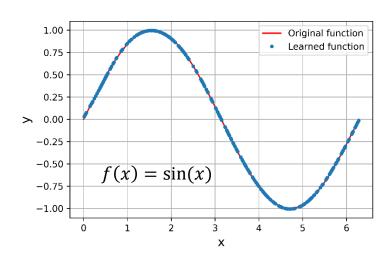
•
$$f(x) = \frac{1}{x}, 1 \le x \le 100,$$

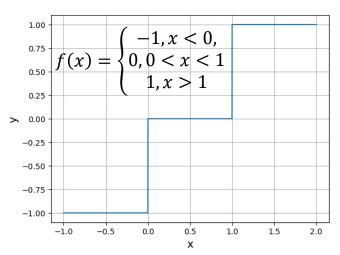
$$f(x) = \sin(x), 1 \le x \le 2\pi,$$

$$f(x) = \begin{cases} -1, & x < 0, \\ 0, & 0 < x < 1 \\ 1, & x > 1 \end{cases}$$









Para casa

- 1. Use as classes MLPRegressor e GridSearchCV da biblioteca SciKit-Learn para encontrar o número de camadas escondidas e nós necessários para que uma rede neural aproxime as funções apresentadas no slide anterior.
 - OBS.: Uma única camada oculta é capaz de aproximar qualquer função contínua.
 Já duas ou mais conseguem aproximar funções com descontinuidade.
- 2. Use as classes MLPClassifier e GridSearchCV e a função load digits da biblioteca SciKit-Learn para encontrar o número de camadas escondidas e nós necessários para classificar imagens de dígitos escritos à mão.
 - OBS.: Ao invocar a função *load_digits*, configure o parâmetro *return_X_y* como *True*.

Como as redes neurais aprendem?

- O processo de atualização dos pesos de uma rede neural corresponde a um problema de minimização de uma função de erro (de perda ou de custo), J(W), com relação aos pesos da rede neural.
 - W representa uma array contendo todos os pesos da rede neural.
- Assim, o problema do aprendizado em redes neurais pode ser formulado como

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

- Esse processo de otimização é conduzido de forma iterativa, o que dá um sentido mais natural à noção de aprendizado (i.e., um processo gradual).
- Os métodos de otimização mais utilizados são os baseados nas derivadas da função de erro, J(W).

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

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

onde
$$\boldsymbol{w}$$
 é o vetor de pesos, $\nabla J(\boldsymbol{w}(k))$ é o vetor gradiente da forma
$$\begin{bmatrix} \frac{\partial J(\boldsymbol{w}(k))}{\partial w_0} & \frac{\partial J(\boldsymbol{w}(k))}{\partial w_1} & \cdots & \frac{\partial J(\boldsymbol{w}(k))}{\partial w_{K+1}} \end{bmatrix}^T \in \mathbb{R}^{K+1 \times 1}, \alpha$$
 é o passo de aprendizagem e k é a iteração de atualização.

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

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

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

 Usando uma aproximação de Taylor de segunda ordem da função de erro, resulta na seguinte equação de atualização dos pesos

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

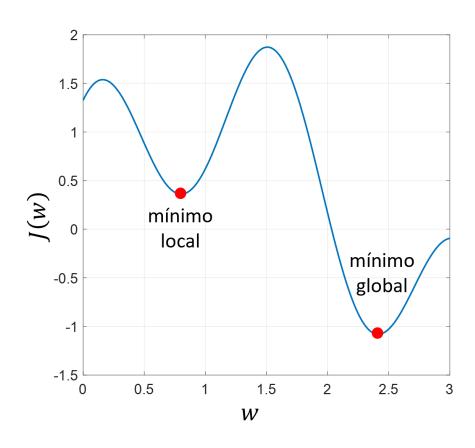
- Essa expressão requer que a *matriz Hessiana* seja *invertível* e *definida positiva* a cada iteração, k, i.e., $\mathbf{z}^T H \mathbf{z} > 0$, $\forall \mathbf{z} \neq \mathbf{0}$ (vetor nulo).
- A atualização dos pesos utilizando informações de primeira e de segunda ordem é mais precisa do que a fornecida por métodos de primeira ordem.
- Portanto, métodos de *segunda ordem convergem mais rapidamente* do que métodos de *primeira ordem*.

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

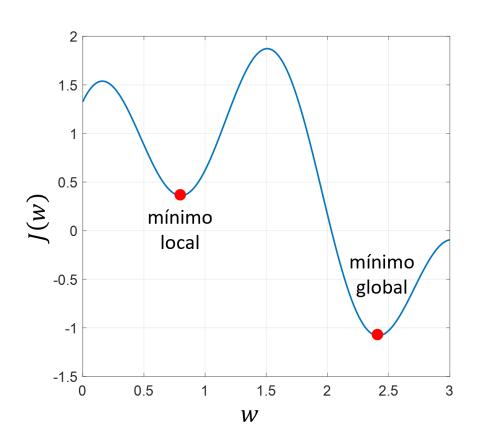
- Entretanto, o cálculo exato da matriz
 Hessiana pode ser custoso
 computacionalmente em vários casos
 práticos.
 - Por exemplo, se tivermos K = 10 pesos para otimizar, precisamos calcular $10 \times 10 = 100$ derivadas parciais para formar a matriz Hessiana.
 - Além disso, ela precisa ser invertida, o que tem complexidade cúbica, $O(K^3)$.
 - Portanto, essa abordagem direta não é eficiente se o número de pesos for muito grande, o que é o caso quando se usa redes neurais profundas.

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

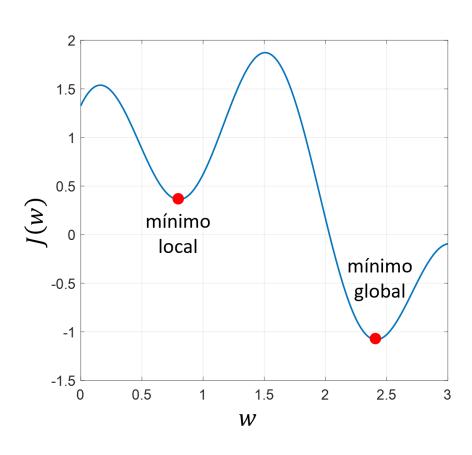
- Porém, há um conjunto de métodos de segunda ordem que evitam esse cálculo direto, como os métodos quasi-Newton ou os métodos de gradiente escalonado, os quais aproximam a matriz Hessiana.
- O algoritmo *limited-memory Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno* (LBFGS) é um exemplo de método *quasi-Newton* implementado pela biblioteca *SciKit-Learn* em algumas de suas classes.



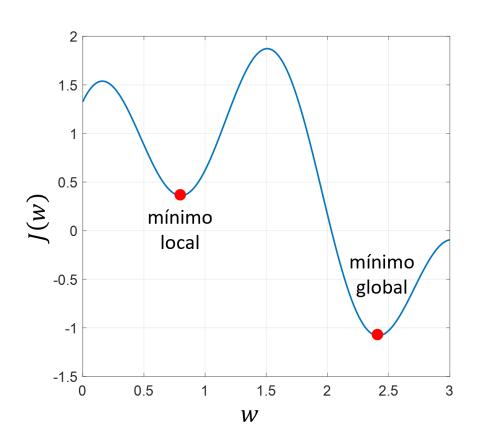
- Todos os métodos que acabamos de discutir são métodos de busca local, ou seja, eles buscam uma solução nas proximidades de onde se encontram.
- Consequentemente, a convergência para um mínimo global não é assegurada.



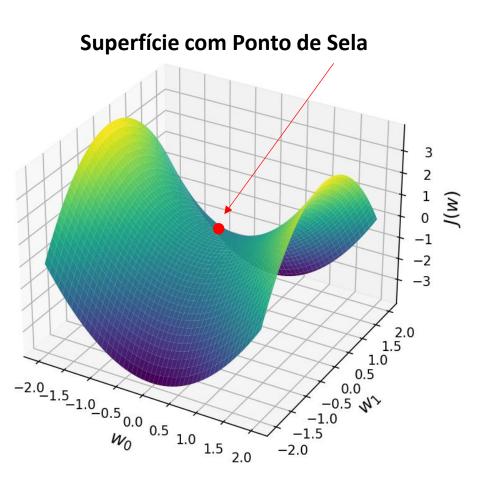
- Portanto, dependendo de onde o algoritmo é inicializado, ele pode convergir para um mínimo local.
- A figura apresenta dois mínimos:
 - Mínimo local: é uma solução ótima apenas em relação aos seus vizinhos.
 - Mínimo global: é uma solução ótima em relação a todo o domínio da função de erro.



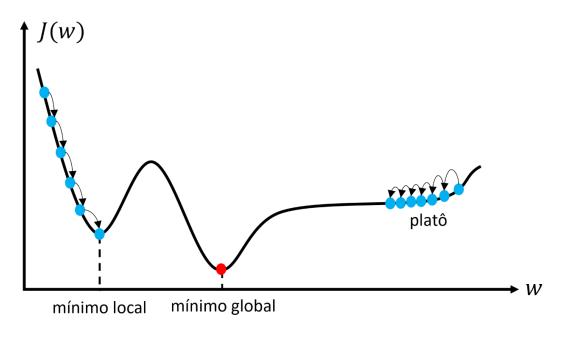
 Por serem formadas pela combinação de vários nós com funções de ativação não-lineares, as superfícies de erro de redes neurais não são convexas, ou seja, são altamente irregulares, podendo conter vários mínimos locais.



- Entretanto, felizmente, em muitos problemas envolvendo redes neurais, quase todos os mínimos locais têm valor de erro próximo ao do mínimo global e, portanto, encontrar um mínimo local já é bom o suficiente para um dado problema.
- Além dos mínimos locais e global, as superfícies de erro de redes neurais podem apresentar outras *irregularidades* que dificultam seu aprendizado.

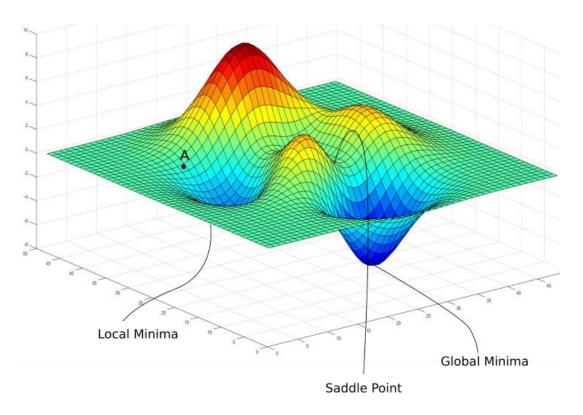


- Uma irregularidade que pode ser encontrada são os pontos de sela:
 - É um ponto que é um mínimo ao longo de um eixo, mas um máximo ao longo de outro.
 - Em algumas direções são atratores (i.e., alta declividade), mas em outras não.
- O algoritmo de otimização pode passar um longo período de tempo sendo atraído por eles, o que prejudica seu desempenho.
- Para escapar destes pontos, usa-se métodos de segunda ordem, versões estocásticas (i.e., ruidosas) do gradiente descendente ou reinicialização dos pesos.



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

Exemplo da superfície de erro de uma rede neural



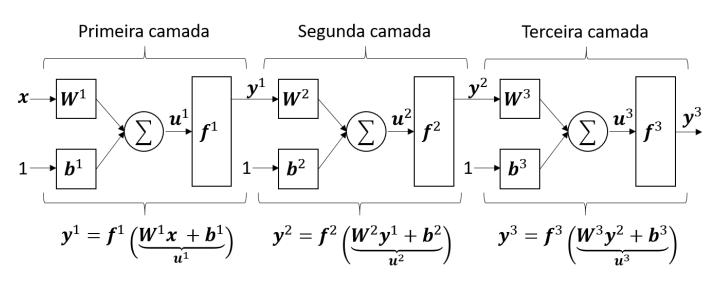
- Portanto, como garantir que o mínimo encontrado é bom o suficiente?
- Treina-se o modelo várias vezes, sempre inicializando os pesos de forma aleatória, com a esperança de que em alguma dessas vezes ele inicialize mais próximo do mínimo global ou de um bom mínimo local.
- Adicionalmente, pode-se usar a técnica da parada antecipada para armazenar o melhor conjunto de pesos.

Como atualizamos os pesos dos neurônios de uma RNA?

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

- Para que entendamos melhor o motivo desta tarefa não ser trivial, nós iremos considerar as notações abaixo, as quais serão úteis a seguir.
 - O peso sináptico, $w_{i,j}^m$, corresponde ao j-ésimo peso do i-ésimo $node node node node neural e <math>w^m$ é a matriz (ou vetor) com todos os pesos da m-ésima camada.
 - O peso de bias, b_i^m , corresponde ao peso do i-ésimo **nó** da m-ésima camada da **rede neural** e b^m é o vetor com todos os pesos de bias da m-ésima camada.
 - A ativação, u_i^m , corresponde à combinação linear das entradas do i-ésimo nó da m-ésima camada da rede neural e u^m é o vetor de ativações com as combinações lineares das entradas de todos os nós da m-ésima camada.
 - $f^m(.)$ é a função de ativação da m-ésima camada da **rede neural**.
- Essas notações nos ajudarão a obter os vetores gradiente para atualizar os pesos de todos os nós da rede neural.

• Usando as notação definidas, podemos representar uma MLP como



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

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

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

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

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

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

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

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

$$J = \frac{1}{N_{\text{dados}} N_{M}} \sum_{n=1}^{N_{\text{dados}}} \sum_{j=1}^{N_{M}} \left(d_{j}(n) - \underbrace{f_{j}^{M} \left((\boldsymbol{w}_{j}^{M})^{T} \boldsymbol{y}^{M-1} + b_{j}^{M} \right)}_{y_{j}^{M}(n)} \right)^{2},$$

onde \mathbf{w}_{j}^{M} é o vetor de pesos e f_{j}^{M} a função de ativação do j-ésimo nó da M-ésima camada.

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

- Resposta: Propaga-se o erro calculado na saída da rede neural para suas camadas anteriores até a primeira camada oculta usando-se um algoritmo, baseado na regra da cadeia, conhecido como backpropagation ou retropropagação do erro.
- A dependência dos pesos das camadas ocultas aparece de maneira clara na expressão do erro através de aplicações sucessivas da regra da cadeia.
- Portanto, na sequência, veremos de maneira sistemática como a retropropagação do erro é realizada para treinar uma rede neural.

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

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

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

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

Algumas noções básicas da retropropagação

 Considerando a derivada parcial da função de erro em relação a um peso qualquer e usando a regra da cadeia, podemos reescrevê-la como

Peso de qualquer camada.
$$\frac{\partial J}{\partial w_{i,j}^m} = \frac{\partial J}{\partial u_i^m} \frac{\partial u_i^m}{\partial w_{i,j}^m} \cdot \frac{\partial w_i^m}{\partial w_{i,j}^m} \cdot \frac{\partial w$$

- A primeira derivada após a igualdade é a derivada da função de erro em relação à ativação do i-ésimo nó da m-ésima camada.
- Esse valor é chamado de *sensibilidade* e será denotado pela letra grega δ . Desta forma a *sensibilidade* do i-ésimo nó da m-ésima camada dado por

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

• O termo δ_i^m é único para cada ${\it no}$ da m-ésima camada.

Algumas noções básicas da retropropagação

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

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

então, sua derivada em relação ao peso sináptico $w_{i,j}^m$ é dada por $\frac{\partial u_i^m}{\partial w_{i,j}^m} = y_j^{m-1}$

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

• Caso a derivada seja em relação ao peso de bias, b_i^m , temos $\frac{\partial u_i^m}{\partial b_i^m} = 1.$

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

Algumas noções básicas da retropropagação

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

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

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

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

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

- Portanto, a estratégia de otimização adotada para atualização dos pesos (sinápticos e de bias) da rede neural é a seguinte:
 - 1. Começa-se pela saída, onde o erro é calculado.
 - Etapa chamada de direta, pois aplica-se as entradas (i.e., atributos) à rede e calcula-se o erro de saída.
 - 2. Encontra-se uma *regra recursiva* que gere os valores de *sensibilidade* para os *nós* das camadas anteriores até a primeira camada oculta.
 - Etapa chamada de reversa, pois calcula-se a contribuição de cada nó das diversas camadas da rede no erro de saída.

- Esse processo é chamado de *retropropagação do erro* ou *backpropagation*.
- Para facilitar a *retropropagação do erro*, nós vamos inicialmente agrupar todas as *sensibilidades* da m-ésima camada, δ_i^m , $\forall i$, em um vetor, δ^m .
- Em seguida, vamos encontrar uma regra que fará a transição ${m \delta}^m o {m \delta}^{m-1}$.
- Ou seja, a partir do vetor de *sensibilidades* da camada m, iremos encontrar o vetor de *sensibilidades* da camada anterior, m-1.
- Em resumo, o processo de retropropagação do erro é iniciado calculandose o vetor de sensibilidades da camada de saída, δ^M , e, de maneira recursiva, obtém-se os vetores de sensibilidades de todas as camadas anteriores.

• Para calcular a sensibilidade da camada de saída, δ^M , consideramos N_M saídas (i.e., nós) e, assim, temos que o j-ésimo elemento do vetor δ^M é dado por:

$$\delta_{j}^{M} = \frac{\partial e_{j}^{2}}{\partial u_{j}^{M}} = \frac{\partial \left(d_{j} - y_{j}^{M}\right)^{2}}{\partial u_{j}^{M}} = \frac{\partial \left(d_{j} - y_{j}^{M}\right)^{2}}{\partial u_{j}^{M}} = \frac{\partial \left(d_{j} - y_{j}^{M}\right)^{2}}{\partial y_{j}^{M}} \frac{\partial y_{j}^{M}}{\partial u_{j}^{M}} = -2\left(d_{j} - y_{j}^{M}\right) \frac{\partial y_{j}^{M}}{\partial u_{j}^{M}} =$$

onde

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

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

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

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

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

onde a matriz
$$F'^M(u^M)$$
 é uma $matriz \ diagonal$ com as derivadas das funções de ativação em relação às ativações dos N_M nós da M -ésima camada,
$$F'^M(u^M) = \begin{bmatrix} f'^M(u_1^M) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & f'^M(u_2^M) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & f'^M(u_{N_M}^M) \end{bmatrix},$$

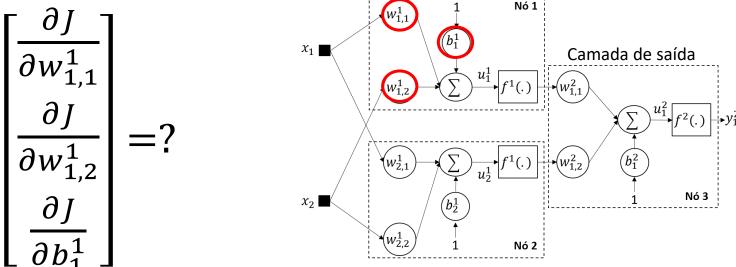
d e y são vetores coluna de dimensão $N_M \times 1$ com os valores esperados e de saída da rede neural, respectivamente.

• Desta forma, a aplicação sucessiva da *regra da cadeia* leva a uma *recursão* que, em termos matriciais, é dada por Matriz ou vetor com os pesos que conectam a camada m-1 à camada m.

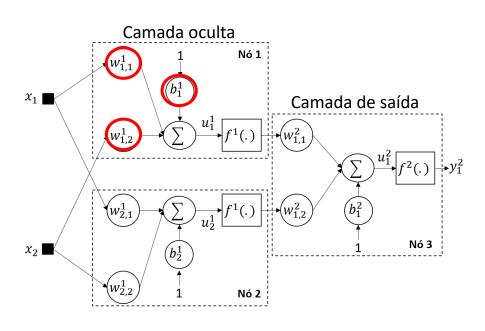
$$\boldsymbol{\delta}^{m-1} = \boldsymbol{F}'^{m-1}(\boldsymbol{u}^{m-1})(\boldsymbol{W}^m)^T \boldsymbol{\delta}^m.$$

• Encontrar o vetor gradiente para todos os pesos do nó 1 (camada oculta) Camada oculta

da rede neural MLP abaixo.

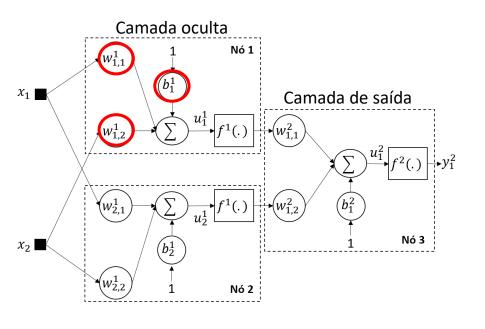


• OBS.: vamos deixar as derivadas da função de ativação em relação às ativações de forma genérica, ou seja, sem assumir um tipo específico de função de ativação.



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

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



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

- Portanto, de posse do valor de saída y_1^2 , podemos calcular o erro $e_1=d-y_1^2$.
- Com o erro, podemos calcular a sensibilidade do **nó** da camada de saída $\delta^2 = -2(d-y_1^2)f'^2(u_1^2).$
- Temos, assim, nossa primeira *sensibilidade*. Agora, usando a equação de recursão para *retropropagar* o erro até a camada anterior, temos

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

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 um valor da camada m=2.

• Portanto, o vetor de sensibilidades da camada 1 é dado por

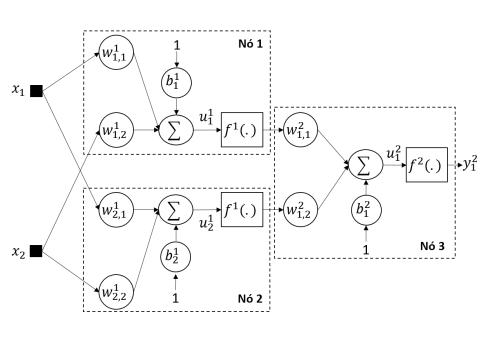
$$\boldsymbol{\delta}^{1} = \begin{bmatrix} \delta_{1}^{1} \\ \delta_{2}^{1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{1,1}^{2} f'^{1}(u_{1}^{1}) \\ w_{1,2}^{2} f'^{1}(u_{2}^{1}) \end{bmatrix} \delta^{2}.$$

• Em seguida, para obtermos a matriz de vetores gradiente, multiplicamos o vetor de *sensibilidades* pelo *vetor de entradas* da camada.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial J}{\partial w_{1,1}^{1}} & \frac{\partial J}{\partial w_{2,1}^{1}} \\ \frac{\partial J}{\partial w_{1,2}^{1}} & \frac{\partial J}{\partial w_{2,2}^{1}} \\ \frac{\partial J}{\partial b_{1}^{1}} & \frac{\partial J}{\partial b_{2}^{1}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{1} \\ x_{2} \\ 1 \end{bmatrix} [\delta_{1}^{1} & \delta_{2}^{1}].$$

• Assim, as derivadas parciais com relação aos pesos do $\emph{n\'o}~i=1$ da camada m=1 são dados por

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial J}{\partial w_{1,1}^1} \\ \frac{\partial J}{\partial w_{1,2}^1} \\ \frac{\partial J}{\partial b_1^1} \end{bmatrix} = \delta_1^1 \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ 1 \end{bmatrix} = \delta^2 w_{1,1}^2 f'^1(u_1^1) \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ 1 \end{bmatrix}$$
Os pesos de *bias*
estão ligados às
entradas com valores
constantes iguais a 1.
$$= -2(d - y_1^2) f'^2(u_1^2) w_{1,1}^2 f'^1(u_1^1) \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ 1 \end{bmatrix}.$$



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

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

• Resolvendo as derivadas parciais, temos

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

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

plicando-se o mesmo procedimento aos outros pesos, obtemos
$$\frac{\partial J}{\partial w_{1,1}^1} = \frac{\partial e^2}{\partial w_{1,1}^1} = \frac{\partial \left(d - f^2(u_1^2)\right)^2}{\partial f^2(u_1^2)} \frac{\partial f^2(u_1^2)}{\partial u_1^2} \frac{\partial u_1^2}{\partial f^1(u_1^1)} \frac{\partial f^1(u_1^1)}{\partial u_1^1} \frac{\partial u_1^1}{\partial w_{1,1}^1} = \frac{\partial e^2}{\partial w_{1,2}^1} = \frac{\partial \left(d - f^2(u_1^2)\right)^2}{\partial f^2(u_1^2)} \frac{\partial f^2(u_1^2)}{\partial u_1^2} \frac{\partial u_1^2}{\partial f^1(u_1^1)} \frac{\partial f^1(u_1^1)}{\partial u_1^1} \frac{\partial u_1^1}{\partial w_{1,2}^1} = \frac{\partial e^2}{\partial b_1^1} = \frac{\partial \left(d - f^2(u_1^2)\right)^2}{\partial f^2(u_1^2)} \frac{\partial f^2(u_1^2)}{\partial u_1^2} \frac{\partial u_1^2}{\partial f^1(u_1^1)} \frac{\partial f^1(u_1^1)}{\partial u_1^1} \frac{\partial u_1^1}{\partial b_1^1}$$

Para casa

- Façam o exercício #7 da lista 12.
- Vocês já podem fazer até o exercício #9 da lista 12.

Algumas questões práticas sobre algoritmos de aprendizado

- Podemos dizer que os *elementos básicos do aprendizado de máquina* através de *redes neurais* foram apresentados até aqui.
- Porém, existem alguns aspectos práticos que nós precisamos discutir.
- Portanto, começamos relembrando sobre a questão do *cálculo do vetor gradiente*.

Cálculo do vetor gradiente

- Conforme vimos anteriormente, a base para o aprendizado de redes MLP é a obtenção do vetor gradiente e o estabelecimento de um processo iterativo de busca dos pesos que minimizem a função de erro.
- Vimos que a obtenção do *vetor gradiente* se dá através do processo de *retropropagação do erro*, o qual é dividido em duas etapas:
 - Etapa direta (*forward*) onde se apresenta um exemplo de entrada, x, e obtém-se a resposta da rede e, consequentemente, o *erro de saída*.
 - Etapa reversa (*retropropagação*) em que se calculam as derivadas parciais necessárias ao longo das camadas da rede.

Cálculo do vetor gradiente

 Vimos que a derivada parcial do erro em relação a um peso qualquer é a média de gradientes particulares (ou locais)

$$\frac{\partial J(\mathbf{W})}{\partial w_{i,j}^m} = \frac{1}{N_{\text{dados}} N_M} \sum_{n=1}^{N_{\text{dados}}} \sum_{j=1}^{N_M} \frac{\partial e_j^2(n)}{\partial w_{i,j}^m} = \frac{1}{N_{\text{dados}}} \sum_{n=1}^{N_{\text{dados}}} \nabla J_n(\mathbf{W}).$$
Gradients less!

- O *gradiente local* é a derivada parcial do erro da j-ésima saída da rede para o n-ésimo exemplo de entrada em relação ao peso $w_{i,j}^m$.
- $\nabla J_n(\mathbf{W})$ é a média dos N_M gradientes locais para o n-ésimo exemplo de entrada.
- No entanto, aqui surge um questionamento importante:
 - O que é melhor, usar a *média dos* N_M *gradientes locais*, $\nabla J_n(W)$, *e já dar um passo de otimização*, ou seja, atualizar os pesos, *reunir o gradiente completo e então dar um passo único e mais preciso* ou *um meio termo*?

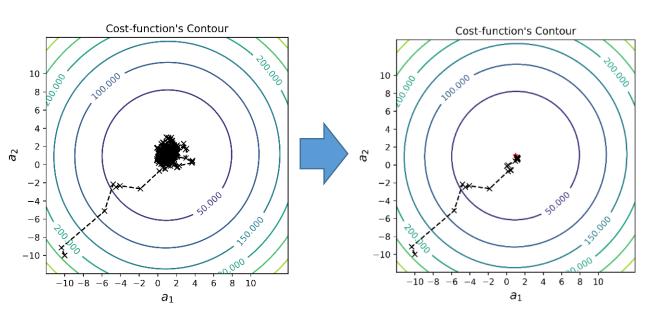
Cálculo do vetor gradiente

- Esse questionamento gera três abordagens possíveis para o cálculo do vetor gradiente.
 - O cálculo usando todos os exemplos (batelada).
 - O cálculo (i.e., estimativa) usando um único exemplo (estocástica).
 - O cálculo usando um subconjunto de exemplos (mini-batches).
- Nas redes neurais profundas (ou deep learning), usadas com muita frequência em problemas possuem enormes conjuntos de dados, usa-se a abordagem com mini-batches, pois com ela, podemos controlar a complexidade computacional necessária para o treinamento.
- OBS.: Os exemplos para estimativa do vetor gradiente com as versões estocástica e mini-batch devem ser aleatoriamente escolhidos a partir do conjunto de treinamento.

Variações dos algoritmos de otimização dos pesos

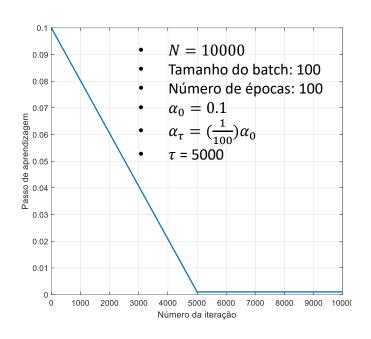
- Existem algumas *modificações* que podem ser aplicadas às versões estocásticas (mini-*batch* e estocástica) para *melhorar seu desempenho* sem aumentar muito sua complexidade computacional.
- As modificações mais usadas são:
 - Redução gradual do passo de aprendizagem,
 - Adição do termo momentum,
 - Adição do termo momentum de Nesterov,
 - Adição de passos de aprendizagem adaptativos.

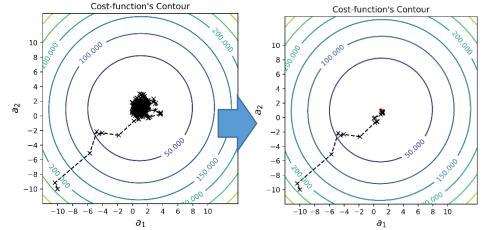
Redução gradual do passo de aprendizagem



- Assim como fizemos com as versões estocásticas do gradiente descendente quando trabalhamos com regressores lineares, podemos reduzir o passo de aprendizagem para tornar essas versões mais comportadas e, esperançosamente, obter a convergência.
- Podemos utilizar todas as técnicas que aprendemos antes: redução por degraus, decaimento exponencial ou temporal.

Redução gradual do passo de aprendizagem





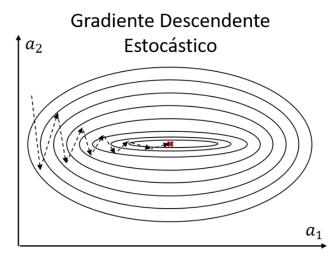
 As figuras mostram o resultado do uso da técnica de redução temporal com a equação

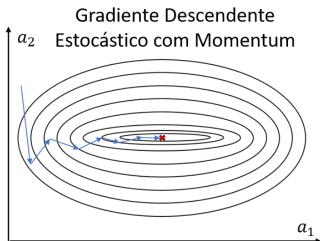
$$\alpha_j = \left(1 - \frac{j}{\tau}\right)\alpha_0 + \frac{j}{\tau}\alpha_\tau,$$

onde j é o contador de iterações, α_0 é o valor inicial do passo, τ é o número da iteração a partir da qual o passo fica constante e α_{τ} é o valor constante do passo após a τ -ésima iteração.

• Entretanto, percebam que ainda temos que encontrar os valores ideais para os hiperparâmetros, nesse caso, α_0 , α_{τ} e τ .

Termo momentum





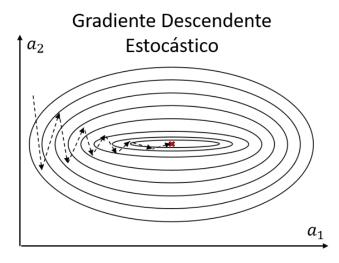
 Como vimos antes, o termo momentum adiciona uma média movente de estimativas do vetor gradiente, ν, à equação de atualização dos pesos, tornando as atualizações menos ruidosas e, consequentemente, acelerando a convergência e aumentando a estabilidade do algoritmo.

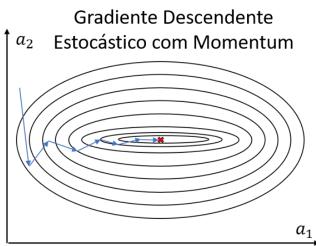
$$\mathbf{v}(i) = \mu \mathbf{v}(i-1) + (1-\mu)\nabla \widehat{J}_e(\mathbf{w}(i)),$$

$$\mathbf{w}(i+1) = \mathbf{w}(i) - \alpha \mathbf{v}(i).$$

onde $\nabla \widehat{J_e}$ (w(i)) é a *estimativa do vetor gradiente* e $\mu \in [0,1)$ (*coeficiente de momentum*) determina a quantidade de estimativas anteriores que são consideradas no cálculo da média.

Termo momentum





- O termo momentum adiciona uma média das estimativas dos gradientes anteriores à atualização corrente.
 - Quando as estimativas apontam na mesma direção por várias iterações, o termo faz com que o tamanho dos passos dados naquela direção aumentem, ou seja, o modelo ganha impulso.
 - Quando as estimativas mudam de direção a cada nova iteração, o termo suaviza as variações.
 - Como resultado, temos convergência mais rápida e oscilação reduzida.
- A *desvantagem* é que nós precisamos encontrar as valores ideais dos *hiperparâmetros* α e μ .

Momento de Nesterov

 O método do momento de Nesterov é uma variação do termo momentum em que o cálculo da estimativa do vetor gradiente não é feito em relação ao vetor de pesos atual, w(i), mas em relação ao próximo vetor de pesos, ou seja, em relação ao valor do vetor de pesos após sua atualização com o termo momentum,

$$\nabla \widehat{J}_e \left(\mathbf{w}(i+1) \right) = \nabla \widehat{J}_e \left(\mathbf{w}(i) - \alpha \mathbf{v}(i) \right).$$

- Essa mudança no cálculo da estimativa do vetor gradiente faz com que o momento de Nesterov apresente convergência mais rápida e ajustes mais precisos dos pesos, evitando passos em direções equivocadas.
- Amortiza as oscilações, especialmente em regiões onde a *superfície de erro se assemelha à forma de um vale*.

Passo de aprendizagem adaptativo

- Na variação adaptativa, o passo de aprendizagem é ajustado adaptativamente de acordo com a inclinação da superfície de erro.
- Além disso, usa passos de aprendizagem diferentes para cada peso do modelo, os atualizando de forma independente de acordo com a inclinação da superfície na direção dos pesos.
- Assim, esses métodos são adequados para redes neurais, onde a superfície de erro é bastante irregular e diferente em diferentes dimensões, tornando a atualização dos pesos mais efetiva.
- Uma vantagem é que na maioria dos casos, não é necessário se ajustar manualmente nenhum hiperparâmetro.
- As técnicas mais conhecidas são RMSProp, AdaGrad e Adam.

- Um outro aspecto prático que é importante discutirmos é a *inicialização* dos pesos de uma rede neural.
- Como os métodos de treinamento de *redes neurais* são de *busca local*, eles dependem de uma *inicialização dos pesos*.
- Porém, a inicialização pode afetar drasticamente a qualidade da solução obtida.
- O *ponto de inicialização dos pesos* pode afetar a velocidade de convergência do algoritmo.
- Alguns pontos de inicialização fazem com que a rede alcance uma boa solução mais rapidamente, enquanto outros pontos podem levar a uma convergência mais lenta (e.g., algoritmo pode ser inicializado em um ponto de sela ou em uma região de platô).

- Alguns pontos de inicialização são tão instáveis que o algoritmo pode encontrar dificuldades numéricas (underflow e overflow), falhando completamente em convergir (desaparecimento ou explosão dos gradientes).
- Uma questão importante da inicialização dos pesos é quebrar a simetria entre os nós, ou seja, nós com a mesma função de ativação e conectados aos mesmos nós, devem ter pesos iniciais diferentes, caso contrário, eles terão os mesmos pesos ao longo do treinamento (i.e., aprendem a mesma coisa).
- Portanto, como veremos a seguir, para quebrar a simetria e evitar problemas de convergência, utilizamos algumas heurísticas de inicialização aleatória dos pesos.

- Os pesos iniciais são tipicamente obtidos a partir de *distribuições gaussianas ou uniformes*, não importando muito qual delas é usada.
- No entanto, a *escala de variação da distribuição de inicialização dos pesos* tem um efeito significativo tanto no *resultado da otimização* quanto na *capacidade de generalização* da rede neural.
- Sendo assim, a *escala de variação* da inicialização dos pesos levanta algumas discussões.
- Distribuições com grande escala variação tendem a reduzir o problema da simetria, pois a probabilidade de valores iniciais bastante distintos é maior.

- Porém, se as *magnitudes dos valores iniciais forem muito grandes*, podemos ter problemas de *instabilidade*.
- Pesos com magnitudes muito grandes podem levar os nós com funções de ativação do tipo
 - Sigmoide a operarem na região de saturação, causando o desaparecimento do gradiente.
 - ReLU à *explosão do gradiente*.
- Por outro lado, distribuições com escala de variação muito pequena têm maiores chances causar a simetria entre nós e também podem apresentar instabilidade ou lentidão durante o treinamento.
 - Por exemplo, redes com pesos muito pequenos e com nós usando função de ativação ReLU, podem ter problemas com o desaparecimento do gradiente.
- Na sequência veremos algumas *heurísticas* para inicialização dos pesos.

Heurísticas de inicialização dos pesos

- A ideia por trás destas heurísticas de inicialização dos pesos é manter a média das ativações dos nós igual a zero e suas variâncias constantes ao longo das várias camadas da rede, pois desta forma evita-se o desaparecimento ou a explosão do gradiente.
- Considerando uma camada com m entradas e n saídas, temos as seguintes heurísticas para inicializar os pesos sinápticos* de seus nós.

Inicialização	Funções de ativação	Distribuição Uniforme $U(-r,r)$	Distribuição Normal $N(0,\sigma^2)$
Xavier/Glorot	Linear (i.e., nenhuma), Tanh, Logística, Softmax	$r = \sqrt{\frac{6}{m+n}}$	$\sigma^2 = \frac{2}{m+n}$
He	ReLU e suas variantes	$r = \sqrt{\frac{6}{m}}$	$\sigma^2 = \frac{2}{m}$
LeCun	SELU	$r = \sqrt{\frac{3}{m}}$	$\sigma^2 = \frac{1}{m}$

Redes neurais com a biblioteca SciKit-Learn



- A biblioteca SciKit-Learn disponibiliza apenas dois tipos de arquiteturas de redes neurais, MLP e máquina de Boltzmann restrita.
- A máquina de Boltzmann é implementada através da classe BernoulliRBM, e que é usada para extração de características de forma não supervisionada.
- Além disso, suas implementações *não são flexíveis* e *não se destinam a aplicações de larga escala*.
 - Por exemplo, a biblioteca SciKit-Learn não oferece suporte a GPUs.

Redes neurais com a biblioteca SciKit-Learn

- Para implementações de modelos de aprendizado profundo escaláveis, muito mais rápidos, flexíveis e baseados em GPU, devemos utilizar bibliotecas como:
 - *Tensorflow*: criada pela equipe *Google Brain* do *Google*.
 - **PyTorch**: criada pela *Meta AI* (antigo *Facebook*).
 - *MXNet*: criada pela *Apache*.
 - *Theano*: criada pela Universidade de Montreal (primeira versão) e mantida posteriormente pela equipe de desenvolvedores do pacote PyMC sob o nome de Aesara.
 - Entre outras: https://en.wikipedia.org/wiki/Comparison of deep learning software

Avisos

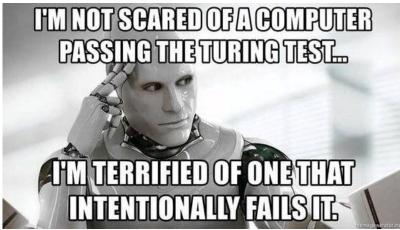
- Vocês já podem resolver os exercícios da lista #12.
- Apresentação dos trabalhos finais: XX/YY/2024 a partir das 08:00.
- Horários das apresentações:

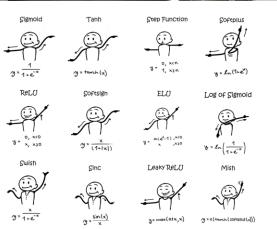
Dia	Horário do Início	Número do Grupo	Nome
	8:00		
	8:20		
	8:40		
	9:00		
	9:20		

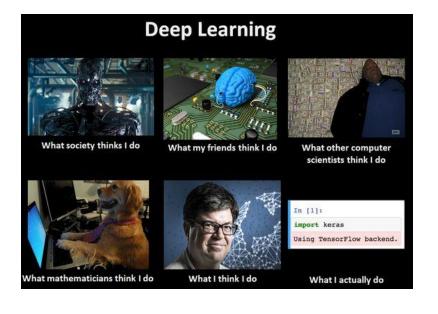
Obrigado!

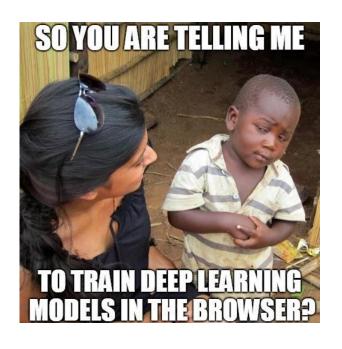
People with no idea about AI, telling me my AI will destroy the world Me wondering why my neural network is classifying a cat as a dog...

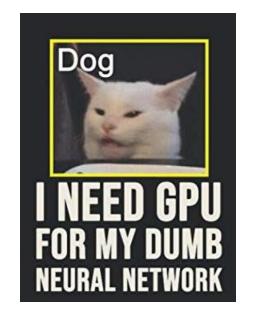


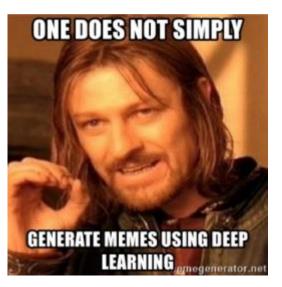


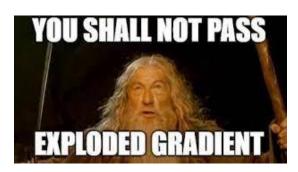




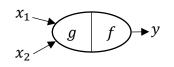


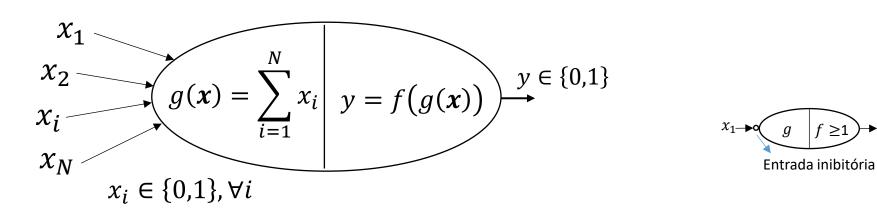


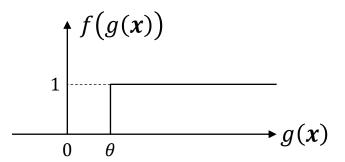




Figuras

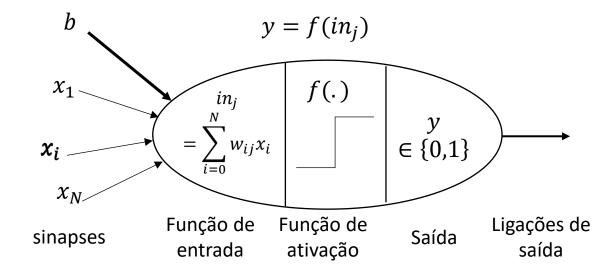


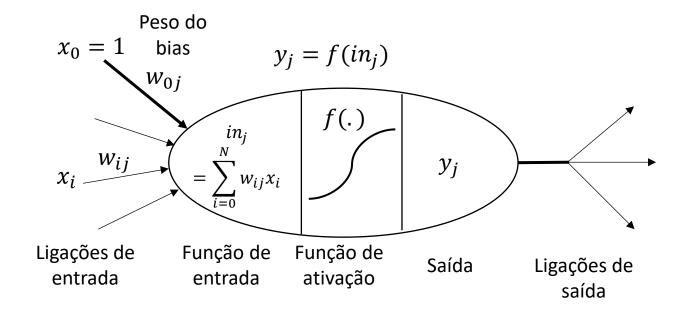


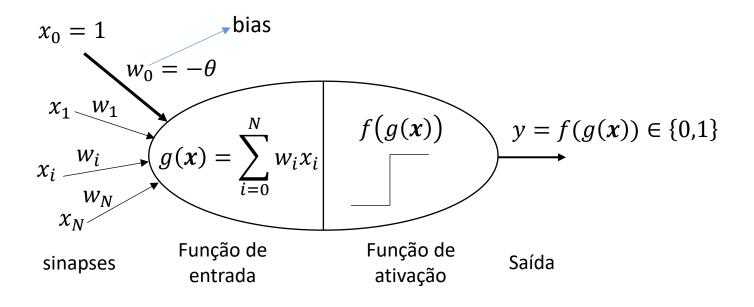


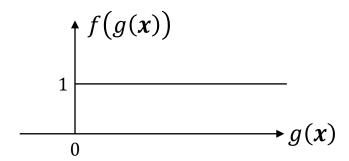
$$y = f(g(x)) = \begin{cases} 1 \text{ se } g(x) \ge \theta \\ 0 \text{ se } g(x) < \theta \end{cases}$$

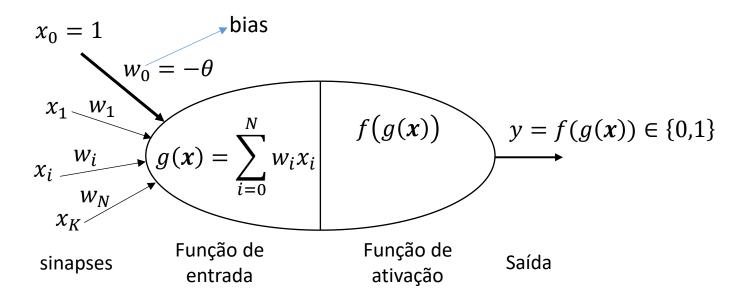
onde θ é o limiar de decisão.

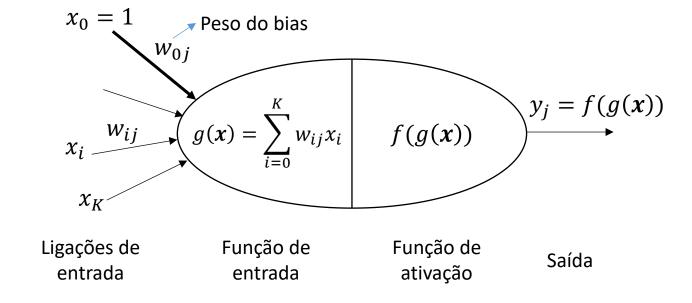


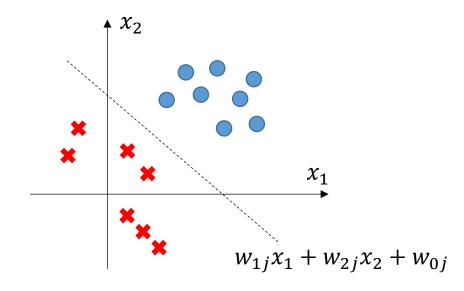


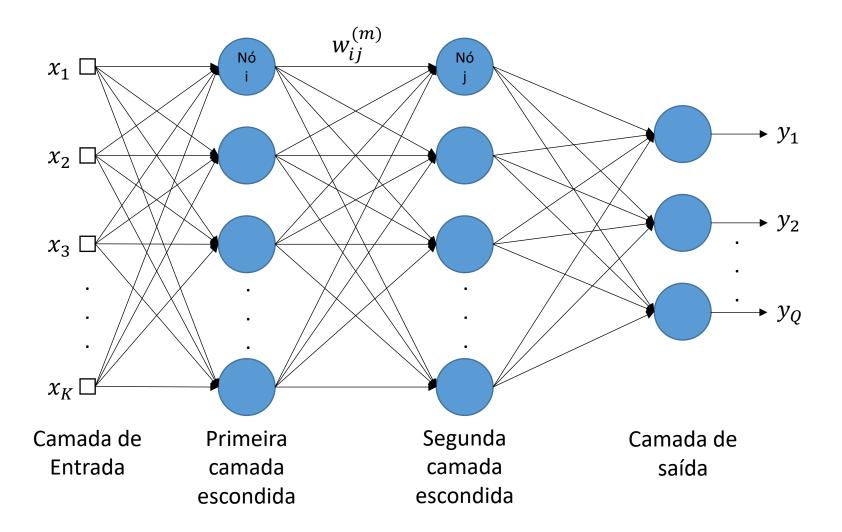








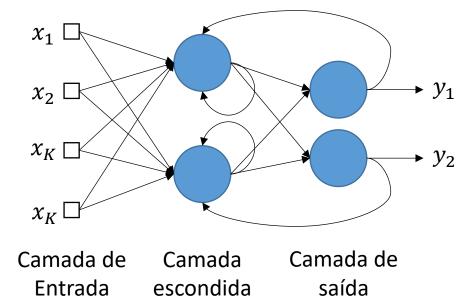


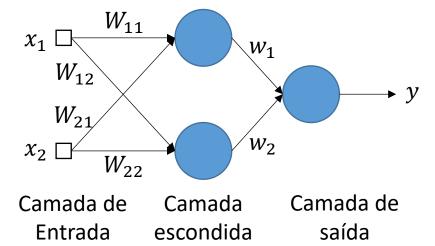


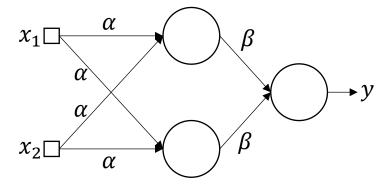
Nó, unidade ou neurônio.

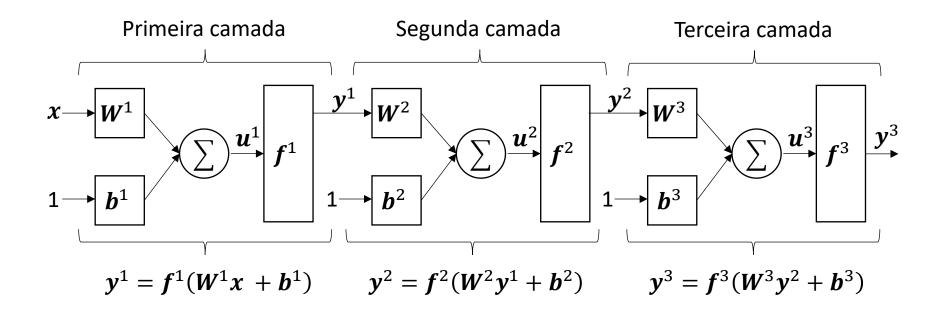
→ Ligação entre *i*-ésimo e *j*-ésimo nó.

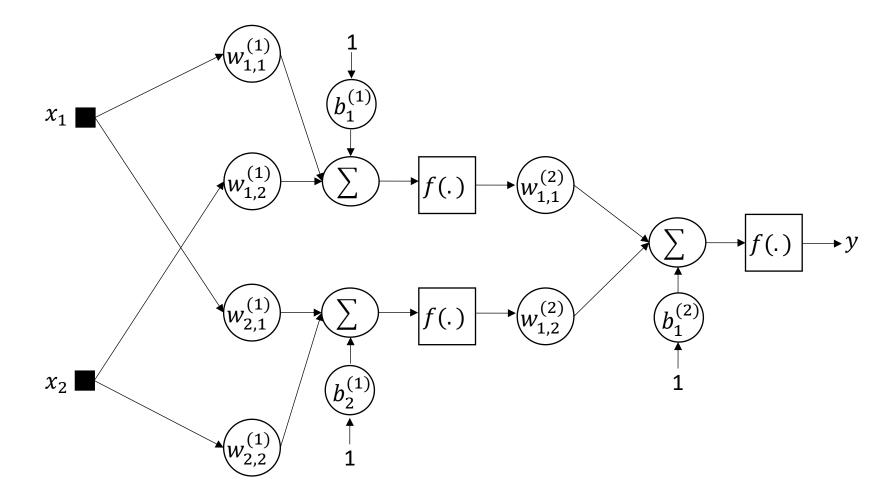
 w_{ij} Peso da ligação entre *i*-ésimo e *j*-ésimo nó.

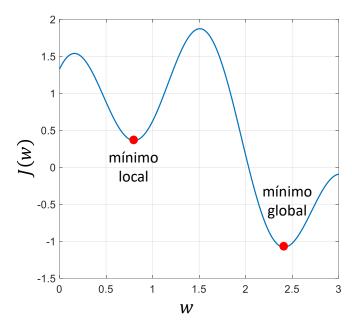






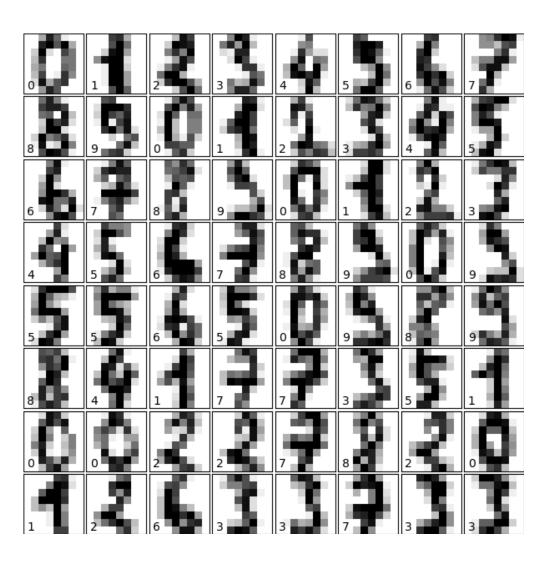




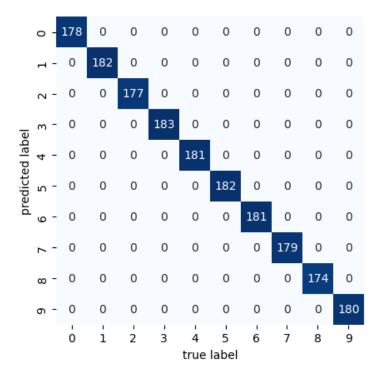


Possíveis respostas

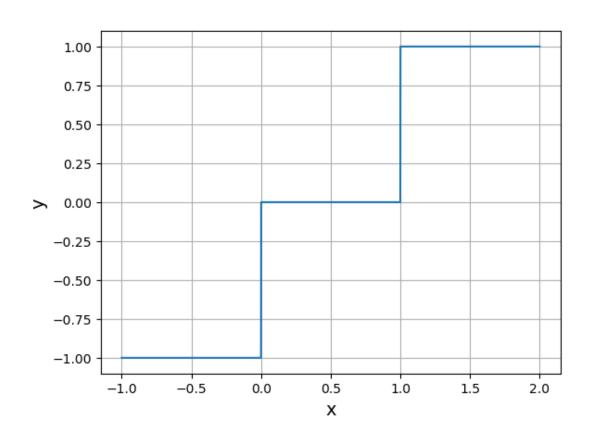
Classificação com MLPClassifier



Classificação de dígitos escritos à mão com uma rede MLP.



Regressão com MLPRegressor



Aproximação de função com descontinuidades com uma rede MLP.