Visão Computacional

Gradiente Descendende e Backpropagation

Prof. Dr. Denis Mayr Lima Martins

Pontifícia Universidade Católica de Campinas



Recap: Uma CNN é apenas uma grande equação

Considere o esboço de equação de uma CNN:

$$z_k = \sum_{j=1}^D \!\! \left[W_{jk}^{(\ell)} \left(ext{flatten} \! \left(ext{pool} \! \left(\phi \! \! \left(ext{conv} \! \left(x; W^{(c)}
ight) + b^{(c)}
ight)
ight)
ight)
ight)_j
ight] + b_k^{(\ell)}$$

- Durante o treinamento, precisamos ajustar cada parâmetro da CNN de forma a diminuir o erro da rede.
- O problema principal do treinamento é a otimização dos parâmetros da rede.

Objetivos de Aprendizagem

- Conceituar e Aplicar a otimização de funções de custo em Deep Learning.
- **Descrever** as variantes do algoritmo *Gradient Descent*.
- Compreender e Derivar o funcionamento de Back-Propagation.

Motivação: O Desafio do Treinamento

O treinamento de um modelo de Deep Learning (DL) é um problema de otimização.

- Objetivo: Encontrar o conjunto de parâmetros (\mathbf{w}, \mathbf{b}) de uma rede neural que minimiza uma função de custo (ou perda) \mathcal{L} .
- A função de custo $\mathcal{L}(\mathbf{w}, \mathbf{b})$ mede o quão "ruim" o modelo $f(\mathbf{x}; \mathbf{w}, \mathbf{b})$ é em mapear as entradas \mathbf{x} para as saídas desejadas \mathbf{y} .

$$\hat{oldsymbol{\phi}} = \operatorname{argmin}_{oldsymbol{\phi}} \left[\mathcal{L}(oldsymbol{\phi})
ight]$$

Onde ϕ representa o vetor de todos os parâmetros (\mathbf{w}, \mathbf{b}) do modelo.

Função de Custo: O que estamos minimizando?

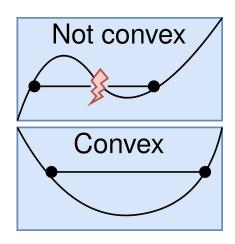
A função de custo mais comum, especialmente para problemas de regressão, é o **Erro Quadrático Médio (MSE)**:

• O MSE calcula a média dos erros quadráticos entre a saída prevista pelo modelo $f(\mathbf{x}_n; \mathbf{w}, \mathbf{b})$ e a saída real \mathbf{y}_n para N exemplos de treinamento.

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}, \mathbf{b}) = rac{1}{N} \sum_n \left(f(\mathbf{x}_n; \mathbf{w}, \mathbf{b}) - \mathbf{y}_n
ight)^2$$

 Para classificação, a Função de Perda de Entropia Cruzada (ou Cross-Entropy Loss) é preferida, pois deriva naturalmente da maximização da verossimilhança.

O Desafio: A função \mathcal{L} geralmente é **não-convexa** para redes profundas, possuindo múltiplos mínimos locais e pontos de sela (saddle points).



Função Convexa x Não-Convexa. Fonte: Wikipedia.

O Conceito de Gradiente ($\nabla \mathcal{L}$)

Para encontrar o ponto de mínimo de $\mathcal{L}(\mathbf{w})$, utilizamos o **gradiente**, que é um vetor de derivadas parciais.

- O gradiente $\nabla \mathcal{L}(\mathbf{w})$ aponta na direção de **máximo crescimento** da função.
- Portanto, o oposto do gradiente, $-\nabla \mathcal{L}(\mathbf{w})$, aponta na direção de **descida mais íngreme** (steepest descent).

Definição Matemática: O gradiente é o mapeamento que leva um vetor de parâmetros **w** a um vetor de derivadas parciais:

$$abla \mathcal{L}(\mathbf{w}) = \left(rac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_1}, rac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_2}, \dots, rac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_D}
ight)^T$$

Veremos mais detalhes na lousa.

Gradient Descent

O algoritmo *Gradient Descent* (GD) é o método geral de minimização que usa informações lineares locais para mover-se iterativamente em direção a um mínimo (local).

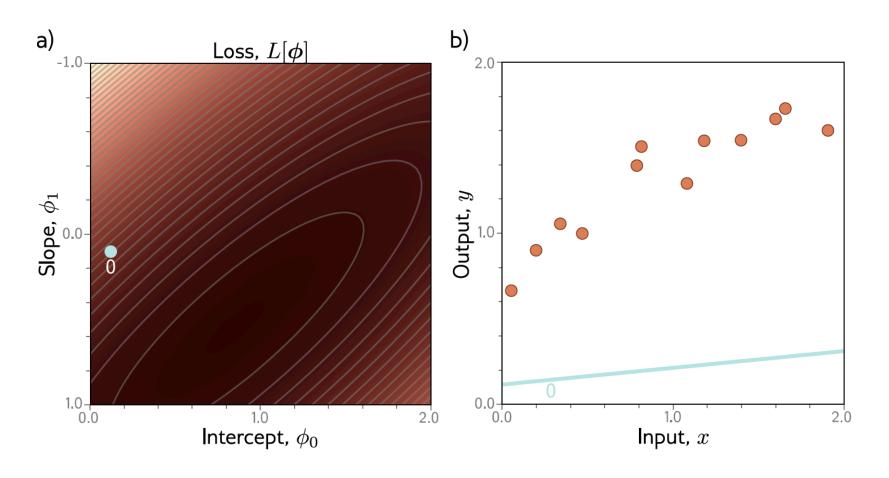
O Algoritmo em 2 Passos:

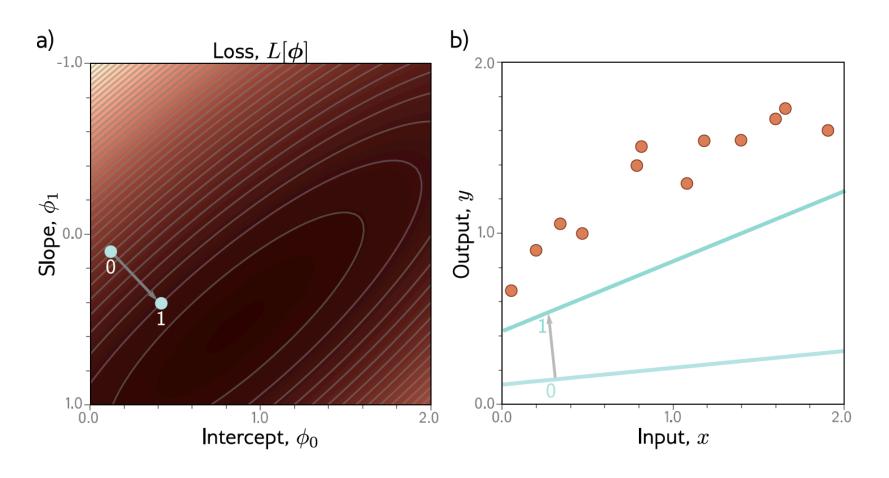
- 1. **Cálculo:** Calcule o gradiente da função de custo \mathcal{L} em relação aos parâmetros \mathbf{w} .
- 2. **Atualização:** Atualize os parâmetros dando um "passo" no sentido contrário ao gradiente (descida).

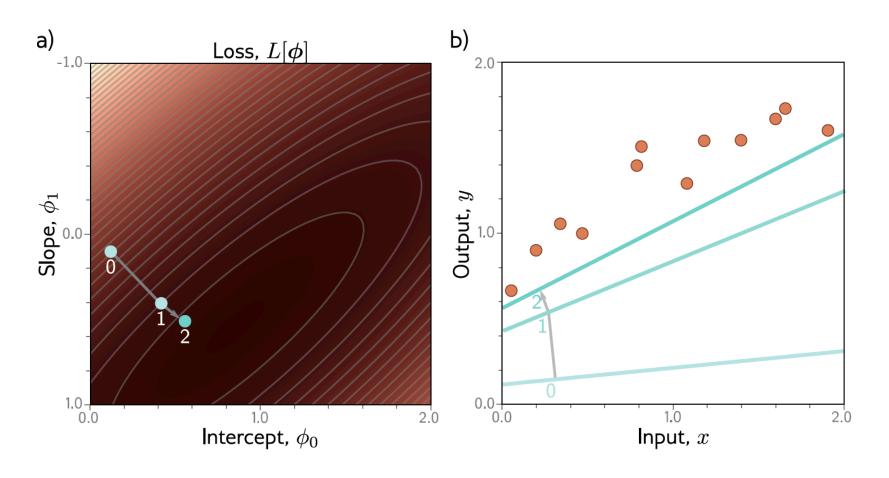
Fórmula de Atualização Central:

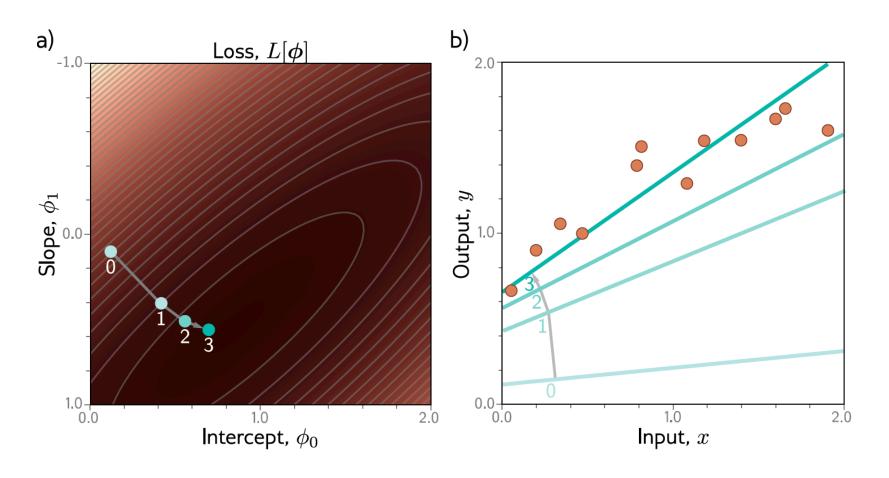
$$\mathbf{w}_{t+1} = \mathbf{w}_t - \eta
abla \mathcal{L}(\mathbf{w}_t)$$

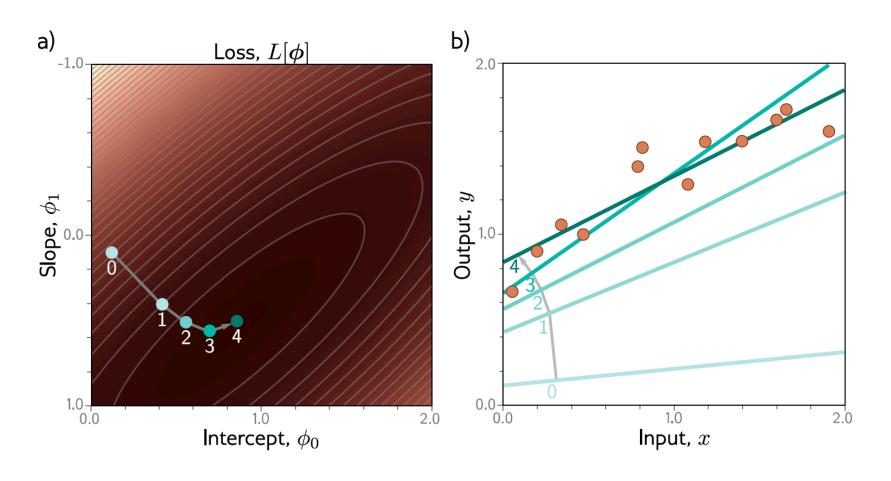
• Onde \mathbf{w}_t são os parâmetros na iteração t, e $\eta>0$ é a **taxa de aprendizado (\eta - learning rate)**, que controla o tamanho do passo.

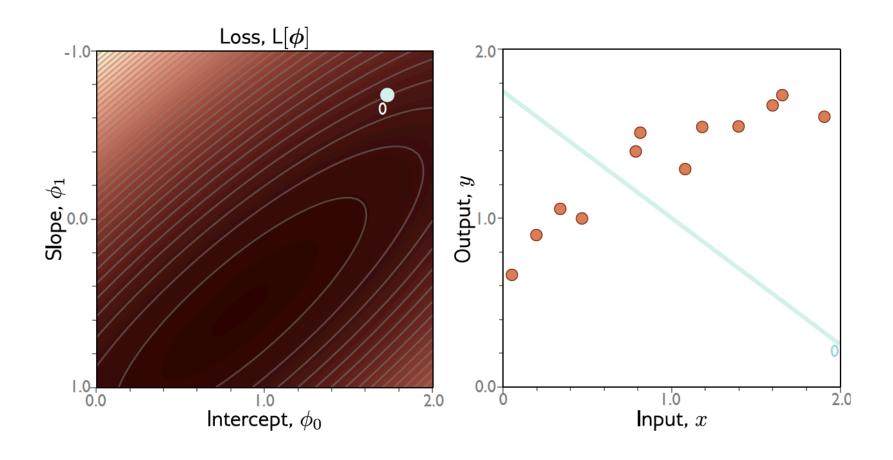


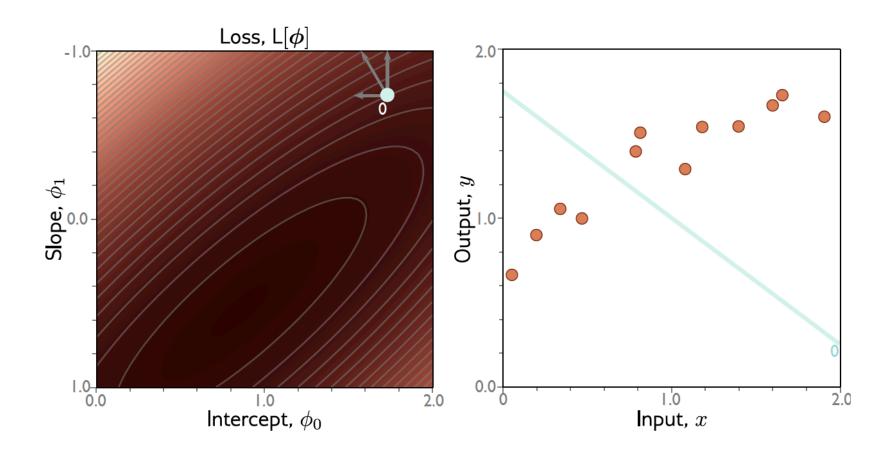


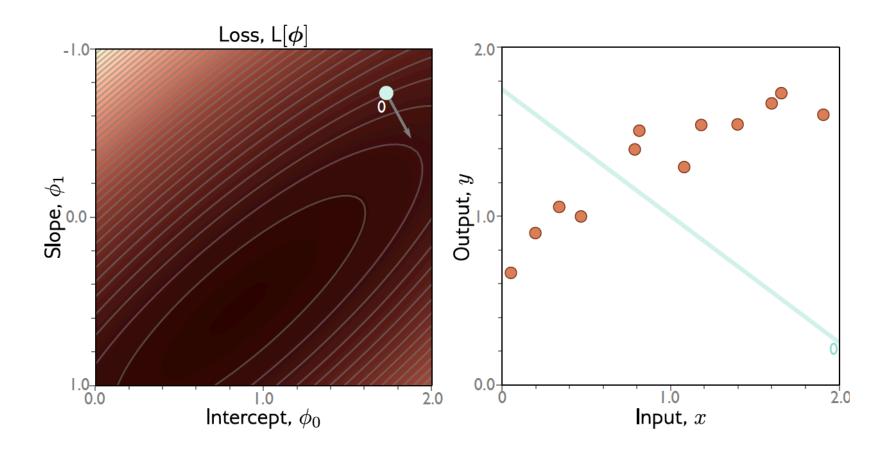




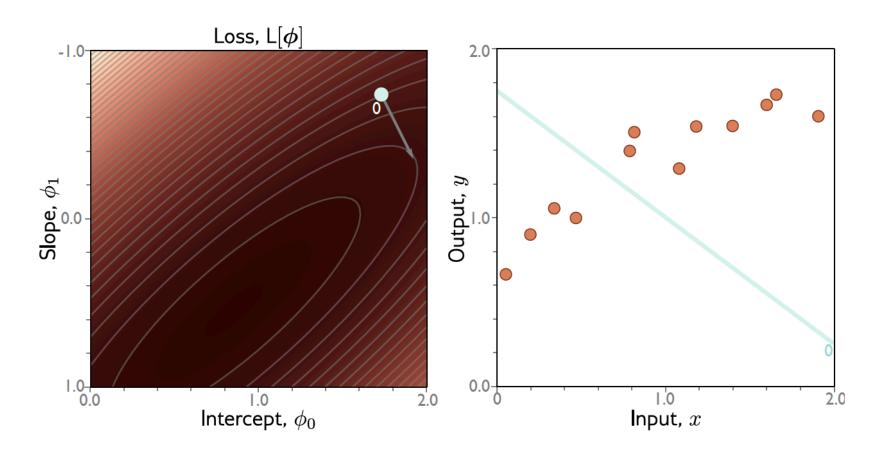




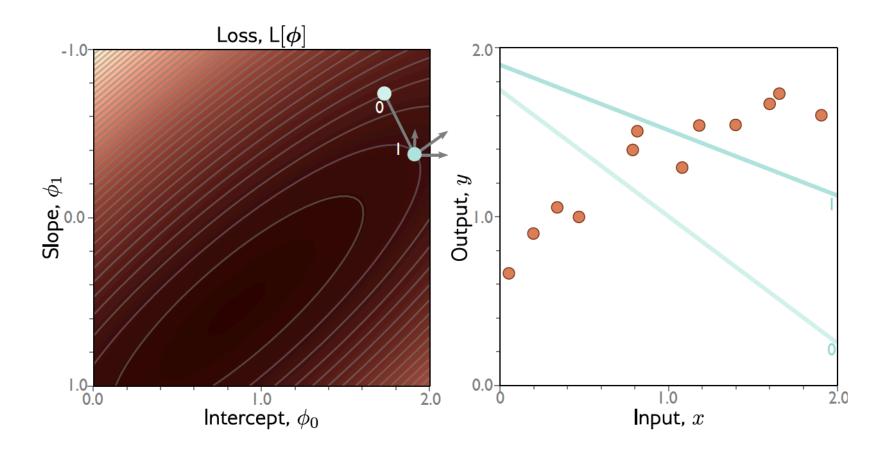




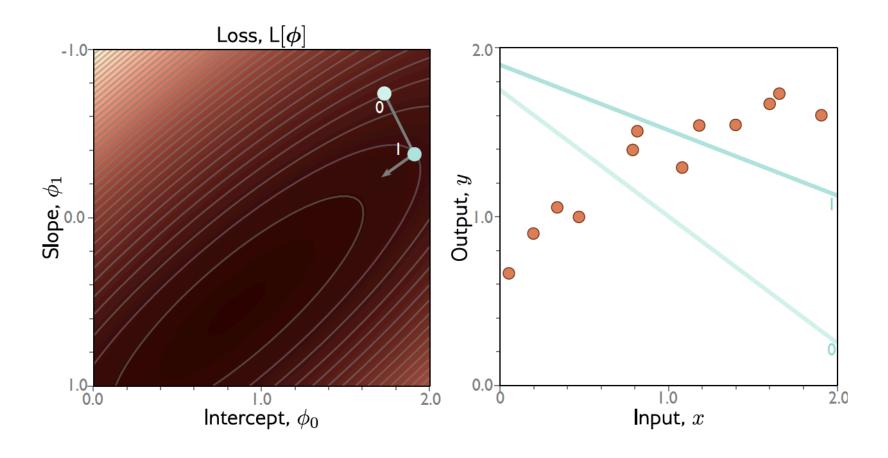
Efeito da Learning Rate



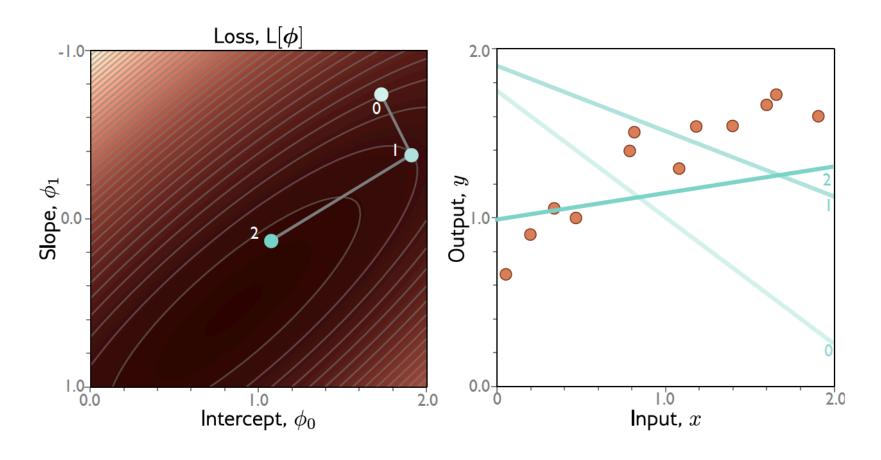
Próximo passo: Cálculo do Gradiente



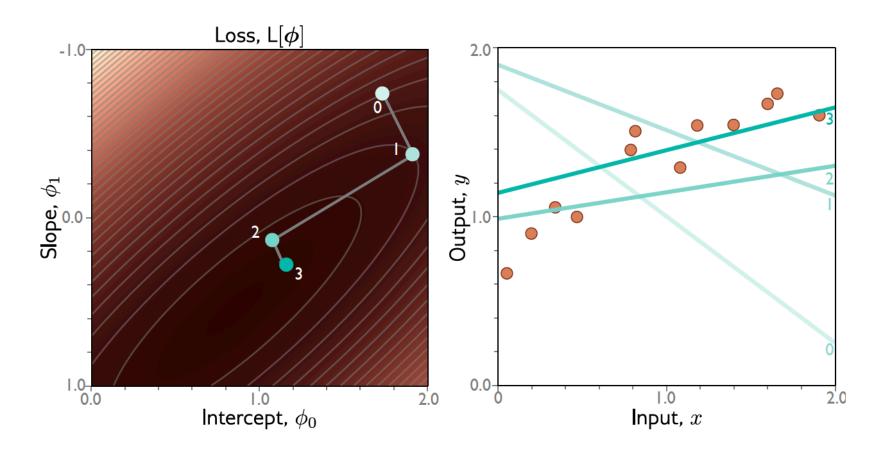
Próximo passo: Gradiente Negativo



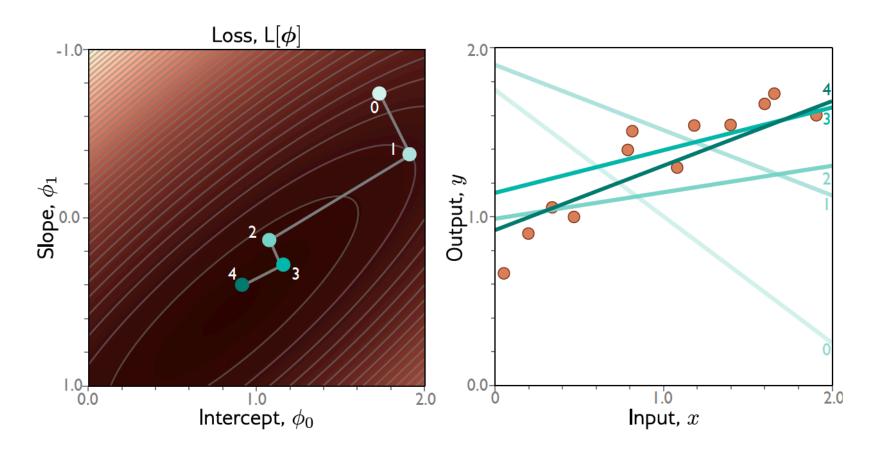
Próximo passo



Próximo passo



Próximo passo



Batch Gradient Descent (BGD)

O BGD é a forma mais pura do algoritmo, utilizando o **conjunto de treinamento completo** (N exemplos) para calcular o gradiente em cada iteração.

• O gradiente calculado é a média de todas as perdas individuais l_i :

$$abla \mathcal{L}(\mathbf{w}) = rac{1}{N} \sum_{i=1}^{N}
abla l_i(\mathbf{w})$$

- **Vantagem:** O gradiente é exato (para o conjunto de treinamento), resultando em convergência estável e suave.
- **Desvantagem:** É computacionalmente caro, pois requer a passagem (forward/backward) por todos os dados em cada passo de atualização.

```
import numpy as np

# Função simples: para d=2, temos f(w_1,w_2) = w_1*w_1 + w_2*w_2
def f(w):
    return np.sum(w*w)

# Gradiente (deriavada) da função
def grad(w):
    return 2*w
```

```
In [33]: def gradient_descent(func, grad_func,
                               w_init, n_epochs=100,
                                lr=0.001, verbose=0):
              i = 0
              w = w_init
              while i < n_epochs:</pre>
                  # conduct gradient update step
                  delta_w = -lr * grad_func(w)
                  w = w + delta_w
                  if verbose > 0:
                      print(f"f = {func(w)};\tw: {w}")
                  i += 1
              return w
```

```
In [34]: # Ponto de início
w_init = np.array([10,10])
# Learning rate
lr = 0.01
# Aplica gradient descent
w_opt = gradient_descent(
    f, grad, w_init, n_epochs=10,
    lr=lr, verbose=1)

f = 192.080000000000004; w: [9.8 9.8]
f = 184.47363200000004; w: [9.604 9.604]
f = 177.1684761728; w: [9.41192 9.41192]
f = 170.15260451635714; w: [9.2236816]
```

f = 163.41456137750941; w: [9.03920797 9.03920797]
f = 156.94334474696007; w: [8.85842381 8.85842381]
f = 150.72838829498042; w: [8.68125533 8.68125533]
f = 144.75954411849915; w: [8.50763023 8.50763023]
f = 139.0270661714066; w: [8.33747762 8.33747762]
f = 133.5215943510189; w: [8.17072807 8.17072807]

Stochastic Gradient Descent (SGD)

O SGD modifica o BGD calculando o gradiente com base em apenas um único exemplo de treinamento ($|\mathcal{S}|=1$).

• O gradiente $\nabla l_i(\mathbf{w})$ é calculado para um exemplo i amostrado aleatoriamente:

$$\mathbf{w}_{t+1} = \mathbf{w}_t - \eta
abla l_i(\mathbf{w}_t)$$

- Vantagem: É muito mais rápido, pois a complexidade por atualização não cresce com N. O ruído adicionado pode ajudar a escapar de mínimos locais e pontos de sela.
- Desvantagem: O gradiente é ruidoso (alta variância). A convergência é ruidosa e instável.

Taxa de Aprendizado (Learning Rate): Em SGD, é crucial diminuir η ao longo do tempo (schedule), pois o ruído inerente impede a convergência tradicional.

Mini-Batch Gradient Descent (M-BGD)

O M-BGD (ou simplesmente SGD) é o padrão moderno, utilizando um subconjunto $\mathcal B$ de M exemplos (1 < M < N).

- Mini-Batch: Um pequeno grupo de amostras, geralmente com tamanho $M\in$ (potências de 2 são comuns).
- O gradiente é calculado como a média das perdas no mini-batch:

$$abla \mathcal{L}_{\mathcal{B}}(\mathbf{w}) = rac{1}{M} \sum_{i \in \mathcal{B}}
abla l_i(\mathbf{w})$$

Benefício do M-BGD: M-BGD equilibra a estabilidade do BGD (estimativa menos ruidosa que SGD puro) com a eficiência do SGD (não precisa processar todos os dados). O paralelismo de hardware (GPUs) é otimizado para o processamento em lotes.

Gradient Descent: Resumo dos Algoritmos

Método	Tamanho do Batch (M)	Freq. de Atualização	Custo Computacional
BGD	N (Total de Dados)	Baixa (1/Epoch)	Alto
SGD	1	Alta (1/Exemplo)	Baixo
M-BGD	1 < M < N	Média (1/Mini-Batch)	Médio

O Desafio dos Gradientes em Redes Neurais

Uma rede neural profunda é uma composição massiva de funções (layers ou "gates").

$$\mathcal{L}(\mathbf{x};oldsymbol{\phi}) = \mathcal{L} \circ f^{(L)} \circ \sigma^{(L-1)} \circ \cdots \circ \sigma^{(1)} \circ f^{(0)}(\mathbf{x})$$

- O Problema: Precisamos calcular $\nabla \mathcal{L}(\phi)$ (o gradiente da perda em relação a cada parâmetro $\mathbf{W}^{(l)}$ e $\mathbf{b}^{(l)}$ em todas as camadas l).
- Calcular essas derivadas diretamente é inviável, pois resultaria em expressões extremamente longas e redundantes.

Solução: O algoritmo **Back-Propagation (BP)**. BP utiliza a regra da cadeia para calcular o gradiente de forma eficiente, reutilizando cálculos parciais em uma passagem reversa (backward pass) pela rede.

Leita também: https://xnought.github.io/backprop-explainer/

A Regra da Cadeia (Chain Rule) Revisitada

O BP é fundamentado na Regra da Cadeia do cálculo diferencial.

1. Caso Simples (Escalar): Se z=f(y) e y=g(x), a derivada de z em relação a x é o produto das derivadas locais:

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

2. Caso Multidimensional (Jacobianos): Se $\mathbf{y}=g(\mathbf{x})$ (mapeamento de $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^l$) e $\mathbf{z}=f(\mathbf{y})$ (mapeamento de $\mathbb{R}^l \to \mathbb{R}^m$), a derivada é o produto das matrizes Jacobianas (matrizes de derivadas parciais):

$$J_{f \circ g}(\mathbf{x}) = J_f(g(\mathbf{x}))J_g(\mathbf{x})$$

• Em DL, a perda $\mathcal L$ (escalar) depende dos parâmetros $\mathbf W$ (matriz), o que torna a notação mais conveniente usando vetores de gradientes.

Backpropagation: O Forward Pass (Ativações)

Antes de calcular os gradientes, precisamos executar o **Forward Pass** (Passagem para Frente). O Forward Pass calcula as ativações de cada camada, que serão usadas posteriormente no Backward Pass para calcular os gradientes.

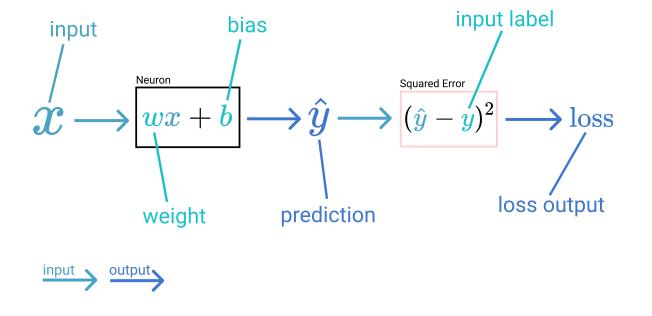
Notação:

- $\mathbf{x}^{(l)}$: Vetor de ativações da camada l.
- $\mathbf{s}^{(l)}$: Vetor de pré-ativações da camada l (somas antes da função σ).
- $\mathbf{W}^{(l)}, \mathbf{b}^{(l)}$: Parâmetros (pesos e vieses) da camada l.
- σ : Função de ativação (e.g., ReLU, Tanh).

Cálculos Iterativos:

$$\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{x}$$
 (Input) $\mathbf{s}^{(l)} = \mathbf{W}^{(l)}\mathbf{x}^{(l-1)} + \mathbf{b}^{(l)}$ (soma ponderada) $\mathbf{x}^{(l)} = \sigma(\mathbf{s}^{(l)})$ (ativação)

• Requisito: Todas as pré-ativações $\mathbf{s}^{(l)}$ e ativações $\mathbf{x}^{(l)}$ devem ser armazenadas na memória (trade-off de memória).



$$2.1 \longrightarrow (1)(2.1) + (0) \longrightarrow 2.1 \longrightarrow (2.1-4)^2 \longrightarrow 3.61$$

Forward Pass. Fonte: Backpropagation Explainer.

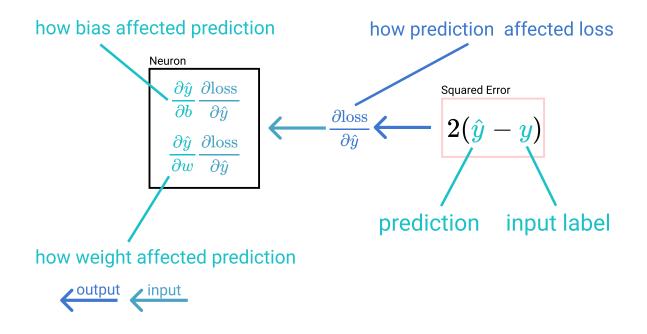
Backpropagation: O Backward Pass

O Backward Pass calcula os gradientes $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{w}^{(l)}}$ e $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{b}^{(l)}}$ trabalhando de **trás para frente** (da camada L para a camada 1), utilizando a Regra da Cadeia.

Passo Inicial (Camada de Saída L): Gradiente da Perda ${\cal L}$

- 1. **Cálculo** $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{x}^{(L)}}$: Calcule o gradiente da perda \mathcal{L} em relação à saída da rede $\mathbf{x}^{(L)}$ (depende diretamente da função de perda escolhida).
- 2. Cálculo $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{s}^{(L)}}$ (Erro de Saída): Propague este gradiente através da função de ativação σ da camada L:
 - Isto é um produto pontual (elemento a elemento, \odot) entre o gradiente da camada seguinte e a derivada local da função de ativação σ' .

$$rac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{s}^{(L)}} = rac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{x}^{(L)}} \odot \sigma'(\mathbf{s}^{(L)})$$



Backward Pass. Fonte: Backpropagation Explainer.

$$(2.1)(-3.8) \leftarrow -3.8 \leftarrow 2(2.1-4)$$

Backward Pass. Fonte: Backpropagation Explainer.

Calculamos os gradientes:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{w}} = -7.68$$
 $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{b}} = -3.8$

Atualizamos os parâmetros (considere a learning rate $\eta=0.01$):

$$w := w - \eta \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{w}} = (1) - (0.01) \cdot (-7.68) = 1.0798$$

$$b := b - \eta \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{b}} = (0) - (0.01) \cdot (-3.8) = 0.038$$

Com os novos parâmetros, temos um loss menor:

$$\mathcal{L} = ((1.0798)(2.1) + 0.038) - 4)^2 = 2.87$$

Backward Pass: Propagação do Erro $(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{x}^{(l-1)}})$

O erro (gradiente da perda) é propagado de volta da pré-ativação $\mathbf{s}^{(l)}$ para a ativação da camada anterior $\mathbf{x}^{(l-1)}$.

- Isto é realizado através da multiplicação pelo transposto ($\mathbf{W}^{(l)T}$) da matriz de pesos $\mathbf{W}^{(l)}$.
 - Este cálculo informa como uma mudança na camada anterior $\mathbf{x}^{(l-1)}$ afeta a perda \mathcal{L} através das conexões em $\mathbf{W}^{(l)}$.

Fórmula de Propagação (Gradients w.r.t. Activations):

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{x}^{(l-1)}} = \left(\mathbf{W}^{(l)}\right)^T \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{s}^{(l)}}$$

Continuação: Após calcular $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{x}^{(l-1)}}$, a Regra da Cadeia é aplicada novamente para obter $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{s}^{(l-1)}}$ e assim sucessivamente.

Backward Pass: Gradientes dos Parâmetros

Uma vez que o vetor de erro $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{s}^{(l)}}$ (o "erro" da camada l) é conhecido, o cálculo dos gradientes dos parâmetros $\mathbf{W}^{(l)}$ e $\mathbf{b}^{(l)}$ é direto e local.

1. Gradiente dos Pesos ($\mathbf{W}^{(l)}$): A derivada da perda em relação ao peso $\mathbf{W}^{(l)}_{i,j}$ é o produto do erro $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{s}_i^{(l)}}$ pela ativação da camada anterior $\mathbf{x}_j^{(l-1)}$.

$$rac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{W}^{(l)}} = rac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{s}^{(l)}} \Big(\mathbf{x}^{(l-1)}\Big)^T$$

2. Gradiente dos Vieses ($\mathbf{b}^{(l)}$): O gradiente do viés é simplesmente o erro da camada:

$$rac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{b}^{(l)}} = rac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{s}^{(l)}}$$

Frameworks Modernos: Diferenciação Algorítmica

Felizmente, não precisamos implementar o Backward Pass manualmente em cada projeto.

- Frameworks de Deep Learning (PyTorch, TensorFlow) utilizam Diferenciação
 Algorítmica (Algorithmic Differentiation) para calcular gradientes automaticamente.
- Cada componente (função linear, ReLU, perda) sabe como calcular suas próprias derivadas locais.
- O framework constrói o grafo computacional e usa a regra da cadeia para compilar o Backward Pass, garantindo eficiência máxima (muitas vezes duas vezes mais caro que o Forward Pass).

```
import torch.optim as optim
# Definição do modelo e perda (omissos)
# model = ...
\# loss = ...
# 1. Zera gradientes (evita acumulação)
optimizer.zero grad()
# 2. Forward Pass
predictions = model(inputs)
loss_value = criterion(predictions, targets)
# 3. Backward Pass (Cálculo Automático)
loss value backward() # Computa dL/dW para todos os W
# 4. Atualização (Gradient Descent)
optimizer.step() # w \leftarrow w - \eta * dL/dw
```

```
import torch
import torch.nn as nn

torch.manual_seed(1)
w = torch.empty(2, 3)
nn.init.xavier_normal_(w)
print(w)

tensor([[ 0.4183,  0.1688,  0.0390],
```

[0.3930, -0.2858, -0.1051]

```
In [41]: w = torch.tensor(1.0, requires_grad=True)
b = torch.tensor(0.5, requires_grad=True)

x = torch.tensor([1.4])
y = torch.tensor([2.1])
z = torch.add(torch.mul(w, x), b)

loss = (y-z).pow(2).sum() # Erro Quadrático
loss.backward()

print('dL/dw : ', w.grad)
print('dL/db : ', b.grad)

print(2 * x * ((w * x + b) - y)) # Computando dL/dw

dL/dw : tensor(-0.5600)
```

dL/db: tensor(-0.4000)

tensor([-0.5600], grad_fn=<MulBackward0>)

Otimizadores

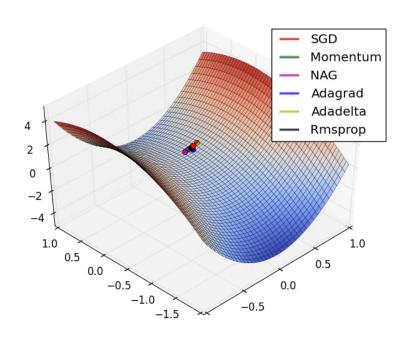
Otimizador mais utilizado é o Adam (Adaptive moment estimation):

$$m_t = eta_1 m_{t-1} + (1-eta_1)
abla_{ heta} \mathcal{L}$$

$$v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2)(\nabla_{\theta} \mathcal{L})^2$$

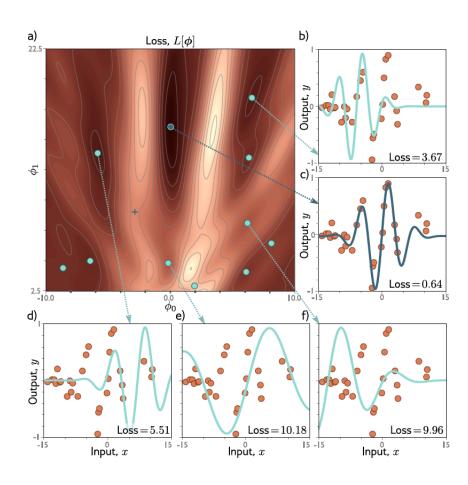
$$\hat{m}_t = rac{m_t}{1-eta_1^t}, \quad \hat{v}_t = rac{v_t}{1-eta_2^t}$$

$$heta_{t+1} = heta_t - \eta rac{\hat{m}_t}{\sqrt{\hat{v}_t} + \epsilon}$$



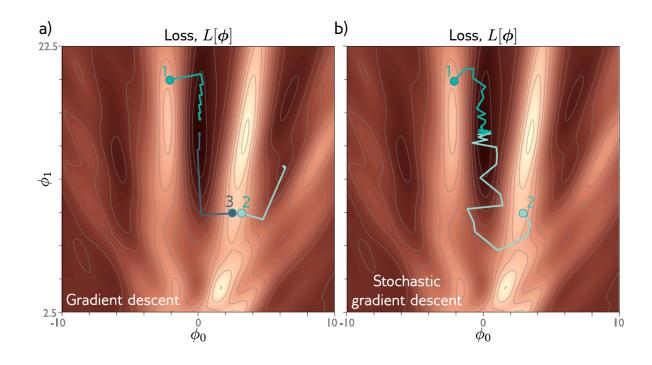
Otimizadores em Deep Learning. Fonte: Analytics Vidhya.

Landscape da função de loss



Mínimos locais e globais. Fonte: Simon Prince (Understanding Deep Learning).

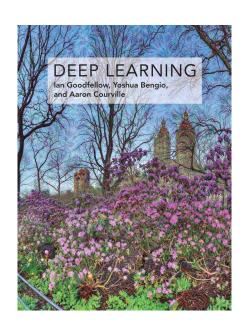
Otimização por Gradiente Descendente



GD versus SGD. Fonte: Simon Prince (Understanding Deep Learning).

Resumo

- Treinamento é a busca por $\operatorname{argmin}[\mathcal{L}(oldsymbol{\phi})].$
- Gradient Descent usa o oposto do gradiente para dar passos iterativos em direção ao mínimo.
- Mini-Batch Gradient Descent (M-BGD) é o padrão (e o mais robusto).
- Equilibra a baixa variância do BGD e a alta velocidade do SGD puro, além de se beneficiar do paralelismo da GPU.
- Backpropagation é o método eficiente para calcular os gradientes de uma composição complexa de funções (rede neural).
- Otimizadores Adaptativos: Extensões do SGD, como Momentum e Adam, ajustam a direção e/ou o tamanho do passo para acelerar a convergência e navegar melhor em paisagens de perda complexas.
- Leitura Recomendada: Understanding Optimization in ML with Gradient Descent & implement SGD Regressor from scratch



Leitura Recomendada: Capítulo 8.

Perguntas e Discussão

- O Mini-Batch Gradient Descent (M-BGD) é o padrão atual. Discuta as razões pelas quais o M-BGD (e não o Batch Gradient Descent puro) se tornou o método preferido, considerando a eficiência computacional em arquiteturas modernas (GPUs) e as propriedades de convergência.
- Funções de custo em Deep Learning são tipicamente não-convexas. A literatura sugere que, para redes profundas e largas, mínimos locais com alto custo são raros. Contudo, o M-BGD introduz ruído que pode ajudar a escapar de mínimos locais.
 Como a natureza ruidosa do SGD se manifesta na trajetória de otimização e por que isso é crucial para evitar pontos de sela (saddle points) em espaços de alta dimensão?
- Backpropagation (BP) é essencial porque evita o cálculo redundante de gradientes via regra da cadeia. O que exatamente precisa ser armazenado durante o Forward Pass para que o Backward Pass funcione?
- O otimizador Adam (Adaptive moment estimation) combina ideias do Momentum e do AdaGrad. Explique o papel da normalização (escalonamento pelo quadrado da média dos gradientes) no Adam e como isso ajuda a equilibrar as taxas de atualização entre diferentes camadas ou parâmetros do modelo.