Visão Computacional

Redes Neurais para Classificação de imagens

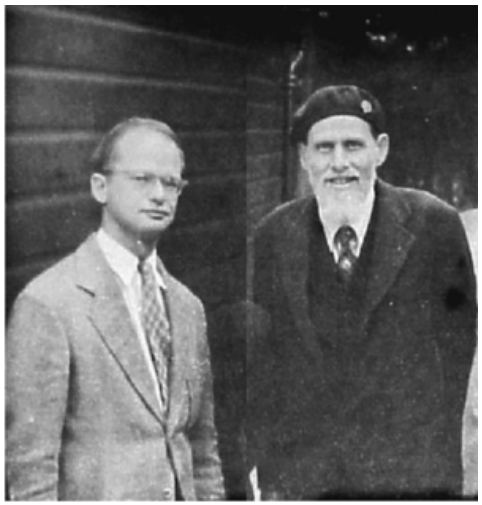
Prof. Dr. Denis Mayr Lima Martins

Pontifícia Universidade Católica de Campinas

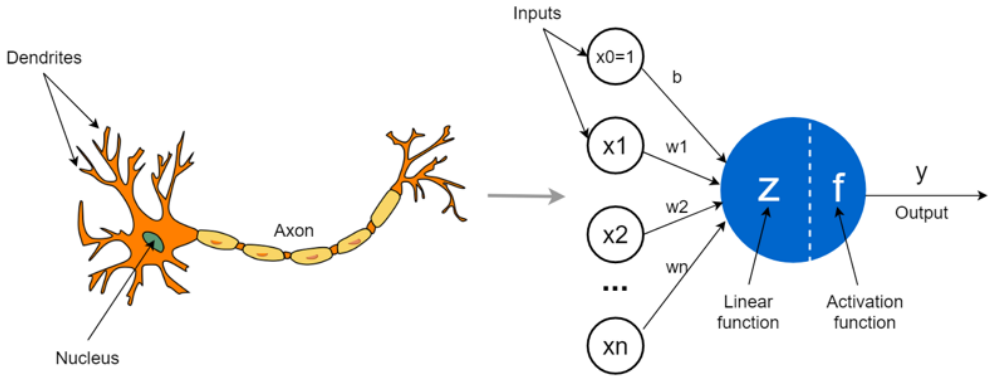
Objetivos de Aprendizagem

- Compreender a estrutura e funcionamento do perceptron clássico, incluindo sua relação com a função logística.
- Analisar o Multi-Layer Perceptron (MLP) como extensão do perceptron, destacando camadas ocultas, funções de ativação não-lineares e topologia geral.
- Descrever o algoritmo de treinamento baseado em *back-propagation* e a otimização de pesos via gradiente descendente.
- Compreender estratégias de validação cruzada (k-fold) para avaliação robusta de modelos.
- Discutir os conceitos de viés e variância, suas implicações na generalização e estratégias de mitigação.
- Entender métodos de regularização (L1/L2, dropout) e suas aplicações práticas em redes neurais.

Neurônio Artificial



Warren McCulloch e Walter Pitts. Criadores do primeiro modelo de neurônio artificial (1943). Fonte: History of Information.

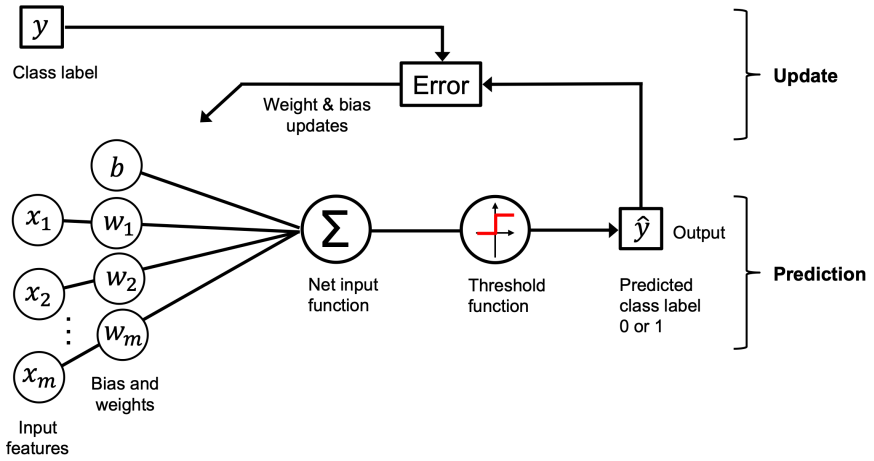


Neurônio Artificial. Fonte: Tahseen Mulla.

Perceptron

- Primeira máquina capaz de aprender a partir de dados.
- Consiste em um conjunto de pesos $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^m$ associados às m características (*features*) de entrada $\mathbf{x}$
- Computa uma saída $z = \mathbf{w}^T\mathbf{x} + b$, onde b é um viés escalar.
- Aplica uma função de ativação σ que transforma z.

$$\sigma(z) = \begin{cases} 0 & z \leq 0 \\ 1 & z > 0 \end{cases}$$

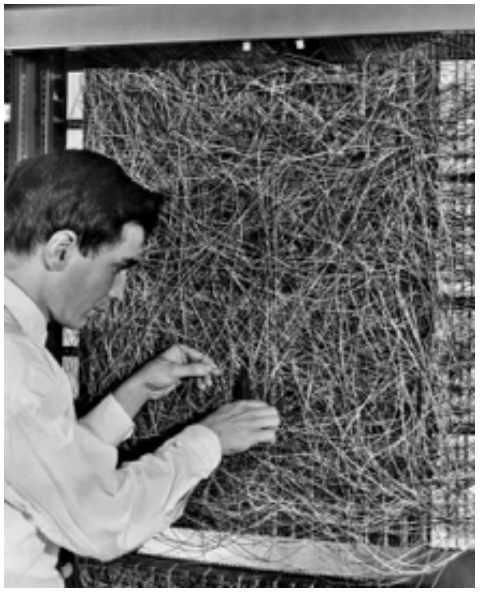


Visão Geral do Perceptron. Image Source: Sebastian Raschka.

Perceptron Learning Rule

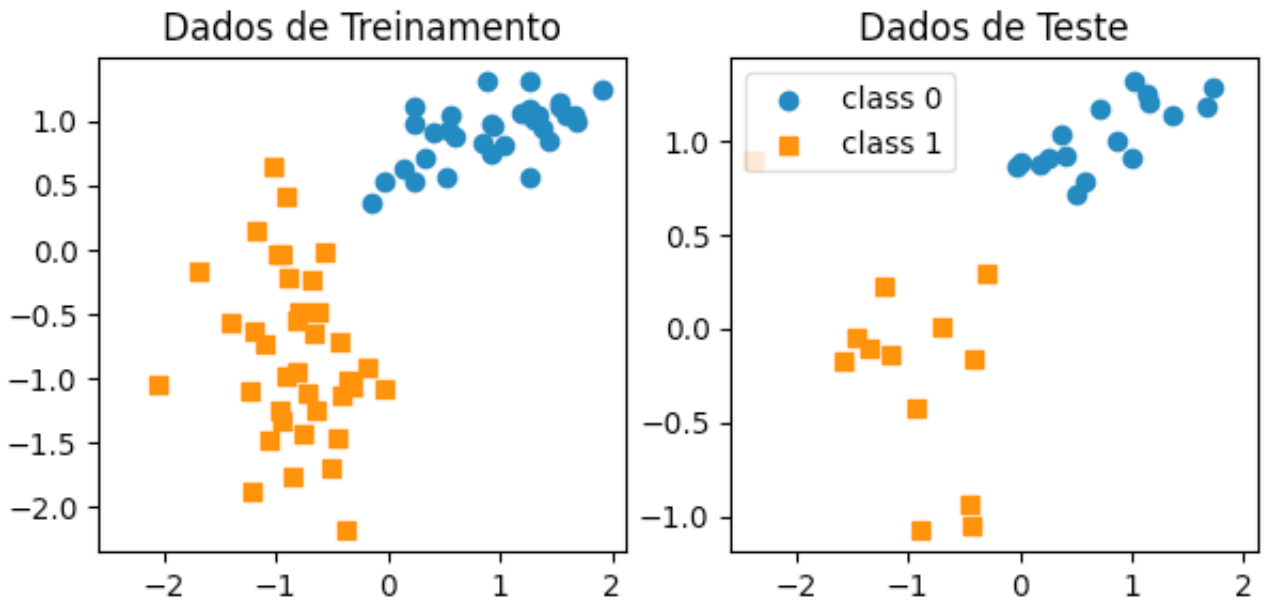
- Dado um exemplo $(\mathbf{x}, y)$, onde $y \in \{0, 1\}$ é o rótulo verdadeiro, calcula-se a predição $\hat{y} = f(z)$.
- Se a predição estiver incorreta ($e = y - \hat{y} \neq 0$), os pesos e viés são ajustados na direção que reduz o erro.
- $\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} + \eta\, e\, \mathbf{x}$ e $b \leftarrow b + \eta\, e$, onde $\eta > 0$ é a taxa de aprendizado.

```
Inicializa w ← 0, b ← 0
para cada época até convergência:
    para cada (x, d) em D:
        z   ← w·x + b
        ŷ   ← (z ≥ 0) ? 1 : 0          // passo
unitário
        se ŷ ≠ d então                  // erro de
classificação
            w ← w + η(d − ŷ)x
            b ← b + η(d − ŷ)
        fim se
    fim para
fim para
```



Frank Rosenblatt em 1960 conectando o Mark 1 Perceptron. Fonte: Perceptron Demo.

Perceptron em Pytorch



In [5]:

```
def set_device(on_gpu=True):
    has_mps = torch.backends.mps.is_available()
    has_cuda = torch.cuda.is_available()
    return "mps" if (has_mps and on_gpu) \
            else "cuda" if (has_cuda and on_gpu) \
            else "cpu"

device = set_device(on_gpu=True)
```

In [6]:

```
class Perceptron():
    def __init__(self, num_features):
        self.num_features = num_features
        self.weights = torch.zeros(
            num_features, 1, dtype=torch.float32, device=device)
        self.bias  = torch.zeros(1, dtype=torch.float32, device=device)
        self.ones  = torch.ones(1, device=device)
        self.zeros = torch.zeros(1, device=device)

    def forward(self, x):
        linear = torch.mm(x, self.weights) + self.bias
        predictions = torch.where(linear > 0., self.ones, self.zeros)
        return predictions

    def backward(self, x, y):
        predictions = self.forward(x)
        errors = y - predictions
        return errors

    def train(self, x, y, epochs):
        for _ in range(epochs):
            for i in range(y.shape[0]):
                errors = self.backward(
                    x[i].reshape(1, self.num_features), y[i]).reshape(-1
                self.weights += (errors * x[i]).reshape(self.num_feature
                self.bias += errors

    def evaluate(self, x, y):
        predictions = self.forward(x).reshape(-1)
        accuracy = torch.sum(predictions == y).float() / y.shape[0]
        return accuracy
```

Treinando o Modelo

In [7]:

```
ppn = Perceptron(num_features=2)

X_train_tensor = torch.tensor(
    X_train,
    dtype=torch.float32,
    device=device)
y_train_tensor = torch.tensor(
    y_train,
    dtype=torch.float32,
    device=device)

ppn.train(X_train_tensor, y_train_tensor, epochs=5)

print('Model parameters:')
print('\tWeights:', ppn.weights.tolist())
print('\tBias: ', ppn.bias.tolist())
```

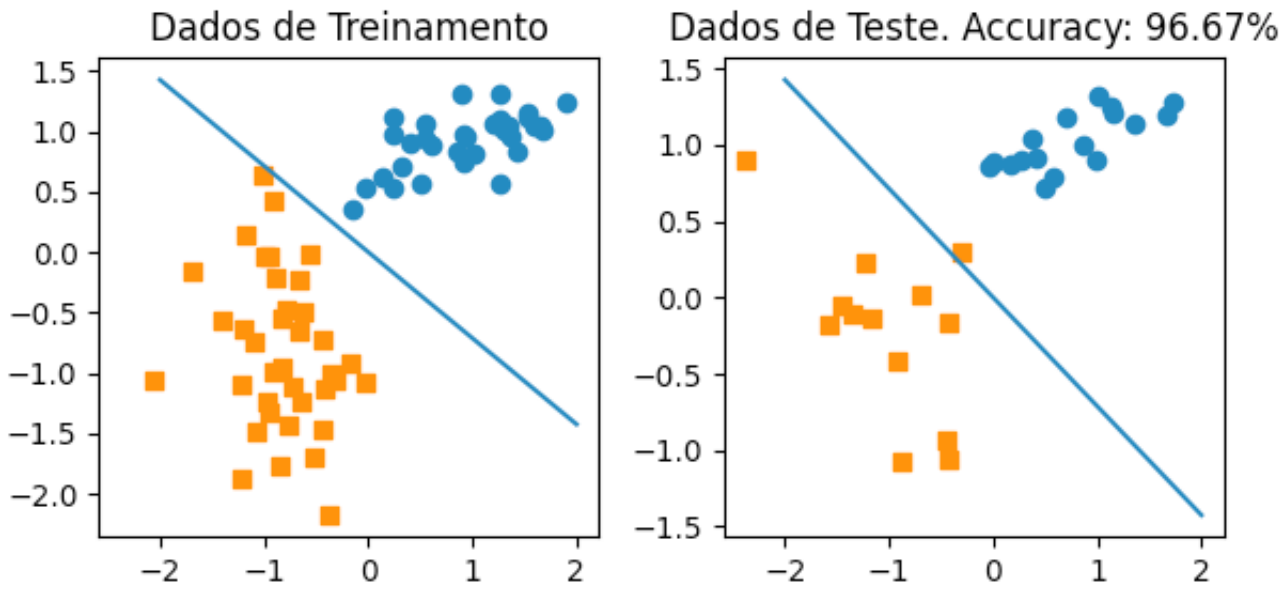
```
Model parameters:
        Weights: [[-1.0376710891723633], [-1.455593466758728]]
        Bias:  [0.0]
```

Avaliando o Modelo nos dados de Teste

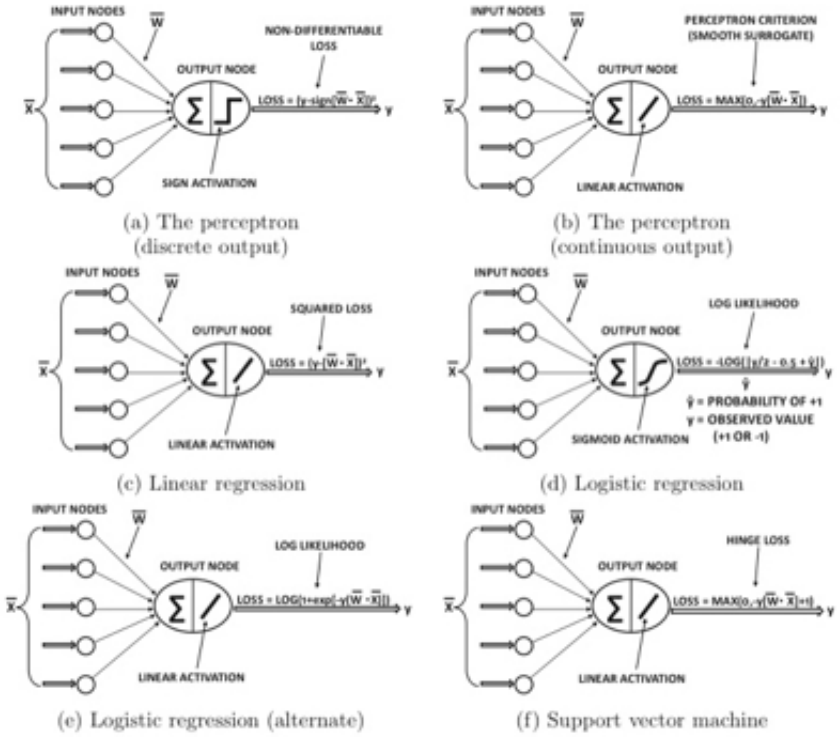
In [8]:
```
X_test_tensor = torch.tensor(
    X_test,
    dtype=torch.float32,
    device=device)
y_test_tensor = torch.tensor(
    y_test,
    dtype=torch.float32,
    device=device)

test_acc = ppn.evaluate(X_test_tensor, y_test_tensor)
print(f'Test set accuracy: {(test_acc*100):.2f}%')
```

```
Test set accuracy: 96.67%
```

Visualizando a Fronteira de Decisão



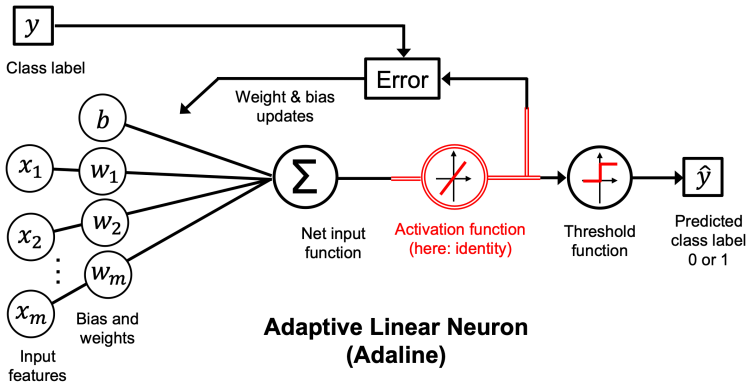
Perceptron é um modelo flexível



Perceptrons em outros modelos. Fonte: AI primer by Trokas.

Adaline: Adaptive Linear Neuron

- Introduzido por Widrow e Hoff em 1960.
- Função de ativação linear σ.
- Função de custo é o MSE $\mathcal{L}(w, b) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (y^i - \sigma(z^i))^2$.
- Perceptron aprimorado: treinamento busca minimizar o MSE em vez de simplesmente corrigir classificações incorretas.
- σ linear permite o gradiente do erro seja calculado de forma contínua.
- σ é convexa, permitindo usar o algoritmo de otimização **gradiente descente**.



Adaline. Image Source: Sebastian Raschka.

Gradiente Descendente

Atualização de parâmetros do modelo utilizando informação do gradiente de uma função de custo (*loss*) $\mathcal{L}(w, b)$: $\nabla(\mathcal{L}(w, b))$.

Ou seja, dar um passo na direção oposta do gradiente.

$$\Delta w = -\eta \times \nabla_w(\mathcal{L}(w, b))$$

$$\Delta b = -\eta \times \nabla_b(\mathcal{L}(w, b))$$

- η: learning rate (tamanho do passo)

Gradiente da função de custo com respeito a w_j e a b:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_j} = -\frac{1}{m} \sum_i (y^i - \sigma(z^i)) x_j^i$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b} = -\frac{1}{m} \sum_i (y^i - \sigma(z^i))$$

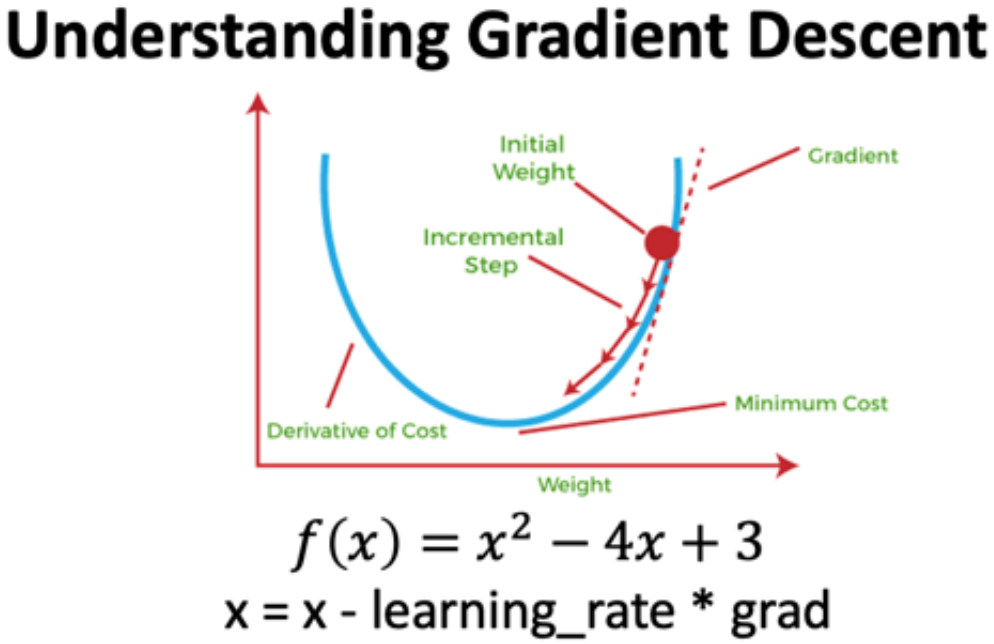
Gradiente Descendente (cont.)

Podemos escrever a atualização de *weights* e *bias* como:

- $\Delta w_j = -\eta(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_j})$
- $\Delta b = -\eta(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b})$

Usamos um algoritmo para computar gradientes com base no conjunto completo de dados de treinamento e atualizar os parâmetros do modelo. Essa atualização se dá realizando um pequeno passo na direção oposta do gradiente da *loss* $\Delta \mathcal{L}(w, b)$.

Gradiente Descendente

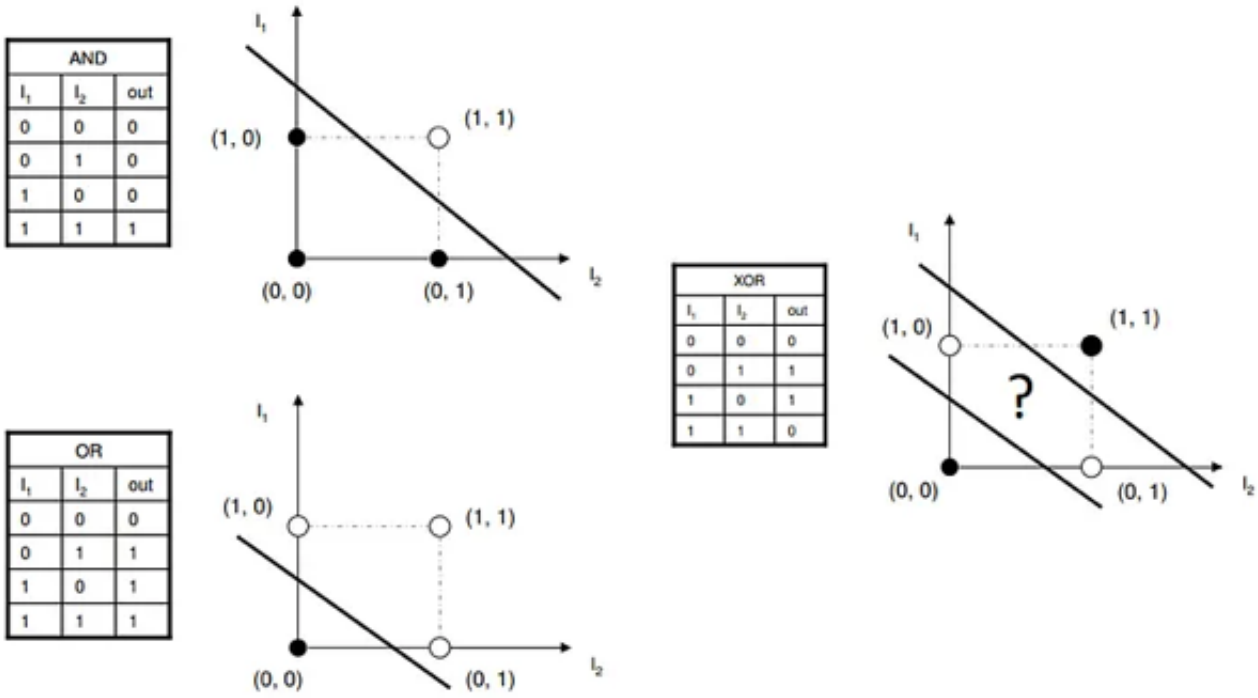


Gradiente Descendente. Fonte: Rany ElHousieny @LinkedIn.

Limitação do Perceptron

Perceptrons podem aprender a representar portas lógicas como AND e OR (como?).

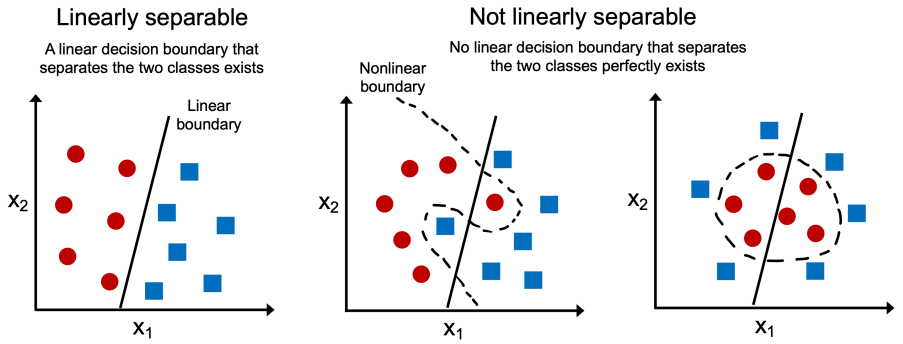
Mas e quanto à porta XOR?



Perceptron e Portas Lógicas. Fonte: Lucas Pereira.

Perceptron: Limitações

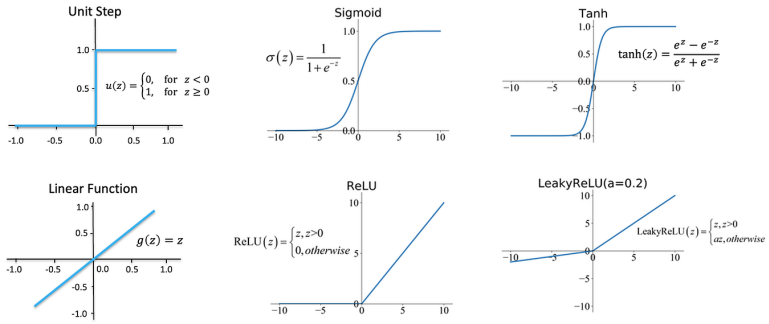
- O modelo unidimensional do Perceptron, focado em regressão ou classificação linear, é fundamentalmente restrito e incapaz de modelar relações de entrada/saída não-lineares. Problemas de classificação que não são linearmente separáveis estão além de sua capacidade
    - Só pode aprender funções lineares.
    - Problemas como a tarefa XOR são impossíveis de resolver.
- Esta limitação motivou a introdução de camadas ocultas e funções de ativação não-lineares
    - Dá origem às redes neurais Multi-Layer Perceptron (MLP).



Limitação do Perceptron. Image Source: Sebastian Raschka.

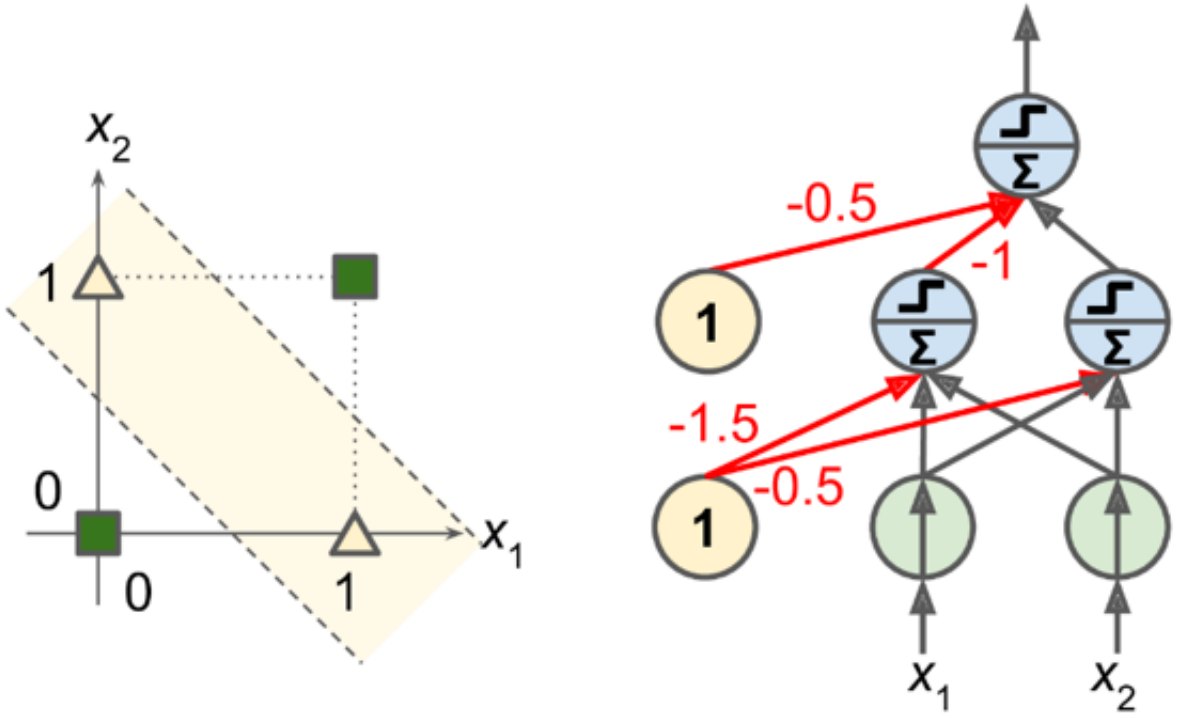
Funções de Ativação (Não-lineares)

- Objetivo é introduzir não-linearidades na saída de um neurônio.
    - Capacidade de modelar relações complexas entre entradas e saídas.
    - Forma múltiplas regiões de decisão.
- A função deve ser diferenciável para permitir o cálculo dos gradientes.
- Deve ser eficiente de calcular.



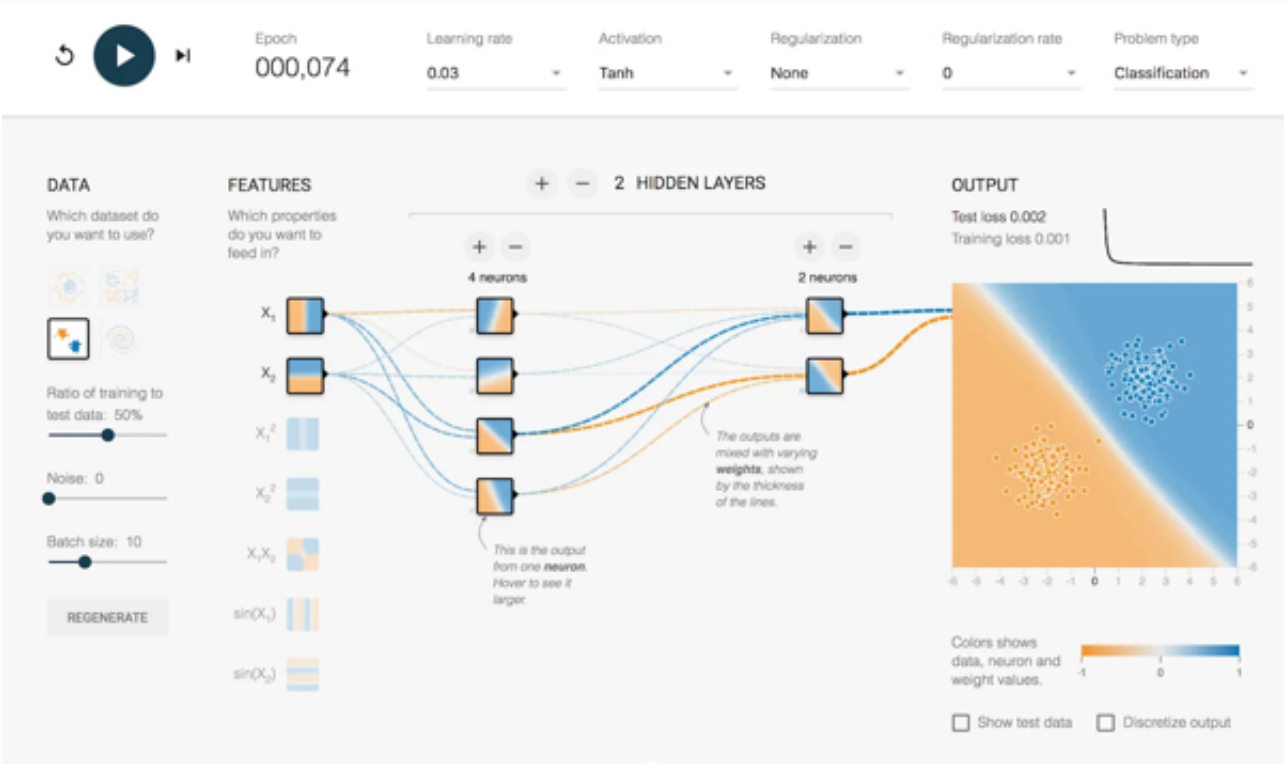
Funções de Ativação. Fonte: Prazan NH.

Redes Neurais: Empilhando Perceptrons



XOR e Perceptron. Fonte: AI primer by Trokas.

MLP: Demo Visual

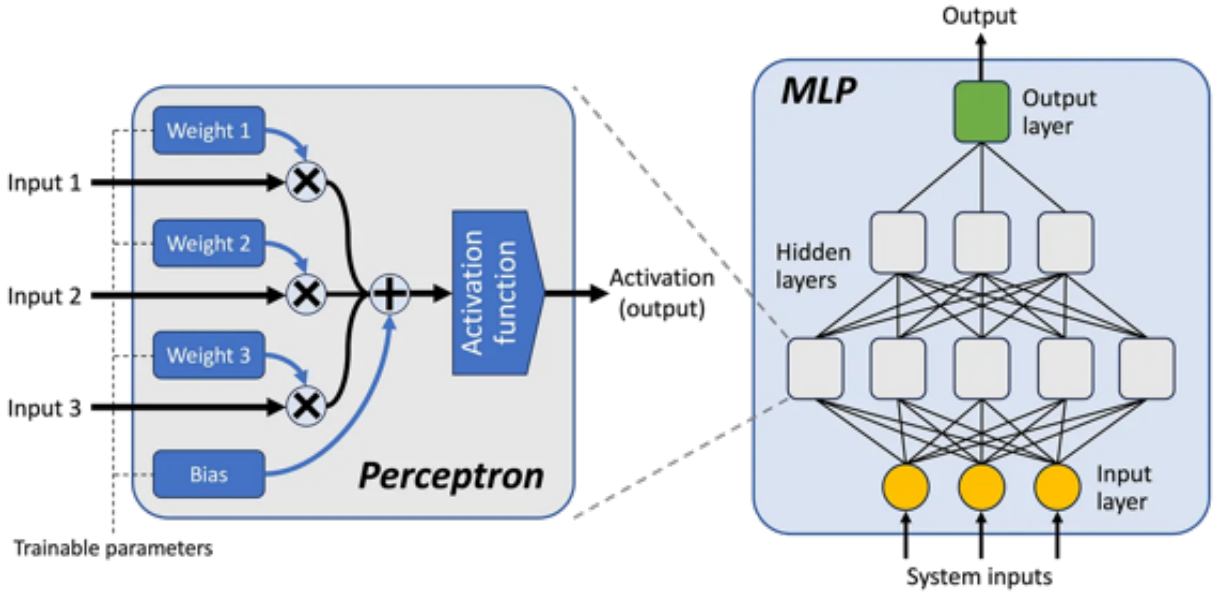


Visualizando Redes Neurais no TensorFlow Playground. Fonte: Tensorflow Playground.

Redes Neurais: Empilhando Perceptrons

- Multilayer Perceptron (MLP)
- Noção de camada (layer): operações parametrizadas sobre tensores.
- Conceito de arquitetura: Camada de entrada, várias camadas escondidas, uma cada de saída.

$$h^{(l)} = \sigma((\mathbf{W}^{(l)})^T \mathbf{x}^{(l)} + b^{(l)})$$



Multilayer Perceptron (MLP). Fonte: Michael Lones.

MLP: Treinamento

O procedimento de treinamento do MLP pode ser resumido em três etapas simples:

1. A partir da camada de entrada, propagamos adiante ("feed-forward") os padrões dos dados de treinamento através da rede para gerar uma saída.
2. Com base na saída da rede, calculamos a perda (*loss*) que queremos minimizar usando uma função de perda que descreveremos mais adiante.
3. Propagamos a *loss* para trás (back-propagation), determinamos sua derivada em relação a cada peso e viés da rede, e atualizamos o modelo.

Por fim, após repetirmos essas três etapas por múltiplas épocas e aprendermos os parâmetros de peso e viés do MLP, usamos a propagação adiante para calcular a saída da rede e aplicamos uma função de limiar (threshold) para obter as classes previstas.

MLP: Feed-forward

Vamos analisar passo a passo a propagação adiante para gerar uma saída a partir dos padrões presentes nos dados de treinamento. Como cada unidade da camada oculta está conectada a todas as unidades das camadas de entrada, primeiro calculamos a unidade de ativação da camada oculta $a_1^{(h)}$ da seguinte forma:

$$z_1^{(h)} = x_1^{(\text{in})} w_{1,1}^{(h)} + x_2^{(\text{in})} w_{1,2}^{(h)} + \ldots + x_m^{(\text{in})} w_{1,m}^{(h)}$$

$$a_1^{(h)} = \sigma(z_1^{(h)})$$

Aqui, $z_1^{(h)}$ é a entrada líquida (*net input*) e $\sigma(\,.\,)$ é a função de ativação, que deve ser diferenciável para permitir o aprendizado dos pesos que conectam os neurônios por meio de uma abordagem baseada em gradiente. Para resolver problemas complexos, como classificação de imagens, precisamos de funções de ativação não lineares no nosso modelo MLP; um exemplo comum é a função sigmoide (logística):

$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

A função sigmoide é uma curva em forma de S que mapeia a entrada líquida z para uma distribuição logística no intervalo de 0 a 1, cruzando o eixo y quando $z = 0$.

MLP: Feed-Forward (cont.)

Escrevemos a ativação em uma forma mais compacta e vetorizada (para evitar loops):

$$z^{(h)} = x^{(\text{in})} W^{(h)T} + b^{(h)}$$

$$a^{(h)} = \sigma(z^{(h)})$$

Aqui, $x^{(\text{in})}$ é o nosso vetor de características de dimensão $1 \times m$.
$W^{(h)}$ é uma matriz de pesos de dimensão $d \times m$, onde d representa o número de

unidades na camada oculta; consequentemente, a matriz transposta $W^{(h)T}$ tem dimensão $m \times d$.
O vetor de viés $b^{(h)}$ contém d unidades de bias (uma para cada nó oculto).

Após a multiplicação matricial-vetorial, obtemos o vetor de entrada líquida $z^{(h)}$ de dimensão $1 \times d$, que será usado para calcular a ativação $a^{(h)} \in \mathbb{R}^{1 \times d}$.

MLP: Feed-Forward (cont.)

Podemos generalizar este cálculo para os n exemplos do conjunto de treinamento:

$$Z^{(h)} = X^{(\text{in})} W^{(h)T} + b^{(h)}$$

Neste caso, $X^{(\text{in})}$ passa a ser uma matriz $n \times m$; a multiplicação matricial resulta em uma matriz de entrada líquida $Z^{(h)}$ de dimensão $n \times d$. Por fim, aplicamos a função de ativação $\sigma(\cdot)$ a cada elemento da matriz de entrada líquida para obter a matriz de ativação $n \times d$ na camada seguinte (aqui, a camada de saída):

$$A^{(h)} = \sigma(Z^{(h)})$$

De maneira análoga, podemos escrever a ativação da camada de saída em forma vetorizada para múltiplos exemplos:

$$Z^{(\text{out})} = A^{(h)} W^{(\text{out})T} + b^{(\text{out})}$$

Aqui multiplicamos a transposta da matriz $t \times d$ $W^{(\text{out})}$ (onde t é o número de unidades de saída) pela matriz $n \times d$ $A^{(h)}$, e somamos o vetor de viés de dimensão t, $b^{(\text{out})}$, obtendo a

matriz $Z^{(\text{out})}$ de dimensão $n \times t$. (As linhas desta matriz representam as saídas para cada exemplo.)

Por fim, aplicamos a função sigmoide para obter o valor contínuo da saída do nosso modelo:

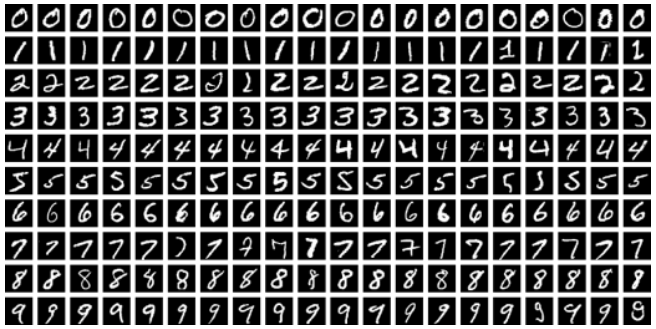
$$A^{(\text{out})} = \sigma(Z^{(\text{out})})$$

Componentes de uma Rede Neural

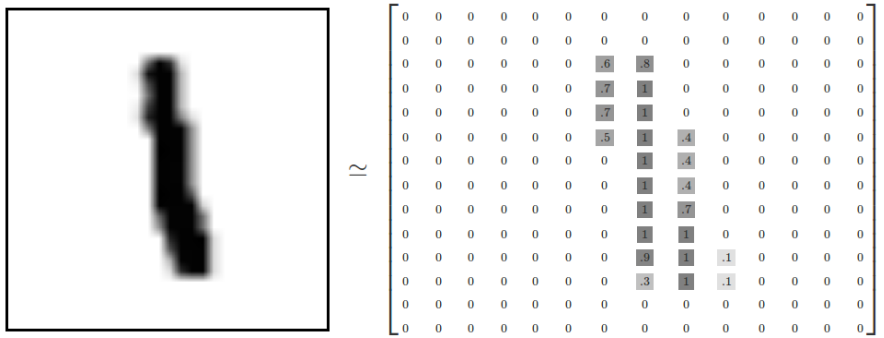
- Arquitetura: Camadas, parâmetros, neurônios e conexões
- Função de ativação
- Função de custo/perda (*loss*)
- Otimizador

MLP para Classificação de Imagens

Vamos construir e treinar uma MLP para classificar imagens de dígitos escritos à mão presentes no dataset *Mixed National Institute of Standards and Technology (MNIST)*, construído por Yann LeCun e colaboradores, publicado em 1998 (Gradient-Based Learning Applied to Document Recognition).



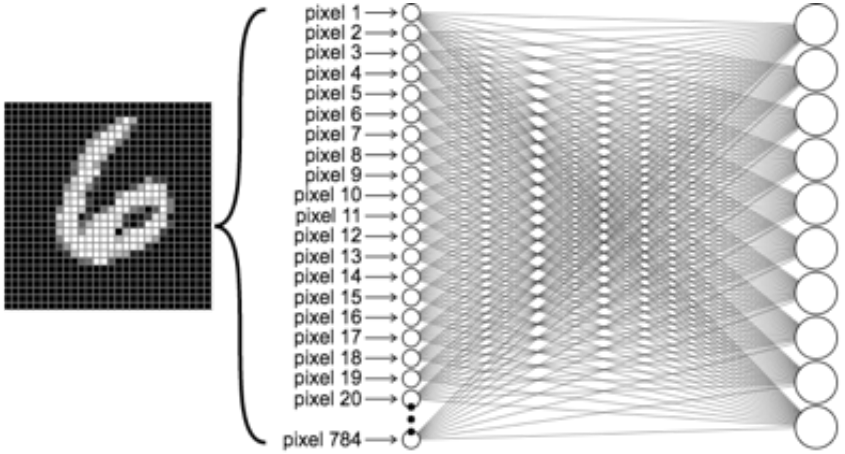
MNIST dataset. Dígitos são imagens de 28x28 pixels (ou seja, 784 dimensões). Fonte: Wikipedia.



Exemplo de dígito 1 no MNIST dataset. Fonte: Tensorflow.

MLP para o MNIST dataset

A MLP que vamos construir vai tomar como entrada os 764 pixels de cada imagem individualmente. Demo: ML4A.

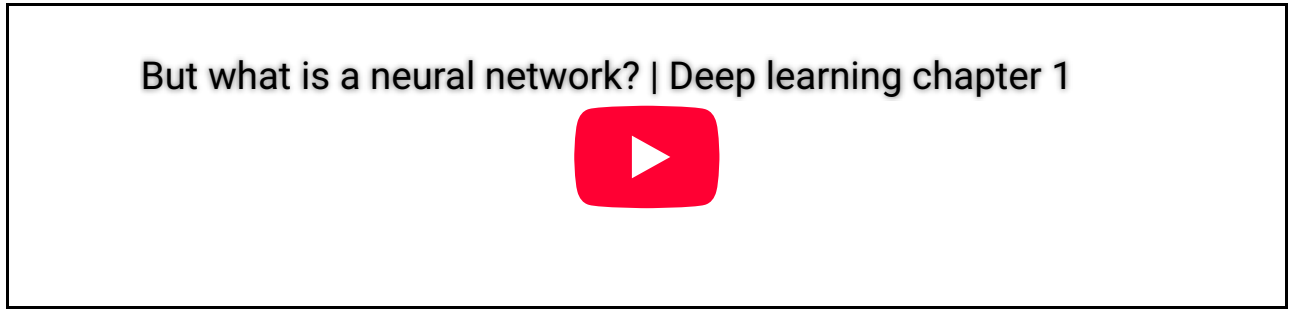


Camada de Entrada da MLP para o MNIST dataset. Dígitos são imagens de 28x28 pixels (ou seja, 784 dimensões). Fonte: ML4A.

MLP MNIST: Tutorial Visual (YouTube)

In [11]:
```
from IPython.display import YouTubeVideo
YouTubeVideo("aircAruvnKk", width=600, height=350)
```

Out[11]:



MLP e MNIST em Pytorch

In [12]:

```
from torchvision import datasets
import torchvision.transforms as transforms
import torch.utils.data as data

# Número de processos para o dataloader
NUM_WORKERS = 0
# Quantas amostras (imagens) por batch
BATCH_SIZE = 128
# Converte dados em tensores
transform = transforms.ToTensor()

# Carrega dados de treino e teste
train_data = datasets.MNIST(root='data', train=True,
    download=True, transform=transform)
test_data = datasets.MNIST(root='data', train=False,
    download=True, transform=transform)
```

In [13]:

```
# Cria dataset de validação
VALIDATION_SIZE = 0.1
n_train_examples = int(len(train_data) * VALIDATION_SIZE)
n_valid_examples = len(train_data) - n_train_examples

train_data, valid_data = data.random_split(
    train_data, [n_train_examples, n_valid_examples])

# Data Loaders
train_loader = torch.utils.data.DataLoader(train_data, shuffle=True,
   batch_size=BATCH_SIZE, num_workers=NUM_WORKERS)
valid_loader = torch.utils.data.DataLoader(valid_data,
   batch_size=BATCH_SIZE, num_workers=NUM_WORKERS)
test_loader = torch.utils.data.DataLoader(test_data,
  batch_size=BATCH_SIZE, num_workers=NUM_WORKERS)
```

Arquitetura da Rede Neural

In [14]:

```
import torch.nn as nn
import torch.nn.functional as F

class MLPNet(nn.Module):
    def __init__(self):
        super(MLPNet, self).__init__()
        self.flatten = nn.Flatten()
        # input layer
        self.fc1 = nn.Linear(28 * 28, 64)
        # linear layer (n_hidden -> hidden_2)
        self.fc2 = nn.Linear(64, 32)
        # linear layer (n_hidden -> 10)
        self.fc3 = nn.Linear(32, 10)

    def forward(self, x):
        x = self.flatten(x)
        x = F.relu(self.fc1(x))
        x = F.relu(self.fc2(x))
        x = self.fc3(x)
        return x
```

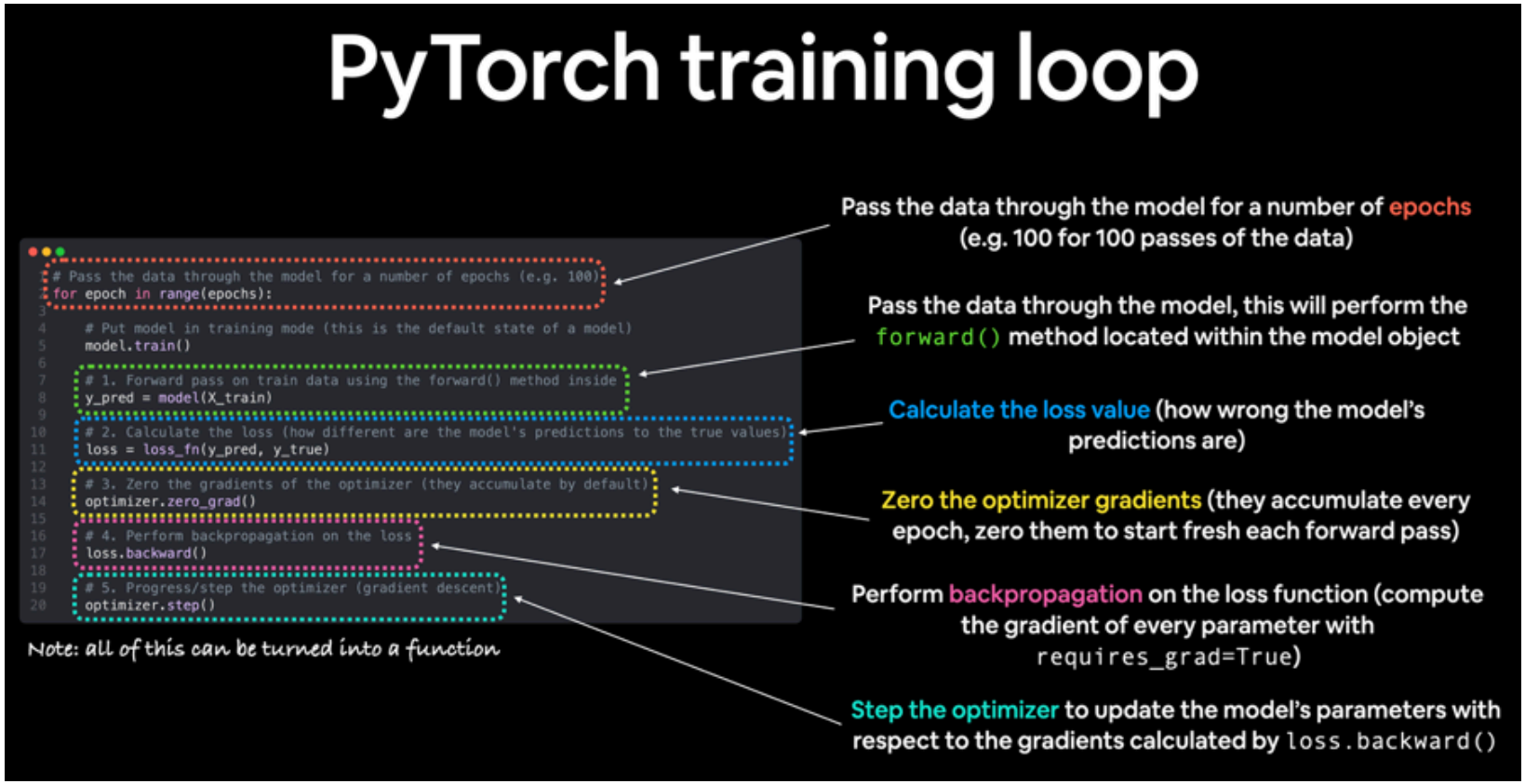
Função de Custo/*Loss* para Classificação

- **Cross-Entropy Loss**: $\mathcal{L}(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = -\sum_{k=1}^{K} y_k \, \log(\hat{y}_k)$
- **Intuição**
    - Mede a divergência entre o vetor de rótulos reais y (ou y_k) e a distribuição predita $\hat{y}$.
    - Penaliza fortemente previsões que atribuem baixa probabilidade ao verdadeiro rótulo.
- **Propriedades importantes**
    - **Não-negatividade**: $\mathcal{L} \geq 0$; zero apenas quando $\hat{y} = y$.
    - **Derivada simples**: facilita a implementação do algoritmo de backpropagation.
- **Quando usar**: Binária ou multiclasse quando as saídas são interpretadas como probabilidades (softmax ou sigmoid).

In [15]:

```
import torch.optim as optim

EPOCHS = 10
device = set_device(on_gpu=True)
model = MLPNet().to(device)
loss_function = nn.CrossEntropyLoss()
optimizer = optim.SGD(model.parameters(), lr=0.02)

num_parameters = sum(p.numel() for p in model.parameters() if p.requires
print(f"Num. Parâmetros no modelo:", num_parameters)
```

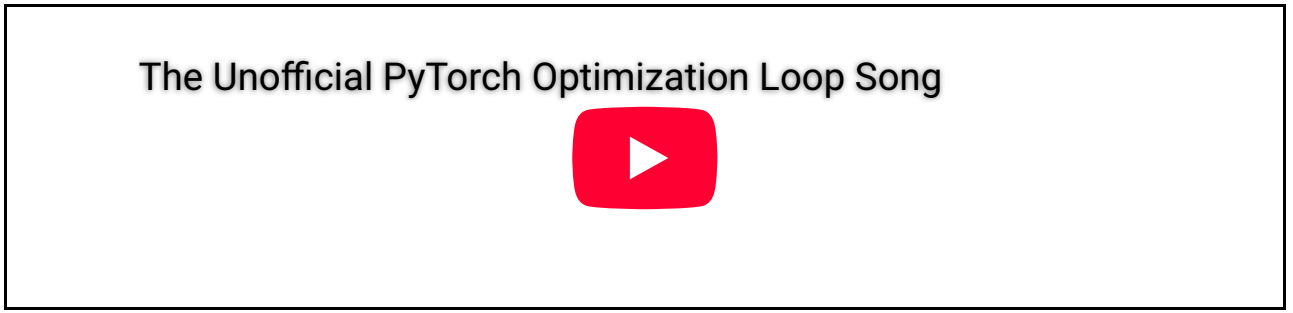
```
Num. Parâmetros no modelo: 52650
```



Pytorch training Loop. Fonte: Daniel Bourke.

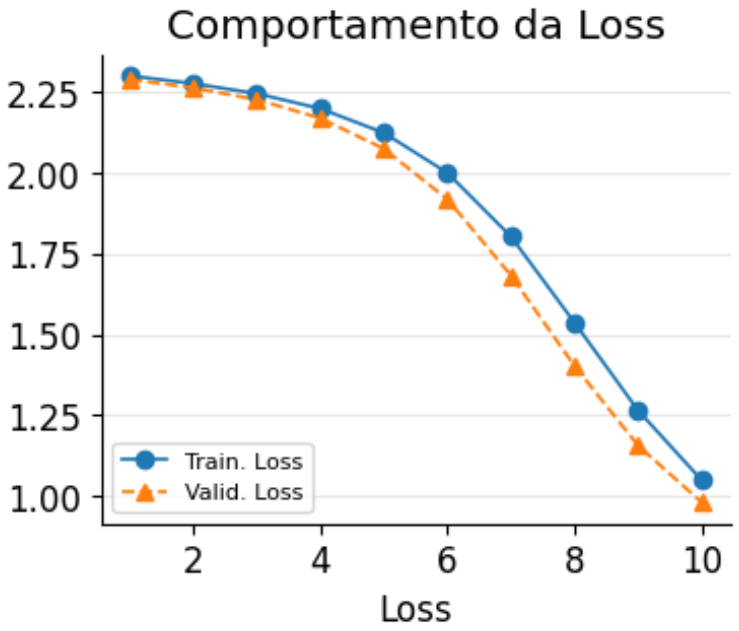
In [16]:
```
from IPython.display import YouTubeVideo
YouTubeVideo("Nutpusq_AFw", width=600, height=350)
```

Out[16]:



In [18]:

```
epoch_ticks = [i+1 for i in range(EPOCHS)]
plt.figure(figsize=(4,3))
plt.plot(epoch_ticks, tr_loss, "-o", label="Train. Loss")
plt.plot(epoch_ticks, val_loss, "--^", label="Valid. Loss")
plt.xlabel('Epoch')
plt.xlabel('Loss')
plt.title("Comportamento da Loss")
plt.legend(loc='lower left', fontsize=8)
plt.show()
```



Testando o Modelo

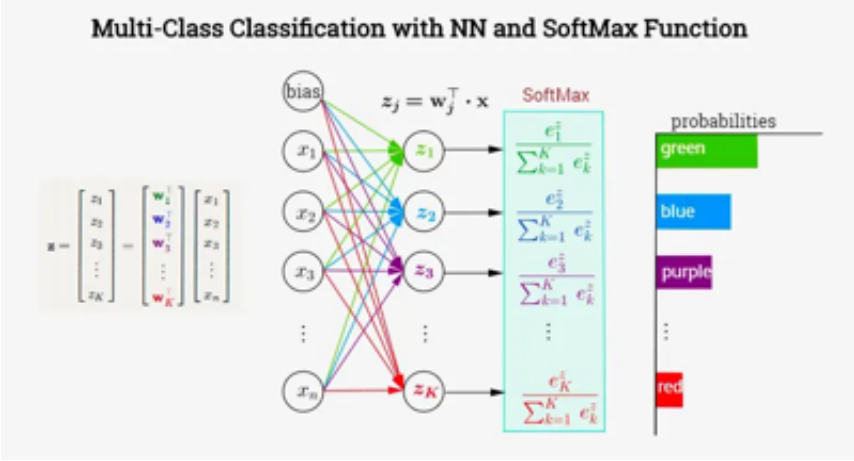
- Avaliar se o modelo **generaliza** bem para dados que não foram vistos pela rede durante o treinamento (*unseen data*).
- **Importante**: usar `model.eval()` para configurar o modelo em *evaluation mode*.

In [19]:

```
def get_predictions(model, iterator, device):
    model.eval()
    images, labels, probs = [], [], []
    with torch.no_grad():
        for (x, y) in iterator:
            x = x.view(-1, 28*28).to(device)
            y = y.to(device)

            y_pred = model(x)
            y_prob = F.softmax(y_pred, dim=-1)

            images.append(x.cpu())
            labels.append(y.cpu())
            probs.append(y_prob.cpu())
    images = torch.cat(images, dim=0)
    labels = torch.cat(labels, dim=0)
    probs = torch.cat(probs, dim=0)

    return images, labels, probs
```

Função de Ativação na Camada de Saída

- Camada de Saída com Softmax: Cabeça de Classificação (*Classification Head*)
- **Propósito principal**: Converter vetores de *logits* (saída da última camada escondida) $z \in \mathbb{R}^K$ em uma distribuição de probabilidade sobre K classes.
- **Definição matemática**: $\sigma(z)_k = \frac{\exp(z_k)}{\sum_{j=1}^{K} \exp(z_j)}, \qquad k = 1, \ldots, K$
- Cada componente fica no intervalo $(0, 1)$ e a soma totaliza 1.
- **Derivada simples**: $\frac{\partial \sigma(z)_i}{\partial z_j} = \sigma(z)_i(\delta_{ij} - \sigma(z)_j)$, onde δ_{ij} é a função indicadora.
- Junto com a loss **Cross-Entropy**, forma o padrão ouro "Softmax + Cross-Entropy".



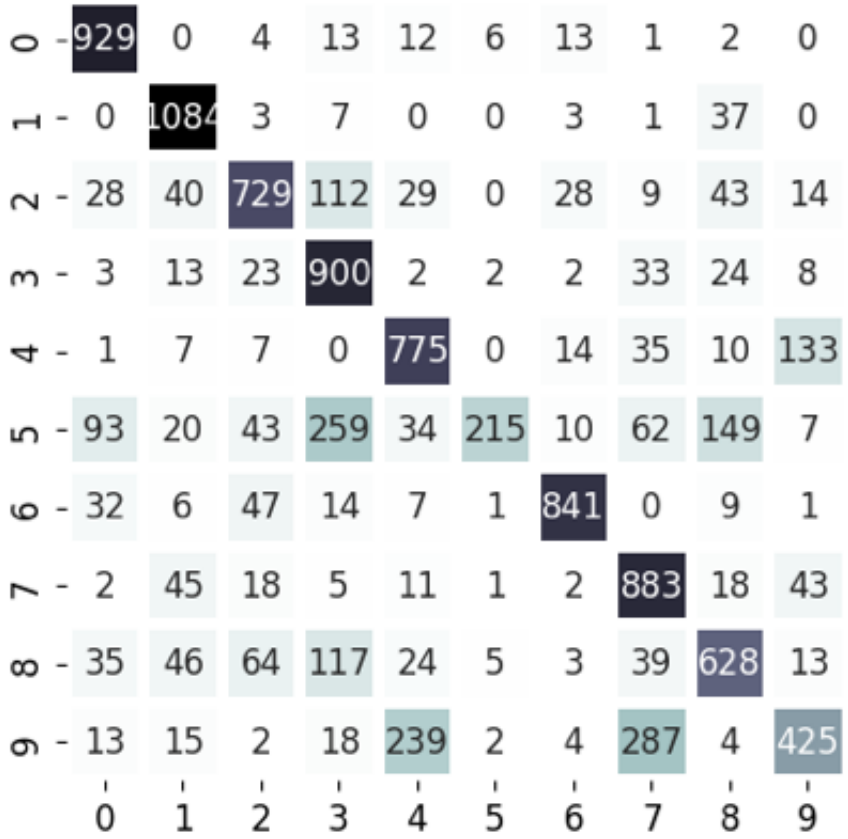
Função Softmax para classificação. Fonte: Abhisek Jana.

In [20]:

```
images, labels, probs = get_predictions(model, test_loader, device)
pred_labels = torch.argmax(probs, 1)
```

In [21]:

```
import sklearn.metrics as mtr
import seaborn as sns
fig = plt.figure(figsize=(7, 5))
ax = fig.add_subplot(1, 1, 1)
cm = mtr.confusion_matrix(labels, pred_labels)
sns.heatmap(
    cm, annot=True, fmt='d', cmap='bone_r', cbar=False,
    square=True, linewidths=3, linecolor="w", ax=ax)
plt.show()
```



In [ ]:

```
import numpy as np

dataiter = iter(test_loader)
images, labels = next(dataiter)
images = images.view(-1, 28*28).to(device)
labels = labels.to(device)

output = model(images)
_, preds = torch.max(output, 1)
images = images.cpu()
```

In [22]:

```
fig = plt.figure(figsize=(3, 3))
for idx in np.arange(20):
    ax = fig.add_subplot(4, int(20/4), idx+1, xticks=[], yticks=[])
    ax.imshow(images[idx].view(28,28), cmap='gray')
    ax.set_title("{} ({})".format(str(preds[idx].item()), str(labels[idx
                 color=("green" if preds[idx]==labels[idx] else "red"))
plt.tight_layout()
plt.show()
```

Salvando o modelo

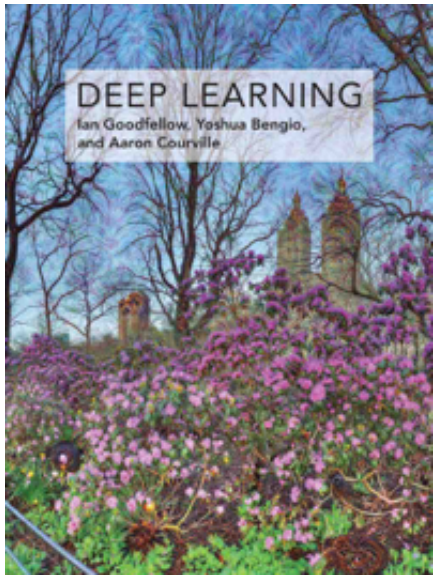
In [23]:
```
torch.save(model.state_dict(), "mlp-mnist-model.pth")
```

Carregando o modelo

In [24]:
```
model = MLPNet()
model.load_state_dict(torch.load("mlp-mnist-model.pth"))
model.eval();
```

Resumo

- **Perceptron**: Modelo linear + função de ativação (step/sigmoid).
- Algoritmo de aprendizagem: ajuste dos pesos com base no erro.
- **Multi-Layer Perceptron (MLP)**: Estrutura em camadas: entrada → múltiplas camadas ocultas → saída.
- Ativações não-lineares (ReLU, tanh, sigmoid) permitem modelar funções complexas.
- **Treinamento de Redes Neurais**
    - Função de perda: Cross-Entropy (classificação) ou MSE (regressão).
    - Otimizadores: SGD, Adam, RMSProp; ajustes de taxa de aprendizado.
    - Backpropagation: cálculo eficiente de gradientes via cadeia da regra (próxima aula).
- **Exercício**: Experimente diferentes arquiteturas (número de camadas, neurônios).
- **Mateiral adicional**: Perceptron - YouTube



Leitura Recomendada: Capítulo 6.