UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

DEPARTAMENTO DE COMPUTAÇÃO

Aprendizagem de Máquina

César Lincoln Cavalcante Mattos

2024

Agenda

1. Projeto e aplicação de algoritmos de aprendizagem
   - Passos gerais
   - Reprodutibilidade
   - Crítica e melhoria
2. Desafios em ambientes reais
3. Tópicos e referências adicionais

Passos gerais

1. Entender o seu problema.
   - → Qual a pergunta a ser respondida? Ela faz sentido?
   - → Qual o conhecimento especialista disponível?
   - → Qual a literatura mais relacionada ao problema?
   - → Quais as variáveis independentes observadas?
   - → Quais as variáveis dependentes?
   - → Aprendizagem de máquina é realmente necessária?

Passos gerais

1. Entender o seu problema.
   - → Qual a pergunta a ser respondida? Ela faz sentido?
   - → Qual o conhecimento especialista disponível?
   - → Qual a literatura mais relacionada ao problema?
   - → Quais as variáveis independentes observadas?
   - → Quais as variáveis dependentes?
   - → Aprendizagem de máquina é realmente necessária?
2. Construir um conjunto de dados de fácil manipulação.
   - → Quais dados disponíveis são úteis ao problema?
   - → Abordagens de mensuração.
   - → Uso de técnicas de mineração de dados.
   - → Uso de técnicas de rotulação de dados.
   - → Armazenamento, versionamento e disponibilização de dados.

Passos gerais

1. Entender o seu problema.
   - → Qual a pergunta a ser respondida? Ela faz sentido?
   - → Qual o conhecimento especialista disponível?
   - → Qual a literatura mais relacionada ao problema?
   - → Quais as variáveis independentes observadas?
   - → Quais as variáveis dependentes?
   - → Aprendizagem de máquina é realmente necessária?
2. Construir um conjunto de dados de fácil manipulação.
   - → Quais dados disponíveis são úteis ao problema?
   - → Abordagens de mensuração.
   - → Uso de técnicas de mineração de dados.
   - → Uso de técnicas de rotulação de dados.
   - → Armazenamento, versionamento e disponibilização de dados.
3. Escolher métricas de avaliação adequadas.
   - → Coerentes com a pergunta original.
   - → Equilíbrio entre análises quantitativas e qualitativas.

Passos gerais

4. Analisar e pré-processar os dados coletados.
   - → Estatísticas básicas.
   - → Visualização exploratória.
   - → Representação adequada dos dados.
   - → Normalização dos dados.
   - → Dados discrepantes (outliers)?
   - → Dados faltantes?
   - → Seleção/combinação de atributos?
   - → Dados desbalanceados? Subamostragem? Sobreamostragem?

Passos gerais

4. Analisar e pré-processar os dados coletados.
   - → Estatísticas básicas.
   - → Visualização exploratória.
   - → Representação adequada dos dados.
   - → Normalização dos dados.
   - → Dados discrepantes (outliers)?
   - → Dados faltantes?
   - → Seleção/combinação de atributos?
   - → Dados desbalanceados? Subamostragem? Sobreamostragem?
5. Escolher uma família de modelos e um algoritmo de aprendizagem.
   - → Comece por abordagens simples.
   - → Coerência com a aplicação final.
   - → Conheça as suposições e limitações impostas por cada modelo.
   - → Teste múltiplas estratégias, mas de forma sistemática.

Passos gerais

6. Realizar o treinamento e a avaliação.
   - → Ajuste dos hiperparâmetros (grid-search, random search, otimização Bayesiana).
   - → Conjunto de teste separado da validação ou validação cruzada aninhada.
   - → Dados de validação/teste normalizados a partir das estatísticas dos dados de treinamento.
   - → Automatize todo o procedimento.
   - → Armazene e visualize as informações geradas.

Passos gerais

6. Realizar o treinamento e a avaliação.
   - → Ajuste dos hiperparâmetros (grid-search, random search, otimização Bayesiana).
   - → Conjunto de teste separado da validação ou validação cruzada aninhada.
   - → Dados de validação/teste normalizados a partir das estatísticas dos dados de treinamento.
   - → Automatize todo o procedimento.
   - → Armazene e visualize as informações geradas.
7. Reportar os resultados obtidos.
   - → Tabelas com valores médios e desvios padrões (e.g. $\mu \pm \sigma$).
   - → Matriz de confusão (em problemas de classificação).
   - → Análise de resíduos (em problemas de regressão).
   - → Figuras: curvas, histogramas, boxplots, ilustração de casos particulares, etc.

Consulte: LONES, Michael, **How to avoid machine learning pitfalls: a guide for academic researchers**, 2023.

Passos gerais

Modelos de aprendizagem probabilística

- Verifique quais partes do problema e do modelo apresentam incerteza e podem ser representadas por variáveis aleatórias.

Passos gerais

Modelos de aprendizagem probabilística

- Verifique quais partes do problema e do modelo apresentam incerteza e podem ser representadas por variáveis aleatórias.
- Seja pragmático, mas sempre que possível explore modelagens alternativas.

Passos gerais

Modelos de aprendizagem probabilística

- Verifique quais partes do problema e do modelo apresentam incerteza e podem ser representadas por variáveis aleatórias.
- Seja pragmático, mas sempre que possível explore modelagens alternativas.
- Escolha um método de inferência compatível com a aplicação.

Passos gerais

Modelos de aprendizagem probabilística

- Verifique quais partes do problema e do modelo apresentam incerteza e podem ser representadas por variáveis aleatórias.
- Seja pragmático, mas sempre que possível explore modelagens alternativas.
- Escolha um método de inferência compatível com a aplicação.
- Antes de codificar a solução, escreva todas as expressões que regem o modelo e o procedimento de inferência.

Passos gerais

Modelos de aprendizagem probabilística

- Verifique quais partes do problema e do modelo apresentam incerteza e podem ser representadas por variáveis aleatórias.
- Seja pragmático, mas sempre que possível explore modelagens alternativas.
- Escolha um método de inferência compatível com a aplicação.
- Antes de codificar a solução, escreva todas as expressões que regem o modelo e o procedimento de inferência.
- Escolha métricas que avaliem a incerteza nas predições do modelo.

Passos gerais

Modelos de aprendizagem probabilística

- Verifique quais partes do problema e do modelo apresentam incerteza e podem ser representadas por variáveis aleatórias.
- Seja pragmático, mas sempre que possível explore modelagens alternativas.
- Escolha um método de inferência compatível com a aplicação.
- Antes de codificar a solução, escreva todas as expressões que regem o modelo e o procedimento de inferência.
- Escolha métricas que avaliem a incerteza nas predições do modelo.
- Procure pacotes de software bem estabelecidos: (py)Stan, PyMC, Pyro, GPflow, Tensorflow Probability, etc.

Passos gerais

- Não custa lembrar:
  - $\rightarrow$ Escolha da família de modelos e do algoritmo de aprendizagem devem levar em consideração as características do problema e dos dados.

Passos gerais

- Não custa lembrar:
  - → Escolha da família de modelos e do algoritmo de aprendizagem devem levar em consideração as características do problema e dos dados.
  - → Seleção de hiperparâmetros faz parte do procedimento de aprendizagem.

Passos gerais

- Não custa lembrar:
  - → Escolha da família de modelos e do algoritmo de aprendizagem devem levar em consideração as características do problema e dos dados.
  - → Seleção de hiperparâmetros faz parte do procedimento de aprendizagem.
  - → Dados de teste nunca devem estar envolvidos nas etapas de treinamento ou ajuste de hiperparâmetros.

Passos gerais

- Não custa lembrar:
  - → Escolha da família de modelos e do algoritmo de aprendizagem devem levar em consideração as características do problema e dos dados.
  - → Seleção de hiperparâmetros faz parte do procedimento de aprendizagem.
  - → Dados de teste nunca devem estar envolvidos nas etapas de treinamento ou ajuste de hiperparâmetros.
  - → As métricas de avaliação devem ser coerentes com a aplicação e com o algoritmo usado.

Reprodutibilidade

- Automatizar tudo.
  - → Coleta e pré-processamento dos dados.
  - → Treinamento e avaliação.
  - → Geração de tabelas e figuras.

Reprodutibilidade

- Automatizar tudo.
  - → Coleta e pré-processamento dos dados.
  - → Treinamento e avaliação.
  - → Geração de tabelas e figuras.
- Disponibilizar dados e códigos usados no treinamento e para reportar os resultados, informando as versões dos softwares usados.

Reprodutibilidade

- Automatizar tudo.
  - $\rightarrow$ Coleta e pré-processamento dos dados.
  - $\rightarrow$ Treinamento e avaliação.
  - $\rightarrow$ Geração de tabelas e figuras.
- Disponibilizar dados e códigos usados no treinamento e para reportar os resultados, informando as versões dos softwares usados.
- No caso de algoritmos estocásticos, fixar e informar o random seed usado.

Os resultados não estão adequados?

- Colete (gere?) mais dados.
- Reveja/recombine/selecione os atributos usados.
- Verifique a possibilidade de overfitting/underfitting.
- Analise (ou peça para alguém analisar) todos os passos do treinamento.
- Analise os erros encontrados e suas possíveis causas.
- Escolha outra função custo/objetivo.
- Escolha outra família de modelos de aprendizagem e/ou algoritmos de aprendizagem.

Agenda

Hidden Technical Debt in Machine Learning Systems

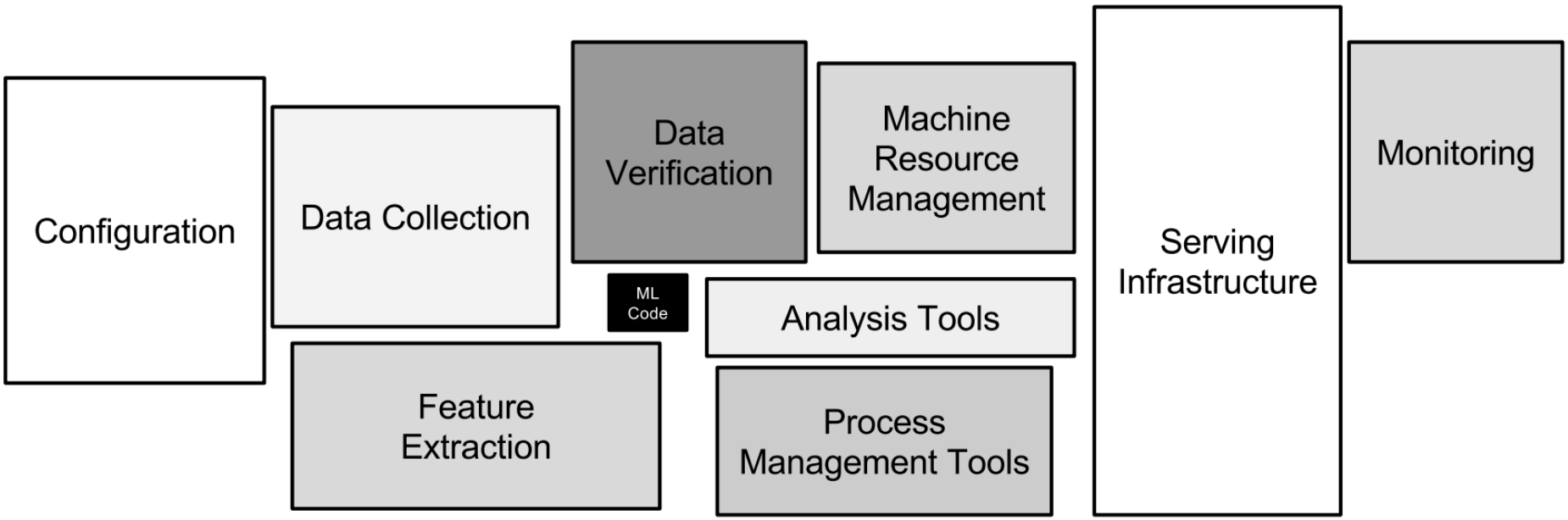
D. Sculley, Gary Holt, Daniel Golovin, Eugene Davydov, Todd Phillips
{dsculley,gholt,dgg,edavydov,toddphillips}@google.com
Google, Inc.

Dietmar Ebner, Vinay Chaudhary, Michael Young, Jean-François Crespo, Dan Dennison
{ebner,vchaudhary,mwyoung,jfcrespo,dennison}@google.com
Google, Inc.

Abstract

Machine learning offers a fantastically powerful toolkit for building useful complex prediction systems quickly. This paper argues it is dangerous to think of these quick wins as coming for free. Using the software engineering framework of *technical debt*, we find it is common to incur massive ongoing maintenance costs in real-world ML systems. We explore several ML-specific risk factors to account for in system design. These include boundary erosion, entanglement, hidden feedback loops, undeclared consumers, data dependencies, configuration issues, changes in the external world, and a variety of system-level anti-patterns.

SCULLEY, David *et al*. **Hidden technical debt in machine learning systems**. Advances in neural information processing systems, v. 28, 2015.



Débito técnico em Aprendizagem de Máquina

- Erosão de fronteiras
  - → Acoplamento (*Changing Anything Changes Everything*).
  - → Consumidores não declarados.
- Dependências relacionadas aos dados
  - → Fontes de dados instáveis.
  - → Dependências subutilizadas.
- Loops de realimentação
- Glue code e pipeline jungles
- "Dívidas" de configuração
- Mudanças no mundo externo

Challenges in Deploying Machine Learning: a Survey of Case Studies

Andrei Paleyes
Department of Computer Science
University of Cambridge
ap2169@cam.ac.uk

Raoul-Gabriel Urma
Cambridge Spark
raoul@cambridgespark.com

Neil D. Lawrence
Department of Computer Science
University of Cambridge
ndl21@cam.ac.uk

Abstract

In recent years, machine learning has received increased interest both as an academic research field and as a solution for real-world business problems. However, the deployment of machine learning models in production systems can present a number of issues and concerns. This survey reviews published reports of deploying machine learning solutions in a variety of use cases, industries and applications and extracts practical considerations corresponding to stages of the machine learning deployment workflow. Our survey shows that practitioners face challenges at each stage of the deployment. The goal of this paper is to layout a research agenda to explore approaches addressing these challenges.

PALEYES, Andrei; URMA, Raoul-Gabriel; LAWRENCE, Neil D. **Challenges in deploying machine learning: a survey of case studies**. NeurIPS 2020 Workshop: ML Retrospectives, Surveys & Meta-Analyses.

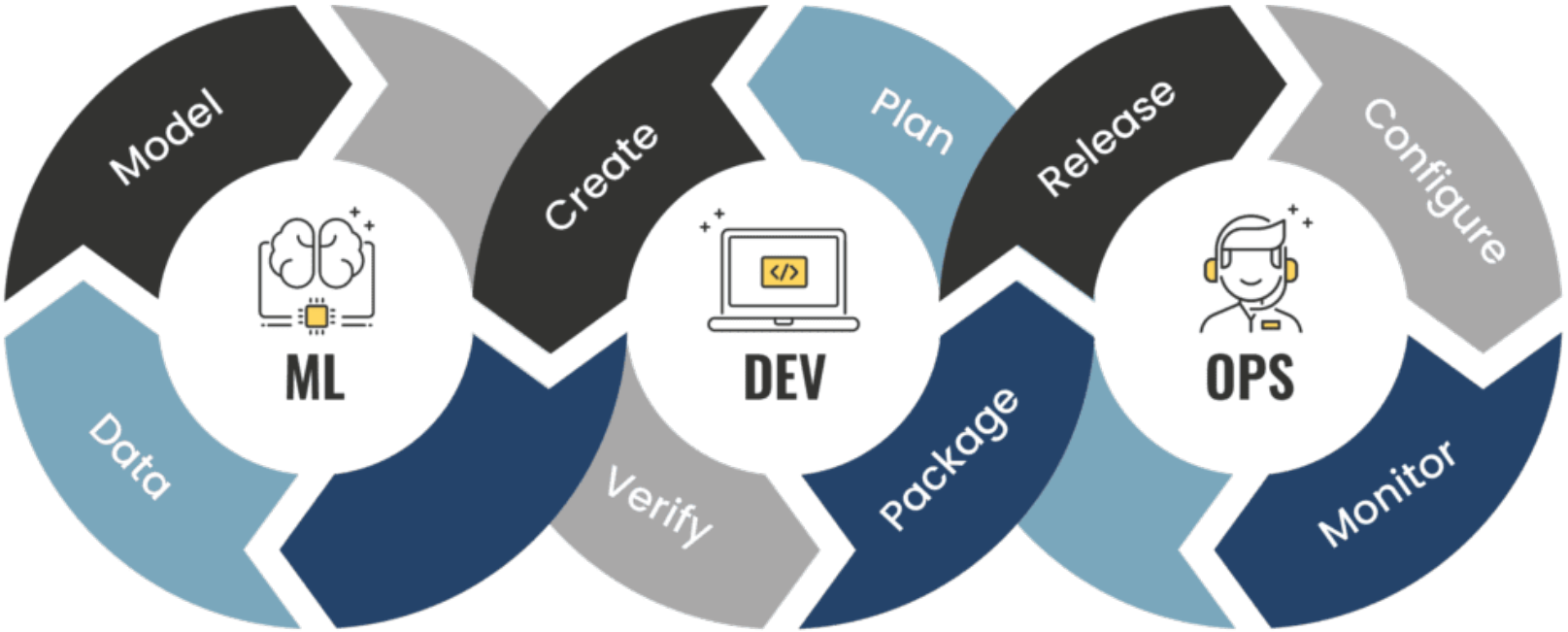
Deployment Stage	**Deployment Step**	**Considerations, Issues and Concerns**
Data management	Data collection	Data discovery
	Data preprocessing	Data dispersion Data cleaning
	Data augmentation	Labeling of large volumes of data Access to experts Lack of high-variance data
	Data analysis	Data profiling
Model learning	Model selection	Model complexity Resource-constrained environments Interpretability of the model
	Training	Computational cost Environmental impact
	Hyper-parameter selection	Resource-heavy techniques Hardware-aware optimization
Model verification	Requirement encoding	Performance metrics Business driven metrics
	Formal verification	Regulatory frameworks
	Test-based verification	Simulation-based testing

PALEYES, Andrei; URMA, Raoul-Gabriel; LAWRENCE, Neil D. **Challenges in deploying machine learning: a survey of case studies**. NeurIPS 2020 Workshop: ML Retrospectives, Surveys & Meta-Analyses.

Model deployment	Integration	Operational support Reuse of code and models Software engineering anti-patterns Mixed team dynamics
	Monitoring	Feedback loops Outlier detection Custom design tooling
	Updating	Concept drift Continuous delivery
Cross-cutting aspects	Ethics	Country-level regulations Focus on technical solution only Aggravation of biases Authorship Decision making
	End users' trust	Involvement of end users User experience Explainability score
	Security	Data poisoning Model stealing Model inversion

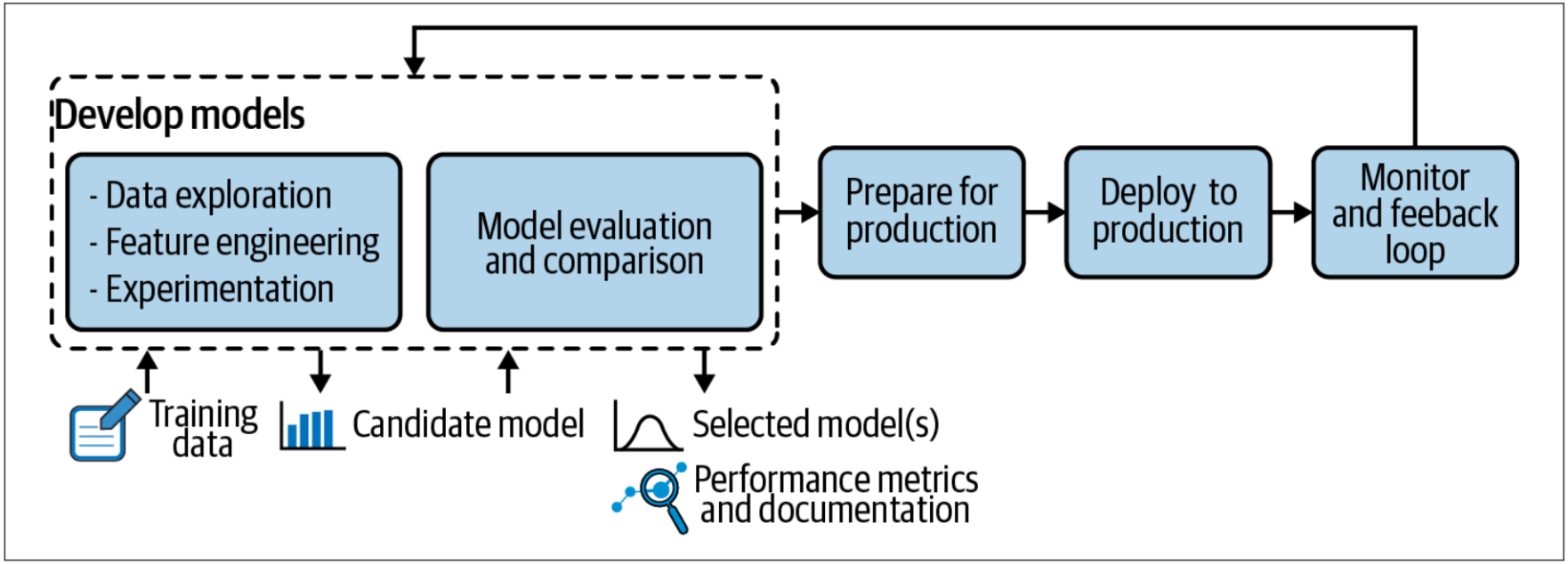
MLOps

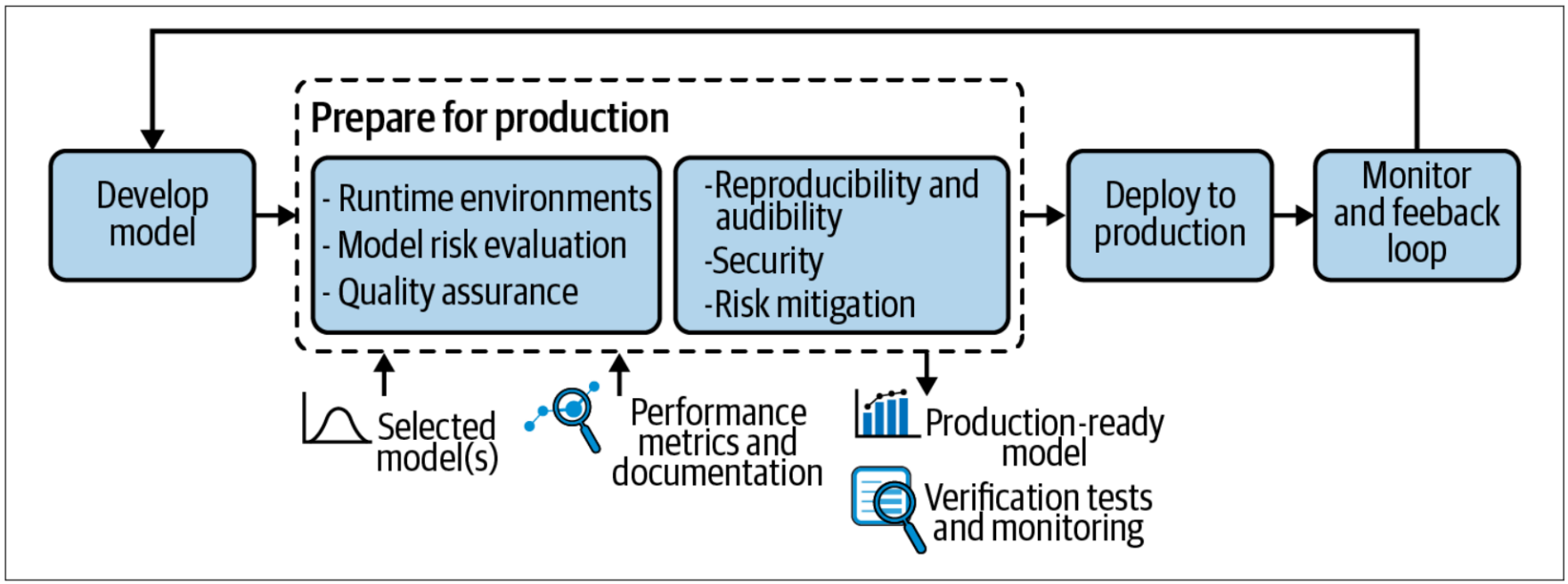
- Conjunto de práticas que visam disponibilizar e manter modelos de ML de maneira confiável e eficiente em ambientes reais.



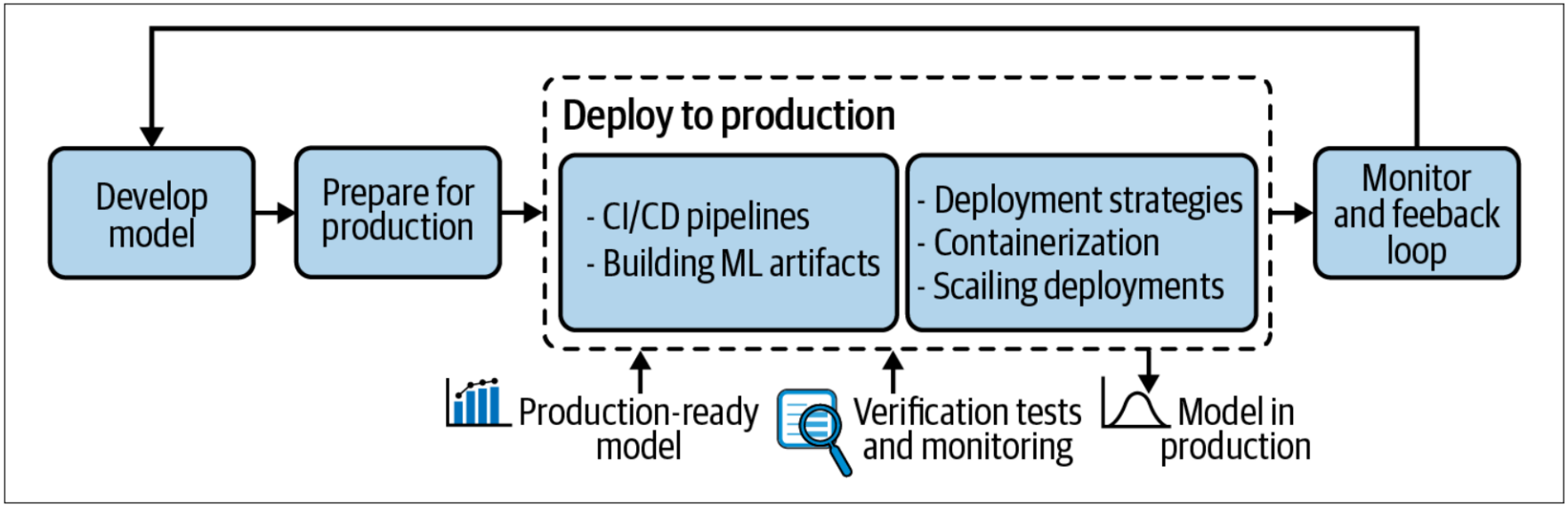
Consulte: SHANKAR, Shreya *et al.*, **Operationalizing Machine Learning: An Interview Study**, 2022.

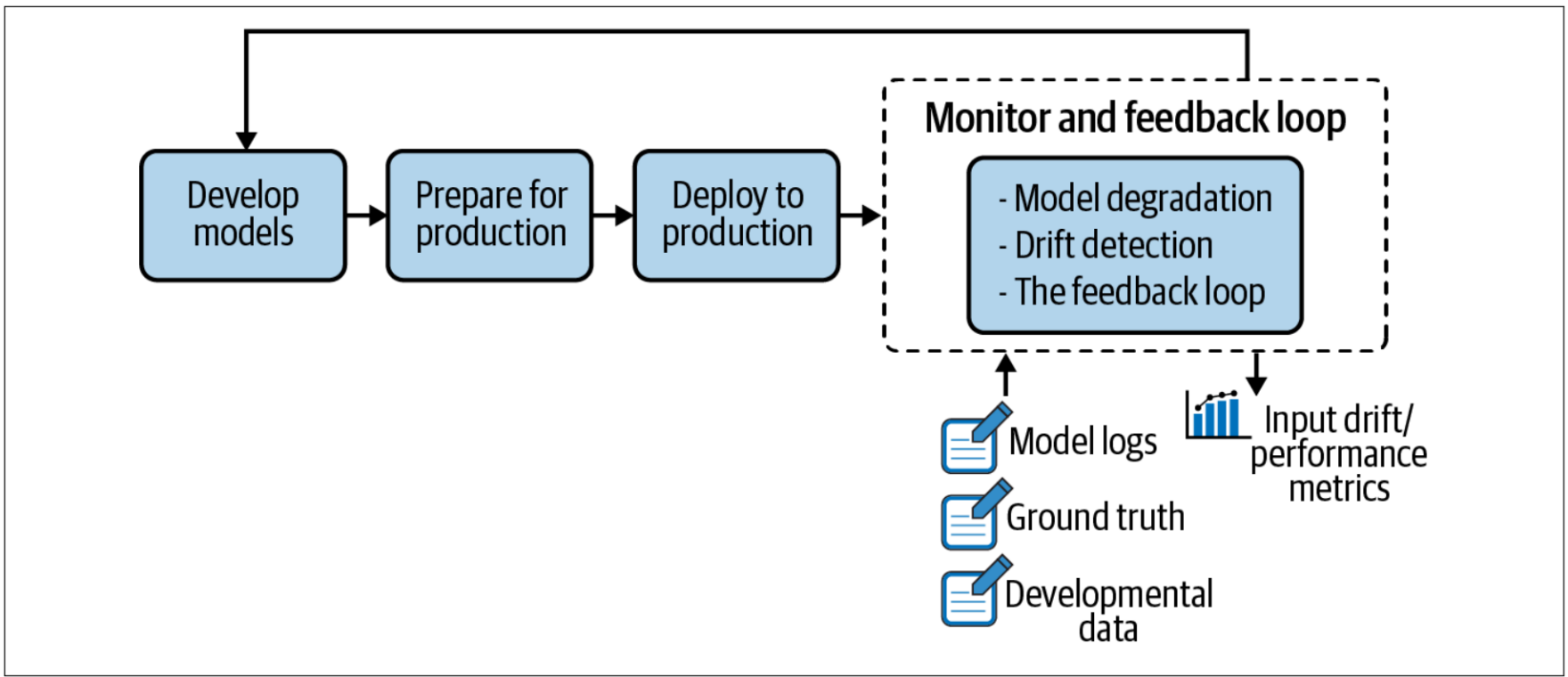
MLOps


Develop models
- Data exploration
- Feature engineering
- Experimentation
Model evaluation and comparison
Prepare for production
Deploy to production
Monitor and feeback loop
Training data
Candidate model
Selected model(s)
Performance metrics and documentation


Develop model
Prepare for production
- Runtime environments
- Model risk evaluation
- Quality assurance
-Reproducibility and audibility
-Security
-Risk mitigation
Deploy to production
Monitor and feeback loop
Selected model(s)
Performance metrics and documentation
Production-ready model
Verification tests and monitoring

MLOps


Develop model
Prepare for production
Deploy to production
- CI/CD pipelines
- Building ML artifacts
- Deployment strategies
- Containerization
- Scailing deployments
Monitor and feeback loop
Production-ready model
Verification tests and monitoring
Model in production


Develop models
Prepare for production
Deploy to production
Monitor and feedback loop
- Model degradation
- Drift detection
- The feedback loop
Model logs
Ground truth
Developmental data
Input drift/ performance metrics

Agenda

1. Projeto e aplicação de algoritmos de aprendizagem
   - Passos gerais
   - Reprodutibilidade
   - Crítica e melhoria
2. Desafios em ambientes reais
3. Tópicos e referências adicionais

Tópicos e referências adicionais

- Lawrence, **Data Science and Digital Systems: The 3Ds of Machine Learning**, 2019.
  - → Discute 3 aspectos fundamentais de sistemas inteligentes: dados, design e desenvolvimento, reforçando a necessidade de uma abordagem *data first*.

Tópicos e referências adicionais

- Lawrence, **Data Science and Digital Systems: The 3Ds of Machine Learning**, 2019.
  - → Discute 3 aspectos fundamentais de sistemas inteligentes: dados, design e desenvolvimento, reforçando a necessidade de uma abordagem *data first*.
- Lawrence, **Living Together: Mind and Machine Intelligence**, 2017.
  - → Discute as diferenças entre as inteligências humana e de máquina, focando em fatores de "encarnação" (*embodiment*) e propondo uma visão baseada em processos duais de cognição.

Tópicos e referências adicionais

- Lawrence, **Data Science and Digital Systems: The 3Ds of Machine Learning**, 2019.
  - → Discute 3 aspectos fundamentais de sistemas inteligentes: dados, design e desenvolvimento, reforçando a necessidade de uma abordagem *data first*.
- Lawrence, **Living Together: Mind and Machine Intelligence**, 2017.
  - → Discute as diferenças entre as inteligências humana e de máquina, focando em fatores de "encarnação" (*embodiment*) e propondo uma visão baseada em processos duais de cognição.
- Malik, **A Hierarchy of Limitations in Machine Learning**, 2020.
  - → Estrutura as limitações conceituais, procedurais e estatísticas de modelos de aprendizagem de máquina, especialmente em aplicações reais.

Tópicos e referências adicionais

- Lawrence, **Data Science and Digital Systems: The 3Ds of Machine Learning**, 2019.
  - → Discute 3 aspectos fundamentais de sistemas inteligentes: dados, design e desenvolvimento, reforçando a necessidade de uma abordagem *data first*.
- Lawrence, **Living Together: Mind and Machine Intelligence**, 2017.
  - → Discute as diferenças entre as inteligências humana e de máquina, focando em fatores de "encarnação" (*embodiment*) e propondo uma visão baseada em processos duais de cognição.
- Malik, **A Hierarchy of Limitations in Machine Learning**, 2020.
  - → Estrutura as limitações conceituais, procedurais e estatísticas de modelos de aprendizagem de máquina, especialmente em aplicações reais.
- Fazelpour e Lipton, **Algorithmic Fairness from a Non-ideal Perspective**, 2020.
  - → Discute questões de justiça e equidade em sistemas inteligentes contrastando visões filosóficas de mundo ideal versus não-ideal.

Tópicos e referências adicionais

- Lipton, **The Mythos of Model Interpretability**, 2018.
  - $\rightarrow$ Aborda a dualidade entre a importância da interpretabilidade como propriedade desejável e a dificuldade de defini-la objetivamente.

Tópicos e referências adicionais

- Lipton, **The Mythos of Model Interpretability**, 2018.
  - $\rightarrow$ Aborda a dualidade entre a importância da interpretabilidade como propriedade desejável e a dificuldade de defini-la objetivamente.
- Cheeseman, **In Defense of Probability**, 1985.
  - $\rightarrow$ Defende a teoria da probabilidade como suficiente para a tarefa de racionalizar na presença de incerteza, enfatizando sua função como representação de crenças, em oposição a interpretações frequentistas.

Tópicos e referências adicionais

- Lipton, **The Mythos of Model Interpretability**, 2018.
  - $\rightarrow$ Aborda a dualidade entre a importância da interpretabilidade como propriedade desejável e a dificuldade de defini-la objetivamente.
- Cheeseman, **In Defense of Probability**, 1985.
  - $\rightarrow$ Defende a teoria da probabilidade como suficiente para a tarefa de racionalizar na presença de incerteza, enfatizando sua função como representação de crenças, em oposição a interpretações frequentistas.
- Ghahramani, **Probabilistic machine learning and artificial intelligence**, 2015.
  - $\rightarrow$ Um survey que motiva o uso da linguagem probabilística em tarefas de aprendizagem, sobretudo na representação da incerteza.

Tópicos e referências adicionais

- Lipton, **The Mythos of Model Interpretability**, 2018.
  - → Aborda a dualidade entre a importância da interpretabilidade como propriedade desejável e a dificuldade de defini-la objetivamente.
- Cheeseman, **In Defense of Probability**, 1985.
  - → Defende a teoria da probabilidade como suficiente para a tarefa de racionalizar na presença de incerteza, enfatizando sua função como representação de crenças, em oposição a interpretações frequentistas.
- Ghahramani, **Probabilistic machine learning and artificial intelligence**, 2015.
  - → Um survey que motiva o uso da linguagem probabilística em tarefas de aprendizagem, sobretudo na representação da incerteza.
- Wilson, **The Case for Bayesian Deep Learning**, 2020.
  - → Argumenta sobre a importância de incluir o conceito Bayesiano de marginalização de valores incertos em frameworks de deep learning.