Uma Análise Empírica e Otimização do Modelo GRU-ODE-Bayes

Gabriel Martins Silveira de Oliveira
Universidade de Brasília (UnB)

Roteiro

1. **Motivação:** O problema com séries temporais do mundo real.
2. **A Solução Teórica:** De RNNs para Equações Diferenciais (NODEs).
3. **Prova de Conceito:** Aprendendo a dinâmica do modelo Presa-Predador.

4. **O Experimento Principal:** Classificação de arritmias com GRU-ODE-Bayes.
    - Processamento dos Dados
    - Implementação e Otimização
5. **Resultados Surpreendentes:** A falha do modelo complexo.
6. **Conclusões e Lições Aprendidas.**

1. Motivação: O Limite dos Modelos Discretos

As Redes Neurais Recorrentes (RNNs) são poderosas, mas operam em **passos de tempo discretos e regulares**.

O Problema:

Dados do mundo real, como prontuários médicos, são **irregulares e esporádicos**.

- Como modelar o que acontece *entre* as observações?
- Como lidar com intervalos de tempo variáveis?

2. A Solução Teórica: Do Discreto ao Contínuo

A ideia da **Neural Ordinary Differential Equation (NODE)** é trocar a recorrência discreta por uma dinâmica de tempo contínuo.

RNN (Discreta)

$$\vec{h}_{t+1} = f(\vec{h}_t, \theta_t)$$

NODE (Contínua)

$$\frac{d\vec{z}(t)}{dt} = f(\vec{z}(t), \theta, t)$$

Em vez de aprender a transição, aprendemos a **derivada** do estado oculto. O estado em qualquer tempo futuro é obtido via integração.

O Desafio: Como Treinar um Integrador?

O backpropagation através de um solver de ODEs é computacionalmente caro.

A Solução: O Método Adjunto

Em vez de salvar todos os estados intermediários, resolvemos uma segunda ODE, "para trás" no tempo, para calcular os gradientes.

Equação do Estado Adjunto:

$$\dot{\vec{\lambda}}^T = -\vec{\lambda}^T \frac{\partial f}{\partial \vec{z}}$$

Gradiente Final:

$$\frac{dL}{d\theta} = \int_{t_1}^{t_0} \vec{\lambda}^T(t) \frac{\partial f}{\partial \theta} \, dt$$

Isso permite treinar o modelo com custo de memória constante ($O(1)$).

Pequena Prova

Conforme vimos:

$$\dot{\vec{z}} = f(\vec{z}, \theta, t)$$

Objetivo: Minimizar a função de perda (L) em relação aos parâmetros θ.

Problema: A dependência de L em θ não é explícita.

Solução: Introduzimos um novo funcional, $\mathcal{L}$.

$$\mathcal{L}(\vec{z}, \vec{\lambda}, \theta) = L(\vec{z}(\tau, \theta)) + \int_0^{\tau} \vec{\lambda}^T(t) \left[f(\vec{z}, \theta, t) - \dot{\vec{z}} \right] dt$$

Utilizamos multiplicadores de Lagrange para incorporar a restrição dinâmica.

Quando a restrição é satisfeita: $\mathcal{L} = L$

$$\delta\mathcal{L} = \delta L = \frac{dL}{d\theta}\,\delta\theta$$

A dependência de L em θ é implícita, mediada pela trajetória $\vec{z}(t,\theta)$.

Calculamos a primeira variação do funcional $\mathcal{L}$:

$$\delta\mathcal{L} = \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\vec{z}}\,\delta\vec{z} + \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\theta}\,\delta\theta + \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\vec{\lambda}}\,\delta\vec{\lambda}$$

Variação em Relação a $\vec{\lambda}$

A variação do funcional em relação ao multiplicador $\vec{\lambda}$ **recupera** a restrição dinâmica original.

$$\dot{\vec{z}} = f(\vec{z}, \theta, t)$$

Variação Explícita em Relação a θ

$$\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \theta}\, \delta\theta = \int_0^{\tau} \vec{\lambda}^T(t)\, \frac{\partial f}{\partial \theta}\, dt\, \delta\theta$$

Variação em Relação a $\vec{z}$

$$\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \vec{z}}\,\delta \vec{z} = \frac{\partial L}{\partial \vec{z}(\tau)}\,\delta \vec{z}(\tau) + \int_0^\tau \vec{\lambda}^T(t)\left[\,\frac{\partial f}{\partial \vec{z}}\,\delta \vec{z} - \delta \dot{\vec{z}}\,\right] dt$$

Aplicamos integração por partes:

$$-\int_0^{\tau} \vec{\lambda}^T \delta \dot{\vec{z}}\, dt = \int_0^{\tau} \dot{\vec{\lambda}}^T \delta \vec{z}\, dt - \left[\vec{\lambda}^T \delta \vec{z} \right]_0^{\tau}$$

Substituindo:

$$\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \vec{z}}\,\delta\vec{z} = \left(\frac{\partial L}{\partial \vec{z}(\tau)} - \vec{\lambda}^T(\tau)\right)\delta\vec{z}(\tau) + \vec{\lambda}^T(0)\,\delta\vec{z}(0) + \int_0^\tau \left[\vec{\lambda}^T\,\frac{\partial f}{\partial \vec{z}} + \dot{\vec{\lambda}}^T\right]\delta\vec{z}\,dt$$

1. O termo $\delta\vec{z}(0)$ é nulo, pois a condição inicial $\vec{z}(0)$ é fixa.
2. Podemos *escolher* a definição do nosso vetor adjunto $\vec{\lambda}(t)$ de forma estratégica.

Definindo $\vec{\lambda}(t)$ de forma a anular a equação acima, obtemos:

1. Condição de Contorno no Tempo Final (τ):

Para anular o termo de fronteira em τ:

$$\frac{\partial L}{\partial \vec{z}(\tau)} - \vec{\lambda}^T(\tau) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \vec{\lambda}^T(\tau) = \frac{\partial L}{\partial \vec{z}(\tau)}$$

2. Equação Diferencial do Estado Adjunto:

Para anular o termo da integral para qualquer variação $\delta\vec{z}(t)$:

$$\dot{\vec{\lambda}}^T + \vec{\lambda}^T \frac{\partial f}{\partial \vec{z}} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \dot{\vec{\lambda}}^T = -\vec{\lambda}^T \frac{\partial f}{\partial \vec{z}}$$

Por fim, usando os resultados obtidos:

$$\delta L = \frac{dL}{d\theta}\,\delta\theta = \int_0^\tau \vec{\lambda}^T(t)\,\frac{\partial f}{\partial \theta}\,dt\,\delta\theta$$

$$\Longrightarrow$$

$$\frac{dL}{d\theta} = \int_0^\tau \vec{\lambda}^T(t)\,\frac{\partial f}{\partial \theta}\,dt$$

3. Prova de Conceito: Aprendendo um Sistema Dinâmico

Pergunta: Um NODE consegue aprender a "física" de um sistema conhecido?

Teste: Modelo Lotka-Volterra (presa-predador).

Diagrama de Fase do Modelo Lotka-Volterra

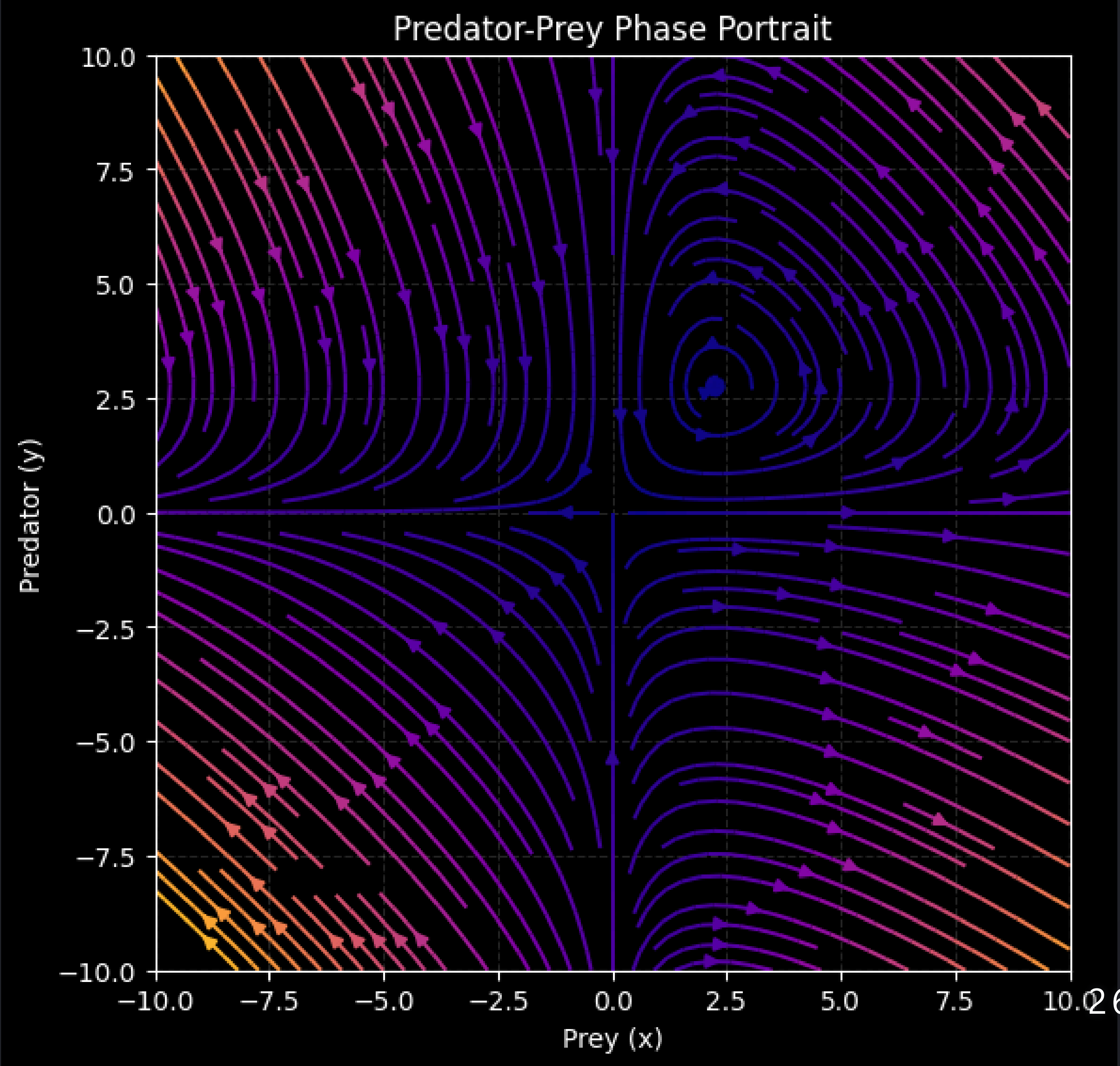


Diagrama de Fase do **MLP**

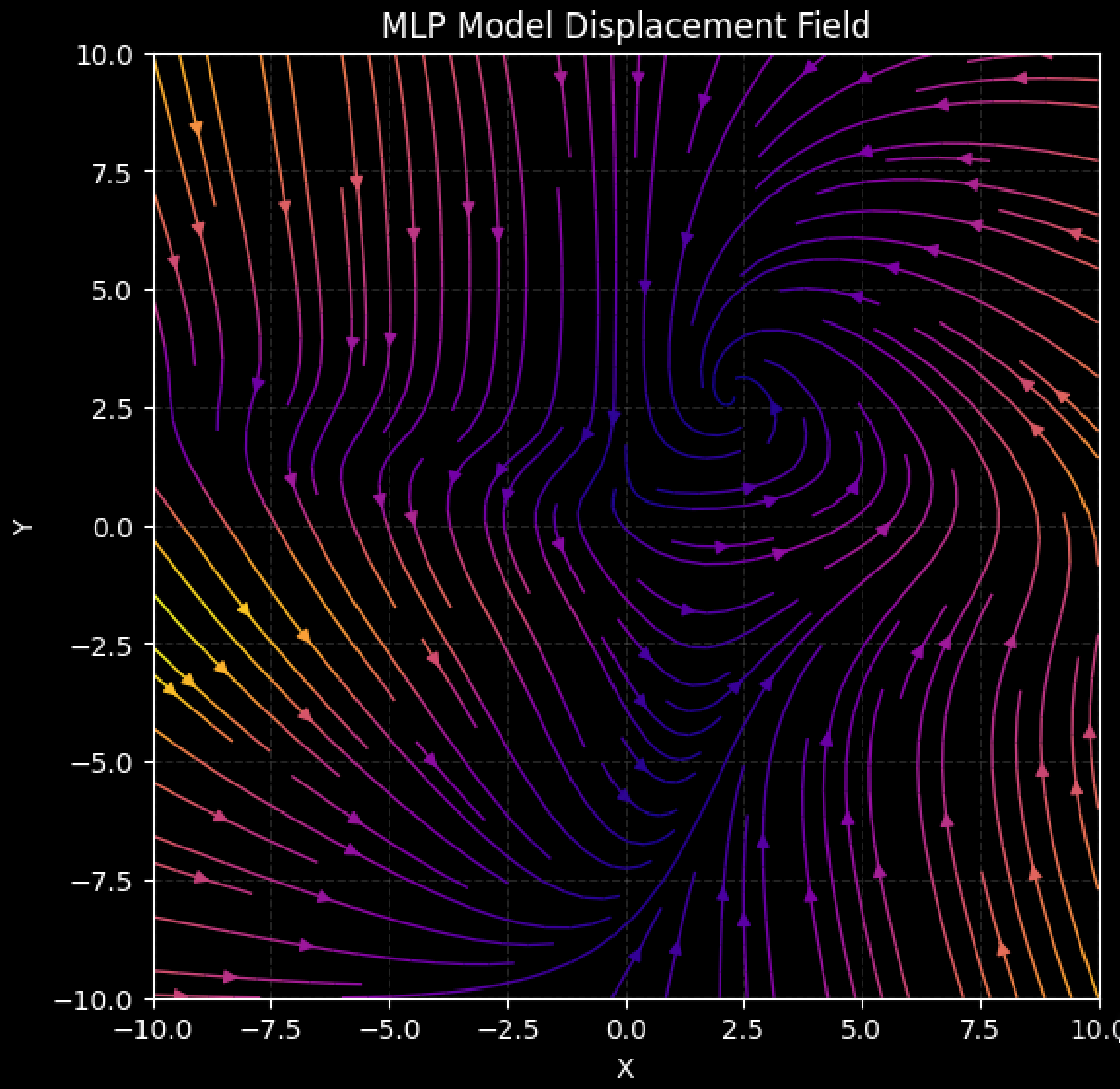
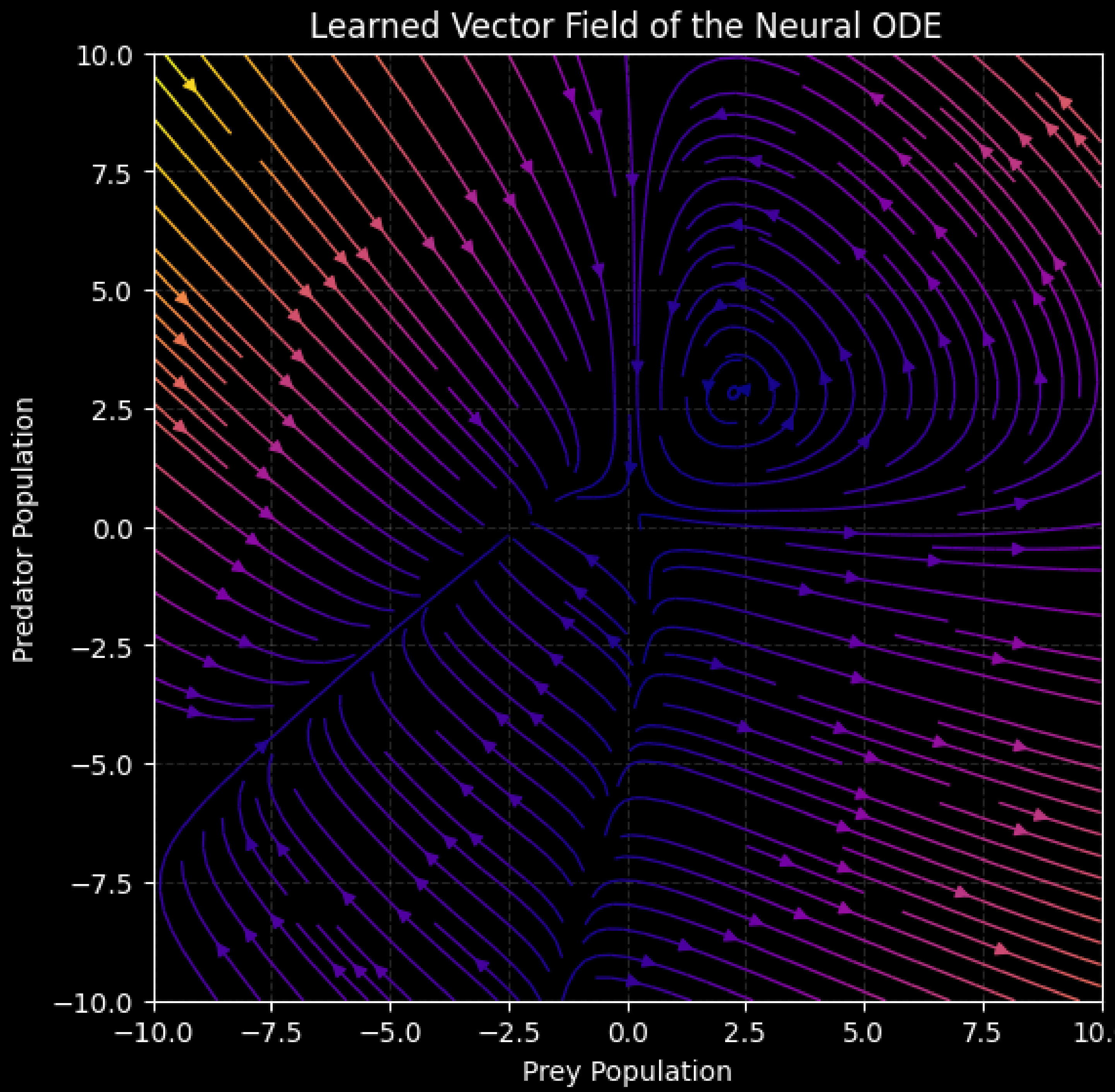


Diagrama de Fase do NODE-ReLU



Resultado: Sim! Um NODE com ativação ReLU aprende o campo vetorial quase perfeitamente, enquanto um MLP padrão falha. O viés indutivo do NODE é poderoso para aprender dinâmicas.

4. O Experimento Principal: GRU-ODE-Bayes

Objetivo:

Usar o modelo estado da arte **GRU-ODE-Bayes** para classificar arritmias cardíacas a partir de dados de ECG (MIT-BIH, BIDMC).

Como funciona:

- **Entre observações:**
  Usa um solver de ODE para evoluir o estado oculto.
- **Em cada observação:**
  Usa um update inspirado em GRUs para incorporar a nova informação.

Um modelo teoricamente perfeito para dados médicos esporádicos.

Processamento dos Dados: Uma Etapa Crítica

Dados de ECG são longos e possuem tamanhos variados (de 30 min a 30+ horas).

Problemas:

1. Lotes de dados desbalanceados causam erros de memória na GPU.
2. Processar cada paciente individualmente é extremamente lento.

Solução: "Chunking"

- Cada registro longo foi segmentado em "chunks" (pedaços) menores, de tamanho uniforme e sobrepostos.
- Isso criou um dataset com amostras de tamanho previsível, estabilizando o treinamento.

```python
def chunk_patient_data(
    patient_data: Dict[str, Any],
) -> List[Dict[str, Any]]:
    # ...
    num_events = len(times)
    if num_events <= chunk_size:
        return [patient_data]
    # ...
    while start_idx < num_events:
        end_idx = min(start_idx + chunk_size, num_events)
        # Cria um chunk com dados estáticos
        chunk = {
            "id": f"{patient_data['id']}_chunk{len(chunks)}", # ...
        }
        chunk_times = times[start_idx:end_idx]
        # Nota: Tornamos cada chunk uma série temporal independente
        chunk["times"] = chunk_times - chunk_times[0]
        # ...
        start_idx += chunk_size - chunk_overlap
        if end_idx == num_events:
            break

    return chunks
```

Implementação e Otimização

O maior gargalo de performance era o loop em Python que alternava entre `odeint` e o update do GRU.

❌ Abordagem Ingênua

```python
def forward(...):
  # ...
  for i, obs_time in enumerate(times):
      # Propagação da ODE até a próxima observação
      while current_time < (obs_time - 0.001 * delta_t):
          if self.solver == "dopri5":
              h, p, current_time, ... = self.ode_step(
                  h, p, obs_time - current_time, current_time
              )
  # ...
```

```python
def ode_step(self, h, p, delta_t, current_time):
    """Executa um único passo da ODE."""
    # ...
    if self.impute is False:
        p = torch.zeros_like(p)

    if self.solver == "euler":
        h = h + delta_t * self.gru_c(p, h)
        p = self.p_model(h)
  # ...
```

Dependências em laços Python e iterações longas, sem o método adjunto.

✅ Abordagem Vetorizada

```python
def forward(...):
    h = self.cov_model(cov)  # Chute inicial com parâmetros estáticos
    # ...
    t_all = torch.cat([torch.tensor([0.0], device=times.device), times])
    t_all = torch.unique(t_all)
    # ...
    # --- Chama o Solver ODE ---
    # Obtém o estado oculto em cada instante de tempo único
    h_all_times = odeint_adjoint(
      self.dynamics,
      h,
      t_all,
      # ...
    )  # Shape: [num_times, batch_size, hidden_size]
```

Sem loops em Python; todas as ações são chamadas de módulos do `PyTorch`. A solução da ODE é realizada apenas uma vez.

5. Resultados (1): A Surpreendente Ineficácia

Comparamos o modelo completo com um **baseline simples** (mesma arquitetura, mas sem o solver de ODE).

```python
# Baseline (Sem ODE)
def forward_(...):
    # --- Esta parte é a mesma ---
    h = self.cov_model(cov)

    t_all = torch.unique(
        torch.cat([torch.tensor([0.0], device=times.device), times])
    )

    num_times = len(t_all)
    # Simplesmente expande o estado inicial para todos os tempos
    h_all_times = h.unsqueeze(0).expand(num_times, -1, -1)
    # ...
```

Modelo	**Acurácia (Validação)**	**Tempo / Época (CPU)**
GRU-ODE-Bayes (Full)	62.0%	~1 hora
Baseline (Sem ODE)	**97.78%**	**~30 segundos**

O modelo complexo não só foi **120x mais lento**, como também drasticamente **menos preciso**.

Resultados (2): O Paradoxo da GPU

Mesmo com a implementação vetorizada, um comportamento estranho surgiu.

Tempo de Treinamento por Época

CPU: ~1 hora

GPU: ~5 horas

A Causa:

O *overhead* de iniciar múltiplos kernels CUDA e gerenciar o estado adjunto com `odeint_adjoint` para muitos intervalos curtos é imenso. Para esta carga de trabalho específica, a CPU, com menor latência de chamada, foi mais eficiente.

6. Conclusões e Lições Aprendidas

1. Elegância Teórica não Garante Sucesso Prático

O GRU-ODE-Bayes, apesar de ser teoricamente ideal, não foi útil para *esta tarefa de classificação*. O viés indutivo de modelar a dinâmica contínua parece ter atrapalhado o aprendizado.

2. Baselines Simples são Essenciais

Um modelo mais simples e rápido superou o complexo de forma esmagadora. A complexidade deve ser justificada por ganhos de performance.

3. Hardware é Dependente do Problema

"Usar uma GPU" não é uma solução universal. Cargas de trabalho com muitas operações pequenas e sequenciais podem ser mais rápidas na CPU.

4. NODEs são a Ferramenta Certa para o Problema Certo

Como vimos no exemplo presa-predador, eles são excelentes para aprender sistemas dinâmicos, mas não necessariamente para qualquer problema de série temporal.

É o Fim das Redes Diferenciais?

Não. A teoria é extremamente interessante e, como vimos, as implementações ainda são muito novas e não otimizadas. O futuro é a paralelização, permitindo relações mais complexas como as que vemos em modelos como os Transformers.

Obrigado!

Perguntas?

Repositório e artigo disponíveis em:

https://github.com/DaturaSol/neural-edo-bayes