

IA048 - Aprendizado de Máquina: Prova 28/05/2024

Tiago Corrêa de Araújo de Amorim (RA: 100675)

1. Questão 1

As redes neurais generativas adversárias (GANs, generative adversarial networks) trouxeram uma abordagem inovadora para a área de aprendizado de máquina.

- (a) (0,8) Explique por que as redes geradora e discriminadora são consideradas adversárias.
- (b) (0,8) Tendo em vista os papéis desempenhados por cada rede, discorra sobre a função custo proposta por Goodfellow et al. (2014)¹ para o treinamento da GAN. Complementando essa análise, comente também sobre como a rede geradora consegue aprender as características típicas dos dados reais.

1.1. Resposta (a)

As redes geradora e discriminadora são consideradas adversárias porque o treinamento dos seus pesos tem objetivos conflitantes. A função objetivo da rede discriminadora é maximizar o número de vezes em que classifica os dados reais como verdadeiros e os dados gerados pela rede geradora como falsos. Já a rede geradora tem como função objetivo maximizar o número de vezes em que a rede discriminadora classifica a saída da rede geradora como verdadeiros. É este jogo de gato e rato que faz com que a rede geradora vá aprendendo a gerar amostras cada vez mais parecidas com as amostras reais, mesmo sem explicitamente definir o que é uma amostra parecida com uma amostra real.

1.2. Resposta (b)

A função custo proposta por Goodfellow segue o que foi discutido no item anterior. Os pesos da rede discriminadora são ajustados para minimizar a entropia cruzada desta rede em função dos dados reais (classe *verdadeira*) e das saídas da rede discriminadora (classe *falsa*). Os pesos da rede geradora são ajustados para maximizar a entropia cruzada na saída da rede discriminadora, em função das saídas da rede discriminadora. Nesta etapa o objetivo é a rede geradora *enganar* a rede discriminadora, para que classifique as saídas da geradora na classe *verdadeira*. Como os objetivos são conflitantes, os autores propõe ajustar os pesos de cada rede de forma intercalada, ou seja, não são ajustados simultaneamente. Ademais, também comentam que existe um balanço delicado entre treinar *demais* a rede discriminadora a ponto de deixar a tarefa da rede geradora *muito difícil* e não conseguir convergência.

Na proposta original a rede geradora recebe como entrada um vetor aleatório. O que se busca é que a rede geradora consiga mapear este vetor aleatório no espaço de distribuição dos dados reais. Uma rede geradora competente consegue aproximar o espaço de distribuição dos dados reais de forma a se tornar quase indistinguível do espaço real. Ao conseguir se tornar uma rede competente, a rede geradora estará efetivamente utilizando o vetor de entrada como uma *codificação* das principais características dos dados reais.

¹Goodfellow, I. J., Pouget-Abadie, J., Mirza, M., Xu, B., Warde-Farley, D., Ozair, S., Courville, A., Bengio, Y., Generative Adversarial Networks, Proceedings of the 27th International Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS), pp.2672-2680, 2014.

2. Questão 2

(1,2) Explique os conceitos de mapa de características (feature map), neurônio, campo receptivo e compartilhamento de pesos no contexto de uma camada convolucional de uma CNN (convolutional neural network).

2.1. Resposta

- **Mapa de características:** Uma rede com camadas convolucionais funciona como uma série de filtros não-lineares, em cascata (no caso de mais de uma camada convolucional na rede). O que se entende como mapa de características são os resultados gerados por cada uma das camadas convolucionais. O ajuste dos pesos dos filtros objetivam encontrar características nos dados de entrada que sejam úteis para o problema posto.
- **Neurônio:** O neurônio é a unidade básica de computação de uma rede neural. Em uma camada densa cada neurônio se conecta a todos os dados de entrada. Em uma camada convolucional o neurônio se conecta a um número limitado de dados de entrada, e depois *passeia* pelos dados (operação de convolução). Cada *canal* na saída de uma camada convolucional é o resultado da aplicação de um mesmo neurônio seguidamente a porções dos dados de entrada.
- **Campo receptivo:** Uma camada densa trabalha *observando* toda a informação de uma única vez, enquanto que uma camada convolucional *observa* os dados de entrada em pequenas porções. Cada saída da camada convolucional é o resultado da aplicação do filtro (*kernel*) em uma porção limitada dos dados. Ao ter camadas convolucionais seguidas o efeito é que cada saída das camadas mais profundas são o resultado da composição destas regiões em cascata. O campo receptivo de uma camada é o resultado desta composição de *lentes* de volta para o dado de entrada, onde as saídas de camadas mais profundas são o resultado de regiões cada vez maiores dos dados de entrada.
- **Compartilhamento de pesos:** Uma camada convolucional pode ser entendida como uma camada densa em que os pesos são compartilhados entre os diferentes neurônios. As operações envolvidas são as mesmas de uma camada densa, mas é como se cada neurônio tivesse pesos ajustáveis (e não-nulos) apenas para as conexões a um número limitado de dados de entrada. Além disso os pesos utilizados são os mesmos entre estes diferentes neurônios. Este mecanismo ajuda a entender a grande diferença entre o número de pesos ajustáveis de camadas densas e camadas convolucionais.

3. Questão 3

Tendo em mente a teoria subjacente às máquinas de vetores-suporte (SVMs, do inglês support-vector machines):

- (a) (0,5) Defina margem de classificação no contexto de um problema linearmente separável e explique por que a maximização da margem é, intuitivamente, uma abordagem segura de projeto.
- (b) (0,5) Por que a formulação matemática relacionada à obtenção do classificador de máxima margem possui similaridades com as ideias de regularização (e.g. Tikhonov / ridge regression) vistas no curso?

3.1. Resposta (a)

Ao maximizar a margem de classificação de um problema linearmente separável estamos efetivamente maximizando a *distância* do hiperplano classificador para os dados. Como não temos garantias dos dados de treino serem suficientes para definir exatamente a região correspondente a cada classe, novos dados (de teste) podem se posicionar na região *entre* as classes. Maximizando a margem existe uma maior chance destes dados serem classificados corretamente (se posicionando no *lado correto* do hiperplano que separa as classes).

3.2. Resposta (b)

A ideia da regularização é de reduzir a flexibilidade do modelo utilizado, fazendo uma troca entre viés e variância. O objetivo é que um modelo mais *bem comportado* consiga generalizar melhor que um modelo mais flexível, e que possa sofrer com *overfitting*.

Entre duas classes linearmente separáveis é possível definir infinitos hiperplanos classificadores. A ideia do SVM é de reduzir a liberdade deste hiperplano, usando como critério a máxima margem, com o intuito de ter um classificador que generalize melhor. Um classificador de máxima margem se apoia nos dados mais *difíceis* de serem classificados (mais próximos da outra classe), de forma que aumenta a chance de que novos dados que venham a se aproximar ainda mais da outra classe (mais *difíceis* de classificar que os dados de treinados) sejam corretamente classificados.

4. Questão 4

(1,2) Numa importante conferência da área de inteligência computacional, foi lançada uma competição no âmbito de um problema de classificação de imagens. Duas jovens pesquisadoras decidiram, então, empregar uma CNN já consolidada na literatura (e.g. uma ResNet) para resolver a tarefa. Partindo de uma inicialização aleatória para os pesos da rede escolhida, e utilizando apenas os dados disponíveis na competição, elas, ao final do treinamento, observaram um nível de acurácia bastante adequado. No entanto, quando exposta a novos padrões de entrada (conjunto de teste), esta rede não atingiu um bom desempenho, tendo ficado muito abaixo das expectativas iniciais de projeto. Recomende (com argumentos bem fundamentados) duas estratégias para amenizar este problema.

4.1. Resposta

Uma possibilidade é que a base de dados utilizada pelas pesquisadoras não tem tamanho adequado para o treinamento de uma rede muito profunda. Redes como a ResNet são muito profundas, com um número significativo de pesos a serem ajustados. Estas redes funcionam bem porque foram ajustadas com um número **muito** grande de dados. Uma forma de buscar contornar o problema do limitado número de dados é utilizar *data augmentation*, gerando amostras adicionais a partir dos próprios dados (rotação, translação, ...). É uma estratégia um pouco limitada, pois depende muito da quantidade de dados disponível, que pode ainda ser insuficiente. Pode ser mais viável associar o *data augmentation* à utilização de apenas parte da rede profunda conhecida, de forma a ter uma melhor relação entre a quantidade de amostras (para treino, validação e teste) e o número de pesos ajustáveis.

Uma estratégia mais interessante é fazer *transfer learning*, ou seja, utilizar os pesos da rede já treinados e adaptar a estrutura da rede para o problema específico. Em diferentes publicações foi explorada a estrutura destas redes *famosas*, verificando que as camadas vão se especializando em elementos cada vez mais complexo à medida que a informação segue pela rede. As primeiras camadas se especializam em formas simples (semicírculo, linha vertical, ...), e camadas profundas em elementos mais complexos (olho, boca, ...). Boa parte destas atividades podem ser úteis para outros problemas de classificação. Assim é possível utilizar boa parte das primeiras camadas da rede existente, incluir algumas novas camadas e fazer o treinamento dos pesos apenas das novas camadas que foram adicionadas ao final. As últimas camadas da rede original também podem ser ajustados, mas partindo dos valores originalmente ajustados.

5. Questão 5

(1,4) Considere o problema de identificação de tumores cerebrais a partir de um conjunto de 1500 imagens de ressonância magnética (MRI) do crânio, de dimensão 200 x 200, em tons de cinza (veja um exemplo na Figura 1). As possíveis classes do problema são: (0) glioma; (1) meningioma; (2) pituitário; (3) saudável (normal). Descreva detalhadamente como uma rede MLP (multilayer perceptron), com uma única camada intermediária, poderia ser aplicada a este problema, indicando aspectos referentes à arquitetura da rede, bem como à metodologia como um todo (e.g. tratamento dos dados, treinamento do modelo etc.).

5.1. Resposta

6. Questão 6

Ao realizar um processo de PCA sobre uma base de dados, um pesquisador obteve os seguintes autovalores para a matriz de autocorrelação:

$$\lambda = \begin{bmatrix} 0,2 \\ 2,3 \\ 1,5 \\ 3 \\ 0,05 \\ 0,15 \\ 0,5 \\ 0,3 \end{bmatrix} \quad (6.1)$$

- (a) (0,3) Qual é a dimensão do espaço original dos dados?
 (b) (0,7) Caso se busque uma preservação de ao menos 90% do conteúdo energético dos dados, qual é o menor número possível de componentes principais empregadas? Justifique.

6.1. Resposta (a)

Dado que a matriz de autocorrelação tem posto completo, e que a matriz de autocorrelação é aproximadamente a média dos produtos externos dos dados de entrada, o número de autovalores coincide com a dimensão do espaço original: 8.

6.2. Resposta (b)

A parcela de variância associada a cada componente principal é dada pela razão entre o valor do autovalor associado e a soma de todos os autovalores. Para preservar ao menos 90% da variância observada nos dados (conteúdo energético) precisamos usar ao menos os 4 componentes principais associados aos 4 maiores autovalores.

i	λ_i	$\sum_{j=1}^i \lambda_j$	$\frac{\sum_{j=1}^i \lambda_j}{\sum_{j=1}^8 \lambda_j}$
1	3.00	3.00	0.375
2	2.30	5.30	0.663
3	1.50	6.80	0.850
4	0.50	7.30	0.913
5	0.30	7.60	0.950
6	0.20	7.80	0.975
7	0.15	7.95	0.994
8	0.05	8.00	1.000

7. Questão 7

Considere que uma CNN tenha sido aplicada à classificação de imagens de retina em três classes: normal, glaucoma e catarata. Na etapa de teste, a seguinte matriz de confusão foi obtida:

Classe real	Classe estimada		
	Normal	Glaucoma	Catarata
Normal	410	15	25
Glaucoma	10	100	40
Catarata	55	25	100

- (a) (0,4) Considerando a classe **Glaucoma** como positiva, obtenha as quantidades de verdadeiros positivos (TP), falsos positivos (FP), verdadeiros negativos (TN) e falsos negativos (FN).
- (b) (0,6) Determine o valor da acurácia balanceada atingida pela CNN, mostrando explicitamente os valores das métricas intermediárias necessárias para o cálculo.

7.1. Resposta (a)

Para encontrar os valores considerando Glaucoma como classe positiva temos que agregar os valores das demais classes:

1. O número de verdadeiros positivos permanece o mesmo.
2. A coluna de classe positiva estimada tem o mesmo total que a coluna de Glaucoma estimado da tabela anterior.
3. A linha de classe positiva real tem o mesmo total que a linha de Glaucoma real da tabela anterior.
4. O número de negativos verdadeiros é a soma dos termos fora da linha ou coluna Glaucoma da tabela anterior.

Classe real	Classe estimada	
	Positiva	Negativa
Positiva	TP=100	FN=50
Negativa	FP=40	TN=590

7.2. Resposta (b)

A acurácia balanceada é a média do *recall* para cada classe. E *recall* é a taxa de positivos verdadeiros: $TPR = \frac{TP}{TP+FN}$. O cálculo dos valores de TP e FN de cada classe seguem a lógica apresentada no item anterior. A acurácia balanceada da CNN é **0.711**.

Classe	TP	FN	<i>Recall</i>
Normal	410	40	0.911
Glaucoma	100	50	0.667
Catarata	100	80	0.556
Média			0.711

8. Questão 8

- (a) (1,0) Explique como funciona o mecanismo de auto-atenção de um transformer.
- (b) (0,6) De que maneira um transformer consegue aproveitar possíveis interdependências de curto e longo prazo em uma sequência de entrada apesar de não ter recorrência?

8.1. Resposta (a)

8.2. Resposta (b)