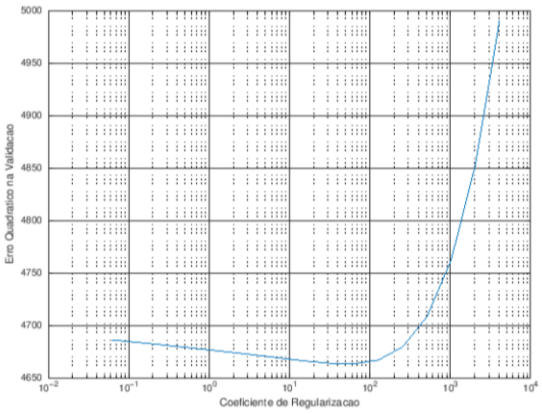
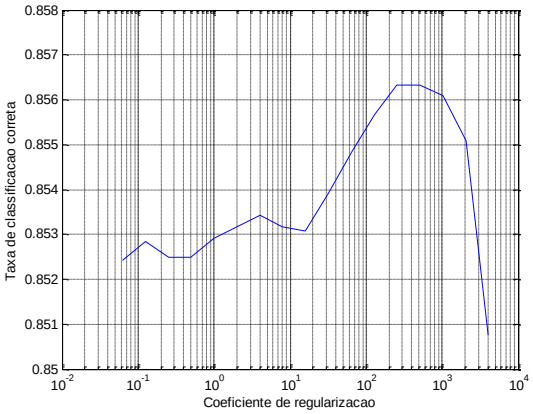
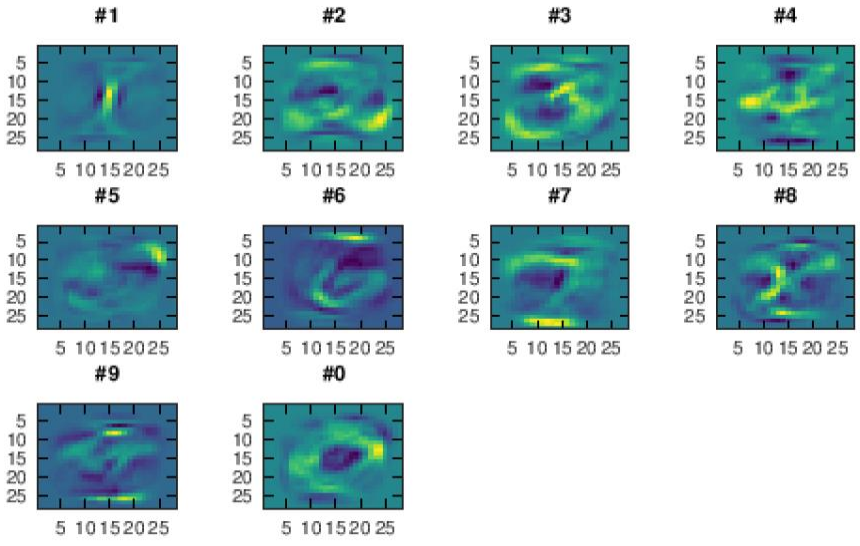
EA072 – Turma A (2s2019)
Exercícios de Fixação de Conceitos – EFC 1
Atividade Individual – Peso 4 – Data de Entrega: 24/09/2019

Questão 1)

Objetivo: Síntese de modelos lineares para classificação de padrões.
O que deve ser entregue por e-mail: 1 arquivo 'w[RA_do(a)_aluno(a)].txt' com a matriz *W*, conforme especificado no enunciado da questão, e 1 arquivo [RA_do(a)_aluno(a)].pdf com os valores dos 2 coeficientes de regularização encontrados na busca (um para o erro quadrático médio e outro para o erro de classificação), 2 gráficos semilog do desempenho dos classificadores junto aos dados de validação para os 11 valores de coeficiente de regularização sugeridos (um para o erro quadrático médio e outro para o erro de classificação), 2 gráficos semilog com uma busca refinada no entorno do mínimo dos gráficos anteriores, e 1 gráfico de calor para os parâmetros de cada um dos 10 classificadores lineares. No arquivo TXT e no gráfico de calor, opte pelo classificador produzido pelo critério de desempenho associado ao erro de classificação junto aos dados de validação. Apresente a matriz de confusão e também exemplos de dígitos classificados equivocadamente.
Os gráficos devem ter aproximadamente os formatos e padrões de cores ilustrados a seguir.







Caso de estudo: Base de dados MNIST (http://yann.lecun.com/exdb/mnist/), ver Figura 1 abaixo, a qual contém dígitos manuscritos rotulados em 10 classes (são os dígitos de '0' a '9'), sendo 60.000 amostras para treinamento e 10.000 amostras para teste (os dados de teste não devem ser empregados em nenhuma fase do processo de síntese do classificador). Cada imagem de entrada contém 784 pixels (no intervalo [0,255], correspondente a níveis de cinza), visto que a dimensão é 28 × 28 pixels. Considere que a classe 10 corresponde ao dígito '0'.

Dados disponibilizados: Visando facilitar a implementação em Octave / Matlab, o professor está fornecendo arquivos *.mat para os dados de treinamento e teste, contendo 2 matrizes cada. Arquivo de treinamento [data.mat]: Uma matriz *X* de dimensão 60.000 × 784, com a imagem de um dígito por linha da matriz, com cada pixel normalizado no intervalo [0,1] e uma matriz *S* de dimensão 60.000 × 10, com as saídas desejadas, sendo '1' para a classe do dígito da linha correspondente da matriz *X* e '0' para as demais classes. Arquivo de teste [test.mat]: Mesma configuração, mas para 10.000 amostras e matrizes *Xt* e *St*. O professor também disponibiliza um programa *.m para visualização da imagem dos dígitos e um código em Python para carregar os arquivos *.mat.

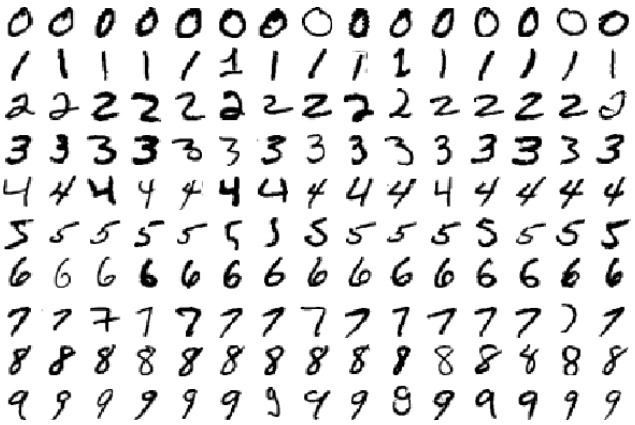


Figura 1 – Exemplos de imagens do conjunto de dados MNIST. Nos dados, a classe '0' é a última, e não a primeira, como na figura acima.

Obtenha um modelo de classificação linear, de tal modo que a saída para cada classe seja produzida como segue, já supondo que os 784 pixels foram empilhados formando um vetor de entrada, **contendo uma entrada fixa de polarização como primeira coluna da matriz *X***:

$$c_j = w_{0j} + w_{1j}x_1 + w_{2j}x_2 + \cdots + w_{784\,j}x_{784},\ j \in \{1,\cdots,10\}$$

sendo que os parâmetros do modelo linear devem compor uma matriz *W* de dimensão 785 × 10 e devem ser obtidos de forma fechada, a partir de uma única expressão algébrica. Com isso, o coeficiente de regularização deve ser único para as 10 classes. Deve-se buscar um bom coeficiente de regularização, o qual tem que ser maior do que zero, pois a matriz de dados de entrada *X* não tem posto completo. Para tanto, tomar parte dos dados de treinamento como validação (Sugestão: 40.000 amostras para treinamento e 20.000 amostras para validação) para poder implementar esta busca pelo melhor coeficiente de regularização, considerando dois critérios de desempenho para o classificador: erro quadrático médio e taxa de erro de classificação. O coeficiente de regularização deve ser buscado iniciando por uma busca no conjunto de valores candidatos:

$$\left\{2^{-10}, 2^{-8}, \cdots, 2^{0}, 2^{+2}, \cdots, 2^{+10}\right\}$$

Uma vez encontrado um valor adequado para o coeficiente de regularização, usar todas as 60.000 amostras de treinamento para sintetizar o classificador linear. Tomando o classificador com melhor desempenho em termos de taxa de erro de classificação, fornecer ao professor um arquivo *.txt com a matriz *W* de dimensão 785 × 10. Considerando os dois critérios de desempenho, indicar também o valor adotado, em cada caso, para o coeficiente $\lambda > 0$, já que a matriz *X* não tem posto completo. De posse desta matriz, fornecida individualmente pelos(as) alunos(as), o professor vai estimar, para cada aluno(a), o desempenho junto aos dados de teste, em termos de taxa média de acerto (considerando todas as classes) e taxa média de acerto por classe. Obtenha também a matriz de confusão, indicando quais são as classes mais desafiadoras para o classificador. Apresente também exemplos de dígitos classificados de forma equivocada pelo classificador. Use sempre o conjunto de dados de treinamento e não o conjunto de dados de teste.

Sugestão: Para resolver esta questão, sugere-se o emprego do ambiente de programação GNU Octave (https://www.gnu.org/software/octave/download.html), ou então o Matlab.

Observação: Está subentendido um classificador com uma saída por classe, de tal modo que a classe indicada é aquela associada à saída de maior valor numérico.

A seguir, serão apresentados conceitos fundamentais que devem ser utilizados para resolver esta questão.

1 Regressão de quadrados mínimos

- Considere que você tenha à disposição um conjunto de *N* amostras de treinamento na forma: $\left\{\left(\mathbf{x}_i, y_i\right)\right\}_{i=1}^{N}$, onde $\mathbf{x}_i \in \Re^n$, *i*=1,...,*N*. Suponha também que *N* > *n*.
- A regressão de quadrados mínimos busca um vetor $\mathbf{w} \in \Re^n$ que minimiza:

$$J\left(\mathbf{w}\right) = \sum_{i=1}^{N}\left(\mathbf{x}_i{}^T\mathbf{w} - y_i\right)^2 .$$

- Fazendo $X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1n} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{N1} & x_{N2} & \cdots & x_{Nn} \end{bmatrix}$, $\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix}$ e acrescentando um elemento de *offset* ao vetor **w**, constata-se que a regressão de quadrados mínimos requer a solução de um sistema linear sobredeterminado, na forma:

$$\min_{\mathbf{w}} \left\| X\mathbf{w} - \mathbf{y} \right\|_2^2 .$$

- Caso a matriz *X* tenha posto completo, a Seção 2 fornecerá a solução para este problema de otimização, na forma:

$$\mathbf{w} = \left(X^T X\right)^{-1} X^T \mathbf{y} .$$

- Caso a matriz *X* não tenha posto completo, a Seção 3 fornecerá a solução para este problema de otimização, na forma:

$$\mathbf{w} = \left(X^T X + \lambda I\right)^{-1} X^T \mathbf{y} \text{, com } \lambda > 0 .$$

2 Resolvendo sistemas lineares sobredeterminados

- O sistema $X\mathbf{w} = \mathbf{y}$, com $X \in \Re^{N\times(n+1)}$, $\mathbf{w} \in \Re^{(n+1)\times 1}$, $\mathbf{y} \in \Re^{N\times 1}$ e $N \geq (n+1)$, sendo X uma matriz de posto completo, tem garantia de solução exata apenas quando $N = (n+1)$. Na situação em que $N > (n+1)$, há mais equações do que incógnitas, criando a possibilidade de inconsistência entre algumas equações (regidas pelas linhas da matriz X), que não podem ser satisfeitas simultaneamente.
- A presença de inconsistência impede, portanto, que exista $\mathbf{w}$ tal que $X\mathbf{w} = \mathbf{y}$, mas não impede que se busque encontrar $\mathbf{w}$ que resolva o seguinte problema de programação quadrática:

$$\min_{\mathbf{w}} \sum_{i=1}^{N} \left(\mathbf{x}_i{}^T \mathbf{w} - y_i \right)^2 = \min_{\mathbf{w}} \left\| X\mathbf{w} - \mathbf{y} \right\|_2^2 = \min_{\mathbf{w}} \left(X\mathbf{w} - \mathbf{y} \right)^T \left(X\mathbf{w} - \mathbf{y} \right)$$

- A função-objetivo fica:

$$J(\mathbf{w}) = \left(X\mathbf{w} - \mathbf{y} \right)^T \left(X\mathbf{w} - \mathbf{y} \right) = \mathbf{w}^T X^T X\mathbf{w} - \mathbf{w}^T X^T \mathbf{y} - \mathbf{y}^T X\mathbf{w} + \mathbf{y}^T \mathbf{y} .$$

- Aplicando a condição necessária de otimalidade, que afirma que o gradiente se anula nos pontos extremos da função-objetivo, resulta:

$$\frac{dJ(\mathbf{w})}{d\mathbf{w}} = 2X^T X\mathbf{w} - 2X^T \mathbf{y} = 0 \Rightarrow X^T X\mathbf{w} = X^T \mathbf{w} .$$

- Se a matriz X for de posto completo, então $X^T X$ tem inversa, o que produz:

$$\mathbf{w} = \left(X^T X \right)^{-1} X^T \mathbf{y} .$$

- Esta equação representa a famosa solução de quadrados mínimos para um sistema linear de equações que não necessariamente admite solução exata.

3 Quadrados mínimos com regularização

- Tomando o mesmo cenário das Seções 1 e 2, é possível adicionar um termo de regularização, que penaliza o crescimento da norma do vetor $\mathbf{w}$, produzindo o problema regularizado de regressão de quadrados mínimos, também denominado de *ridge regression*, na forma:

$$\min_{\mathbf{w}} \left\| X\mathbf{w} - \mathbf{y} \right\|_2^2 + \lambda \left\| \mathbf{w} \right\|_2^2, \ \lambda \geq 0 .$$

- Aplicando a condição necessária de otimalidade, como feito na Seção 2, obtém-se como solução ótima:

$$\mathbf{w} = \left(X^T X + \lambda I \right)^{-1} X^T \mathbf{y} .$$

- A definição de um valor para o parâmetro de regularização $\lambda \geq 0$ pode ser feita por técnicas de validação cruzada. Lembre-se que, quando a matriz X não tem posto completo, necessariamente deve-se tomar $\lambda > 0$.
- O modelo regularizado de regressão linear assume então a forma:

$$\mathbf{w}^T \mathbf{x} = \mathbf{y}^T X \left(X^T X + \lambda I \right)^{-1} \mathbf{x} .$$

- Note que é possível, e deve ser feito na atividade apresentada, expandir o vetor $\mathbf{y}$ com a saída desejada de modo a considerar tantas colunas quanto classes. Com isso, o vetor $\mathbf{w}$ também vai corresponder a uma matriz, com o mesmo número de colunas de $\mathbf{y}$.

Questão 2)

Objetivo: Síntese de modelos não-lineares para classificação de padrões, mas lineares nos parâmetros ajustáveis. Para tanto, repetir o fluxograma da Questão 1, mas agora para uma máquina de aprendizado extremo (ELM) com 500 neurônios na camada intermediária e pesos definidos aleatoriamente, com distribuição normal e desvio padrão 0,2. Não variar esses pesos, ou seja, usar a mesma camada intermediária para todos os experimentos solicitados.

O que deve ser entregue: 1 arquivo [RA_do(a)_aluno(a)].pdf com os valores dos 2 coeficientes de regularização encontrados na busca (um para o erro quadrático médio e outro para o erro de classificação) e 2 gráficos semilog do desempenho dos classificadores junto aos dados de validação para os 11 valores de coeficiente de regularização sugeridos (um para o erro quadrático médio e outro para o erro de classificação), seguidos pelos gráficos da fase de refinamento. Análises a serem feitas: (2.1) Considerando os dados de treinamento, apresente a matriz de confusão e alguns exemplos de dígitos classificados de forma equivocada. (2.2) Seguindo a sugestão de empregar 500 unidades na camada intermediária da rede neural, apresente argumentos para sustentar o ganho de desempenho verificado e uma execução em menor tempo computacional, quando comparado com o classificador linear da Questão 1. (2.3) Compare os coeficientes de regularização obtidos nessas duas primeiras atividades (classificador linear e ELM) e procure justificar a diferença. (2.4) O que você espera que ocorra com o coeficiente de regularização caso os neurônios da camada intermediária sejam inicializados com pesos sinápticos distintos a cada execução?

Especificação para as Questões 3 e 4: Trabalhe no ambiente Anaconda e elabore o seu relatório como um Jupyter notebook. Deve haver, assim, um único relatório no Jupyter notebook para cada questão.

Questão 3)

Tomando o mesmo problema de classificação de dados da base MNIST, use o framework Keras, tendo o TensorFlow como *backend* e realize o treinamento de uma rede neural MLP. Busque inspiração em resultados já publicados na literatura e/ou adote o procedimento de tentativa-e-erro para definir, da melhor forma que você puder, o número de camadas intermediárias, o número de neurônios por camada, o algoritmo de treinamento, a taxa de *dropout* (onde for pertinente) e o número de épocas de treinamento. Procure trabalhar com a média de várias execuções (junto a cada configuração candidata) para se chegar a um índice de desempenho mais estável. Um código que pode servir de ponto de partida é fornecido a seguir, considerando uma camada intermediária, 512 neurônios nesta camada intermediária, ADAM, ocorrência de dropout com taxa de 50% e 5 épocas de treinamento. A sua proposta deve ser capaz de superar o desempenho desta sugestão de ponto de partida e você deve descrever de forma objetiva o caminho trilhado até a sua configuração final de código para a rede neural MLP, assim como uma comparação de desempenho com a sugestão abaixo.

```
import tensorflow as tf
import os
mnist = tf.keras.datasets.mnist

(x_train, y_train),(x_test, y_test) = mnist.load_data()
x_train, x_test = x_train / 255.0, x_test / 255.0

model = tf.keras.models.Sequential([
  tf.keras.layers.Flatten(),
  tf.keras.layers.Dense(512, activation=tf.nn.relu),
  tf.keras.layers.Dropout(0.5),
  tf.keras.layers.Dense(10, activation=tf.nn.softmax)
])
model.compile(optimizer='adam',
              loss='sparse_categorical_crossentropy',
              metrics=['accuracy'])

model.fit(x_train, y_train, epochs=5)
model.evaluate(x_test, y_test)

model_json = model.to_json()
json_file = open("model_MLP.json", "w")
json_file.write(model_json)
json_file.close()
model.save_weights("model_MLP.h5")
print("Model saved to disk")
os.getcwd()
```

Questão 4)

Tomando o mesmo problema de classificação de dados da base MNIST e novamente usando o framework Keras, tendo o TensorFlow como *backend*, realize o treinamento de uma rede neural com camadas convolucionais, usando *maxpooling* e *dropout*. Mais uma vez, é apresentada a seguir uma sugestão de código e de configuração de hiperparâmetros que pode ser tomada como ponto de partida. A sua proposta deve superar, em termos de desempenho médio, essa sugestão fornecida abaixo. Compare os resultados (em termos de taxa de acerto na classificação) com aqueles obtidos pelos três tipos de máquinas de aprendizado adotadas nas atividades anteriores: classificador linear (Questão 1), ELM (Questão 2) e MLP (Questão 3). Descreva de forma objetiva o caminho trilhado até a sua configuração final de código.

Observações gerais:

- Devem ser entregues um único arquivo TXT (associado à Questão 1), um único arquivo PDF (associado às Questões 1 a 4) e dois notebooks Jupyter (um para a Questão 3 e outro para a Questão 4).
- Nas atividades das Questões 1 e 2, procure fixar a semente do gerador pseudo-aleatório, de modo a sempre produzir o mesmo resultado.
- Os entregáveis devem ser enviados para o e-mail [vonzuben@dca.fee.unicamp.br] com Assunto [EA072 - EFC1] até 23h59 do prazo final. Aguarde um retorno com a confirmação de recebimento.

```
import tensorflow as tf
import os
mnist = tf.keras.datasets.mnist

(x_train, y_train),(x_test, y_test) = mnist.load_data()

# reshape to be [samples][width][height][pixels]
x_train = x_train.reshape(x_train.shape[0], 28, 28, 1)
x_test = x_test.reshape(x_test.shape[0], 28, 28, 1)

x_train, x_test = x_train / 255.0, x_test / 255.0

model = tf.keras.models.Sequential()
model.add(tf.keras.layers.Conv2D(32, kernel_size=(3, 3),
                                 activation='relu',
                                 input_shape=(28, 28, 1)))
model.add(tf.keras.layers.Conv2D(64, (3, 3), activation='relu'))
model.add(tf.keras.layers.MaxPooling2D(pool_size=(2, 2)))
model.add(tf.keras.layers.Dropout(0.25))
model.add(tf.keras.layers.Flatten())
model.add(tf.keras.layers.Dense(128, activation='relu'))
model.add(tf.keras.layers.Dropout(0.5))
model.add(tf.keras.layers.Dense(10, activation='softmax'))

model.compile(optimizer='adam',
              loss='sparse_categorical_crossentropy',
              metrics=['accuracy'])

model.fit(x_train, y_train, epochs=5)
model.evaluate(x_test, y_test)

model_json = model.to_json()
json_file = open("model_CNN.json", "w")
json_file.write(model_json)
json_file.close()
model.save_weights("model_CNN.h5")
print("Model saved to disk")
os.getcwd()
```