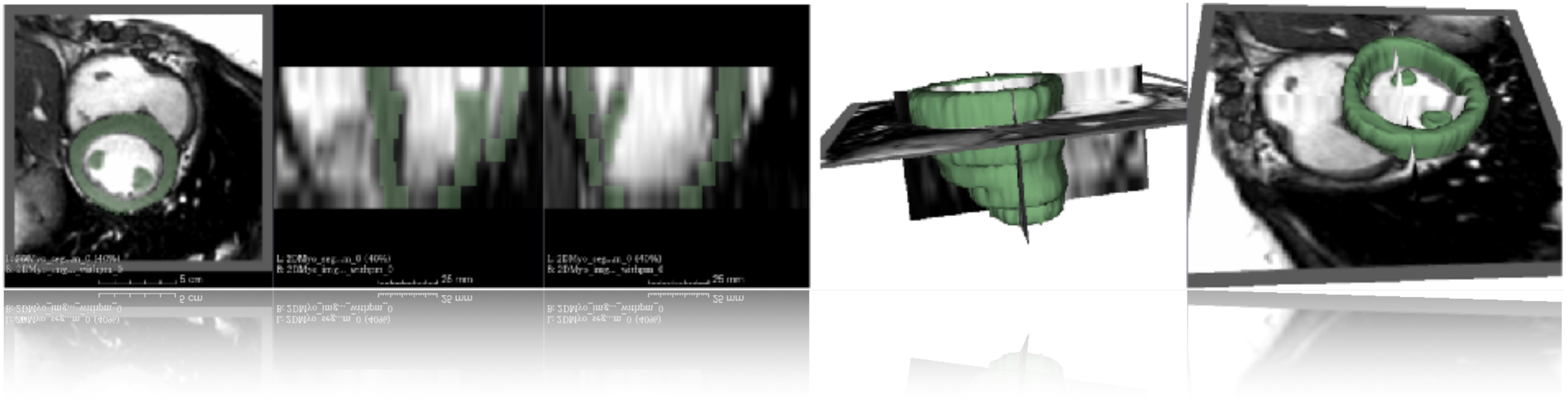


*Departamento de Física Médica - Centro atómico Bariloche - IB*

# Función de costo y optimización

Ariel Hernán Curiale
ariel.curiale@cab.cnea.gov.ar

La mayoría de los slides fueron adaptados de Fei Fei Li, J. Johnson y S. Yeung, cs231n, Stanford 2017.

CONICET

UNCUYO
UNIVERSIDAD NACIONAL DE CUYO

Instituto Balseiro

CNEA

# Clasificación de imágenes

- Nearest Neighbors
- K-Nearest Neighbors
- Linear Classifier :
  - Support Vector Machine
  - Softmax Classifier

Nos quedaba pendiente

# Clasificación lineal

$$f(x, W) = Wx = \hat{W}x + b \qquad \xrightarrow{\text{bias}} \qquad x_0 = 1$$

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 0.2 | 1.0 | 0.0 | … | 0.0 |
| 1.1 | 2.4 | -2 | … | -2 |
| 0.3 | 4 | -0.5 | … | -0.5 |
| 2 | -0.7 | 30 | … | 30 |
| -0.8 | 0.1 | 1.0 | … | 1.0 |

$W$

$\cdot$

| |
|---|
| 1 |
| 112 |
| 123 |
| … |
| 45 |

$x$

$=$

| | |
|---|---|
| 0.2 | cat |
| 1.1 | deer |
| 0.3 | dog |
| 2 | frog |
| -0.8 | horse |

$$S = f(x, W)$$

¿Cómo calculamos los pesos?

¿Porque no usar cuadrados mínimos?

# Loss Function, Cost Function, Objective

# Función de costo

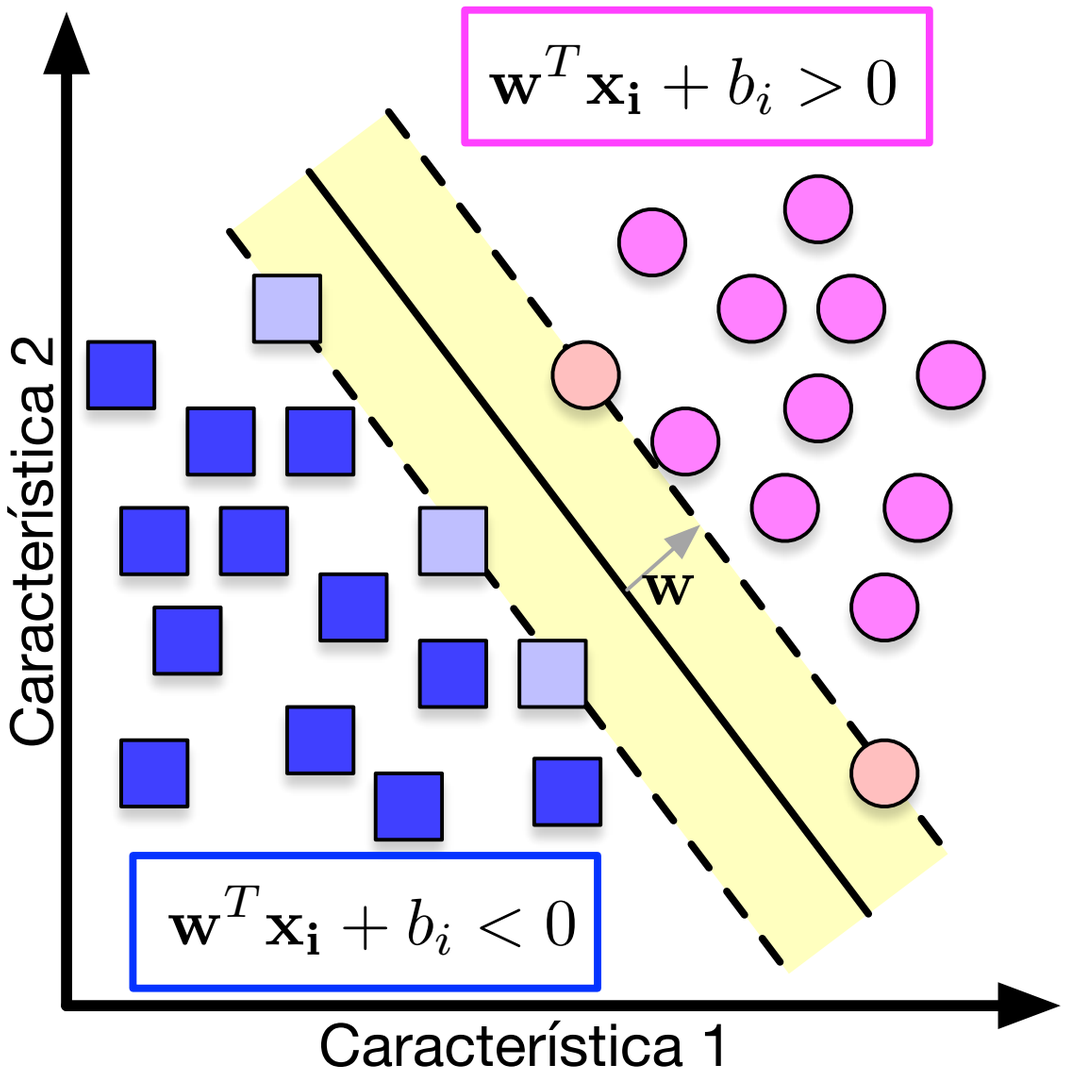
- Función de costo: loss function, cost function, objective
  - Nos da una idea de cuán bien estamos resolviendo el problema dado un conjunto de datos $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{N}$

$$\text{loss} = \frac{1}{N} \sum_i L(f(x_i, W), y_i)$$

- Existen diferentes formas de definir esta función de costo y dependen fuertemente del tipo de problema.

# Support Vector Machine

- Idea general de Support Vector Machine: encontrar un hiperplano de margen máximo




Solución: $\mathbf{w}^T\mathbf{x_i} + b_i = 0$

Función de clasificación:

$$f(\mathbf{x}) = \text{sig}(\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b_i = 0)$$

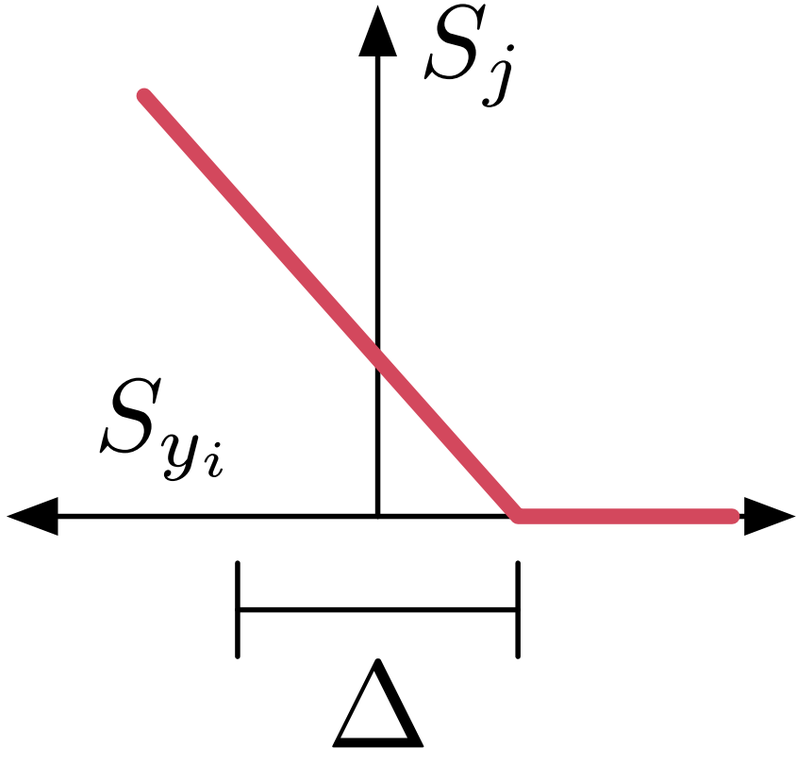
- SVM es un clasificador lineal que optimiza la función de costo bisagra o Hinge loss con una regularización L2

Recordar: Aclarar problemas linealmente separables con kernels al final de todo

# Hinge loss: Multi Class SVM Loss

- Hinge loss: busca que la clasificación correcta de la imagen tenga un valor mayor al de la incorrecta considerando un pequeño margen.

valores obtenido para la clasificación verdadera




$$L = \sum_{j \neq y_i} \max(0, S_j - S_{y_i} + \Delta)$$

donde $S = f(x, W)$

# Support Vector Machine

- Supongamos tenemos sólo 3 clases y 3 ejemplos

Img. source: Stanford CS231n 2017

| | | | |
|---|---|---|---|
| cat | **3.2** | 1.3 | 2.2 |
| car | 5.1 | **4.9** | 2.5 |
| frog | -1.7 | 2.0 | **-3.1** |

L: 2.9

$$\Delta = 1$$

$$L = \sum_{j \neq y_i} \max(0, S_j - S_{y_i} + \Delta)$$

$$\begin{aligned} &= \max(0, 5.1 - 3.2 + 1) + \\ &\quad \max(0, -1.7 - 3.2 + 1) \\ &= \max(0, 2.9) + \max(0, -3.9) \\ &= 2.9 \end{aligned}$$

# Support Vector Machine

- Supongamos tenemos sólo 3 clases y 3 ejemplos

Img. source: Stanford CS231n 2017

| | | | |
|---|---|---|---|
| cat | **3.2** | 1.3 | 2.2 |
| car | 5.1 | **4.9** | 2.5 |
| frog | -1.7 | 2.0 | **-3.1** |
| L: | 2.9 | 0.0 | 12.9 |

$$L = \sum_{j \neq y_i} \max(0, S_j - S_{y_i} + \Delta)$$

$$\text{loss} = \frac{1}{N} \sum_i L(f(x_i, W), y_i)$$

loss = 5.27

# Support Vector Machine

- Supongamos tenemos sólo 3 clases y 3 ejemplos

Img. source: Stanford CS231n 2017

¿Usamos 1 o 100?
¿De que depende?

| | | | |
|---|---|---|---|
| cat | **3.2** | 1.3 | 2.2 |
| car | 5.1 | **4.9** | 2.5 |
| frog | -1.7 | 2.0 | **-3.1** |
| L: | 2.9 | 0.0 | 12.9 |

$$L = \sum_{j \neq y_i} \max(0, S_j - S_{y_i} + \Delta)$$

$$\text{loss} = \frac{1}{N} \sum_i L(f(x_i, W), y_i)$$

loss = 5.27

# Support Vector Machine

- Supongamos tenemos sólo 3 clases y 3 ejemplos

Img. source: Stanford CS231n 2017

$$L = \sum_{j \neq y_i} \max(0, S_j - S_{y_i} + \Delta)$$

$$\text{loss} = \frac{1}{N} \sum_i L(f(x_i, W), y_i)$$

| | | | |
|---|---|---|---|
| cat | **3.2** | 1.3 | 2.2 |
| car | 5.1 | **4.9** | 2.5 |
| frog | -1.7 | 2.0 | **-3.1** |

¿Qué pasa con el valor de loss si cambian un poco los resultados para el ej. del auto?

L: 2.9 0.0 12.9 loss = 5.27

# Support Vector Machine

- Supongamos tenemos sólo 3 clases y 3 ejemplos

Img. source: Stanford CS231n 2017

$$L = \sum_{j \neq y_i} \max(0, S_j - S_{y_i} + \Delta)$$

$$\text{loss} = \frac{1}{N} \sum_i L(f(x_i, W), y_i)$$

| | | | |
|---|---|---|---|
| cat | **3.2** | 1.3 | 2.2 |
| car | 5.1 | **4.9** | 2.5 |
| frog | -1.7 | 2.0 | **-3.1** |
| L: | 2.9 | 0.0 | 12.9 |

¿Qué valores mínimos y máximos puede tomar?

loss = 5.27

# Support Vector Machine

- Supongamos tenemos sólo 3 clases y 3 ejemplos

Img. source: Stanford CS231n 2017

$$L = \sum_{j \neq y_i} \max(0, S_j - S_{y_i} + \Delta)$$

$$\text{loss} = \frac{1}{N} \sum_{i} L(f(x_i, W), y_i)$$

| | | | |
|---|---|---|---|
| cat | **3.2** | 1.3 | 2.2 |
| car | 5.1 | **4.9** | 2.5 |
| frog | -1.7 | 2.0 | **-3.1** |
| L: | 2.9 | 0.0 | 12.9 |

Si delta=1 y W es pequeño, entonces s ~ 0.
Siendo esto así, ¿qué valor tiene loss ?

loss = 5.27

# Support Vector Machine

- Supongamos tenemos sólo 3 clases y 3 ejemplos

Img. source: Stanford CS231n 2017

$$L = \sum_{j \neq y_i} \max(0, S_j - S_{y_i} + \Delta)$$

$$\text{loss} = \frac{1}{N} \sum_{i} L(f(x_i, W), y_i)$$

| | | | |
|---|---|---|---|
| cat | **3.2** | 1.3 | 2.2 |
| car | 5.1 | **4.9** | 2.5 |
| frog | -1.7 | 2.0 | **-3.1** |
| L: | 2.9 | 0.0 | 12.9 |

¿Qué pasa si la suma es sobre todas las clases?

loss = 5.27

# Support Vector Machine

- Supongamos tenemos sólo 3 clases y 3 ejemplos

Img. source: Stanford CS231n 2017

$$L = \sum_{j \neq y_i} \max(0, S_j - S_{y_i} + \Delta)$$

$$\text{loss} = \frac{1}{N} \sum_i L(f(x_i, W), y_i)$$

| | | | |
|---|---|---|---|
| cat | **3.2** | 1.3 | 2.2 |
| car | 5.1 | **4.9** | 2.5 |
| frog | -1.7 | 2.0 | **-3.1** |
| L: | 2.9 | 0.0 | 12.9 |

¿Qué pasa si usamos el promedio en lugar de la suma?

loss = 5.27

# Support Vector Machine

- Supongamos tenemos sólo 3 clases y 3 ejemplos

Img. source: Stanford CS231n 2017

| | | | |
|---|---|---|---|
| cat | **3.2** | 1.3 | 2.2 |
| car | 5.1 | **4.9** | 2.5 |
| frog | -1.7 | 2.0 | **-3.1** |
| L: | 2.9 | 0.0 | 12.9 |

$$L = \sum_{j \neq y_i} \max(0, S_j - S_{y_i} + \Delta)$$

$$\text{loss} = \frac{1}{N} \sum_i L(f(x_i, W), y_i)$$

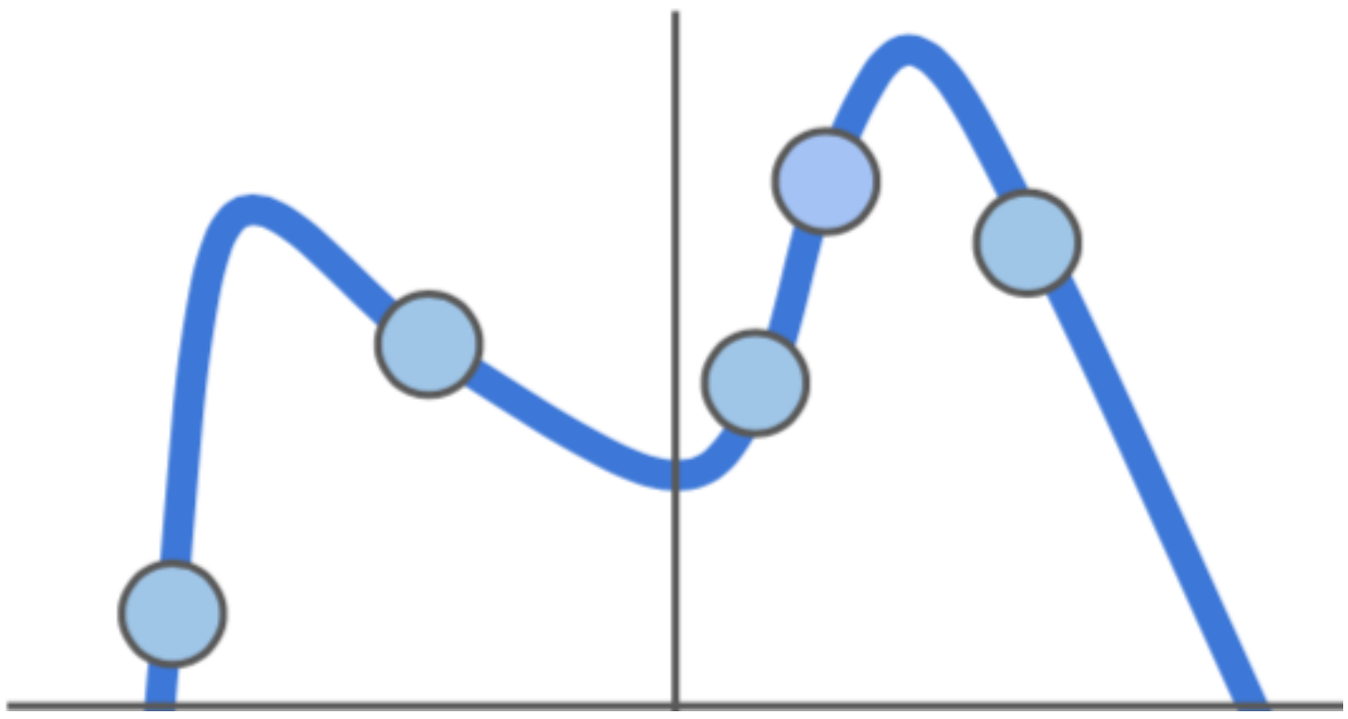
¿Qué pasa si usamos esta métrica ?

$$L = \sum_{j \neq y_i} \max(0, S_j - S_{y_i} + 1)^2$$

loss = 5.27

# Regularización

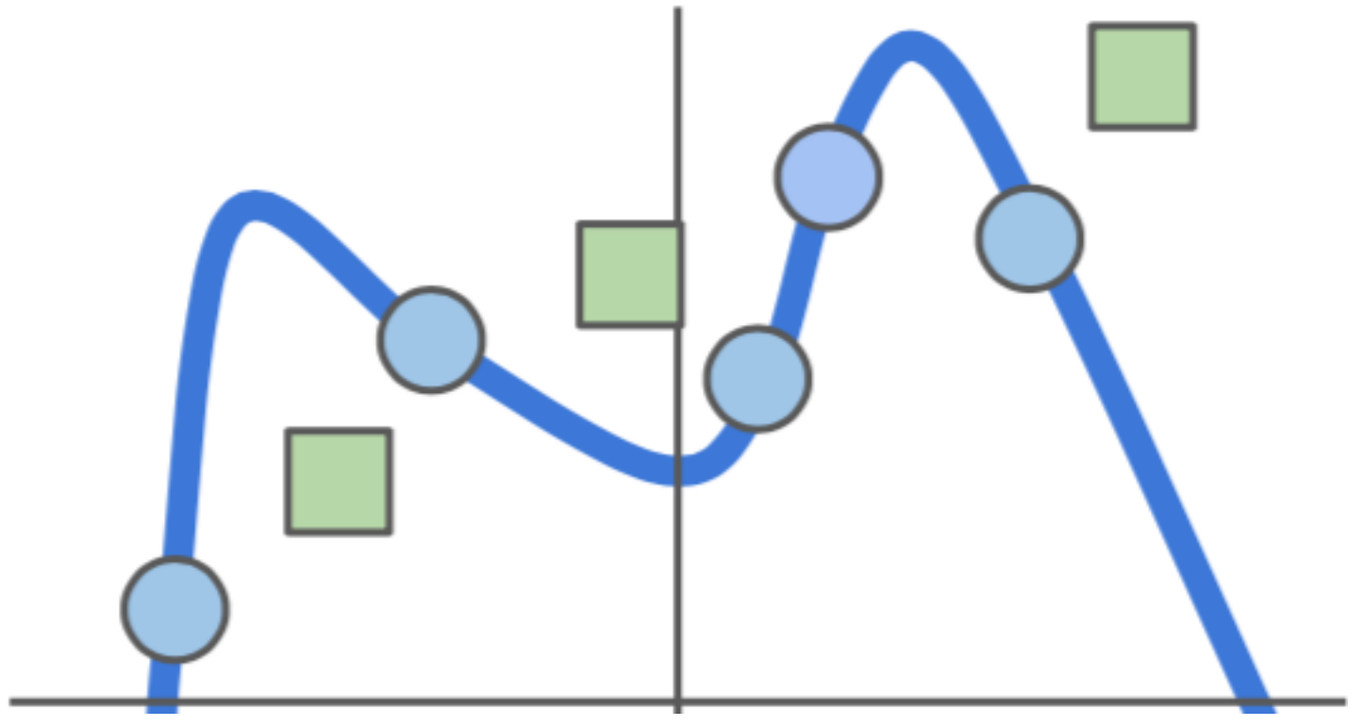
$$\text{loss} = \frac{1}{N} \sum_i L(f(x_i, W), y_i)$$



Img. source: Stanford CS231n 2017

# Regularización

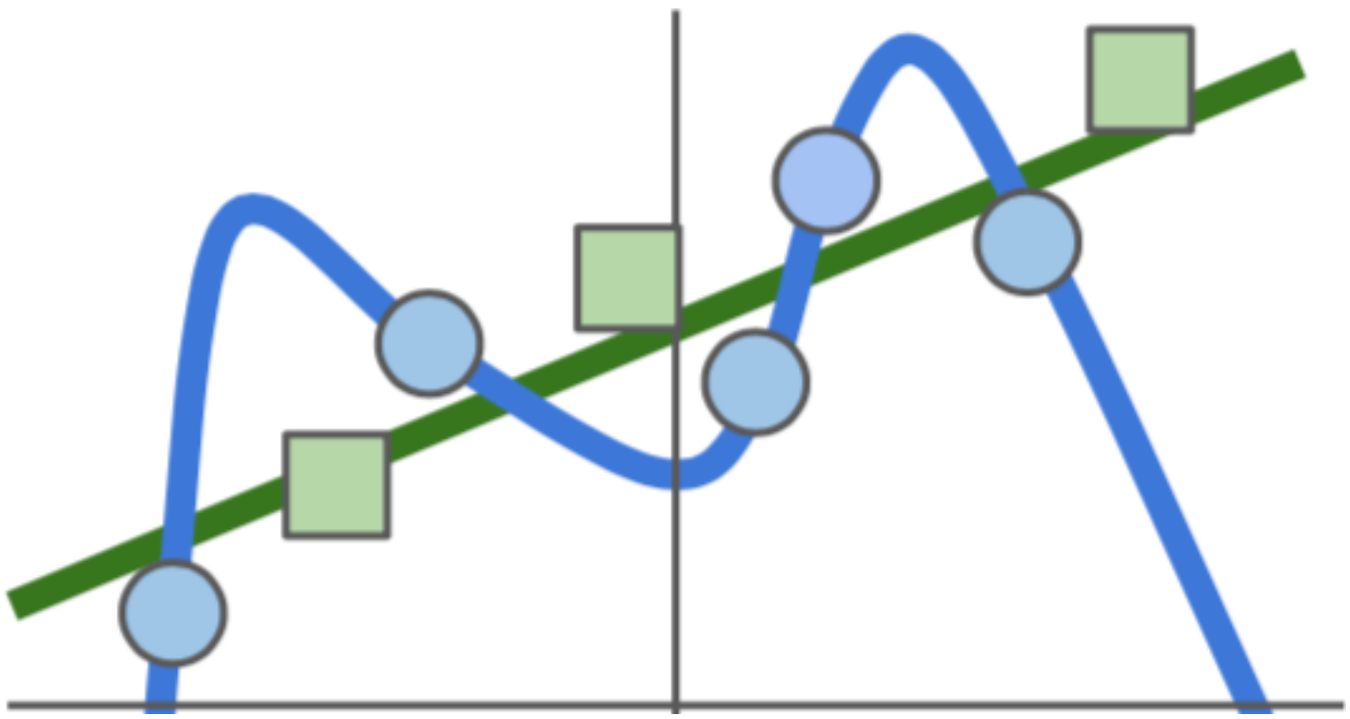
$$\text{loss} = \frac{1}{N} \sum_i L(f(x_i, W), y_i)$$



Img. source: Stanford CS231n 2017

# Regularización

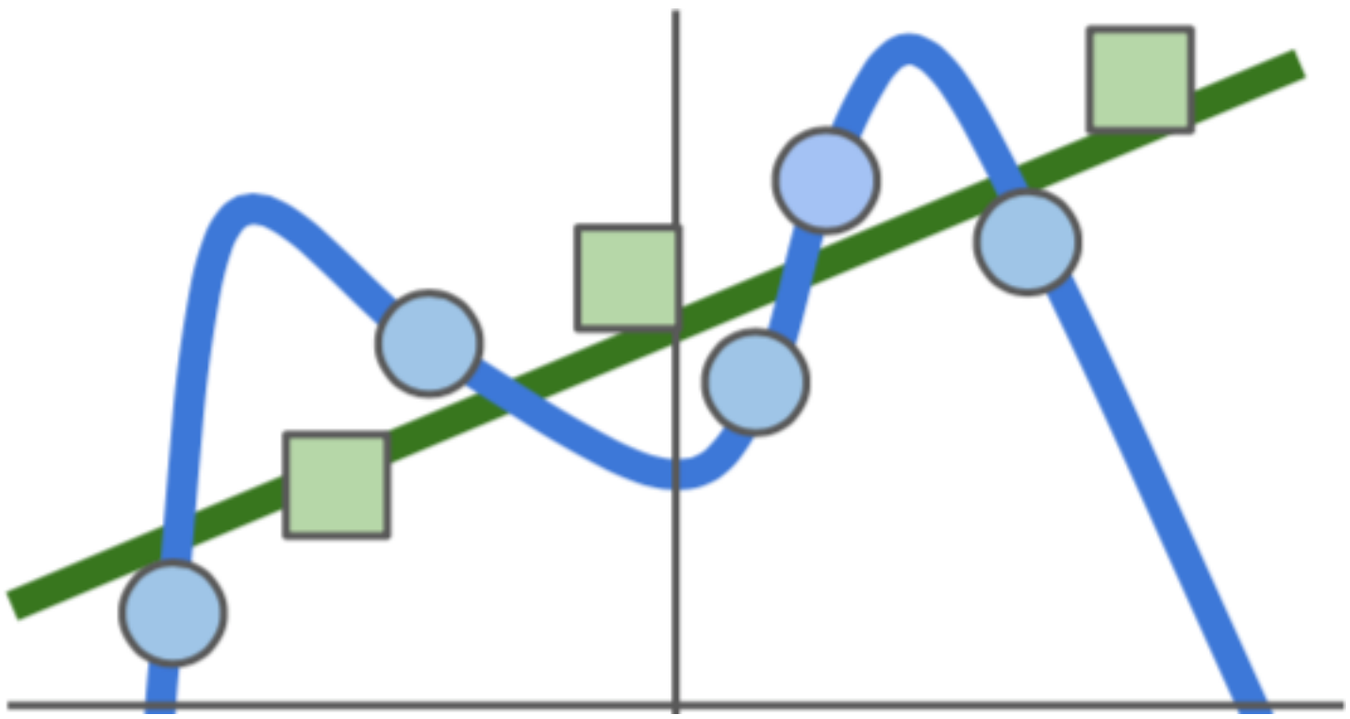
$$\text{loss} = \frac{1}{N} \sum_i L(f(x_i, W), y_i)$$



Img. source: Stanford CS231n 2017

# Regularización

$$\text{loss} = \frac{1}{N} \sum_i L(f(x_i, W), y_i) + \lambda R(W)$$



Img. source: Stanford CS231n 2017

# Regularización

$$\text{loss} = \frac{1}{N}\sum_{i}^{N}\sum_{j \neq y_i} \max(0, f(x_i, W)_j - f(x_i, W)_{y_i} + \Delta) + \lambda R(W)$$

- L2 $R(W) = \sum_{k,l} W_{k,l}^2$ (0.5 * L2)
- L1 $R(W) = \sum_{k,l} |W_{k,l}|$
- Elastic net (L1 + L2) $R(W) = \sum_{k,l} \beta W_{k,l}^2 + |W_{k,l}|$
- Max norm regularization
- Dropout
- Batch normalization también aplica un efecto de regularización

# Clasificación de imágenes

- Nearest Neighbors
- K-Nearest Neighbors
- Linear Classifier :
  - Support Vector Machine
  - Softmax Classifier

Nos quedaba pendiente

# Softmax Classifier

- Al igual que SVM, en Softmax la función de activación es lineal

$$f(x, W) = Wx$$

done cambia su función de costo, si lo comparamos con SVM

- Softmax es la generalización del clasificador conocido como Binary Logistic Regression
- La función de costo Softmax también es conocida como Categorical Cross Entropy

# Softmax Classifier

- Interpretando los resultados como log probabilidades no normalizadas para cada clase tenemos

$$P(Y = j|X = x_i) = \frac{e^{f_j(x_i)}}{\sum_k e^{f_k(x_i)}}$$

softmax

$$f_i(z) = \frac{e^{z_i}}{\sum_j e^{z_j}}$$

- Ahora buscamos maximizar la log likelihood

$$L = -\log P(Y = j|X = x_i)$$

# Softmax Classifier

- Al igual que SVM sigue siendo un clasificador lineal (**Wx**), pero en lugar de utilizar la función de costo de Hinge utilizamos la log likelihood:

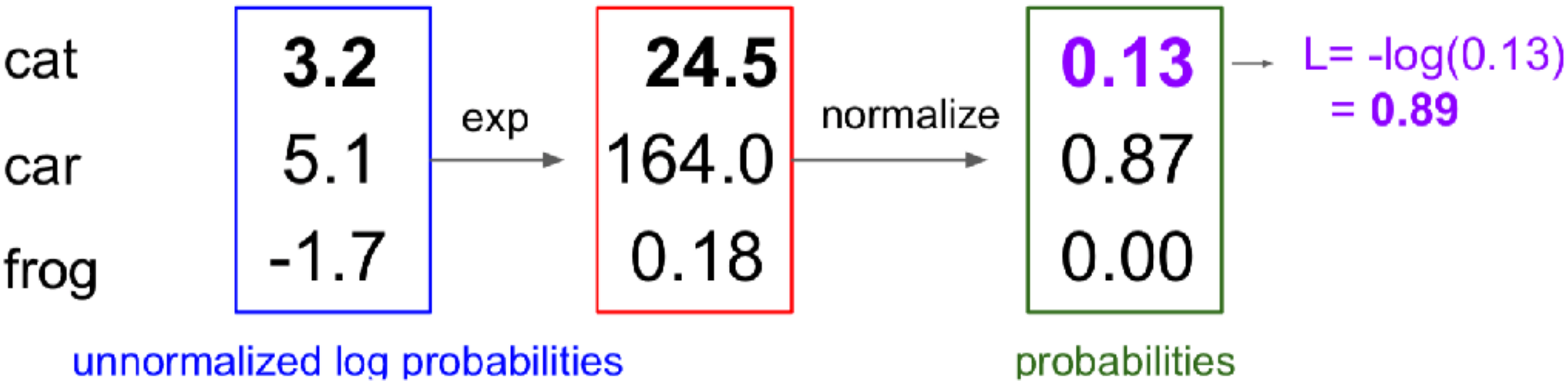
$$L = -\log\left(\frac{e^{fy_i}}{\sum_j e^{f_j}}\right) = -f_{y_i} + \log\left(\sum_j e^{f_j}\right)$$

$$\text{loss} = \frac{1}{N}\sum_i L(f(x_i, W), y_i) + \lambda R(W)$$

# Softmax Classifier

$$L = -\log\left(\frac{e^{f_{y_i}}}{\sum_j e^{f_j}}\right) = -f_{y_i} + \log\left(\sum_j e^{f_j}\right)$$

unnormalized probabilities




Img. source: Stanford CS231n 2017

# Softmax Classifier

- Teoría de la información: La entropía cruzada entre la distribución real $p$ y la distribución estimada $q$ se define

$$H(p,q) = -\sum_x p(x) \log q(x)$$

- El clasificador softmax minimiza la entropía cruzada entre las probabilidades estimadas (log prob. normalizada) y la distribución real (i.e p=(0,…,1,…0))
  - En otras palabras, esta función de costo busca que la distribución estimada tengan su centro de masa en la clasificación correcta

# SVM vs Softmax

- SVM: Sólo interesa que la correcta gane, sin importar la diferencia entre las otras clases.
- Softmax: Busca mejorar la relación entre las clases de la clasificación ya que intenta maximizar la probabilidad de la correcta (que sea 1) y minimizar la de la incorrecta a cero.

- Hasta acá definimos tres formas de clasificar imágenes, KNN, SVM y Softmax.
- SVM y Softmax son ambos lineales y su principal diferencia radica en la función de costo que utilizan Hinge vs Categorical Cross Entropy
- También vimos el efecto de la regularización y posibles formas de aplicarla (L1, L2 dropoouts, …)

¿Cómo calculamos los pesos o parámetro de nuestro modelo de clasificación lineal?

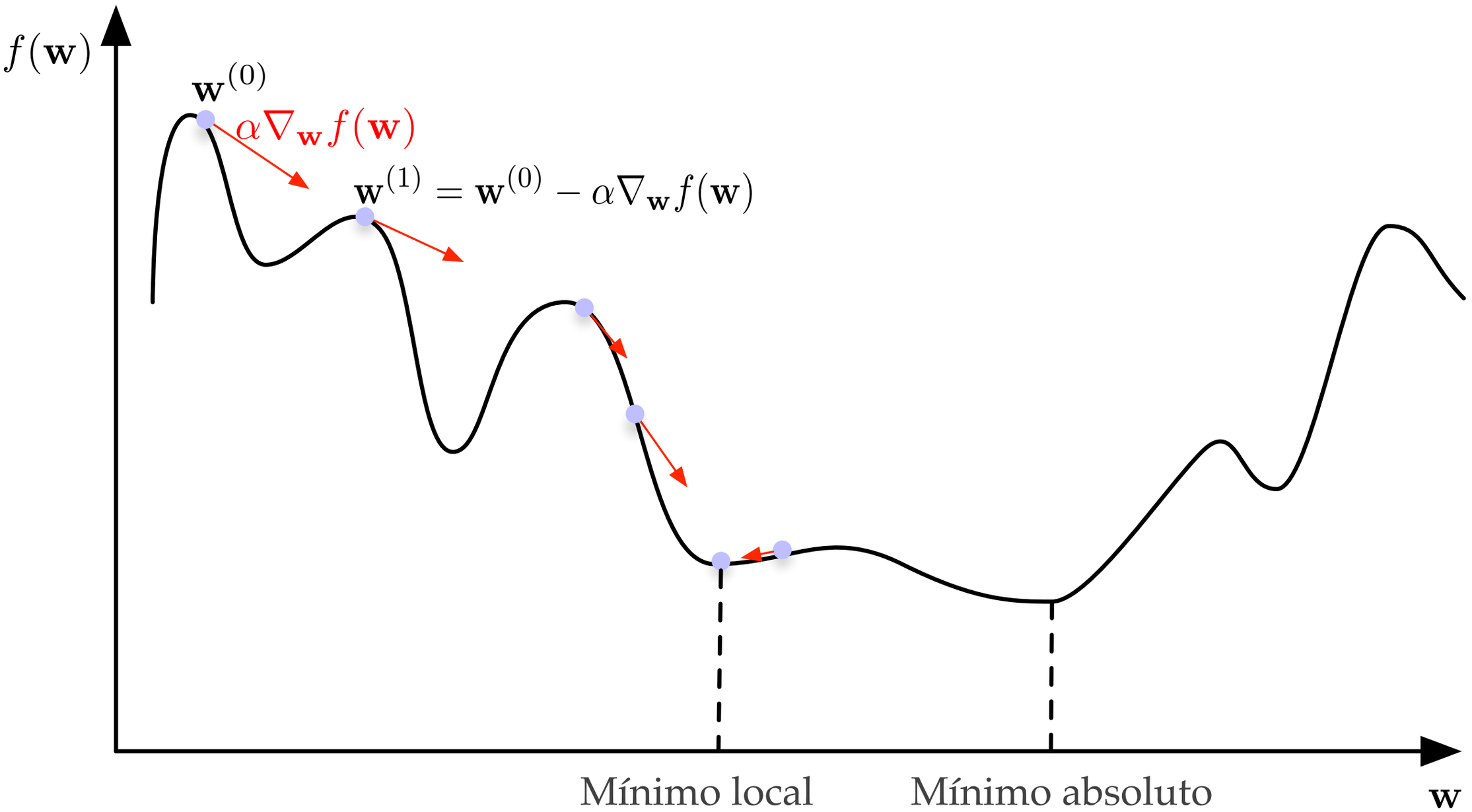
# Optimización

# Optimización

Copyright: Michael Werlberger

# Optimización

- Gradiente descendente



# Optimización

- Buscamos minimizar la función de costo

$$\text{loss} = \frac{1}{N} \sum_i L(f(x_i, W), y_i) + \lambda R(W)$$

- SVM $$L = \sum_{j \neq y_i} \max(0, f_j - f_{y_i} + \Delta)$$

# Optimización

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 0.2 | 1.0 | 2.0 | 1 | 190.2 | cat |
| 1.1 | 2.4 | -2 | 90 | 117.1 | deer |
| 0.3 | 4 | -4.5 | 50 | 135.3 | dog |

$W$ $\cdot$ $x_i$ $=$

$w_1^T x_i$

$w_2^T x_i$

$w_3^T x_i$

$$\text{loss} = \frac{1}{N}\sum_i L(f(x_i, W), y_i) + \lambda R(W) \qquad L = \sum_{j \neq y_i} \max(0, w_j^T x_i - w_{y_i}^T x_i + \Delta)$$

$$\text{loss} = \frac{1}{2}[(\max(0, w_1^T x_1 - w_2^T x_1 + \Delta) + \max(0, w_3^T x_1 - w_2^T x_1 + \Delta)) \longleftarrow \boxed{y_1 = 2}$$
$$+ (\max(0, w_1^T x_2 - w_3^T x_2 + \Delta) + \max(0, w_2^T x_2 - w_3^T x_2 + \Delta))] \longleftarrow y_2 = 3$$
$$+ \lambda R(W)$$

Corresponde a los pesos de la clase verdadera, y_1=2

- gradiente descendente $W = W - \alpha \nabla_W \text{loss}$

Notar que se escala la imagen "1" de una forma en particular

$$\nabla_W \text{loss} = \frac{1}{2}(\nabla_W L_1 + \nabla_W L_2) + \lambda \nabla_W R(W)$$

Primer componente de la imagen "1"

$$\nabla_W L_1 = \begin{pmatrix} \mathbb{I}(w_1^T x_1 - w_2^T x_1 + \Delta)(x_1)_1 & \cdots & \mathbb{I}(w_1^T x_1 - w_2^T x_1 + \Delta)(x_1)_3 \\ -\mathbb{I}(w_1^T x_1 - w_2^T x_1 + \Delta)(x_1)_1 - \mathbb{I}(w_3^T x_1 - w_2^T x_1 + \Delta)(x_1)_1 & \cdots & \cdots \\ \mathbb{I}(w_3^T x_1 - w_2^T x_1 + \Delta)(x_1)_1 & \cdots & \mathbb{I}(w_3^T x_1 - w_2^T x_1 + \Delta)(x_1)_3 \end{pmatrix}$$

# Optimización

| | | |
|---|---|---|
| 0.2 | 1.0 | 2.0 |
| 1.1 | 2.4 | -2 |
| 0.3 | 4 | -4.5 |

$W$

$\cdot$

| |
|---|
| 1 |
| 90 |
| 50 |

$x_i$

$=$

| | |
|---|---|
| 190.2 | cat |
| 117.1 | deer |
| 135.3 | dog |

$w_1^T x_i$

$w_2^T x_i$

$w_3^T x_i$

$$\text{loss} = \frac{1}{N}\sum_i L(f(x_i, W), y_i) + \lambda R(W)$$

$$L = \sum_{j \neq y_i} \max(0, w_j^T x_i - w_{y_i}^T x_i + \Delta)$$

- gradiente descendente $W = W - \alpha \nabla_W \text{loss}$

$$\nabla_W \text{loss} = \frac{1}{2}(\nabla_W L_1 + \nabla_W L_2) + \lambda \nabla_W R(W)$$

¡¡ Podemos evitar un for con un producto matricial !!

```
# ---- Evitar loops
# Vamos a utilizar el producto punto para sumar los ejemplos
# escalados como indica el gradiente que esta almacenado en binary
dW = x_batch.T.dot(binary)
dW /= x_batch.shape[0]
# sumamos el gradiente de la regularizacion
sW += reg * self.W
```

# Optimización

- Gradiente descendente: $W = W - \alpha \nabla_W \text{loss}$

$$\nabla_W \text{loss} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \nabla_W L$$

$$L = \sum_{j \neq y_i} \max(0, S_j - S_{y_i} + \Delta)$$

$$L = \sum_{j \neq y_i} \max(0, w_j^T x_i - w_{y_i}^T x_i + \Delta)$$

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 0.2 | 1.0 | 0.0 | ... | 0.0 |
| 1.1 | 2.4 | -2 | ... | -2 |
| 0.3 | 4 | -0.5 | ... | -0.5 |
| 2 | -0.7 | 30 | ... | 30 |
| -0.8 | 0.1 | 1.0 | ... | 1.0 |

$W$

$\cdot$

| |
|---|
| 1 |
| 112 |
| 123 |
| ... |
| 45 |

$x_i$

$=$

| | |
|---|---|
| 0.2 | cat |
| 1.1 | deer |
| 0.3 | dog |
| 2 | frog |
| -0.8 | horse |

$$\frac{\partial L}{\partial w_{ij}} = (x_i)_j$$

$$(\nabla_W L)_{y_i} = -\sum_{j \neq y_i} \mathbb{I}(w_j^T x_i - w_{y_i}^T x_i + \Delta) x_i$$

$$(\nabla_W L)_j = \mathbb{I}(w_j^T x_i - w_{y_i}^T x_i + \Delta) x_i$$

# Batch Gradient Descent (BGD)

$$\text{loss} = \frac{1}{N}\sum_i L(f(x_i, W), y_i) + \lambda R(W)$$

- En lugar de tomar todo el conjunto de datos de entrenamiento lo partimos en mini-batchs (32/64/128)

```
# ------ Naive SGD implementation
tol = 1e-3
delta = np.inf
while delta > tol:
    data_batch = sample_data(training_data, batch_size)
    old = loss_fun(data_batch, weights)
    w_grads = evaluate_gradient(loss_fun, data_batch, weights)
    weights += - step_size * w_grads
    delta = np.abs(old - loss_fun(data_batch, weights))
```

# Stochastic Gradient Descent (SGD)

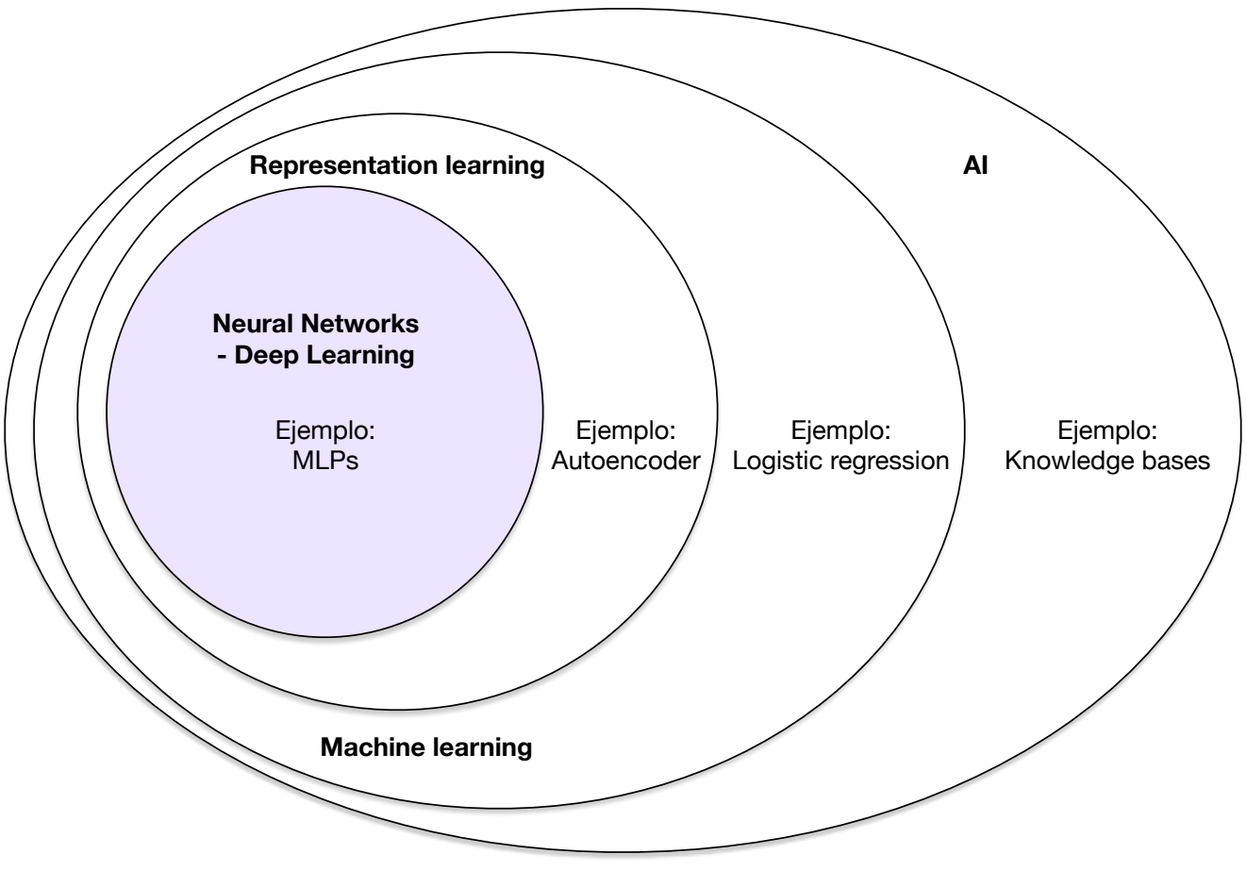
$$\text{loss} = \frac{1}{N} \sum_i L(f(x_i, W), y_i) + \lambda R(W)$$

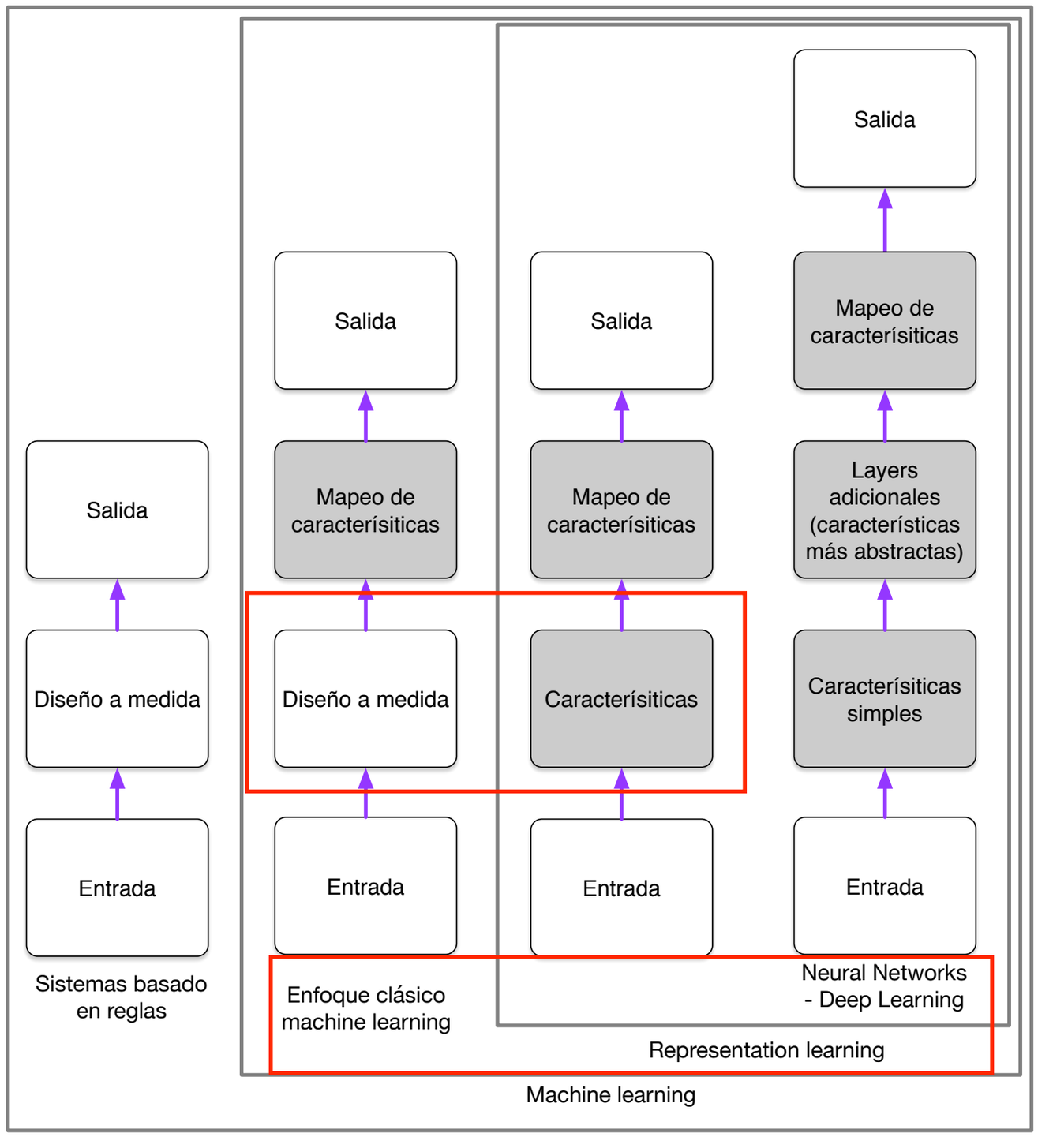
- mini-batch = 1
- Es común que se diga SGD cuando en realidad es BGD

```
# ------ Naive SGD implementation
tol = 1e-3
delta = np.inf
while delta > tol:
    data_batch = sample_data(training_data, batch_size)
    old = loss_fun(data_batch, weights)
    w_grads = evaluate_gradient(loss_fun, data_batch, weights)
    weights += - step_size * w_grads
    delta = np.abs(old - loss_fun(data_batch, weights))
```

# Recordemos

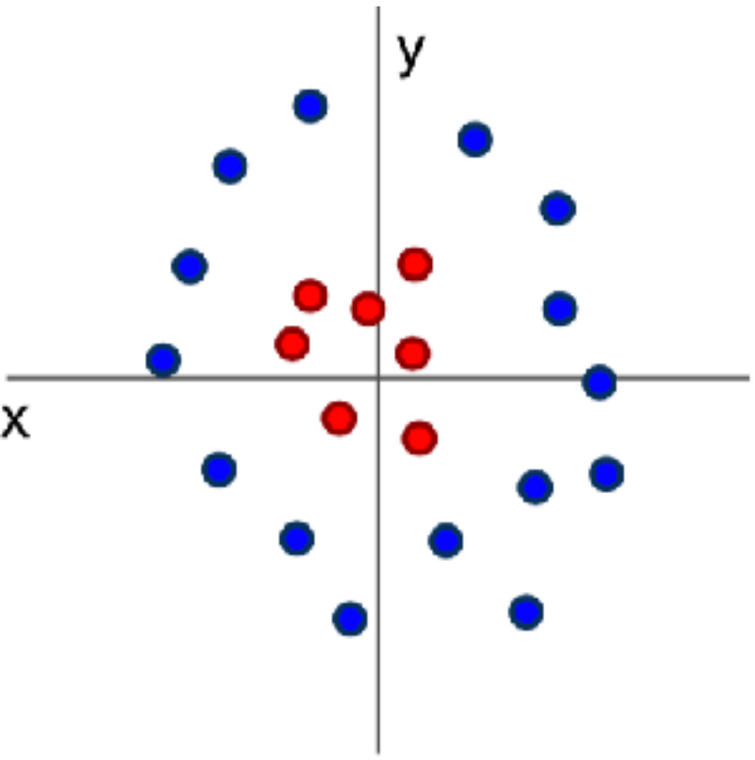
- Relación entre distintas técnicas de AI



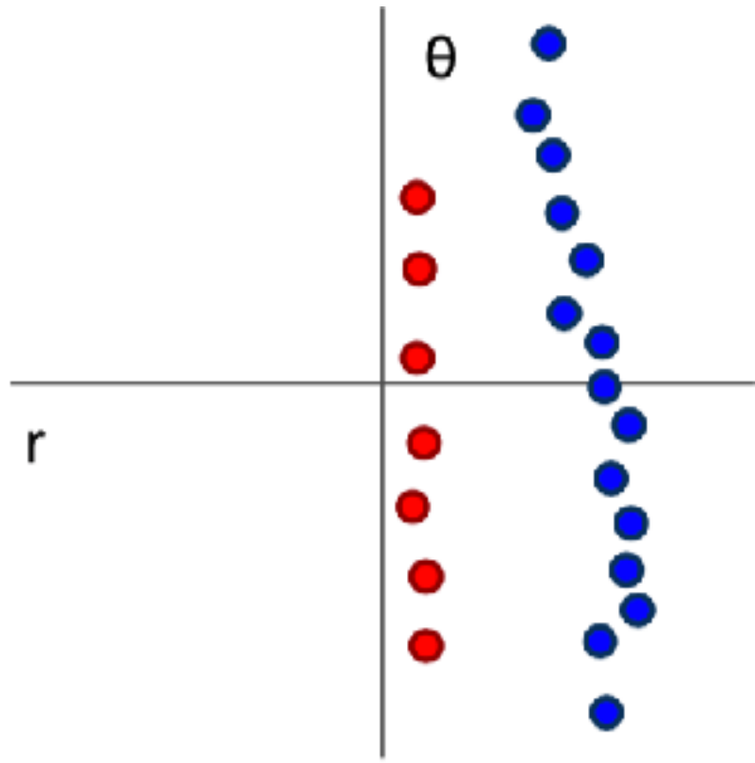

I. Goodfellow, Y. Bengio, and A. Courville, Deep Learning. MIT, 2016.

# Extracción de características




Cannot separate red and blue points with linear classifier

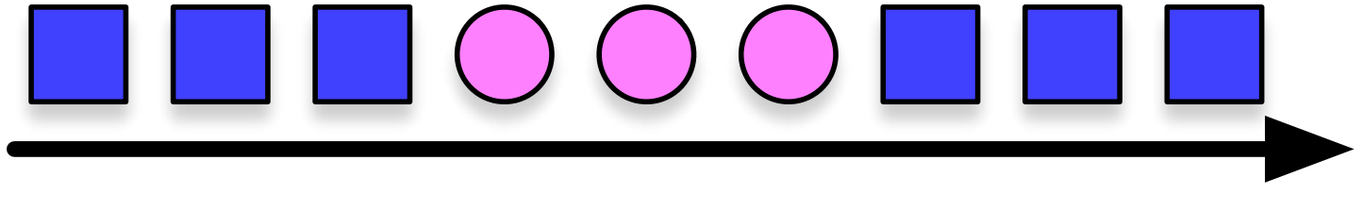
$$f(x, y) = (r(x, y), \theta(x, y))$$

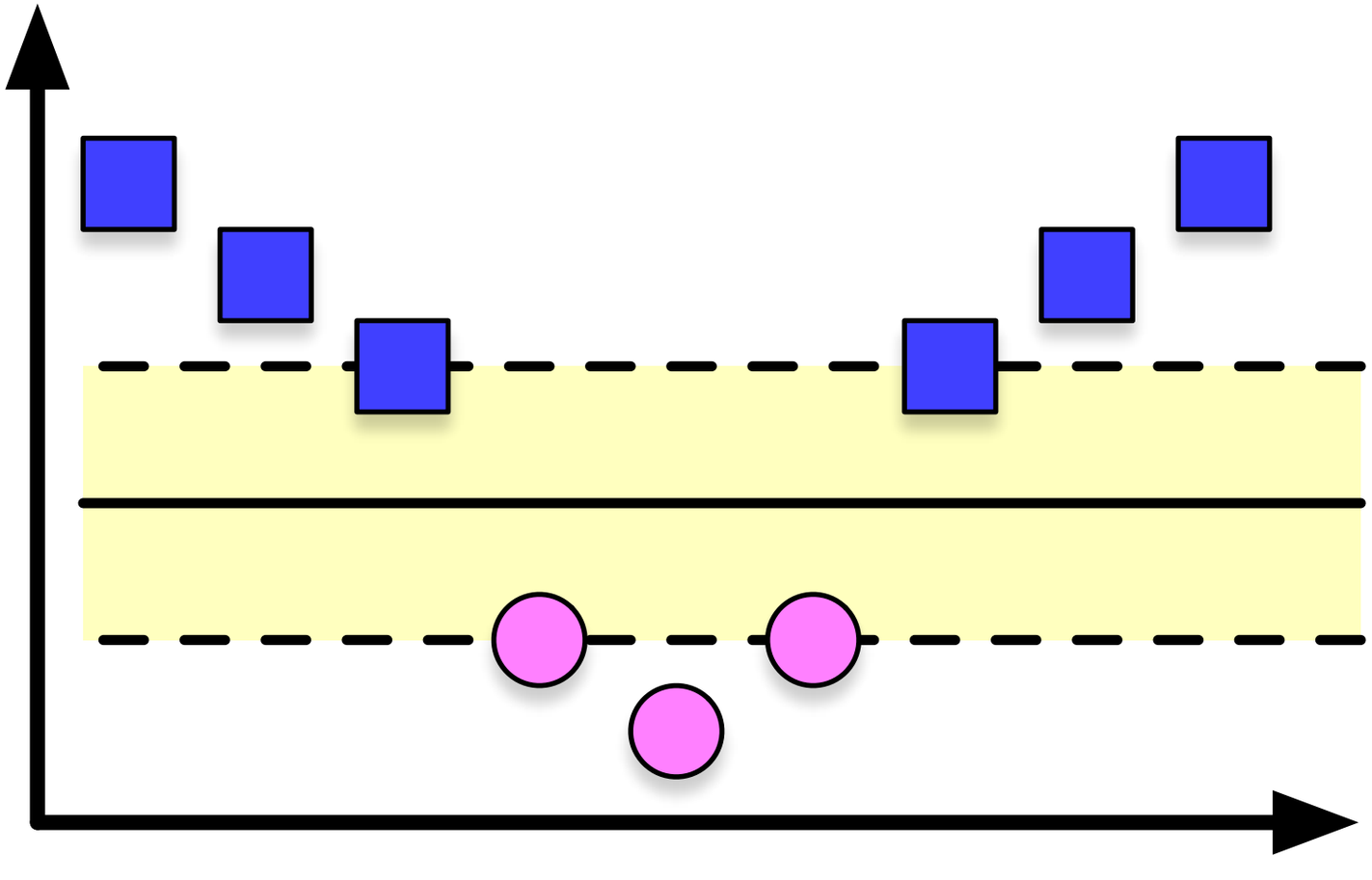



After applying feature transform, points can be separated by linear classifier

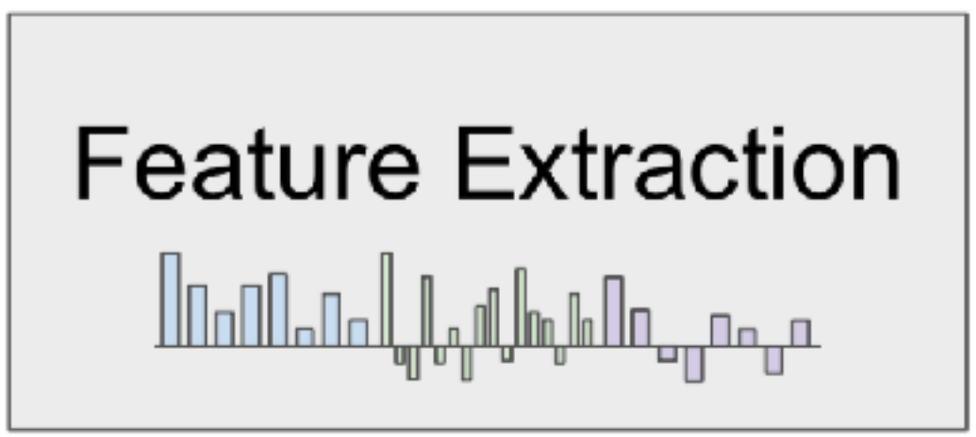
Img. source: Stanford CS231n 2017

# Extracción de características





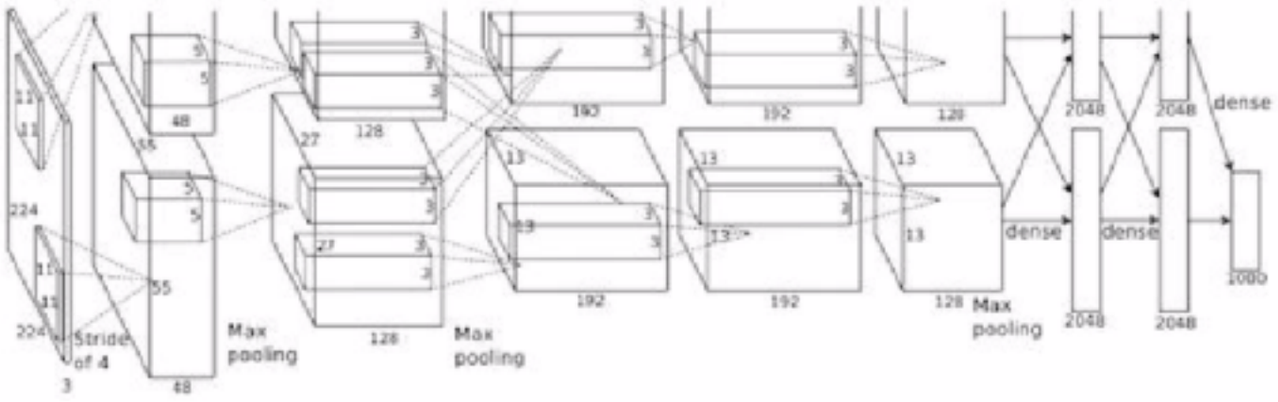
# Extracción de características



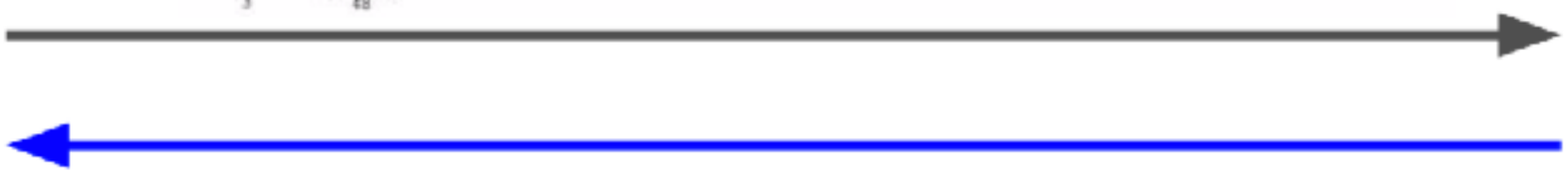


**10** numbers giving scores for classes

training




Krizhevsky, Sutskever, and Hinton, "Imagenet classification with deep convolutional neural networks", NIPS 2012. Figure copyright Krizhevsky, Sutskever, and Hinton, 2012. Reproduced with permission.



**10** numbers giving scores for classes

training

Img. source: Stanford CS231n 2017