Novas Estratégias de Treinamento e Transferência de Aprendizado

Redes Neurais e Arquiteturas Profundas

Moacir Ponti
ICMC, Universidade de São Paulo

www.icmc.usp.br/~moacir — moacir@icmc.usp.br

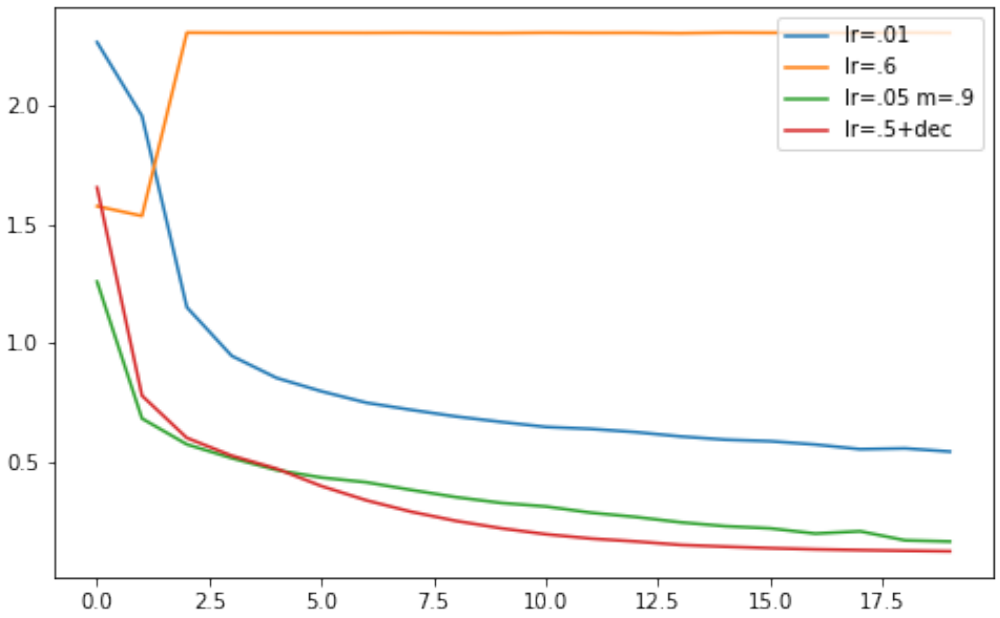
São Carlos-SP/Brasil – 2021

Agenda

Treinando redes profundas em cenários reais
- Suposições para convergência e aprendizado
- Estratégias para melhorar generalização
- Normalização de dados

Transferência de aprendizado

Anteriormente...




```
Batch size = 2, Erros de Validação MSE = 27.0030, MAE = 3.6657
Batch size = 4, Erros de Validação MSE = 24.0659, MAE = 3.2671
Batch size = 8, Erros de Validação MSE = 24.2604, MAE = 3.2732
Batch size = 16, Erros de Validação MSE = 15.8703, MAE = 2.9850
Batch size = 32, Erros de Validação MSE = 19.7997, MAE = 3.5542
Batch size = 64, Erros de Validação MSE = 26.4097, MAE = 4.1476
Batch size = 128, Erros de Validação MSE = 46.3122, MAE = 5.4005
Batch size = 256, Erros de Validação MSE = 477.0085, MAE = 18.6275
```

Algumas suposições que fizemos

Dados de treinamento

- Limpos
- Representativos e bem definidos com relação à tarefa: classes, valores da regressão, etc.
- Baixa taxa de erros de rótulo
- Quantidade de dados é suficiente

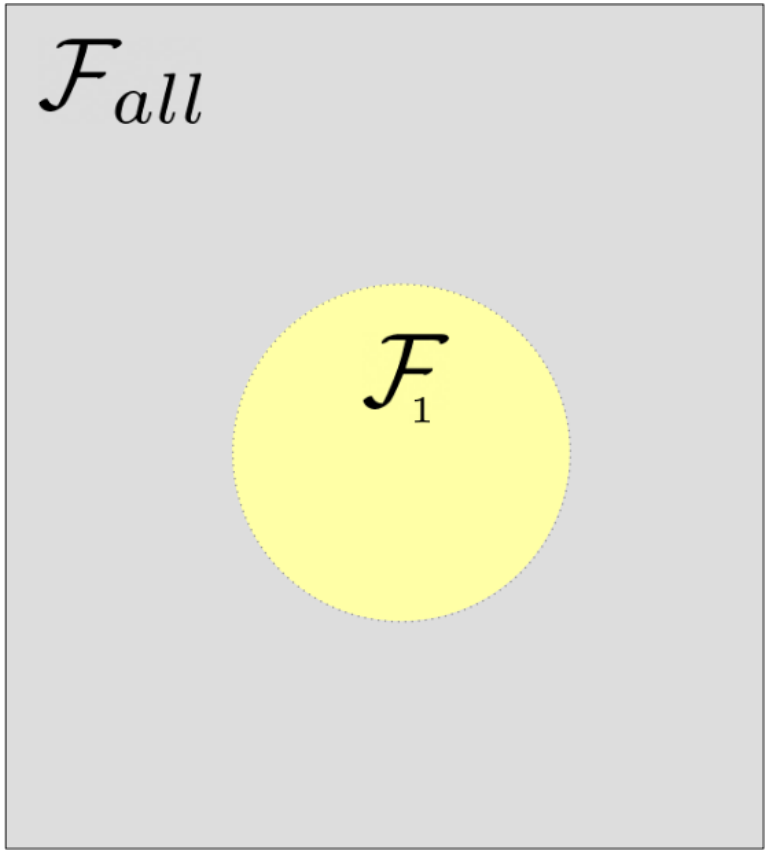
- E se não for possível?
  - Riscos: *overfitting*, baixa generalização, maior dificuldade no treinamento.

Complexidade de modelos: "viés" segundo a Teoria do Aprendizado Estatístico

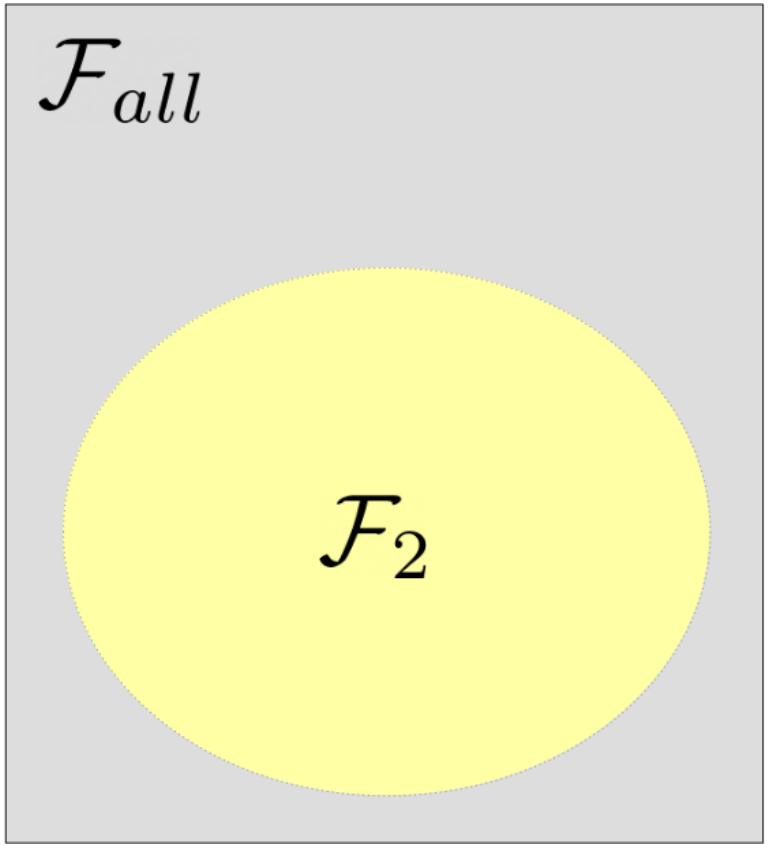
- Lembrando: Aprendizado de Máquina pode ser formulado como sendo aprender os parâmetros de $f : X \rightarrow Y$
- Um algoritmo ajusta f a partir de um espaço de funções admissíveis $\mathcal{F}$:
  - "muitas" funções: mais graus de liberdade, menor garantia de convergência, possível *overfitting*;
  - "poucas" funções: menos graus de liberdade, maior garantia de convergência, possível *underfitting*.

Espaço de funções admissíveis

Viés forte: espaço restrito

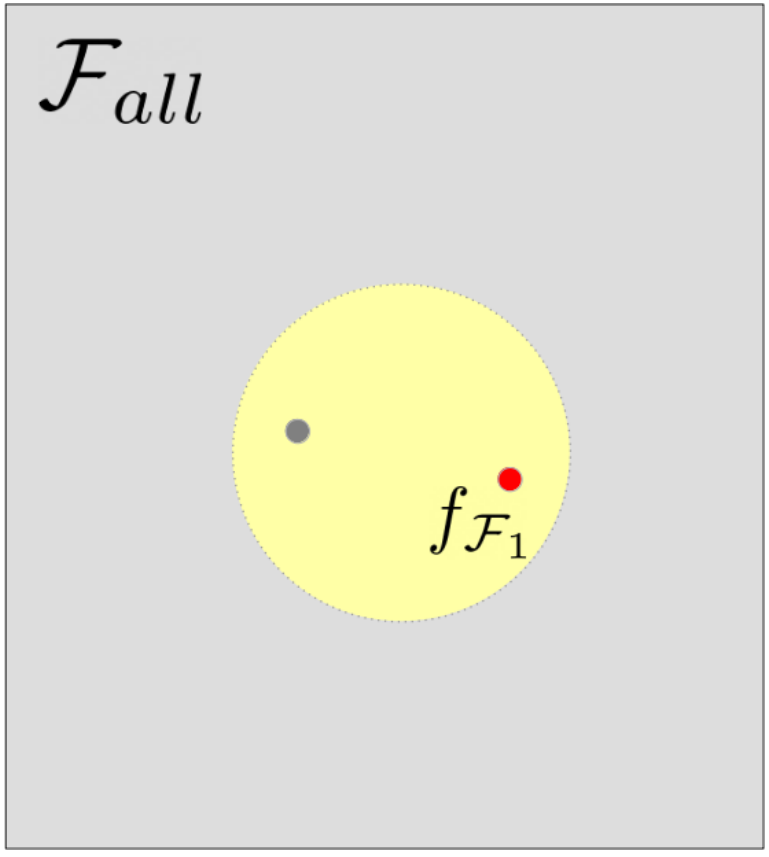


Viés fraco: espaço amplo



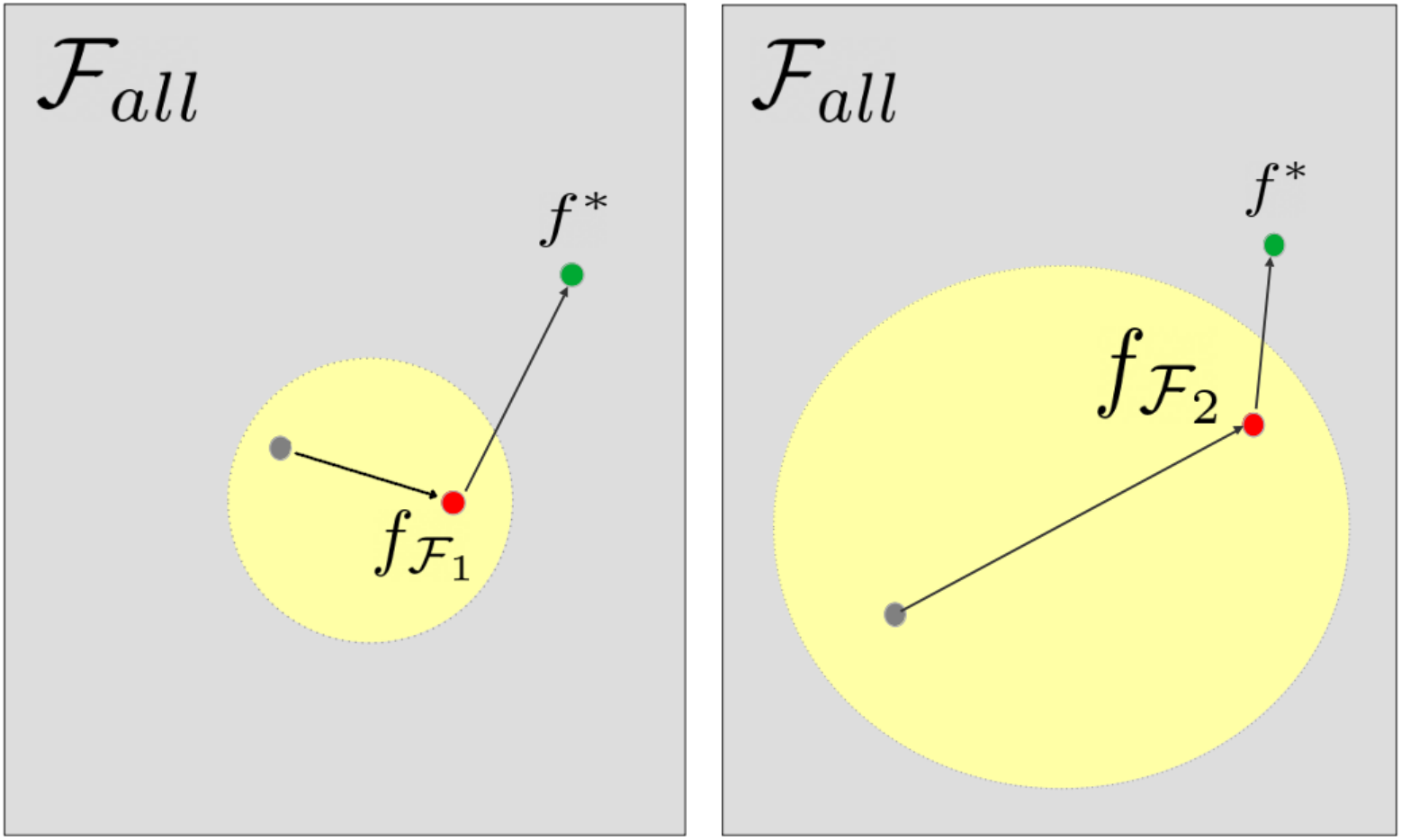
Espaço de funções admissíveis

De um modelo arbitrário para o melhor no espaço

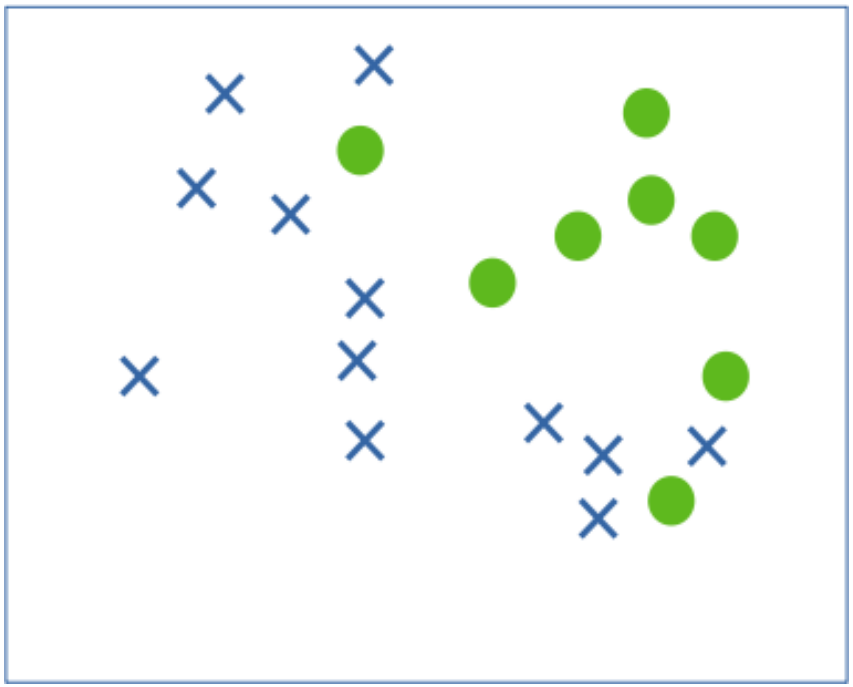


Erros quando definindo o espaço de funções admissíveis

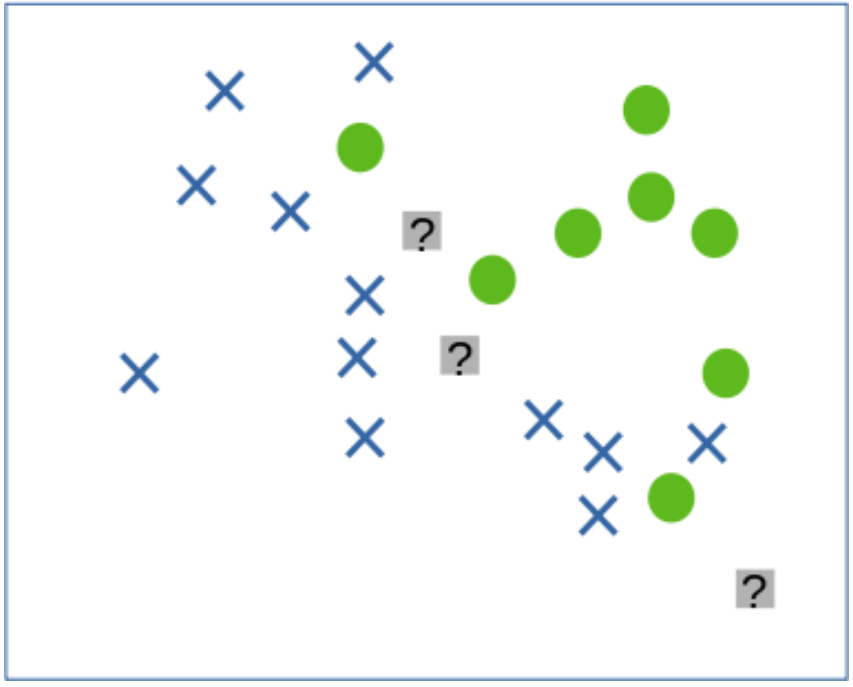
Erro de aproximação vs Erro de estimação



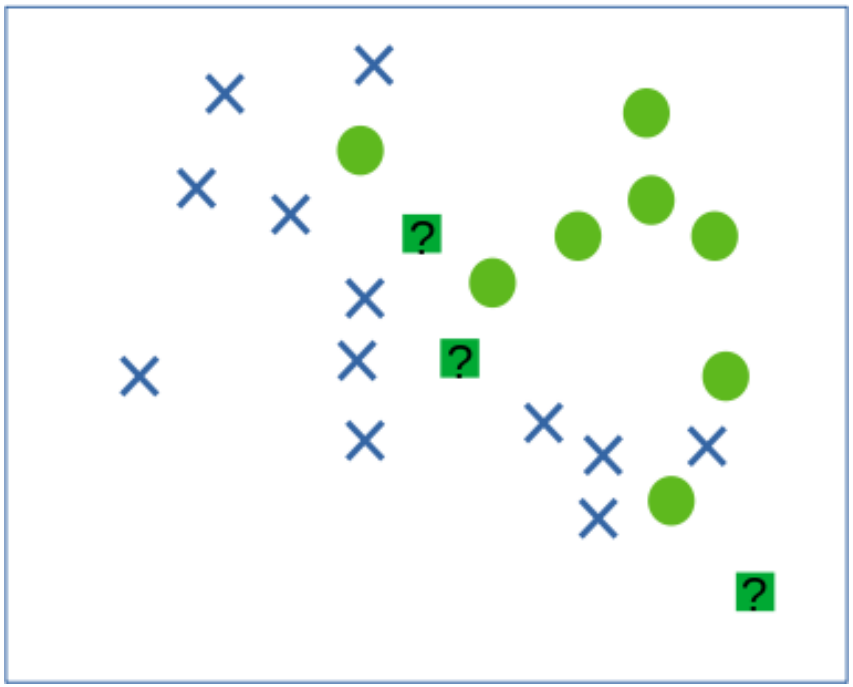
Exemplo com KNN



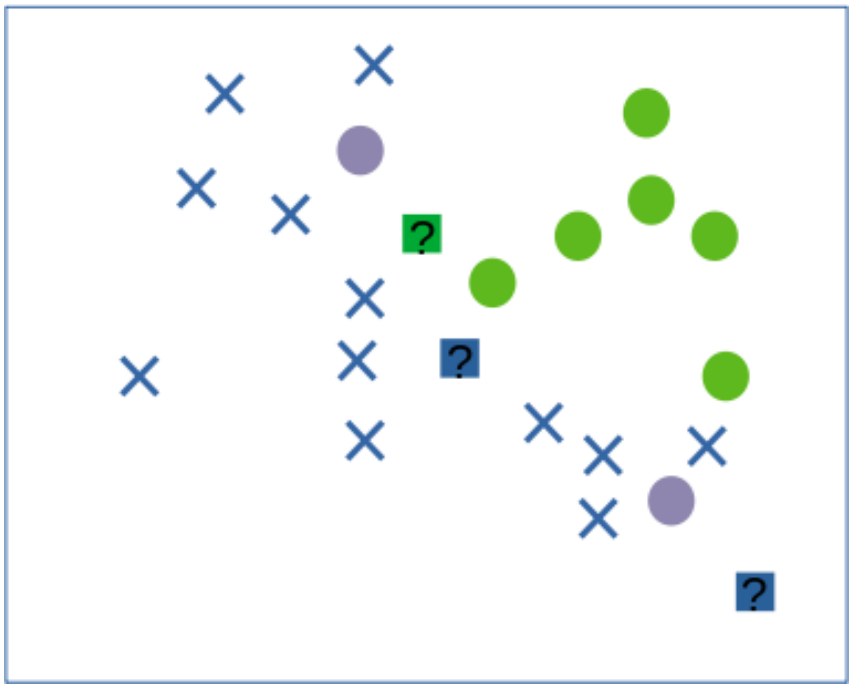
Exemplo com KNN



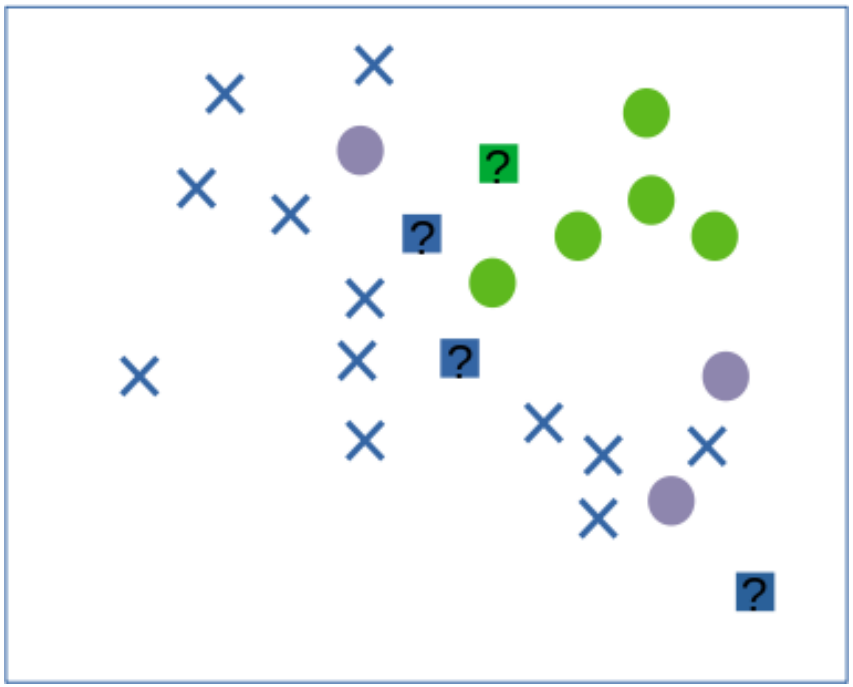
1-NN



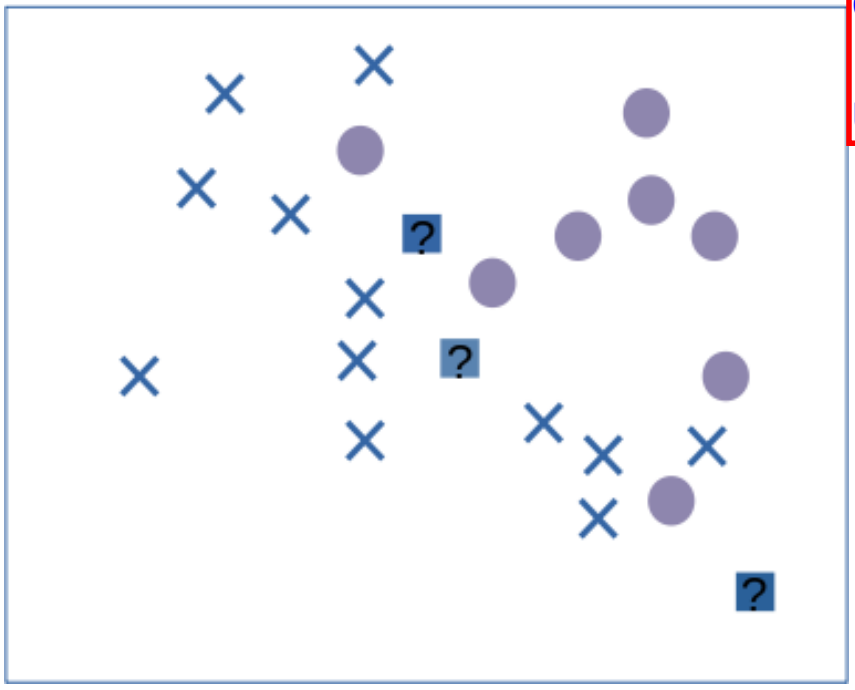
3-NN



5-NN

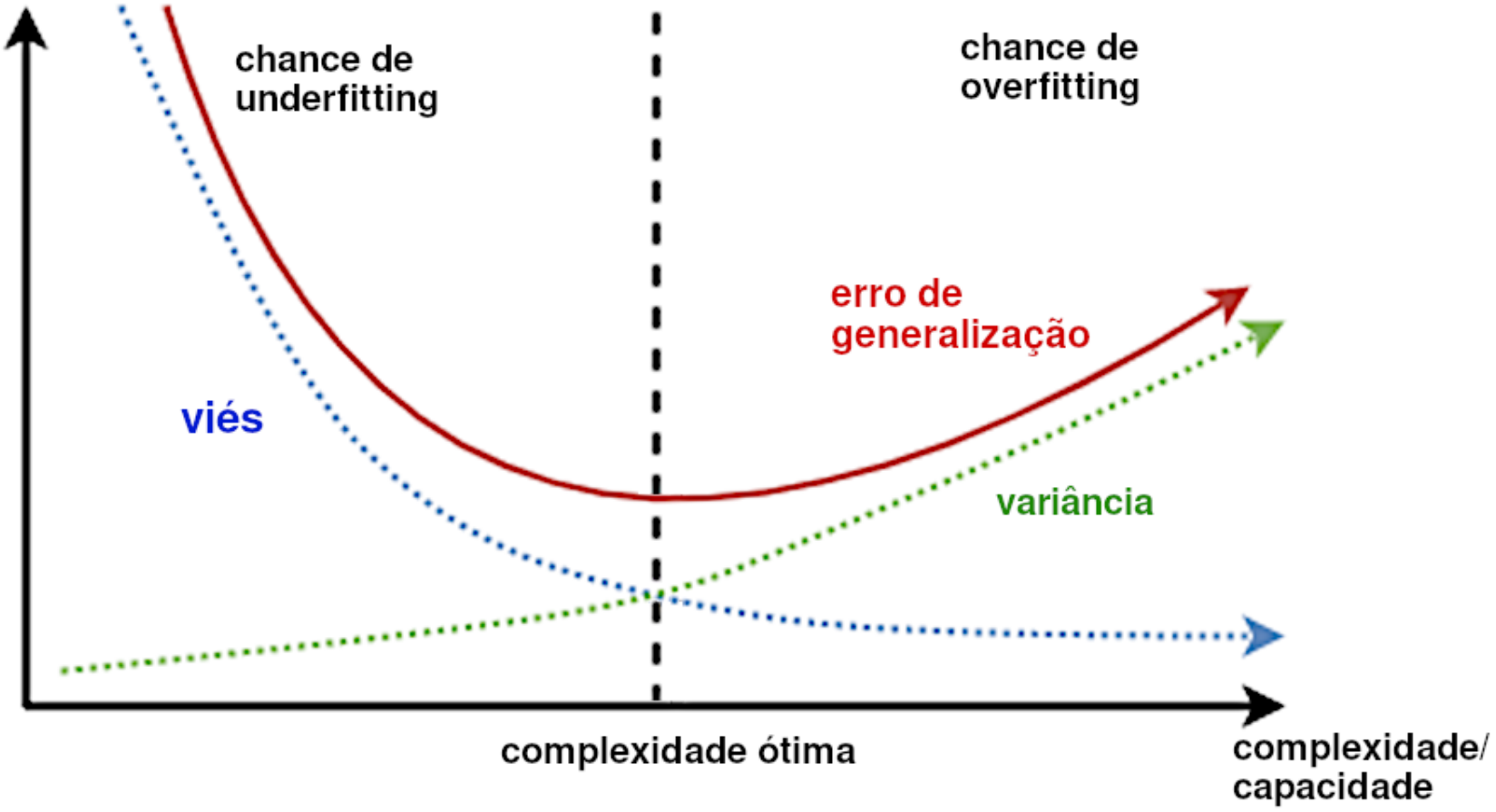


n-NN



Para K menor temos um espaço amplo de função, conforme aumenta-se o K diminui esse espaço ate qdo K=n tem-se apenas uma unica função

Dilema viés e variância

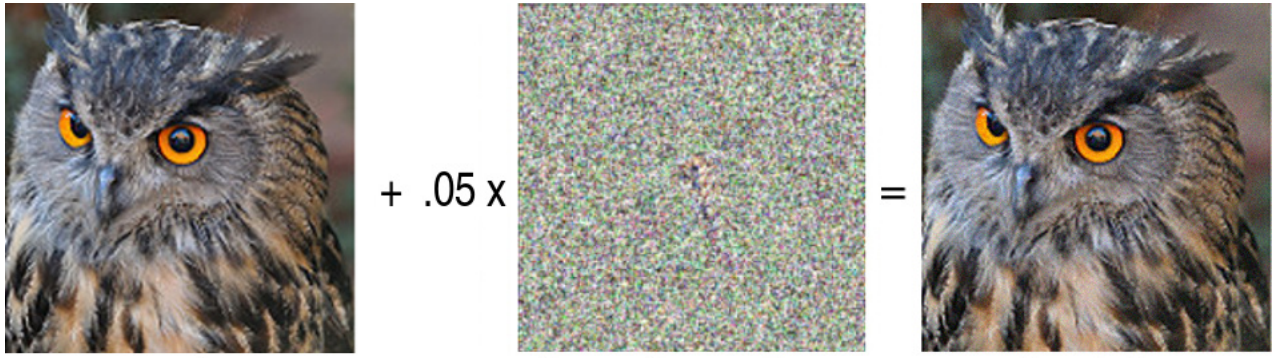


Controvérsias com Deep Learning

Marcus (2018) em "Deep Learning: a critical appraisal":
"... sistemas que se baseiam em Deep Learning frequentemente devem generalizar para além de dados específicos... mas a garantia de performance em alta qualidade nesses cenários é mais limitada."

Ataques adversariais

Artigo "Deep Neural Networks are easily fooled"



owl
(73% confidence)

cheetah gradient
features

cheetah
(99% confidence)

Ataques adversariais

Pixel attack: assume que há acesso ao conjunto de treinamento

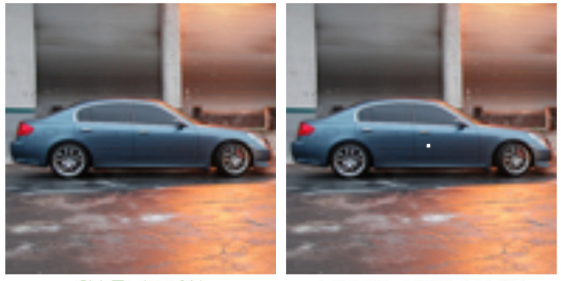
Conjunto de treinamento

CAR (56%)
AIRPLANE (30%)
HORSE (7%)

Ataques adversariais

Pixel attack: assume que há acesso ao conjunto de treinamento

Conjunto de treinamento



CAR (56%)
AIRPLANE (30%)
HORSE (7%)

AIRPLANE (61%)
CAR (31%)
HORSE (6%)

Ataques adversariais

Zhang et al (2017)
"... nossos experimentos estabeleceram que redes convolucionais profundas do estado da arte (...) *facilmente ajustam rótulos aleatórios* nos dados de treinamento."

UNDERSTANDING DEEP LEARNING REQUIRES RETHINKING GENERALIZATION

Chiyuan Zhang[*]
Massachusetts Institute of Technology
chiyuan@mit.edu

Samy Bengio
Google Brain
bengio@google.com

Moritz Hardt
Google Brain
mrtz@google.com

Benjamin Recht[†]
University of California, Berkeley
brecht@berkeley.edu

Oriol Vinyals
Google DeepMind
vinyals@google.com

ABSTRACT

Despite their massive size, successful deep artificial neural networks can exhibit a

muitas camadas e muitos neuronios o espaço de funções vai crescer e pode conter a função memória (overfiting)

Agenda

Treinando redes profundas em cenários reais

- Suposições para convergência e aprendizado
- Estratégias para melhorar generalização
- Normalização de dados

Transferência de aprendizado

(I) Regularização

Relembrando a regularização L2 (ou de Tikhonov)

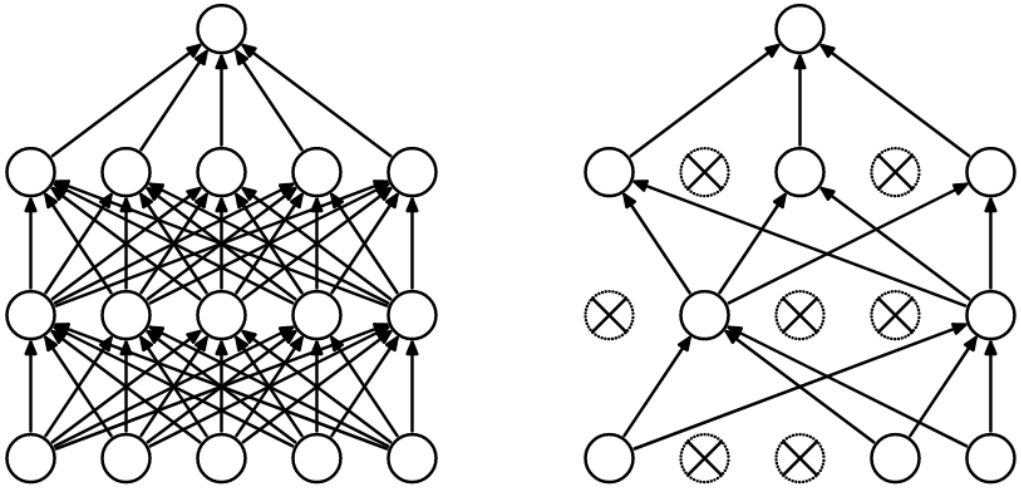
$$\ell(\Theta) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \ell_i(x_i, y_i, \Theta) + \lambda\frac{1}{2}||\Theta||^2$$

adiciona-se um termo na função de custo. Suaviza os parametros do modelo

- Objetivo: limitar a capacidade do modelo de se especializar demais nos dados
- Formas:
  - Global: na função de perda ponderada por λ
  - Definindo λ_l por camada (ou grupos de camadas)
- Interpretação: vê cada entrada como sendo de maior variância

(II) Dropout

- Objetivo: limitar a capacidade de certos parâmetros do modelo a memorizarem os dados
- Implementado na forma de "camada"
- Em cada iteração, desliga ativações de neurônios aleatoriamente com probabilidade p
- Interpretação: treinamento com técnica "Bagging"



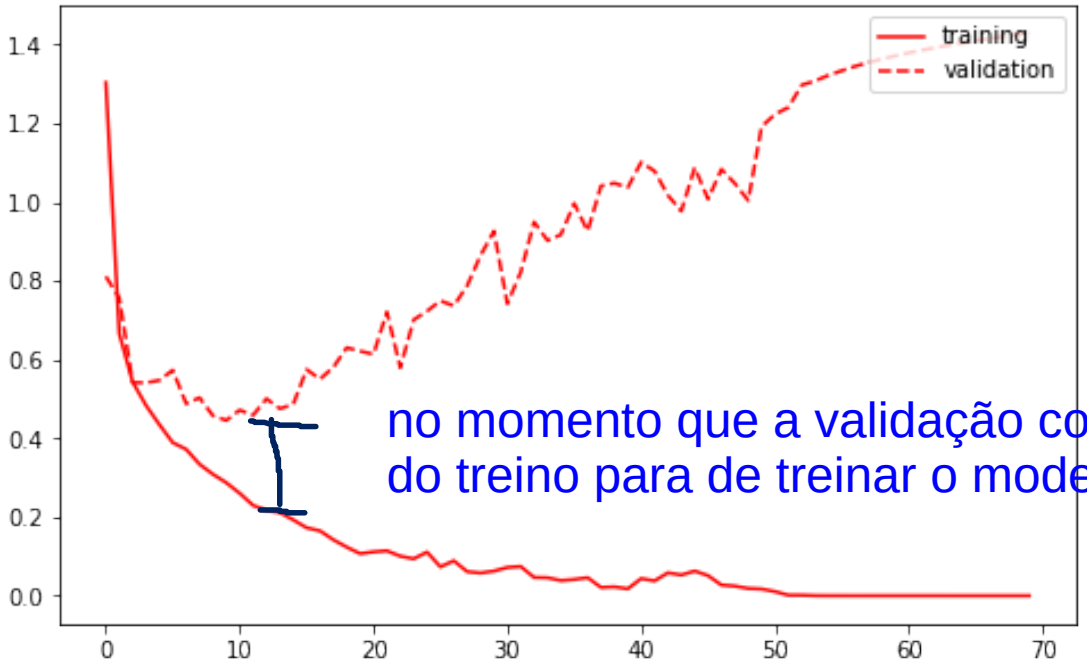
(a) Standard Neural Net (b) After applying dropout.

a cada camada a rede é treinada com uma variação dos nenuronios

Srivastava et al. Dropout: A Simple Way to Prevent Neural Networks from Overfitting

(III) Parada precoce

- Objetivo: evitar que o modelo memorize os dados de treinamento ao treinar por muitas épocas
- Acompanhar um conjunto de validação e interromper de acordo com a relação do custo no treinamento e validação



(V) Coletar mais dados

- Objetivo: impedir que o treinamento considere apenas um conjunto limitado de exemplos
- Baseado na lei dos grandes números, quanto maior a amostra, teremos um melhor estimador

(VI) Aumentação de dados/Data augmentation

- Objetivo: gerar exemplos artificiais na esperança de que melhore as propriedades de convergência
- Implementado por meio da manipulação de exemplos existentes, ou sua combinação
- Exemplos:
  - Dados estruturados: SMOTE
  - Não estruturados: rotação, corte, injeção de ruído, e outros que não descaracterizem os dados
  - Dropout na camada de entrada: eliminando features aleatoriamente a cada iteração.

(VI) Aumentação de dados/Data augmentation (cont.)

Dica para melhoria de performance final

- Para cada exemplo de teste:
  1. Gerar m exemplos com aumentação de dados
  2. Predizer o resultado para os m exemplos
  3. Combinar as predições: por média, maioria ou outro método

Agenda

Normalização de dados

ideia nao é evitar o overfiting em si mas sim facilitar o processo de convergência e diminui problemas com o gradiente para redes muito profundas como vanishing ou explode

- Exemplos de técnicas:
  - **Normalização (ou padronização) z-score**: valores com média zero e desvio padrão 1;
  - **Normalização min-max**: valores no intervalo 0-1.

- Objetivo: facilitar otimização ao normalizar/padronizar a magnitude dos valores utilizados no treinamento:
  - suaviza as ativações dos neurônios, reduzindo a variância do gradiente;
  - ataca o problema de "desaparecimento" do gradiente (vanishing gradient) em particular para redes profundas.

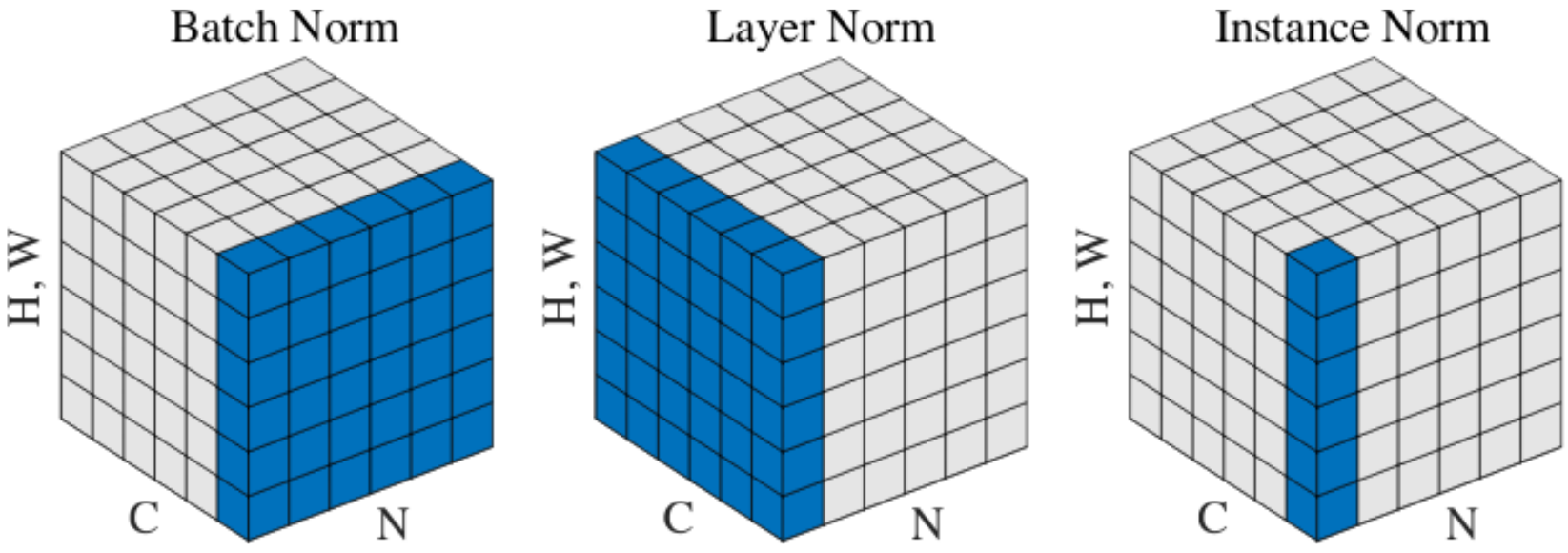
Normalização de dados

- Podemos usar como pré-processamento considerando todos os dados de treinamento
- Mas durante o treinamento pode também ser aplicado ao batch ou às camadas

Tipos de normalização baseada em camadas!

Batch
Camada
Instância

Normalização de Dados

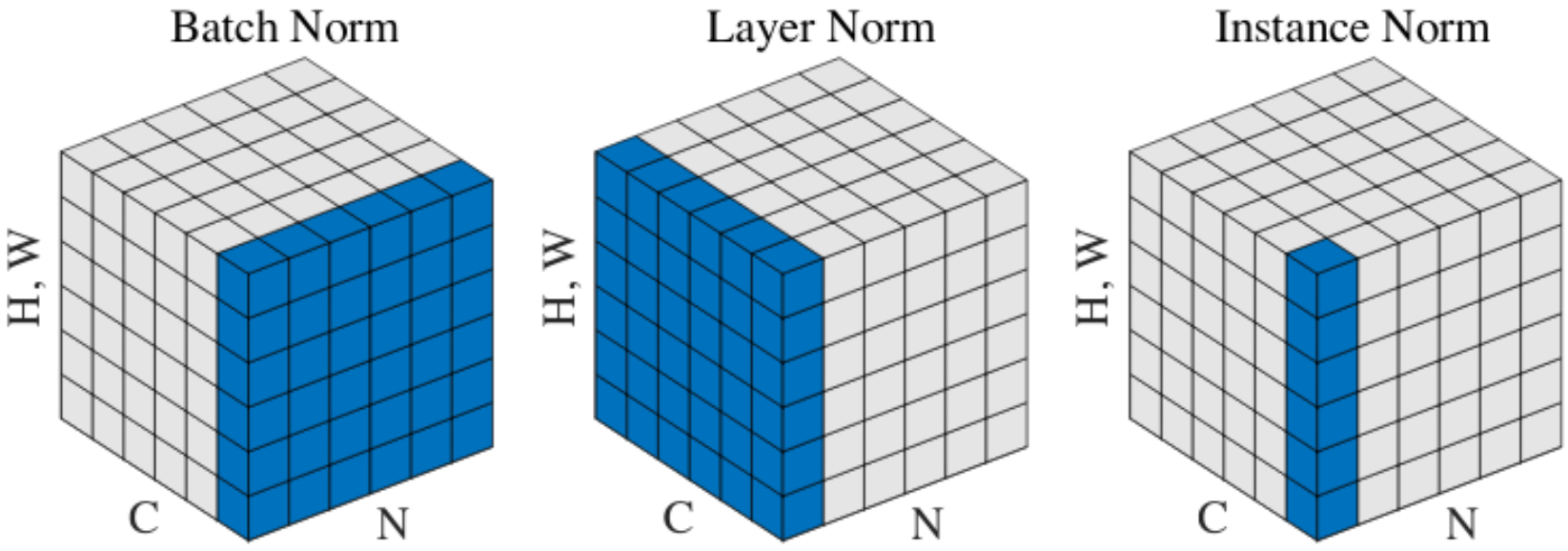


- C = canais, ou mapas de ativação
- N = instâncias no batch
- H,W = dimensões dos mapas de ativação (ex. altura x largura)

A operação aprende ainda os valores γ, β para transformação linear dos dados após normalizados:

$$\gamma x_i + \beta$$

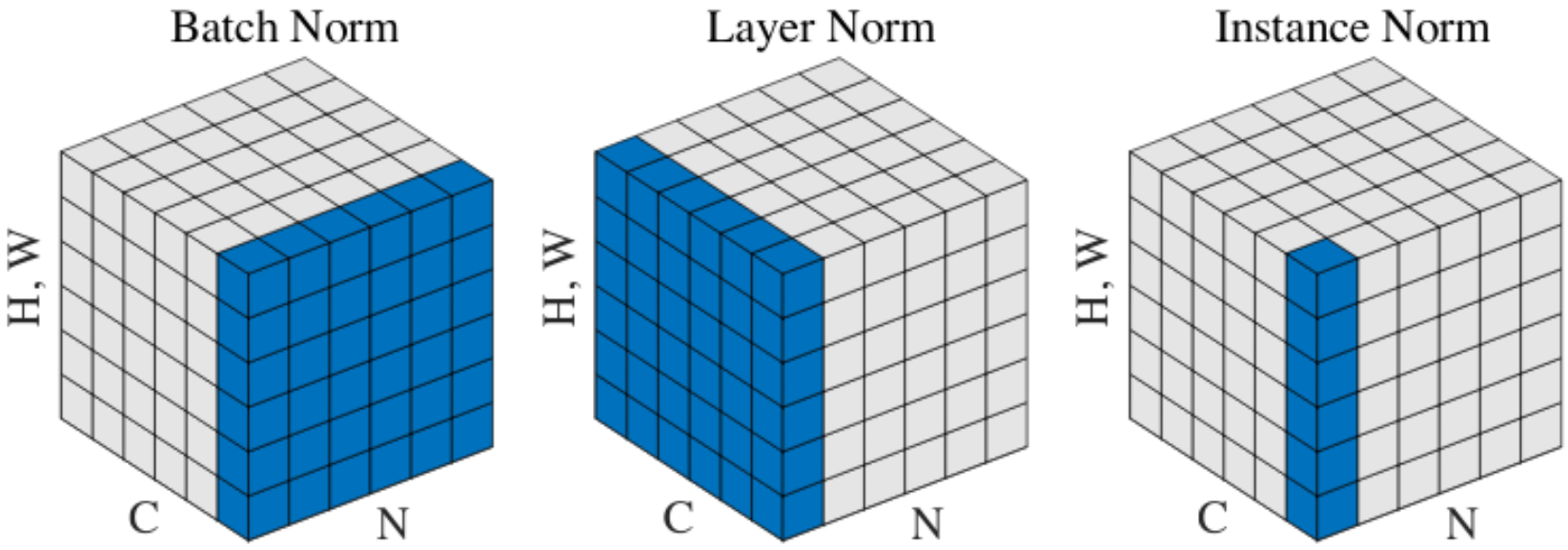
Normalização de Dados: Batch



normaliza por cada batch

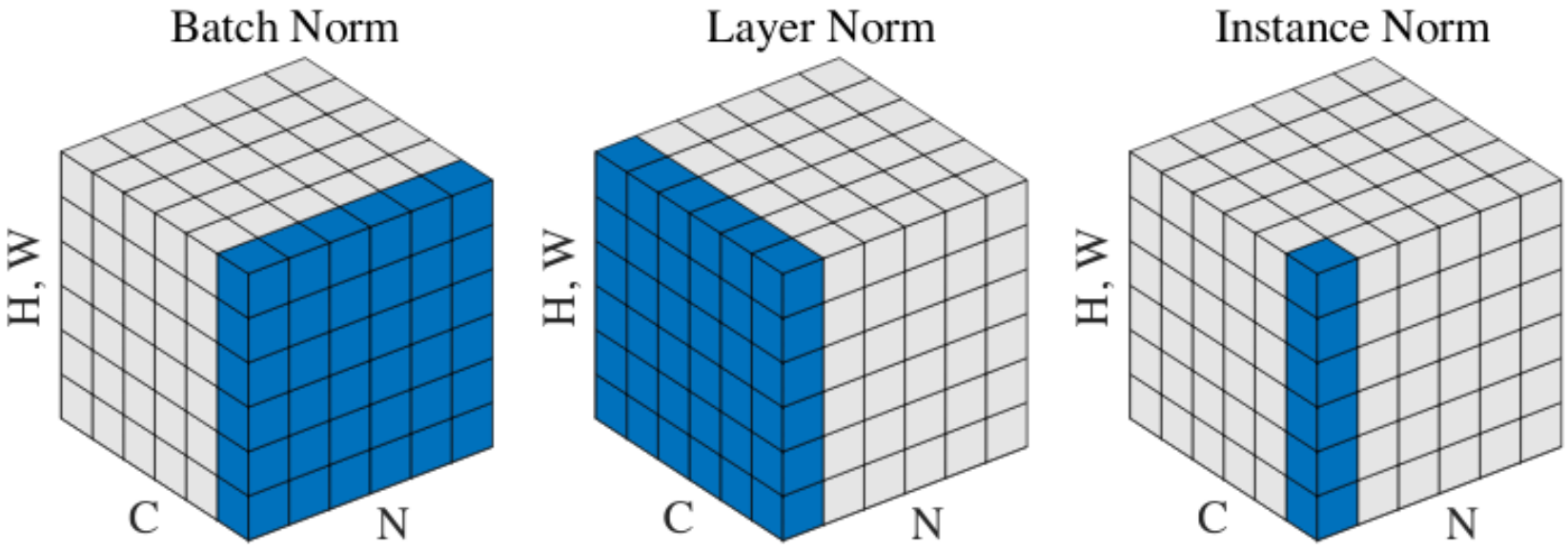
- **Batch normalization** (BN): para cada batch
  - média e desvio calculados por canal (total C)
  - normalização com relação ao canal ao longo de N instâncias no batch
- Funciona melhor com batchsize ≥ 32

Normalização de Dados: Layer



- **Layer normalization** (LN):
  - média e desvio calculados por instância (total N)
  - normalização com relação à cada instância ao longo de todas as ativações de todos os canais
- Independe do tamanho do batch, mais comum em redes recorrentes e adversariais

Normalização de Dados: Instance



- **Instance normalization** (IN):
  - média e desvio calculados por instância e canal (total $N \times C$)
  - normalização com relação à cada instância ao longo de cada canal individualmente
- Independe do tamanho do batch, mais comum em redes recorrentes e adversariais

Agenda

Treinando redes profundas em cenários reais
- Suposições para convergência e aprendizado
- Estratégias para melhorar generalização
- Normalização de dados

Transferência de aprendizado

Quando o assunto é volume de dados

Nem sempre...

- é possível coletar mais
- aumentação é efetiva

Transferência de aprendizado

Utilizar modelo treinado em uma determinada tarefa ou domínio, aproveitando o aprendizado para uma outra tarefa ou domínio alvo.

Transferência de aprendizado

Modos mais comuns

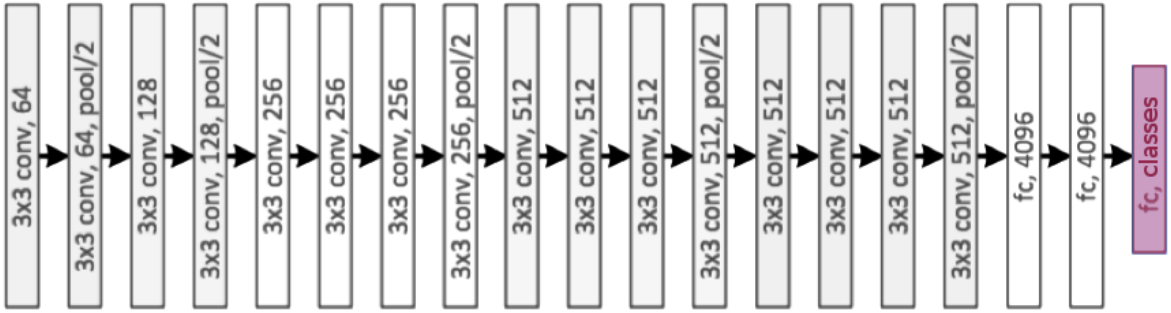
- Ajuste-fino / adaptação dos parâmetros
- Extração de características

Ajuste-fino / adaptação dos parâmetros

Exemplo: classificação de imagens

Modelo fonte: CNN treinada na ImageNet

- Transferência de aprendizado
  - Redefinir a última camada (inicialização aleatória) com o número de classes desejado
  - Realizar treinamento a partir dos pesos pré-treinados
  - Permitir adaptação apenas da últimas camadas, congelando as demais



Ajuste-fino / adaptação dos parâmetros

Exemplo: classificação de imagens

Modelo fonte: CNN treinada na ImageNet

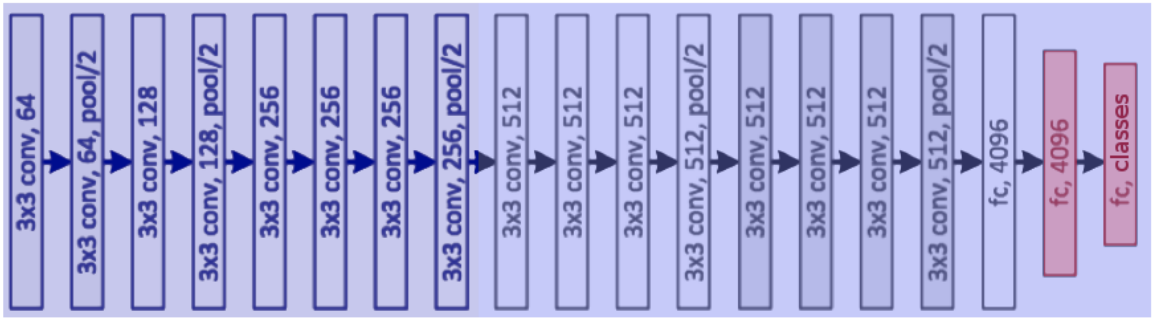
- Ajuste-fino:
  - Comumente feito após o anterior, em que já temos o classificador treinado
  - (Opcionalmente) Re-inicializar ou inserir novas camadas densas ocultas
  - Permitir adaptação de camadas do meio da rede (sem reinicializar seus pesos), congelando algumas iniciais

Ajuste-fino / adaptação dos parâmetros

Exemplo: classificação de imagens

Modelo fonte: CNN treinada na ImageNet

- Ajuste-fino – opção alternativa
  - Depende de maior quantidade de dados
  - (Opcionalmente) Re-inicializar ou inserir novas camadas densas ocultas
  - Permitir adaptação de toda a rede (sem reinicializar seus pesos)



Transferência de aprendizado

Dicas

- CNNs com menos parâmetros costumam generalizar melhor para dados muito diferentes do treinamento
- Exemplos: MobileNet, SqueezeNet, etc. funcionam melhor em imagens médicas do que ResNet e Inception.
- Ajuste-fino pode não convergir se tivermos poucos dados, ex. menos de 100 instâncias por classe.

Extração de características

Características para dados não estruturados

- Carregar rede neural treinada em grande base de dados
- Passar exemplos de sua base de dados pela rede para predição (não treinamento!).
- Obter os mapas de ativação de alguma camada

Extração de características

Dicas

- Aplicar redução de dimensionalidade baseada em PCA, Product Quantization ou outra
- Treinar modelo de aprendizado raso com maiores garantias de aprendizado com poucos dados: SVM, árvore de decisão, etc.
- Essas características também são efetivas para recuperação baseada em conteúdo
- Podem ser usados métodos de projeção para as características aprendidas: tSNE, UMAP, PCA.

Mensagem da aula

- Deep Learning não pode ser tratado como panacéia;
- Há ainda preocupações sobre sua capacidade de generalização e fragilidade a ataques;
- Sua grande utilidade está no aprendizado de representações, em particular para dados não estruturados...
  - representações que parecem ter excelente capacidade de transferência

Bibliography I

Moacir A. Ponti, Fernando dos Santos, Leo Ribeiro, Gabriel Cavallari. **Training Deep Networks from Zero to Hero: avoiding pitfalls and going beyond**.
SIBGRAPI, 2021. Tutorial.
`https://arxiv.org/abs/2109.02752`

Moacir A. Ponti, Leo Ribeiro, Tiago Nazaré, Tu Bui, John Collomosse. **Everything You Wanted to Know About Deep Learning for Computer Vision but were Afraid to Ask**.
SIBGRAPI-T, 2017. Tutorial.

Bibliography II

Moacir A. Ponti, **Introduction to Deep Learning** (Code).

Github Repository:

`https://github.com/maponti/deeplearning_intro_datascience`

CNN notebook: `https://colab.research.google.com/drive/1EnNjtzdw8ftIO7I9xCUhb-ovq1iNy4pf`