Modelos Lineales y Redes Neuronales

Felipe José Bravo Márquez

Universidad de Chile- Minería de Datos

23 de junio de 2021

Modelos de Regresión

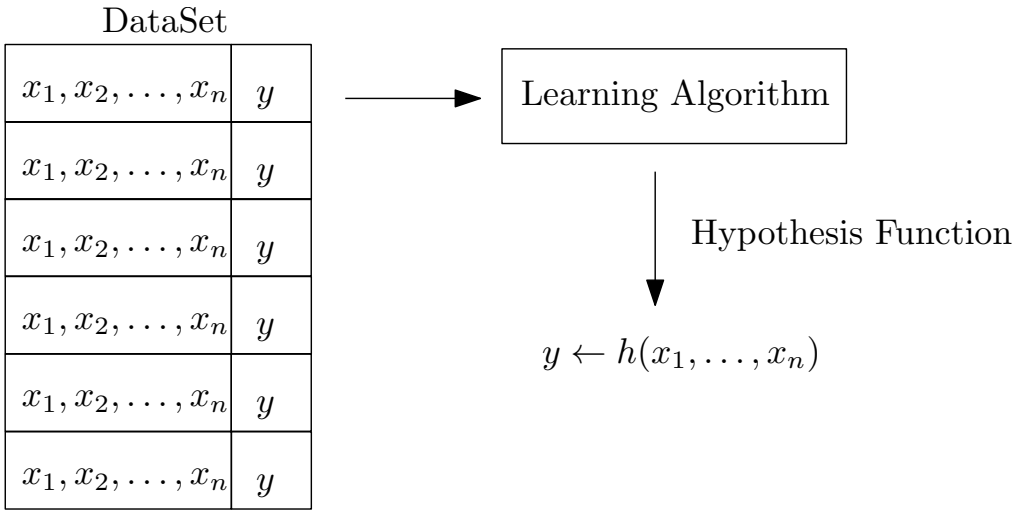
- Un modelo de regresión se usa para modelar la relación de una variable dependiente **y** numérica con n variables independientes $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n$.
- A grandes rasgos queremos conocer el valor esperado de **y** a partir los valores de **x**:

$$\mathbb{E}(y|x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

- Usamos estos modelos cuando creemos que la variable de respuesta **y** puede ser modelada por otras variables independientes también conocidas como covariables o atributos.
- Para realizar este tipo de análisis necesitamos un dataset formado por m observaciones que incluyan tanto a la variable de respuesta como a cada uno de los atributos.
- Nos referimos al proceso de **ajustar** una función de regresión al proceso en que a partir de los datos inferimos una función de hipótesis h que nos permite predecir valores de **y** desconocidos usando los valores de los atributos.

Introducción (2)

- A este proceso de ajustar una función a partir de los datos se le llama en las áreas de minería de datos y aprendizaje de máquinas como **entrenamiento**.
- En esas disciplinas se dice que las funciones **aprenden** a partir de los datos.
- Como necesitamos observaciones donde el valor de **y** sea conocido para aprender la función, se le llama a este tipo de técnicas como técnicas de **aprendizaje supervisado**.
- Cuando **y** es una variable categórica hablamos de un problema de **clasificación**.



Regresión Lineal Simple

- En la regresión lineal simple se tiene una única variable independiente x para modelar la variable dependiente **y**.
- Se asume la siguiente relación lineal entre la variables:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \epsilon_i \quad \forall i$$

- El parámetro β_0 representa el intercepto de la recta (el valor de y cuando x vale cero).
- El parámetro β_1 es la pendiente y representa el cambio de **y** cuando variamos el valor de **x**. Entre mayor sea la magnitud de este parámetro mayor será la relación lineal entre las variables.
- Los valores ϵ_i corresponden a los errores asociados al modelo.
- Tenemos que encontrar una función lineal o recta h_β que nos permita encontrar una estimación de y, $\hat{y}$ para cualquier valor de x con el mínimo error esperado.

$$h(x) = \beta_0 + \beta_1 x$$

Mínimos de Cuadrados

- El método de mínimos cuadrados ordinarios se usa para estimar $\hat{\beta}_0$ y $\hat{\beta}_1$ minimizando la suma de los errores cuadráticos (SSE) de los datos observados.
- Supongamos que tenemos m observaciones de $\mathbf{y}$ y de $\mathbf{x}$, calculamos la suma de los errores cuadráticos (SSE) o E de error de la siguiente forma:

$$E = \sum_{i=1}^{m}(y_i - h(x_i))^2 = \sum_{i=1}^{m}(y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2 \tag{1}$$

- Para encontrar los parámetros que minimizan el error calculamos las derivadas parciales de SSE respecto a β_0 y β_1. Luego igualamos las derivadas a cero y resolvemos la ecuación para despejar los parámetros.

$$\frac{\partial E}{\partial \beta_0} = -2\sum_{i=1}^{m}(y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i) = 0 \tag{2}$$

$$\frac{\partial E}{\partial \beta_1} = -2\sum_{i=1}^{m}(y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)x_i = 0 \tag{3}$$

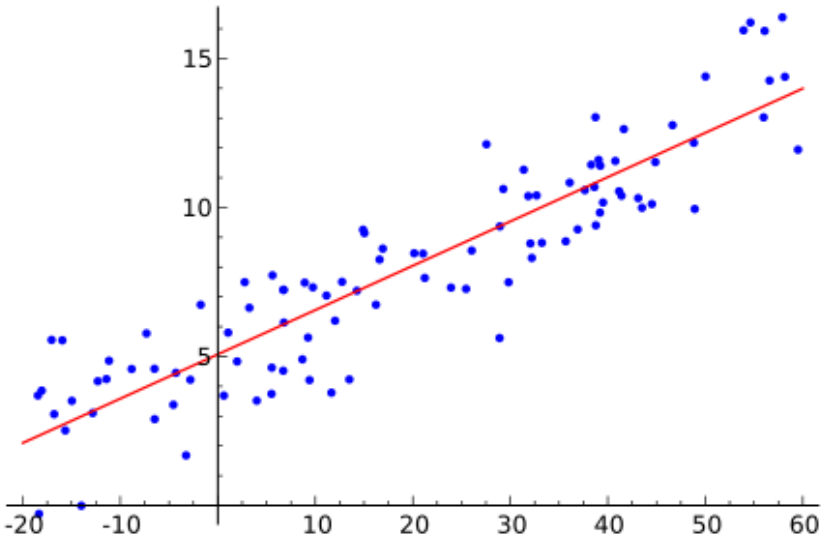
Mínimos Cuadrados (2)

- Del sistema de ecuaciones anterior se obtienen las soluciones normales:

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_i^m (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})}{\sum_i^m (x_i - \overline{x})^2} \tag{4}$$

$$\hat{\beta}_0 = \overline{y} - \hat{\beta}_1 \overline{x} \tag{5}$$

- El modelo ajustado representa la recta de mínimo error cuadrático.



Coeficiente de Determinación R^2

- Una vez ajustado nuestro modelo lineal debemos evaluar la calidad del modelo.
- Una medida muy común es el coeficiente de determinación R^2.
- Para calcularlo debo calcular otros errores distintos a los errores cuadráticos SSE.
- Se define a la suma cuadrática total (SST) como el error predictivo cuando usamos la media $\overline{y}$ para predecir la variable de respuesta y (es muy similar a la varianza de la variable):

$$\text{SST} = \sum_{i}^{m} (y_i - \overline{y})^2$$

- Luego tenemos a la suma de los cuadrados explicada por el modelo (SSM) que nos indica la variabilidad de los valores predichos por el modelo respecto a la media:

$$\text{SSM} = \sum_{i}^{m} (\hat{y}_i - \overline{y})^2$$

Coeficiente de Determinación R^2 (2)

- Se define el coeficiente de determinación para un modelo lineal R^2 como:

$$R^2 = \frac{\text{SSM}}{\text{SST}} = \frac{\sum_i^m (\hat{y}_i - \overline{y})^2}{\sum_i^m (y_i - \overline{y})^2} \tag{6}$$

- El coeficiente adquiere valores entre 0 a 1 y mientras más cercano a 1 sea su valor mayor sera la calidad del modelo.
- El valor de R^2 es equivalente a la correlación lineal (Pearsons) entre y e $\hat{y}$ al cuadrado.

$$R^2 = \text{cor}(y, \hat{y})^2$$

Regresión Lineal Múltiple

- Supongamos que tenemos n variables independientes: $x_1, x_2, \ldots, x_n$.
- Intuitivamente, estas variables en conjunto podrían explicar de mejor manera la variabilidad de la variable de respuesta **y** que un modelo simple.
- Se define un modelo lineal multi-variado de la siguiente manera:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i,1} + \beta_2 x_{i,2} + \cdots + \beta_n x_{i,n} + \epsilon_i \quad \forall i \in \{1, m\}$$

- En el modelo multi-variado se extienden todas las propiedades del modelo lineal simple.
- Se puede representar el problema de manera matricial:

$$Y = X\beta + \epsilon$$

- Donde Y es un vector de $m \times 1$ de variables de respuesta:

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}$$

Regresión Lineal Múltiple (2)

- X es una matriz de $m \times (n+1)$ con las variables explicativas. Tenemos m observaciones de las n variables. La primera columna es constante igual a 1 ($x_{i,0} = 1 \quad \forall i$) para modelar la variable de intercepto β_0.

$$X = \begin{pmatrix} x_{1,0} & x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,n} \\ x_{2,0} & x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{m,0} & x_{m,1} & x_{m,2} & \cdots & x_{m,n} \end{pmatrix}$$

- Luego, β es un vector de parámetros de $(n+1) \times 1$

$$\beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix}$$

Regresión Lineal Múltiple (2)

- Finalmente, ϵ es un vector con los errores del modelo de $m \times 1$.

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_m \end{pmatrix}$$

- Usando la notación matricial, podemos ver que la suma de los errores cuadráticos (SSE) se puede expresar como:

$$\text{SSE} = (Y - X\beta)^T (Y - X\beta)$$

- Minimizando esta expresión derivando el error en función de β e igualando a cero se llega a las ecuaciones normales:

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

Supuestos del Modelo Lineal

Cada vez que ajustamos un modelo lineal estamos asumiendo implícitamente ciertos supuestos sobre los datos.

Supuestos

1. Linealidad: la variable de respuesta se relaciona linealmente con los atributos.
2. Normalidad: los errores tienen distribución normal de media cero: $\epsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$
3. Homocedasticidad: los errores tienen varianza constante (mismo valor σ^2).
4. Independencia: los errores son independientes entre sí.

Interpretación Probabilística

- Considerando los supuestos anteriores podemos ver que la densidad de probabilidad (PDF) de los errores ϵ esta definida por una normal de media cero y varianza constante:

$$\text{PDF}(\epsilon_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{\epsilon_i^2}{2\sigma^2}\right)$$

- Esto implica que:

$$\text{PDF}(y_i|x_i;\beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y_i - h_\beta(x_i))^2}{2\sigma^2}\right)$$

- Lo que implica que la distribución de **y** dada los valores de **x** y parametrizada por β sigue una distribución normal.
- Luego si uno estima los parámetros de β usando una técnica de estimación llamada máxima verosimilitud llega a los mismos resultados que haciendo estimación por mínimos cuadrados.
- Esto nos dice que cuando estimamos los parámetros del modelo usando mínimos cuadrados estamos realizando las mismas hipótesis probabilísticas mencionados anteriormente.

Regresiones en R

- En R lo modelos lineales se crean con el comando `lm` que recibe como parámetro una fórmula de la forma `y~x` ($y = f(x)$).
- Vamos a trabajar con el dataset `USArrests` que tiene información sobre los arrestos ocurridos en Estados Unidos el año 1973.
- Cada observación corresponde a un estado.
- Tiene las siguientes variables:
  1. **Murder**: arrestos por homicidio (por 100.000 habitantes).
  2. **Assault** : arrestos por asalto (por 100.000 habitantes).
  3. **UrbanPop**: porcentaje de la población total del estado.
  4. **Rape**: arrestos por violación (por 100.000 habitantes).
- Para ver si vale la pena hacer un análisis de regresión lineal vemos las correlaciones lineales entre las variables:

```
> data(USArrests)
> attach(USArrests)
> cor(USArrests)
             Murder   Assault   UrbanPop       Rape
Murder   1.00000000 0.8018733 0.06957262 0.5635788
Assault  0.80187331 1.0000000 0.25887170 0.6652412
UrbanPop 0.06957262 0.2588717 1.00000000 0.4113412
Rape     0.56357883 0.6652412 0.41134124 1.0000000
```

Regresiones en R (2)

- Podemos ver que hay una correlación positiva importante entre `Murder` y `Assault`.
- Vamos a modelar los asesinatos en función de los asaltos usando una regresión lineal simple:

$$\text{Murder(Assault)} = \beta_0 + \beta_1 * \text{Assault}$$

```
> reg1<-lm(Murder~Assault,USArrests)
> reg1

Call:
lm(formula = Murder ~ Assault, data = USArrests)

Coefficients:
(Intercept)      Assault
    0.63168      0.04191
```

- Podemos ver que los coeficientes del modelo son $\beta_0 = 0{,}632$ y $\beta_1 = 0{,}042$.

Regresiones en R (3)

- Podemos acceder directamente a los coeficientes y guardarlos en una variable:

```
> reg1.coef<-reg1$coefficients
> reg1.coef
(Intercept)     Assault
 0.63168266  0.04190863
```

- Podemos ver diversos indicadores sobre el modelo lineal con el comando **summary**:

```
> summary(reg1)
Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-4.8528 -1.7456 -0.3979  1.3044  7.9256

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 0.631683   0.854776   0.739    0.464
Assault     0.041909   0.004507   9.298  2.6e-12 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 2.629 on 48 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.643,Adjusted R-squared:  0.6356
F-statistic: 86.45 on 1 and 48 DF,  p-value: 2.596e-12
```

Regresiones en R (4)

- Vemos que el coeficiente de determinación R^2 tiene un valor de 0,643 lo cual no es tan bueno pero aceptable.
- Podemos concluir que el nivel de asaltos si bien provee información útil para modelar una parte de la variabilidad del nivel de homicidios no es suficiente para construir un modelo altamente confiable.
- Puedo guardar los resultados del comando `summary` en una variable y así acceder directamente al coeficiente de determinación:

```
> sum.reg1<-summary(reg1)
> sum.reg1$r.squared
[1] 0.6430008
```

- También puedo acceder a los valores ajustados que son los valores predichos por mi modelo para los datos usados:

```
> reg1$fitted.values
      Alabama        Alaska       Arizona      Arkansas
    10.522119     11.653652     12.952819      8.594322
```

Regresiones en R (5)

- Podemos ver que la correlación lineal al cuadrado entre mis valores ajustados y los observados para la variable de respuesta es equivalente al coeficiente de determinación:

```
> cor(Murder,reg1$fitted.values)^2
[1] 0.6430008
```

- Supongamos ahora que conozco el nivel de asalto de dos estados en otro período para dos lugares pero no conozco el nivel de homicidios.
- Podría usar mi modelo lineal para predecir el nivel de de homicidios.
- Para hacerlo en R debo usar el comando `predict.lm` que recibe el modelo lineal y un data.frame con los datos nuevos:

```
> nuevos.arrestos<-data.frame(Assault=c(500,12))
> predict.lm(object=reg1,newdata=nuevos.arrestos)
       1         2
21.585997  1.134586
> # Esto es equivalente a:
> reg1.coef[1]+reg1.coef[2]*nuevos.arrestos
    Assault
1 21.585997
2  1.134586
```

Regresiones en R (6)

- Ahora estudiaremos una regresión lineal múltiple.
- Podemos ver que la variable **Rape** que representa el nivel de violaciones tiene una correlación menor con el número de asaltos y con el número de homicidios que la correlación que presentan estas dos variables entre sí.
- Vamos a ajustar el siguiente modelo lineal multi-variado:

$$\text{Rape} = \beta_0 + \beta_1 * \text{Assault} + \beta_2 * \text{Murder}$$

- En R para agregar más variables al modelo lineal las agregamos con el signo **+** :

```
reg2<-lm(Rape~Assault+Murder,USArrests)
```

Regresiones en R (7)

```
> summary(reg2)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-17.243  -3.171  -1.171   3.281  18.511

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  8.35011    2.32912   3.585 0.000799 ***
Assault      0.06716    0.02044   3.286 0.001927 **
Murder       0.18155    0.39108   0.464 0.644619
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 7.124 on 47 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.4451,Adjusted R-squared:  0.4215
F-statistic: 18.85 on 2 and 47 DF,  p-value: 9.755e-07
```

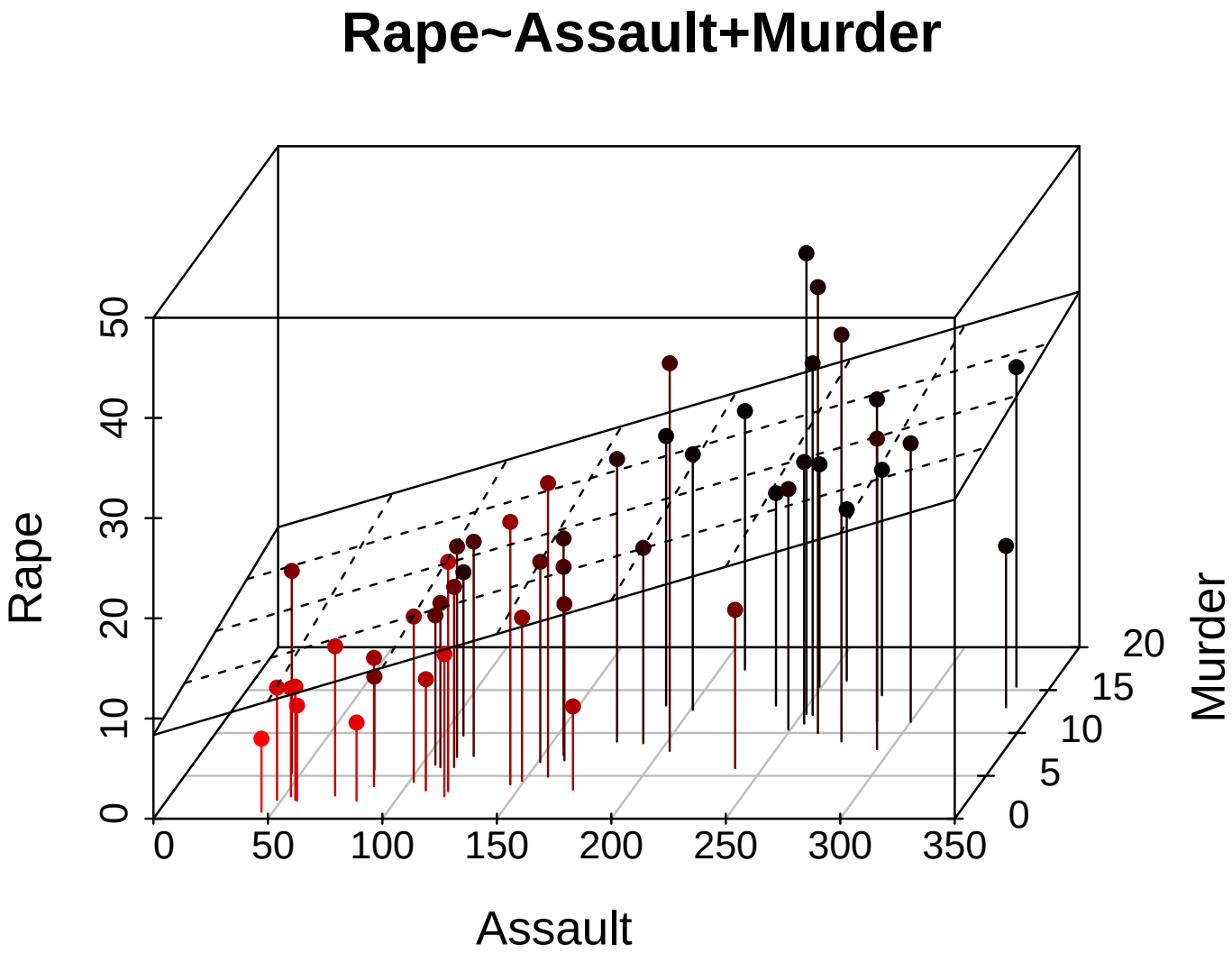
- En este caso el coeficiente de determinación es bajo. Por lo que tendremos baja confianza en la calidad del modelo.

Regresiones en R (8)

- Cuando teníamos una regresión simple podíamos ver el modelo ajustado como una recta.
- Ahora que tenemos dos variables independientes podemos ver el modelo ajustado como un plano.
- Si tuviésemos más variables independientes nuestro modelo sería un hiper-plano.
- Podemos graficar en R el plano de nuestro modelo lineal de dos variables independientes y una dependiente de la siguiente manera:

```
library("scatterplot3d")
s3d <- scatterplot3d(USArrests[,c("Assault","Murder","Rape")],
                     type="h", highlight.3d=TRUE,
                     angle=55, scale.y=0.7, pch=16,
                     main="Rape~Murder+Rape")
s3d$plane3d(reg2, lty.box = "solid")
```

Regresiones Lineales en R (9)



Entrenando un modelo lineal

- Una forma alternativa a ver el problema de regresión es definiendo una función de pérdida $L(\hat{y}, y)$, indicando la pérdida o error de la predicción de $\hat{y}$ cuando la salida verdadera es y.
- Una función de pérdida calcula un escalar a partir de $\hat{y}$ e y.
- Una función de pérdida a usar para regresión es el error cuadrático medio (MSE), que es el SSE normalizado por la cantidad de ejemplos.

$$MSE = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y_i - h(x_i))^2 \tag{7}$$

- El objetivo del entrenamiento es minimizar la pérdida en los datos de entrenamiento.

Entrenando un modelo lineal

- La regresión lineal es un caso particular de modelo de regresión donde los parámetros tienen solución exacta (ecuaciones normales).
- Alternativamente, una regresión se puede se entrenar usando métodos iterativos basados en gradientes.
- Se calculan los gradientes de los parámetros con respecto a la pérdida L, y se mueven los parámetros en las direcciones opuestas del gradiente.
- Diferentes métodos de optimización difieren en cómo se calcula la estimación del error y cómo se define el movimiento en la dirección opuesta al gradiente.

Descenso del Gradiente

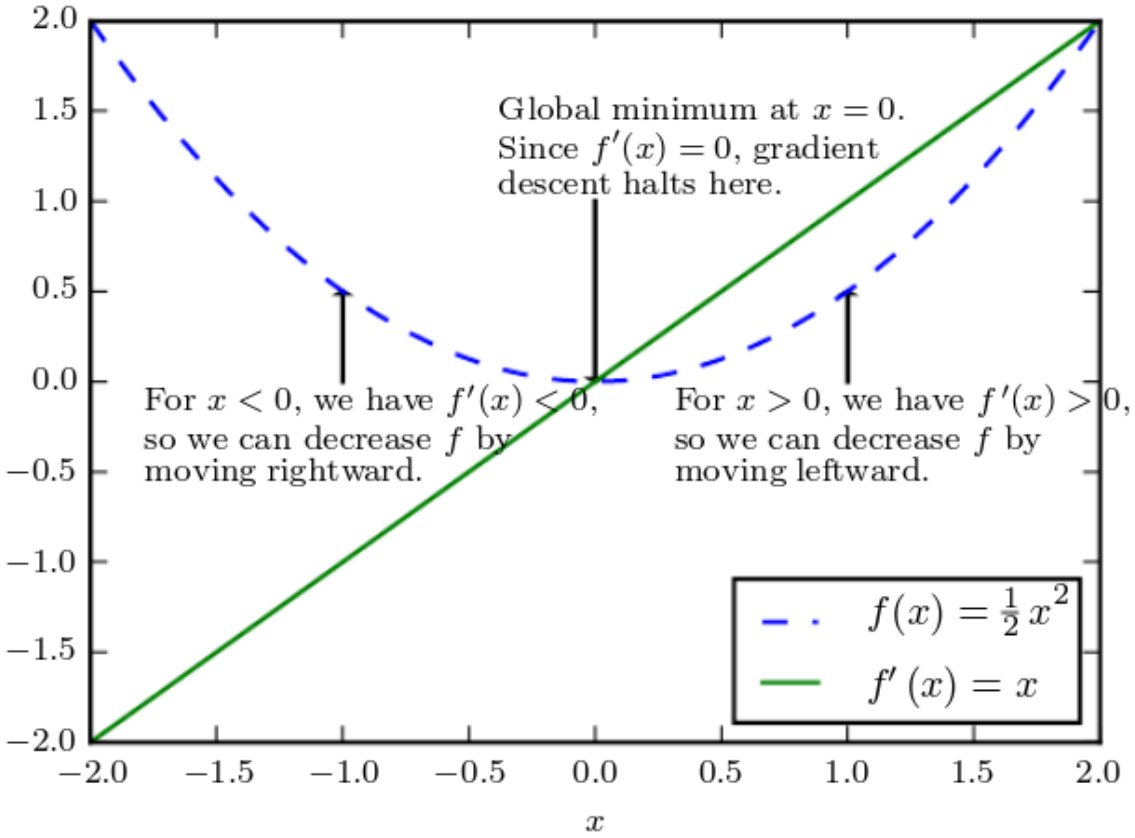
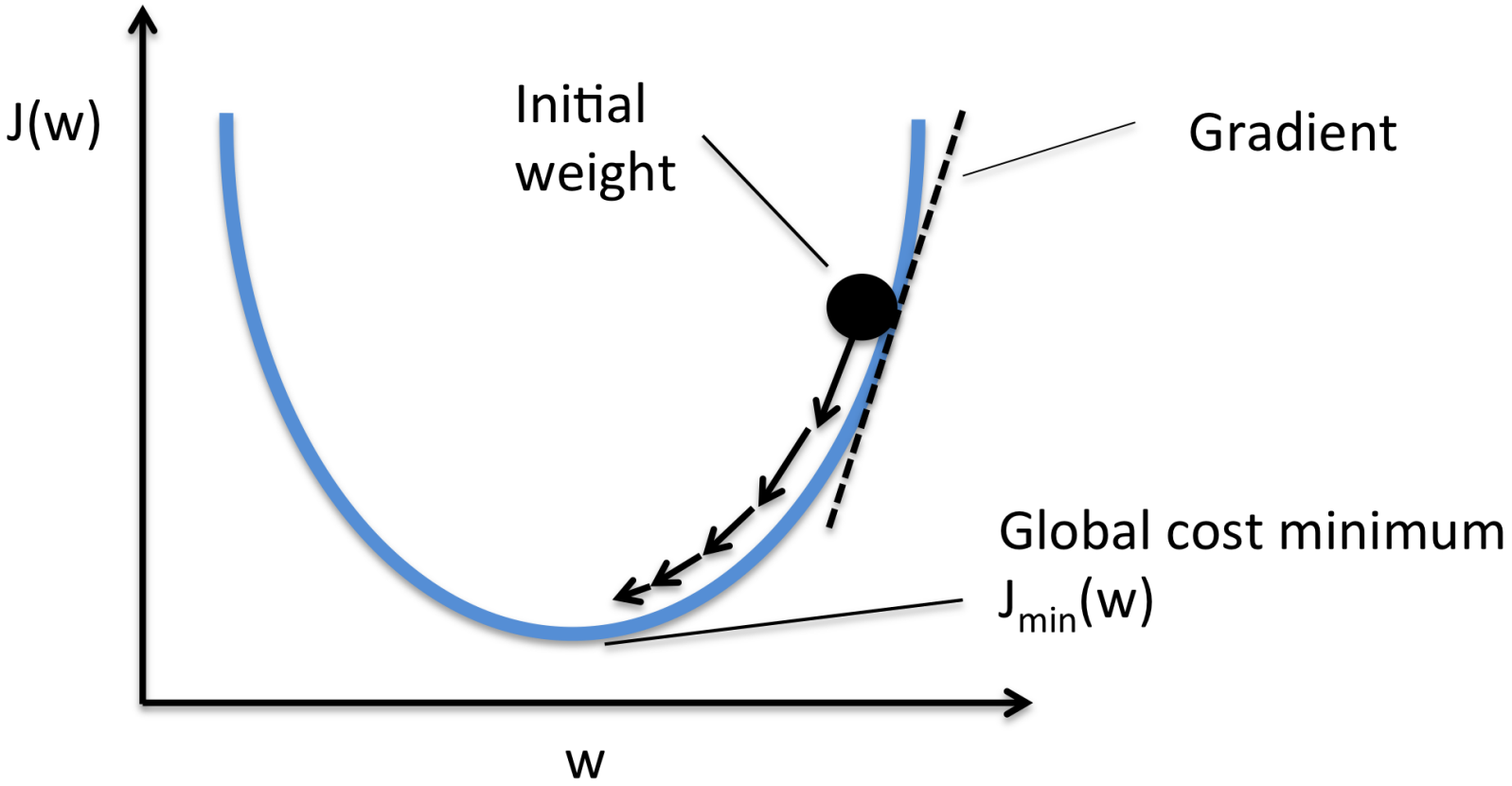


Figure 4.1: Gradient descent. An illustration of how the gradient descent algorithm uses the derivatives of a function to follow the function downhill to a minimum.

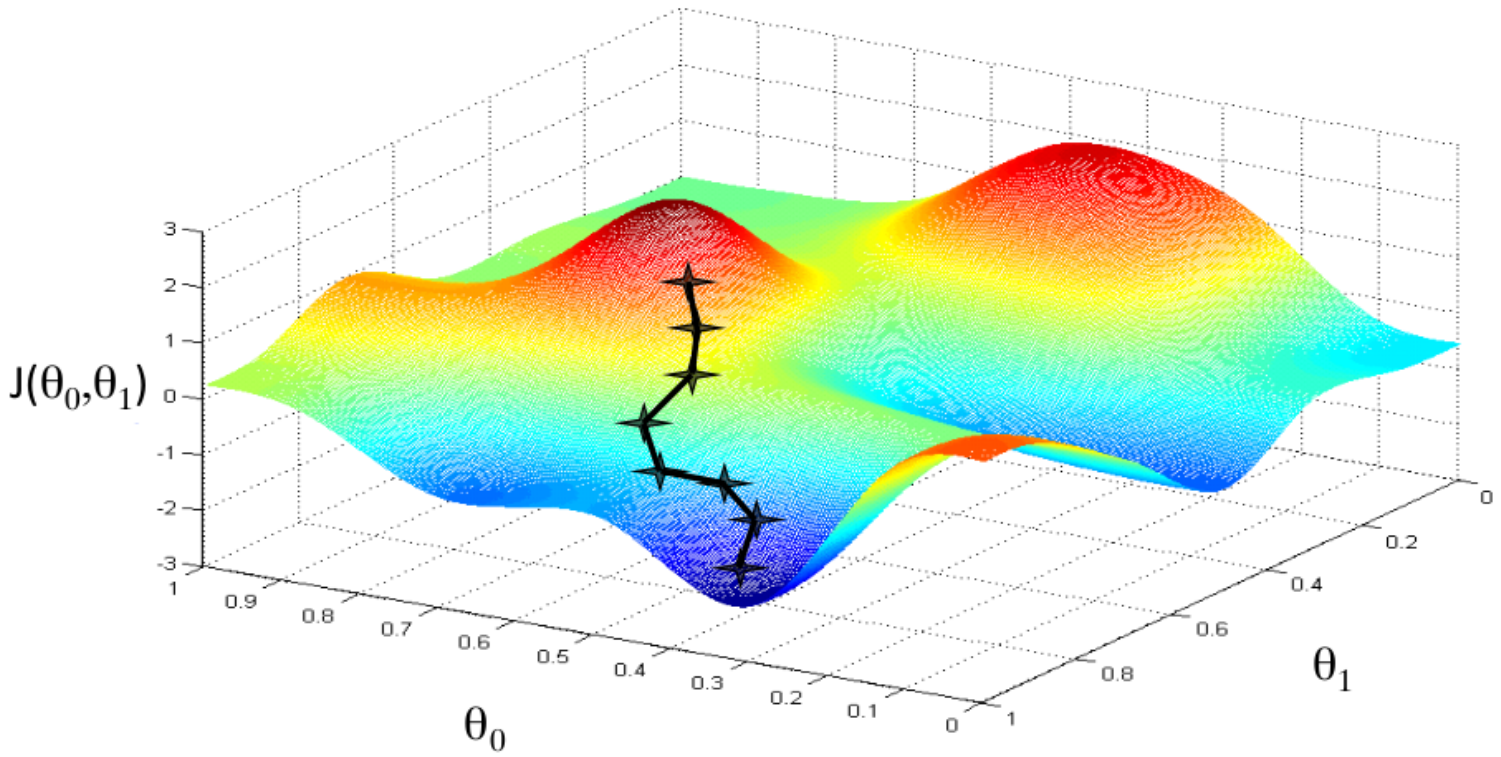
[0][Goodfellow16]

Descenso del Gradiente



[0]Source: https://sebastianraschka.com/images/faq/closed-form-vs-gd/ball.png

Descenso del Gradiente



Descenso del Gradiente Online Estocástico (SGD)

- Se inicializan los parámetros w con valores iniciales aleatorios.
- Por cada dato de entrenamiento (x, y) calculo L con el valor actual de w y actualizo los parámetros usando la siguiente regla hasta converger:
- $w_i \leftarrow w_i - \eta \frac{\partial L}{w_i}(x, y)$ (Para todos los parámetros w_i)

Algorithm 2.1 Online stochastic gradient descent training.

Input:
- Function $f(\boldsymbol{x}; \Theta)$ parameterized with parameters Θ.
- Training set of inputs $\boldsymbol{x_1}, \ldots, \boldsymbol{x_n}$ and desired outputs $\boldsymbol{y_1}, \ldots, \boldsymbol{y_n}$.
- Loss function L.

1: **while** stopping criteria not met **do**
2: Sample a training example $\boldsymbol{x_i}, \boldsymbol{y_i}$
3: Compute the loss $L(f(\boldsymbol{x_i}; \Theta), \boldsymbol{y_i})$
4: $\hat{\boldsymbol{g}} \leftarrow$ gradients of $L(f(\boldsymbol{x_i}; \Theta), \boldsymbol{y_i})$ w.r.t Θ
5: $\Theta \leftarrow \Theta - \eta_t \hat{\boldsymbol{g}}$
6: **return** Θ

Descenso del Gradiente Online Estocástico (SGD)

- La tasa de aprendizaje η puede ser fija a lo largo del proceso de entrenamiento, o se puede decaer en función del paso de tiempo t.
- El error calculado en la línea 3 se basa en un solo dato de entrenamiento y, por lo tanto, es solo una estimación aproximada de la pérdida total L que queremos minimizar.
- El ruido en el cálculo de la pérdida puede dar lugar a gradientes inexactos (un solo dato puede proporcionar información ruidosa).

Funciones de Pérdida para clasificación

El MSE es una función de pérdida para entrenar modelos de regresión. También se puede tener funciones de pérdida para entrenar modelos de clasificación:

- Hinge (función bisagra): para problemas de clasificación binaria, la salida del clasificador es un escalar $\tilde{y}$ y la salida deseada y está en $\{+1, -1\}$. La regla de clasificación es $\hat{y} = sign(\tilde{y})$, y la clasificación se considera correcta cuando $y \cdot \tilde{y} > 0$.

$$L_{\text{hinge(binary)}}(\tilde{y}, y) = \text{máx}(0, 1 - y \cdot \tilde{y})$$

- Esta es la función de pérdida de la SVM (hiperplano de máximo margen).
- ¡Podemos entrenar una SVM lineal usando SGD!
- ¿Es máx una función derivable? Para aplicar SGD a $\text{máx}(0, x)$, el valor del gradiente es 1 cuando $x > 0$ y 0 para el caso contrario.

Regresión Logística

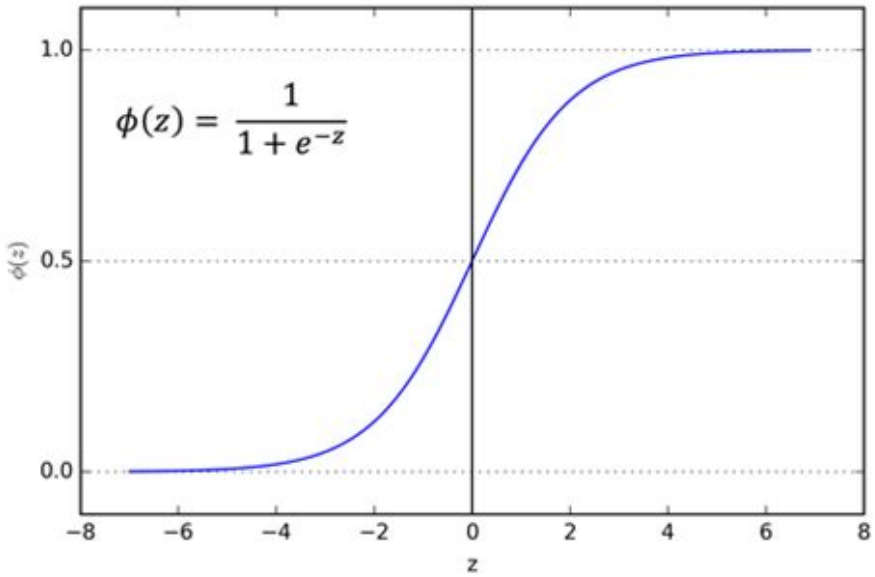
- Una regresión logística estima la probabilidad posterior $P(y|x)$ de una variable binaria y dado los datos observados x ajustando un modelo lineal a los datos.
- Los parámetros del modelo son un vector de parámetros w.
- Si asumimos el término de intercepto como 1 $x_0 = 1$, tenemos una función lineal de la siguiente forma:

$$\tilde{y} = \sum_{i=0}^{n} w_i x_i = w^T x \tag{8}$$

- Para darle una interpretación probabilística a la salida, transformamos $\tilde{y}$ al intervalo $[0, 1]$ usando una función sigmoidal.:

$$g(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}} \tag{9}$$

Regresión Logística



- Esto se puede resumir en la función de perdida logística:

$$L_{\text{logistic}}(\hat{y}, y) = -y \log \hat{y} - (1 - y) \log(1 - \hat{y})$$

- Esta función de perdida es entonces el negativo del log-likelihood de un modelo probabilístico donde $P(y|x)$ sigue una distribución de Bernoulli.
- Muchas funciones de perdidas son el negativo de una función de verosimilitud. Entonces, minimizar la pérdida equivale en esos casos a realizar estimación por máxima verosimilitud.
- ¡Podemos entrenar una regresión logística usando SGD!

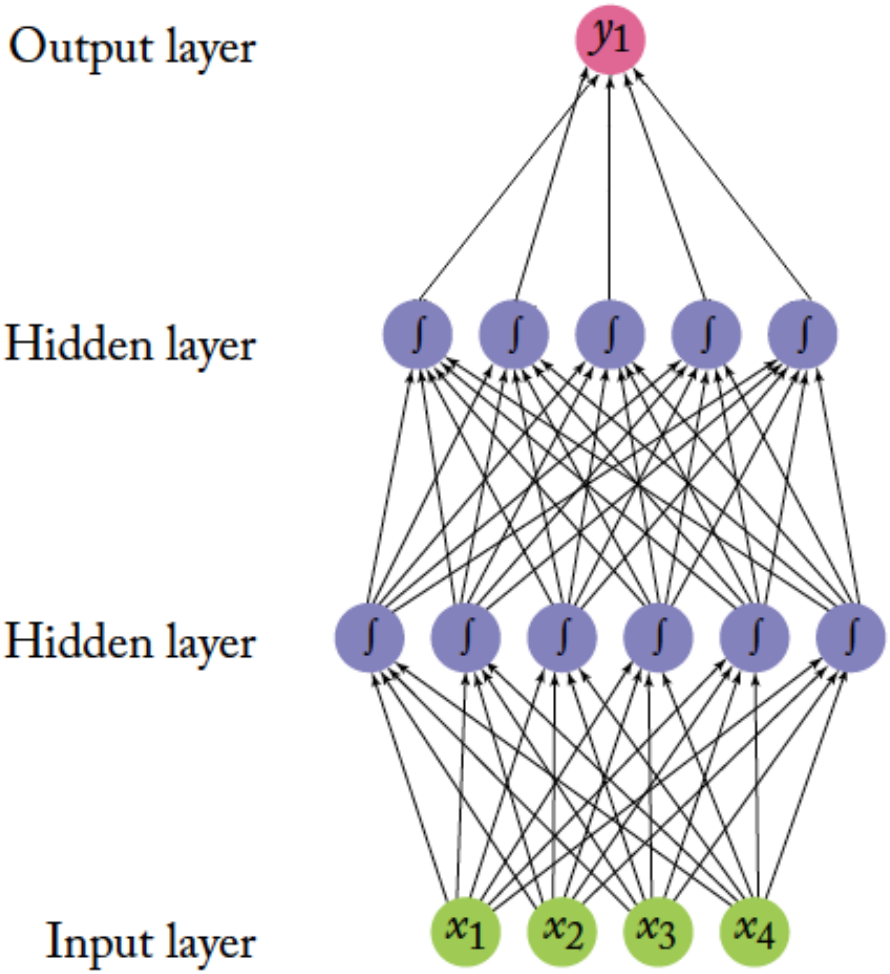
Introducción a las redes neuronales

- Una gran limitación de los modelos lineales que sólo pueden encontrar relaciones lineales entre la entrada y la salida.
- Las redes neuronales son modelos de aprendizaje automático muy populares formados por unidades llamadas **neuronas**.
- Son capaces de aprender relaciones no-lineales entre x e y.
- También se pueden entrenar con métodos de gradiente.

Introducción a las redes neuronales

- Una neurona es una unidad computacional que tiene entradas y salidas escalares.
- Cada entrada tiene un peso asociado w.
- La neurona multiplica cada entrada por su peso y luego las suma (también se pueden usar otras funciones de agregación como **max**).
- Aplica una función de activación g (generalmente no lineal) al resultado, y la pasa a su salida.
- Se pueden apilar varias capas.
- A este tipo de redes se les conoce como Feedforward Networks o Multi-Layer Perceptron.

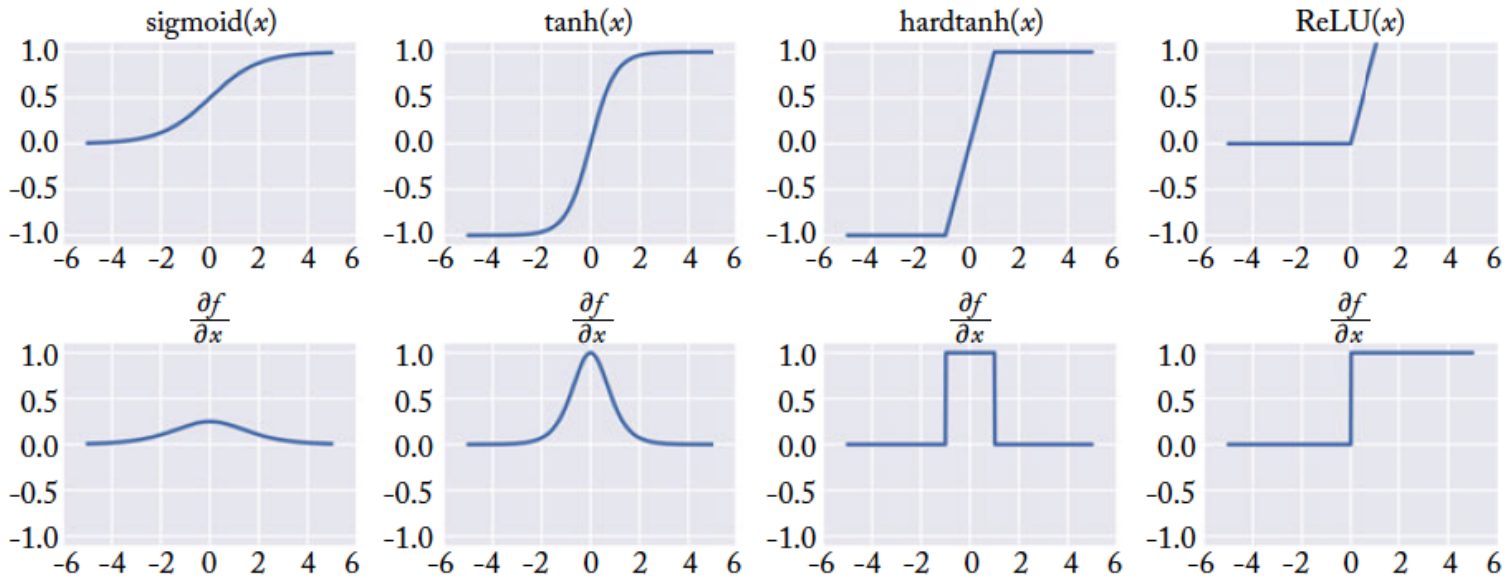
Feedforward Network de dos capas



[0]Source:[Goldberg, 2016]

Funciones de activación

- La función de activación no lineal *g* tiene un papel crucial en la capacidad de la red para representar funciones complejas.
- Si quitamos la no-linealidad aportada por *g*, la red neuronal sólo podría representar transformaciones lineales de la entrada.



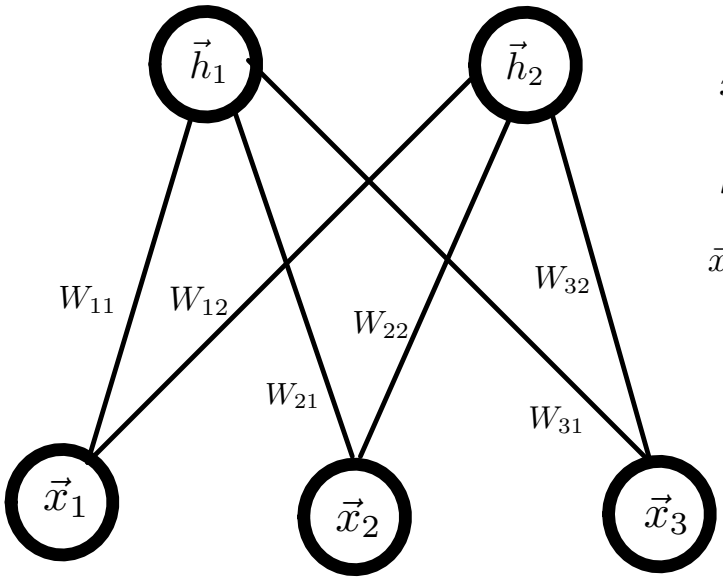
[0]Source:[Goldberg, 2016]

Redes Feedforward

- La red feedforward de la imagen es una pila de modelos lineales separados por funciones no lineales.
- Los valores de cada fila de neuronas en la red se pueden considerar como un vector.
- La capa de entrada es un vector de 4 dimensiones ($\vec{x}$), y la capa de arriba es un vector de 6 dimensiones ($\vec{h}^1$).
- Esta capa de conexión completa se puede ver una transformación lineal de 4 a 6 dimensiones.
- Una capa de conexión completa implementa una multiplicación vector-matriz, $\vec{h} = \vec{x}W$.
- El peso de la conexión desde la neurona i en la fila de entrada hasta la neurona j en la fila de salida es $W_{[i,j]}$.
- Los valores de $\vec{h}$ se transforman usando una función no lineal g que se aplica a cada elemento antes de pasar como entrada a la siguiente capa.

[0] En la notación asumimos que los vectores son filas y los superíndices corresponden a capas de red.

Capa complementamente conectada como una multiplicación vector por matriz



$$\vec{x} = [\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3] \qquad W = \begin{pmatrix} W_{1,1} & W_{1,2} \\ W_{2,1} & W_{2,2} \\ W_{3,1} & W_{3,2} \end{pmatrix}$$

$$\vec{h} = \vec{x}W$$

$$\vec{x}W = [\vec{x}_1 * W_{11} + \vec{x}_2 * W_{21} + x_3 * W_{31}, \vec{x}_1 * W_{12} + \vec{x}_2 * W_{22} + x_3 * W_{32}]$$

$$\vec{h} = [\vec{h}_1, \vec{h}_2]$$

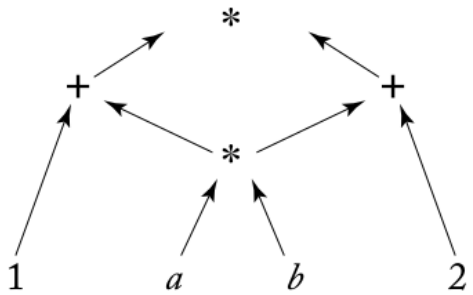
La red como una función

- El perceptrón multicapa (MLP) de la figura se puede escribir como la siguiente función matemática:

$$
\begin{aligned}
NN_{MLP2}(\vec{x}) &= \vec{y} \\
\vec{h}^1 &= g^1(\vec{x}W^1 + \vec{b}^1) \\
\vec{h}^2 &= g^2(\vec{h}^1 W^2 + \vec{b}^2) \\
\vec{y} &= \vec{h}^2 W^3 \\
\vec{y} &= (g^2(g^1(\vec{x}W^1 + \vec{b}^1)W^2 + \vec{b}^2))W^3.
\end{aligned}
\tag{10}
$$

El Grafo de Cómputo

- Las redes neuronales se entrenan usando descenso por gradiente.
- En teoría, se podrían calcular los gradientes de los diversos parámetros de una red a mano e implementarlos en código.
- Este procedimiento es engorroso y propenso a errores.
- Es preferible usar herramientas de derivación automática [Bengio, 2012].
- Un grafo de cómputo (computation graph) es un grafo capaz de representar cualquier proceso de cómputo matemático (Ej: evaluar una red neuronal).
- Considere, por ejemplo el grafo computacional para $(a * b + 1) * (a * b + 2)$:



- El cálculo de $a * b$ es compartido.
- La estructura del grafo define el orden del cálculo en términos de las dependencias entre los diferentes componentes.

El Grafo de Cómputo

- El grafo de cómputo nos permite:
  1. Construir fácilmente redes neuronales arbitrarias.
  2. Evaluar sus predicciones para una entrada dada (forward pass).

Algorithm 5.3 Computation graph forward pass.

1: **for** i = 1 to N **do**
2: Let $a_1, \ldots, a_m = \pi^{-1}(i)$
3: $v(i) \leftarrow f_i(v(a_1), \ldots, v(a_m))$

  3. Calcular los gradientes para sus parámetros con respecto a funciones de perdida arbitrarias (backward pass o backpropagation).

Algorithm 5.4 Computation graph backward pass (backpropagation).

1: $d(N) \leftarrow 1$ ▷ $\frac{\partial N}{\partial N} = 1$
2: **for** i = N-1 to 1 **do**
3: $d(i) \leftarrow \sum_{j \in \pi(i)} d(j) \cdot \frac{\partial f_j}{\partial i}$ ▷ $\frac{\partial N}{\partial i} = \sum_{j \in \pi(i)} \frac{\partial N}{\partial j} \frac{\partial j}{\partial i}$

- El algoritmo de backpropagation (backward pass) esencialmente sigue la regla de la cadena en derivación[1].

[1] Un muy buen tutorial del algoritmo backpropagation usando la abstracción del grafo de cómputo:
https://colah.github.io/posts/2015-08-Backprop/

SGD por Mini-batches

- SGD es susceptible al ruido inducido por un único ejemplo (un outlier puede mover mucho el gradiente).
- Una forma común para reducir este ruido es estimar el error y los gradientes sobre muestras de *m* ejemplos.
- Esto se llama minibatch SGD.
- Valores grandes para m *m* dan una mejor estimación del gradiente en base al dataset completo, mientras que valores más pequeños permiten realizar más actualizaciones y converger más rápido.
- Para tamaños razonables de *m* , algunas arquitecturas computacionales (i.e., GPUs, TPUs) permiten paralelizar SGD eficientemente (es la única forma de entrenar redes de varias capas en tiempo razonable).

Descenso de Gradiente Estocástico por Mini-batches

Algorithm 2.2 Minibatch stochastic gradient descent training.

Input:

- Function $f(\boldsymbol{x}; \Theta)$ parameterized with parameters Θ.
- Training set of inputs $\boldsymbol{x_1}, \ldots, \boldsymbol{x_n}$ and desired outputs $\boldsymbol{y_1}, \ldots, \boldsymbol{y_n}$.
- Loss function L.

---

while stopping criteria not met **do**
  Sample a minibatch of m examples $\{(\boldsymbol{x_1}, \boldsymbol{y_1}), \ldots, (\boldsymbol{x_m}, \boldsymbol{y_m})\}$
  $\hat{\boldsymbol{g}} \leftarrow 0$
  for $i = 1$ to m **do**
    Compute the loss $L(f(\boldsymbol{x_i}; \Theta), \boldsymbol{y_i})$
    $\hat{\boldsymbol{g}} \leftarrow \hat{\boldsymbol{g}} +$ gradients of $\frac{1}{m} L(f(\boldsymbol{x_i}; \Theta), \boldsymbol{y_i})$ w.r.t Θ
  $\Theta \leftarrow \Theta - \eta_t \hat{\boldsymbol{g}}$
return Θ

---

[1] Source:[Goldberg, 2016]

Comentarios

- Las redes neuronales son modelos muy poderosos para regresión y clasificación.
- El uso de redes con varias capas se llama popularmente como Deep Learning.
- Existen arquitecturas de red que son buenas para aprender representaciones sobre datos complejos: texto, imágenes, audio, video.
- Arquitecturas famosas: redes neuronales convolucionales, redes recurrentes y redes de atención.
- La alta capacidad de estas redes las hace muy proclives al overfitting.
- Hay varias técnicas para mitigarlo: regularización, drop-out, batch normalization.

Frameworks para Deep Learning

Varios paquetes de software implementan el modelo de grafo de cómputo.
Estos paquetes implementan los componentes esenciales (tipos de nodo) para definir una amplia gama de arquitecturas de redes neuronales.

- TensorFlow (`https://www.tensorflow.org/`): una biblioteca de software de código abierto para cálculos numéricos utilizando data-flow graphs desarrollados originalmente por Google Brain Team.
- Keras: API de redes neuronales de alto nivel que corre sobre Tensorflow y otros backends (`https://keras.io/`).
- PyTorch: biblioteca de código abierto de aprendizaje automático para Python, basada en Torch, desarrollada por el grupo de investigación de inteligencia artificial de Facebook. Es compatible con la construcción de grafos de cómputo dinámicos, se crea un grafo de cómputo diferente desde cero para cada muestra de entrenamiento. (`https://pytorch.org/`)

Bilbiografía I


L. Wasserman *All of Statistics: A Concise Course in Statistical Inference*, Springer Texts in Statistics, 2005.


Goldberg, Y. (2016).
A primer on neural network models for natural language processing.
J. Artif. Intell. Res.(JAIR), 57:345–420.


Goodfellow, Ian, Yoshua Bengio, and Aaron Courville.
Deep learning. MIT press, 2016.