Implementación de Redes Neuronales

Redes ++

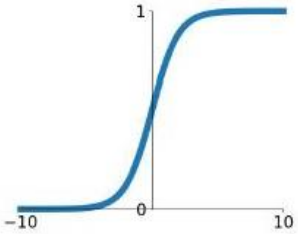
¿Qué función de activación se usa en la última capa cuando tengo una clasificación multi clase?

- Regresión -> sigmoidea , lineal, ReLu, etc
- Clasificación de clases excluyentes -> sigmoidea
- Clasificación N clases simultaneas -> ??

Funciones de activación

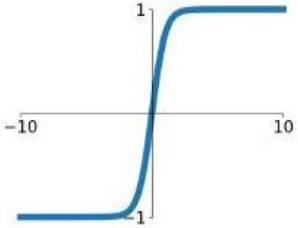
Sigmoid

$$\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$$



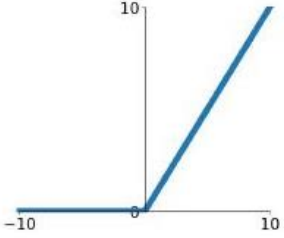
tanh

$$\tanh(x)$$



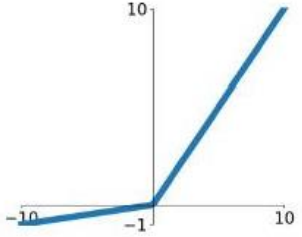
ReLU

$$\max(0, x)$$



Leaky ReLU

$$\max(0.1x, x)$$

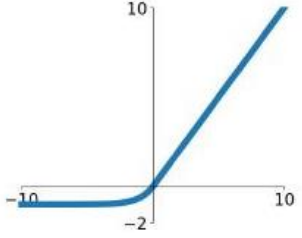


Maxout

$$\max(w_1^T x + b_1, w_2^T x + b_2)$$

ELU

$$\begin{cases} x & x \geq 0 \\ \alpha(e^x - 1) & x < 0 \end{cases}$$



Funciones de activación

- **Softmax**: función exponencial normalizada. Se utiliza como función de activación de la capa de salida en modelos de clasificación, interpretándola como ***scoring***, según el modelo, de pertenecer a dicha clase.

$$\sigma(z)_j = \frac{e^{z_j}}{\sum_k e^{z_k}}$$

$$\begin{bmatrix} 1.6 \\ 5.1 \\ 2.2 \\ 0.7 \\ 1.1 \end{bmatrix} \rightarrow \frac{e^{z_i}}{\sum_{j=1}^{K} e^{z_j}} \rightarrow \begin{bmatrix} 0.02 \\ 0.90 \\ 0.05 \\ 0.01 \\ 0.02 \end{bmatrix}$$

Que pasa si tengo una Red Neuronal muy compleja?

OVERFITTING!!

¿Cómo lo soluciono?

Métodos de regularización

Son métodos que ayudan a una mejor generalización, es decir, que el modelo funcione en datos que nunca vió. Los más usados son:

- Regularización L1 y L2
- Dropout
- Early stopping
- Data augmentation

Regularización L1 y L2

Penalizan el valor de los pesos de la red. Esto evita que se le dé más relevancia a una característica que a otra. Se le agrega un término en la función de costos proporcional a los pesos.

Si es proporcional al módulo de los pesos se llama ***Regularización L1***, si es proporcional al módulo cuadrado se le llama ***Regularización L2***.

Regularización L1 y L2

$$Loss = Error(y, \hat{y})$$

Loss function with no regularisation

$$Loss = Error(y, \hat{y}) + \lambda \sum_{i=1}^{N} |w_i|$$

Loss function with L1 regularisation

$$Loss = Error(y, \hat{y}) + \lambda \sum_{i=1}^{N} w_i^2$$

Loss function with L2 regularisation

Ejemplos de Regularización

Ejemplo - XOR - red 4 -> 1 Neuronas (con regu)

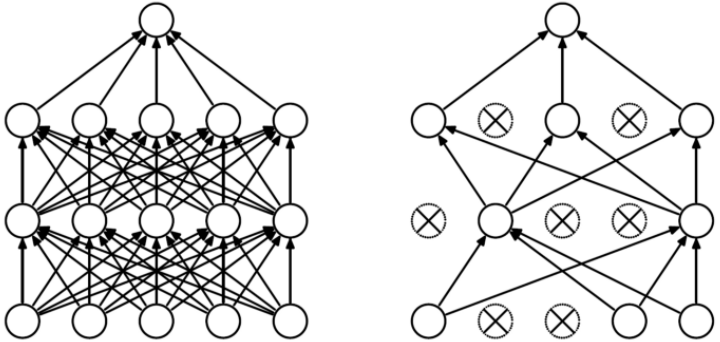
(Veamos que pasa si cambiamos la importancia de la regularización, podemos deducir algo?).

Ejemplo dona - con reg

(Veamos qué pasa con los pesos y las funciones de activación, ¿podemos deducir algo?)

Dropout

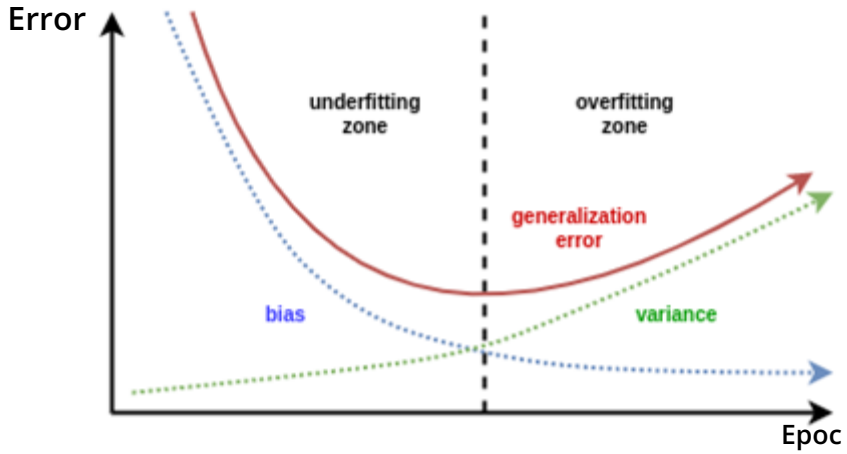
Método de regularización que evita codependencias en las conexiones de la red. La idea es “apagar” activaciones aleatoriamente durante el entrenamiento. Esto hace que el buen funcionamiento de la red no dependa de unas pocas neuronas.



Early stopping

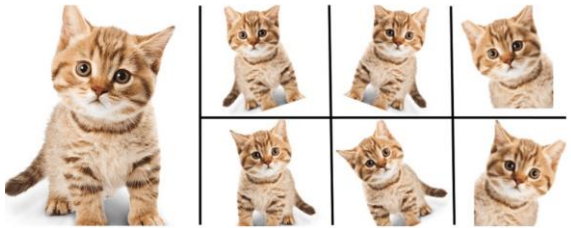
La idea es evitar el sobreajuste parando el entrenamiento antes de que el error del set validación empieza aumentar.

Este método busca entonces quedarse con los pesos en la instancia óptima.



Data Augmentation

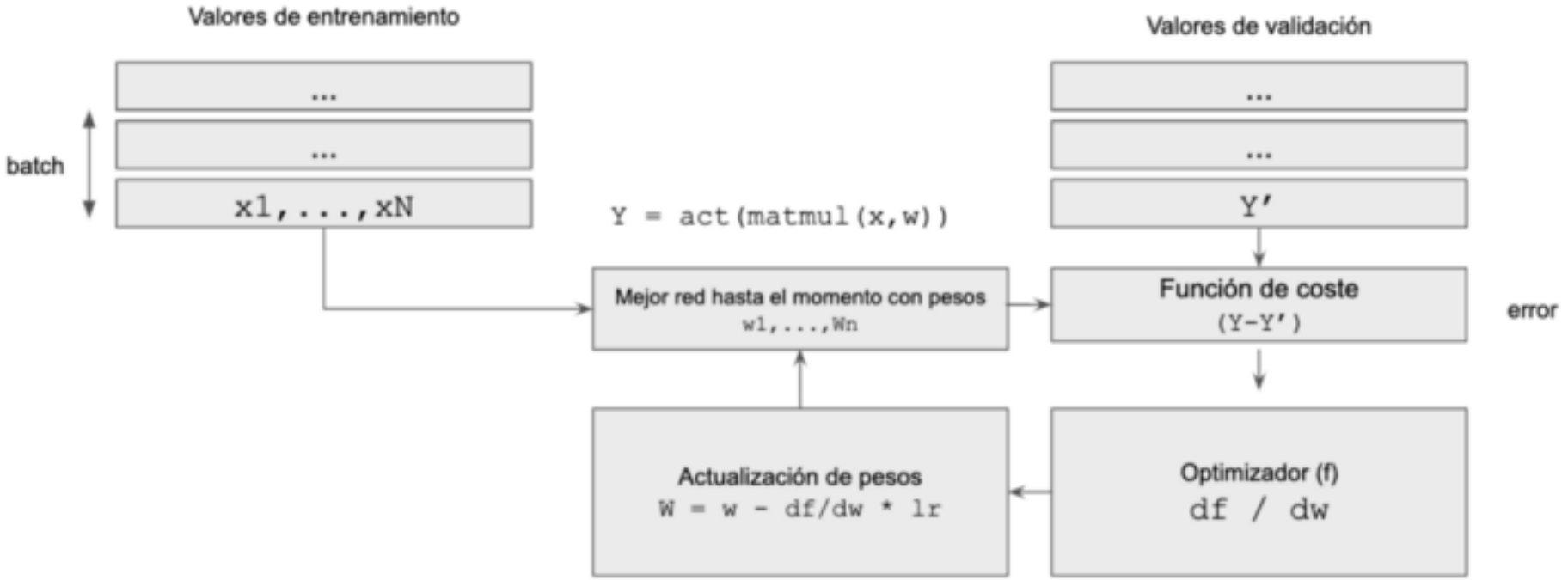
La idea es agregar datos usando los datos que se tienen y aplicarles transformaciones que los conviertan en nuevos datos, de manera que sean verosímiles. Ej:



Es especialmente útil cuando se trabaja con imágenes. En general es difícil encontrar las transformaciones a aplicar.

Optimizadores

Un optimizador es una implementación concreta del algoritmo de ***backpropagation***



Optimizadores

Los optimizadores más utilizados son:

- **SGD:** *stochastic gradient descen*t

- **Momentum**
- Nesterov
- **RMSprop**
- **AdaGrad**
- **Adam**
- **Nadam**

+ sofisticados

Utilizan otra información además del gradiente para modificar los pesos, como derivadas segundas.

Optimizadores: SGD

SGD: *Stochastic Gradient Descent (SGD)*

Backpropagation **simple, sin ningún tipo de optimización, tal y como lo vimos en clase. Algoritmo de la década de 1960.**

Para implementar *SGD*, en Keras, tenemos que usar el optimizador SGD.

```
optimizer = keras.optimizers.SGD(lr=0.001)
```

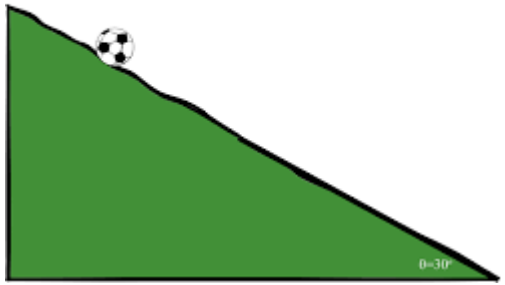
Optimizadores: *Momentum*

Propuesto por Boris Polyak en 1964

Idea principal: Imaginemos una pelota rodando por una colina…

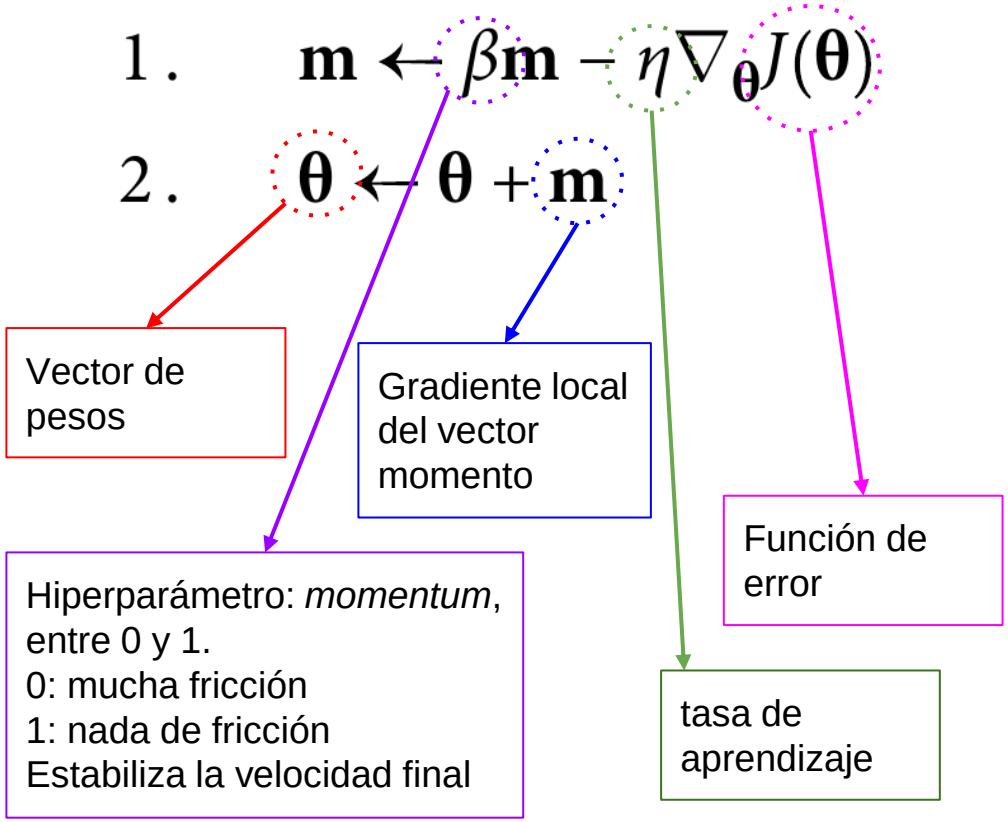
Primero irá despacio, luego irá cada vez más rápido hasta alcanzar una velocidad final constante.

A diferencia del ***backpropagation*** tradicional, en donde los pasos son regulares aquí son cada vez más rápidos.



Optimizadores: *Momentum*

El gradiente se utiliza para la aceleración y no para la velocidad.



Optimizadores: *Momentum*

Para implementar *Momentum*, en Keras, tenemos que usar el optimizador SGD, con el hiperparámetro: *momentum* distinto de cero.

```
optimizer = keras.optimizers.SGD(lr=0.001, momentum=0.9)
```

Lo malo es que añade un nuevo hiperparámetro que ajustar.

Lo bueno es que 0.9 suele funcionar bien en la mayoría de los casos, mejorando a Backpropagation tradicional

Optimizadores: *Nesterov*

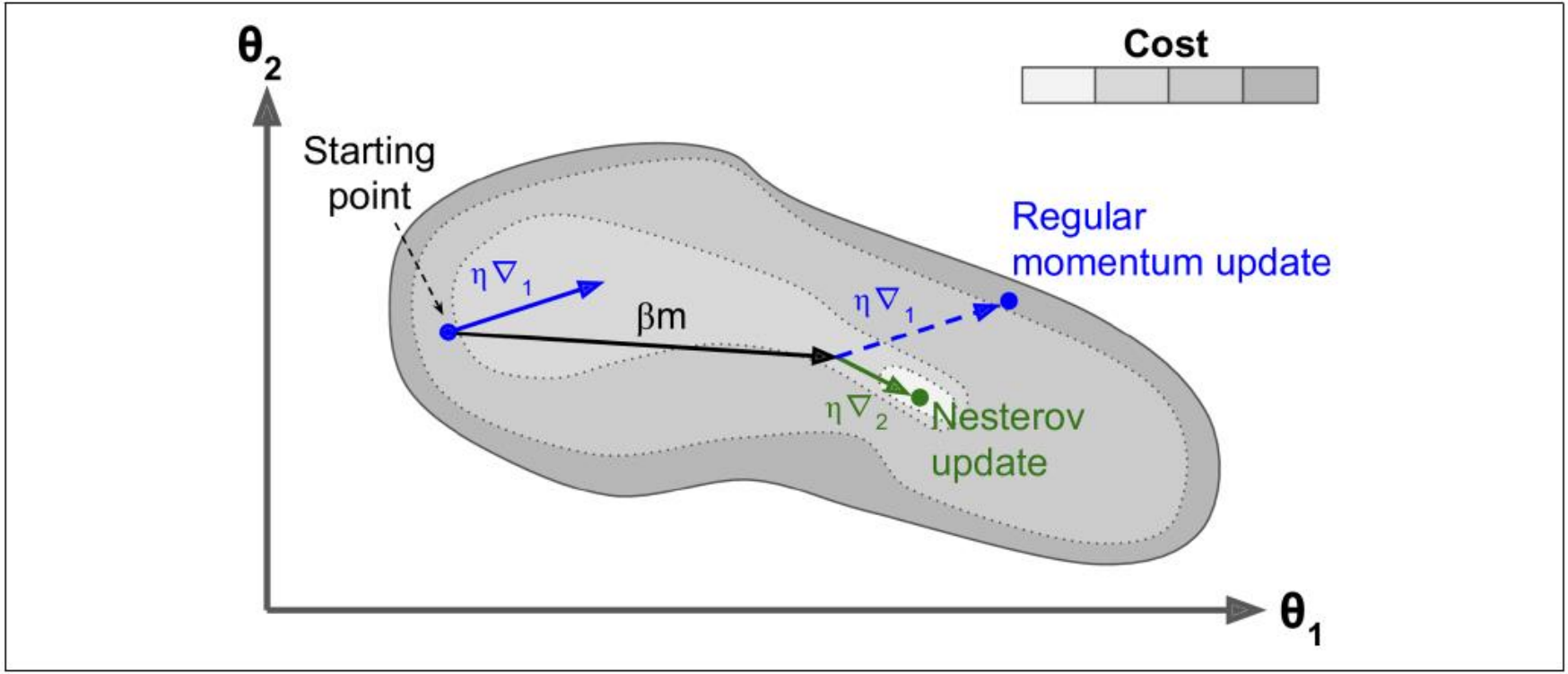
Propuesta por Yurii Nesterov en 1983

Variante de *Momentum*, en vez de calcular el gradiente del error en el punto actual, lo calcula un poco más adelante (en la dirección del **momento**): $\theta + \boldsymbol{\beta}\mathrm{m}$

$$1. \quad \mathbf{m} \leftarrow \beta\mathbf{m} - \eta\nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta} + \beta\mathbf{m})$$

$$2. \quad \boldsymbol{\theta} \leftarrow \boldsymbol{\theta} + \mathbf{m}$$

Optimizadores: *Nesterov*



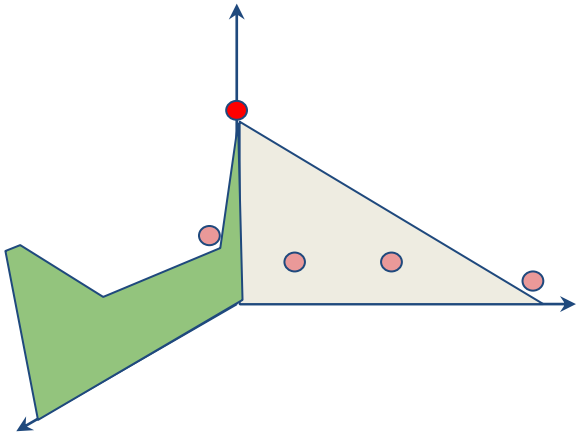
Optimizadores: *Nesterov*

Para implementar *Nesterov*, en Keras, tenemos que usar el optimizador SGD, pero con la opción **nesterov** en ***True***:

```
optimizer = keras.optimizers.SGD(lr=0.001, momentum=0.9,
            nesterov=True)
```

Suele ser más rápido que Momentum

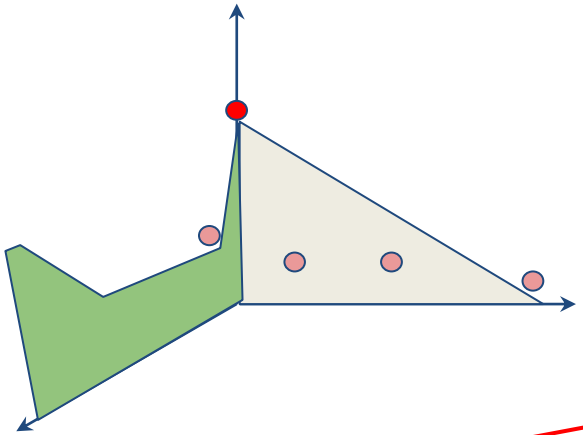
Optimizadores: *AdaGrad*



Presentado por John Duchi y otros en 2011

Uno de los problemas de los otros métodos es que en N dimensiones,el error descenderá por la dimensión con la pendiente más empinada, que no necesariamente será que conduzca al mínimo global.
Esto implica que hallará primero el mínimo local (más empinado) y luego irá lentamente hacia el mínimo global.

Optimizadores: *AdaGrad*



AdaGrad reduce el vector gradiente a lo largo de las dimensiones más empinadas.

1. $\mathbf{s} \leftarrow \mathbf{s} + \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta}) \otimes \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$

2. $\boldsymbol{\theta} \leftarrow \boldsymbol{\theta} - \eta \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta}) \oslash \sqrt{\mathbf{s} + \varepsilon}$

Esto es Backpropagation normal

Pero el gradiente está dividido por un término: $\sqrt{(s+\varepsilon)}$, que dependerá de cuan empinado es.
El símbolo $\oslash$ indica división de vectores, cada elemento en el vector gradiente es dividido por el término

Optimizadores: *AdaGrad*

s es un vector, en donde se actualiza en cada paso el valor actual sumandole el cuadrado del gradiente.

ε: es un término para atenuar este valor y evitar dividir por cero.

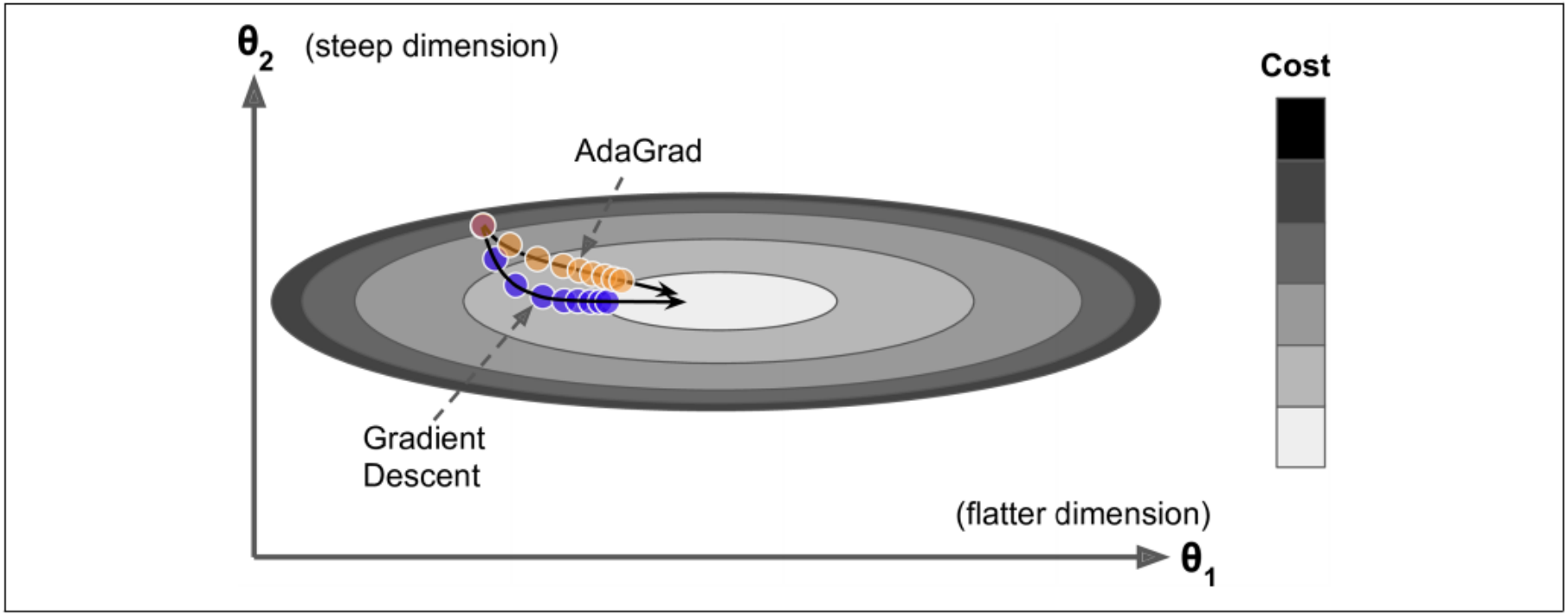
AdaGrad reduce el vector gradiente a lo largo de las dimensiones más empinadas.

1. $\mathbf{s} \leftarrow \mathbf{s} + \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta}) \otimes \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$

2. $\boldsymbol{\theta} \leftarrow \boldsymbol{\theta} - \eta \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta}) \oslash \sqrt{\mathbf{s} + \varepsilon}$

En otras palabras, cuanto más alto es el gradiente (la derivada), más empinada es la función de error en esa dimensión. Ya que el gradiente mide “la pendiente”.
Al dividir esta pendiente, por un valor proporcional a ella misma, se suaviza, y en todas las dimensiones el descenso por gradiente es similar, evitando caer en *valles* locales.

Optimizadores: *AdaGrad*



Acá se ve AdaGrad vs Backpropagation, Ada no se desvía y corrige el rumbo hacia el mínimo global

Optimizadores: *AdaGrad*

Lo bueno:

Con frecuencia **AdaGrad** tiene un buen desempeño para problemas cuadráticos simples.
Es bueno para tareas sencillas como regresión lineal.

Lo malo:

A menudo se detiene demasiado pronto cuando entrena redes neuronales. Muchas veces se detiene antes de alcanzar el mínimo global.
No debería usarse para entrenar redes profundas.

Sirve para entender cómo funcionan otro métodos más complejos.

Optimizadores: *RMSProp*

Creado por Geoffrey Hinton y Tijmen Tieleman en 2012

Soluciona el principal problema de AdaGrad al ir “olvidando” las pendientes anteriores, a medida que sigue avanzando. Es decir solo acumula los gradientes de las iteraciones más recientes.

$$1.\quad \mathbf{s} \leftarrow \beta \mathbf{s} + (1-\beta)\nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta}) \otimes \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$$

$$2.\quad \boldsymbol{\theta} \leftarrow \boldsymbol{\theta} - \eta\, \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta}) \oslash \sqrt{\mathbf{s} + \varepsilon}$$

β es la tasa de decaimiento, y suele configurarse como 0.9. Es un nuevo hiperparámetro, pero suele funcionar bien con este valor predeterminado.
En Keras:

```
optimizer = keras.optimizers.RMSprop(lr=0.001, rho=0.9)
```

rho es β

RMSProp suele ser mejor que AdaGrad y era el preferido antes de que apareciese Adam.

Optimizadores: Adam

Adam: **Ada**ptive **m**oment estimation
fue presentado en 2014 por *Diederik P. Kingma* y *Jimmy Ba.*
Combina las ideas de **Momentum** y **RMSProp**.
Hace un seguimiento de una media de decaimiento exponencial de gradientes pasados y de gradientes cuadrados pasados.

Optimizadores: Adam

1. $\mathbf{m} \leftarrow \beta_1 \mathbf{m} - (1 - \beta_1) \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$
2. $\mathbf{s} \leftarrow \beta_2 \mathbf{s} + (1 - \beta_2) \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta}) \otimes \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$
3. $\widehat{\mathbf{m}} \leftarrow \dfrac{\mathbf{m}}{1 - \beta_1^t}$
4. $\widehat{\mathbf{s}} \leftarrow \dfrac{\mathbf{s}}{1 - \beta_2^t}$
5. $\boldsymbol{\theta} \leftarrow \boldsymbol{\theta} + \eta \, \widehat{\mathbf{m}} \oslash \sqrt{\widehat{\mathbf{s}} + \varepsilon}$

hiperparámetro, decaimiento del momento = 0.9

hiperparámetro, decaimiento del escalado = 0.999

número de iteración

hiperparámetro, suavizamiento = 10^{-7}

Valores, por defecto.

Optimizadores: Adam

1. $\mathbf{m} \leftarrow \beta_1 \mathbf{m} - (1 - \beta_1) \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$
2. $\mathbf{s} \leftarrow \beta_2 \mathbf{s} + (1 - \beta_2) \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta}) \otimes \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$
3. $\widehat{\mathbf{m}} \leftarrow \dfrac{\mathbf{m}}{1 - \beta_1^{\,t}}$
4. $\widehat{\mathbf{s}} \leftarrow \dfrac{\mathbf{s}}{1 - \beta_2^{\,t}}$
5. $\boldsymbol{\theta} \leftarrow \boldsymbol{\theta} + \eta \widehat{\mathbf{m}} \oslash \sqrt{\widehat{\mathbf{s}} + \varepsilon}$

Esto es muy parecido a RMSProp

Pero acá tengo no el gradiente sino el array de momento como *Momentum*

Optimizadores: Adam

1. $\mathbf{m} \leftarrow \beta_1 \mathbf{m} - (1 - \beta_1)\nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$
2. $\mathbf{s} \leftarrow \beta_2 \mathbf{s} + (1 - \beta_2)\nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta}) \otimes \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$

¿Qué son estos sombreritos?

3. $\widehat{\mathbf{m}} \leftarrow \dfrac{\mathbf{m}}{1 - \beta_1^{\,t}}$
4. $\widehat{\mathbf{s}} \leftarrow \dfrac{\mathbf{s}}{1 - \beta_2^{\,t}}$
5. $\boldsymbol{\theta} \leftarrow \boldsymbol{\theta} + \eta\, \widehat{\mathbf{m}} \oslash \sqrt{\widehat{\mathbf{s}} + \varepsilon}$

m y **s** se inicializan en 0 => cuando t=1, por lo que m y s “sombrero” son también cero.
Luego a medida que t > 0, los hiperparámetros β_1 y β_2 tienden a cero, así que **m** y **s** quedan divididos por 1, y estas dos ecuaciones casi no tienen impacto.
Solo ayudan en las primeras iteraciones, para darle más fuerza a s y m

Optimizadores: Adam

Para implementar *Adam*, en Keras, tenemos que usar el optimizador Adam

```
optimizer = keras.optimizers.Adam(lr=0.001, beta_1=0.9,
                                  beta_2=0.999)
```

Optimizadores: AdaMax

AdaMax: Modificación de Adam

En general Adam da mejores resultados, pero depende del conjunto de datos.

1. $\mathbf{m} \leftarrow \beta_1 \mathbf{m} - (1 - \beta_1) \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$
2. $\mathbf{s} \leftarrow \max(\beta_2 \mathbf{s}, \nabla_{\theta} J(\boldsymbol{\theta}))$
3. $\widehat{\mathbf{m}} \leftarrow \dfrac{\mathbf{m}}{1 - \beta_1^{\,t}}$

5. $\boldsymbol{\theta} \leftarrow \boldsymbol{\theta} + \eta \, \widehat{\mathbf{m}} \oslash \mathbf{s}$

Optimizadores: Nadam

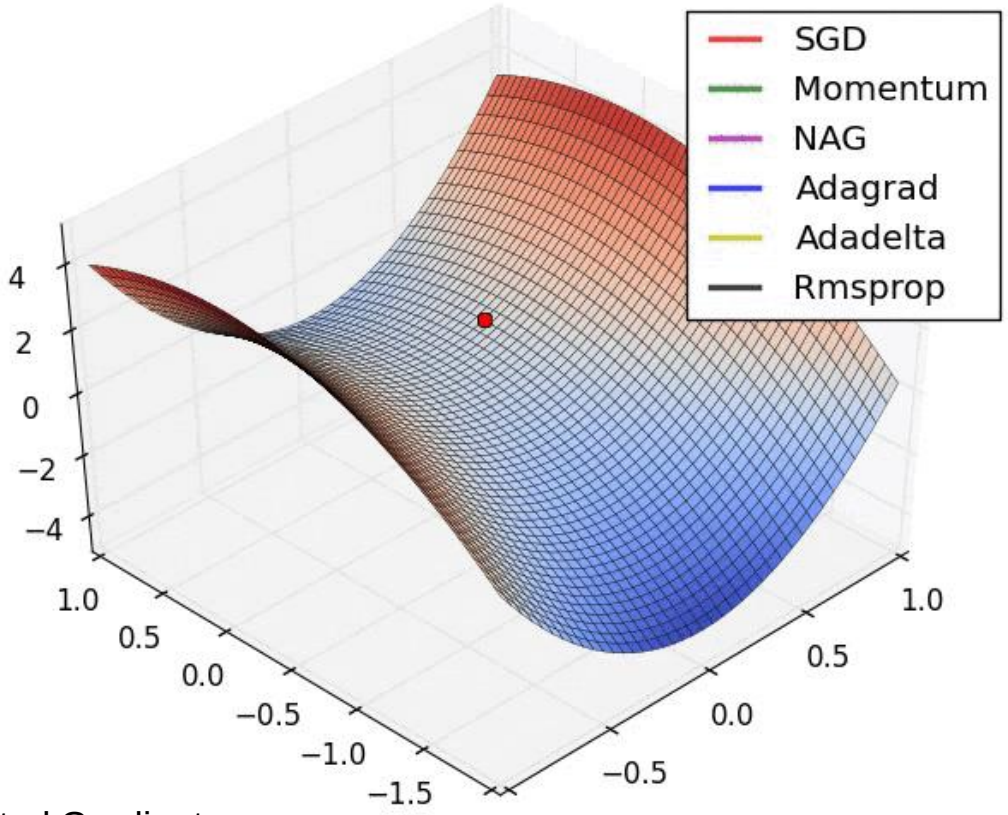
Nadam: Es Adam + Nesterov, asi que a menudo converge más rápido que Adam.

Optimizadores: AdaDelta

Adadelta: Es una variación de **AdaGrad** en la que en vez de calcular el escalado del factor de entrenamiento de cada dimensión, teniendo en cuenta el gradiente acumulado desde el principio de la ejecución, se restringe a una ventana de tamaño fijo de los últimos n gradiente.

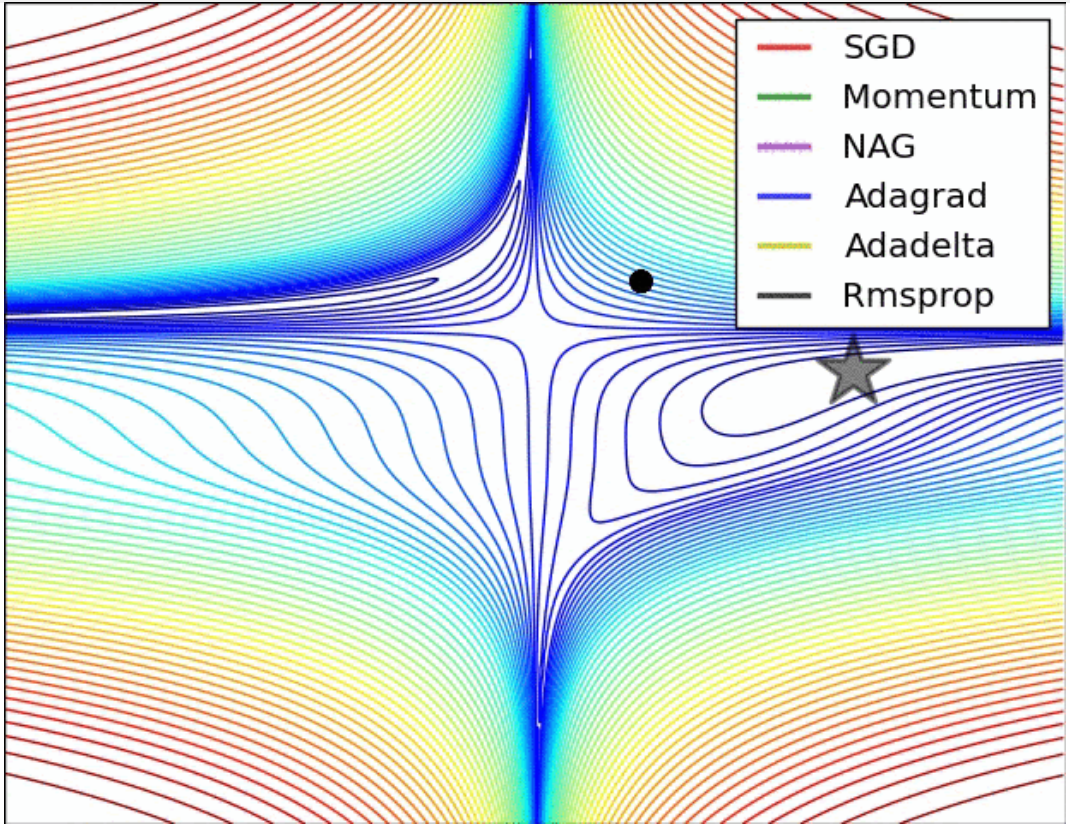
Similar a RMSProp que va olvidando los gradientes

Optimizadores

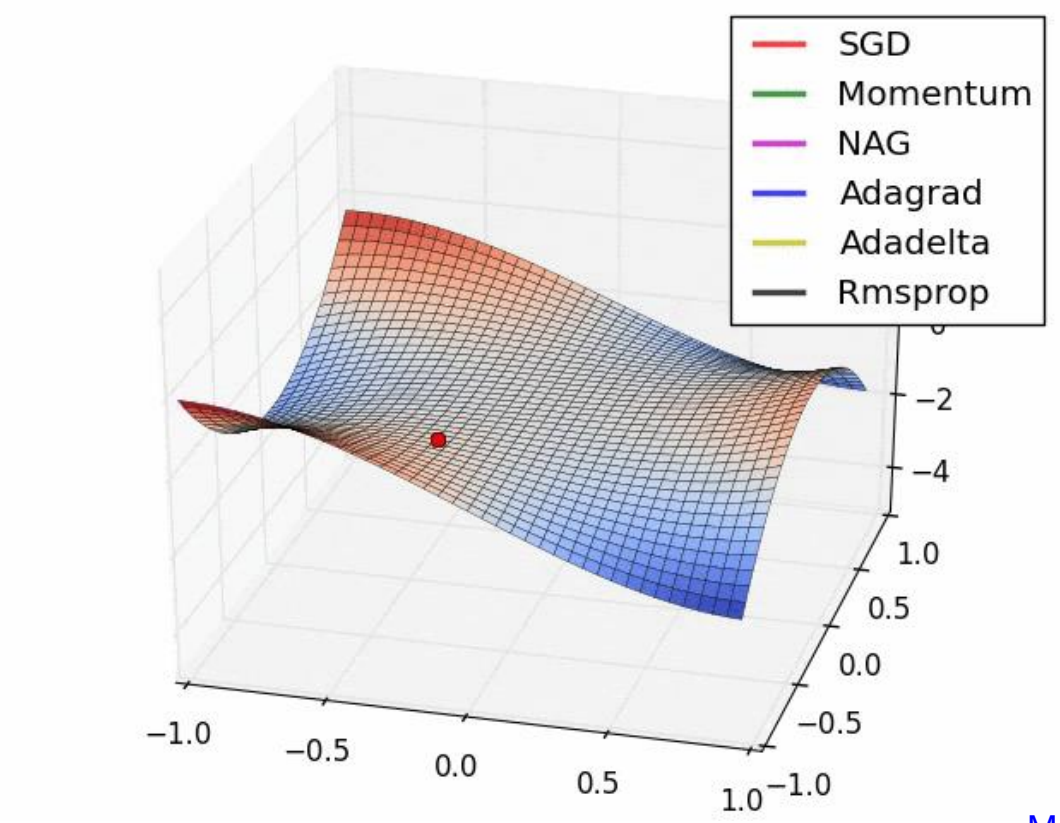


NAG: Nesterov's Accelerated Gradient

Optimizadores



Optimizadores



Más info aquí

Número de capas

Para muchos problemas 1 capa oculta será suficiente. En teoría un PMC con una sola capa oculta puede modelizar funciones complejas. Tendrá que tener neuronas suficientes.
Pero si estamos ante problemas más complejos, las redes profundas tendrán mejor desempeño, ya que pueden modelizar mejor con menos neuronas totales.

Ejemplo: MNIST:

1 capa oculta (cientos de neuronas) = 97 %
2 capas ocultas (mismo número de neuronas total) = 98%

Otros problemas como reconocimiento de imágenes o del discurso requieren decenas o cientos de capas, pero todas ellas conectadas como en PMC

Número neuronas por capas

El número de neuronas de la capa de entrada y de salida está determinado por el problema a resolver:

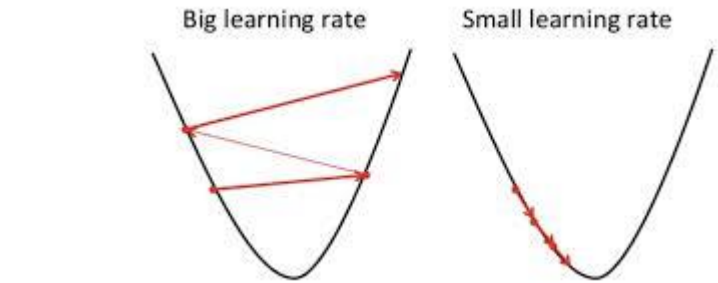
Ejemplo: **MNIST**:

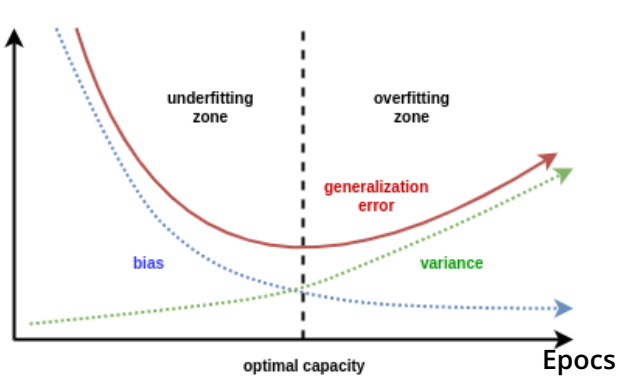
cada número es una imagen de 28x28 píxeles = 784 neuronas de entrada.
Los dígitos a reconocer, son los del sistema decimal tradicional. Así que son 10, del 0 al 9. 10 neuronas de salida.

Lo habitual es hacer una pirámide. Poniendo cada vez menos neuronas. Por ejemplo para MNIST, 3 capas ocultas podrían tener: 300, 200 y 100 neuronas cada una.
Sin embargo últimamente se ha cuestionado esta técnica, ya que a veces poner la misma cantidad de neuronas en todas las capas da el mismo resultado o a veces mejor.

Otros Hiperparámetros...

- Learning rate o tasa de aprendizaje: es el más **importante**, indica qué tan rápido se va desciendo en la función de costo. Valores usuales: E-01 a E-04
- Cantidad de épocas: depende...





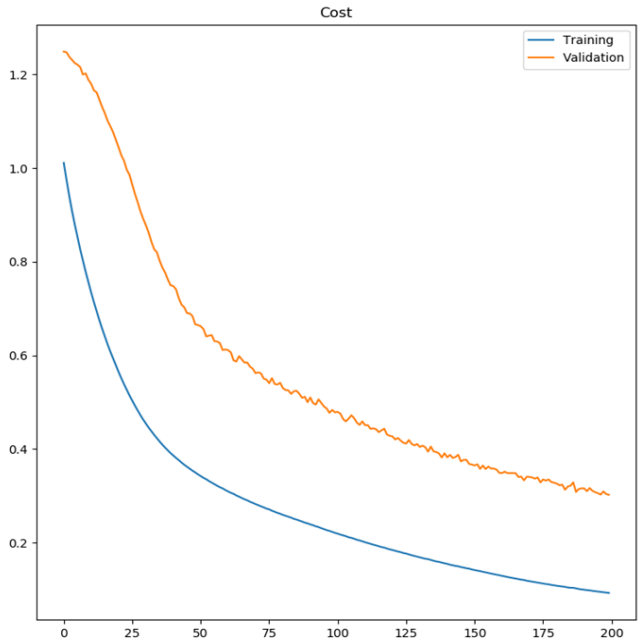
Entrenamiento de la red

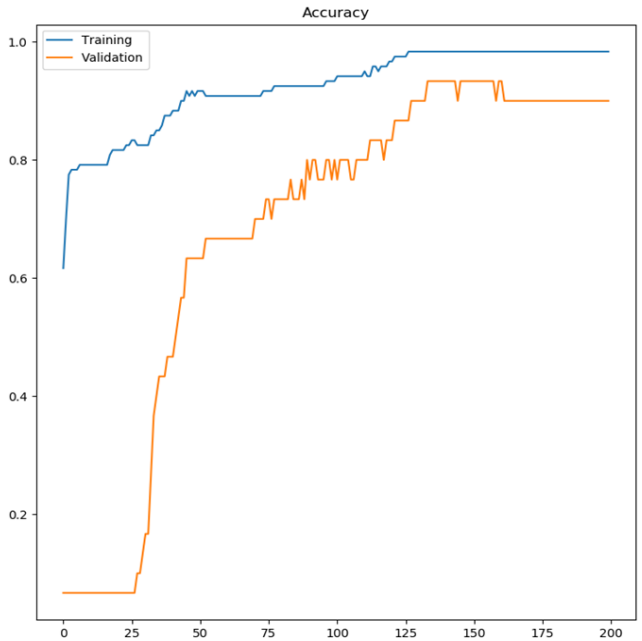
Una vez que tenemos los ingredientes anteriores, podemos entrenar la red.

(Arquitectura + Hiperparámetros + optimizador + Función de pérdida + funciones de activación)

Entrenamiento de la red

Como se ve un entrenamiento:





Resumen

- Los métodos de regularización me ayudan a mejorar la generalización, es decir, que el modelo funcione en datos nuevos que nunca vió. Los más usados son:
  - Early stopping
  - Regularización: L2, L1
  - Dropout
  - Data Augmentation