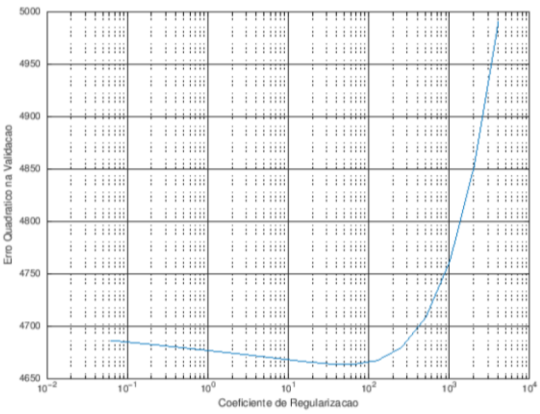
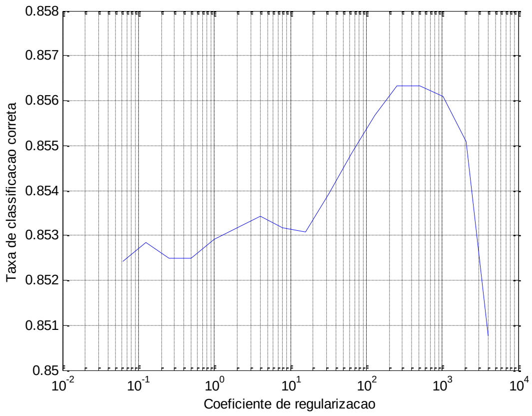
Exercícios de Fixação de Conceitos – EFC 1
Atividade Individual – Peso 2

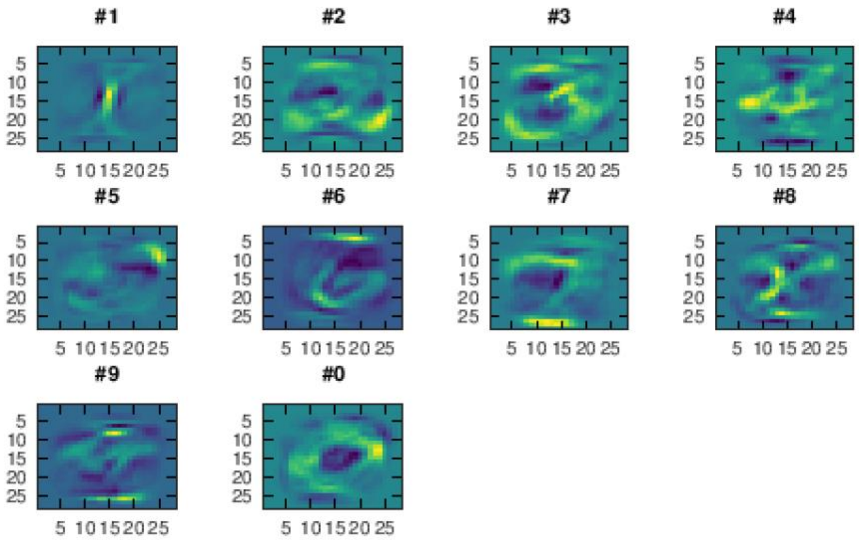
Questão 1) Data de entrega dos resultados solicitados: 11/04/2019

Objetivo: Síntese de modelos lineares para classificação de padrões.

O que deve ser entregue: 1 arquivo ‘n[RA_do_aluno].txt’ com a matriz *W* e 1 arquivo ‘p[RA_do_aluno].txt’ com o coeficiente de regularização, conforme especificado no enunciado da questão, e 1 arquivo [Q1_RA_do_aluno].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 21 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. 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, os professores estão 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. Os professores também disponibilizam um programa *.m para visualização da imagem dos dígitos.

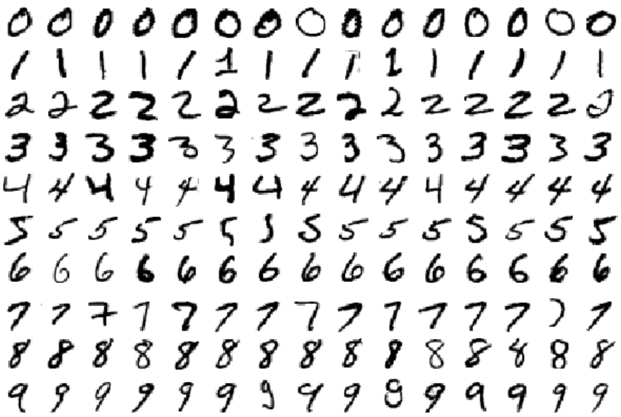


Figura 1 – Exemplos de imagens do conjunto de dados MNIST. Nos dados, a classe ‘0’ é a última, e não a primeira, como na figura acima.

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***:

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

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 aos professores 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 e do correspondente coeficiente de regularização, fornecidos individualmente pelos alunos, os professores vão estimar, para cada aluno, 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.

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

<u>Observação</u>: 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:

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

- 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:
$$\min_{\mathbf{w}} \sum_{i=1}^{N} \left(\mathbf{x}_i{}^T \mathbf{w} - y_i\right)^2 = \min_{\mathbf{w}} \|X\mathbf{w} - \mathbf{y}\|_2^2 = \min_{\mathbf{w}} \left(X\mathbf{w} - \mathbf{y}\right)^T \left(X\mathbf{w} - \mathbf{y}\right)$$
- 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:
$$\min_{\mathbf{w}} \|X\mathbf{w} - \mathbf{y}\|_2^2 + \lambda \|\mathbf{w}\|_2^2,\ \lambda \geq 0\ .$$
- 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) Data de entrega dos resultados solicitados: 11/04/2019

<u>Objetivo</u>: Síntese de modelos não-lineares para classificação de padrões, mas lineares nos parâmetros ajustáveis. Para tanto, repetir o fluxograma da Q1, 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.

<u>O que deve ser entregue</u>: 1 arquivo [Q2_RA_do_aluno].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 21 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. <u>Análises a serem feitas</u>: (2.1) 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 Q1. (2.2) Compare os coeficientes de regularização obtidos nessas duas primeiras atividades (classificador linear e ELM) e procure justificar a diferença. (2.3) 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?

Observações gerais:

- Em todas as atividades, 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] até 23h59 do prazo final. Aguarde um retorno com a confirmação de recebimento.