Estudo comparativo de ferramentas para a conceção e desenvolvimento de redes neuronais

Computação Natural

Mestrado integrado em Engenharia Informática

Departamento de Informática

Universidade do Minho

Rogério Gomes Lopes Moreira
A74634

Introdução

Inteligência Artificial, Redes Neuronais e Sistemas Inteligentes são cada vez mais termos presentes no nosso dia a dia. Habituamo-nos a ver estes conceitos por todo o lado, seja no nosso telemóvel novo, no nosso carro ou até mesmo no nosso novo frigorífico. As Redes Neuronais Artificiais têm um papel muito importante nesta expansão da Inteligência Artificial, já que permitiram resolver problemas como um modelo simplificado do sistema nervoso central dos seres humanos. Este tipo de sistema de base conexionista apresenta uma estrutura interligada de unidades computacionais, também designados por neurónios que apresentam capacidade de aprendizagem.
Pela sua importância e atualidade existem, cada vez mais, diversas soluções disponíveis para o desenvolvimento de Redes Neuronais Artificiais. Durante este estudo apresenta-se uma comparação de algumas das soluções atualmente disponíveis, indicando os seus pontos fracos e fortes e métodos de aprendizagem.

Redes Neuronais Artificiais

Nos dias de hoje abundam as plataformas e ferramentas disponíveis no mercado para o estudo e desenvolvimento de Redes Neuronais Artificiais. Desde aplicações específicas, bibliotecas para linguagens, até linguagens criadas especificamente para trabalhar e lidar com Inteligência Artificial. Torna-se, por isso cada vez mais uma questão de que linguagem de programação usar, qual é que vai cumprir melhor a sua tarefa.
Além disso, e embora nos situemos num contexto académico torna-se importante pensar mais além e ter a noção da diferença entre as plataformas usadas para investigação e aprendizagem daquelas que terão que cumprir um papel real em situações reais, quando implementadas em contextos de produção. São de seguida exploradas três linguagens: *R*, *Python* e *Julia*, apresentando para cada uma dessas um estudo sobre uma biblioteca de manipulação de RNAs.

Linguagem R

R é uma linguagem e um ambiente de desenvolvimento integrado muito usado para cálculos estatísticos e gráficos. Torna-se por isso menos flexível e compatível comparando com outras, como por exemplo o *Python*. É uma linguagem bastante especializada no campo da estatística e menos prática para ser usada em contextos mais abrangentes do que uma investigação académica.
Contudo, uma das grandes vantagens da linguagem *R* são os tipos nativos e a facilidade de representação de tipos complexos como por exemplo vetores e matrizes, não havendo a necessidade de recursos adicionais para a sua representação.
Outro dos pontos fortes da linguagem é a quantidade de bibliotecas disponíveis para uso, apresentando uma vasta escolha no que toca a Redes Neuronais. Além disso, a facilidade de criação e manipulação de gráficos nativamente é outro dos pontos fortes. Por sua vez, limitações nas opções de personalização do hardware a usar são pontos negativos do *R*, por exemplo, não é possível escolher nativamente entre o CPU e GPU para o treino das redes. Uma das bibliotecas mais usadas no que toca a RNA é a *NeuralNet*, usada para treino das redes e que apresenta bastante personalização e reutilização.

Listing 1.1. NeuralNet

```
neuralnet(formula, data, hidden = 1, threshold = 0.01,
    stepmax = 1e+05, rep = 1, startweights = NULL,
    learningrate.limit = NULL,
    learningrate.factor = list(minus = 0.5, plus = 1.2),
    learningrate=NULL, lifesign = "none",
    lifesign.step = 1000, algorithm = "rprop+",
    err.fct = "sse", act.fct = "logistic",
    linear.output = TRUE, exclude = NULL,
    constant.weights = NULL, likelihood = FALSE)
```

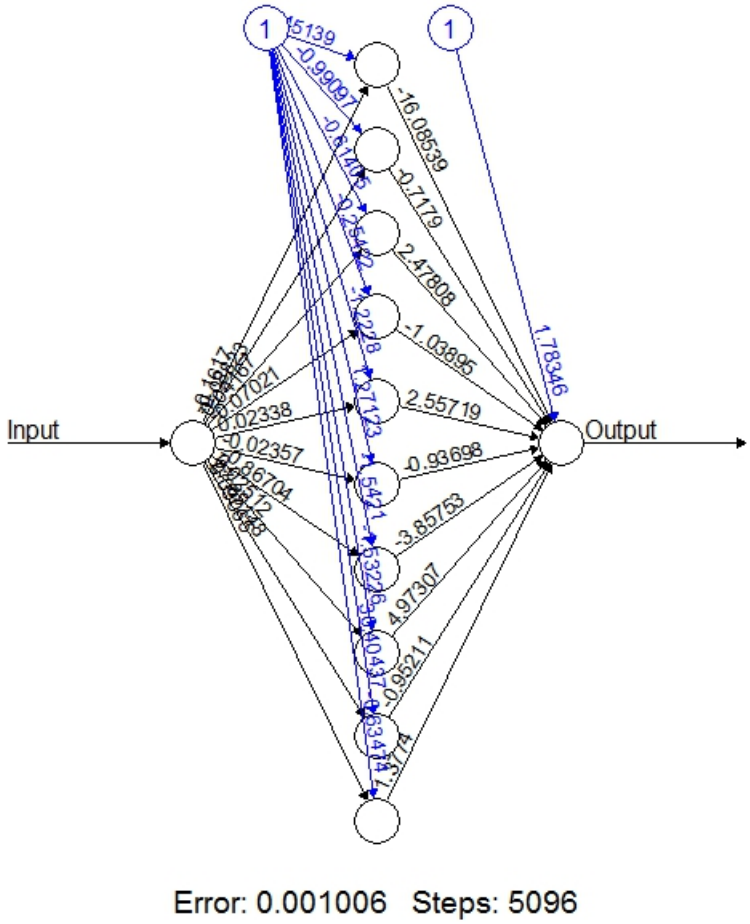
Alguns parâmetros de personalização do treino de uma Rede Neuronal na *NeuralNet* são:

- formula - a descrição do modelo a ser treinado
- data - os dados para treino da RNA
- hidden - o número de neurónios presentes em cada camada da rede
- threshold - valor numérico que especifica o limite para as derivadas parciais da função de erro e que funcionam como critério de paragem
- rep - número de repetições do treino da rede
- stepmax - número máximo de iterações para o treino da rede
- startweights - vetor que contém os valores inicias para os pesos dentro da rede, não sendo por isso inicializados aleatoriamente.
- learningrate.limit - vector ou lista contendo os máximos e mínimos para a taxa de aprendizagem. Usado para algoritmos RPROP e GRPROP.
- learningrate.factor - vector ou lista contendo os multiplicadores para os máximos e mínimos da taxa de aprendizagem nos algoritmos RPROP e GRPROP.
- learningrate - valor numérico que especifica a taxa de aprendizagem.

Para além disto é possível personalizar o algoritmo/método de aprendizagem que queremos usar na rede. A biblioteca *NeuralNet* tem disponíveis vários algoritmos, entre eles:

- Backpropagation
- Resilient Backpropagation
- Weight Backtracking
- Modified Globally Convergent (GRPROP)

O resultado da execução do treino da rede neural é um objeto da classe nn e de onde podemos extrair a função de erro, a função de ativação, a lista de resultados por cada repetição do treino da rede e o modelo do treino.



A *NeuralNet* é apenas uma biblioteca disponível para o treino de Redes Neuronais Artificiais em R, existem outras como o *MXNet*, *nnet*, *RSNNS* e *H2O*.

Python

Python é uma linguagem de programação multi-paradigma, que apresenta várias funcionalidades, flexibilidade, tornando-a muito apropriada para prototipar e testar hipóteses rapidamente. Por esta razão, *Python* é cada vez mais escolhida no campo da Inteligência Artificial. Tal como explorado no *R*, as bibliotecas disponíveis no Python são variadas e bastante úteis neste contexto.
Uma das bibliotecas mais usadas em *Python* para a criação de Redes Neuronais Artificiais é o *TensorFlow*, originalmente criada pela Google e open-source. A grande vantagem em relação a por exemplo, a *NeuralNet* é o facto de ser muito mais versátil, aplicando-se a uma variedade de domínios muito maior. Para além disso, é possível executar em CPU, em GPU ou até mesmo em TPUs, uma unidade de processamento criada especificamente para o treino de Redes Neuronais com o *Tensorflow*.

Listing 1.2. TensorFlow

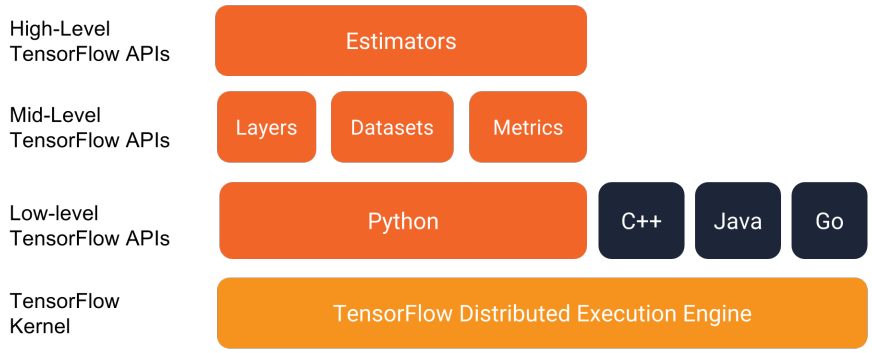
```
# Parameters
learning_rate = 0.1
num_steps = 500
batch_size = 128
display_step = 100

# Network Parameters
n_hidden_1 = 256 # 1st layer number of neurons
n_hidden_2 = 256 # 2nd layer number of neurons
num_input = 784 # MNIST data input (img shape: 28*28)
num_classes = 10 # MNIST total classes (0-9 digits)

# tf Graph input
X = tf.placeholder("float", [None, num_input])
Y = tf.placeholder("float", [None, num_classes])

# Store layers weight & bias
weights = {
    'h1': tf.Variable(tf.random_normal([num_input,
        n_hidden_1])),
    'h2': tf.Variable(tf.random_normal([n_hidden_1,
        n_hidden_2])),
    'out': tf.Variable(tf.random_normal([n_hidden_2,
        num_classes]))
}
biases = {
    'b1': tf.Variable(tf.random_normal([n_hidden_1])),
    'b2': tf.Variable(tf.random_normal([n_hidden_2])),
    'out': tf.Variable(tf.random_normal([num_classes]))
}
```

```
# Create model
def neural_net(x):
    # Hidden fully connected layer with 256 neurons
    layer_1 = tf.add(tf.matmul(x, weights['h1']), biases[
        'b1'])
    # Hidden fully connected layer with 256 neurons
    layer_2 = tf.add(tf.matmul(layer_1, weights['h2']),
        biases['b2'])
    # Output fully connected layer with a neuron for each
         class
    out_layer = tf.matmul(layer_2, weights['out']) +
        biases['out']
    return out_layer

# Construct model
logits = neural_net(X)
prediction = tf.nn.softmax(logits)

# Define loss and optimizer
loss_op = tf.reduce_mean(tf.nn.
    softmax_cross_entropy_with_logits(
     logits=logits, labels=Y))
optimizer = tf.train.AdamOptimizer(learning_rate=
    learning_rate)
```

Como podemos observar pelo código acima, as opções de personalização do *TensorFlow* são muito variadas. Podemos definir os parâmetros da rede: taxa de aprendizagem, número de passos, entre outros, podemos ainda definir a arquitetura da nossa rede, indicando o número de camadas e o número de neurónios por camada. e ainda selecionar o algoritmo com o qual queremos treinar a nossa rede, estão disponíveis vários algoritmos:

- Optimizer
- GradientDescentOptimizer
- AdadeltaOptimizer
- AdagradOptimizer
- AdagradDAOptimizer
- MomentumOptimizer
- AdamOptimizer
- FtrlOptimizer
- ProximalGradientDescentOptimizer
- ProximalAdagradOptimizer
- RMSPropOptimizer

O *Tensorflow* torna-se assim uma solução muito completa para a criação e treino de Redes Neuronais tanto em contextos científicos como em contextos de mercado, contudo e devido ao seu elevado grau de personalização poderá ter uma grande curva de aprendizagem inicial.



O *TensorFlow* é apenas uma biblioteca disponível para o treino de Redes Neuronais Artificiais em *Python*, existem outras como *Blocks*, *Lasagne*, *Keras*, *Deepy*, *Nolearn* e *NeuPy*.

JULIA

A linguagem *Julia* foi criada com o foco em computação numérica, apresentando mesmo a possibilidade de fazer nativamente computação paralela distribuída. É por isso uma boa linguagem de programação para aplicações em que seja necessário muita computação, por exemplo para o treino de redes neuronais com grande quantidade de dados. Por outro lado, o facto de ser uma linguagem recente torna-a instável e não apresenta o mesmo número de bibliotecas disponíveis que o *Python* ou o *R*.
A principal biblioteca de Redes Neuronais Artificiais em *Julia* é o *MXNet*. Esta biblioteca permite o treino de Redes Neuronais distribuído por vários CPUs e GPUs.

Listing 1.3. MXNet

```
using MXNet

mlp = @mx.chain mx.Variable(:data)                    =>
  mx.FullyConnected(name=:fc1, num_hidden=128)        =>
  mx.Activation(name=:relu1, act_type=:relu)          =>
  mx.FullyConnected(name=:fc2, num_hidden=64)         =>
  mx.Activation(name=:relu2, act_type=:relu)          =>
```

```
  mx.FullyConnected(name=:fc3, num_hidden=10)  =>
  mx.SoftmaxOutput(name=:softmax)

# data provider
batch_size = 100
include(Pkg.dir("MXNet", "examples", "mnist", "mnist-data
    .jl"))
train_provider, eval_provider = get_mnist_providers(
    batch_size)

# setup model
model = mx.FeedForward(mlp, context=mx.cpu())

# optimization algorithm
optimizer = mx.SGD(learning_rate=0.1, momentum=0.9)

# fit parameters
mx.fit(model, optimizer, train_provider, n_epoch=20,
    eval_data=eval_provider)
```

As opções de personalização do *MXNet* são bastantes. É possível definir a tipologia da rede, o objetivo de cada camada e os neurónios presentes. À semelhança do *TensorFlow* em *Python*, é possível aplicar vários modelos à Rede Neuronal em *Julia*. Os modelos disponíveis são:

- AbstractModel
- FeedForward
- Predict
- Fit

Além disso, é possível também escolher vários algoritmos de otimização:

- AbstractOptimizer
- ADAM
- AdaGrad
- AdaDelta
- AdaMax
- RMSProp
- Nadam

O *MXNet* tem mais duas grandes vantagens, para além de ser compatível com várias linguagens é também suportado por vários serviços de computação na nuvem como por exemplo AWS ou o Google Cloud.

O *MXNet* é apenas uma biblioteca disponível para o treino de Redes Neuronais Artificiais em *Julia*, existem outras como o *Mocha.jl*, o *Tensorflow* e o *KNet.jl*.

Outros

R, *Python* e *Julia* são apenas três linguagens onde se podem construir e treinar Redes Neuronais Artificiais, existem outras como por exemplo Matlab com a biblioteca NNet, C++ com a biblioteca OpenNN, Octave com a biblioteca Octave-NN e Java com a biblioteca NeuroPH.

Conclusão

As linguagens e bibliotecas aqui descritas são apenas exemplos das variadas ferramentas disponíveis no mercado atualmente. Não é possível eleger a melhor linguagem ou a mais completa, tudo depende das necessidades e do caso de uso em questão. É essencial um estudo prévio das condições de desenvolvimento e do que será necessário em determinado projeto.
Como referido anteriormente é também importante diferenciar contextos académicos e científicos de contextos reais de produção, a robustez necessária em contextos de produção contrapõe-se com a simplicidade de prototipagem rápida em contextos académicos. Por esta razão, e depois da análise efetuada, na minha opinião, a linguagem mais apropriada para contextos académicos é a linguagem *R* e para contextos de produção *Python*.

Referências

1. Stefan Fritsch, Frauke Guenther, Marc Suling, Sebastian M. Mueller, Package 'neuralnet', 2016
2. Luis Miguel Rios, Nikolaos V. Sahinidis, Derivative-free optimization: a review of algorithms and comparison of software implementations, Springer, 2012