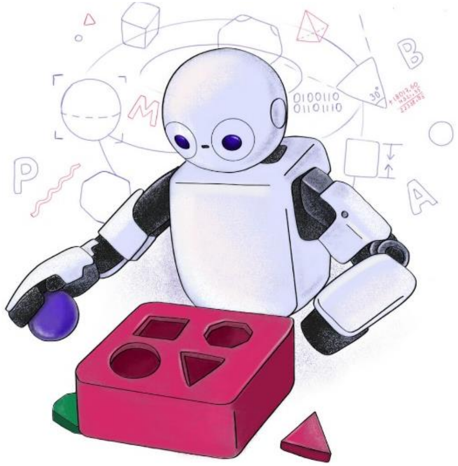
T320 - Introdução ao Aprendizado de Máquina II:

Redes Neurais Artificiais (Parte IV)



Inatel

Felipe Augusto Pereira de Figueiredo
felipe.figueiredo@inatel.br

Recapitulando

- Na última aula, aprendemos como as redes neurais aprendem.
- Vimos que isso é feito através da minimização de uma função de custo.
- Aprendemos que a minimização é realizada iterativamente com a retropropagação do erro.
- Analisamos como a retropropagação funciona através de um exemplo.
- Nesta aula, iremos discutir algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado para redes neurais.

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado

- Podemos dizer que os elementos básicos do aprendizado de máquina através de redes neurais foram apresentados até aqui.
- Porém, existem importantes aspectos práticos que devem ser comentados de modo que vocês fiquem mais familiarizados com as práticas atuais.
- Começamos falando da questão do cálculo do ***vetor gradiente***.

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado

Versões Online, Batch e Minibatch

- Conforme vimos nos slides anteriores, a base para o aprendizado em redes MLP é a obtenção do ***vetor gradiente*** e o estabelecimento de um processo iterativo de busca dos ***pesos sinápticos*** que minmizem a ***função de custo***.
- Vimos que a obtenção do ***vetor gradiente*** se dá através de um processo de ***retropropagação do erro*** em que existem duas etapas:
  - Etapa direta (***forward***) onde se apresenta um exemplo de entrada, $\boldsymbol{x}$, e obtém-se a resposta da rede, ou seja, o ***erro de saída***.
  - Etapa reversa (***retropropagação/backpropagation***) em que se calculam as derivadas parciais necessárias ao longo das camadas anteriores da rede.

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado

Versões Online, Batch e Minibatch

- Vimos também que se calcula o gradiente associado a cada exemplo de entrada e que a combinação de todos esses ***gradientes locais*** leva ao gradiente estimado para o conjunto total de exemplos.

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{w})}{\partial w_{i,j}^{m}} = \frac{1}{N_{\text{dados}} N_M} \sum_{n=1}^{N_{\text{dados}}} \sum_{j=1}^{N_M} \frac{\partial e_j^2(n)}{\partial w_{i,j}^{m}}$$

- No entanto, surge aqui um questionamento interessante: o que é melhor, usar o ***gradiente local e já dar um passo de otimização***, ou seja, atualizar os pesos, ou ***reunir o gradiente completo e então dar um passo único e mais preciso***?

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado

Versões Online, Batch e Minibatch

- Nesse questionamento, existem duas abordagens: o cálculo ***online*** do gradiente (ou seja, exemplo-a-exemplo) e o cálculo em batelada (***batch***) do gradiente.
- Vejamos inicialmente a noção geral de ***adaptação dos pesos sinápticos*** com o cálculo ***online*** do gradiente, como expressa o algoritmo abaixo com um método clássico de ***primeira ordem***.

> - Defina valores iniciais para o vetor de pesos $\boldsymbol{w}$ e um passo de aprendizagem α pequeno.
> - Faça $k = 0$ (épocas), $t = 0$ (iterações) e calcule $J(\boldsymbol{w}(k))$.
> - Enquanto o critério de parada não for atendido, faça:
>   - Ordene aleatoriamente os exemplos de entrada/saída.
>   - Para l variando de 1 até N, faça:
>   - Apresente o exemplo l de entrada à rede.
>   - Calcule $J_l(\boldsymbol{w}(t))$ e $\nabla J_l(\boldsymbol{w}(t))$.
>   - $\boldsymbol{w}(t+1) = \boldsymbol{w}(t) - \alpha \nabla J_l(\boldsymbol{w}(t))$; $t = t + 1$.
>   - $k = k + 1$.
>   - Calcule $J(\boldsymbol{w}(k))$.

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado

Versões Online, Batch e Minibatch

- O outro extremo seria utilizar todo o conjunto de dados para estimar o gradiente antes de atualizar os pesos sinápticos.
- Essa é a ideia por trás da abordagem em ***batelada*** (***batch***). O algoritmo abaixo ilustra a operação correspondente (novamente considerando um método de ***primeira ordem***).

> - Defina valores iniciais para o vetor de pesos $\boldsymbol{w}$ e um passo de aprendizagem α pequeno.
> - Faça $k = 0$ (épocas) e calcule $J\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$.
> - Enquanto o critério de parada não for atendido, faça:
>   - Para l variando de 1 até N, faça:
>   - Apresente o exemplo l de entrada à rede.
>   - Calcule $J_l\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$ e $\nabla J_l\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$.
>   - $\boldsymbol{w}(k+1) = \boldsymbol{w}(k) - \frac{\alpha}{N}\sum_{l=1}^{N} \nabla J_l\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$.
>   - $k = k + 1$.
>   - Calcule $J\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$.

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado

Versões Online, Batch e Minibatch

- Nas modernas ***redes neurais profundas*** (ou ***deep learning***), usadas com muita frequência em problemas com enormes conjuntos de dados, a regra é adotar o caminho do meio, usando a abordagem com ***mini-batches***.
- Nesse caso, a adaptação dos ***pesos*** é realizada com um gradiente calculado a partir de um meio-termo entre um exemplo e o número total de exemplos (em geral, este é um valor relativamente pequeno em métodos de ***primeira ordem***).
- As amostras que devem compor o ***mini-batch*** são ***aleatoriamente*** tomadas do conjunto de dados. O algoritmo abaixo ilustra isso.

> - Defina valores iniciais para o vetor de pesos $\boldsymbol{w}$ e um passo de aprendizagem α pequeno.
> - Faça $k = 0$ e calcule $J\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$.
> - Enquanto o critério de parada não for atendido, faça:
>   - Para l variando de 1 até m, faça:
>   - Apresente o exemplo l de entrada, amostrado aleatóriamente sem reposição para compor um ***minibatch***, à rede.
>   - Calcule $J_l\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$ e $\nabla J_l\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$.
>   - $\boldsymbol{w}(k+1) = \boldsymbol{w}(k) - \frac{\alpha}{\boldsymbol{m}} \sum_{l=1}^{\boldsymbol{m}} \nabla J_l\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$.
>   - $k = k + 1$.
>   - Calcule $J\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$.

Variações dos algoritmos de otimização dos pesos

- Existem vários algoritmos baseados no ***gradiente*** que podem ser empregados para otimizar os ***pesos sinápticos*** de uma rede neural.
- Aqui, vamos nos ater a alguns métodos muito usuais na literatura moderna, que se encontra bastante focada no ***apredizado profundo***.

➢ **Método do Gradiente Estocástico (*Stochastic Gradient Descent*, SGD)**

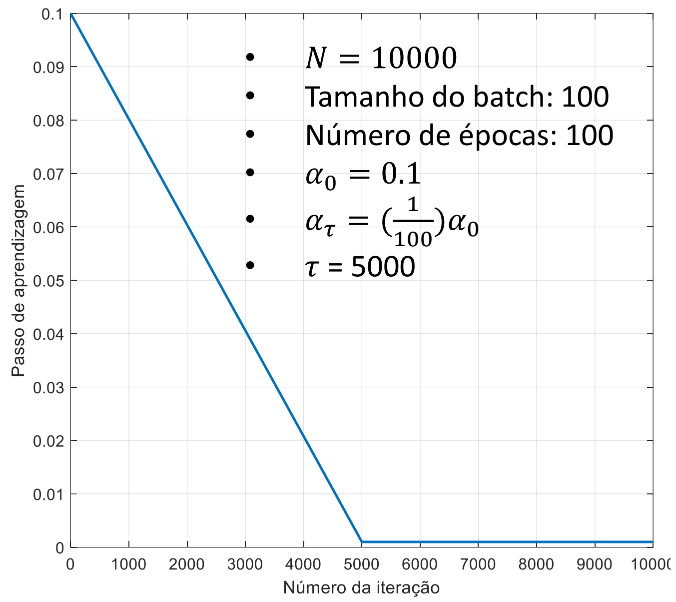
- Nos slides anteriores, nós vimos que o método ***online*** utiliza um único exemplo (que deve ser tomado aleatóriamente) para estimar o gradiente da ***função custo***.
- Este tipo de estimador é o que gera a noção de ***gradiente estocástico***. Caso utilizemos ***mini-batches***, também teremos uma estimativa do ***gradiente***, o qual, a rigor, seria determinístico apenas se usássemos todos os dados (no caso do ***batch***).
- Por esse motivo, esses métodos de ***primeira ordem***, como o ***online***, são conhecidos como métodos de ***gradiente descendente estocástico***.

Variações dos algoritmos de otimização dos pesos

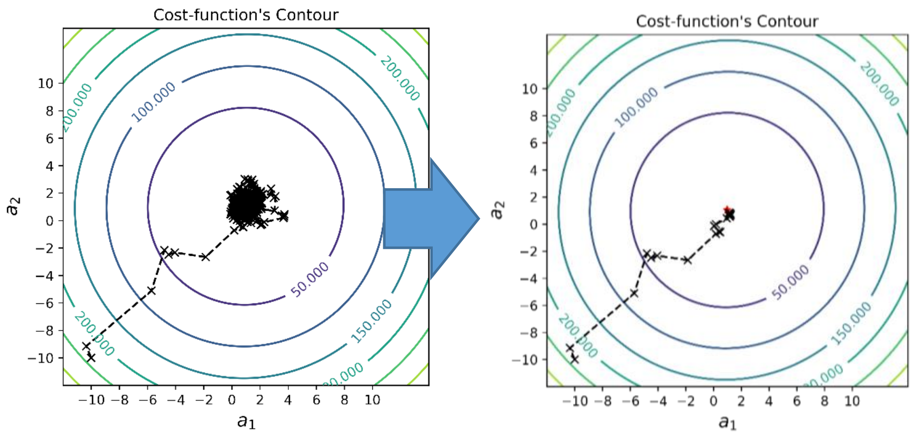
- A escolha do ***passo de aprendizagem*** é complicada e nos remete ao conhecido compromisso entre velocidade de convergência e estabilidade/precisão.
- Pode-se usar um valor fixo, mas geralmente, se adota uma variação decrescente de um valor α_0 a um valor α_τ (i.e., da iteração 0 à iteração τ):

$$\alpha_j = \left(1 - \frac{j}{\tau}\right)\alpha_0 + \frac{j}{\tau}\alpha_\tau,$$

onde j é o número da iteração de treinamento.



- Após a τ-ésima iteração, pode-se deixar o valor do passo de aprendizagem fixo, como mostrado na figura ao lado.
- Naturalmente, a definição dos hiperparâmetros necessários, α_0 e α_τ, é mais um problema ***a ser tratado caso-a-caso***.



Variações dos algoritmos de otimização dos pesos

- **Momentum**
  - O ***termo momento*** é adicionado à equação de atualização dos pesos para trazer ***informação de gradientes anteriores acumulados*** ao ajuste de pesos.
  - Esse termo tem o potencial de melhorar a convergência das versões online e em mini-lotes do gradiente descendente.
  - A ***atualização dos pesos*** com o ***termo momento*** é dada por

$$\boldsymbol{w} \leftarrow \boldsymbol{w} + \boldsymbol{v},$$

onde $\boldsymbol{v}$ é a ***velocidade***, a qual é atualizada da seguinte forma

$$\boldsymbol{v} \leftarrow \mu\boldsymbol{v} - \alpha\boldsymbol{g},$$

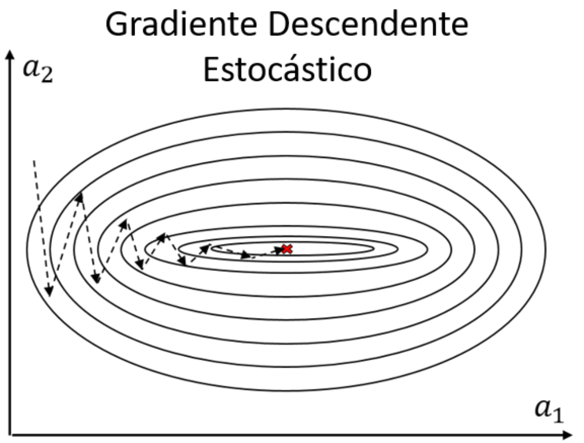
$\boldsymbol{g}$ é o ***vetor gradiente***, α é o ***passo de aprendizagem*** e $\mu \in [0,1)$ é o ***coeficiente de momento*** e determina com que rapidez as contribuições de gradientes anteriores decaem (ou seja, μ é um termo de memória).

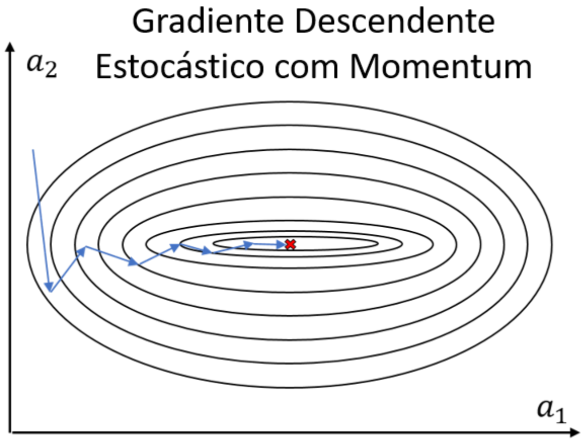
  - Quanto maior for μ, maior será a influência de gradientes anteriores na direção atual.
  - $\boldsymbol{v}$ dá a ***direção*** e a ***velocidade*** na qual os pesos se movem pelo espaço de pesos.

Variações dos algoritmos de otimização dos pesos

➢ Momentum

- ***Momento*** em física é igual a ***massa de uma partícula vezes sua velocidade***. No algoritmo do momento, assumimos que a massa é unitária, então o vetor velocidade $\boldsymbol{v}$ também pode ser considerado como o momento da partícula.
- O termo momento adiciona uma fração μ de atualizações anteriores dos pesos à atualização corrente.
  - Quando o gradiente aponta na mesma direção por várias iterações, isso aumenta o tamanho dos passos dados em direção ao mínimo.
  - Quando o gradiente muda de direção a cada nova iteração, o termo momento suaviza as variações.
  - Como resultado, temos convergência mais rápida e oscilação reduzida.
- O efeito do algoritmo do momentum no GDE é ilustrado na figura ao lado.





Variações dos algoritmos de otimização dos pesos

➢ Momento de Nesterov

- O método do ***momento de Nesterov*** pode ser visto, essencialmente, como uma variação do ***método do momento*** em que o cálculo do ***vetor gradiente*** não é feito sobre o vetor de pesos $\boldsymbol{w}$, mas sim sobre $\boldsymbol{w} + \varphi \boldsymbol{v}$.
- Esse termo adicional funciona como um fator de correção que pode aumentar, em alguns casos, a velocidade de convergência.

➢ Modelos com Passo de Aprendizagem Adaptativo

- O ***passo de aprendizagem*** é um hiperparâmetro difícil de se ajustar otimamente e bastante relevante para o sucesso do treinamento de uma rede neural.
- Isso motivou o surgimento de um conjunto de métodos com mecanismos capazes de modificá-lo dinamicamente.
- O passo é ajustado de acordo com o desempenho da rede e, além disso, pode-se ter passos diferentes para cada peso do modelo, os quais são atualizados de forma independente.
- Dentre as técnicas mais populares dessa classe estão ***AdaGrad***, ***RMSProp*** e ***Adam.***

Inicialização dos Pesos

- Uma vez que os métodos de treinamento de ***redes neurais MLP*** são iterativos, eles dependem de uma ***inicialização dos pesos***.
- Como os métodos são de ***busca local***, a inicialização pode afetar drasticamente a qualidade da solução obtida.
- O ***ponto de inicialização*** pode determinar se o algoritmo converge, sendo alguns pontos iniciais tão instáveis que o algoritmo encontra dificuldades numéricas e falha completamente em convergir.
- Também pode haver variações expressivas na ***velocidade de convergência***.
- Um ponto importante da inicialização é "***quebrar a simetria***" entre os ***nós***, ou seja, ***nós*** com a mesma ***função de ativação*** e conectados às mesmas entradas, devem ter pesos iniciais diferentes.
- Isso, portanto, sugere uma ***abordagem aleatória***.

Inicialização dos Pesos

- Os pesos iniciais são tipicamente obtidos a partir de ***distribuições gaussianas*** ou ***uniformes***.
- A ordem de grandeza desses pesos levanta algumas discussões:
  - Pesos de maior magnitude criam maior distinção entre ***nós*** (i.e., a ***quebra de simetria***). Por outro lado, isso pode causar problemas de instabilidade.
  - Pesos de maior magnitude favorecem a propagação de informação, porém, por outro lado, causam preocupações do ponto de vista de regularização.
  - Pesos de magnitude elevada podem levar os ***nós*** (no caso de ***funções de ativação*** do tipo sigmóide como a tangente hiperbólica e a função logística) a operarem numa região de saturação, comprometendo a convergência do algoritmo.
  - Por outro lado, pesos de magnitude muita reduzida podem reduzir drasticamente o aprendizado das redes neurais.
- Portanto, na sequência listamos algumas ***heurísticas*** para inicialização dos pesos.

Inicialização dos Pesos

- Considerando uma camada com m entradas e n saídas, temos as seguintes heurísticas para inicializar os pesos de seus nós.

Inicialização	**Funções de ativação**	**Distribuição Uniforme** $U(-r, r)$	**Distribuição Normal** $N(0, \sigma^2)$
Xavier/Glorot	Nenhuma, Tanh, Logística, Softmax	$r = \sqrt{\frac{6}{m+n}}$	$\sigma^2 = \frac{2}{m+n}$
He	ReLU e variantes	$r = \sqrt{\frac{6}{m}}$	$\sigma^2 = \frac{2}{m}$
LeCun	SELU	$r = \sqrt{\frac{3}{m}}$	$\sigma^2 = \frac{1}{m}$

- Uma heurística para a inicialização dos termos de ***bias*** é inicializá-los com ***valores nulos***. Esta heurística se mostra bastante eficiente na maioria dos casos.

Redes Neurais MLP com SciKit-Learn

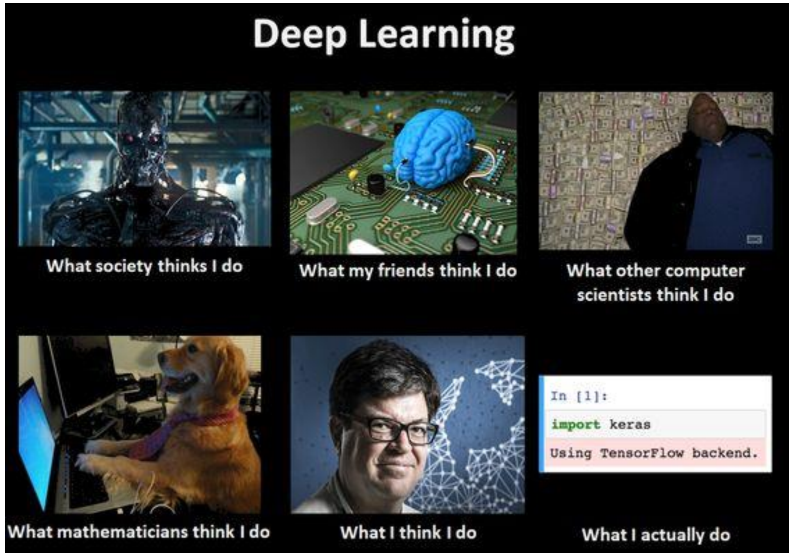
- A biblioteca SciKit-Learn disponibiliza algumas classes para o treinamento de redes neurais multi-layer perceptron.
- Entretanto, as implementações desta biblioteca não se destinam a aplicações de larga escala.
- Em particular, a biblioteca SciKit-Learn não oferece suporte a GPUs.
- Para implementações muito mais rápidas, baseadas em GPU, bem como estruturas que oferecem muito mais flexibilidade para criar arquiteturas de aprendizado profundo, por exemplo, devemos utilizar outras bibliotecas como:
  - ***Tensorflow***: biblioteca para desenvolvimento de aplicações eficientes e escaláveis de machine learning.
  - ***keras***: biblioteca de alto-nível para desenvolvimento de aplicações Deep Learning de forma simples. É capaz de rodar sobre TensorFlow, Theano ou Apache MXNet.
  - ***skorch***: biblioteca para a criação de redes neurais compatíveis com o SciKit-Learn que encapsula a biblioteca PyTorch.
  - Entre outras: https://scikit-learn.org/stable/related_projects.html#related-projects

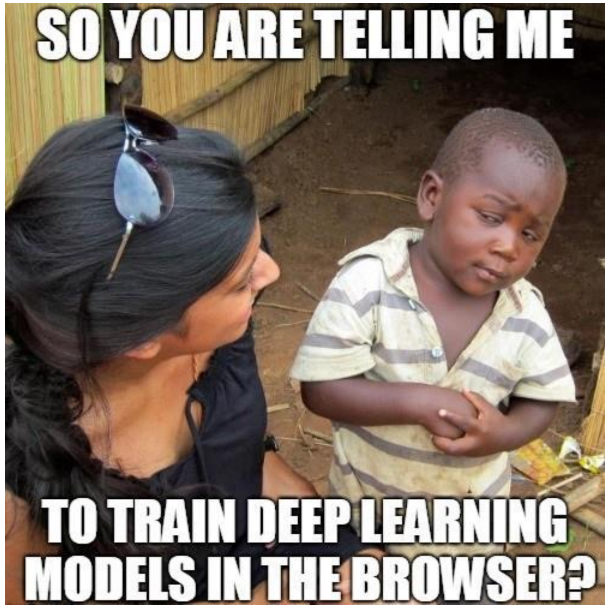
Tarefas

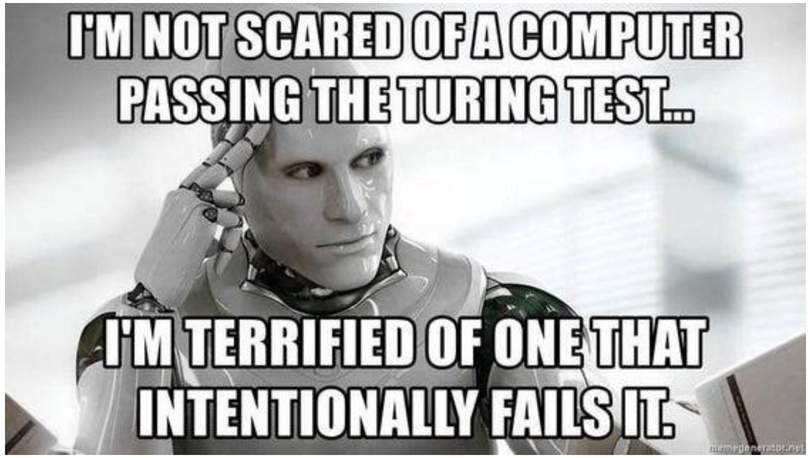
- **Quiz**: *"T320 - Quiz – Redes Neurais Artificiais (Parte VII)"* que se encontra no MS Teams.
- **Projeto**: Projeto #2.
  - Pode ser feito em grupos de no máximo 3 alunos.
  - **Entrega**: 12/12/2021.
  - Vídeo com a explicação sobre o projeto se encontra na pasta "Projeto #2" em "Arquivos".
  - Leiam os enunciados atentamente.
  - Não se esqueçam de colocar os nomes dos integrantes do grupo.
  - Apenas um integrante do grupo precisa fazer a entrega.

Obrigado!


People with no idea about AI, telling me my AI will destroy the world
Me wondering why my neural network is classifying a cat as a dog..
Dog


Deep Learning
What society thinks I do
What my friends think I do
What other computer scientists think I do
What mathematicians think I do
What I think I do
In [1]:
import keras
Using TensorFlow backend.
What I actually do

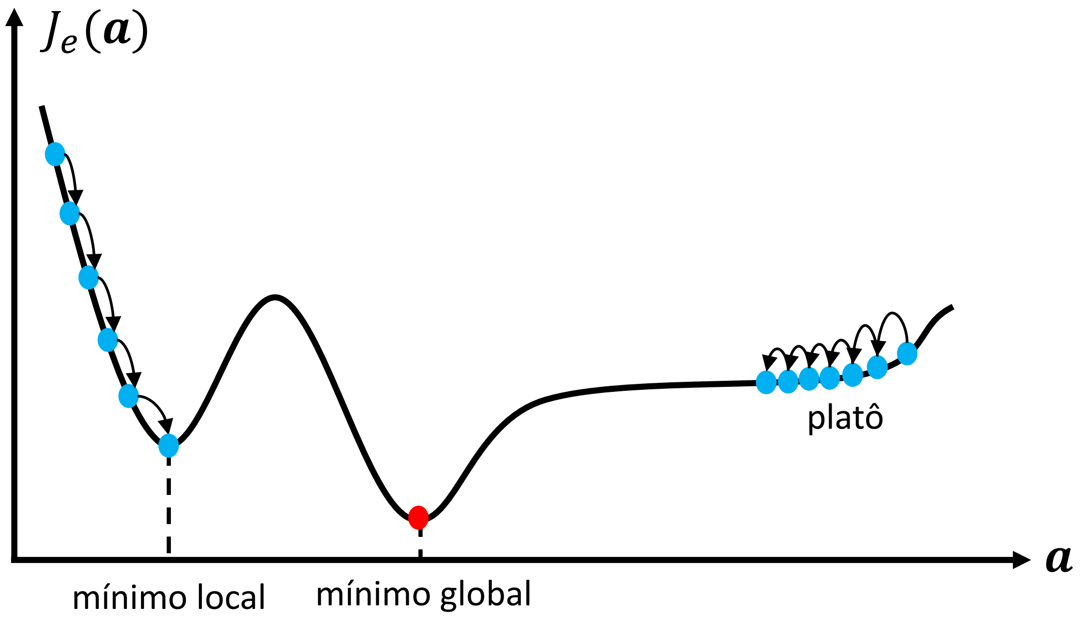

SO YOU ARE TELLING ME
TO TRAIN DEEP LEARNING MODELS IN THE BROWSER?


I'M NOT SCARED OF A COMPUTER PASSING THE TURING TEST...
I'M TERRIFIED OF ONE THAT INTENTIONALLY FAILS IT.


Dog
I NEED GPU
FOR MY DUMB
NEURAL NETWORK


ONE DOES NOT SIMPLY
GENERATE MEMES USING DEEP LEARNING

Figuras



$J_e(\boldsymbol{a})$
$\boldsymbol{a}$
platô
mínimo local
mínimo global