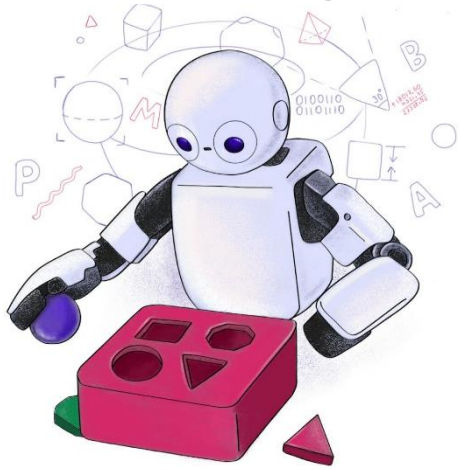
T320 - Introdução ao Aprendizado de Máquina II:
Redes Neurais Artificiais (Parte IV)



Inatel

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

Recapitulando

- Na última aula, discutimos como as redes neurais aprendem.
- Vimos que isso é feito através da minimização de uma função de custo.
  - Usamos o erro quadrático médio por questões didáticas, mas existem várias outras funções como por exemplo a ***entropia cruzada***, usada para o treinamento de classificadores multi-classe e a ***focal loss*** para o treinamento de detectores de objetos.
- Aprendemos que a minimização da função de custo é realizada iterativamente com a retropropagação do erro até que não haja mais melhoria na performance da rede neural.
- Analisamos como a retropropagação funciona através de um exemplo.
- Nesta aula, iremos discutir algumas visões práticas para o treinamento de 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.
- Portanto, começamos relembrando sobre a questão do cálculo do ***vetor gradiente***.

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado

Versões Online, Batch e Minibatch

- Conforme vimos anteriormente, a base para o aprendizado de redes MLP é a obtenção do ***vetor gradiente*** e o estabelecimento de um ***processo iterativo de busca*** dos ***pesos sinápticos*** que minimizem a ***função de custo***.
- Vimos que a obtenção do ***vetor gradiente*** se dá através do processo de ***retropropagação do erro***, o qual é dividido em duas etapas:
  - Etapa direta (***forward***) onde se apresenta um exemplo de entrada, $\boldsymbol{x}$, e obtém-se a resposta da rede e, consequentemente, o ***erro de saída***.
  - Etapa reversa (***retropropagação/backpropagation***) em que se calculam as derivadas parciais necessárias ao longo das camadas 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 saída da rede e que a média de todos esses ***gradientes locais*** leva ao gradiente estimado para o conjunto total de exemplos.

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

- O ***gradiente local***, é a derivada parcial do erro da j-ésima saída da rede para o n-ésimo exemplo de entrada em relação ao peso, $w_{i,j}^{m}$.
- $\nabla J_n(\boldsymbol{w})$ é a média dos N_M ***gradientes locais*** para o n-ésimo exemplo de entrada.
- No entanto, surge aqui um questionamento importante:
  - O que é melhor, usar a ***média dos*** N_M ***gradientes locais,*** $\nabla J_n(\boldsymbol{w})$***, e já dar um passo de otimização***, ou seja, atualizar os pesos, ***reunir o gradiente completo e então dar um passo único e mais preciso*** ou ***um meio termo***?

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado

Versões Online, Batch e Minibatch

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

- 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 $J\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$.
- Enquanto o critério de parada não for atendido, faça:
  - Ordene aleatoriamente os exemplos de entrada e saídas correspondentes.
  - Para l variando de 1 até N, faça:
    - Apresente o exemplo l de entrada à rede.
    - Calcule $J_l\big(\boldsymbol{w}(t)\big)$ e $\nabla J_l\big(\boldsymbol{w}(t)\big)$.
    - $\boldsymbol{w}(t+1) = \boldsymbol{w}(t) - \alpha \nabla J_l\big(\boldsymbol{w}(t)\big)$.
    - $t = t + 1$.
  - $k = k + 1$.
  - Calcule $J\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$.

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado

Versões Online, Batch e Minibatch

- O outro extremo seria utilizar todo o conjunto de exemplos para calcular o gradiente antes de atualizar os pesos.
- Essa é a ideia por trás da abordagem em ***batelada*** (***batch***). O algoritmo abaixo ilustra a operação correspondente.

- 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 calcule e armazene $\nabla J_l\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$.
  - $\boldsymbol{w}(k+1) = \boldsymbol{w}(k) - \frac{\alpha}{N}\sum_{l=1}^{N} \nabla J_l\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$.
  - $k = k + 1$.
  - Calcule $J\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$.

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado

Versões Online, Batch e Minibatch

- Nas ***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 conjunto com mais de um e menos de N exemplos.
- **OBS**.: As amostras que compõem o ***mini-batch*** devem ser ***aleatoriamente*** escolhidas a partir do conjunto de treinamento. O algoritmo abaixo ilustra isso.

- Defina valores iniciais para o vetor de pesos $\boldsymbol{w}$, um passo de aprendizagem α pequeno e o tamanho m do mini-batch.
- Faça $k = 0$ (época) 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 do conjunto de treinamento, à rede.
    - Calcule $J_l\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$ e calcule e armazene $\nabla J_l\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$.
  - $\boldsymbol{w}(k+1) = \boldsymbol{w}(k) - \frac{\alpha}{\boldsymbol{m}} \sum_{l=1}^{\boldsymbol{m}} \nabla J_l\big(\boldsymbol{w}(k)\big)$.
  - $k = k + 1$.
  - 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*** de uma rede neural.
- Aqui, vamos nos ater aos métodos mais 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 aprendizado ***online*** utiliza um único exemplo (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*** (ou seja, métodos baseados na derivada parcial de primeira ordem), como o ***online***, são conhecidos como métodos de ***gradiente descendente estocástico***.

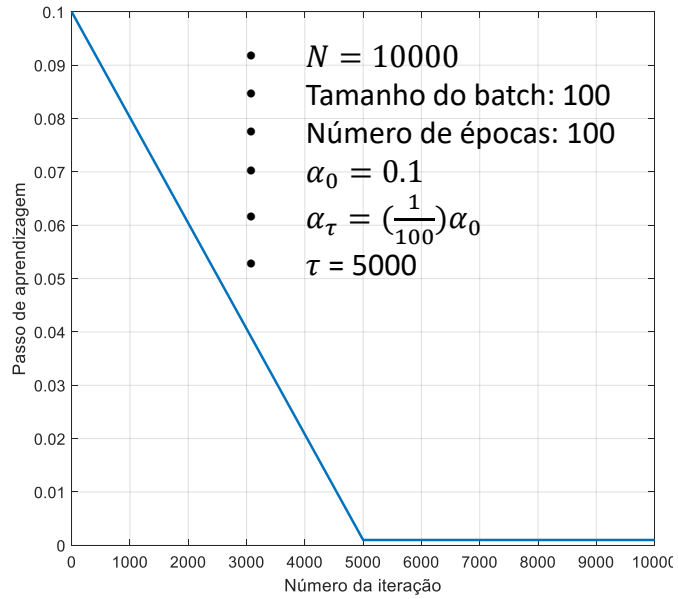
Variações dos algoritmos de otimização dos pesos

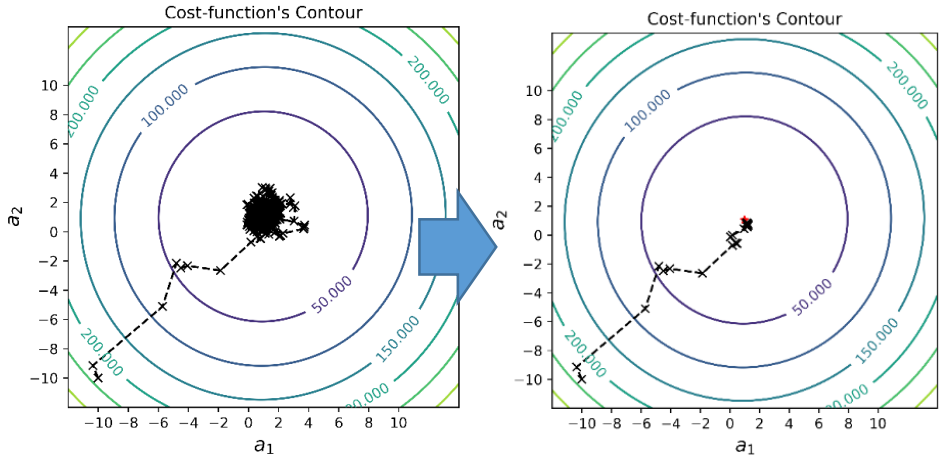
- **Redução programada do passo de aprendizagem**
  - A escolha do ***passo de aprendizagem*** é complicada e exige um compromisso entre velocidade de convergência e estabilidade/precisão.
  - Pode-se usar um valor fixo, mas geralmente para o GDE e MB, se adota uma variação decrescente de um valor α_0 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, deixa-se o valor do passo de aprendizagem fixo, como mostrado na figura ao lado.
  - Porém, a definição dos hiperparâmetros 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 seu ajuste.
  - Esse termo tem o potencial de aumentar a velocidade de convergência das versões online e em mini-lotes do gradiente descendente e deixá-las mais estáveis.
  - 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

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

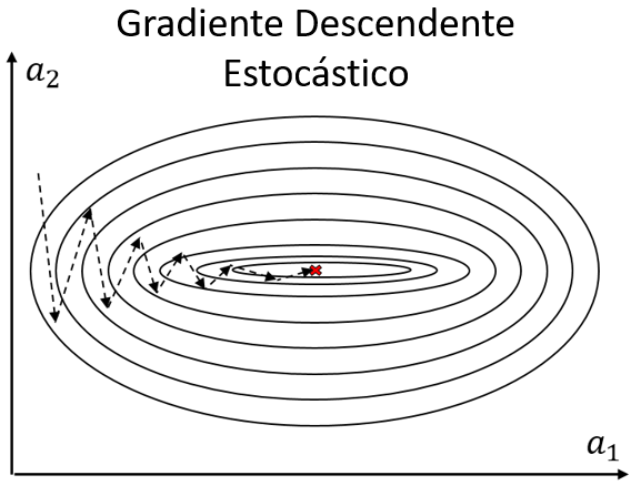
$\boldsymbol{g}$ é o ***vetor gradiente***, α é o ***passo de aprendizagem*** e $\mu \in [0,1)$ é o ***coeficiente de momento*** e determina com que rapidez as contribuições de gradientes anteriores decaem (ou seja, μ é um termo de memória).

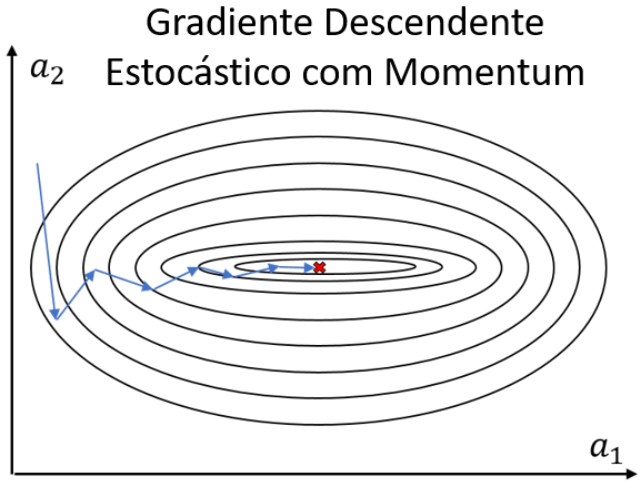
  - Quanto maior for μ, maior será a influência de gradientes anteriores na direção atual.
  - $\boldsymbol{v}$ dá a ***direção*** e a ***velocidade*** na qual os pesos se movem pelo espaço de pesos.

Variações dos algoritmos de otimização dos pesos

➢ Momentum

- Em física, ***momento*** 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, o termo aumenta o tamanho dos passos dados naquela direção.
  - Quando o gradiente muda de direção a cada nova iteração, o termo momento suaviza as variações (figura ao lado).
  - Como resultado, temos convergência mais rápida e oscilação reduzida.





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 $\boldsymbol{w} + \mu\boldsymbol{v}$.
  - Esse termo adicional funciona como um fator de correção que pode aumentar, em alguns casos, a velocidade de convergência do algoritmo.
- **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 ajustá-lo dinamicamente.
  - O passo é ajustado de acordo com o desempenho da rede, i.e., informação dos gradientes passados.
  - Além disso, pode-se ter ***passos diferentes para cada peso do modelo***, os quais são atualizados de forma independente.
  - Portanto, são adequados para redes neurais, onde a superfície de erro é diferente em diferentes dimensões, tornando a atualização dos pesos mais efetiva.
  - 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 (representações numéricas: ***underflow*** e ***overflow***) e falha completamente em convergir (e.g., desaparecimento e explosão dos gradientes).
- A inicialização também pode fazer com que ocorram variações expressivas na ***velocidade de convergência*** (e.g., platôs, pontos de sela).
- 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 de inicialização aleatória***.

https://www.deeplearning.ai/ai-notes/initialization/

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 na 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

- A ideia por trás delas é manter a média das ativações igual a ***zero*** e a variância das ativações ***constante*** ao longo das várias camadas da rede, pois desta forma evita-se o desaparecimento ou a explosão do gradiente.
- Considerando uma camada com m entradas e n saídas, temos as seguintes ***heurísticas*** para inicializar os ***pesos sinápticos*** de seus nós.

Inicialização	**Funções de ativação**	**Distribuição Uniforme** $U(-r, r)$	**Distribuição Normal** $N(0, \sigma^2)$
Xavier/Glorot	Nenhuma (Linear), 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 ***pesos de bias*** é inicializá-los com ***valores nulos***. Esta heurística se mostra bastante eficiente na maioria dos casos.

Redes Neurais MLP com SciKit-Learn

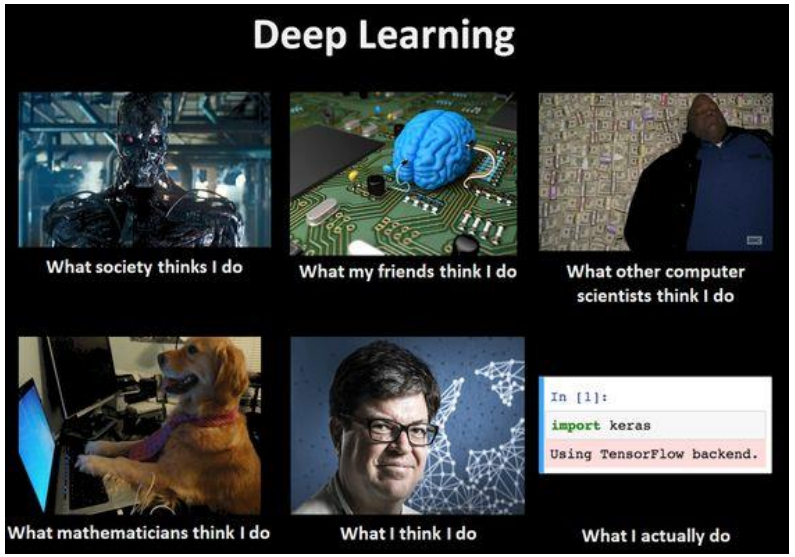
- Como vimos anteriormente, a biblioteca SciKit-Learn disponibiliza algumas classes para o treinamento de redes neurais multi-layer perceptron.
- Entretanto, suas implementações não se destinam a aplicações de larga escala.
- Em particular, a biblioteca SciKit-Learn não oferece suporte a GPUs.
- Para implementações de ***modelos de aprendizado profundo*** escaláveis, muito mais rápidos, flexíveis e baseados em GPU, devemos utilizar 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

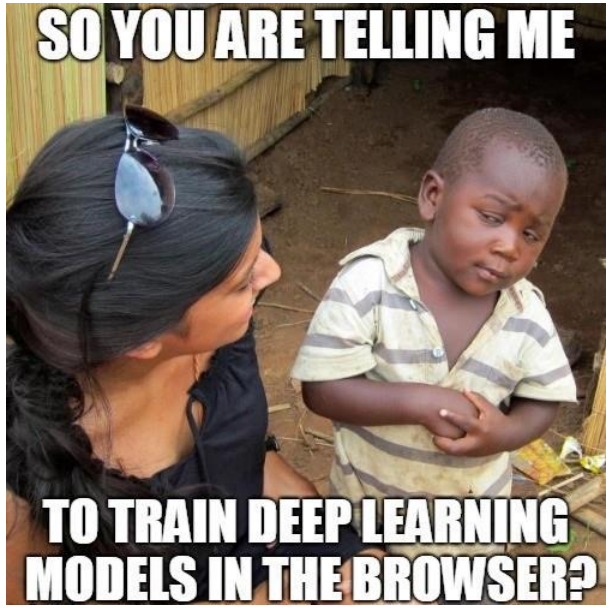
Tarefas

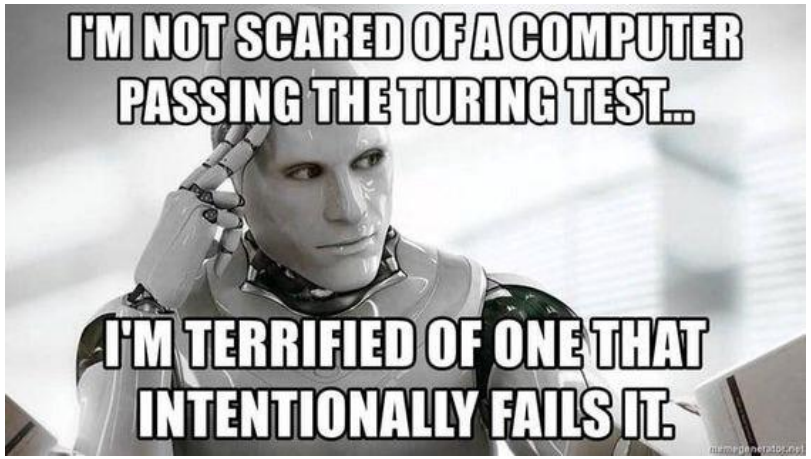
- **Quiz**: “*T320 - Quiz – Redes Neurais Artificiais (Parte VII)*” que se encontra no MS Teams.
- **Projeto**: Projeto #2.
  - Projeto já está no github e pode ser feito em grupos de no máximo 3 alunos.
  - **Entrega**: **11/12/2022 até às 23:59**.
  - Leiam os enunciados atentamente.
  - Apenas um integrante do grupo precisa fazer a entrega.
  - **Mas, não se esqueçam de colocar os nomes de todos os integrantes do grupo.**

Obrigado!

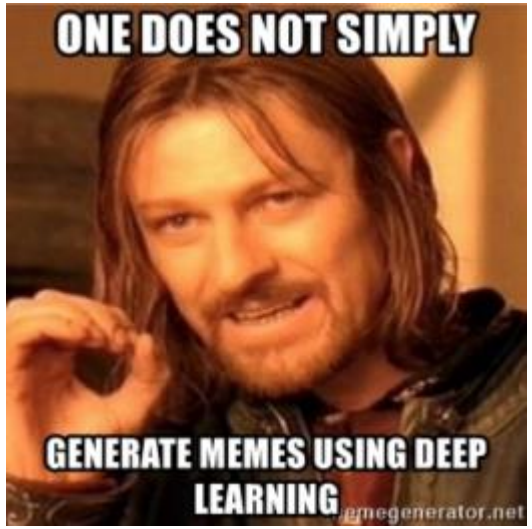

People with no idea about AI, telling me my AI will destroy the world
Me wondering why my neural network is classifying a cat as a dog..
Dog


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

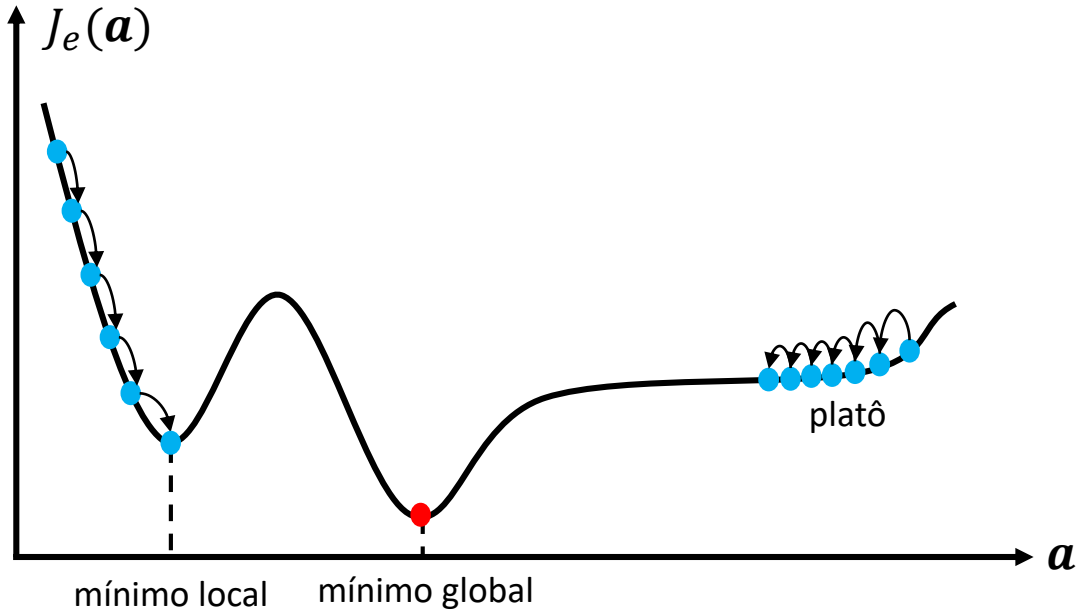

SO YOU ARE TELLING ME
TO TRAIN DEEP LEARNING MODELS IN THE BROWSER?


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
memegenerator.net

Figuras


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

Algumas visões práticas de algoritmos de aprendizado

Versão Online

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{x}(n) \mid \boldsymbol{w}(k))}{\partial w_{i,j}^{m}} = \frac{1}{N_M}\sum_{j=1}^{N_M}\frac{\partial\left(d_j(n) - y_j(n) \mid \boldsymbol{w}(k)\right)^2}{\partial w_{i,j}^{m}} = \frac{1}{N_M}\sum_{j=1}^{N_M}\frac{\partial e_j^2(n \mid \boldsymbol{w}(k))}{\partial w_{i,j}^{m}} = \nabla J_n(\boldsymbol{w}(k)).$$