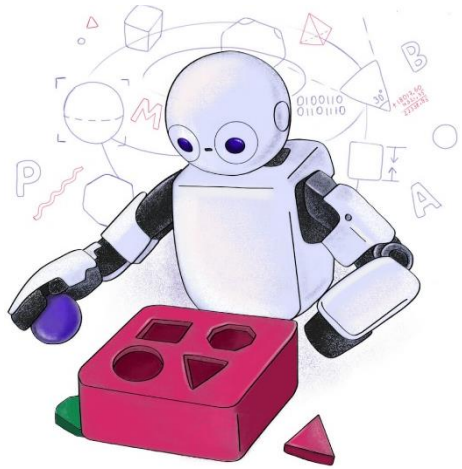
TP557 - Tópicos avançados em IoT e Machine Learning:

Regressão com DNNs (Parte I)



Inatel

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

O que vamos ver?

- Anteriormente, vimos como minimizar iterativamente a função de erro usando o gradiente descendente.
  - Dá-se um palpite sobre os valores dos pesos (i.e., inicializa-se os pesos com valores aleatórios);
  - Mede-se o erro causado por esse palpite;
  - Usa-se a informação obtida através do erro (i.e., vetor gradiente) para melhorar o palpite;
  - Repete-se o processo até a convergência ou até que um critério de parada seja atingido.
- Em termos gerais, é assim que as redes neurais são treinadas.
- Portanto, neste tópico, nós veremos como criar uma rede neural que atinja o mesmo objetivo do exemplo anterior, encontrar uma ***função linear*** que aproxime um conjunto de dados.

Conjunto de dados de treinamento

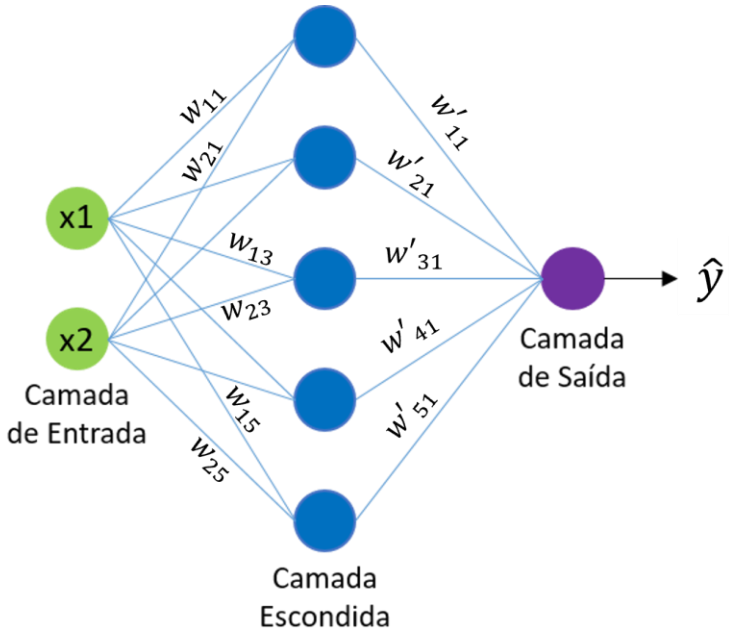
$$\boldsymbol{x} = \{-1, 0, 1, 2, 3, 4\}$$
$$\boldsymbol{y} = \{-3, -1, 1, 3, 5, 7\}$$

- Ao lado temos o conjunto de dados que usamos anteriormente.
- Nosso ***objetivo*** é encontrar um ***modelo que mapeie*** os valores de $\boldsymbol{x}$ em $\boldsymbol{y}$ de forma ótima (no sentido da minimização do erro).
- Antes, nós usamos o ***gradiente descendente*** para ***otimizar os pesos de uma função hipótese*** com formato de reta.
- Agora, treinaremos uma rede neural para resolver o problema do mapeamento.

O modelo

$$\hat{y}(n) = a_0 + a_1 x_1(n) + \cdots + a_K x_K(n)$$

$$\hat{y}(n) = a_0 + a_1 x_1(n) + a_2 x_1^2(n) + \cdots + a_K x_1^K(n)$$



- Notem que independentemente se estamos usando ***hiperplanos***, ***polinômios*** ou ***redes neurais***, em todos os casos temos um ***modelo*** e o nosso ***objetivo é encontrar seus pesos de forma que o erro seja minimizado***.

O código da rede neural

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error’)

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

- Usaremos as APIs da biblioteca TensorFlow para ***criar***, ***treinar*** e ***avaliar*** nossas redes neurais.
  - ***Application programming interface*** (**API**): conjunto de regras (e.g., funções, classes, etc.) que um software oferece para que desenvolvedores ou outros programas possam interagir com ele.

Definindo o conjunto de treinamento

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

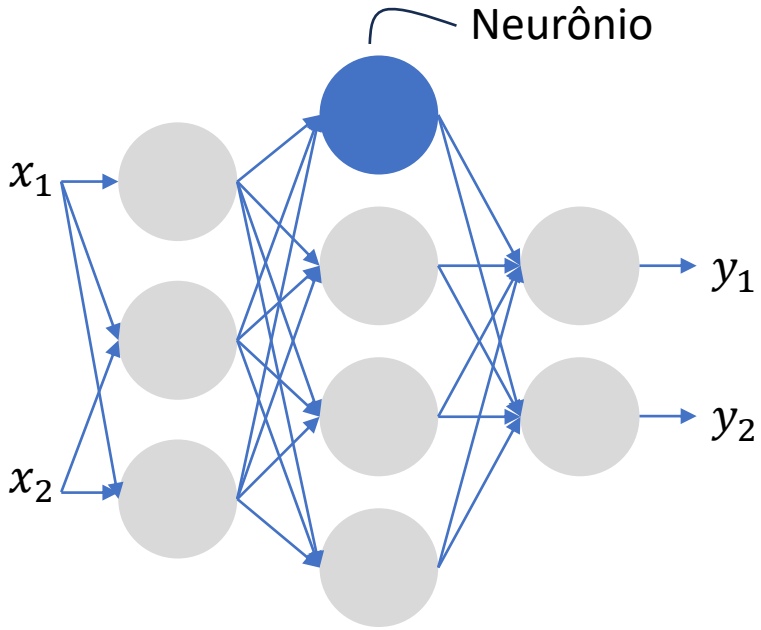
- As primeiras duas linhas definem o conjunto de treinamento.
- Ou seja, os valores de x e y que usaremos para otimizar o modelo durante as iterações e épocas de treinamento.
- Cada valor de x corresponde a um valor de y.
- O Tensorflow espera que o conjunto de dados sejam *arrays* NumPy.

Definindo uma rede neural

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

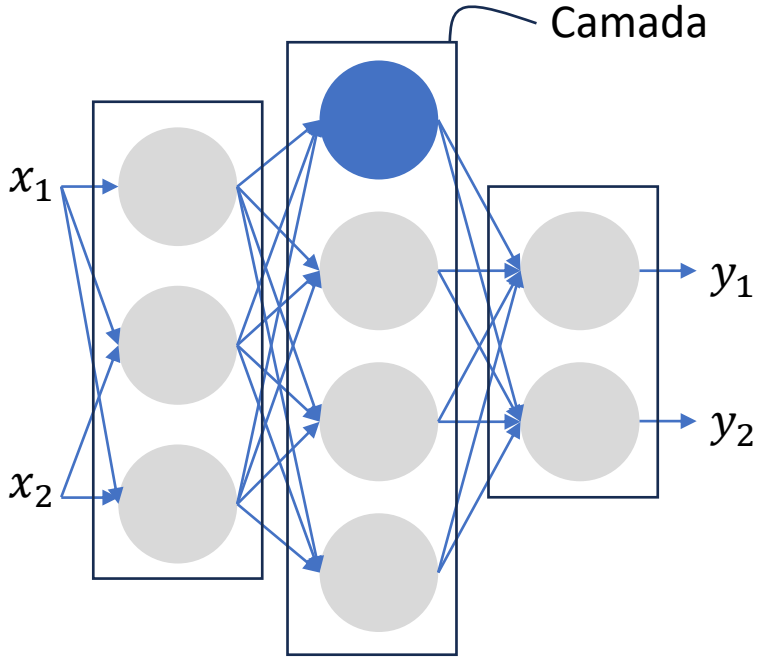
- Na sequência, temos a definição da rede neural.
- É uma rede neural muito simples, uma das mais simples que veremos.
- Antes de discutirmos o código, vamos relembrar alguns termos para que possamos entendê-lo.

Relembrando alguns termos



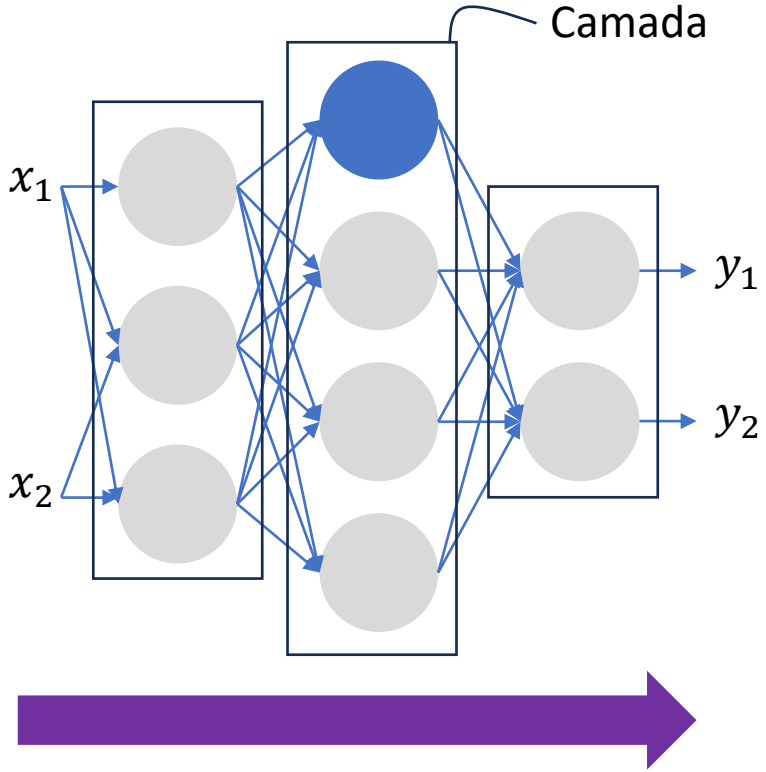
- Cada um dos círculos ao lado é um neurônio ou nó.

Relembrando alguns termos



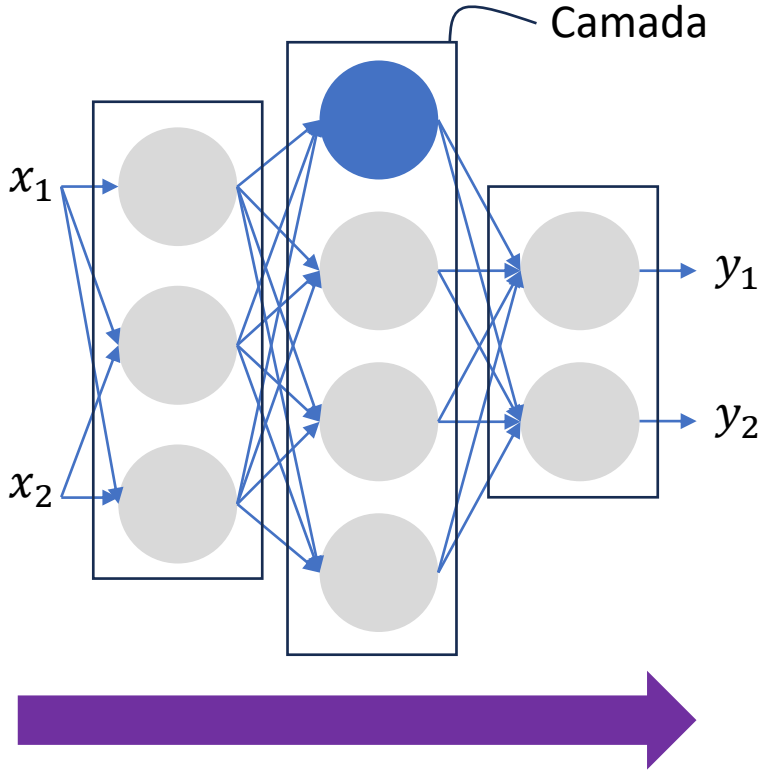
- Nós chamamos cada um dos ***conjuntos de neurônios*** em um retângulo de ***camada***.
- A rede ao lado tem ***duas camadas ocultas*** e ***uma camada de saída***.

Relembrando alguns termos



- Em redes de ***alimentação direta***, as camadas estão conectadas em ***sequência***.
- As ***informações fluem em uma única direção***, ou seja, elas fluem da entrada para as camadas ocultas e, finalmente, para a camada de saída, sem recursões.

Relembrando alguns termos



- Na terminologia do Tensorflow, nós usamos o termo ***sequential*** para definir este tipo de rede.
- Além disso, vemos que as ***saídas de uma camada estão conectadas a todos os neurônios da próxima camada***, criando conexões ***densas***.
- Usaremos o termo ***densas*** para definir estes tipos de camadas da rede.

Definindo uma rede neural

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

- Voltando ao código, nós vemos o termo ***sequential*** e, portanto, temos a definição de uma rede de alimentação direta ou sequencial.
- Dentro dos colchetes, ***listamos as camadas*** dessa rede neural.
- Nesse exemplo, a ***lista*** contém apenas um elemento, portanto, temos apenas uma ***camada***.

Definindo uma rede neural

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

- Essa camada é do tipo ***densa*** (classe *Dense*), então sabemos que é uma rede ***densamente conectada***.
- O parâmetro ***units*** define quantos neurônios a camada possui.
- Podemos ver que essa camada tem ***apenas um neurônio***.
- Portanto, esse código define a rede neural mais simples possível.
  - Há apenas uma camada com um único neurônio nela.

Definindo uma rede neural

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

- Um parâmetro que definimos ***apenas para a primeira camada*** (neste caso a única) de uma rede neural é o formato (i.e., ***dimensões***) das ***entradas***.
- No exemplo, o parâmetro ***input_shape*** tem o valor 1, que indica a dimensão da entrada, ou seja, a ***quantidade de atributos de entrada*** do neurônio.
- Isso significa que o neurônio tem apenas uma entrada, o atributo x.

Definindo uma rede neural

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

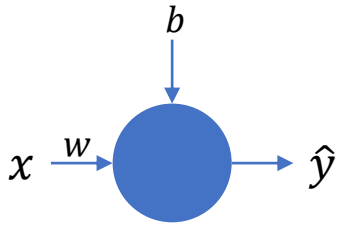
- Quando vimos o funcionamento dos neurônios, aprendemos que eles possuem uma ***função de ativação***, que tem como entrada a ***combinação ponderada das entradas pelos pesos sinápticos mais o peso de bias*** e que faz um ***mapeamento não linear*** de sua entrada na saída.
- Porém, como queremos encontrar um ***mapeamento linear entre a entrada e a saída***, ***não usaremos*** nenhuma ***função de ativação***.

Definindo uma rede neural

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

- Lembrem-se nosso objetivo é encontrar os pesos de uma função hipótese, do tipo $\hat{y} = b + wx$, modelada pela rede neural.
- A função de ativação pode ser definida através do parâmetro ***activation*** da classe ***Dense***.
- Por padrão, a ativação é definida como ***None***, ou seja, não se tem ativação.

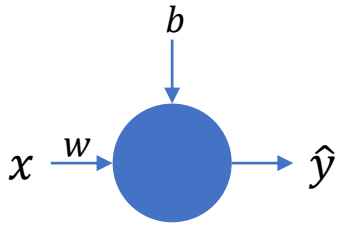
Nossa rede neural



$$\hat{y} = b + wx$$

- Visualmente, nossa rede neural se parece com a figura ao lado.
- Nós temos apenas ***uma camada*** com um ***único neurônio*** nela.
- O neurônio tem apenas uma entrada, o atributo, x.
  - Por isso a dimensão da entrada é igual a 1.

Nossa rede neural



$$\hat{y} = b + wx$$

- Nenhuma função de ativação é definida.
  - Isso se deve ao fato de queremos encontrar um ***mapeamento linear***.
- Ele irá aprender os pesos (w e b) que mapeiam x em y da ***melhor forma possível***, baseado no ***conjunto de treinamento***.
- Esse modelo é conhecido na literatura como ***Perceptron***.

Compilando a rede neural

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

- Depois de termos definido o modelo, precisamos compilá-lo.
- Ao compilarmos o modelo, devemos definir a ***função de erro (loss)*** e um ***otimizador***.
- Como antes, usaremos o ***erro quadrático médio*** como função de erro.
- **Obs**.: O Tensorflow se encarrega de realizar os cálculos de erro, portanto, não precisamos nos preocupar com isso.

Compilando a rede neural

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

- O ***otimizador*** é o SGD, que significa *Stochastic Gradient Descent*.
- Na verdade, ele implementa o ***gradiente descendente em mini-lotes***.
- Ele segue o processo que vimos anteriormente, o qual calcula o vetor gradiente usando um subconjunto de amostras do conjunto de treinamento.
- O SGD usa o vetor gradiente para caminhar pela (descer a) superfície de erro até atingir ***um*** mínimo.

Treinando a rede neural

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

- O treinamento propriamente dito é feito através do método *fit()*.
- O que ele faz é atualizar ***iterativamente*** os pesos do modelo usando o SGD.
- O treinamento é feito por 500 épocas.
- Uma ***época*** representa ***uma passagem completa pelo conjunto de treinamento*** durante o treinamento do modelo.

Treinando a rede neural

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

- Uma ***iteração*** representa ***uma atualização dos pesos***.
- Assim, uma época é um conjunto de iterações.
- Por exemplo, se o conjunto de treinamento tem 1000 exemplos e está sendo treinado em *mini-batches* de 100 exemplos, então uma época é composta por 10 iterações, i.e., os ***pesos são atualizados 10 vezes***.
- Por padrão, o tamanho do *mini-batch* é igual a 32.

Treinando a rede neural

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

- O tamanho do *mini-batch* é definido através do parâmetro ***batch_size*** do método *fit()*.
- Porém, como no código acima o número de exemplos de treinamento é menor do que o tamanho padrão, ***1 iteração se torna igual a 1 época***.
- Ou seja, todo os exemplos são usados para se atualizar os pesos → **GDB**.

Treinando a rede neural

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

- Cada ***iteração*** de atualização executa as etapas que discutimos antes:
  - dá-se um palpite a respeito dos valores dos pesos (inicialmente, eles são aleatórios),
  - mede-se o erro causado por esse palpite,
  - atualiza-se os pesos usando-se o gradiente do erro,
  - e repete-se o processo, aqui, até se completar as 500 épocas.

Treinando a rede neural

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

- Percebam que não estamos fazendo, nem faremos, nenhum cálculo nós mesmos (i.e., cálculo do erro, vetor gradiente, atualizações).
- Nós deixaremos o TensorFlow fazer isso por nós.
- Essa é uma das grandes vantagens do TensorFlow, principalmente quando temos redes neurais profundas.

Treinando a rede neural

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

- Ao final do treinamento, o método *fit()* retorna um objeto do tipo *History*.
- Ele contém, além de outros parâmetros, um ***dicionário*** chamado de ***history*** contendo o ***erro*** e ***todas as métricas extras*** medidas ***ao final de cada época*** no conjunto de treinamento e no conjunto de validação (se houver).

Realizando predições

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

- Depois de treinado, podemos usar o modelo para predizer o valor de y para um determinado x.
- A predição também é chamada de ***inferência***.
- Predições são feitas com o método *predict()*.

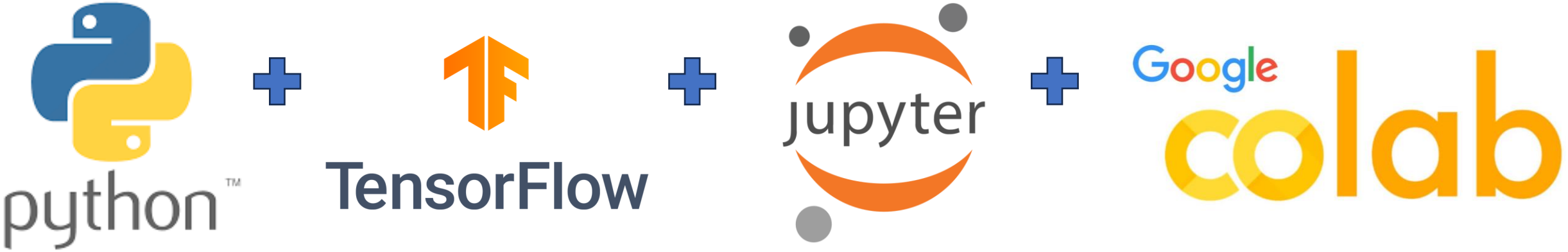
Realizando predições

```
x = np.array([-1.0,  0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0])
y = np.array([-3.0, -1.0, 1.0, 3.0, 5.0, 7.0])

model = tf.keras.Sequential([tf.keras.layers.Dense(units=1, input_shape=[1])])
model.compile(optimizer='sgd', loss='mean_squared_error')

history = model.fit(x, y, epochs=500)

print(model.predict([10.0]))
```

- Qual valor seria predito e impresso para $x = 10$?
- Sabemos das aulas anteriores que a melhor função hipótese é dada por $\hat{y} = -1 + 2x$.
- Assim, quando $x = 10$, o valor de $\hat{y}$ deveria ser 19. Correto?
- Vamos ver no próximo exemplo, que, surpreendentemente, a resposta é não.

Exemplo

- Regressão com DNNs



Atividades

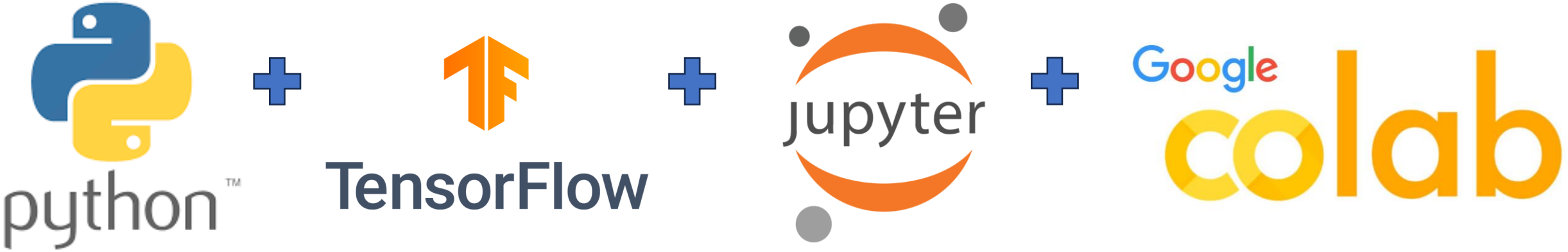
- Quiz: “***TP557 – Regressão com DNNs (Parte I)***”.
- Exercício #1: Regressão com DNNs (Parte I).
- Exercício #2: Regressão com DNN e dados ruidosos

Usando *callbacks*

- E se o treinamento durar várias horas ou dias?
  - Isso é bastante comum, especialmente ao treinar com grandes conjuntos de dados.
- Nesse caso, não devemos apenas salvar o modelo ao final do treinamento, mas também ***salvar pontos de verificação em intervalos regulares*** durante o treinamento.
- Podemos configurar o método ***fit()*** para salvar pontos de verificação, mas como fazer esta configuração?
  - A resposta é: através de ***callbacks***.
  - ***callbacks*** são funções passadas como argumento para outras funções e chamadas quando um evento ocorrer.
- O método ***fit()*** possui um parâmetro chamado ***callbacks***, que permite especificar uma lista de ***callbacks*** que o Keras ***chamará durante o treinamento*** no ***início e no final do treinamento***, ***no início e no final de cada época*** e até ***antes e depois do processamento de cada mini-batch***.
- Veja todas as ***callbacks*** disponíveis em https://keras.io/callbacks/

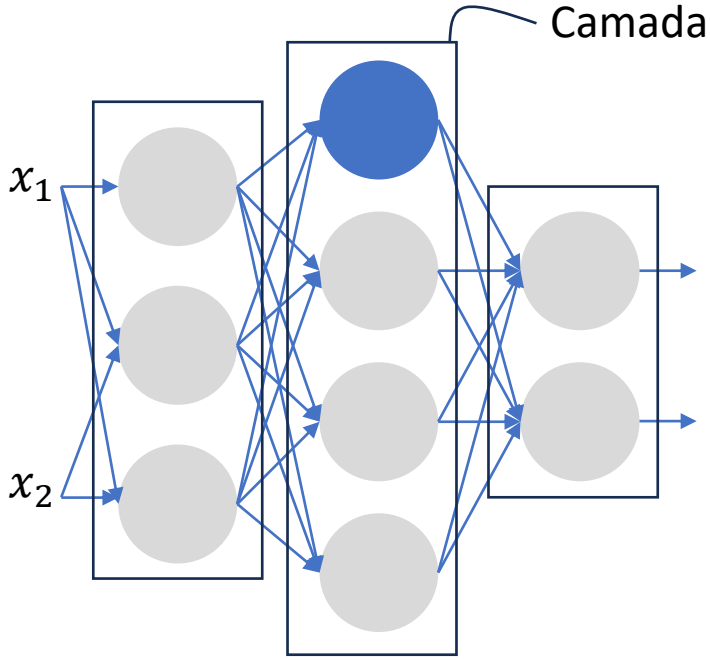
Exemplo

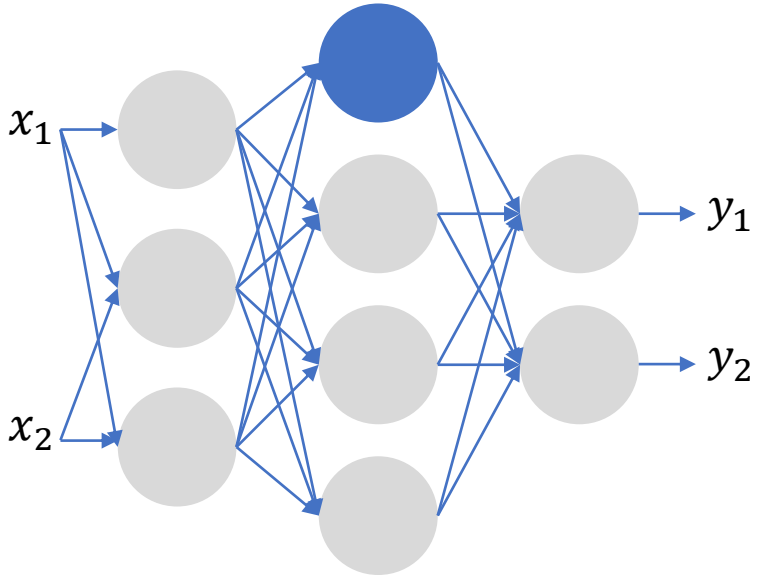
- Usando_callbacks.ipynb

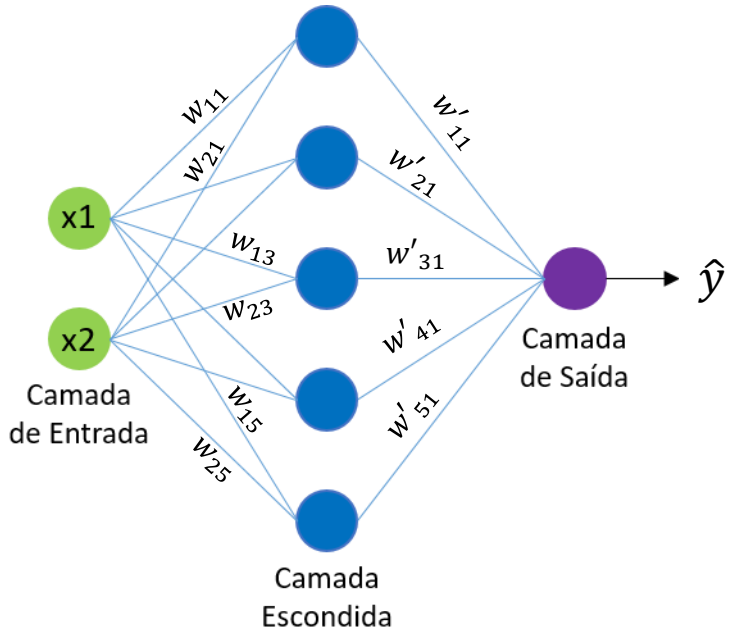


Perguntas?

Obrigado!


Camada
x_1
x_2


x_1
x_2
y_1
y_2


x1
x2
Camada
de Entrada
w_{11}
w_{21}
w_{13}
w_{23}
w_{15}
w_{25}
Camada
Escondida
w'_{11}
w'_{21}
w'_{31}
w'_{41}
w'_{51}
Camada
de Saída
$\hat{y}$