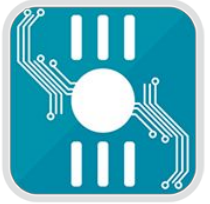


Descidas de gradiente (batch, mini-batch, estocástica), Overfitting e Underfitting (Viés e Variância) e Técnicas de Regularização de Modelos

Filipe Pinheiro e Guilherme Matos

Gradiente Batch, Estocástico e Mini-Batch

O que são métodos de otimização?

Exemplos:

- Gradiente Descendente;
- Momentum;
- Adagrad (Adaptive Gradient Algorithm);
- RMSProp (Root Mean Square Propagation);
- Adam (Adaptive Moment Estimation);
- …

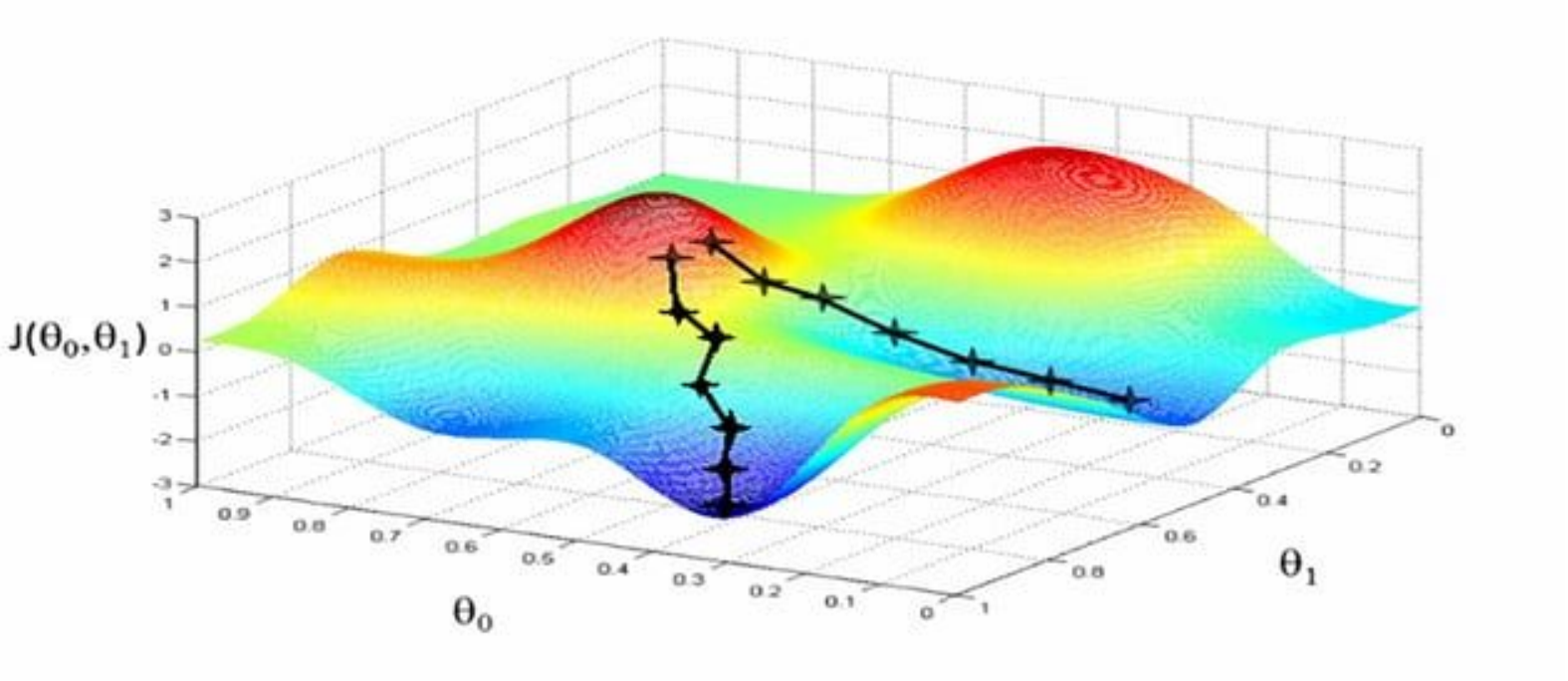
Gradiente Descendente

- Método de otimização iterativo;
- Definida por:

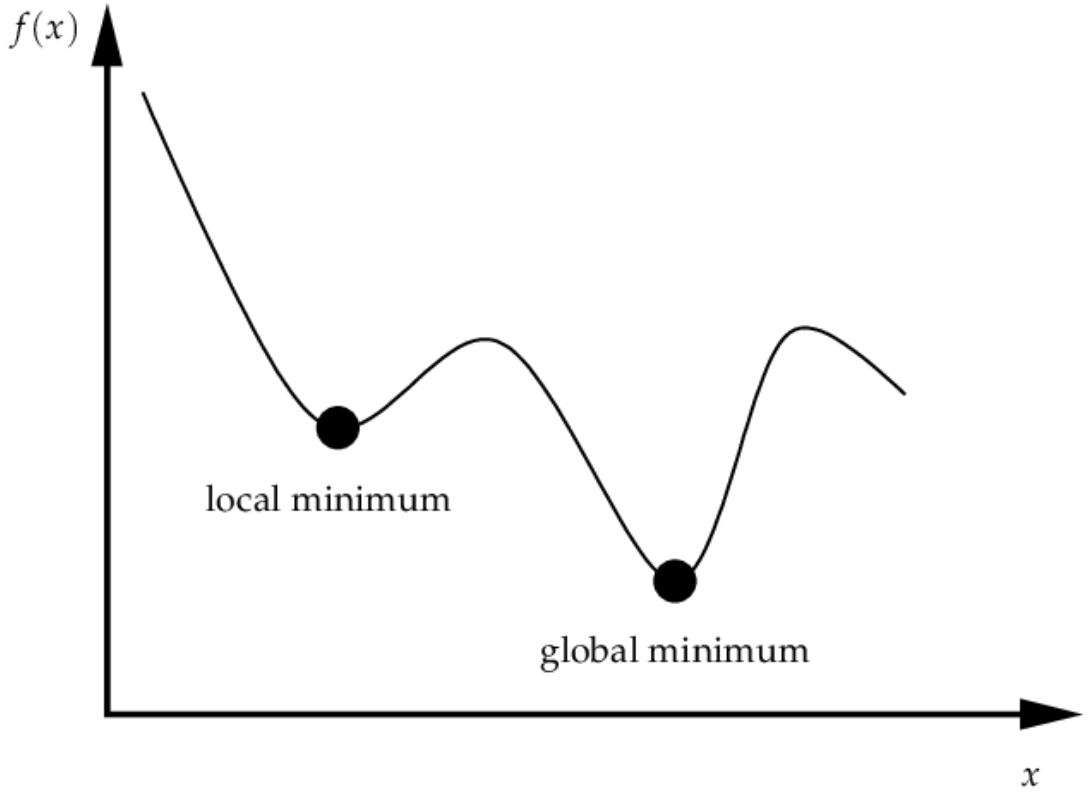
$$\theta := \theta - \alpha \cdot \nabla J(\theta)$$

- θ: parâmetro a ajustar
- α: taxa de aprendizado
- ∇J(θ): gradiente da função de custo em relação a θ

Gradiente Descendente



Gradiente Descendente



Gradiente Descendente Batch

- Calcula o gradiente com todos os dados de uma vez;
- Batch = grupo de dados;
- “Você espera ver todos os dados antes de dar um passo”;
- Mais preciso;
- Mais lento.

Gradiente Descendente Batch

- Demonstração matemática (regressão):

$$\hat{y}^{(i)} = h_\theta(x^{(i)}) = \theta_0 + \theta_1 x^{(i)}$$

- ŷ: predição
- θ: parâmetros
- x: característica passada
- i: exemplo

Gradiente Descendente Batch

- Função de custo (MSE):

$$J(\theta) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left(\hat{y}^{(i)} - y^{(i)} \right)^2$$

- m: número de exemplos

Gradiente Descendente Batch

- Gradiente da função de custo:

$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_0} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(\hat{y}^{(i)} - y^{(i)} \right)$$

$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_1} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(\hat{y}^{(i)} - y^{(i)} \right) x^{(i)}$$

Gradiente Descendente Batch

- Atualização dos parâmetros:

$$\theta_j := \theta_j - \alpha \frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j}$$

Gradiente Descendente Batch

- Exemplo numérico (1ª iteração):

Os dados a serem calculados são:

- x = [1, 2]
- y = [2, 4]

Onde, com a inicialização:

- $\theta_0 = 0$
- $\theta_1 = 0$
- $\alpha = 0.05$

Gradiente Descendente Batch

- Exemplo numérico (1ª iteração):

Inicialmente, calcular a predição para cada exemplo:

- $\hat{y}_1 = 0 + 0 \cdot 1 = 0$
- $\hat{y}_2 = 0 + 0 \cdot 2 = 0$

Calculando a diferença entre o valor predito e o valor real:

- $\hat{y}_1 - y_1 = 0 - 2 = -2$
- $\hat{y}_2 - y_2 = 0 - 4 = -4$

Gradiente Descendente Batch

- Exemplo numérico (1ª iteração):

Em seguida é realizado o cálculo do gradiente:

- $\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_0} = \frac{1}{2}(-2 + (-4)) = -3$
- $\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_1} = \frac{1}{2}(-2 \cdot 1 + (-4) \cdot 2) = -5$

Gradiente Descendente Batch

- Exemplo numérico (1ª iteração):

Atualização dos parâmetros:

- $\theta_0 := \theta_0 - 0.05 \cdot (-3) = 0.15$
- $\theta_1 := \theta_1 - 0.05 \cdot (-5) = 0.25$

Gradiente Descendente Batch

Fluxo de uma iteração:

- Definir os parâmetros theta;
- Calcular a predição para todo o conjunto;
- Calcular diferença entre predição e valor real;
- Calcular gradiente para todos os dados;
- Atualizar θ.

Gradiente Descendente Estocástico (SGD)

- O que é um processo estocástico?
- Calcula o gradiente usando apenas um dado por vez;
- “Como subir uma montanha no nevoeiro dando passos baseados só no que você vê”;
- Mais rápido, porém errático.

Gradiente Descendente Estocástico (SGD)

- Demonstração matemática (regressão):

$$\hat{y}^{(i)} = h_\theta(x^{(i)}) = \theta_0 + \theta_1 x^{(i)}$$

- ŷ: predição
- θ: parâmetros
- x: característica passada
- i: exemplo

Gradiente Descendente Estocástico (SGD)

- Função de custo (MSE):

$$J(\theta) = \frac{1}{2}(\hat{y}_i - y_i)^2$$

Gradiente Descendente Estocástico (SGD)

- Gradiente da função de custo:

$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_0} = (\hat{y}_i - y_i)$$

$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_1} = (\hat{y}_i - y_i)x_i$$

Gradiente Descendente Estocástico (SGD)

- Atualização dos parâmetros:

$$\theta_j := \theta_j - \alpha \frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j}$$

Gradiente Descendente Estocástico (SGD)

- Exemplo numérico (1ª iteração):

Os dados a serem calculados são:

- x = [1, 2]
- y = [2, 4]

Onde, com a inicialização:

- $\theta_0 = 0$
- $\theta_1 = 0$
- $\alpha = 0.05$

Gradiente Descendente Estocástico (SGD)

- Exemplo numérico (1ª iteração):

É calculado o gradiente somente para o primeiro exemplo:

- $\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_0} = \hat{y}_i - y_i = 0 - 2 = -2$
- $\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_1} = (\hat{y}_i - y_i) \cdot x_i = -2 \cdot 1 = -2$

Gradiente Descendente Estocástico (SGD)

- Exemplo numérico (1ª iteração):

Atualização dos parâmetros conforme os gradientes para o primeiro exemplo:

- $\theta_0 := 0 - 0.05 \cdot (-2) = 0.1$
- $\theta_1 := 0 - 0.05 \cdot (-2) = 0.1$

Gradiente Descendente Estocástico (SGD)

- Exemplo numérico (2ª iteração):

Os dados a serem calculados são:

- x = [1, 2]
- y = [2, 4]

Onde, com a inicialização:

- $\theta_0 = 0.1$
- $\theta_1 = 0.1$
- $\alpha = 0.05$

Gradiente Descendente Estocástico (SGD)

- Exemplo numérico (2ª iteração):

É calculado o gradiente somente para o segundo exemplo:

- $\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_0} = \hat{y}_i - y_i = 0.3 - 4 = -3.7$
- $\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_1} = (\hat{y}_i - y_i) \cdot x_i = (0.3 - 4) \cdot 2 = -7.4$

Gradiente Descendente Estocástico (SGD)

- Exemplo numérico (2ª iteração):

Atualização dos parâmetros conforme os gradientes para o segundo exemplo:

- $\theta_0 := 0.1 - 0.05 \cdot (-3.7) = 0.285$
- $\theta_1 := 0.1 - 0.05 \cdot (-7.4) = 0.47$

Gradiente Descendente Estocástico (SGD)

Fluxo de uma iteração:

- Definir os parâmetros theta;
- Calcular a predição somente para o exemplo atual;
- Calcular diferença entre predição e valor real;
- Calcular gradiente para o exemplo atual;
- Atualizar θ.

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Calcula o gradiente com pequenos grupos de dados;
- Batch = grupo de dados;
- “O melhor dos dois mundos”;
- Compromisso entre precisão e velocidade;
- Depende do número de Batchs.

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Demonstração matemática (regressão):

$$\hat{y}^{(i)} = h_\theta(x^{(i)}) = \theta_0 + \theta_1 x^{(i)}$$

- ŷ: predição
- θ: parâmetros
- x: característica passada
- i: exemplo

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Função de custo (MSE):

$$J(\theta) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left(\hat{y}^{(i)} - y^{(i)} \right)^2$$

- m: número de exemplos

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Gradiente da função de custo:

$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_0} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(\hat{y}^{(i)} - y^{(i)} \right)$$

$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_1} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(\hat{y}^{(i)} - y^{(i)} \right) x^{(i)}$$

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Atualização dos parâmetros:

$$\theta_j := \theta_j - \alpha \frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j}$$

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Exemplo numérico (1ª iteração):

Os dados a serem calculados são:

- $x = [1, 2, 3, 4, 5, 6]$
- $y = [2, 4, 6, 8, 10, 12]$

Onde, com a inicialização:

- $\theta_0 = 0$
- $\theta_1 = 0$
- $\alpha = 0.05$

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Exemplo numérico (1ª iteração):

Inicialmente é feito a separação dos Batchs.
Aqui o tamanho do batch será 2:

- $x = [[1, 2], [3, 4], [5, 6]]$
- $y = [[2, 4], [6, 8], [10, 12]]$

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Exemplo numérico (1ª iteração):

Para a primeira iteração, será feito o ŷ para x = [1, 2] e y = [2, 4], junto a sua diferença:

- $\hat{y}_1 = 0 + 0 \cdot 1 = 0$
- $\hat{y}_2 = 0 + 0 \cdot 2 = 0$

- $\hat{y}_1 - y_1 = 0 - 2 = -2$
- $\hat{y}_2 - y_2 = 0 - 4 = -4$

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Exemplo numérico (1ª iteração):

Em seguida é realizado o cálculo do gradiente:

- $\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_0} = \frac{1}{2}(-2 + (-4)) = -3$
- $\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_1} = \frac{1}{2}(-2 \cdot 1 + (-4) \cdot 2) = -5$

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Exemplo numérico (1ª iteração):

Atualização dos parâmetros:

- $\theta_0 := \theta_0 - 0.05 \cdot (-3) = 0.15$
- $\theta_1 := \theta_1 - 0.05 \cdot (-5) = 0.25$

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Exemplo numérico (2ª iteração):

Relembrando os Batchs:

- $x = [[1, 2], [3, 4], [5, 6]]$
- $y = [[2, 4], [6, 8], [10, 12]]$

Onde, com os parâmetros:

- $\theta_0 = 0.15$
- $\theta_1 = 0.25$
- $\alpha = 0.05$

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Exemplo numérico (2ª iteração):

Para a segunda iteração, será feito o ŷ para x = [3, 4] e y = [6, 8], junto a sua diferença:

- $\hat{y}_1 = 0.25 \cdot 3 + 0.15 = 0.9$
- $\hat{y}_2 = 0.25 \cdot 4 + 0.15 = 1.15$
- $\hat{y}_1 - y_1 = 0.9 - 6 = -5.1$
- $\hat{y}_2 - y_2 = 1.15 - 8 = -6.85$

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Exemplo numérico (2ª iteração):

Em seguida é realizado o cálculo do gradiente:

- $\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_0} = \frac{1}{2}(-5.1 + (-6.85)) = -5.97$
- $\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_1} = \frac{1}{2}(-5.1 \cdot 3 + (-6.85) \cdot 4) = -21.35$

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Exemplo numérico (2ª iteração):

Atualização dos parâmetros:

- $\theta_0 = 0.15 - 0.05 \times (-5.975) = 0.448$
- $\theta_1 = 0.25 - 0.05 \times (-21.35) = 1.31$

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Exemplo numérico (3ª iteração):

Relembrando os Batchs:

- $x = [[1, 2], [3, 4], [5, 6]]$
- $y = [[2, 4], [6, 8], [10, 12]]$

Onde, com os parâmetros:

- $\theta_0 = 0.448$
- $\theta_1 = 1.31$
- $\alpha = 0.05$

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Exemplo numérico (3ª iteração):

Para a segunda iteração, será feito o ŷ para x = [5, 6] e y = [10, 12], junto a sua diferença:

- $\hat{y}_1 = 1.31 \cdot 5 + 0.448 = 7.03$
- $\hat{y}_2 = 1.31 \cdot 6 + 0.448 = 8.35$
- $\hat{y}_1 - y_1 = 7.03 - 10 = -2.96$
- $\hat{y}_2 - y_2 = 8.35 - 12 = -3.64$

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Exemplo numérico (3ª iteração):

Em seguida é realizado o cálculo do gradiente:

- $\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_0} = \frac{1}{2}(-2.96 + (-3.64)) = -3.30$
- $\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_1} = \frac{1}{2}(-2.96 \cdot 5 + (-3.64) \cdot 6) = -18.34$

Gradiente Descendente Mini-Batch

- Exemplo numérico (3ª iteração):

Atualização dos parâmetros:

- $\theta_0 = 0.448 - 0.05 \times (-3.30) = 0.614$
- $\theta_1 = 1.31 - 0.05 \times (-18.34) = 2.23$

Gradiente Descendente Mini-Batch

Fluxo de uma iteração:

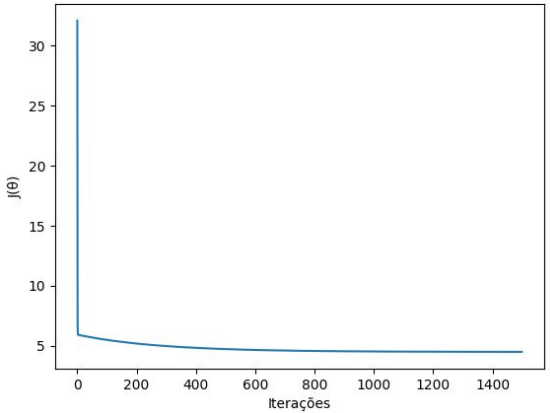
- Definir os parâmetros theta;
- Definir os Batchs e separar os dados de acordo;
- Calcular a predição para o Batch atual;
- Calcular diferença entre predição e valor real;
- Calcular gradiente para o Batch atual;
- Atualizar θ.

Comparativo

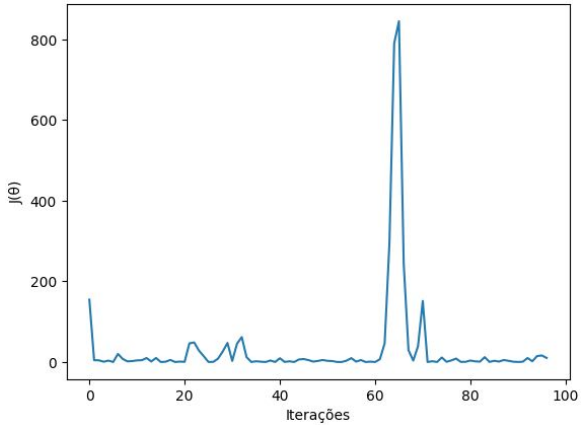
Critério	Batch GD	SGD	Mini-Batch GD
Tamanho do passo	Todos os dados	1 exemplo	Pequeno grupo
Atualização	1x por batch	A cada exemplo	1x por mini-batch
Velocidade	Lenta	Muito rápida	Intermediária
Estabilidade	Alta	Baixa (ruidosa)	Boa
Convergência	Precisa	Rápida	Rápida e estável
Custo computacional	Alto	Baixo	Intermediário
Vetorização	Alta (GPU eficiente)	Baixa	Moderada a alta
Mínimos locais	Mais propenso	Menos propenso	Intermediário
Uso ideal	Dados pequenos	Dados grandes, online	Deep learning, grandes datasets

Partindo para o código…

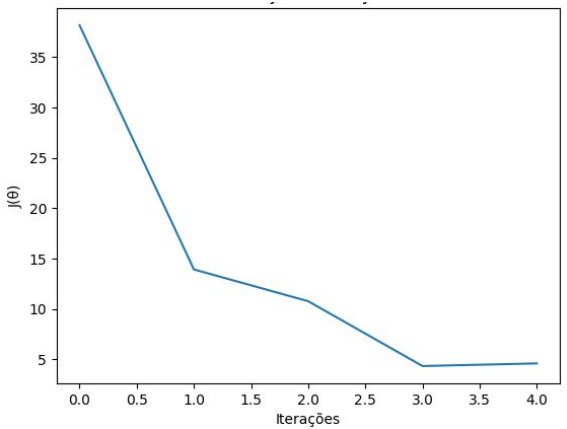
Comparativo do Custo x Iterações



Função de custo
Batch

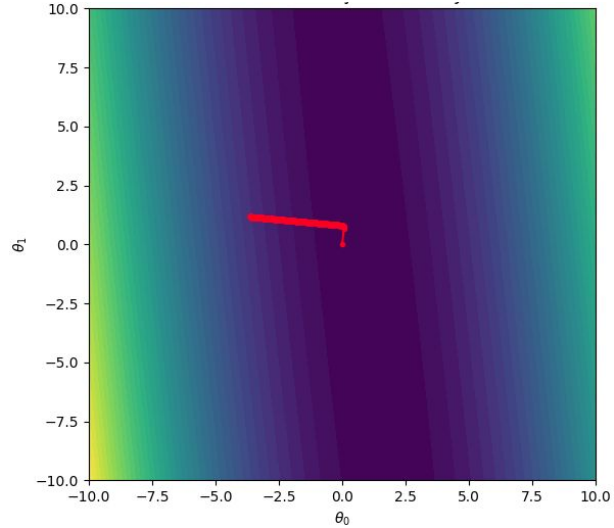


Função de custo
Estocástico

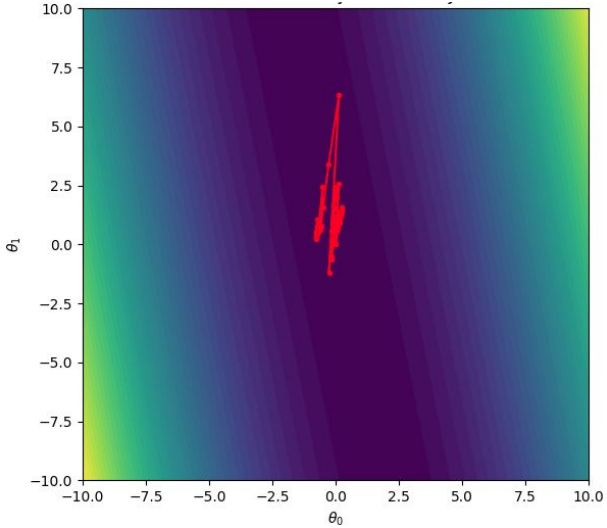


Função de custo
Mini-Batch

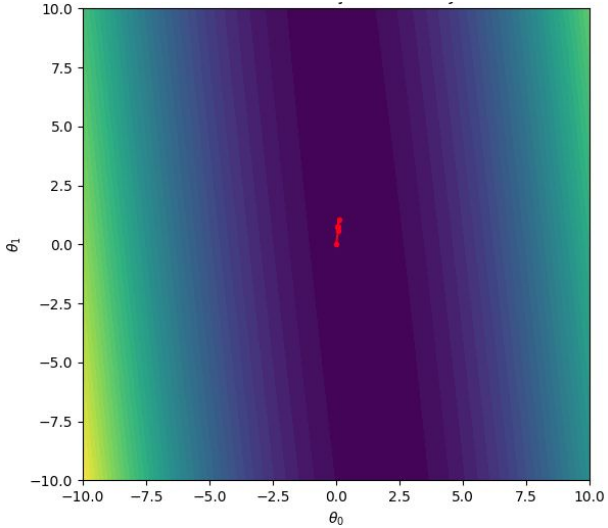
Comparativo do Contorno da Função de Custo



Contorno do Batch



Contorno do Estocástico



Contorno do Mini-Batch

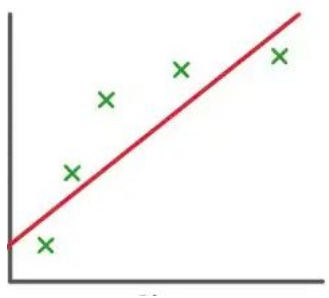
Underfitting, Overfitting e Goodfitting

O Problema da Generalização

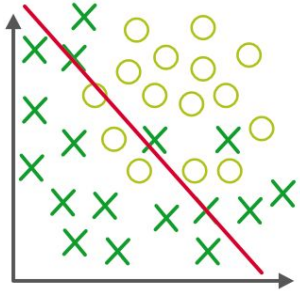
- Modelos de machine learning aprendem com dados de treino;
- O desafio: ir bem nos dados novos, não só nos que já viu;
- Isso se chama generalização;
- Mas o modelo pode errar por aprender pouco ou demais.

Underfitting (Aprendizado insuficiente)

- Modelo não consegue aprender nem o básico;
- Resultado: baixa performance no treino e no teste;
- Sinal de viés alto;
- Causas comuns:
  - Modelo muito simples;
  - Pouco tempo de treino;
  - Poucos dados ou dados mal representados.



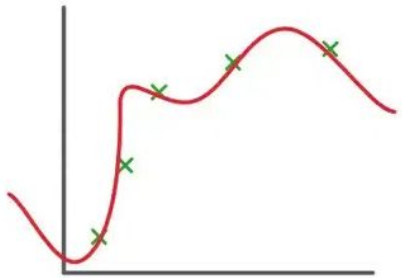
Regressão



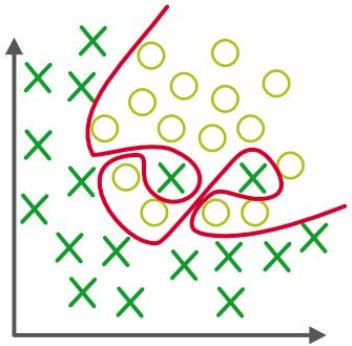
Classificação

Overfitting (Aprendeu demais)

- Modelo memoriza demais os dados de treino;
- Vai muito bem no treino, mas mal no teste;
- Sinal de variância alta ;
- Causas comuns:
  - Modelo muito complexo;
  - Poucos dados;
  - Treinou por tempo demais.



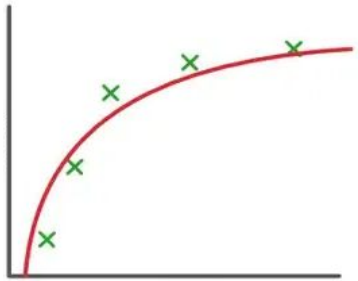
Regressão



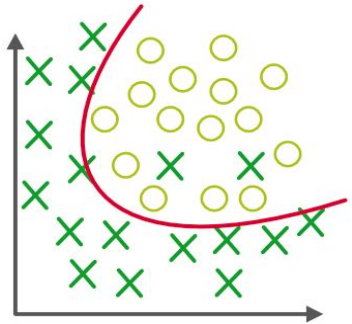
Classificação

Goodfitting (Ajuste ideal)

- Modelo aprende os padrões reais dos dados;
- Vai bem tanto no treino quanto no teste;
- Nem simples demais, nem complexo demais;
- Esse é o objetivo final ao treinar qualquer modelo.



Regressão



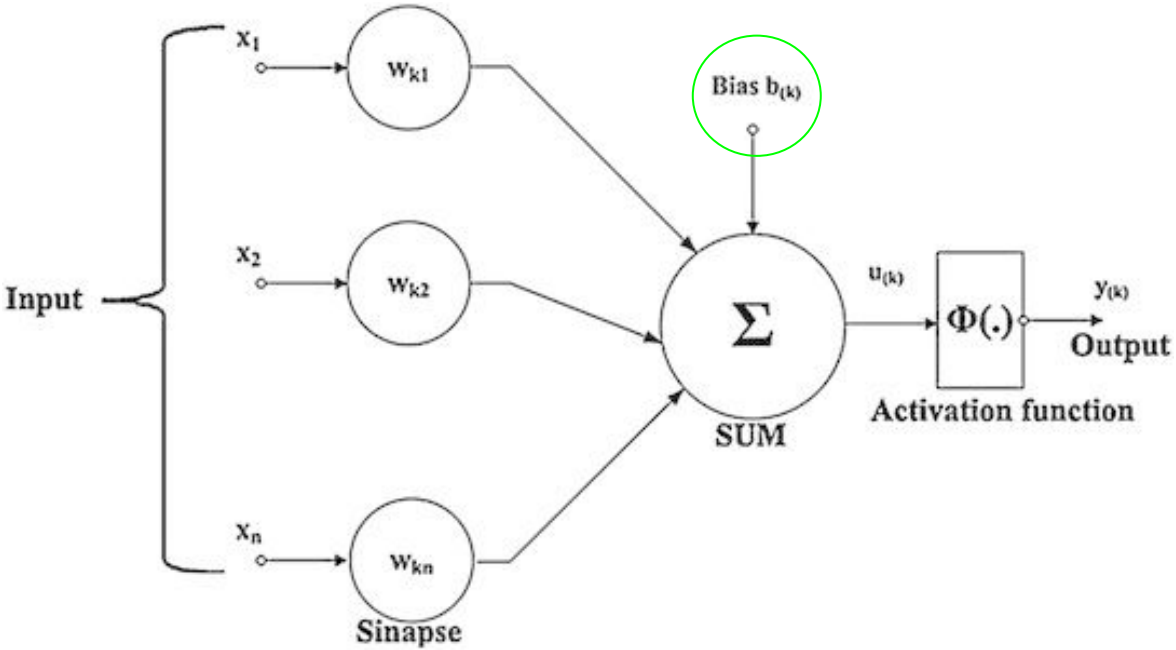
Classificação

Viés e Variância em Redes Neurais Artificiais

Viés (como parâmetro da rede)

- É um valor ajustável que é somado à saída de cada neurônio;
- Funciona como um "ajuste fino" que ajuda a rede a aprender funções mais complexas;
- Não depende das entradas;
- Não precisa ser pequeno ou grande, apenas o valor certo para a tarefa;
- Treinado junto com os pesos durante o aprendizado.

Viés (como parâmetro da rede)



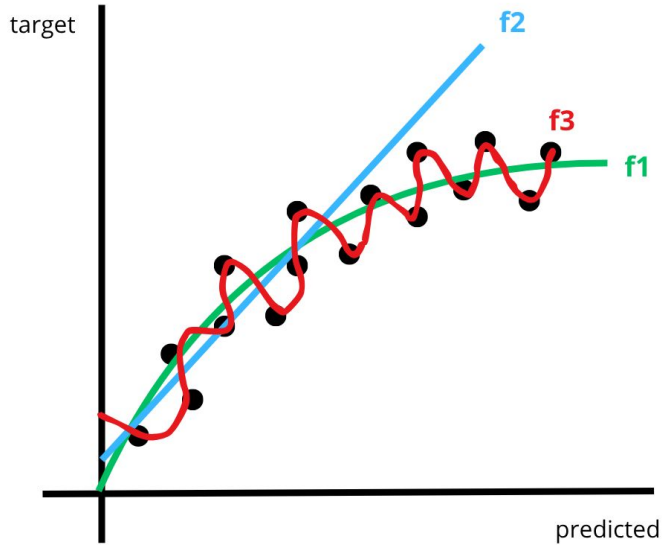
Viés (como componente de erro do modelo)

- Refere-se à simplicidade do modelo;
- Um modelo com alto viés (bias):
  - É muito simples para aprender os padrões;
  - Comete muitos erros mesmo nos dados de treino;
  - Sofre de underfitting.
- Causa: rede pequena demais, mal configurada ou treinada.

Variância

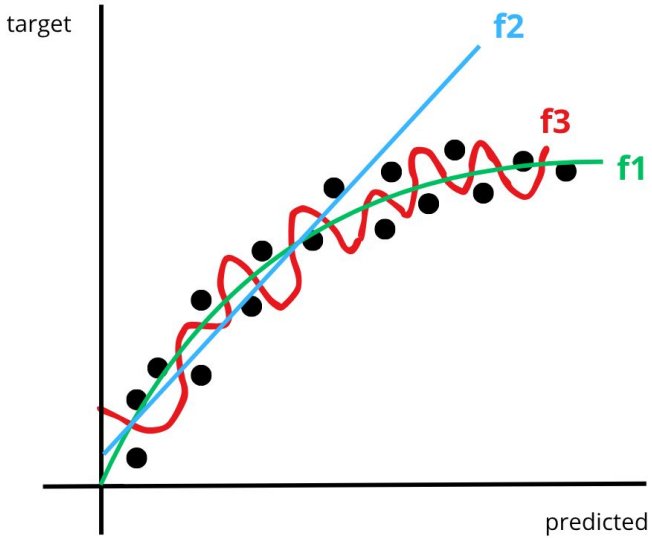
- Mede o quanto o modelo muda se os dados mudarem;
- Um modelo com alta variância:
  - Aprende até os ruídos dos dados de treino;
  - Vai muito bem no treino, mas mal nos dados novos;
  - Sofre de overfitting.
- Causa: rede muito complexa, com poucos dados ou sem regularização.

Bias durante o Treinamento



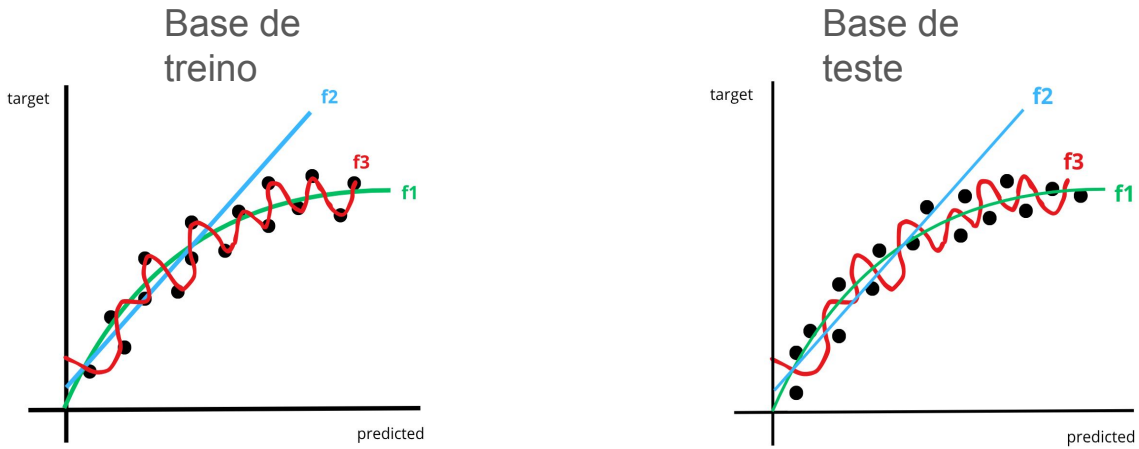
MODELO	BIAS
f1	MÉDIO
f2	ALTO
f3	BAIXO

Bias durante o Teste



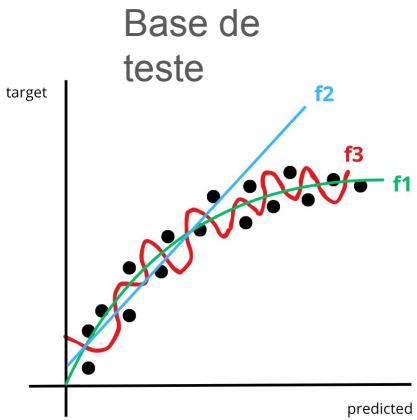
MODELO	BIAS
f1	MÉDIO
f2	ALTO
f3	ALTO

Comparação viés (bias) treino e teste



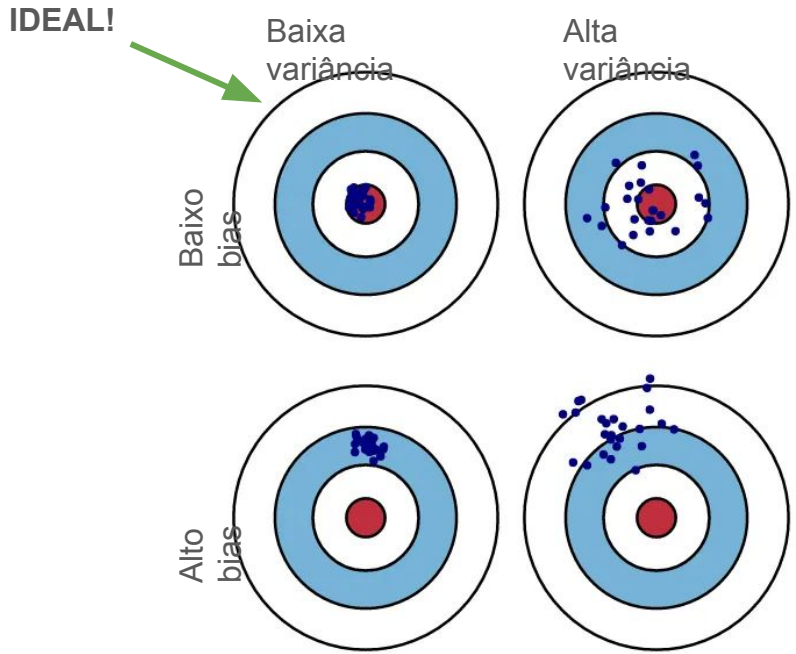
- f3 tem baixo viés por ser flexível, mas alta variância, com pior desempenho em novos dados;
- f3 é overfitting: trabalha bem com os dados de treino, mas é ruim no dataset de teste.

Comparação viés (bias) treino e teste



- f2 é underfitting (possui um viés alto, mas ao mesmo tempo, uma baixa variância)

Ilustração gráfica de bias e variância



Dilema Viés x Variância

- Modelos simples demais = alto viés;
- Modelos complexos demais = alta variância;
- O desafio é encontrar o ponto ideal:
  - Aprender bem os dados;
  - Generalizar para novos exemplos.

Resumo

- Viés pode significar parâmetro do neurônio ou erro do modelo;
- Variância mede a sensibilidade do modelo aos dados de treino;
- Buscar o equilíbrio entre os dois é essencial;
- Técnicas como regularização, validação cruzada, e arquitetura adequada ajudam nesse equilíbrio.

Quantos parâmetros uma rede neural profunda tem?

Uma rede neural profunda pode possuir muitos parâmetros (pesos e bias) a serem aprendidos:

FC: fully connected layer

1ª camada: 500.000 pesos + 500 bias terms
2ª camada: 25.000 pesos + 50 bias terms
Camada de saída: 50 pesos + 1 bias term
Total: 525.601 params
Resultando, assim, em modelos muito complexos

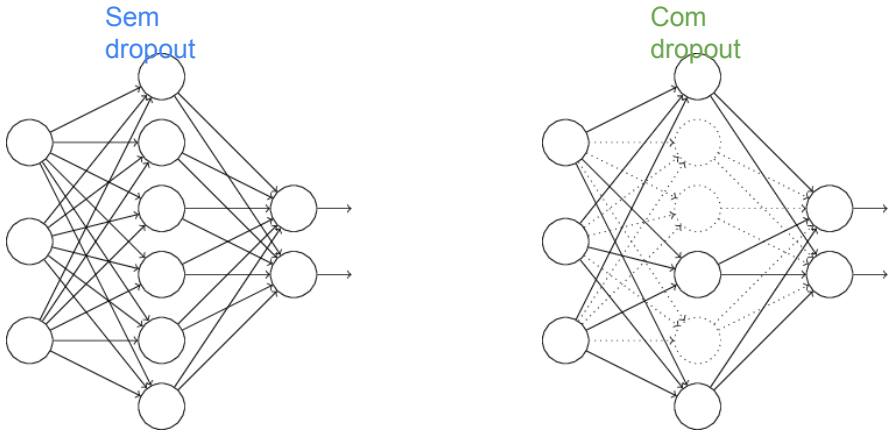
Técnicas de Regularização de Modelos

O que é Regularização?

- Técnicas que ajudam a evitar o overfitting;
- Fazem o modelo generalizar melhor para novos dados;
- Agem como um "freio" na complexidade da rede;
- Objetivo: equilíbrio entre aprender e não exagerar.

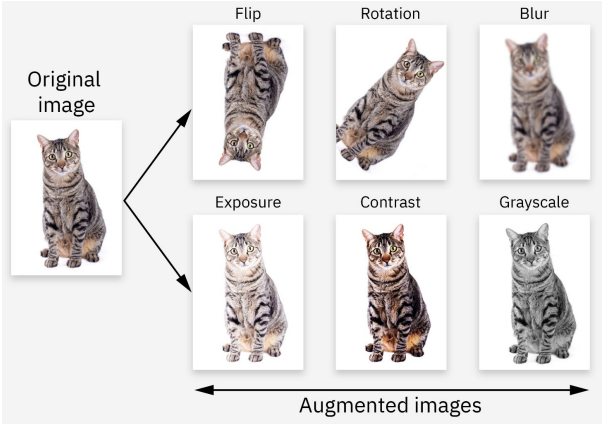
Dropout

- Durante o treino, alguns neurônios são desligados aleatoriamente;
- A rede aprende a não depender de um caminho só;
- Melhora a robustez do modelo;
- No teste, todos os neurônios voltam.



Data Augmentation e Mais Dados

- Adiciona variações nos dados de treino;
- Exemplo: rotação, corte, espelhamento em imagens;
- Torna o modelo mais generalista;
- Quando possível, mais dados reais também ajudam.



Regularizações L2 (Weight Decay)

- Reduz pesos grandes, mantendo o modelo simples;
- Adiciona um termo de penalização na função de erro;
- Evita que o modelo dependa demais de conexões específicas;

$$Custo\ total = Erro + \lambda \cdot \sum w^2$$

- W são os pesos;
- λ (lambda) é um número que diz quanto a gente se importa com a regularização (ex: 0.01 ou 0.1).

Regularizações L1 (Lasso)

- Penaliza pesos, mas tende a zerar alguns deles;
- Adiciona um termo de penalização mais agressivo na função de custo;
- Modelo com menos conexões ativas;

$$Custo\ total = Erro + \lambda \cdot \sum | w |$$

- w são os pesos;
- λ (lambda) é um número que diz importância dada à regularização (ex: 0.01 ou 0.1).

Pode-se combinar L1 + L2, o que é conhecido como Elastic Net.

Early Stopping

- Observa o erro em dados de validação;
- Se o erro piora mesmo com mais épocas, paramos o treinamento;
- Evita que o modelo comece a memorizar os dados;
- Simples e eficaz.

Resumo

- Técnicas abordadas:
  - Dropout;
  - Aumento de Dados;
  - Regularização L1 e L2;
  - Early Stopping;
- Regularização = controle contra overfitting;
- O segredo está no equilíbrio entre aprender e não decorar.

Partindo para o código…

Referências

https://www.geeksforgeeks.org/underfitting-and-overfitting-in-machine-learning/

https://www.deeplearningbook.com.br/o-neuronio-biologico-e-matematico/

https://www.ibm.com/br-pt/think/topics/data-augmentation