Revisão de Machine Learning e Descida de Gradiente

Eduardo Adame

Redes Neurais

13 de agosto de 2025

Sobre mim

- **Nome:** Eduardo Adame
- **Formação:**
  - Mestrando em Matemática Aplicada e Ciência de Dados (FGV EMAp);
  - Bacharel em Ciência de Dados e Inteligência Artificial (FGV EMAp).
- **Experiência:** Diversos cursos produzidos/ministrados, ex-consultor por 2 anos e meio no Banco Mundial.
- **Pesquisa:** Estatística bayesiana; quantificação de incerteza, modelos não-paramétricos, inferência exata.
- **Contato:** eadamesalles@gmail.com

Sobre o curso

Objetivos

- Fornecer fundamentos sólidos em redes neurais e aprendizado profundo
- Desenvolver intuição sobre funcionamento dos algoritmos
- Preparar estudantes para projetos reais de deep learning

Metodologia

- Aulas teóricas (slides próprios + outros materiais)
- Exercícios práticos em Jupyter notebooks
- Implementação de algoritmos do zero
- Uso de frameworks modernos (Keras/TensorFlow)

Estrutura do curso - 12 semanas

Fundamentos (Semanas 1-8):

1. Revisão ML + Gradiente
2. Introdução às Redes Neurais
3. Retropropagação
4. Keras + Primeiras Redes
5. Regularização + Dropout
6. Introdução às CNNs
7. Revisão + Dúvidas
8. Avaliação 1

Tópicos Avançados (Semanas 8-16):

9. Transfer Learning
10. Arquiteturas de CNNs
11. Técnicas Avançadas (Data Aug.)
12. Texto + Word Vectors
13. RNNs para Sequências
14. LSTMs + Aplicações
15. Revisão + Dúvidas
16. Avaliação 2

Logística do curso

Horário e Local:

- Quartas-feiras, 15h-18h
- Primeira aula: 13/08/2025
- Última aula: 26/11/2025

Material:

- Slides (PDF)
- Notebooks interativos
- Notas de aula
- Repositório GitHub

Pré-requisitos:

- Python
- Álgebra linear
- Cálculo diferencial
- ML básico

Avaliação:

- Exercícios semanais
- Projeto final

Por que revisar Machine Learning?

- Redes neurais são uma extensão dos métodos de ML tradicionais
- Muitos conceitos fundamentais são compartilhados:
  - Função de custo/perda
  - Otimização via gradiente
  - Overfitting vs. underfitting
  - Validação cruzada
- Entender o gradiente é crucial para entender redes neurais
- Comparação de performance: NN vs. métodos tradicionais

Objetivo da Semana 1

Implementar descida de gradiente do zero e entender sua dinâmica

O que é Machine Learning?

Machine Learning permite que computadores aprendam e façam inferências a partir de dados.

Programação Tradicional:

- Regras explícitas
- Comportamento determinístico
- Limitado a cenários previstos

Machine Learning:

- Aprende padrões dos dados
- Generaliza para novos casos
- Adapta-se a complexidade

Tipos de Machine Learning

Aprendizado Supervisionado

- Dados com respostas conhecidas
- Objetivo: prever respostas para novos dados
- Exemplos:
  - Classificação de e-mails (spam/não spam)
  - Previsão de preços de imóveis
  - Diagnóstico médico

Aprendizado Não-Supervisionado

- Dados sem respostas
- Objetivo: encontrar estruturas/padrões
- Exemplos:
  - Segmentação de clientes
  - Detecção de anomalias
  - Redução de dimensionalidade

Tipos de Aprendizado Supervisionado

Regressão

- Saída: valor contínuo/numérico
- Exemplos:
  - Preço de uma casa: R$ 450.000
  - Temperatura amanhã: 23.5°C
  - Vendas do próximo mês: 1.250 unidades
- Métricas: RMSE, MAE, R^2

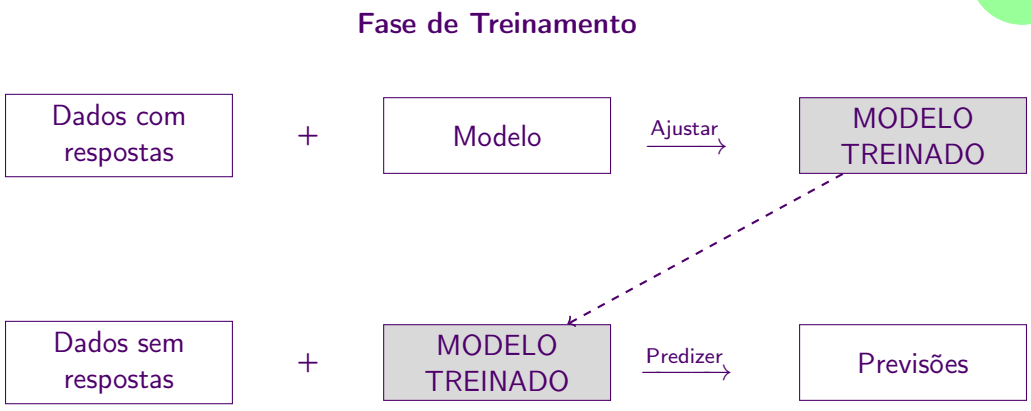
Classificação

- Saída: categoria/classe
- Exemplos:
  - E-mail: spam ou não spam
  - Imagem: gato, cachorro ou pássaro
  - Transação: fraudulenta ou legítima
- Métricas: Acurácia, Precisão, Recall, F1

Vocabulário de Machine Learning

- **Target (Alvo):** Variável que queremos prever
  - Sinônimos: Resposta, Output, Variável Dependente, Labels
- **Features (Características):** Variáveis usadas para fazer a previsão
  - Sinônimos: Preditores, Input, Variáveis Independentes, Atributos
- **Example (Exemplo):** Um único ponto de dados
  - Sinônimos: Observação, Registro, Instância, Linha
- **Label (Rótulo):** Valor do target para um exemplo específico
  - Sinônimos: Resposta, Valor-y, Categoria

Pipeline de Aprendizado Supervisionado



Dados de Treino e Teste

Por que dividir os dados?

- Avaliar generalização do modelo
- Detectar overfitting
- Simular cenário real de uso

Divisão típica:

- 70-80% para treino
- 20-30% para teste
- Opcional: conjunto de validação

Processo

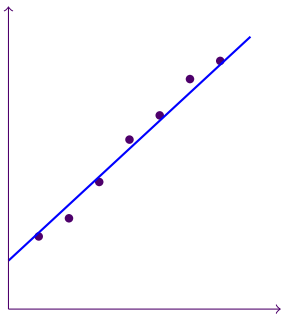
1. **Treinar** com dados de treino
2. **Prever** nos dados de teste
3. **Comparar** previsões com valores reais
4. **Calcular** métricas de erro

Importante

NUNCA use dados de teste durante o treinamento!

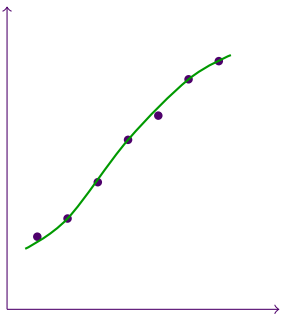
Underfitting vs. Overfitting

Underfitting



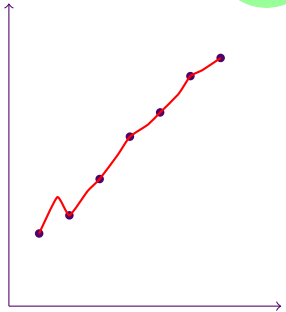
- Modelo muito simples
- Alto bias
- Baixa variância
- Erro alto no treino e teste

Na medida certa



- Complexidade adequada
- Balanceado
- Boa generalização
- Erro baixo no treino e teste

Overfitting



- Modelo muito complexo
- Baixo bias
- Alta variância
- Erro baixo no treino, alto no teste

Métricas de Avaliação Básicas

Para Regressão:

- RMSE (Root Mean Square Error)

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}$$

- MAE (Mean Absolute Error)

$$\text{MAE} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|y_i - \hat{y}_i|$$

Para Classificação:

- Acurácia

$$\text{Acc} = \frac{\text{Previsões Corretas}}{\text{Total de Previsões}}$$

- Precisão e Recall

$$\text{Prec} = \frac{TP}{TP + FP}, \quad \text{Rec} = \frac{TP}{TP + FN}$$

Problema de Regressão Linear

Modelo: $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \varepsilon$

Dados conhecidos:

- $\beta_0 = 1.5$ (intercepto)
- $\beta_1 = 2$ (coef. de x_1)
- $\beta_2 = 5$ (coef. de x_2)
- $x_1, x_2 \sim \text{Uniforme}[0, 10]$
- $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, 0.5^2)$

Objetivo:

- Estimar $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2$
- Métodos a comparar:
  1. Solução analítica
  2. Scikit-learn
  3. Descida de gradiente

Função de Custo (MSE)

$$J(\boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \boldsymbol{x_i}^T \boldsymbol{\beta})^2 \tag{1}$$

Solução Analítica vs. Numérica

Solução Analítica:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (X^T X)^{-1} X^T \mathbf{y} \qquad (2)$$

Vantagens:

- Solução exata
- Uma única operação
- Computacionalmente rápida (problemas pequenos)

Desvantagens:

- Inversão de matriz: $O(n^3)$
- Problemas numéricos
- Não escala para grandes dados

Descida de Gradiente:

$$\boldsymbol{\beta}^{(t+1)} = \boldsymbol{\beta}^{(t)} - \alpha \nabla J(\boldsymbol{\beta}^{(t)}) \qquad (3)$$

Vantagens:

- Escala para grandes dados
- Aplicável a funções não-lineares
- Base para redes neurais
- Flexibilidade

Desvantagens:

- Solução aproximada
- Hiperparâmetros (α, iterações)
- Convergência pode ser lenta

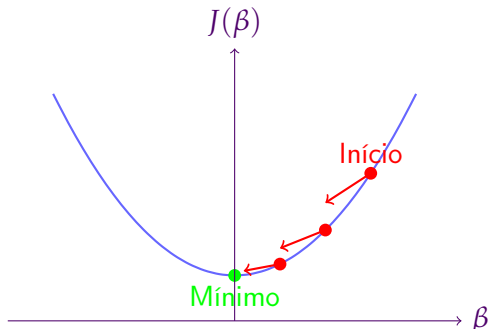
Intuição Geométrica do Gradiente

Imagine: Você está no topo de uma montanha e quer descer até o vale mais baixo.

Estratégia:

1. Olhe ao seu redor
2. Encontre a direção mais íngreme
3. Dê um passo nessa direção
4. Repita até chegar ao vale

O gradiente aponta para a direção de maior subida. Logo, o gradiente negativo aponta para a maior descida!



Trajetória da Descida de Gradiente

Algoritmo de Descida de Gradiente

Algoritmo Básico

1. **Inicialização:** $\boldsymbol{\beta}^{(0)} =$ valores iniciais
2. **Para** $t = 0, 1, 2, \ldots$ **até convergência:**
   - 2.1 Calcular predições: $\hat{\mathbf{y}} = X\boldsymbol{\beta}^{(t)}$
   - 2.2 Calcular erro: $\mathbf{e} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}$
   - 2.3 Calcular gradiente: $\nabla J = -\frac{1}{n} X^T \mathbf{e}$
   - 2.4 Atualizar parâmetros: $\boldsymbol{\beta}^{(t+1)} = \boldsymbol{\beta}^{(t)} - \alpha \nabla J$
3. **Retornar:** $\boldsymbol{\beta}^{(T)}$

Gradiente do MSE:

$$\frac{\partial J}{\partial \beta_j} = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i) \cdot x_{ij} \tag{4}$$

Batch vs. Stochastic Gradient Descent

Batch Gradient Descent:

- Usa **todos** os dados por iteração
- Gradiente exato
- Convergência suave
- Computacionalmente caro

$$\nabla J = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla J_i \qquad (5)$$

Stochastic Gradient Descent:

- Usa **uma amostra** por iteração
- Gradiente aproximado
- Convergência com ruído
- Computacionalmente eficiente

$$\nabla J \approx \nabla J_i \qquad (6)$$

Vantagens do SGD

- Escala para milhões de amostras
- Pode escapar de mínimos locais (ruído = benefício!)
- Convergência online (dados chegando continuamente)

SGD: Ordem dos Dados Importa!

Sem embaralhamento:

- Mesma ordem a cada época
- Padrões sistemáticos
- Convergência tendenciosa
- Ciclos na trajetória

Problema: Se os dados têm ordem específica, o algoritmo pode "memorizar" essa ordem.

Com embaralhamento:

- Ordem aleatória a cada época
- Reduz viés sistemático
- Convergência mais robusta
- Melhor exploração

Solução: Embaralhar dados no início de cada época.

Exercício no Notebook

Implemente SGD com e sem embaralhamento e compare as trajetórias!

Análises a Fazer

1. **Comparação de Métodos:**
   - Os três métodos convergem para o mesmo resultado?
   - Qual é o mais rápido? Qual é o mais preciso?
2. **Experimentos com Taxa de Aprendizado:**
   - $\alpha = 0.00001$ (muito pequeno)
   - $\alpha = 0.001$ (adequado)
   - $\alpha = 0.1$ (muito grande)
3. **Visualização da Trajetória:**
   - Plotar o caminho no espaço de parâmetros
   - Plotar a evolução da função de custo
   - Identificar ponto de convergência
4. **SGD com Embaralhamento:**
   - Implementar versão estocástica
   - Comparar com e sem embaralhamento

Critérios de Convergência

Como saber quando parar o algoritmo?

1. **Convergência do gradiente:**

$$\|\nabla J(\boldsymbol{\beta}^{(t)})\| < \varepsilon_1 \tag{7}$$

2. **Convergência dos parâmetros:**

$$\|\boldsymbol{\beta}^{(t+1)} - \boldsymbol{\beta}^{(t)}\| < \varepsilon_2 \tag{8}$$

3. **Convergência da função de custo:**

$$|J(\boldsymbol{\beta}^{(t+1)}) - J(\boldsymbol{\beta}^{(t)})| < \varepsilon_3 \tag{9}$$

4. **Número máximo de iterações:** $t > T_{\max}$

Visualização das Trajetórias

Análise visual é fundamental para entender convergência:

Plots importantes:

- Trajetória no espaço de parâmetros
- Evolução da função de custo
- Curvas de nível + trajetória
- Comparação SGD vs. Batch GD

O que observar:

- Convergência suave vs. oscilante
- Velocidade de convergência
- Ponto final vs. solução analítica
- Efeito da taxa de aprendizado

Momentum e Algoritmos Avançados

Limitações do GD básico:

- Pode ficar oscilando em vales estreitos
- Convergência lenta em direções de pouca curvatura
- Dificuldade com mínimos locais

Definition 1: SGD com Momentum

$$\mathbf{v}^{(t+1)} = \gamma \mathbf{v}^{(t)} + \alpha \nabla J(\boldsymbol{\beta}^{(t)}) \tag{10}$$

$$\boldsymbol{\beta}^{(t+1)} = \boldsymbol{\beta}^{(t)} - \mathbf{v}^{(t+1)} \tag{11}$$

onde $\gamma \in [0, 1)$ é o coeficiente de momentum.

Algoritmos mais modernos: Adam, RMSprop, AdaGrad (veremos nas próximas aulas)

Resumo da Aula

O que aprendemos hoje

- Revisão de conceitos fundamentais de ML
- Regressão linear como base para redes neurais
- Descida de gradiente: algoritmo e implementação
- Importância da taxa de aprendizado
- SGD vs. Batch GD
- Efeito do embaralhamento em SGD
- Critérios de convergência e visualização
- Introdução ao momentum

Resumo da Aula

Próxima semana: Introdução às Redes Neurais

- Do neurônio biológico ao artificial
- Perceptron e funções de ativação
- Primeira rede neural multi-camadas
- Por que precisamos de não-linearidade?

Obrigado!

Alguma dúvida?

Agora vamos para os exercícios!