Revisão de Machine Learning e Descida de Gradiente

Eduardo Adame

Curso Introdutório de 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, R²

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

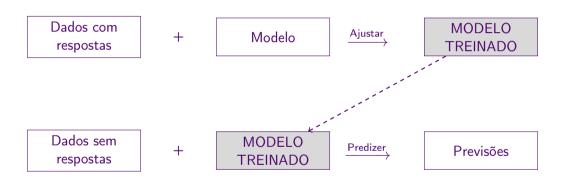


- Target (Alvo): Variável que queremos prever
 - ► Sinônimos: Resposta, Output, Variável Dependente, Labels
- Features (Características): Variáveis usadas para fazer a previsão
 - ► Sinônimos: Preditores, Input, Variáveis Independentes, Atributos
- Example (Exemplo): Um único ponto de dados
 - ► Sinônimos: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

Pipeline de Aprendizado Supervisionado



Fase de Treinamento



Fase de Predição

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

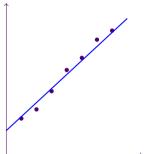
- 1. Treinar com dados de treino
- 2. Prever nos dados de teste
- Comparar previsões com valores reais
- 4. Calcular métricas de erro

Importante

NUNCA use dados de teste durante o treinamento!

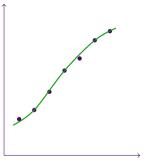
Underfitting vs. Overfitting

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)

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

• MAE (Mean Absolute Error)

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

Para Classificação:

Acurácia

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

Precisão e Recall

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

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)

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

Solução Analítica vs. Numérica

Solução Analítica:

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

Descida de Gradiente:

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

Vantagens:

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

Desvantagens:

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

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

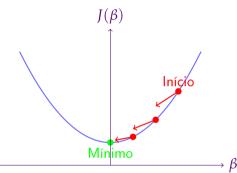
Imagine: Você está no topo de uma montanha e quer descer até o vale mais baixo.

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: $\beta^{(0)} = \text{valores iniciais}$
- 2. Para $t = 0, 1, 2, \ldots$ até convergência:
 - 2.1 Calcular predições: $\hat{\mathbf{v}} = X\boldsymbol{\beta}^{(t)}$
 - 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: $\boldsymbol{\beta}^{(t+1)} = \boldsymbol{\beta}^{(t)} \alpha \nabla \boldsymbol{J}$
- 3. Retornar: $\boldsymbol{\beta}^{(T)}$

Gradiente do MSE:

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

Batch vs. Stochastic Gradient Descent

Batch Gradient Descent:

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

$$\nabla J = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla J_i \tag{5}$$

Stochastic Gradient Descent:

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

$$\nabla J \approx \nabla J_i \tag{6}$$

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:

- $ightharpoonup \alpha = 0.00001$ (muito pequeno)
- $ightharpoonup \alpha = 0.001$ (adequado)
- ightharpoonup $\alpha=0.1$ (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:

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

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

2. Convergência dos parâmetros:

$$|I(oldsymbol{eta}^{(t+1)}) - I(oldsymbol{eta}^{(t)})| < arepsilon_3$$

$$t > T_{\text{max}}$$

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



(7)

(8)

(9)

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:

NES

- 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!