



Preditiva.ai

Diagnóstico de Modelos Supervisionados

Tuning de Hiperparâmetros

Tuning de Hiperparâmetros

Por que temos tantos hiperparâmetros para ajustar?

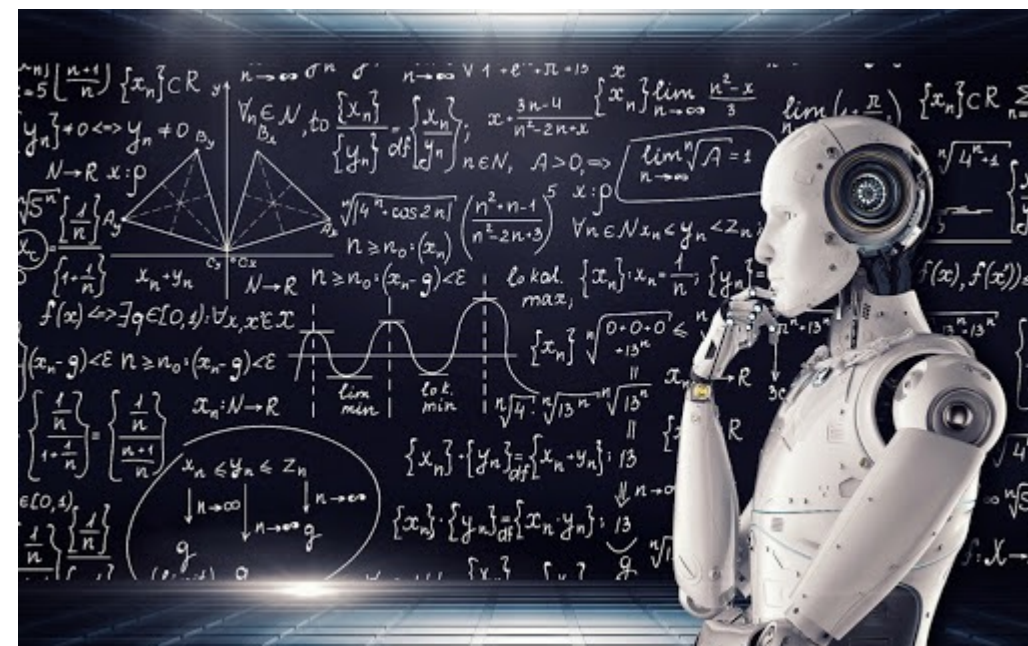


Preditiva.ai

Os modelos de **Machine Learning**, como vimos anteriormente, podem possuir diversos **hiperparâmetros** e ajustá-los corretamente pode fazer muita diferença no **desempenho**.

Mas antes, vamos entender quais as diferenças entre os parâmetros e **hiperparâmetros**:

- **Parâmetros:** também conhecidos como **coeficientes**, são os elementos otimizados durante o treinamento e são responsáveis por **capturar o conhecimento** contido nos dados.
- **Hiperparâmetros:** são responsáveis pela **definição da estrutura do modelo**. Cada técnica possuirá diferentes **hiperparâmetros** que permitem uma **adequação da estrutura** do modelo para **melhor adequação** aos dados.



Fonte: <http://www.radixeng.com.br/noticias/599/machine-learning-uma-tendencia-que-nao-pode-ser-ignorada>

Tuning de Hiperparâmetros

Por que temos tantos hiperparâmetros para ajustar?



Abaixo, temos alguns dos muitos **hiperparâmetros** de cada uma das técnicas mais populares:

Redes Neurais Artificiais

- Nº camadas
- Nº neurônios por camada
- Função de ativação
- Taxa de dropout
- L1 e L2
- Otimizador
- Learning rate

Árvores de Decisão

- Max depth
- Critério para split
- Min samples split
- Max features split

Naive Bayes

- Priori

Support Vector Machine

- Kernel
- Degree
- C

Gradient Boosting Machine

- Nº estimadores
- Max depth
- Learning rate
- Critério para split
- Min samples split
- Max features split

XGBoost

- Learning rate
- Gamma
- Max depth
- Min child weight
- Max delta step
- L1 e L2

Tuning de Hiperparâmetros

Por que temos tantos hiperparâmetros para ajustar?



Vamos analisar o número de diferentes combinações dos **hiperparâmetros** em uma Rede Neural Artificial:

Hiperparâmetro	Valores permitidos	Nº alternativas
Nº camadas	Inteiro: 1 a 5	5
Nº neurônios por camada	Inteiro: 1 a 16	16
Função de ativação	Categórico: 1 - Relu; 2 - Sigmoid; 3 - Tanh; 4 - Softmax	4
Taxa de dropout	Real: 0% a 80%	9
L1	Real: 0,0 a 0,1	20
L2	Real: 0,0 a 0,1	20
Otimizador	Categórico: 1 - Adam; 2 - Adadelata; 3 - Adagrad; 4 - SGD; 5 - RMSprop	5
Learning rate	Real: 0,0001 a 0,0100	100

Mesmo considerando apenas os **hiperparâmetros mais importantes**, o número de **combinações chega a 576 mil**. Se o tempo necessário para treinar cada modelo for de **1 segundo**, serão necessários mais de **18 anos** para testar todas as possibilidades!

Tuning de Hiperparâmetros

Principais estratégias



Desde então tem-se buscado diferentes estratégias para **explorar** esse **grande número de combinações** da forma mais **eficiente** possível, ou seja, avaliando **poucas combinações** e conseguindo **grande desempenho**.

Método	Característica principal	Pontos Fortes	Pontos Fracos
Random Search	Exploração aleatória do espaço hiperparamétrico	Fácil compreensão do método	Não considera regiões que possam produzir melhores resultados
Grid Search	Exploração extensiva do espaço hiperparamétrico	Testa todas as combinações no espaço definido	Pode gerar uma grande quantidade de modelos para avaliação
Otimização Bayesiana	Exploração guiada do espaço hiperparamétrico	Utiliza resultado das escolhas anteriores para selecionar hiperparâmetros	Capacidade limitada de explorar todo o espaço hiperparamétrico
Algoritmos Genéticos	Inspirado na Teoria de Evolução das Espécies de Charles Darwin	Considera regiões com melhor resultado para maior exploração	Pode requerer uma grande quantidade de modelos para avaliação

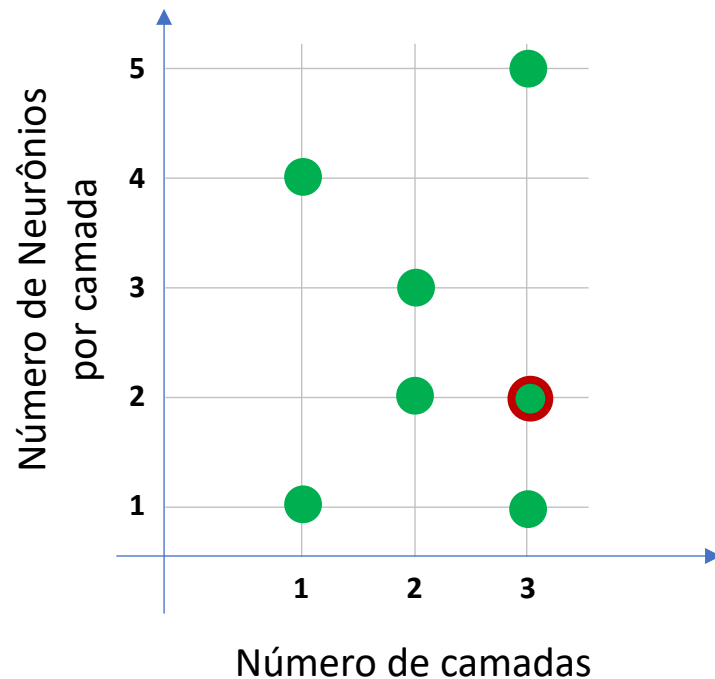
Tuning de Hiperparâmetros

Principais estratégias: Random Search



Random Search

Neste método, o **espaço hiperparamétrico** é explorado forma **aleatória**. Ou seja, são treinados diversos modelos com diferentes hiperparâmetros selecionados aleatoriamente e no final compara-se o desempenho de todos eles.



Nº de camadas	Nº neurônios por camada	RMSE Test
1	1	1,24
1	4	1,32
2	2	1,12
2	3	2,10
3	1	0,95
3	2	0,82
3	5	0,91

Demonstração

Random Search

Arquivo: [6_Tuning_Hiperparametros.ipynb](#)

Tuning de Hiperparâmetros

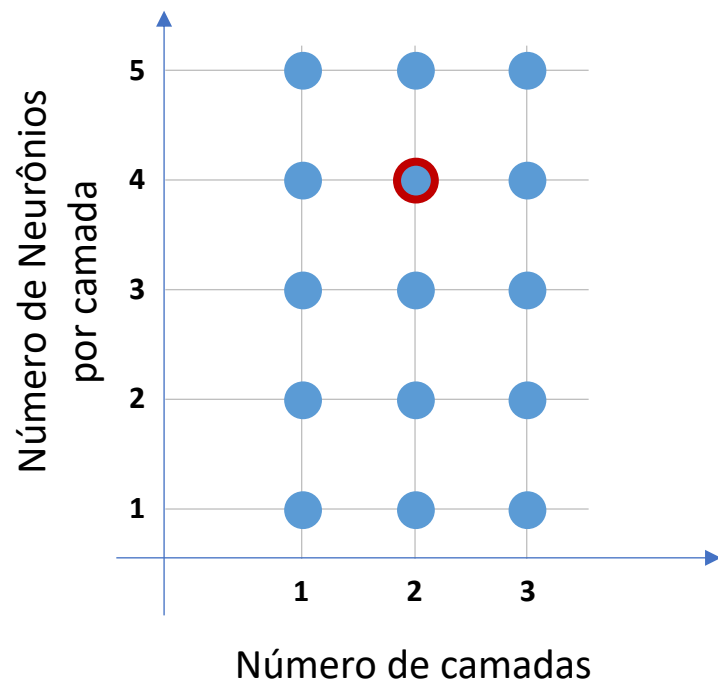
Principais estratégias: Grid Search



Preditiva.ai

Grid Search

Este é um dos métodos ainda muito utilizados, e consiste em **explorar** extensivamente **todas as combinações** de hiperparâmetros no **espaço definido**. Dependendo do número do espaço definido, o número de modelos a serem explorados pode ser bastante grande.



Nº de camadas	Nº neurônios por camada	RMSE Test
1	1	2,18
1	2	2,15
1	3	2,43
...
2	4	0,79
...
3	5	1,56



Demonstração

Grid Search

Arquivo: [6_Tuning_Hiperparametros.ipynb](#)

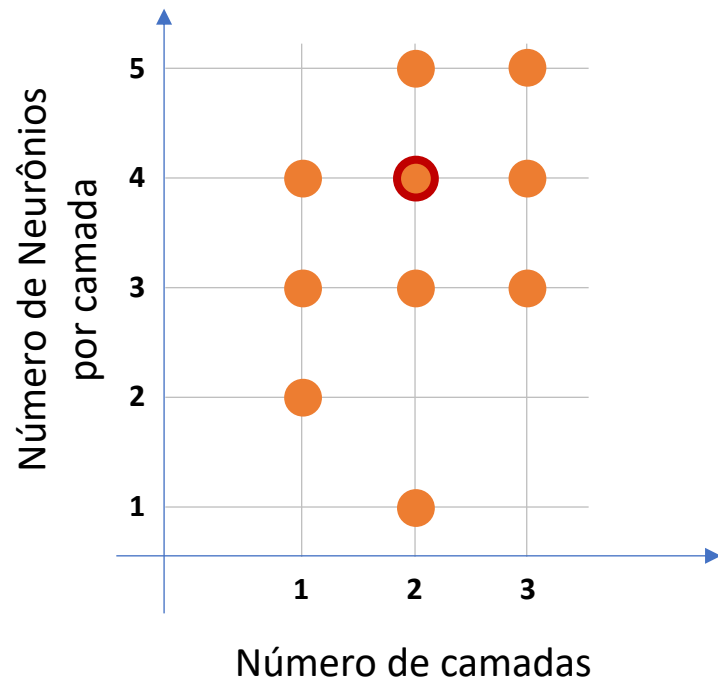
Tuning de Hiperparâmetros

Principais estratégias: Bayesian Optimization



Bayesian Optimization

Este método tem como principal vantagem a **escolha dos próximos hiperparâmetros** a serem testados a partir dos **resultados obtidos anteriormente**.



Nº de camadas	Nº neurônios por camada	RMSE Test
1	3	2,18
2	3	2,15
1	4	2,43
...
2	4	0,79
...
3	5	1,56

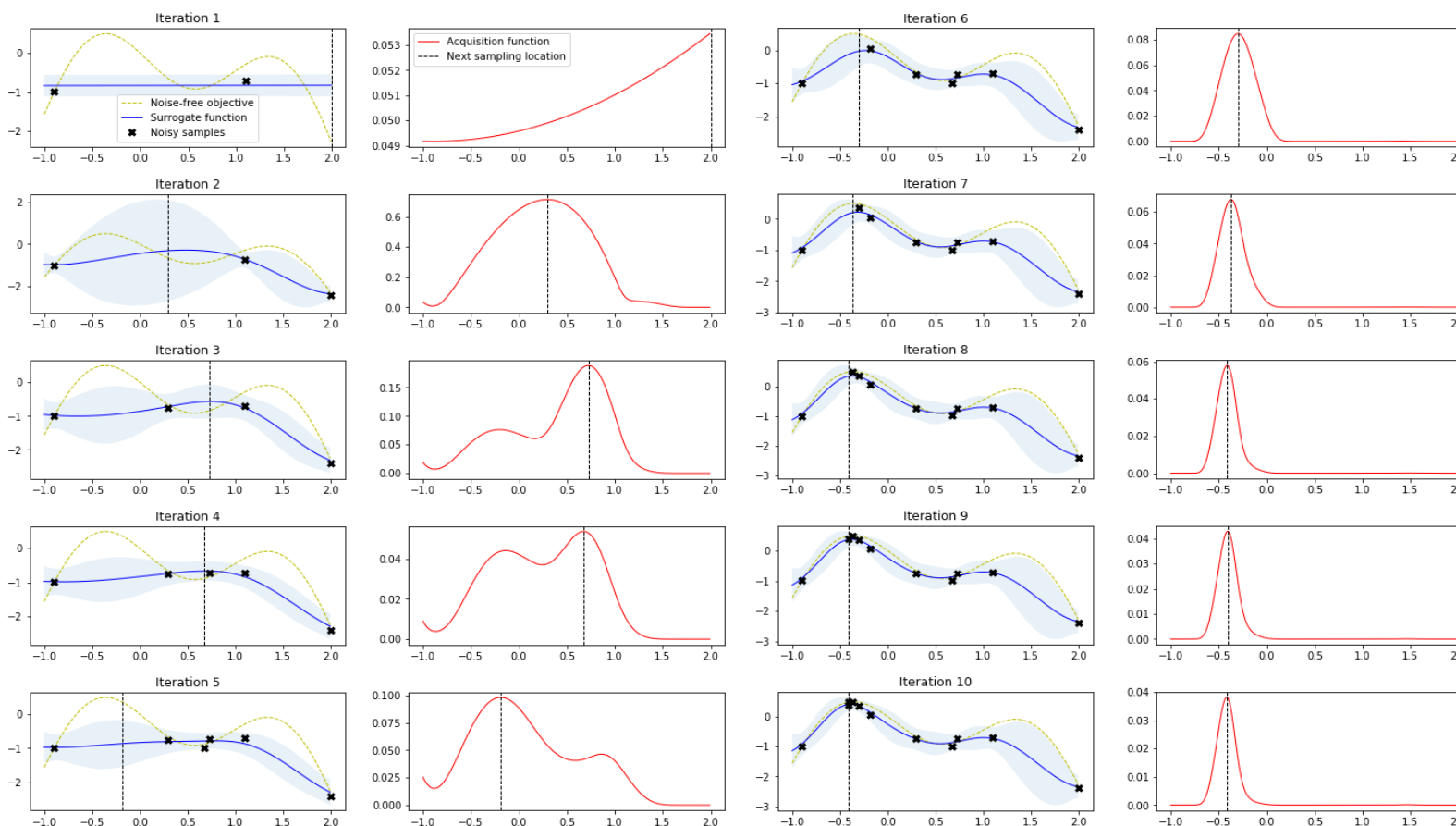
Tuning de Hiperparâmetros

Principais estratégias: Bayesian Optimization



Bayesian Optimization

Este método tem como principal vantagem a **escolha dos próximos hiperparâmetros** a serem testados a partir dos **resultados obtidos anteriormente**.



Fonte: <https://krasserm.github.io/2018/03/21/bayesian-optimization/>



Demonstração

Bayesian Optimization

Arquivo: [6_Tuning_Hiperparametros.ipynb](#)

Tuning de Hiperparâmetros

Principais estratégias



Hands on

Utilize as técnicas de tuning de hiperparâmetros aprendidas nesta aula para melhorar o desempenho do modelo usando a mesma base de Preços de Casas porém com um modelo mais simples, como o **Random Forest**.

Roteiro:

1. Identifique e selecione alguns dos **hiperparâmetros** para realização do **tuning**. Sugestão: `max_depth`, `min_samples_split` e `n_estimators`.
2. Utilize o `random_state = 42`.
3. Defina o **espaço paramétrico** para cada um dos hiperparâmetros.
4. Utilize algum dos **métodos de tuning** de hiperparâmetros para obter um modelo com **melhor desempenho** no conjunto de teste.

Revisão: Tuning de Hiperparâmetros

Neste módulo vimos que os modelos de **Machine Learning** tem **muitos hiperparâmetros** para serem otimizados e o **ajuste adequado** pode trazer um grande **ganho de desempenho**.

Aprendemos as técnicas mais populares utilizadas no tuning dos hiperparâmetros: **Random Search**, **Grid Search** e **Bayesian Optimization**, cada um deles com vantagens e desvantagens, e diferentes estratégias para **explorar de forma eficiente** o espaço hiperparamétrico.





Preditiva.ai