INF721

2023/2

Aprendizado em Redes Neurais Profundas

A4: Gradiente Descendente

Logística

Avisos

- Aula A3 Regressão Logística publicada no site [slides, vídeo]
- Na próxima aula teremos o nosso primeiro Teste!
 - ▶ T1: Regressão Logística e Aprendizado de Máquina

Última aula

- Funções de perda;
- Regressão Logística.



Plano de Aula

- ▶ Cálculo para Otimização de RNAs
 - Derivadas
 - Derivadas parciais e vetor gradiente
 - Regra da cadeia
- ▶ Gradiente descendente
 - ▶ Regra de atualização de pesos
 - ▶ Taxa de atualização
 - ▶ Aplicação em regressão logística



Resumo de Regressão Logística

Entrada

Um exemplo $x \in \mathbb{R}^d$

Saída

A probabilidade de x ser da classe y=1

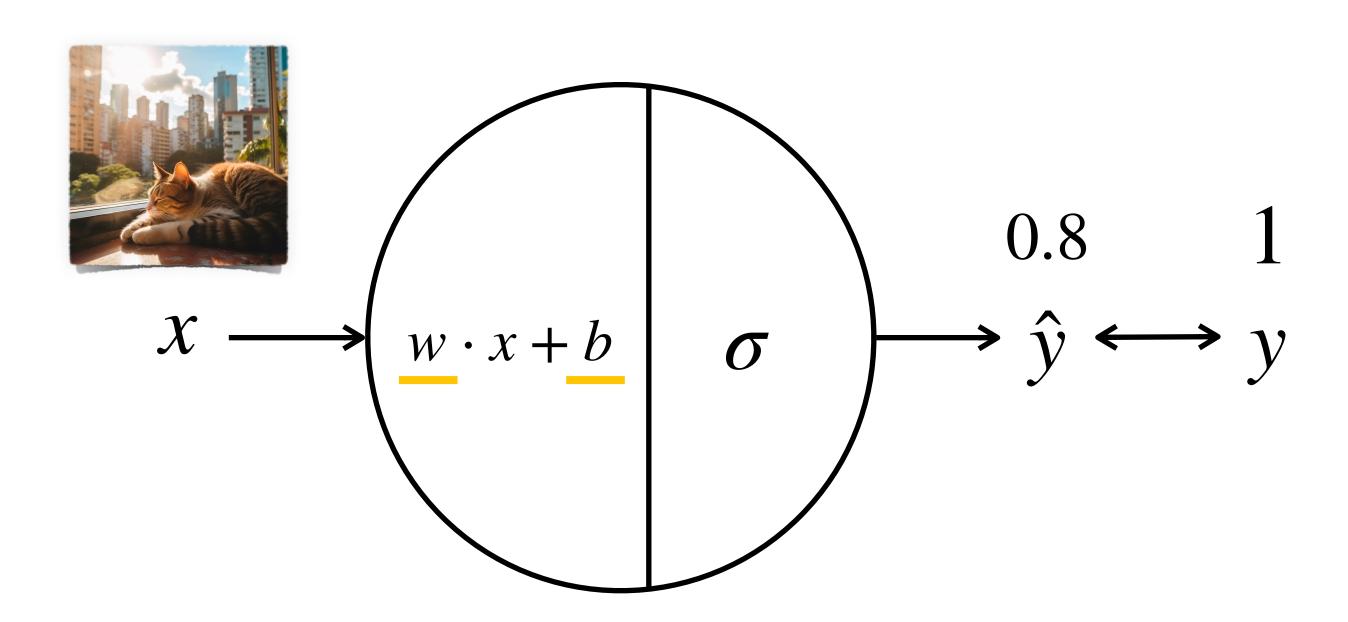
$$\hat{y} = P(y = 1 | x), 0 \le \hat{y} \le 1$$

Hipótese

$$\hat{y} = h(x) = \sigma(w \cdot x + b)$$

Função de Perda

$$L(h) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i \log \hat{y}_i + (1 - y_i) \log (1 - \hat{y}_i))$$

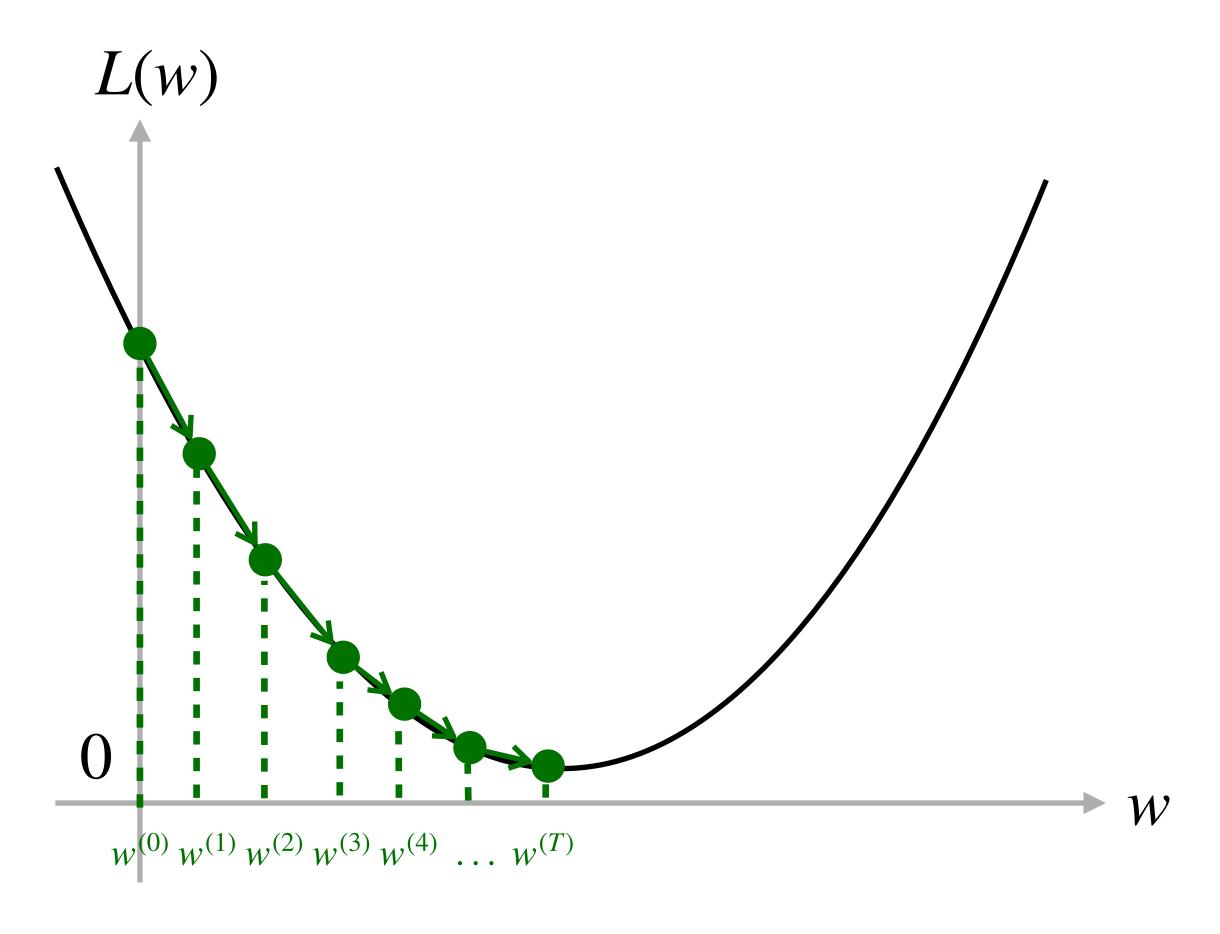


Treinamento

Encontrar valores de w e b que minimizam L !



Gradiente Descendente

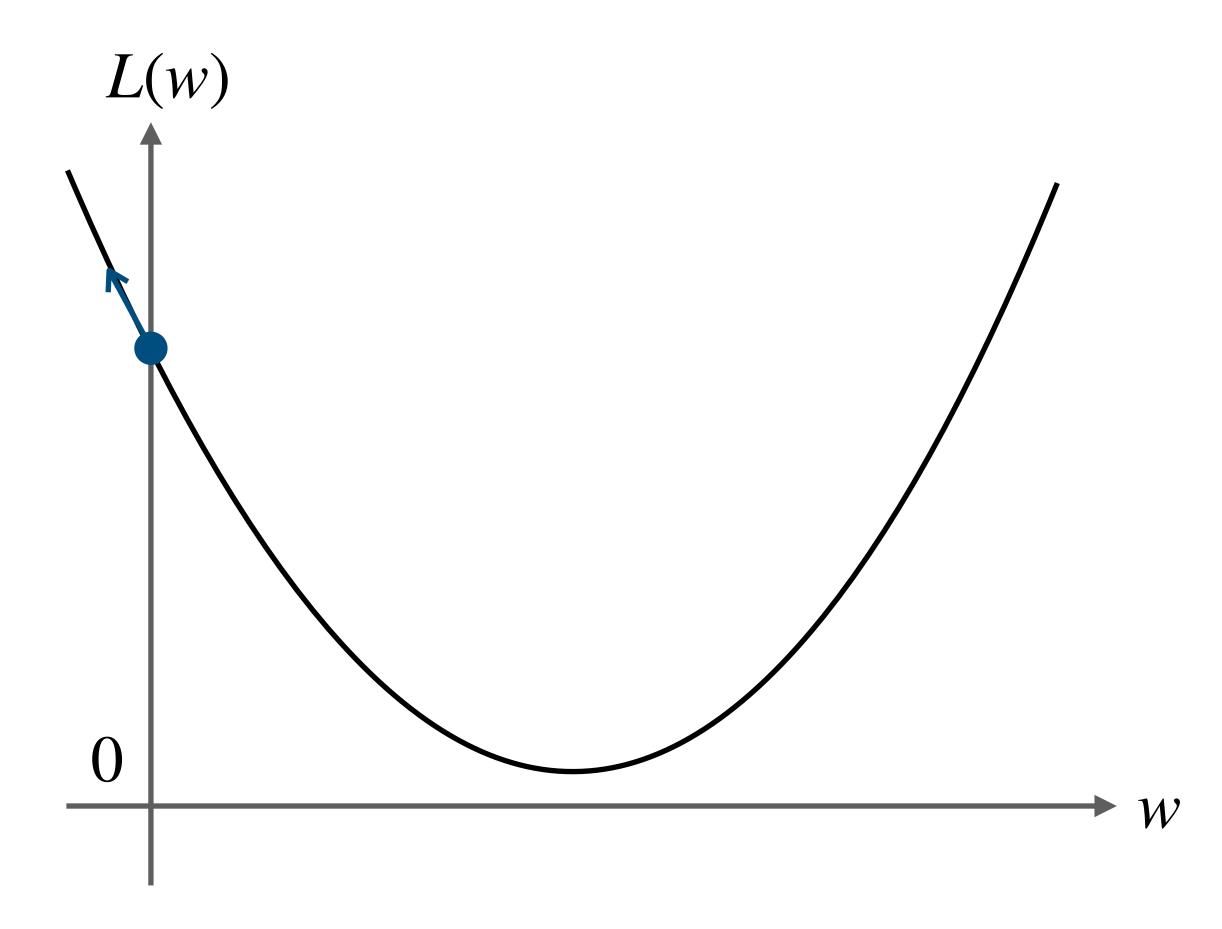


Dado um valor inicial w, atualizamos iterativamente o valor de w na direção de descida mais íngrime de L a partir do ponto (w, L(w)).

Como calcular a direção do movimento? Vetor gradiente $\nabla L(w)!$



Vetor Gradiente



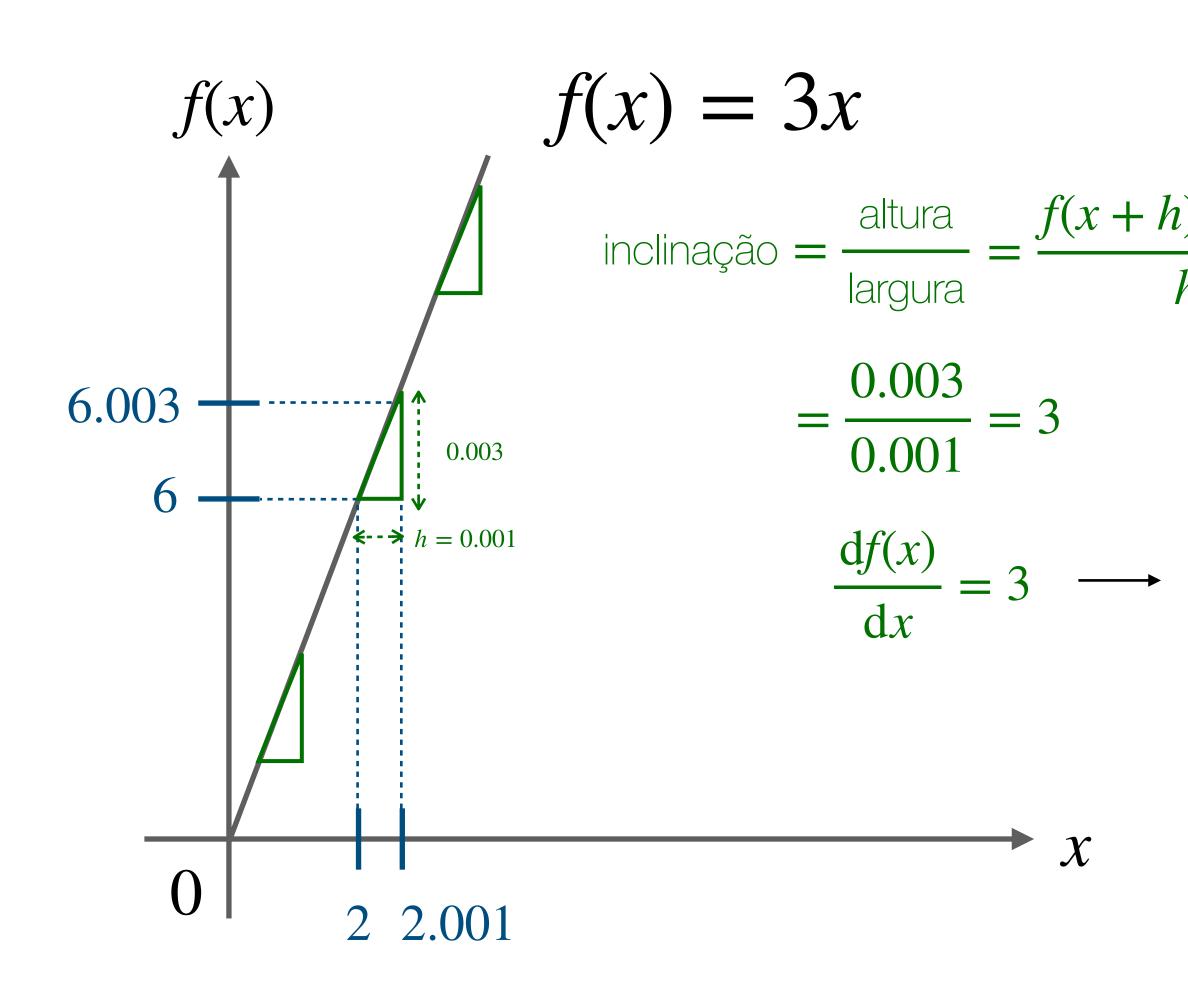
O **gradiente** de uma função multivariável $L(w_1, w_2, \ldots, w_d)$ é um vetor contendo suas derivadas parciais:

O vetor $\nabla L(w)$ nos diz a direção de subida mais íngrime de L a partir do ponto (w, L(w)).



Derivadas

A derivada de uma função f(x) no ponto x=a representa a **inclinação** da reta tangente a essa função no ponto (a,f(a))



$$h = 3x$$
 $h = 0.001$ $x = 2$ $f(x) = 6$ inclinação $= \frac{\text{altura}}{\text{largura}} = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$ $x + h = 2.001$ $f(x+h) = 6.003$

$$x = 5$$
 $f(x) = 15$
 $x + h = 5.001$ $f(x + h) = 15.003$

 $\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} = 3 \qquad \text{A derivada de } f(x) \text{ no ponto } x = 2 \pm 3$ Quando aplicamos uma variação minúscula $h \in X$, o quanto ela afeta o valor de f(x)

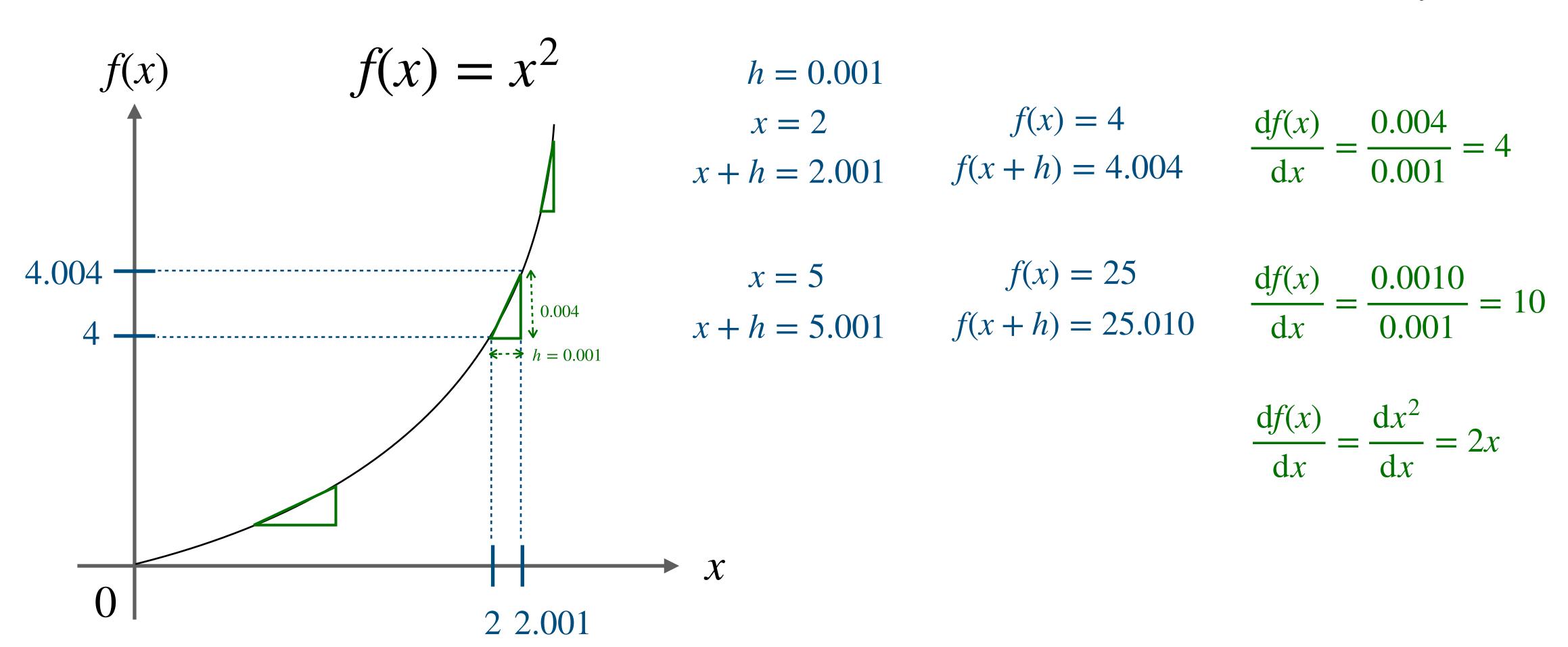
Em cálculo, essa variação h é infinitamente pequena:

$$\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$



Derivadas

A derivada de uma função f(x) no ponto x=a representa a **inclinação** da reta tangente a essa função no ponto (a, f(a))





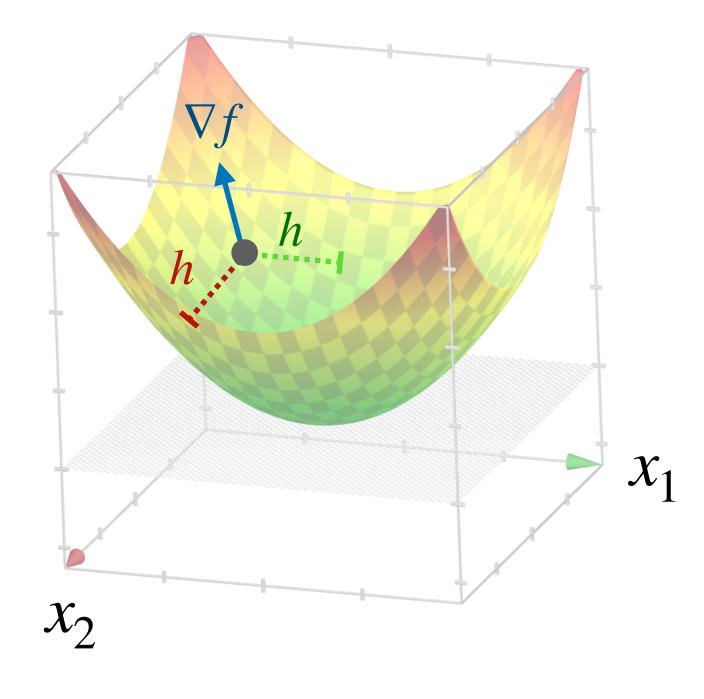
Derivadas em Python

```
def f(x):
  return x**2
def derivative(x):
  """Compute the exact derivative of `f` at the location `x`."""
  return 2*x
def approx_derivative(f, x, h=0.001):
  """Compute the approximate derivative of `f` at the location `x`."""
  return (f(x+h) - f(x))/h
x = 3
da_exact = derivative(x)
da_approx = approx_derivative(f,x)
print(da_exact, da_approx)
```



Derivadas Parciais

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$$



A **derivada parcial** de uma função multivariável $f(x_1, x_2, \ldots, x_d)$, representa a taxa de variação de $f(x_1, x_2, \ldots, x_d)$ quando aplicamos uma minúscula variação h em apenas uma das variáveis x_i .

$$(x_1, x_2) = (2, 5)$$

$$\frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_1} = \frac{\partial x_1^2}{\partial x_1} + \frac{\partial x_2^2}{\partial x_1} = 2x_1 + 0 = 2x_1 = 2 \times 2 = 4$$

$$\frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_2} = \frac{\partial x_1^2}{\partial x_2} + \frac{\partial x_2^2}{\partial x_2} = 0 + 2x_2 = 2x_2 = 2 \times 5 = 10$$

O vetor gradiente é definido pelas derivas parciais de $\nabla f(x_1, x_2)$

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 10 \end{bmatrix}$$



Regra da Cadeia

$$f(x) = (x^2 + 1)^3$$

Função interna:

$$g(x) = x^2 + 1 \qquad \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x} = 2x$$

Função externa:

$$f(g(x)) = g(x)^3 \qquad \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}g} = 3(g(x))^2$$

Para calcular a derivada de uma função composta f(g(x)), temos que usar a **regra da cadeia:**

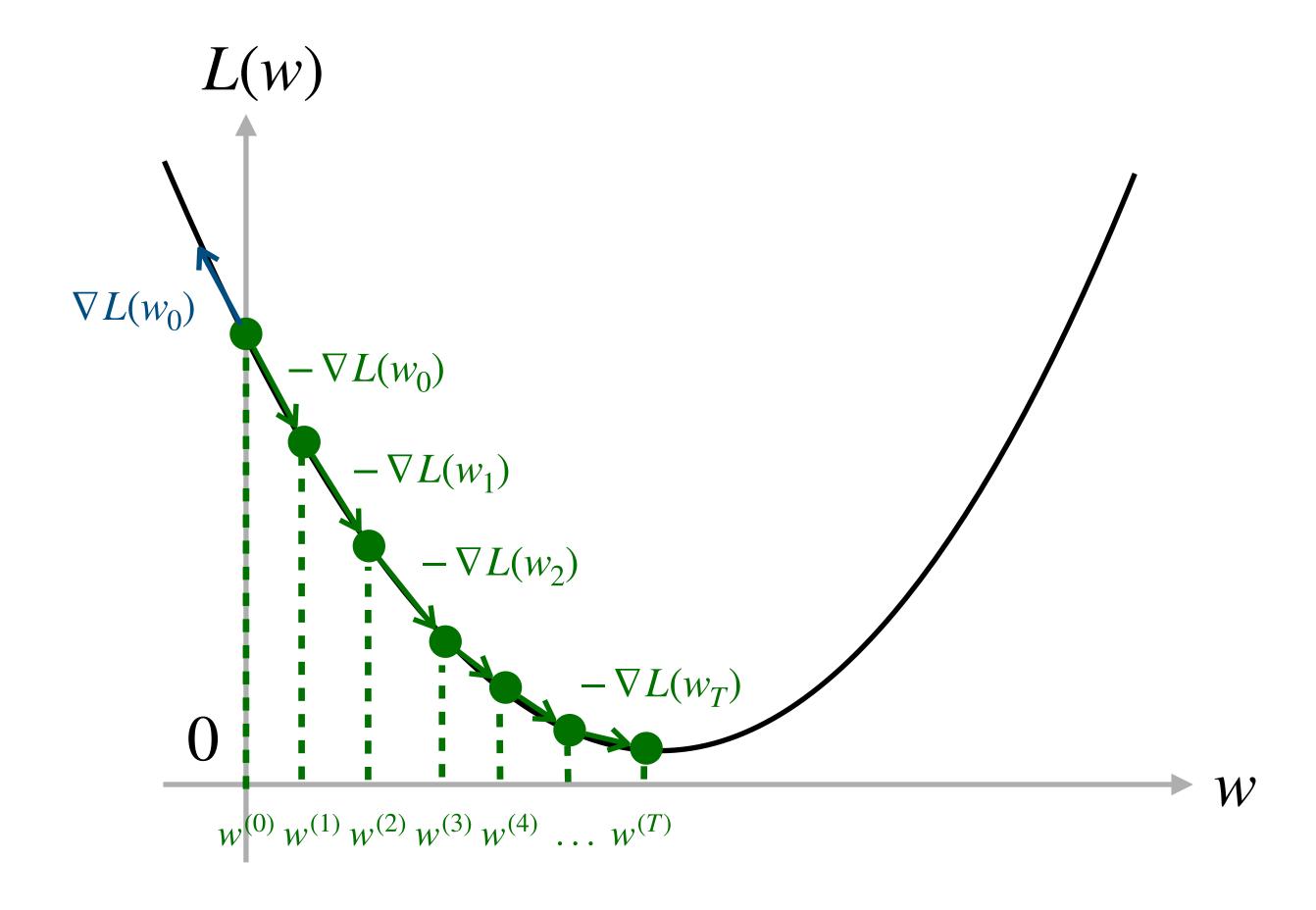
$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}g} \cdot \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}$$

A derivada da função compostaf(g(x)) é o produto da derivada da função externafem relação a g pela derivada da função interna g em relação a g.

$$\frac{df}{dx} = \frac{df}{dg} \cdot \frac{dg}{dx} = 3(x^2 + 1)^2 \cdot (2x) = 6x(x^2 + 1)^2$$



Gradiente Descendente

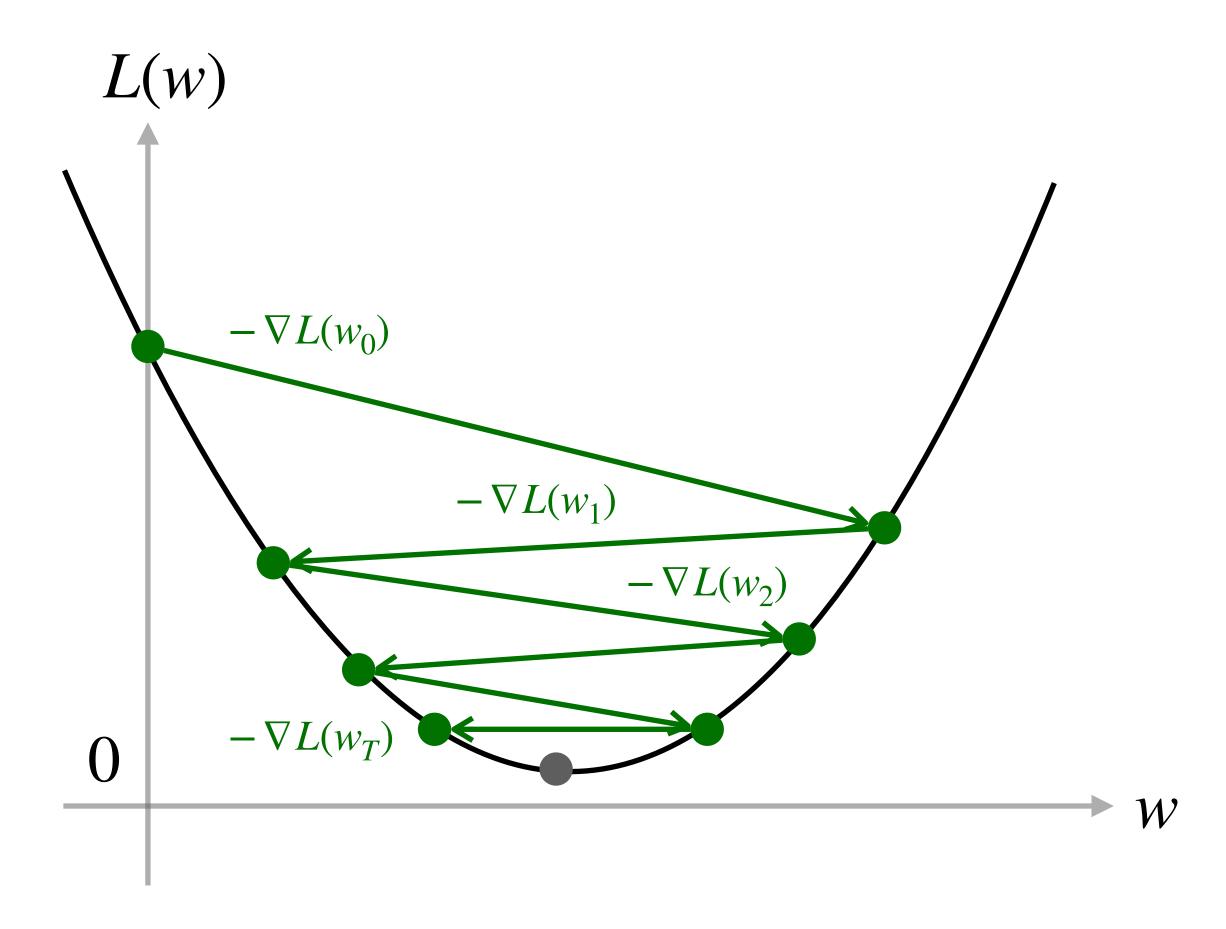


Dado um valor inicial w, atualizamos iterativamente o valor de w na direção de descida mais íngrime de L a partir do ponto (w, L(w)).

$$w_t \leftarrow w_{t-1} - \nabla L(w_{t-1})$$



Taxa de Aprendizado



$$w_t \leftarrow w_{t-1} - \nabla L(w_{t-1})$$

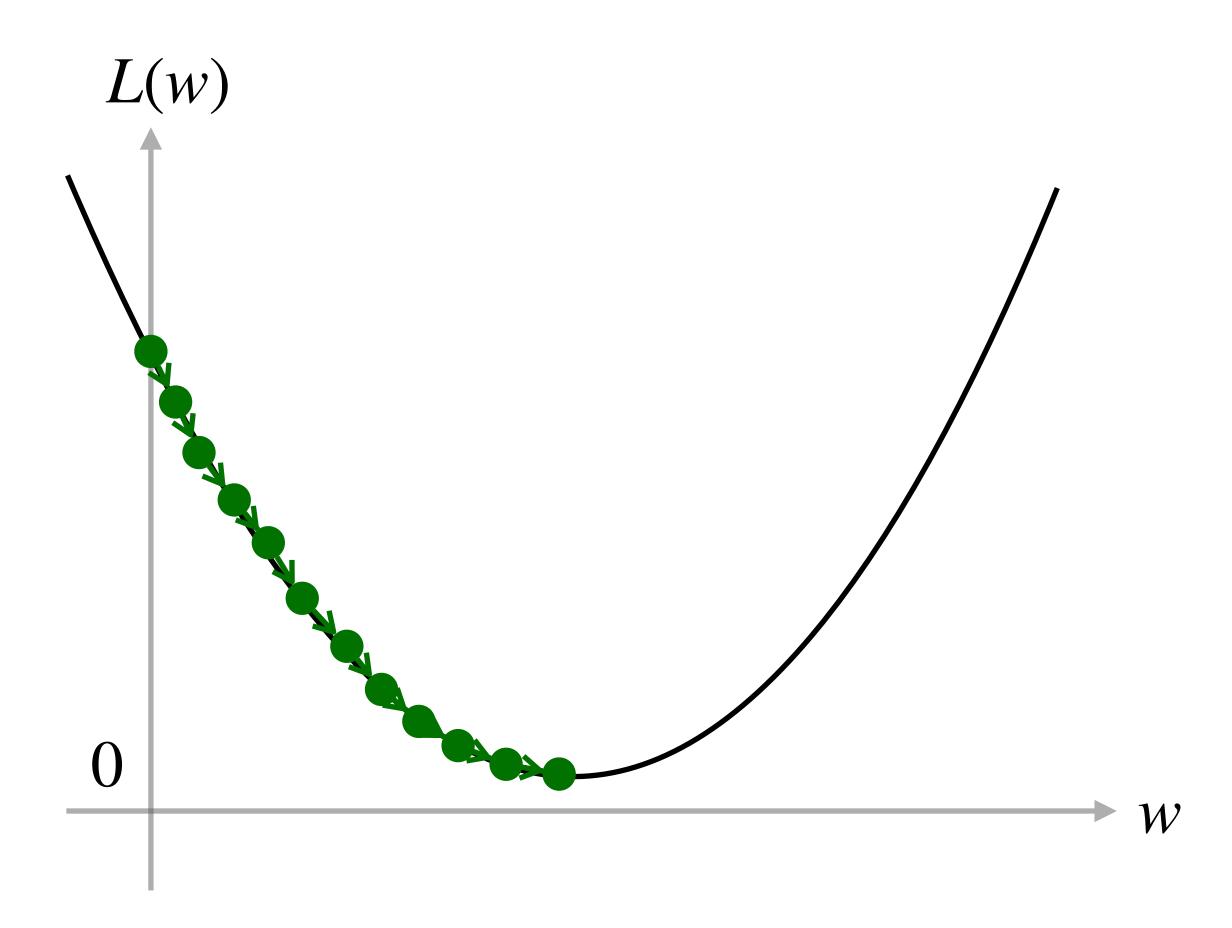
Essa regra de atualização de w não tem controle sobre o comprimento do vetor gradiente $\nabla L(w_{t-1})$:

Gradiente muito grande

Convergência rápida, porém subótima!



Taxa de Aprendizado



$$w_t \leftarrow w_{t-1} - \nabla L(w_{t-1})$$

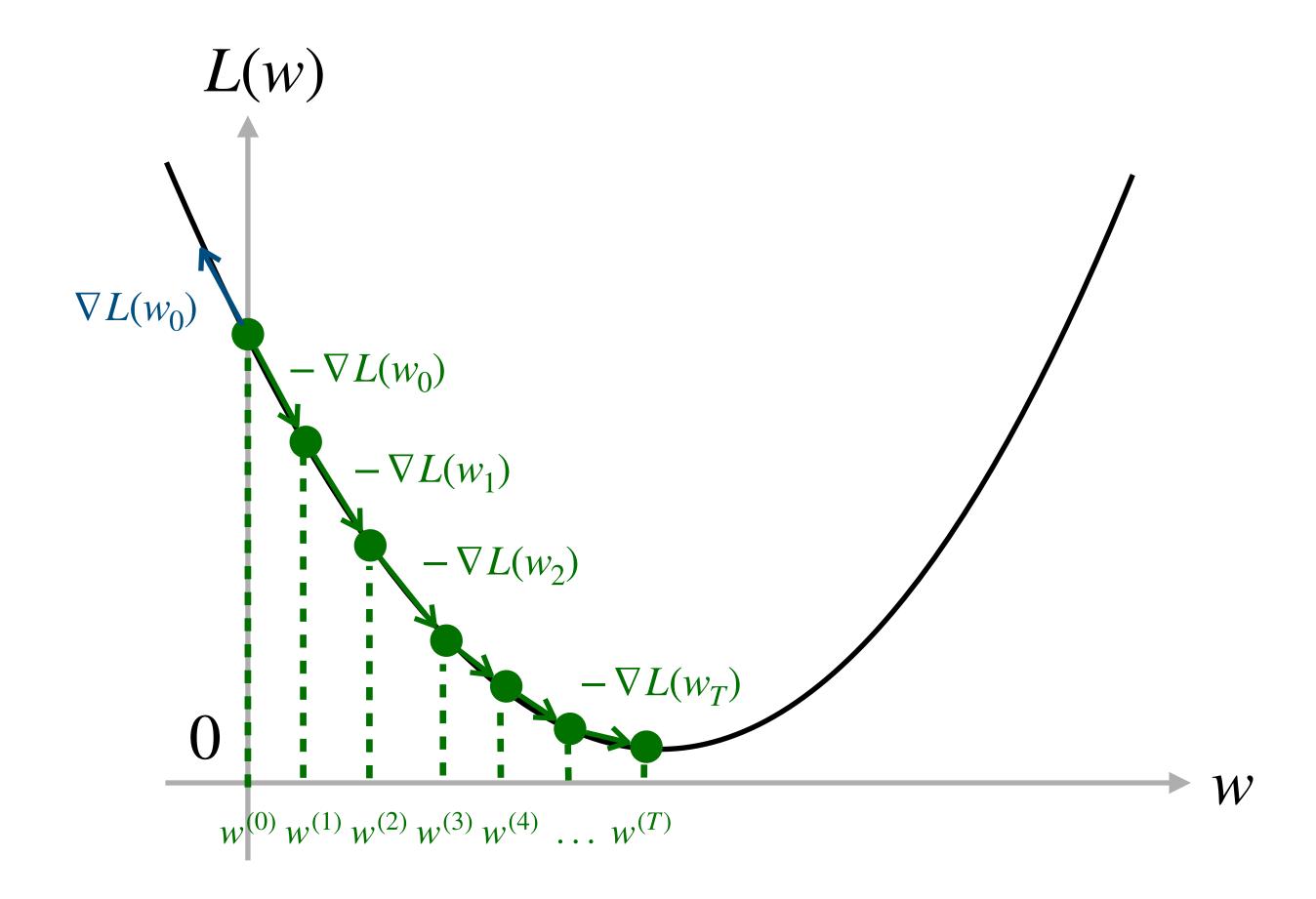
Essa regra de atualização de w não tem controle sobre o comprimento do vetor gradiente $\nabla L(w_{t-1})$:

Gradiente muito pequeno

Convergência lenta e pode ficar presa em mínimos locais!



Gradiente Descendente



Dado um valor inicial w, atualizamos iterativamente o valor de w na direção de descida mais íngrime de L a partir do ponto (w, L(w)).

$$w_t \leftarrow w_{t-1} - \alpha \nabla L(w_{t-1})$$

onde α é um híper-parâmetro chamado de **taxa de aprendizado** (*learning rate*), responsável por controlar o comprimento do vetor gradiente.



Gradiente Descendente em Regressão Logística

```
def gradient_descent(X, Y, T, lr):
 # Init weights to zero
 w, b = 0, 0
 # Optimize weihts iteratively
  for t in range(T):
   # Predict X labels with w and b
   Y_hat = logistic_regression(X, w, b)
   # Compute gradients
   dw, db = gradients(X, Y, Y_hat)
   # Update weights
   w = w - lr * dw
   b = b - lr * db
  return w, b
```

Regressão Logística

$$z = w \cdot x + b$$

$$\hat{y} = h(x) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

Função de Perda

$$L(h) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i \log \hat{y}_i + (1 - y_i) \log (1 - \hat{y}_i))$$

Gradientes

$$\frac{\partial L}{\partial w} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - y_i) x_i$$
$$\frac{\partial L}{\partial b} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - y_i)$$



Próxima aula

A5: Regressão Logística em Numpy

Aula prática sobre implementação de regressão logística com Numpy.

