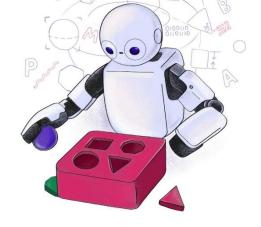
T319 - Introdução ao Aprendizado de Máquina: *Regressão Linear (Parte III)*



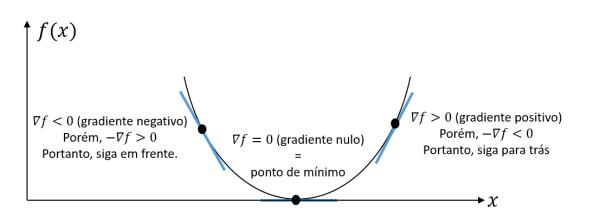


Felipe Augusto Pereira de Figueiredo felipe.figueiredo@inatel.br

Recapitulando

- No tópico anterior, discutimos o vetor gradiente.
- Aprendemos dois algoritmos que usam o vetor gradiente para a resolução de problemas de otimização.
 - Gradiente ascendente para problemas de maximização.
 - *Gradiente descendente* para problemas de *minimização*.
- Falamos sobre as três versões do gradiente descendente e as comparamos:
 - Batelada
 - Estocástico
 - Mini-batch
- Neste tópico, discutiremos o quão importante é o ajuste do passo de aprendizagem, α .

Escolha do passo de aprendizagem



- Conforme nós vimos, no gradiente descendente, o negativo do vetor gradiente, $-\nabla f(x)$, dá a direção de decrescimento mais rápido de uma função a partir de um ponto e sua magnitude indica a taxa de variação da função nessa direção.
- Porém, ele não nos informa a *distância* até o ponto de máximo.

Escolha do passo de aprendizagem

$$a \leftarrow a - \alpha \frac{\partial J_e(a)}{\partial a}$$

- Portanto, para andarmos na direção apontada pelo gradiente, usamos uma porcentagem de seu valor.
- Essa porcentagem é dada pelo *passo de* aprendizagem, α .
- O passo de aprendizagem controla o quão "grande" ou "pequena" é a atualização aplicada aos pesos do modelo em cada iteração do processo de treinamento.
- Ou seja, ele determina o tamanho do passo dado na direção oposta à indicada pelo vetor gradiente.

Portanto, como veremos, a escolha do passo de aprendizagem é muito importante para o aprendizado de um modelo de ML.

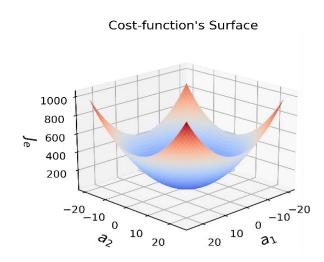
Escolha do passo de aprendizagem

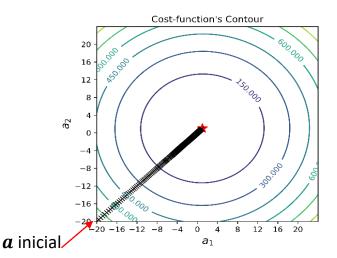
- O passo de aprendizagem é um hiperparâmetro que influencia diretamente o desempenho e a convergência do algoritmo do gradiente descendente.
 - Hiperparâmetros: são parâmetros que não são aprendidos durante o treinamento do modelo, mas que influenciam seu aprendizado.
- Valores muito pequenos podem resultar em treinamento lento, enquanto valores muito grandes podem causar divergência.
- Em geral, a escolha do passo é feita empiricamente por meio de experimentação.
- Uma regra empírica para exploração do passo de aprendizagem é usar a seguinte sequência (ajuste manual):

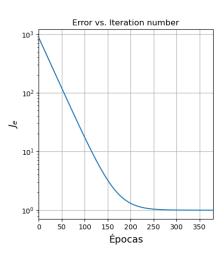
..., 0.001, 0.003, 0.01, 0.03, 0.1, 0.3, 1.0, ...

Passo de aprendizado pequeno

- Caso o passo de aprendizagem seja muito pequeno, a convergência do algoritmo será muito lenta.
- No exemplo abaixo, com $\alpha=10^{-6}$, o algoritmo atinge o ponto de mínimo, i.e., converge, após mais de 250 épocas.
 - Passos muito curtos, fazem com que o algoritmo caminhe vagarosamente em direção ao *mínimo global* da *função de erro*.

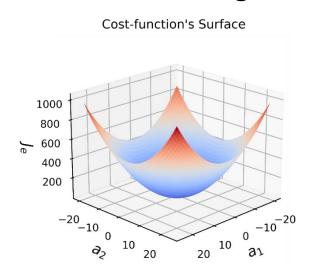


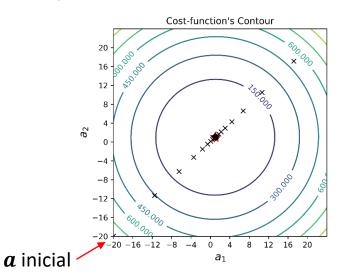


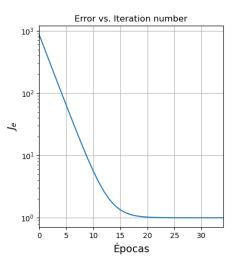


Passo de aprendizado grande

- Caso o passo seja grande, o algoritmo pode nunca convergir.
- Se o passo for grande, *mas não tão grande assim*, o algoritmo pode ficar "*pulando*" ou "*oscilando*" *de um lado para o outro da superfície de erro* até que, por sorte, ele converge.
 - No exemplo abaixo, com $\alpha=1.3\times10^{-3}$, o algoritmo oscila inicialmente, mas acaba convergindo após 20 épocas.

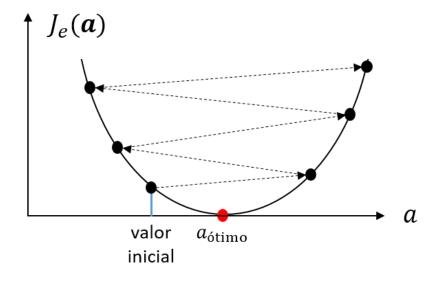






Passo de aprendizado grande

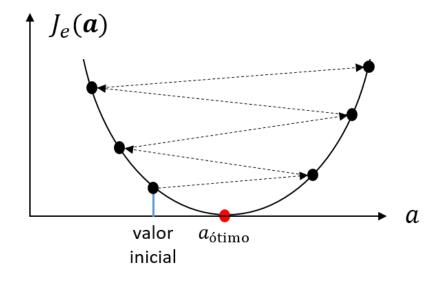
feedback positivo → estouro da precisão numérica



- Em outros casos, quando o passo é
 muito grande, a cada época, o algoritmo
 "pula" para um valor mais alto do que o
 anterior, e assim, acaba divergindo.
- Ou seja, ao invés de se aproximar do ponto de mínimo a cada época, ele se distancia dele.

Passo de aprendizado grande

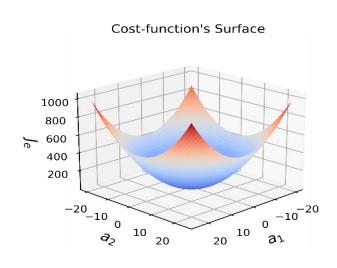
feedback positivo → estouro da precisão numérica

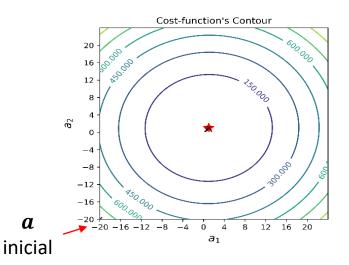


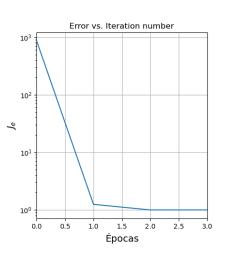
- Nesse caso ocorre um ciclo de feedback positivo onde a cada época os valores dos gradientes e, consequentemente, dos pesos se tornam maiores e maiores até que ocorra o estouro da representação numérica.
 - Problema que o ocorre quando uma variável não pode representar um valor, pois ele é maior do que o intervalo que ela pode armazenar.

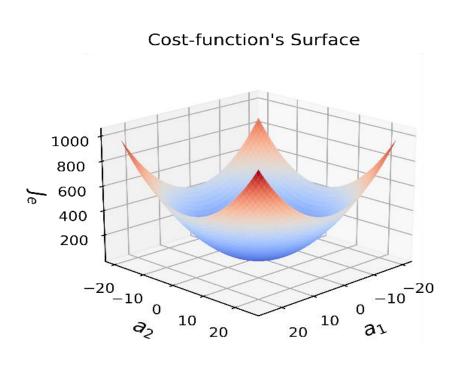
Passo de aprendizado ideal

- Portanto, o valor do passo de aprendizagem deve ser explorado para se encontrar um valor ideal que acelere a convergência de forma estável, ou seja, sem oscilações.
- O exemplo abaixo, com $\alpha=10^{-4}$, o algoritmo converge de forma estável para o *mínimo global* em apenas 3 épocas.

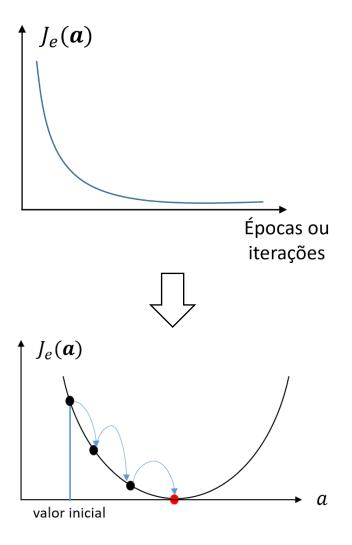




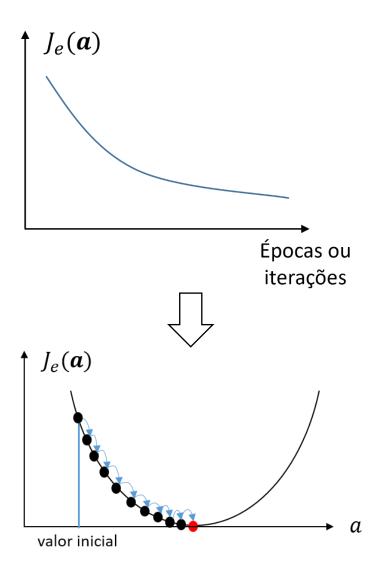




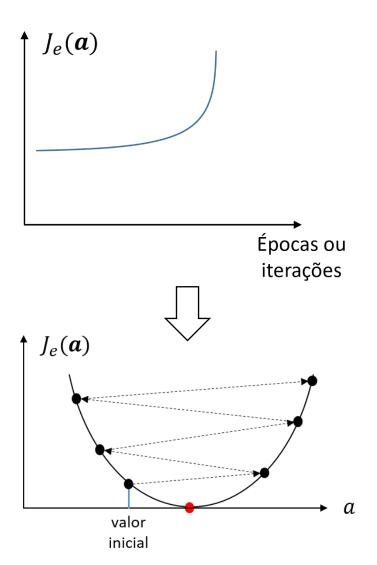
- Nem sempre iremos conseguir plotar a superfície de erro e de contorno para analisarmos o treinamento e o desempenho de um modelo.
- Por exemplo, quando tivermos três atributos, a superfície de erro terá quatro dimensões, tornando sua análise mais difícil.
- Assim, em geral, usamos a curva do erro (i.e., EQM) em função das épocas (ou iterações) de treinamento para analisar o treinamento de um modelo.



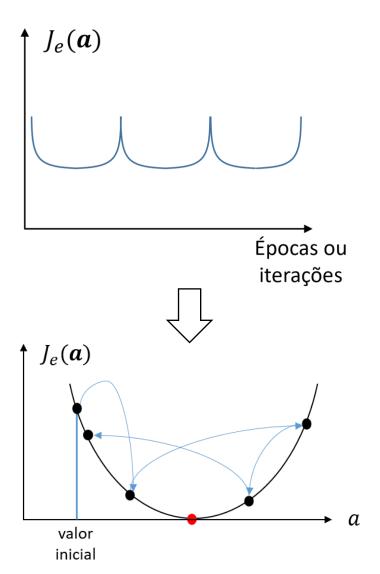
- A figura mostra o *comportamento esperado* quando o *passo tem o tamanho ideal*.
- A convergência nesse caso é rápida.
 - O erro diminui rapidamente nas primeiras épocas (ou iterações).
 - Conforme o treinamento continua, o erro se estabiliza e exibe uma redução suave (i.e., mais lenta).
 - A convergência é atingida quando o erro se torna praticamente constante ao longo das épocas, indicando que os pesos não são mais atualizados, pois o mínimo da função foi atingido.
 - O treinamento pode ser encerrado quando o erro entre duas épocas consecutivas for menor do que um limiar pré-definido (e.g., 1e-5).



- A figura mostra o caso onde o *passo de aprendizagem é muito pequeno*.
- Nesse caso, a *convergência é muito lenta*.
- Após várias épocas de treinamento, o erro ainda não se estabilizou.
- Levaria *muito tempo* para que o modelo atingisse o *ponto de mínimo*.



- A figura mostra o caso onde o *passo de aprendizagem é muito grande*.
- Nesse caso, ocorre divergência.
- Ou seja, o erro aumenta mais e mais ao longo do treinamento, indicando que o algoritmo está se distanciando do ponto de mínimo.
- Se o treinamento continuar, os gradientes e pesos podem se tornar tão grandes que ocorre o estouro da representação numérica.



- A figura mostra o caso onde o passo de aprendizagem é grande, mas não tão grande assim.
- Nesse caso, o *erro oscila* entre valores grandes e pequenos.
- Por ventura, a convergência pode ocorrer após algumas épocas.

Melhorando a convergência das versões estocásticas

- As versões estocásticas do gradiente descendente, i.e., SGD e mini-batch (principalmente quando MB é pequeno), têm um caminho irregular para o ponto de mínimo.
- Além disso, quando as amostras do conjunto de treinamento estão contaminadas com ruido, eles podem não convergir para o mínimo (oscilam ao redor dele).
- Esses problemas impactam o desempenho do modelo e deixam o treinamento lento e, possivelmente, instável.
- Entretanto, existem *técnicas para minimizar* esses problemas, deixando essas versões do GD *mais comportadas*.
- As mais conhecidas envolvem o ajuste do passo de aprendizagem ou do termo de atualização dos pesos.

Ajuste do passo de aprendizagem

- Redução gradual (ou decaimento) do passo de aprendizagem diminui gradualmente o passo de aprendizagem ao longo do treinamento.
- A redução da taxa de aprendizagem faz com que as atualizações dos pesos se tornem cada vez menores à medida que o treinamento progride, o que pode melhorar (ou forçar) a convergência.

$$a(i+1) = a(i) - \alpha(i) \frac{\partial J_e(a(i))}{\partial a}.$$

- Essa é a técnica mais simples, porém, precisamos encontrar a taxa ideal de redução do passo.
- Veremos um exemplo de como ela funciona.

Ajuste do termo de atualização dos pesos

O termo momentum adiciona a média do histórico de gradientes, ν, à equação de atualização dos pesos, tornando as atualizações menos ruidosas, e, consequentemente, acelerando a convergência do algoritmo.

$$\mathbf{v} \leftarrow \mu \mathbf{v} + (1 - \mu) \nabla \widehat{J}_e(\mathbf{a}),$$

 $\mathbf{a} \leftarrow \mathbf{a} - \alpha \mathbf{v}.$

onde $\nabla \widehat{J_e}(a)$ é a aproximação do vetor gradiente e μ determina a quantidade de gradientes anteriores que são considerados no cálculo da média.

• A desvantagem é que precisamos encontrar as valores ideais dos hiperparâmetros α e μ .

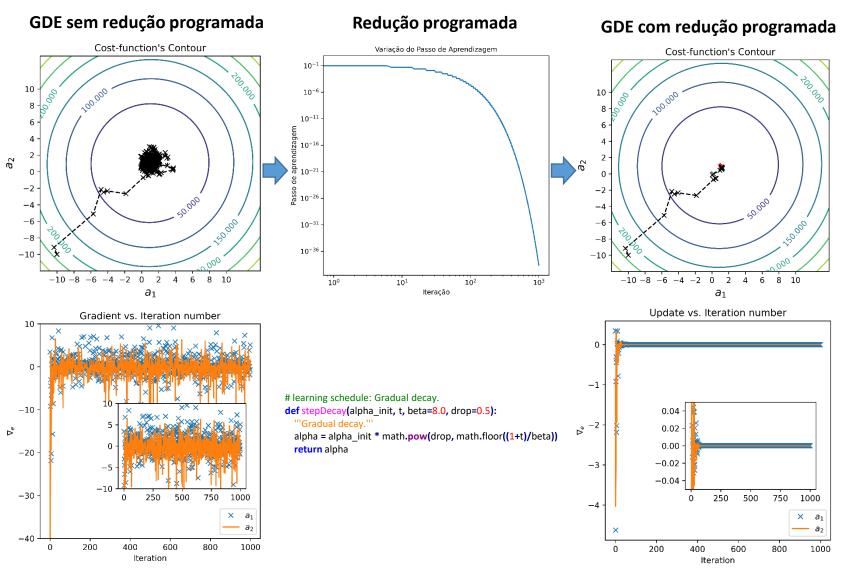
Ajuste dos pesos e do termo de atualização dos pesos

- Na variação adaptativa, o passo de aprendizado é ajustado adaptativamente de acordo com a inclinação da superfície de erro, além disso, usa passos diferentes para cada peso do modelo, os atualizando de forma independente de acordo com a inclinação da superfície na direção dos pesos.
- Pode ser combinado com o termo momentum para ajustar o termo de atualização dos pesos, melhorando ainda mais a convergência.
- Uma vantagem é que na maioria dos casos, não é necessário se ajustar manualmente nenhum hiperparâmetro como no caso das técnicas de redução gradual e termo momentum.

Redução gradual do passo de aprendizagem

- Os três tipos mais comuns para a *redução programada* de α são:
 - **Decaimento gradual**: também conhecido como *decaimento por etapas* ou *por degraus*. Reduz a taxa de aprendizagem inicial, α_0 , de um fator, τ , a cada número pré-definido de iterações, β . Um valor típico para reduzir a taxa de aprendizado é de $\tau=0.5$ a cada β de iterações.
 - **Decaimento exponencial**: é expresso pela equação $\alpha = \alpha_0 e^{-kt}$, onde α_0 e k são hiperparâmetros e t é o número da iteração corrente.
 - **Decaimento temporal**: é expresso pela equação $\alpha = {\alpha_0}/{(1+kt)}$ onde α_0 e k são hiperparâmetros e t é o número da iteração corrente.
- Na prática, o *decaimento gradual* é o mais utilizado entre os 3, pois seus *hiperparâmetros* (a taxa de decaimento, τ , e o intervalo para redução, β) são mais interpretáveis do que o hiperparâmetro k, que dita a taxa de decaimento do passo de aprendizagem.
- Mas percebam que ainda temos que encontrar os hiperparâmetros.

Exemplo: GDE com Redução Programada de lpha



- Exemplo usando GDE com *decaimento gradual*.
- O caminho com decaimento gradudal também não é regular para o ponto de mínimo.
- Apresenta algumas mudanças de direção ao longo do caminho.
- Porém, a oscilação em torno do mínimo é bastante reduzida devido à diminuição gradual de α.
- Conseguimos visualizar melhor o efeito da redução de α nas figuras que mostram o gradiente.
- **Conclusão**: um passo de aprendizagem que diminui ao longo das iterações permite que o algoritmo se estabilize próximo ao ponto de mínimo global.

Tarefas

- Quiz: "T319 Quiz Regressão: Parte III" que se encontra no MS Teams.
- Exercício Prático: Laboratório #4.
 - Pode ser acessado através do link acima (Google Colab) ou no GitHub.
 - Vídeo explicando o laboratório: Arquivos -> Material de Aula -> Laboratório #4
 - Se atentem aos prazos de entrega.
 - Instruções para resolução e entrega dos laboratórios.
 - Laboratórios podem ser resolvidos em grupo, mas as entregas devem ser individuais.

Obrigado!





When someone asks why you never stops talking about machine learning





IF IF IF IF IF IF IF WE!

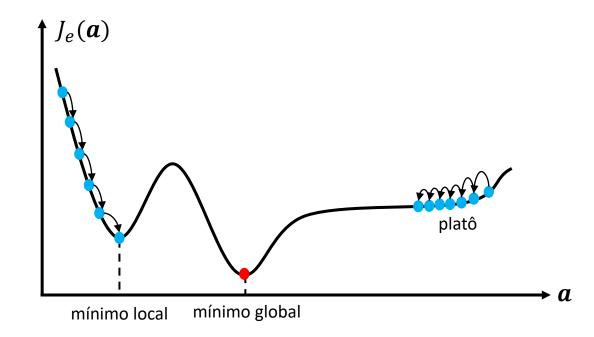
Albert Einstein: Insanity Is Doing the Same Thing Over and Over Again and Expecting Different Results

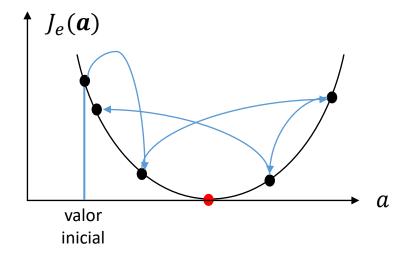
Machine learning:

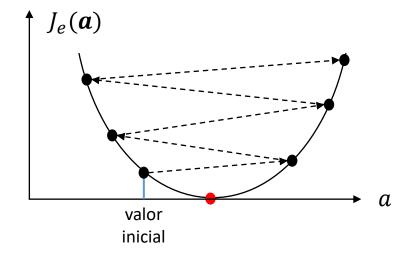


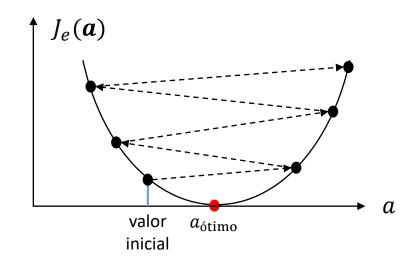


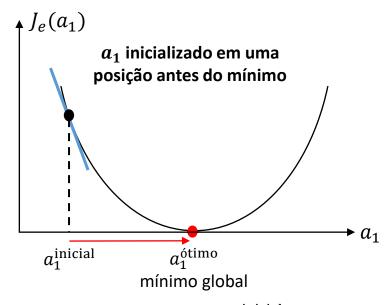
FIGURAS



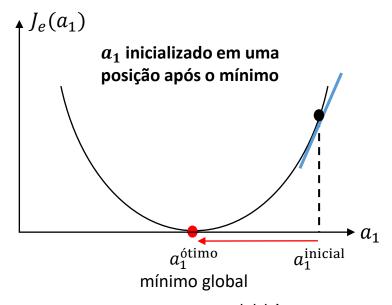




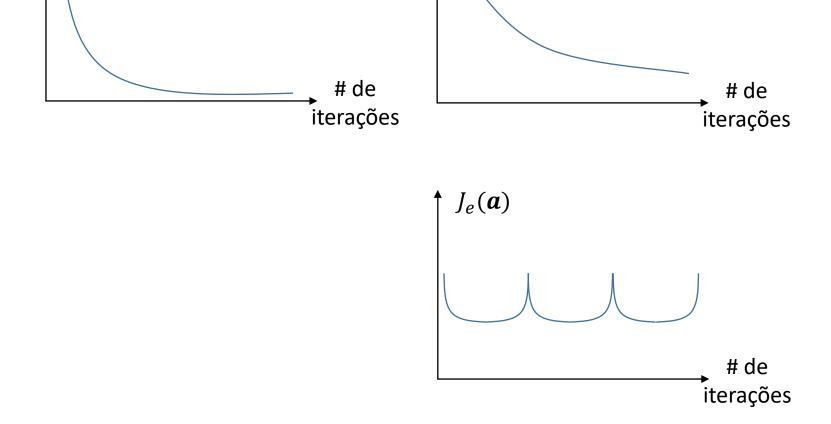




gradiente negativo: $a_1=a_1^{
m inicial}+\alpha \nabla J_e(a_1)$ a_1 aumenta e se aproxima do mínimo

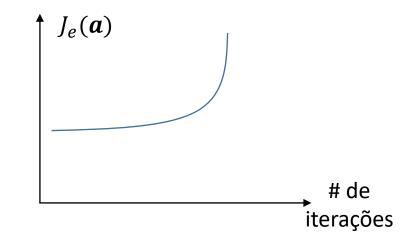


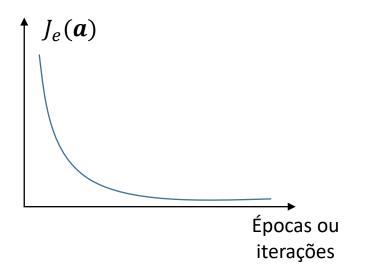
gradiente positivo: $a_1=a_1^{
m inicial}-\alpha \nabla J_e(a_1)$ a_1 diminiu e se aproxima do mínimo

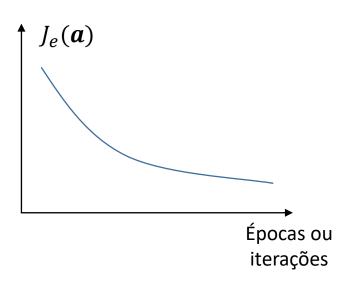


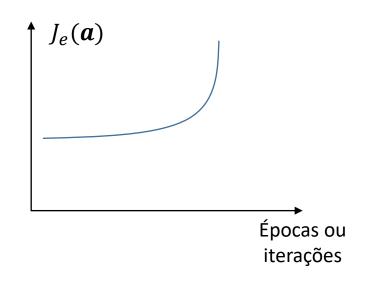
 $J_e(a)$

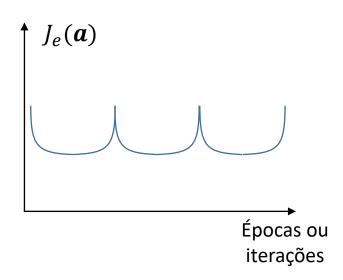
 $J_e(\boldsymbol{a})$

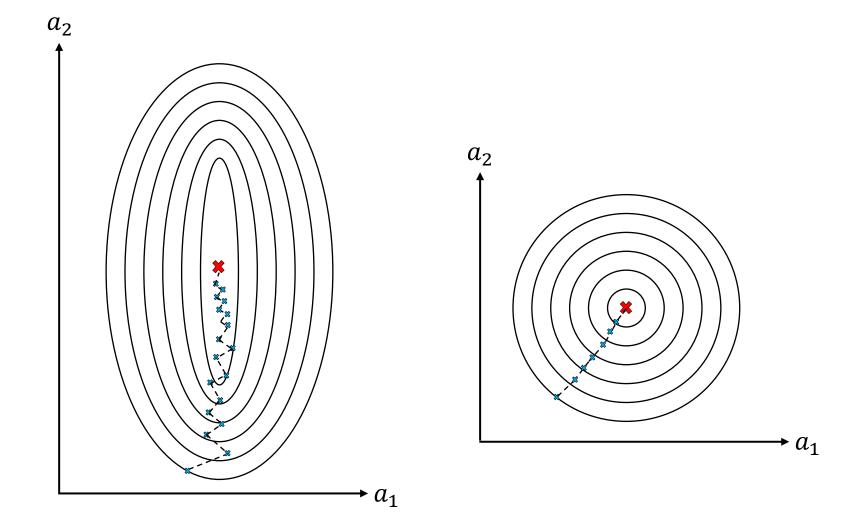


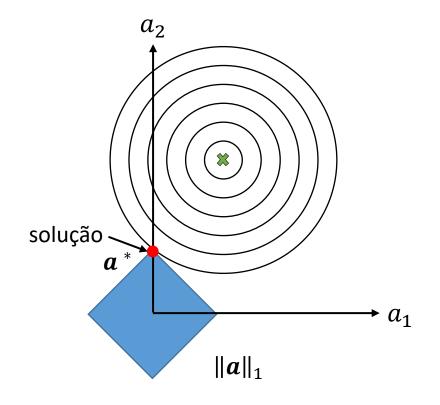


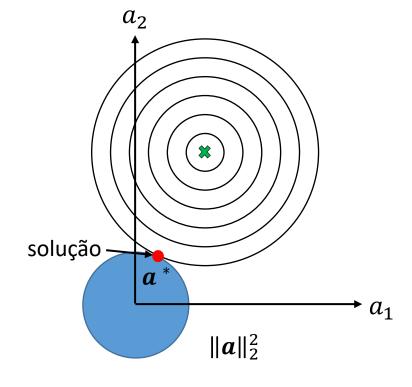












Gradiente Descendente a₂ Estocástico a₁

