

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



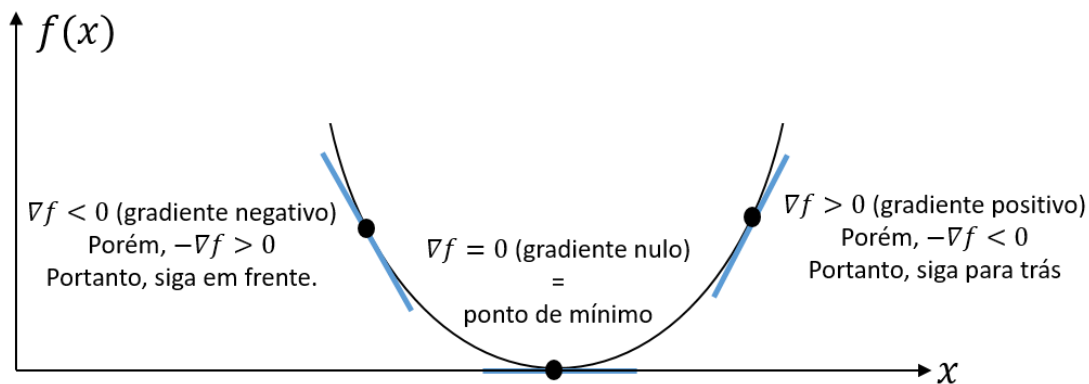
Inatel

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 **veter 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

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

- 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

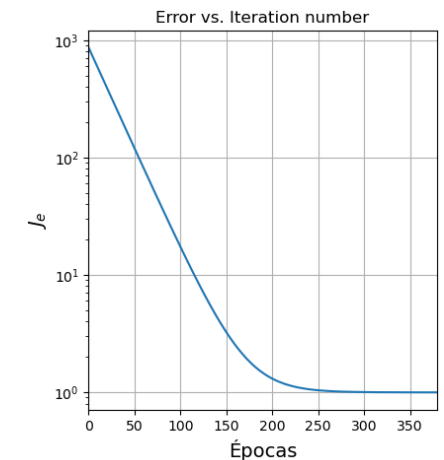
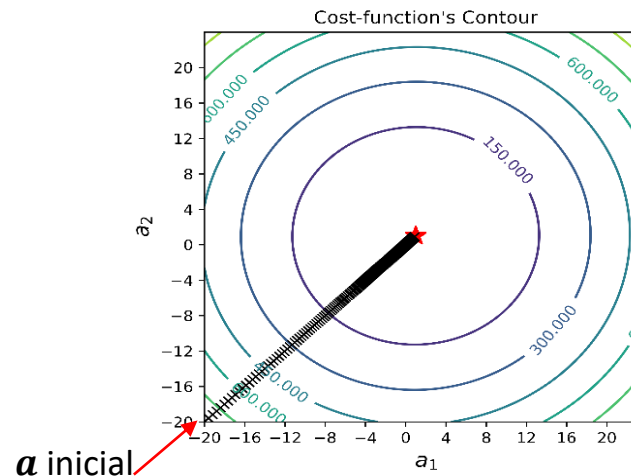
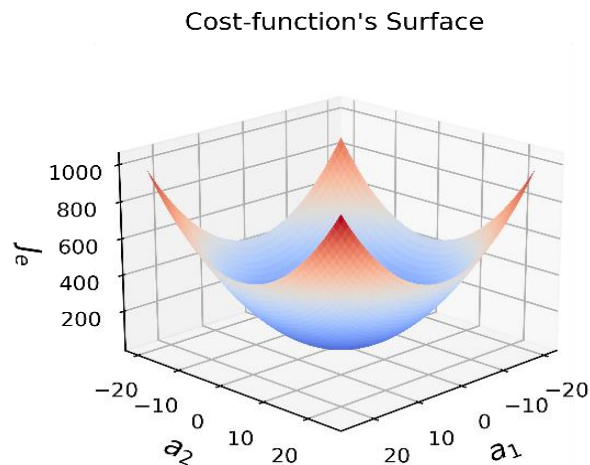
- O passo de aprendizagem é um **hiperparâmetro** que influencia diretamente o **desempenho e a convergência** do algoritmo do gradiente descendente.
 - **Hiperparâmetros:** são **parâmetros que não são aprendidos durante o treinamento** do modelo, mas que influenciam seu aprendizado.
- Valores **muito 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, ...

$3 \times$ $\approx 3 \times$ $3 \times$ $\approx 3 \times$ $3 \times$ $\approx 3 \times$

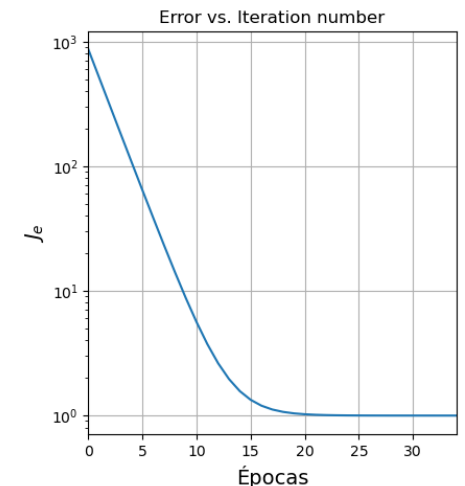
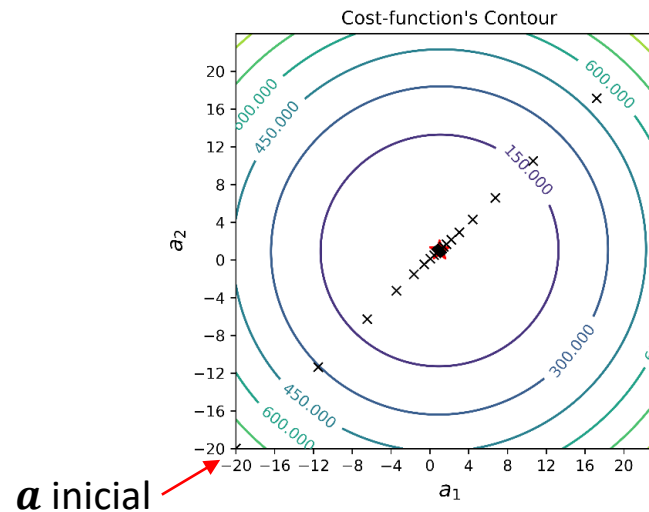
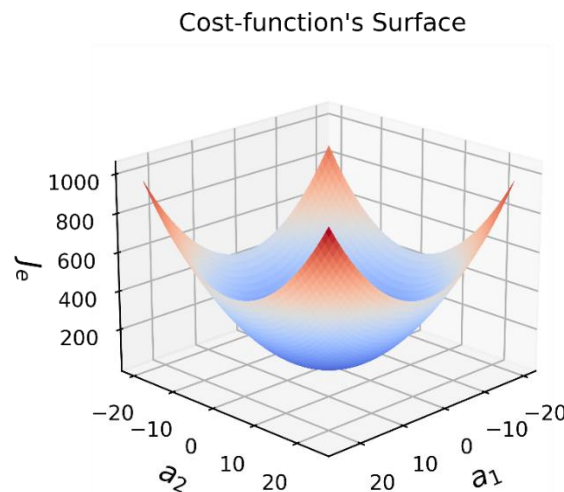
Passo de aprendizado pequeno

- Caso o passo de aprendizagem seja **muito pequeno**, a **convergência do algoritmo será muito lenta**.
- No exemplo abaixo, com $\alpha = 2 \times 10^{-6}$, 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**.



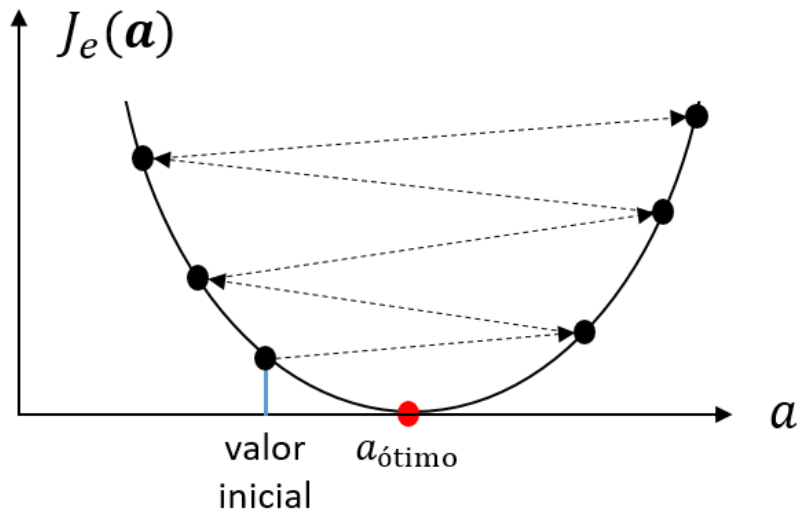
Passo de aprendizado grande

- 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 $\alpha = 1.8 \times 10^{-4}$, o algoritmo oscila inicialmente, mas acaba convergindo após 20 épocas.



Passo de aprendizado grande

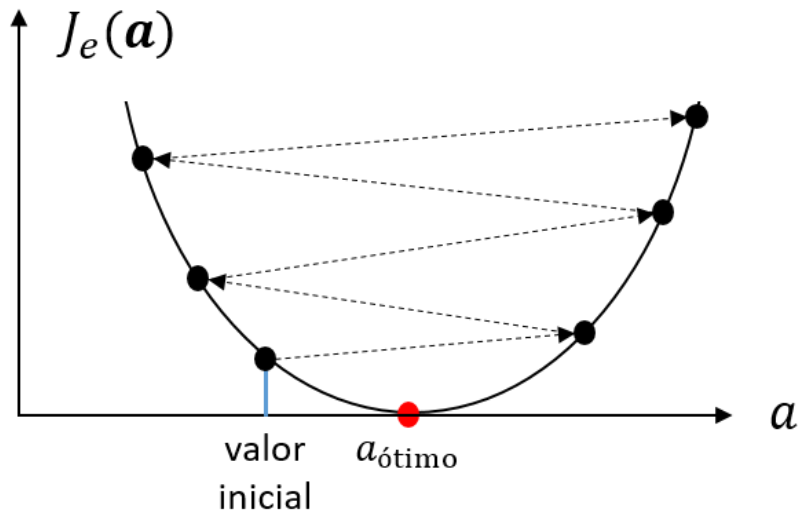
feedback positivo → estouro da precisão numérica



- 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

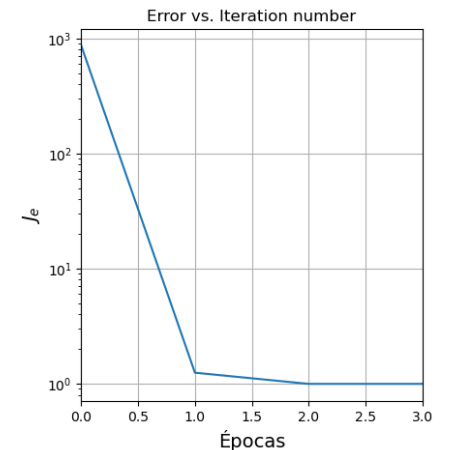
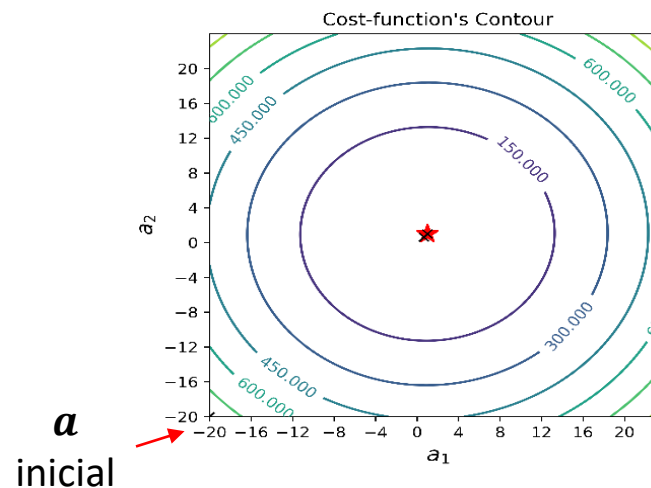
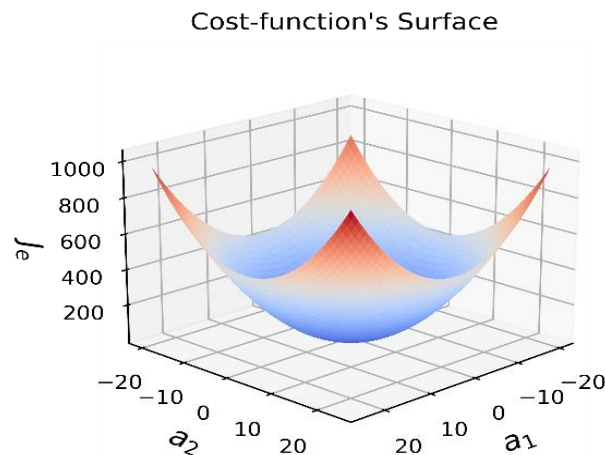
feedback positivo → estouro da precisão numérica



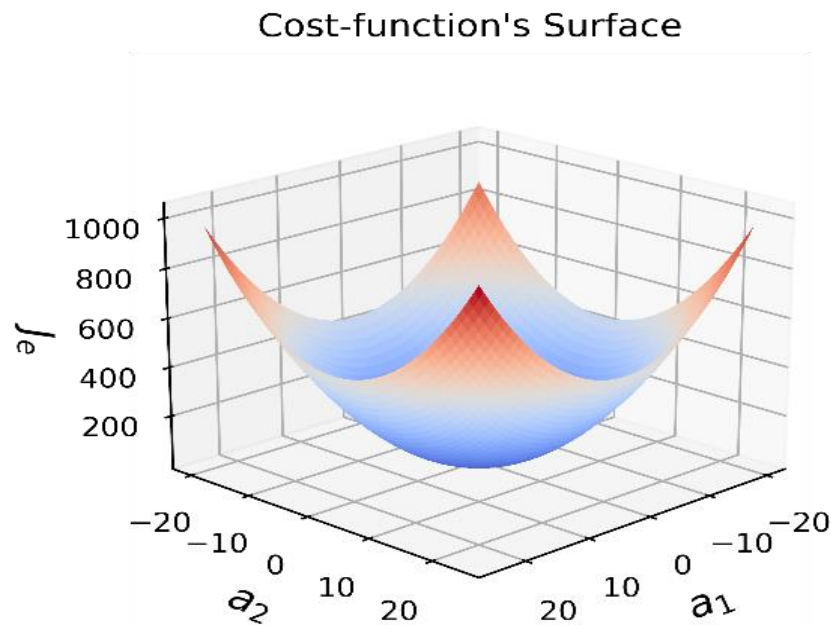
- Nesse caso ocorre um **ciclo de feedback positivo** onde **a cada época** os valores dos **gradientes** e, conseqüentemente, dos **pesos se tornam maiores e maiores** até que ocorra o **estouro da representação numérica**.
 - Problema que ocorre quando uma variável não pode mais representar um valor, 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.

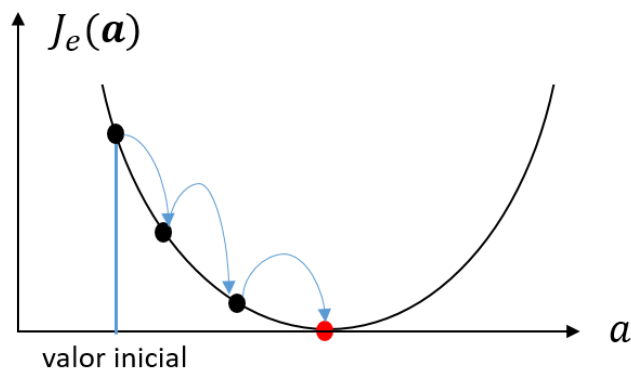
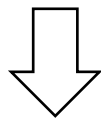
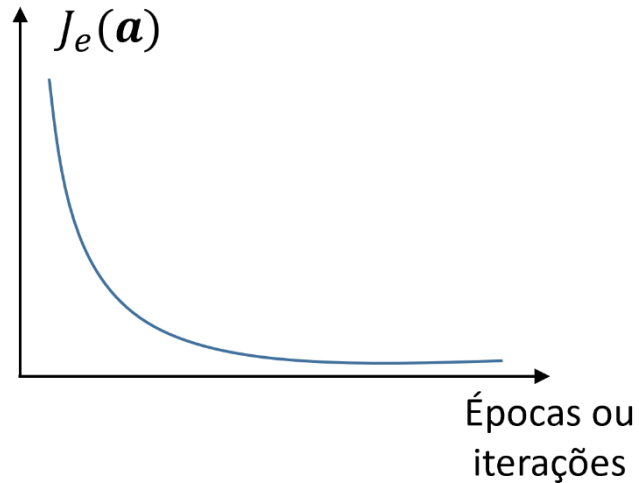


Analizando o treinamento de um modelo



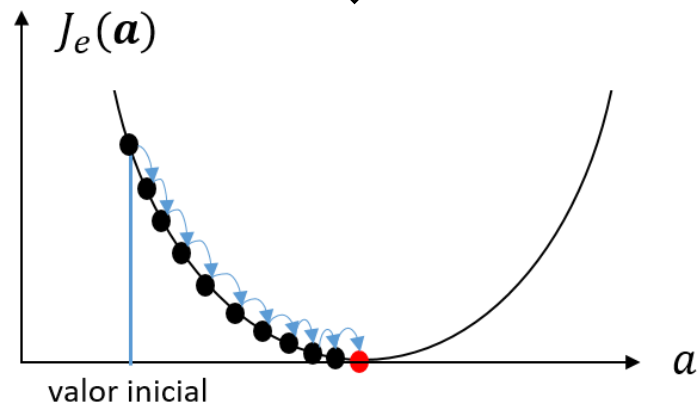
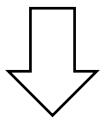
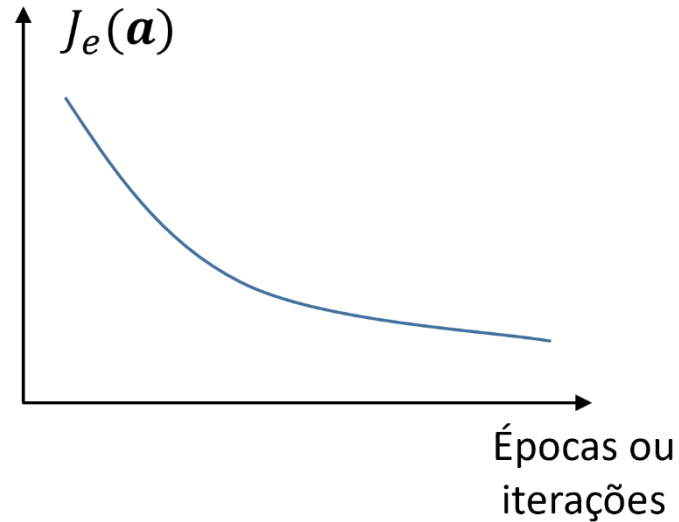
- *Nem sempre iremos conseguir plotar a **superfície de erro e de contorno** para analisarmos o treinamento e o desempenho de um modelo.*
- Por exemplo, quando tivermos **três atributos**, a **superfície de erro terá quatro dimensões**, tornando sua análise mais difícil.
- Assim, em geral, usamos a **curva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

Analizando o treinamento de um modelo



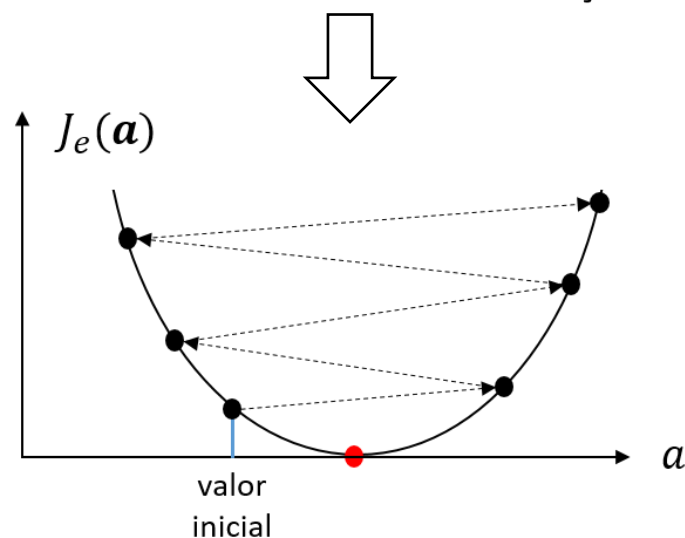
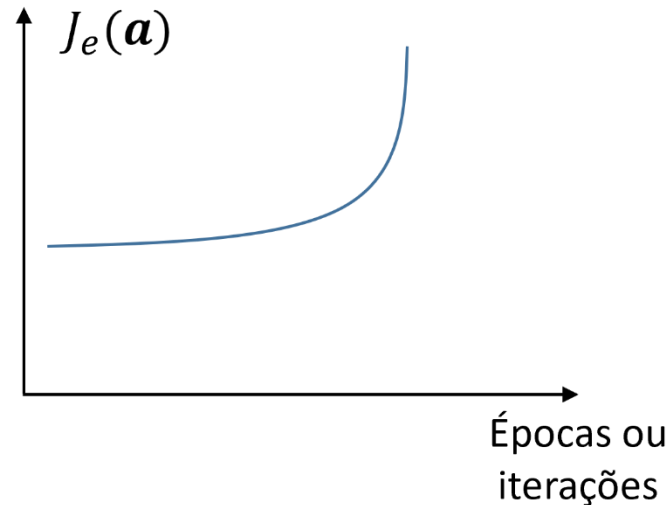
- A figura ao lado mostra o **comportamento esperado** quando o **passo tem o tamanho ideal**.
- A **convergência** nesse caso é **rápida**.
 - O **erro diminui rapidamente nas primeiras épocas** (ou iterações).
 - Conforme o treinamento continua, o **erro se estabiliza e exibe uma redução suave** (i.e., 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 valor pré-definido (e.g., $1e-5$).

Analizando o treinamento de um modelo



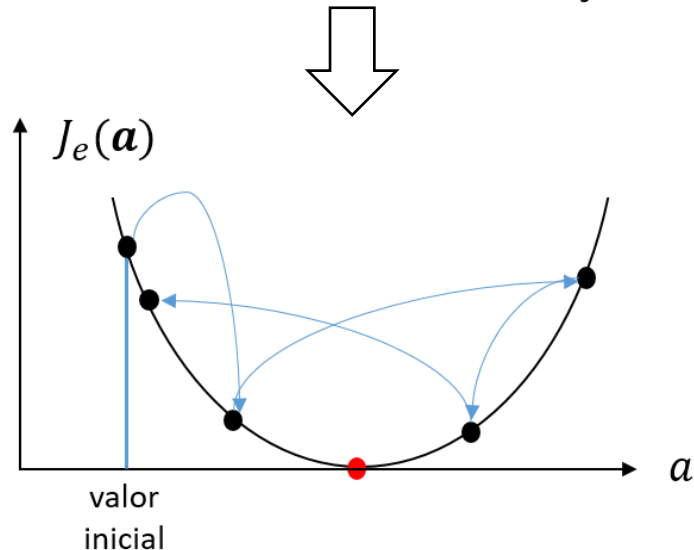
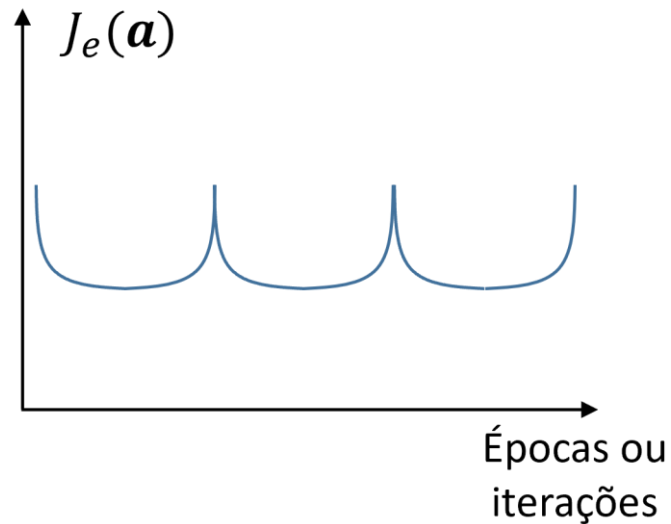
- A figura mostra o caso onde o **passo de aprendizagem é muito pequeno**.
- Nesse caso, a **convergência é muito lenta**.
- **Após várias épocas** de treinamento, o **erro ainda não se estabilizou**.
- Levaria **muito tempo** para que o modelo atingisse o **ponto de mínimo**.

Analizando o treinamento de um modelo



- 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**.

Analizando o treinamento de um modelo



- 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 ruído**, 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** e/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*.

$$\mathbf{a}(i + 1) = \mathbf{a}(i) - \boxed{\alpha(i)} \nabla \hat{J}_e (\mathbf{a}(i)),$$

onde i é número da iteração de atualização atual e $\nabla \hat{J}_e (\mathbf{a}(i))$ é a *estimativa do vetor gradiente*.

- Essa é a técnica mais simples das que veremos, mas, precisamos encontrar os hiperparâmetros que dão a taxa ideal de redução do passo de aprendizagem.
- Veremos um exemplo de como ela funciona.

Técnicas mais comuns para a redução gradual

- As três técnicas mais comuns para a **redução gradual** do passo de aprendizagem são:
 - **Dcaimento por etapas ou degraus:** reduz o passo 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.
 - **Dcaimento exponencial:** é dado pela equação $\alpha(i) = \alpha_0 e^{-ki}$, onde α_0 , k e i são passo de aprendizagem inicial, a taxa de decrescimento e o número da iteração de atualização atual, respectivamente.
 - **Dcaimento temporal:** é dado pela equação $\alpha(i) = \alpha_0 / (1+ki)$ onde α_0 , k e i tem o mesmo significado que no decaimento exponencial.
- Entretanto, percebam que ainda temos que encontrar os valores ideais para os **hiperparâmetros** α_0 , τ , β e k .

Ajuste do termo de atualização dos pesos

- O **termo momentum** adiciona a **média do histórico de estimativas do vetor gradientes**, \mathbf{v} , à equação de atualização dos pesos, **tornando as atualizações menos ruidosas**, e, conseqüentemente, **acelerando a convergência** do algoritmo.

$$\begin{aligned}\mathbf{v}(i) &= \mu \mathbf{v}(i-1) + (1-\mu) \nabla \hat{J}_e(\mathbf{a}(i)), \\ \mathbf{a}(i+1) &= \mathbf{a}(i) - \alpha \mathbf{v}(i).\end{aligned}$$

onde $\nabla \hat{J}_e(\mathbf{a}(i))$ é a **estimativa do vetor gradiente** e μ , chamado de **coeficiente de momentum**, determina a quantidade de estimativas anteriores que são consideradas no cálculo da média.

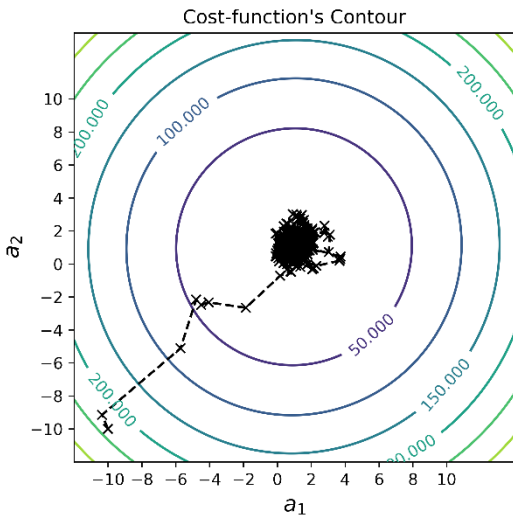
- O passo de aprendizagem é constante.
- A **desvantagem** é que nós precisamos encontrar os valores ideais dos **hiperparâmetros** α e μ .

Ajuste dos pesos e de seu termo de atualização

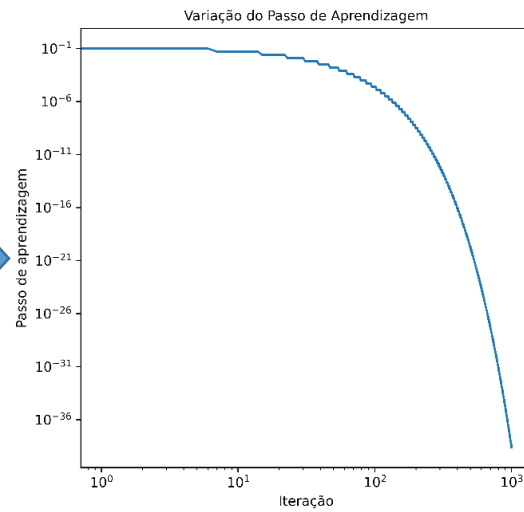
- Na *variação adaptativa*, o passo de aprendizagem é *ajustado adaptativamente* de acordo com a *inclinação da superfície de erro*.
- Além disso, usa *passos de aprendizagem diferentes para cada peso* do modelo, *os atualizando de forma independente* de acordo com a inclinação da superfície na direção 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.
- As técnicas mais conhecidas são RMSProp, AdaGrad e Adam.

Exemplo de redução programada com GDE

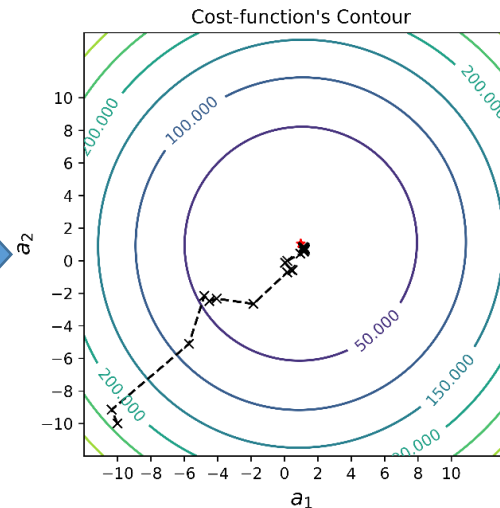
Sem redução gradual



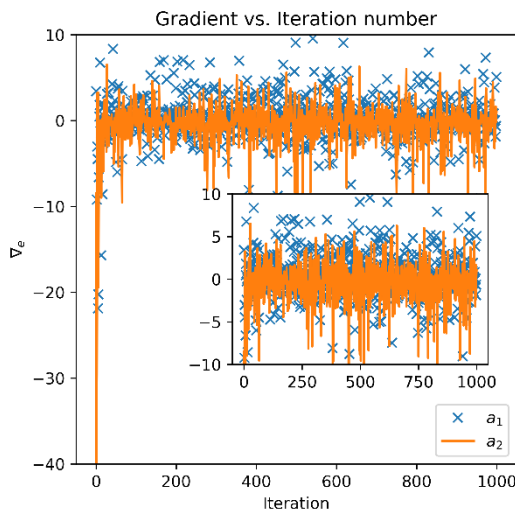
Redução gradual por degraus



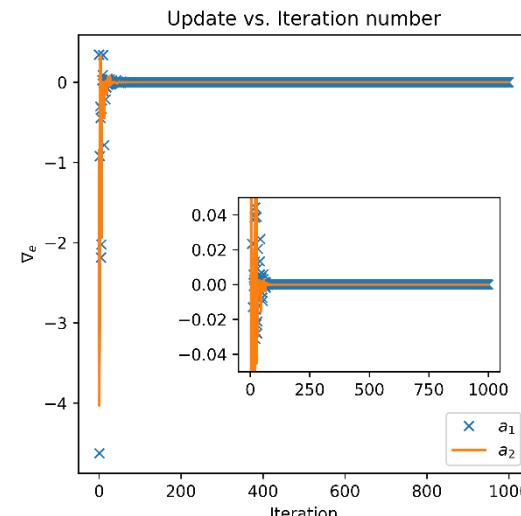
Com redução gradual



- O caminho com **decaimento gradual** também não é regular para o ponto de mínimo.
- Ele apresenta **algumas mudanças de direção** ao longo do caminho.
- O passo não influencia na direção, apenas no tamanho do deslocamento.

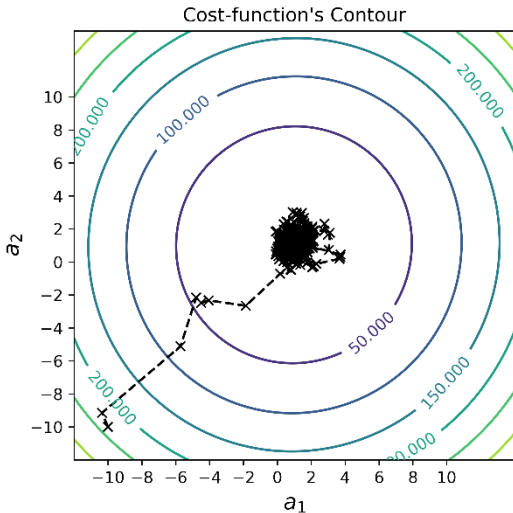


```
# learning schedule: Gradual decay.  
def stepDecay(alpha_init, t, beta=6.0, drop=0.5):  
    """Gradual decay."""  
    alpha = alpha_init * math.pow(drop, math.floor((1+t)/beta))  
    return alpha
```

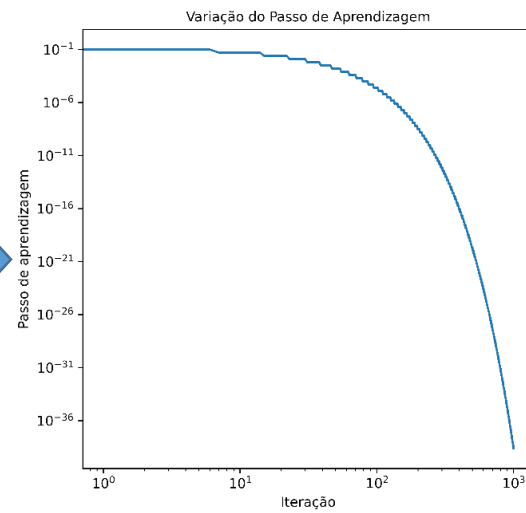


Exemplo de redução programada com GDE

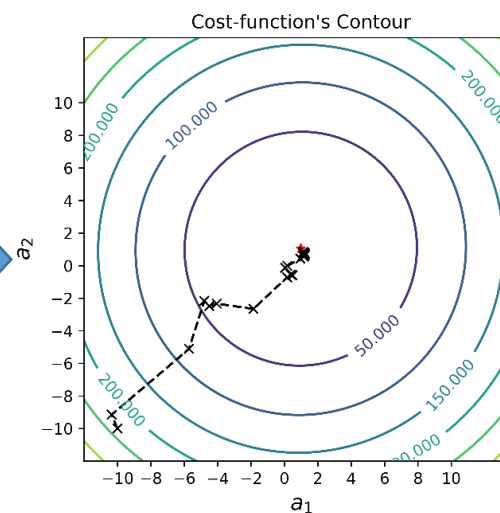
Sem redução gradual



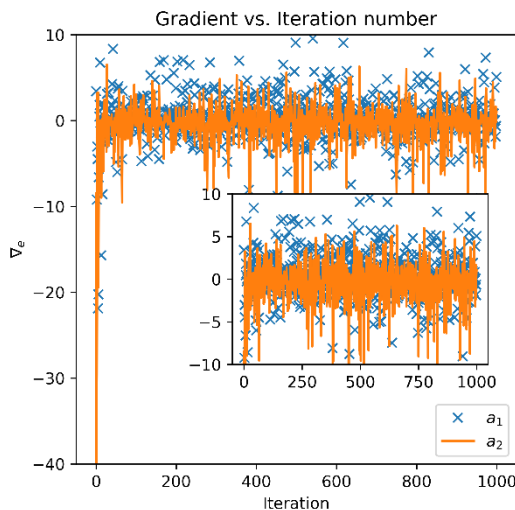
Redução gradual por degraus



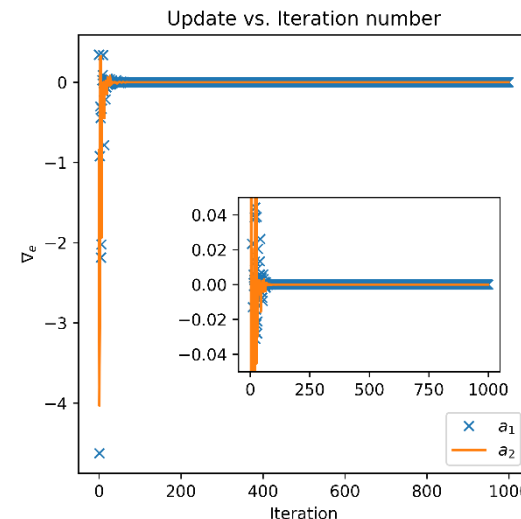
Com redução gradual



- Porém, a **oscilação em torno do mínimo é bastante reduzida** devido à **diminuição gradual** do passo de aprendizagem, α .
- Conseguimos visualizar melhor o efeito da redução de α nas figuras que mostram os elementos do vetor gradiente.

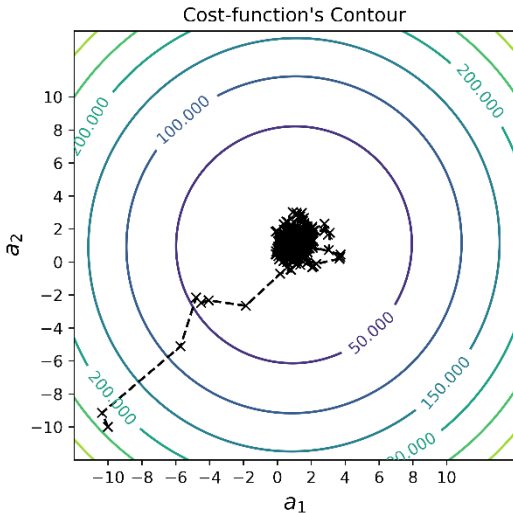


```
# learning schedule: Gradual decay.  
def stepDecay(alpha_init, t, beta=6.0, drop=0.5):  
    """Gradual decay."""  
    alpha = alpha_init * math.pow(drop, math.floor((1+t)/beta))  
    return alpha
```

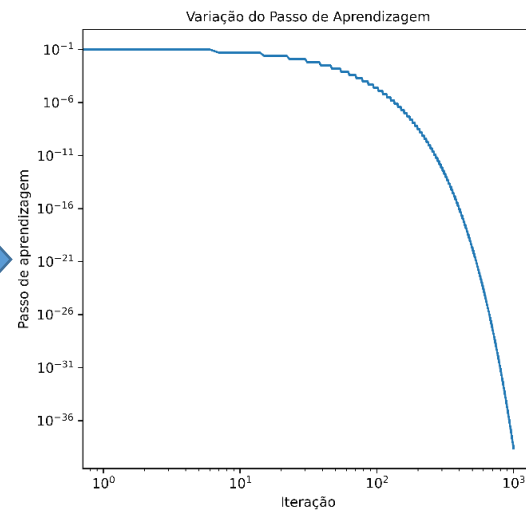


Exemplo de redução programada com GDE

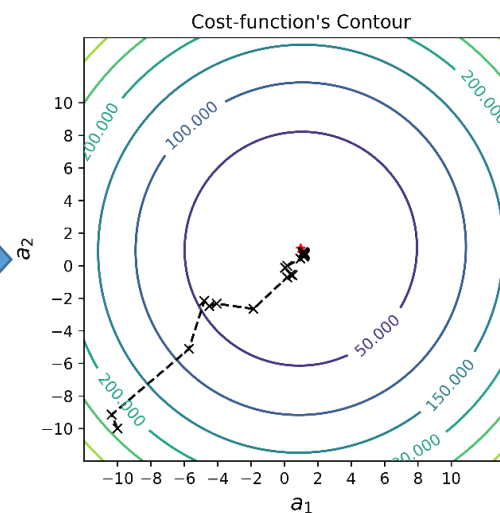
Sem redução gradual



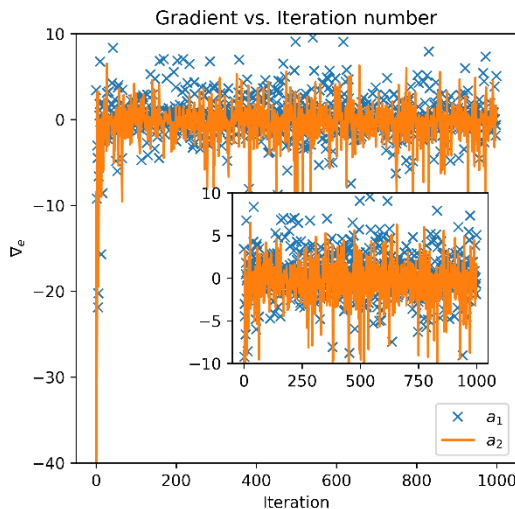
Redução gradual por degraus



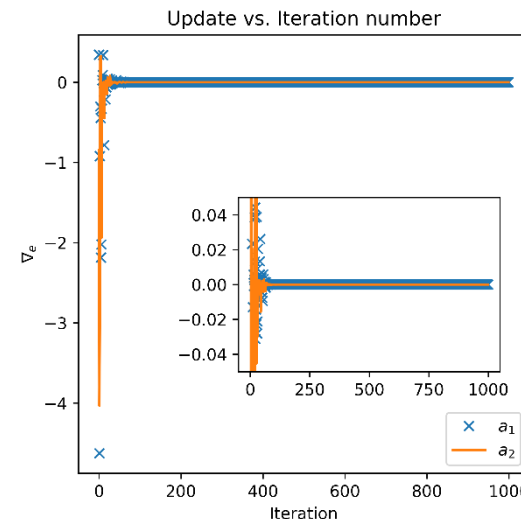
Com redução gradual



- **Conclusão:** um passo de aprendizagem que tem seu valor reduzido ao longo das iterações de treinamento permite que as versões estocásticas do gradiente descendente se estabilizem próximo ao ponto de mínimo global.



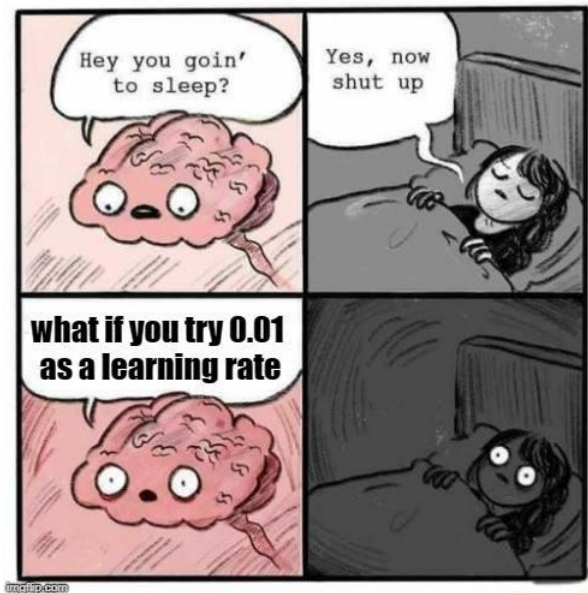
```
# learning schedule: Gradual decay.  
def stepDecay(alpha_init, t, beta=6.0, drop=0.5):  
    """Gradual decay."""  
    alpha = alpha_init * math.pow(drop, math.floor((1+t)/beta))  
    return alpha
```



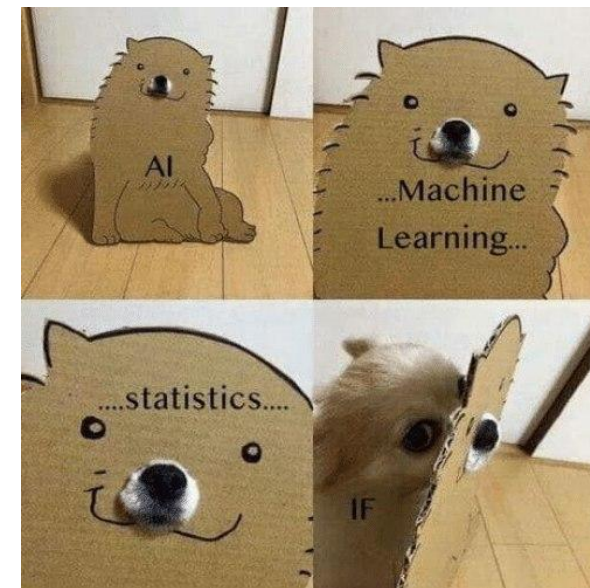
Tarefas

- **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.**

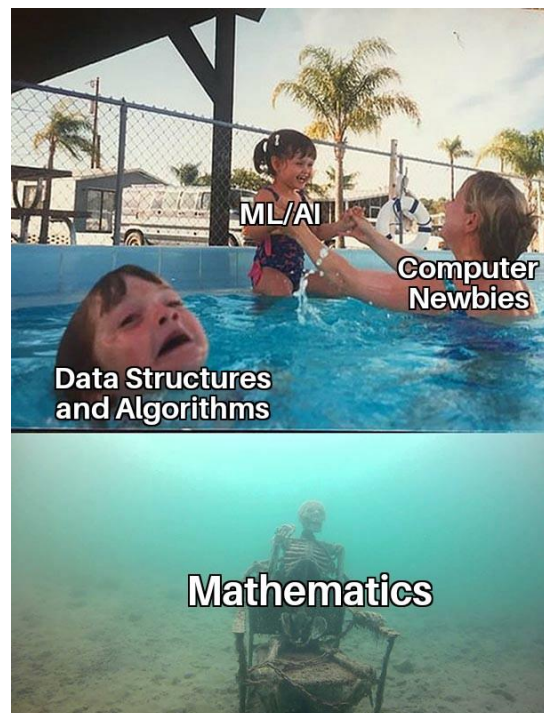
Obrigado!



When someone asks why you never stops talking about machine learning

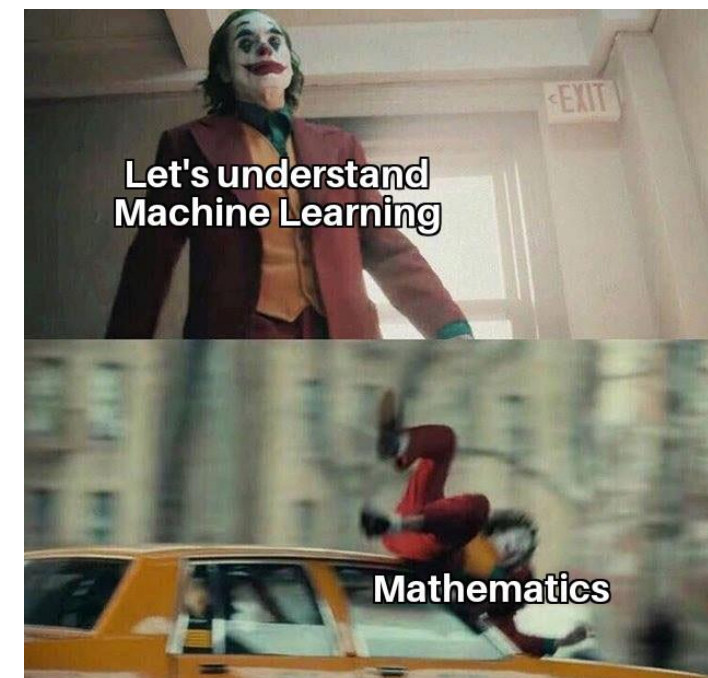


IF IF IF IF IF IF IF IF IF IF WE!

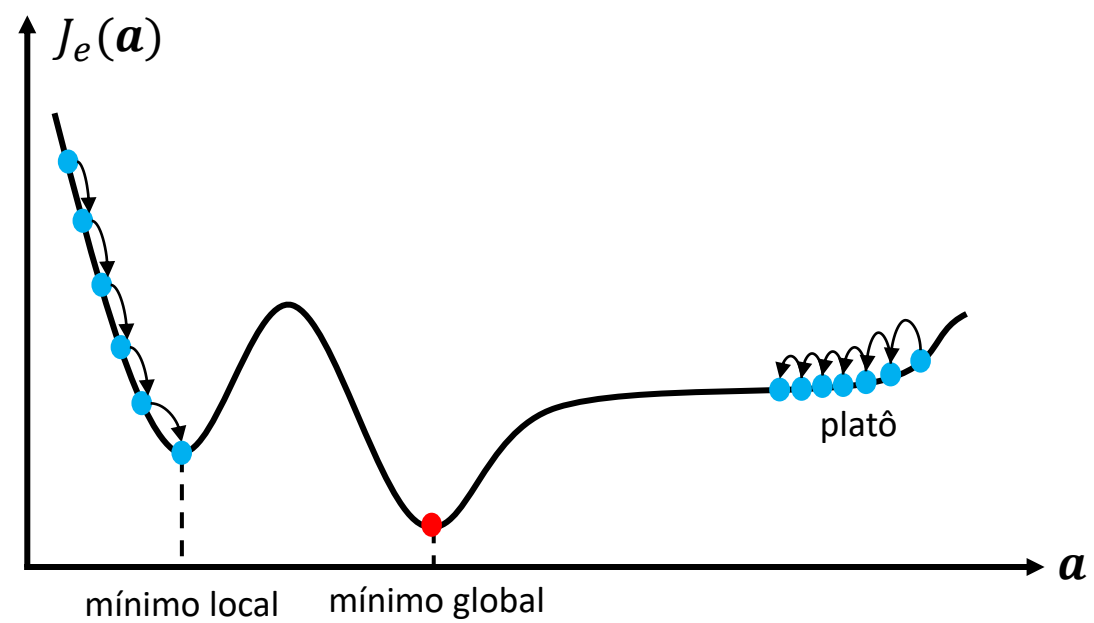


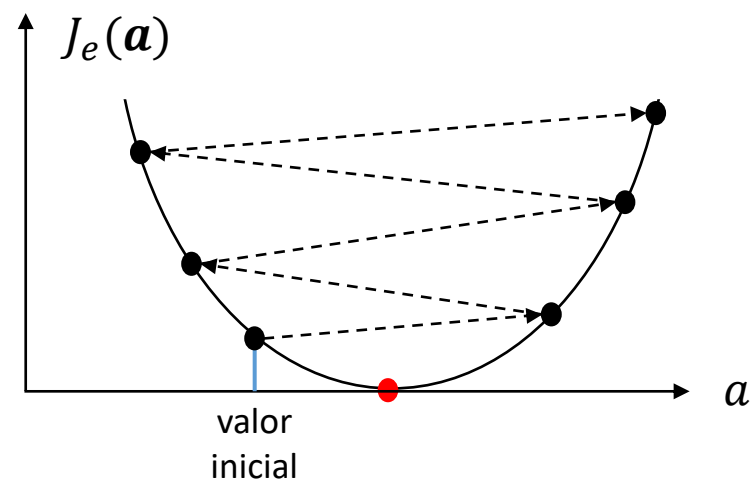
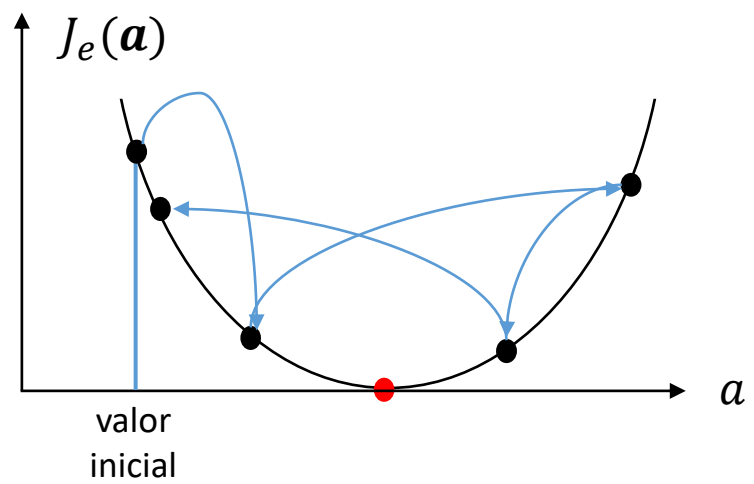
Albert Einstein: Insanity Is Doing the Same Thing Over and Over Again and Expecting Different Results

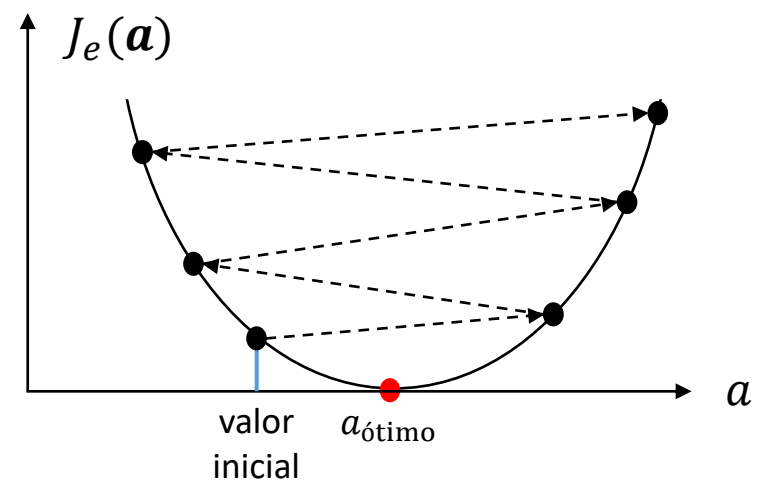
Machine learning:

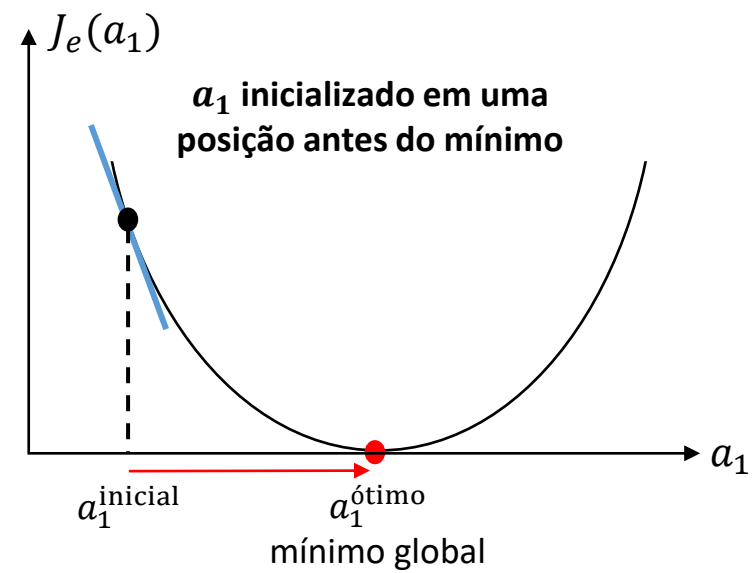


FIGURAS

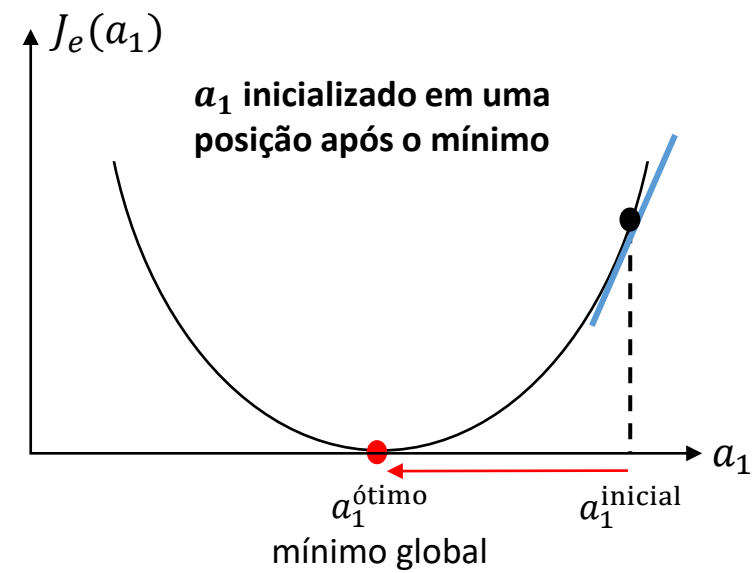




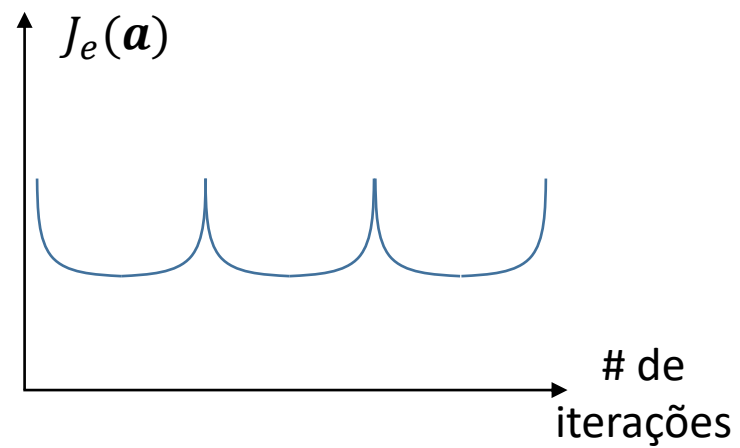
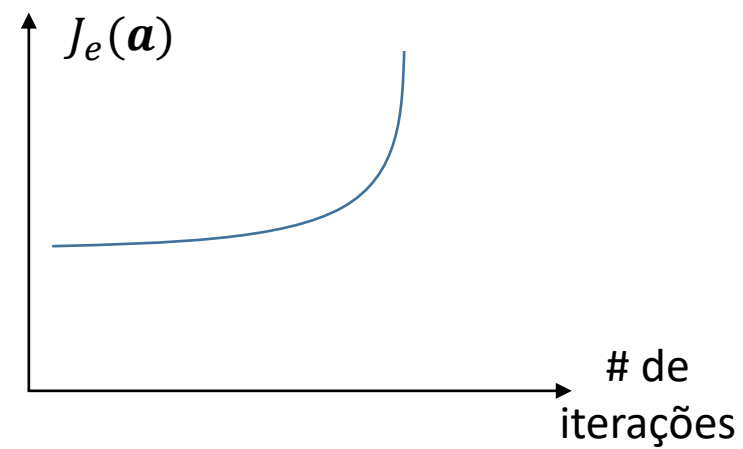
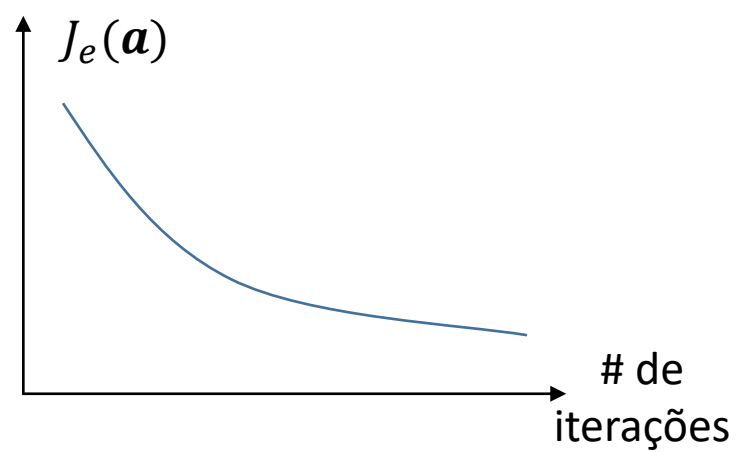
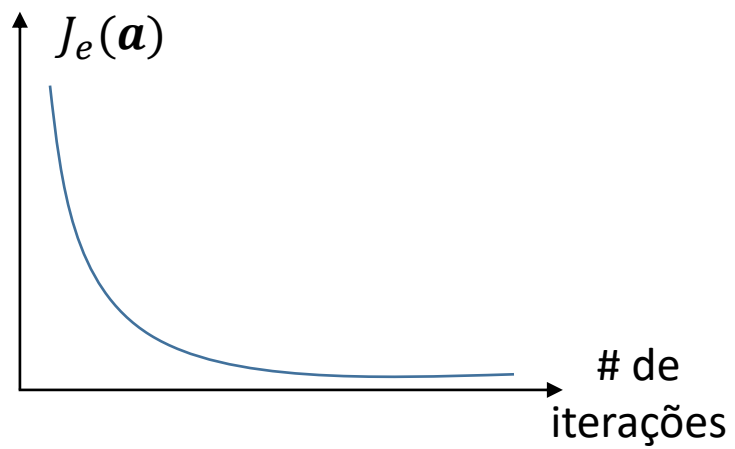


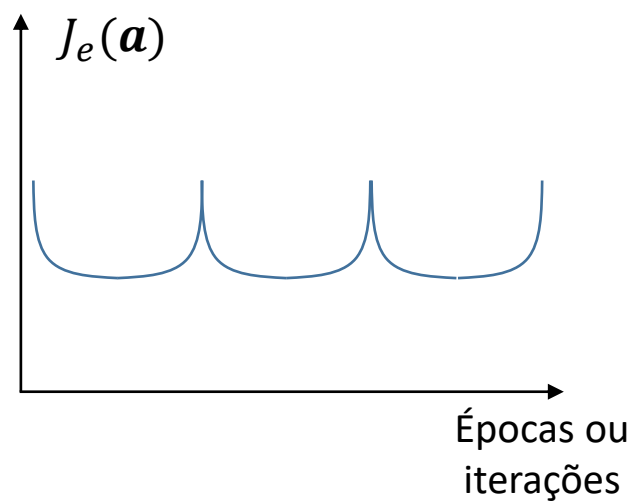
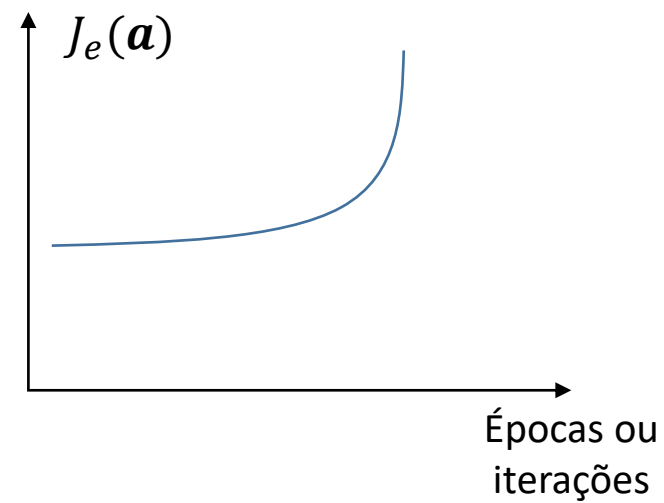
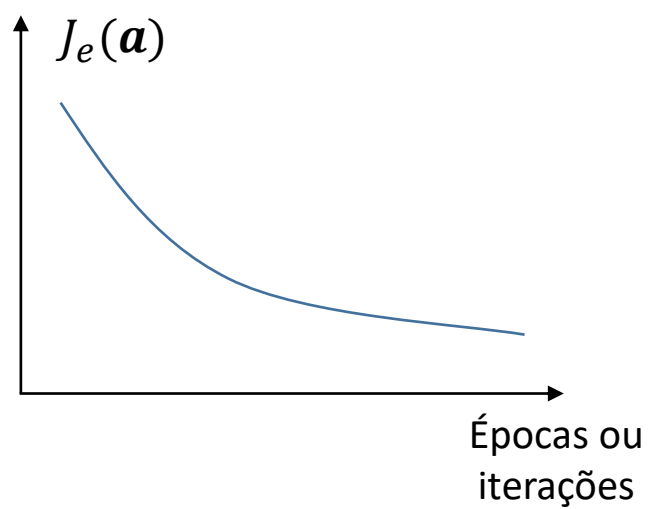
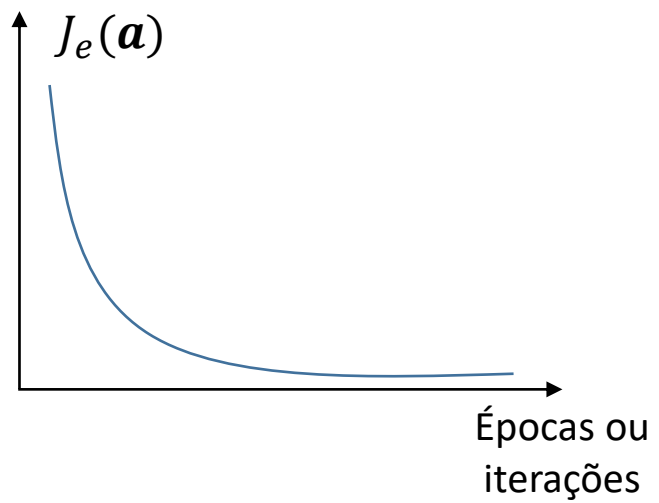


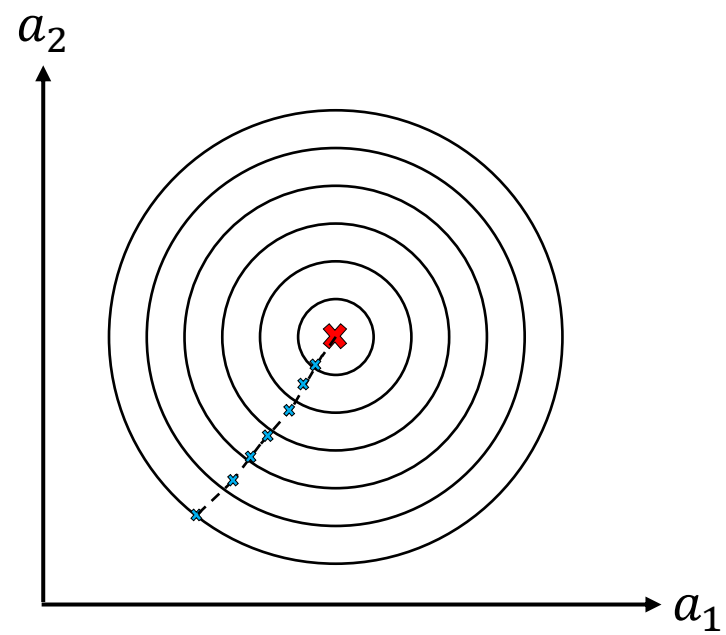
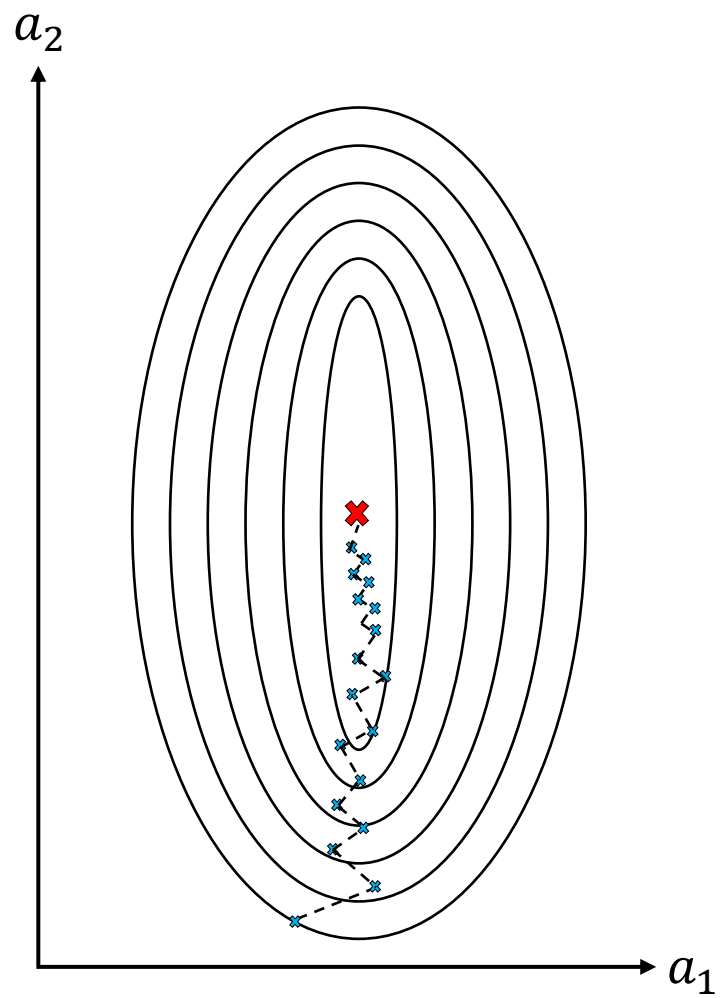
gradiente negativo: $a_1 = a_1^{\text{inicial}} + \alpha \nabla J_e(a_1)$
 a_1 aumenta e se aproxima do mínimo

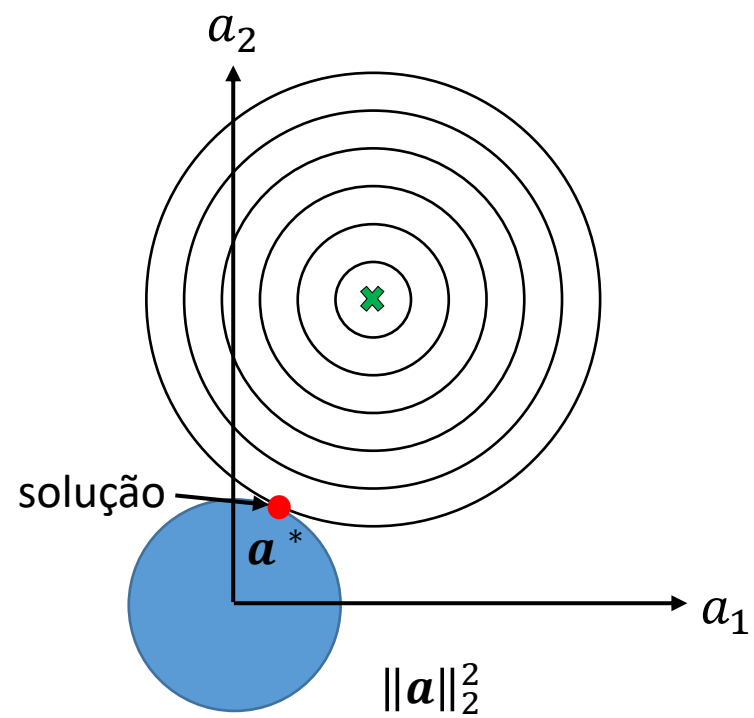
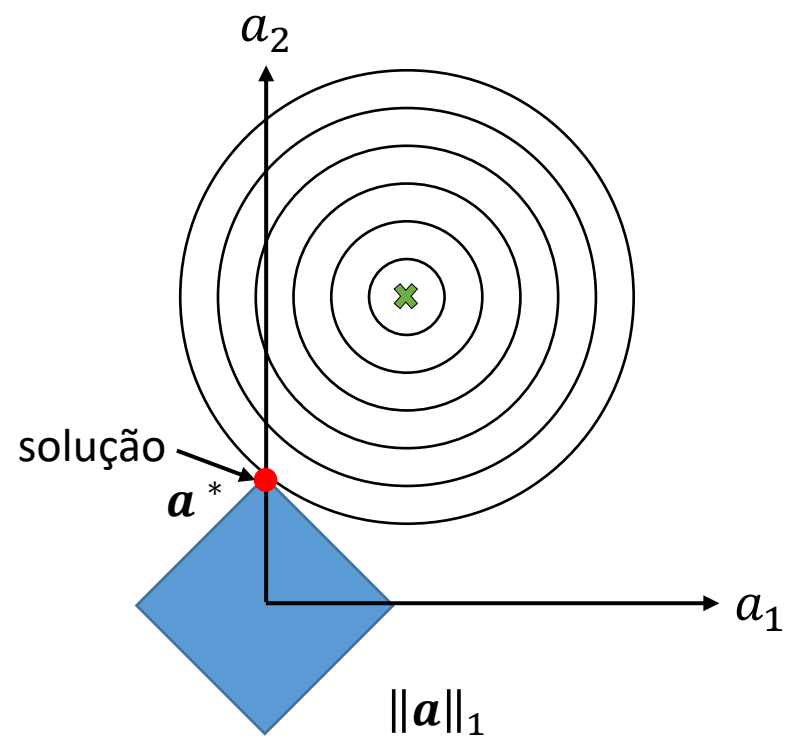


gradiente positivo: $a_1 = a_1^{\text{inicial}} - \alpha \nabla J_e(a_1)$
 a_1 diminuiu e se aproxima do mínimo









Gradiente Descendente Estocástico

