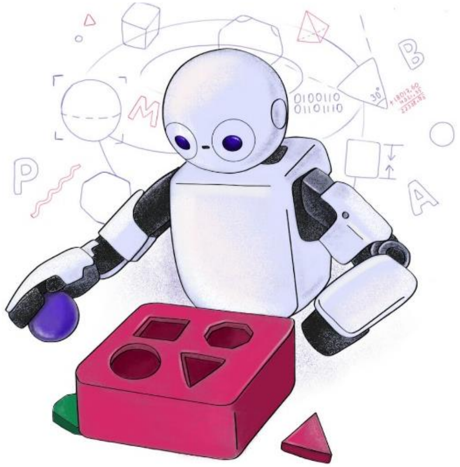
T319 - Introdução ao Aprendizado de Máquina: *Regressão Linear (Parte III)*



Inatel

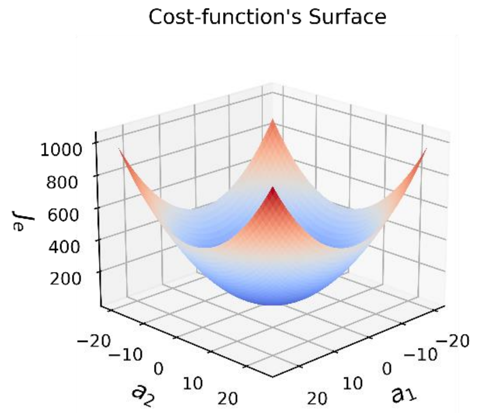
Felipe Augusto Pereira de Figueiredo
felipe.figueiredo@inatel.br

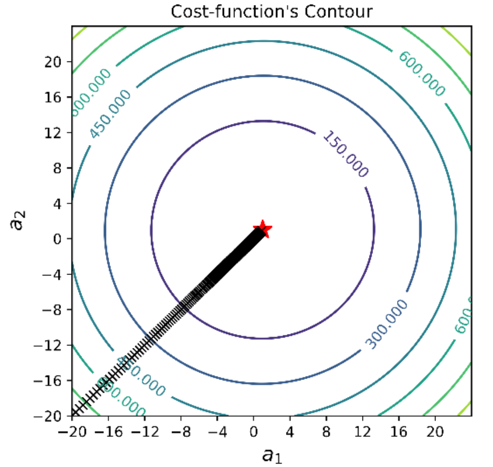
Recapitulando

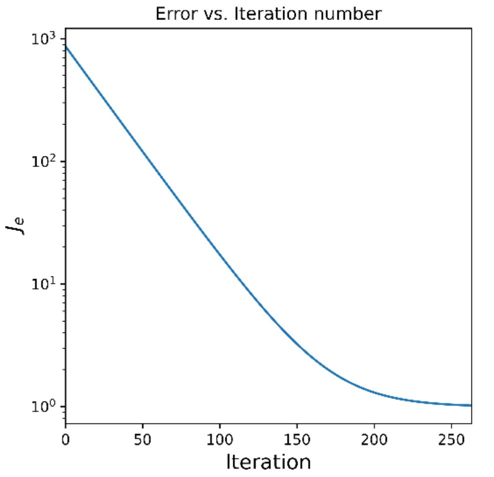
- Discutimos sobre o vetor gradiente.
- Aprendemos dois algoritmos que usam o vetor gradiente para a resolução de problemas de otimização.
- Vimos as três versões do gradiente descendente, como implementá-las em Python e as comparamos.
- Nesta parte, discutiremos o quão importante é o ajuste do passo de aprendizagem, α.

Escolha do Passo de Aprendizagem

- Conforme nós já aprendemos, enquanto o ***sentido*** e a ***direção*** para o mínimo são determinados pelo ***vetor gradiente*** da ***função de erro***, o ***passo de aprendizagem*** determina o quão grande esse passo é dado naquela direção e sentido.
- Portanto, a **escolha do passo de aprendizagem é muito importante**:
  - Caso ele seja muito pequeno, a convergência do algoritmo levará muito tempo.
  - **Exemplo**: com $\alpha = 0.01$ atinge o valor ótimo após mais de 250 épocas.
    - Passos muito curtos, fazem com que o algoritmo caminhe vagarosamente em direção ao ***mínimo global*** da ***função de erro***.



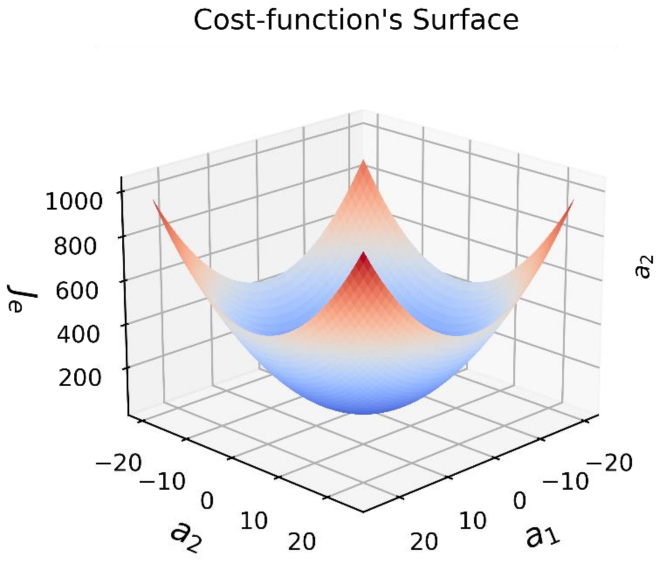


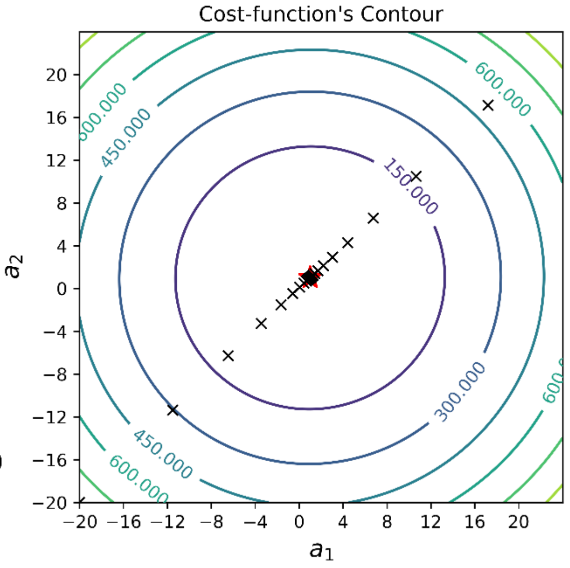


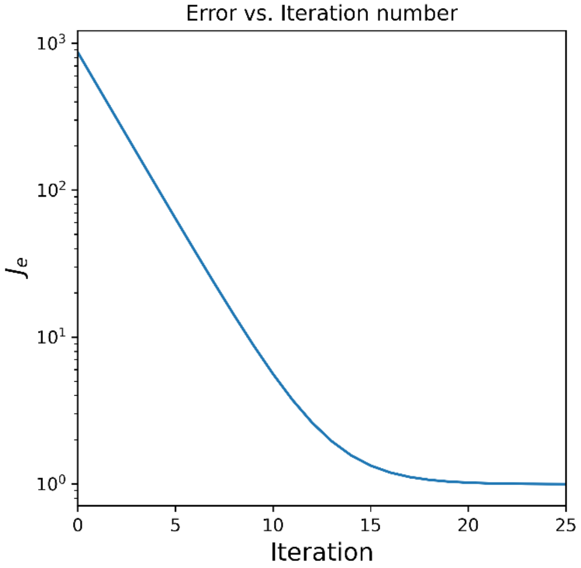
[Exemplo: linear_regression_selecting_the_learning_rate.ipynb]

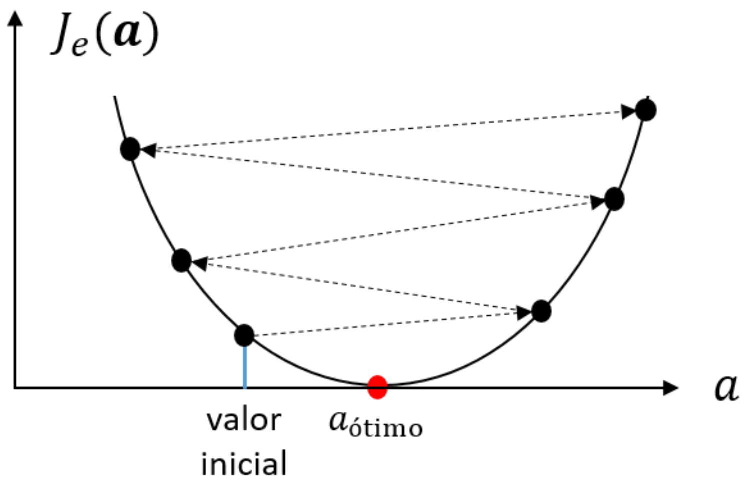
Escolha do Passo de Aprendizagem

- Caso o ***passo de aprendizagem*** seja muito grande, o algoritmo pode nunca convergir.
- O algoritmo fica “pulando” ou “oscilando” de um lado para o outro do vale até que converge, por sorte.
- Em alguns casos, a cada iteração o algoritmo “pula” para um valor mais alto que antes, e assim, divergindo.



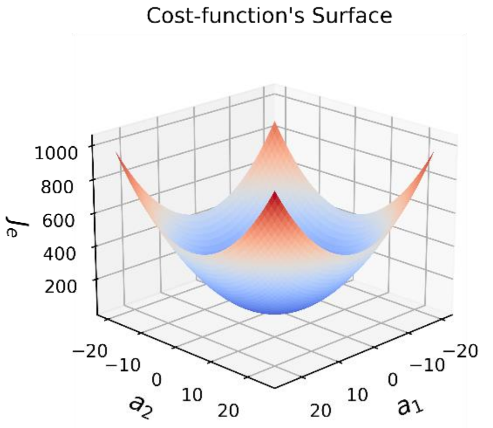


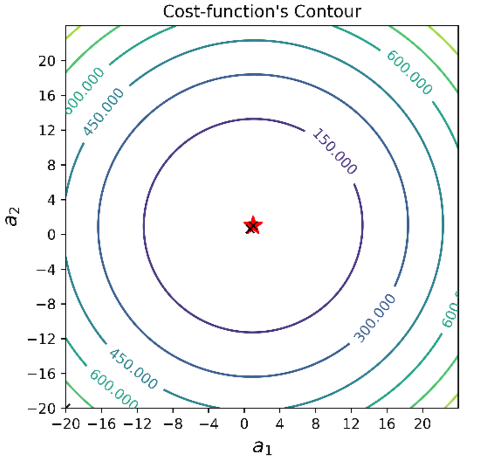


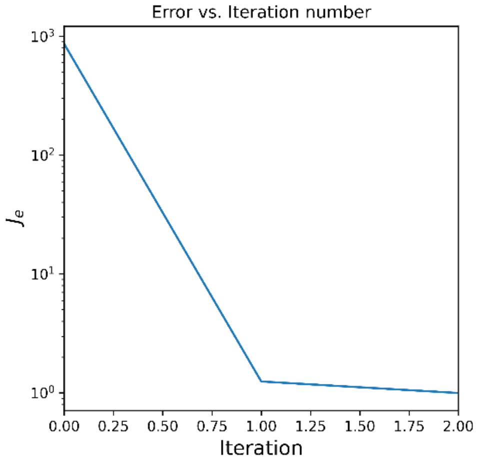


Escolha do Passo de Aprendizagem

- Portanto, o valor ***passo de aprendizagem*** deve ser ***experimentado/explorado*** para se encontrar um ***valor ótimo*** que acelere a ***descida do gradiente*** de forma ***estável*** (ou seja, acelere a convergência).
- O exemplo ao lado, converge para o ***mínimo global*** em apenas 2 iterações.
- Portanto, escolher o passo de aprendizagem é muitas vezes desafiador e demorado.
  - Passos muito grandes fazem com que o algoritmo aprenda rápido demais ao custo de um modelo final que seja sub-ótimo ou que o treinamento divirja ou se torne instável (oscilação).
  - Passos muito pequenos resultam num longo treinamento, podendo o algoritmo, por exemplo, ficar preso em um mínimo local ou mesmo nunca atingir um mínimo.







Como depurar o algoritmo do GD?

- Uma das maneiras de se ***depurar*** (principalmente quando não é possível se plotar o gráfico da superfície de contorno) o algoritmo do ***gradiente descendente*** é plotar o gráfico do erro (EQM) em função do número de iterações ou épocas.
  - Figura A $\Rightarrow$ Passo ótimo: converge rapidamente
    - Erro diminui rapidamente nas primeiras épocas e depois diminui quase que a uma taxa constante.
    - Convergência pode ser declarada quando o erro entre duas épocas subsequentes for menor do que um limiar pré-definido (e.g., 1e-3).
  - Figura B $\Rightarrow$ Passo pequeno demais: convergência lenta.
  - Figuras C e D $\Rightarrow$ Passo grande demais: divergência.

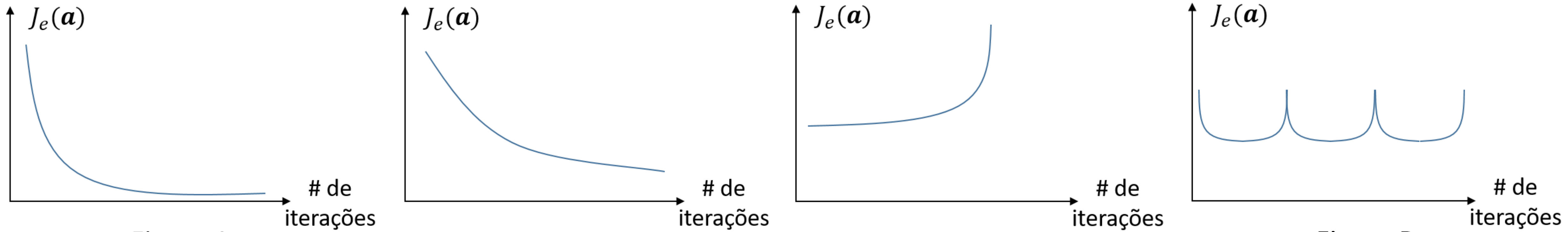
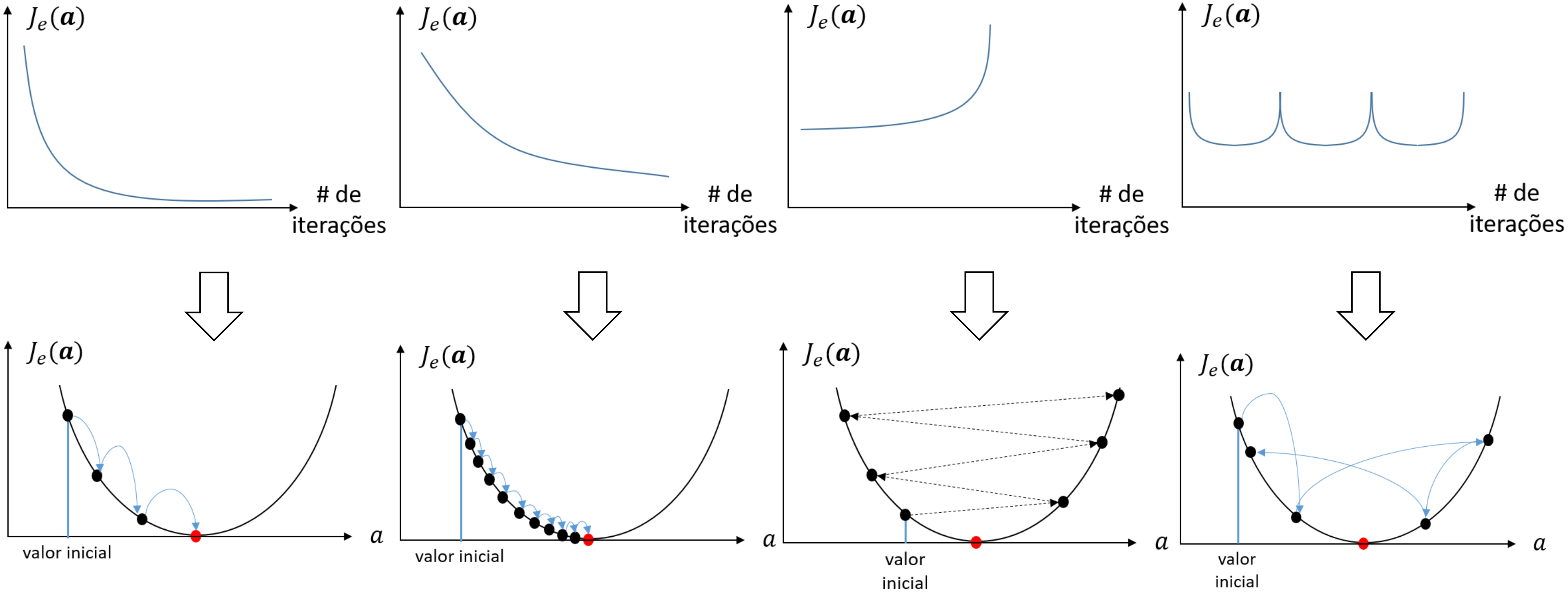


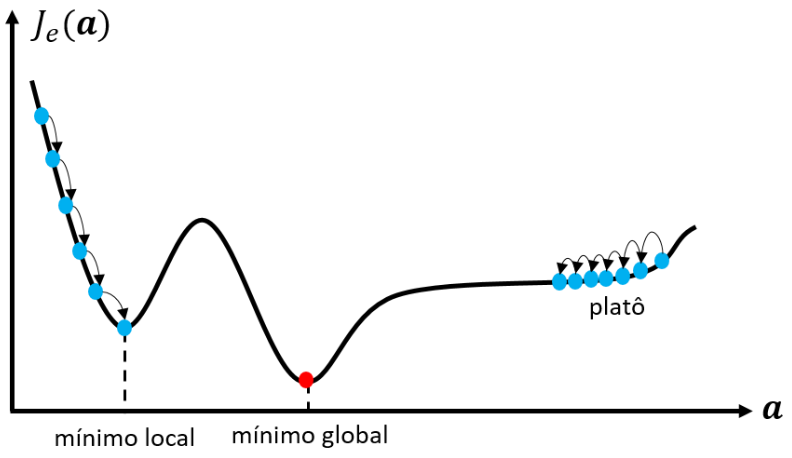
Figura A Figura B Figura C Figura D

Como depurar o algoritmo do GD?

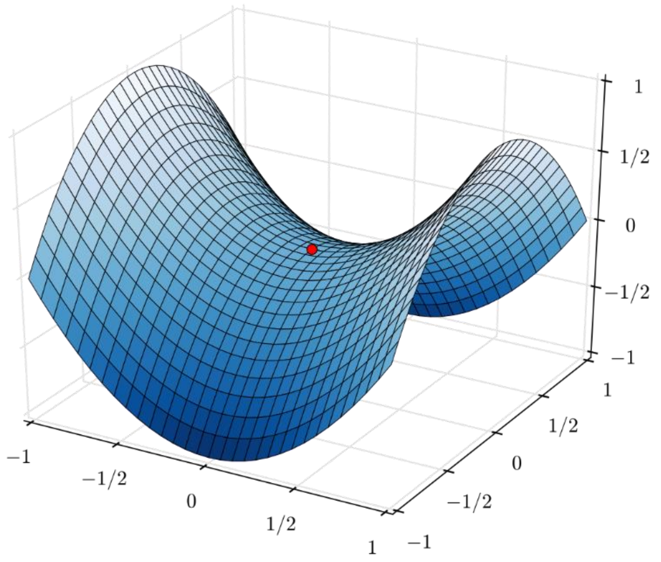


Desafios Encontrados pelo Gradiente Descendente

- Como vimos, as superfícies de ***funções de erro*** que utilizam o ***erro quadrático médio*** para treinamento de modelos de regressão linear são sempre ***convexas***, se assemelhando a um vale ou a uma tigela.
  - **Implicações**: não existem mínimos locais, apenas um mínimo global. É também uma função contínua com uma inclinação que nunca muda abruptamente.
  - **Consequência**: o gradiente descendente ***garantidamente*** se aproxima do mínimo global (dado que você espere tempo suficiente e que o ***passo de aprendizagem*** não seja grande demais).

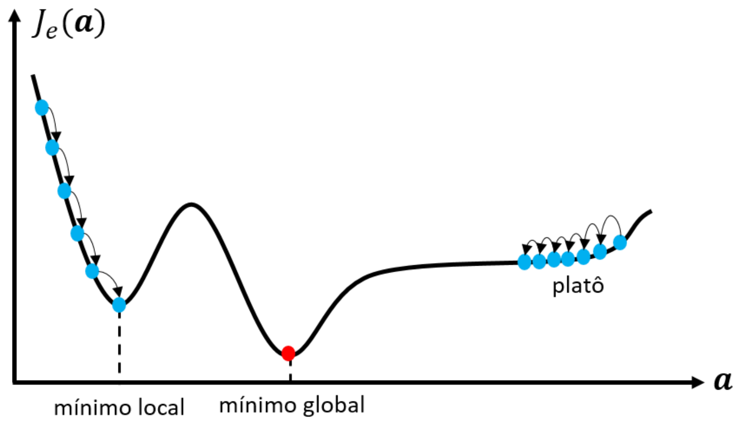


- Porém, nem todas as ***superfícies de erro*** se parecem com vales ou tigelas, ou seja, são convexas. Algumas podem ter vários mínimos locais, platôs, pontos de sela, e todo tipo de "***terreno irregular***", dificultando a convergência para o mínimo global. Redes neurais são exemplos de modelos com funções de erro não-convexas e bem irregulares.
- Além disso, como vimos antes, passos grandes podem desestabilizar o algoritmo e passos muito pequenos aumentar demais o tempo de convergência.



Desafios Encontrados pelo Gradiente Descendente

- A figura mostra dois dos principais desafios encontrados pelo ***algoritmo do gradiente descendente***. Se a inicialização aleatória dos pesos iniciar o algoritmo à
  - esquerda, ele convergirá para um mínimo local, que não é tão bom quanto o mínimo global.
  - direita, levará muito tempo para atravessar o platô (gradiente próximo de zero pois a inclinação é próxima de 0 graus) e, se ele parar muito cedo, nunca alcançará o mínimo global.
- Dado que o passo de aprendizagem seja grande o suficiente, como garantir que o mínimo encontrado é o global e não um mínimo local?
  - O que se faz é treinar o modelo várias vezes, sempre inicializando os pesos aleatoriamente, com a esperança de que em alguma dessas vezes ele inicialize mais próximo do mínimo global.



Tarefas

- **Quiz**: *"T319 - Quiz - Regressão: Parte III (1S2021)"* que se encontra no MS Teams.
- **Exercício número 1 do Laboratório #4**.
  - Pode ser baixado do MS Teams ou do GitHub.
  - Pode ser respondido através do link acima (na nuvem) ou localmente.
  - Instruções para resolução e entrega dos laboratórios.

Como configurar o passo de aprendizagem?

As abordagens abaixo são as mais usadas para se configurar o passo de aprendizagem.

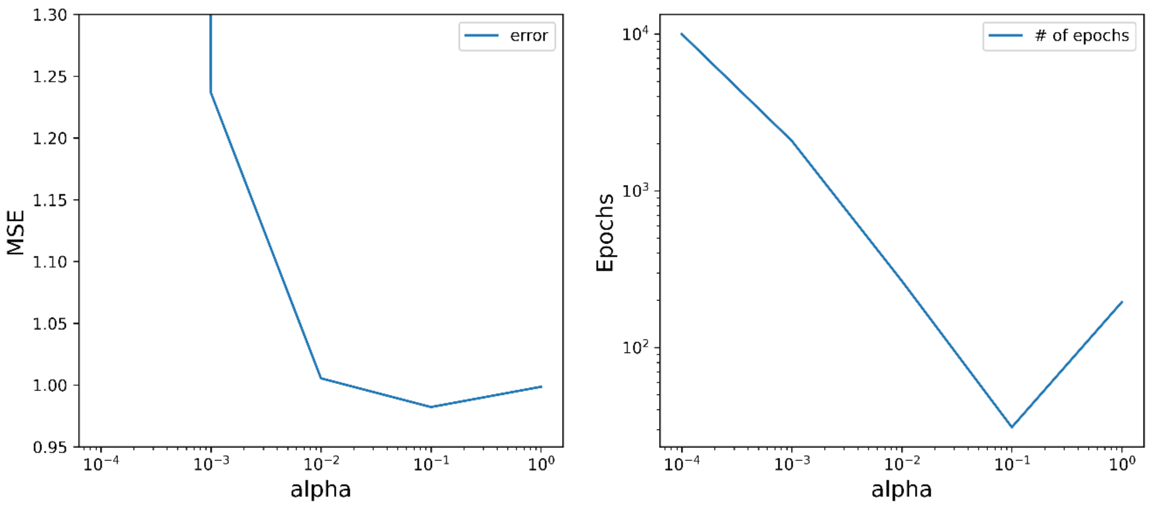
- **Ajuste manual**: envolve a escolha de valores através de tentativa e erro.
- **Redução programada**: variação do passo de aprendizagem ao longo do processo de treinamento. A forma mais simples é diminuir o passo de aprendizagem linearmente de um grande valor inicial para um pequeno valor.
- **Momentum**: adiciona a média do histórico de atualizações (i.e., o termo momentum) à atualização corrente dos pesos. O termo momentum tem o efeito de suavizar o processo de aprendizado, tornando as atualizações menos ruidosas.
- **Variação adaptativa**: o algoritmo de aprendizado monitora o desempenho do modelo no conjunto de treinamento e, consequentemente, o passo de aprendizagem pode ser ajustado em resposta ao desempenho. Pode ajustar os pesos de cada elemento do vetor gradiente de forma independente. Por exemplo, se o algoritmo ficar preso em um platô, pode-se aumentar o passo.

Ajuste Manual do Passo de Aprendizagem

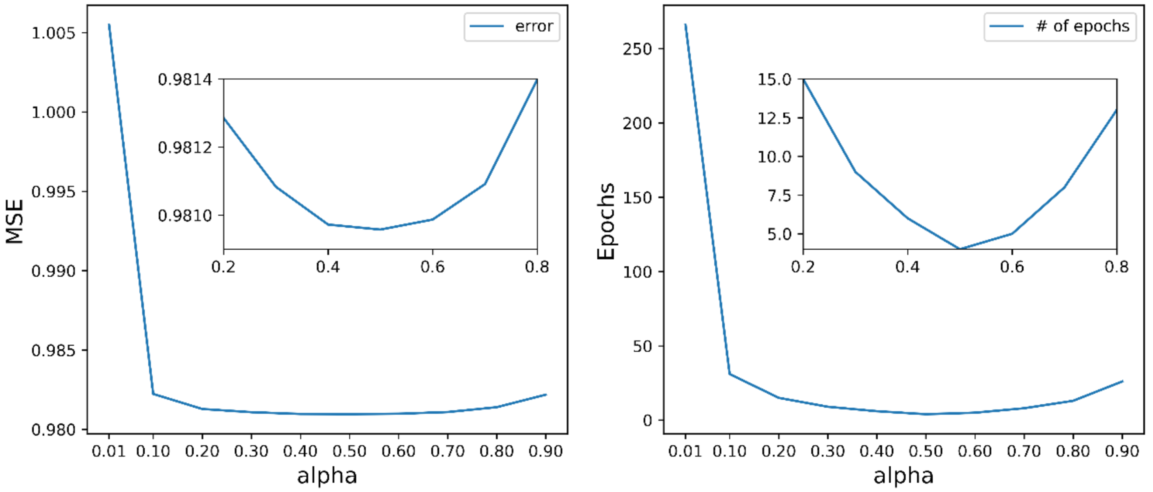
- Em geral, não é possível se calcular a priori o melhor passo de aprendizagem.
- Portanto, uma primeira abordagem para se ajustar o passo é através do **ajuste manual**, onde sua configuração é feita através de ***tentativa e erro*** (como fizemos antes) até que um passo bom o suficiente seja encontrado.
  - A desvantagem é que isso pode levar muito tempo, imagine um conjunto de treinamento com milhões de exemplos e dezenas ou até mesmo centenas de pesos a serem ajustados e você ter que esperar até que o treinamento termine para saber se um determinado passo é bom o suficiente.
- Uma forma alternativa consiste em realizar uma análise de sensibilidade do passo de aprendizagem para o modelo escolhido, também chamada de ***busca em grade*** (do Inglês, ***grid search***).
  - **Grid search** é um método de pesquisa exaustiva que faz a busca em um subconjunto do espaço de hiperparâmetros, especificado manualmente, de um algoritmo de aprendizagem.
- **Grid search** nos ajuda a encontrar uma ordem de magnitude onde podem residir bons passos de aprendizagem.
- Típicamente, uma ***busca em grade*** envolve a escolha de valores em uma escala logarítmica, por exemplo, $\{1, 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}\}$.
- Depois de escolhido, o valor do passo é sempre constante.

Exemplo: Ajuste Manual com Grid Search

```
# Define the number of examples.
N = 1000

# Features.
x1 = np.random.randn(N, 1)
x2 = np.random.randn(N, 1)

# Observable function.
y_noisy = x1 + x2 + np.random.randn(N, 1)

# Maximum number of epochs.
maxEpochs = 10000

# Logarithmic search.
alphas = [0.0001, 0.001, 0.01, 0.1, 1.0]

for i in range(0,len(alphas)):
    gd = MyGD(alphas[i], maxEpochs, [-20.0, -20.0])
    gd.fit(X, y_noisy)
    scores.append(gd.score(X, y_noisy))
    interations.append(gd.iteration)

# Fine-tuning the learning rate.
alphas = [0.01, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9]

for i in range(0,len(alphas)):
    gd = MyGD(alphas[i], maxEpochs, [-20.0, -20.0])
    gd.fit(X, y_noisy)
    scores.append(gd.score(X, y_noisy))
    interations.append(gd.iteration)
```



Ajuste fino em torno do melhor valor de α



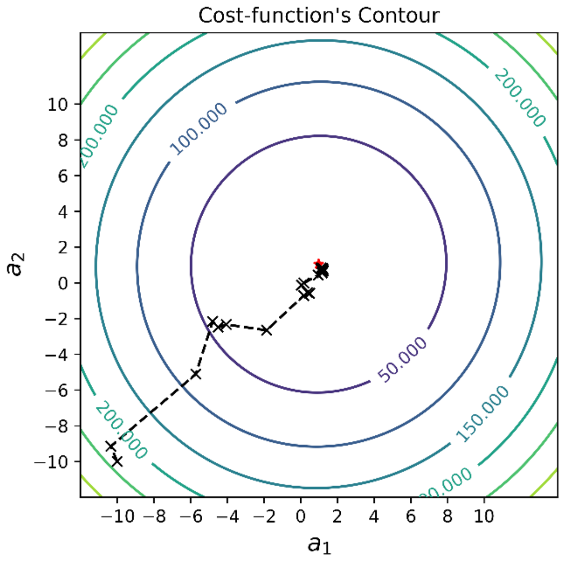
[Exemplo: linear_regression_grid_search.ipynb]

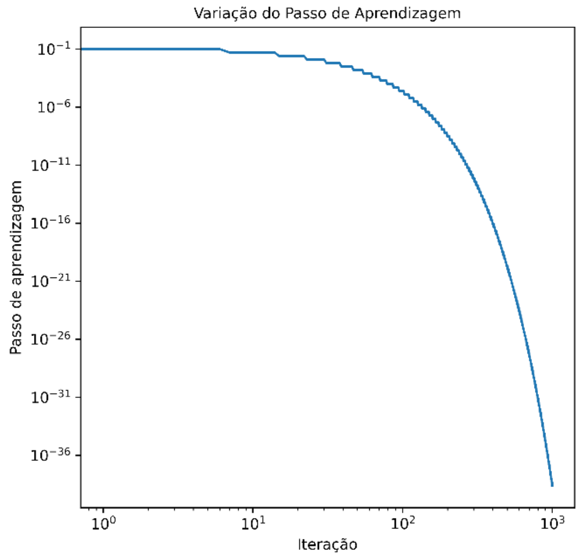
Ajuste por Redução Programada do Passo de Aprendizagem

- Os três tipos mais comuns de implementação da ***redução programada*** do passo de aprendizagem são:
  - **Decaimento gradual**: também conhecido como ***decaimento por etapas*** ou ***por degraus***. Ele reduz a taxa de aprendizagem de um fator α a cada número pré-definido de iterações ou épocas, β. Um valor típico para reduzir a taxa de aprendizado é de $\alpha = 0.5$ a cada número pré-definido de épocas.
  - **Decaimento exponencial**: tem a forma matemática $\alpha = \alpha_0 e^{-kt}$, onde α_0 e k são hiperparâmetros e t é o número da iteração (pode-se se usar também o número de épocas).
  - **Decaimento $\mathbf{1/t}$**: ou ***temporal***, tem a forma matemática $\alpha = \alpha_0/(1+kt)$ onde α_0 e k são hiperparâmetros e t é o número da iteração.
- Na prática, o ***decaimento gradual*** é o mais utilizado entre os 3, pois seus ***hiperparâmetros*** (a fração de decaimento e os intervalos de tempo para redução) são mais interpretáveis do que o hiperparâmetro k, que dita a taxa de decaimento do passo de aprendizagem.
- Existem outros esquemas de redução programada de α, mas todos são extensões de algum destes 3.

Exemplo: GDE com Redução Programada de α

```python
import numpy as np

# Define the number of examples.
N = 1000

# Generate target function.
x1 = np.random.randn(N, 1)
x2 = np.random.randn(N, 1)
y = x1 + x2 + np.random.randn(N, 1)

# Concatenate both column vectors, x1 and x2.
X = np.c_[x1, x2]

# Number of epochs.
n_epochs = 1

# Initial learning rate.
alpha_int = 0.1
# Learning schedule function.
def learning_schedule(alpha_int, t):
    drop = 0.5
    epochs_drop = 4.0
    alpha = alpha_int*math.pow(drop,math.floor((1+t)/epochs_drop))
    return alpha

a = np.random.randn(2,1)
# Stocastic gradient-descent loop.
for epoch in range(n_epochs):
 si = random.sample(range(0, N), N)
   for i in range(N):
    random_index = si[i]
    xi = X[random_index:random_index+1]
    yi = y[random_index:random_index+1]
    gradient = -2*xi.T.dot(yi - xi.dot(a))
    alpha = learning_schedule(alpha_int, epoch*N + i)
    a = a - alpha * gradient
```





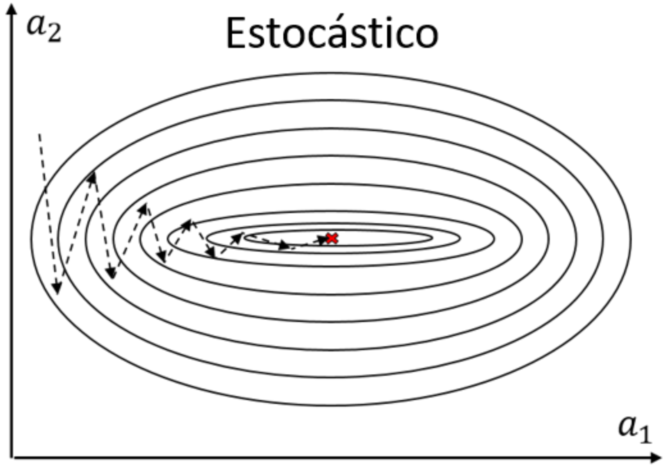
[Exemplo: stocastic_gradient_descent_with_learning_schedule_and_with_figures.ipynb]()

- Exemplo com esquema de variação do passo conhecido como "decaimento gradual"
- O caminho também não é direto/regular para o mínimo.
- Apresenta algumas mudanças de direção e sentido ao longo do caminho.
- Oscilação em torno do mínimo é bastante minimizada pelo esquema de variação do passo.
- Os passos começam com grandes valores e depois diminuem cada vez mais, permitindo que o algoritmo se estabilize próximo ao mínimo global.

Ajuste do Passo de Aprendizagem com Termo Momentum

- O GDE aproxima o gradiente com apenas um exemplo fazendo com que as derivadas parciais se tornem ”*ruidosas*”, ou seja, a direção que o algoritmo toma à caminho do mínimo varia a cada atualização dos pesos.
- Esse problema dos gradientes “*ruidosos*” é mais acentuado em superfícies que se assemelham a ***ravinas***, que são áreas onde as curvas da superfície são muito mais abruptas em uma dimensão do que em outra.
- O GDE tem problemas para caminhar em tais superfícies.
- Nessas superfícies, o GDE oscila ao longo das encostas da ***ravina*** (movimento de zig-zag), enquanto faz um progresso lento e hesitante em direção ao mínimo global, como na figura ao lado.
- Como poderíamos mitigar esse problema?
- O ***algoritmo do momentum*** é um esquema de ajuste do passo de aprendizagem, α, simples e que ajuda a acelerar a convergência do GDE e amortece as oscilações.
- O algoritmo introduz uma variável $\boldsymbol{\nu}$ que desempenha o papel da ***velocidade***, ou seja, é a direção e a rapidez com que os parâmetros se movem através do ***espaço de parâmetros***.

Gradiente Descendente Estocástico

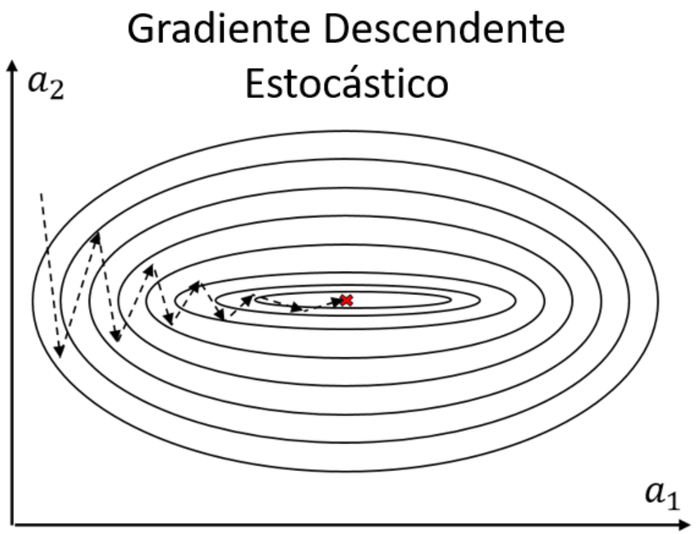


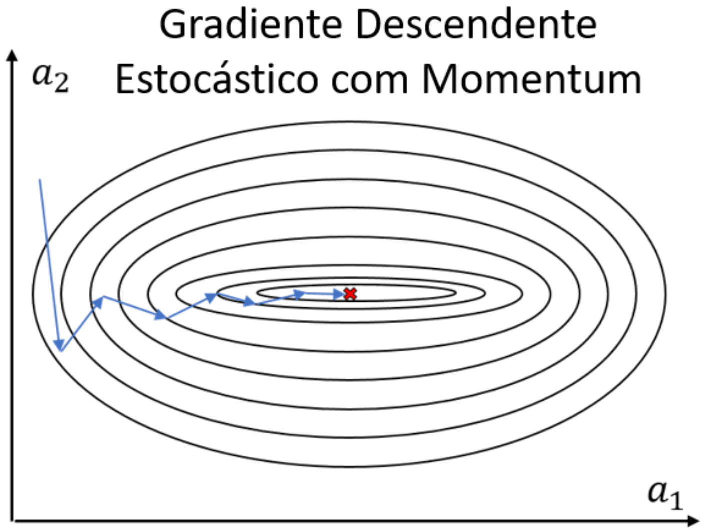
Ajuste do Passo de Aprendizagem com Termo Momentum

- O algoritmo acelera a convergência e amortece oscilações adicionando uma fração, μ (***chamado de coeficiente de momentum***), do vetor de atualização dos pesos da iteração anterior ao vetor de atualização atual:

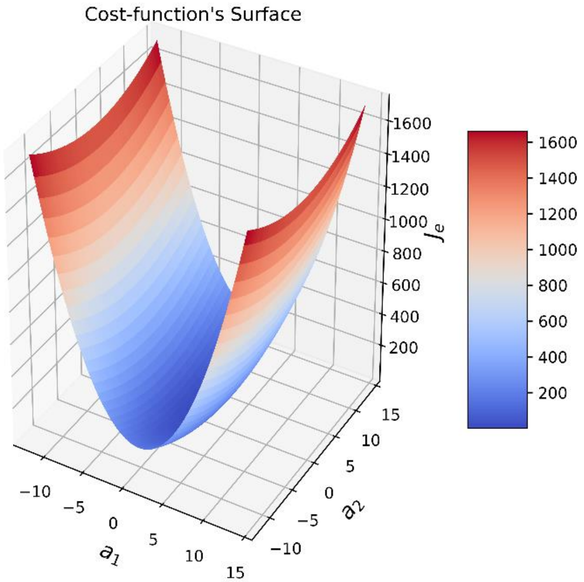
$$\boldsymbol{v} \leftarrow \mu\boldsymbol{v} - \alpha \frac{\partial (y - \hat{y})^2}{\partial \boldsymbol{a}}$$
$$\boldsymbol{a} \leftarrow \boldsymbol{a} + \boldsymbol{v}$$

- Quanto maior for o valor de μ, maior será a influência de gradientes anteriores na direção atual.
- O algoritmo acumula uma ***média móvel exponencialmente decrescente de gradientes anteriores*** e, portanto, pode fornecer uma estimativa melhor, que está mais próxima da derivada parcial real do que os cálculos "*ruidosos*".
- Ao analisarmos a equação de atualização dos pesos, vemos que a variável $\boldsymbol{v}$ faz com que a atualização seja maior para dimensões cujos gradientes apontam nas mesmas direções e reduz atualizações para dimensões cujos gradientes mudam de direção. Como resultado, temos convergência mais rápida e oscilação reduzida.

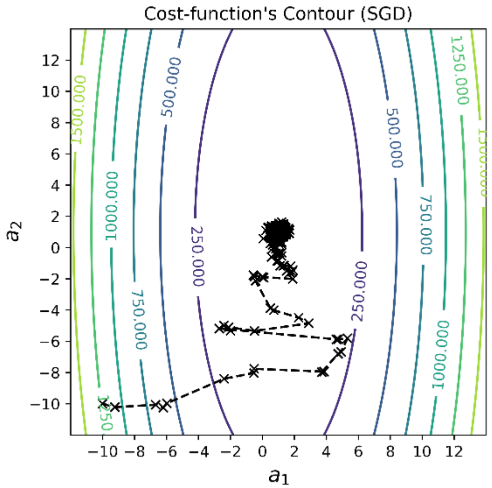


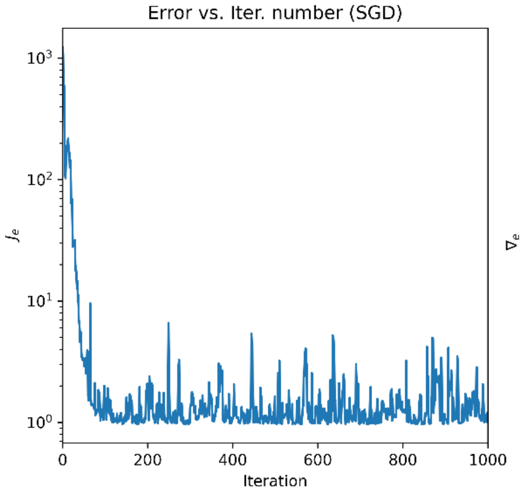


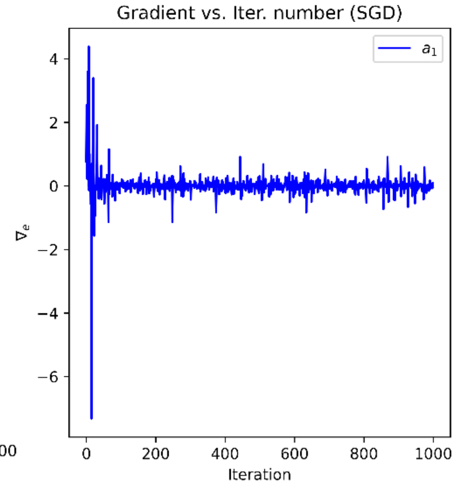
Exemplo: GDE com Termo Momentum

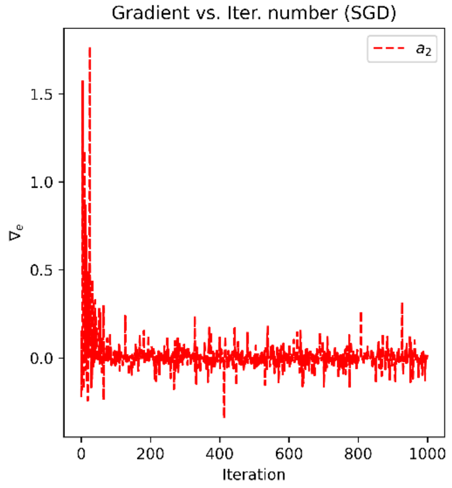


$$\alpha = 0.02$$

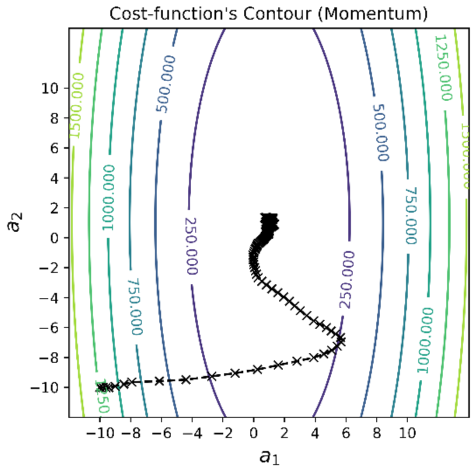


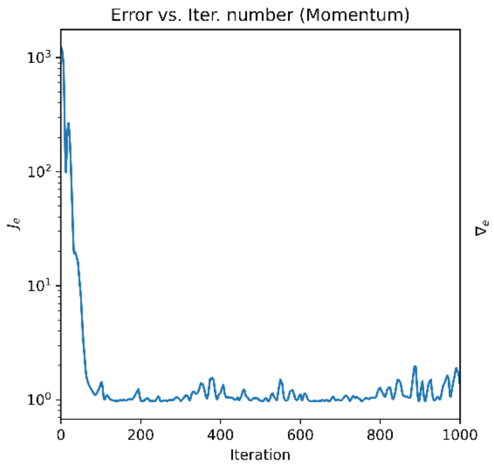


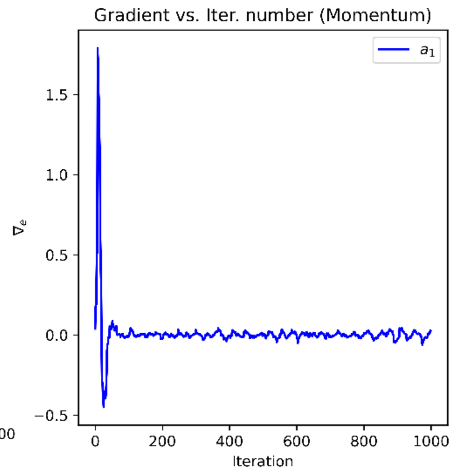


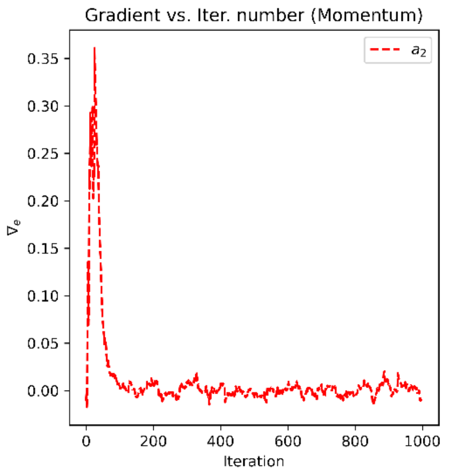


$$\alpha = 0.001, \mu = 0.9$$









Função observável

```
x1 = 3.0 * randn(N, 1)
x2 = randn(N, 1)
y = x1 + x2 + randn(N,1)
```

Exemplo: stocastic_gradient_descent_with_momentum.ipynb

Ajuste do Passo de Aprendizagem por Variação Adaptativa

- Na **variação adaptativa**, o passo é adaptativamente ajustado de acordo com a performance do modelo além disso, pode ter passos diferentes para cada peso do modelo e os atualiza independentemente.
  - Os passos são atualizados de acordo com valores obtidos pelo modelo
    - Por exemplo, enquanto o desempenho estiver aumentando, o passo é mantido constante. Quando o desempenho se estabiliza, diminui-se o passo. Alternativamente, o passo de aprendizagem pode ser aumentado se o desempenho não melhorar por um número fixo de iterações.
  - Na maioria dos casos, não é necessário se ajustar manualmente nenhum hiperparâmetro como no caso dos esquemas de redução programada.
  - E quando existe algum hiperparâmetro a ser ajustado o esquema normalmente funciona muito bem para uma grande gama de valores.
  - **Exemplos**: Adam, Adagrad, RMSprop, etc.

Implementação: GDE com Scikit-Learn

- A biblioteca ***Scikit Learn*** disponibiliza a classe ***SGDRegressor*** para realizar regressão linear utilizando o Gradiente Descendente Estocástico.
- A classe possui vários parâmetros que podem ser configurados (tipo de função de erro, esquema de variação do passo de aprendizagem, etc.).
- A ***função de erro*** pode ser configurada entre várias opções, mas por padrão, a classe usa o **erro quadrático médio.**
- É possível definir o **esquema de variação do passo de aprendizagem**: constante, redução programada ou adaptativo.
- Por padrão o esquema é o da escala inversa, "***invscaling***"

$$\alpha = \frac{\alpha_{init}}{i^{power}},$$

- Onde α_{init} é o passo inicial (por padrão = 0.01), i é o número da iteração e $power$ é o expoente da escala inversa (por padrão = 0.25).
- Os outros tipos de GD não são implementados pela biblioteca.

```python
import numpy as np

# Usamos a classe SGDRegressor do módulo Linear da biblioteca sklearn.
from sklearn.linear_model import SGDRegressor

# Número de exemplos
N = 1000

# Criamos os features e labels.
x1 = np.random.randn(N, 1)
x2 = np.random.randn(N, 1)
y = 2*x1 + 4*x2 + np.random.randn(N, 1)

# Concatena os vetores coluna x1 e x2.
X = np.c_[x1, x2]

# Instancia a classe SGDRegressor.
sgd_reg = SGDRegressor(max_iter=50, fit_intercept=False)
# Treina o modelo.
sgd_reg.fit(X, y.ravel())

print('a1: %1.4f' % (sgd_reg.coef_[0]))
print('a2: %1.4f' % (sgd_reg.coef_[1]))
```

```
a1: 1.9844
a2: 3.9802
```

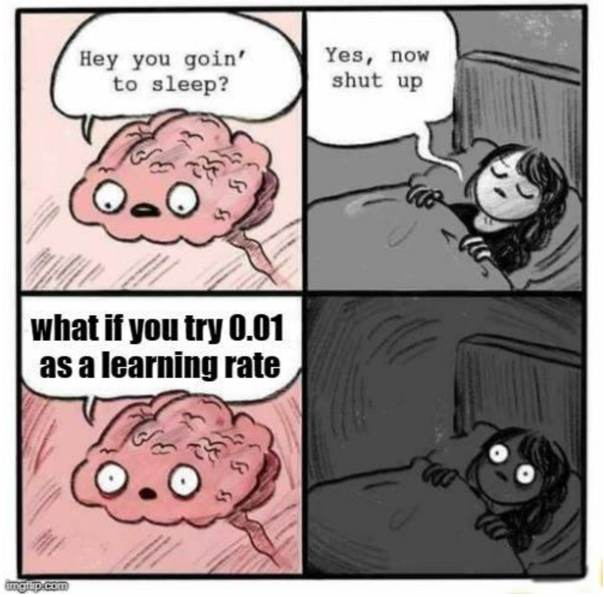
scikit learn

[Exemplo: SGD_with_scikit_learn_lib.ipynb]

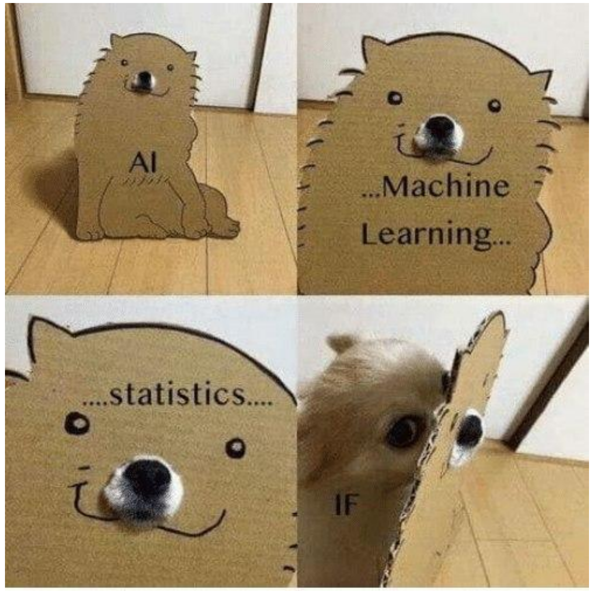
Tarefas

- **Quiz**: *“T319 - Quiz - Regressão: Parte IV (1S2021)”* que se encontra no MS Teams.
- **Exercícios 2 e 3 do Laboratório #4.**
  - Pode ser baixado do MS Teams ou do GitHub.
  - Pode ser respondido através do link acima (na nuvem) ou localmente.
  - Instruções para resolução e entrega dos laboratórios.

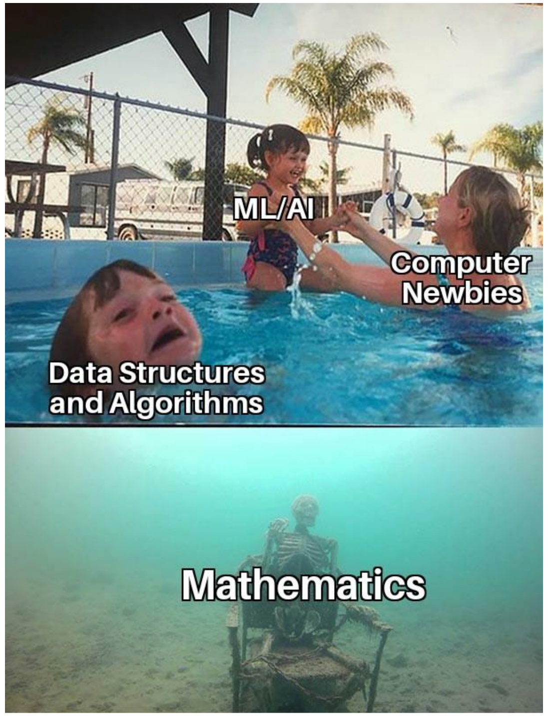
Obrigado!



When someone asks why you never stops talking about machine learning

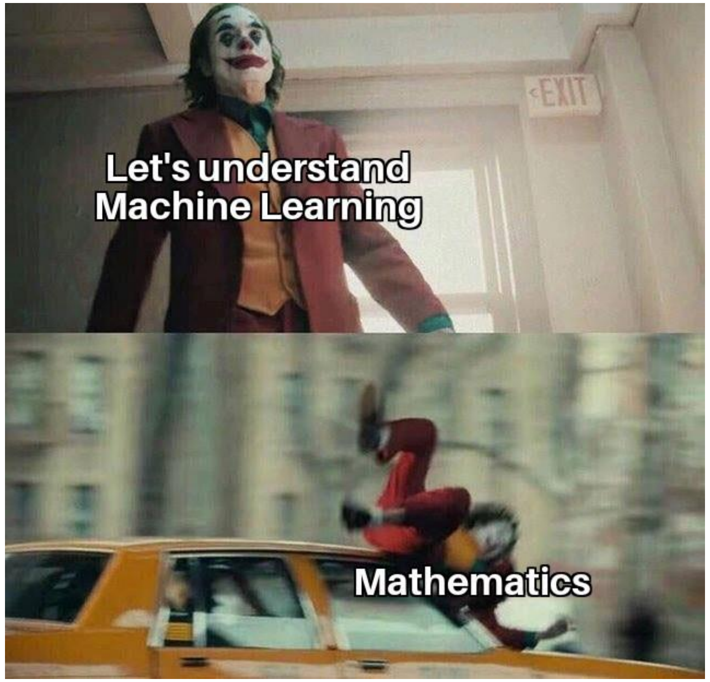


IF IF IF IF IF IF IF IF IF WE!

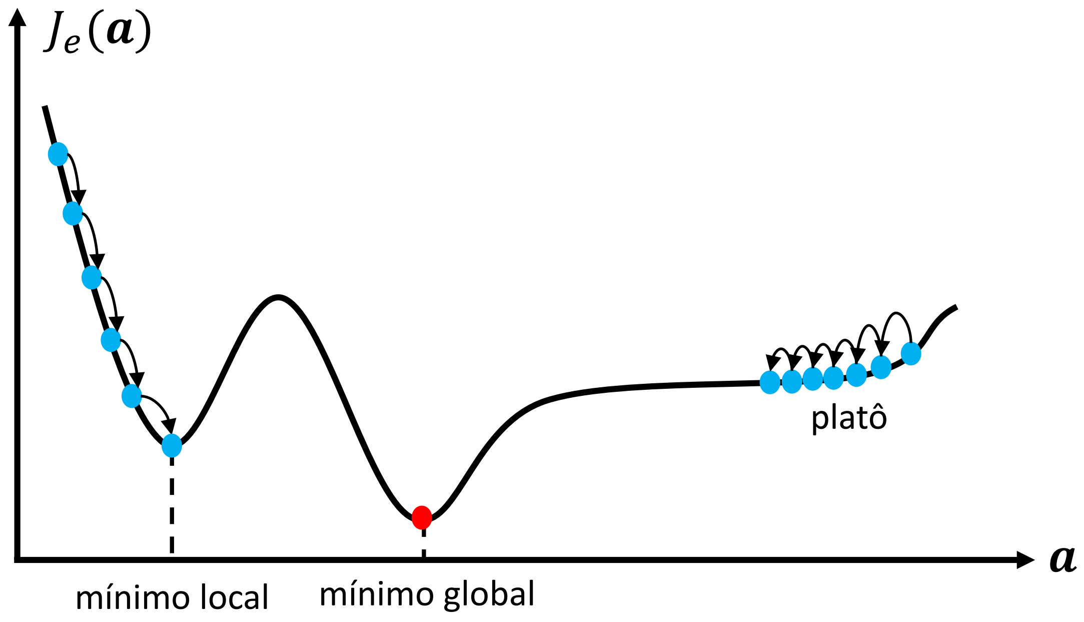


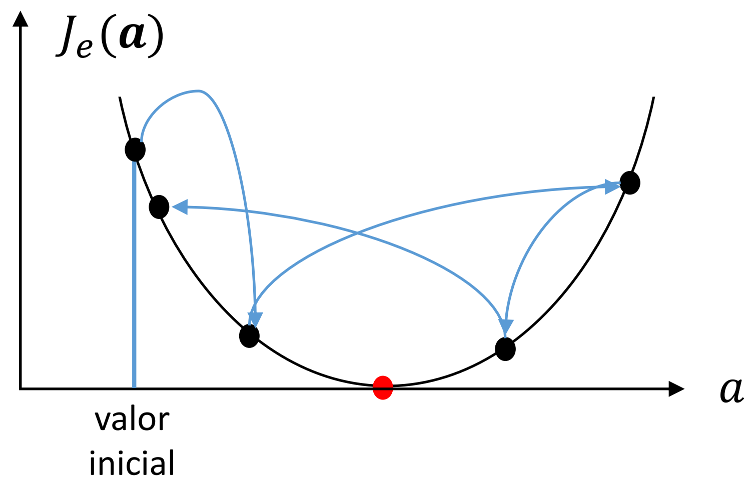
Albert Einstein: Insanity Is Doing the Same Thing Over and Over Again and Expecting Different Results

Machine learning:

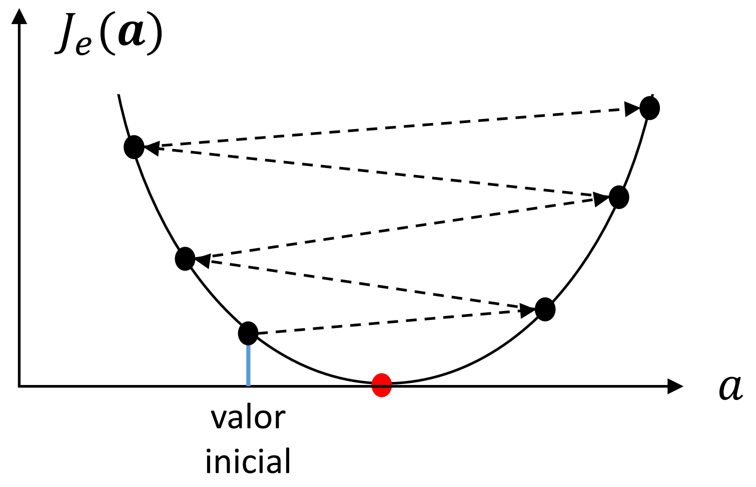


FIGURAS

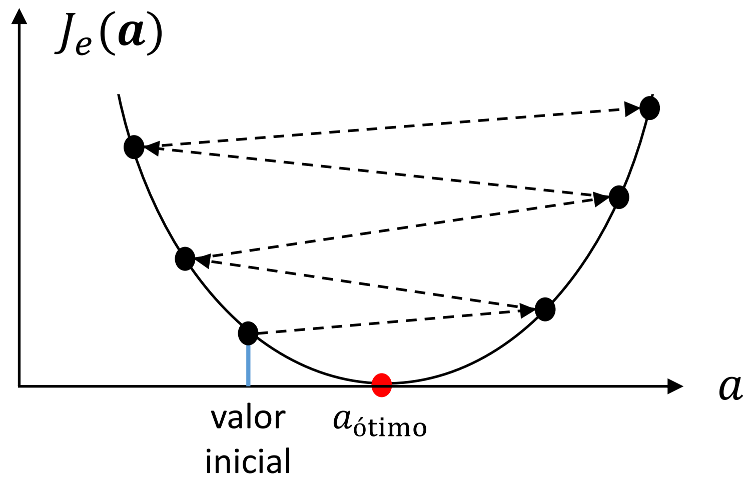

$J_e(\boldsymbol{a})$
$\boldsymbol{a}$
mínimo local
mínimo global
platô

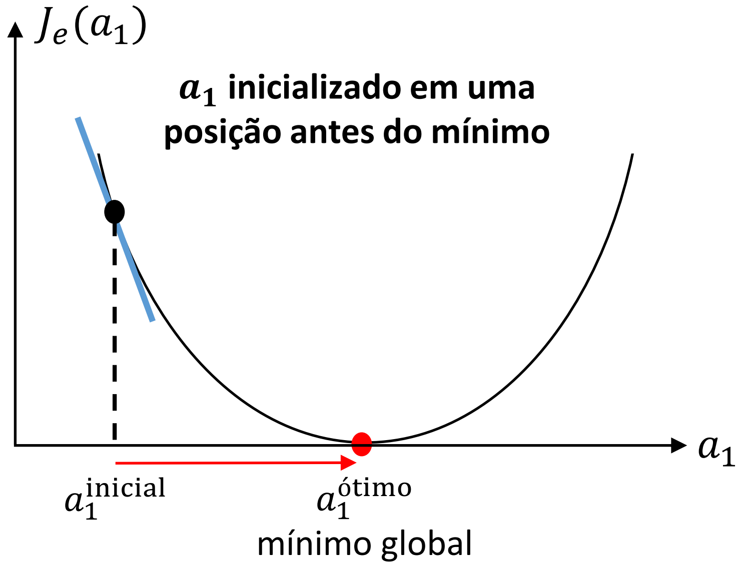


$J_e(\boldsymbol{a})$
a
valor inicial



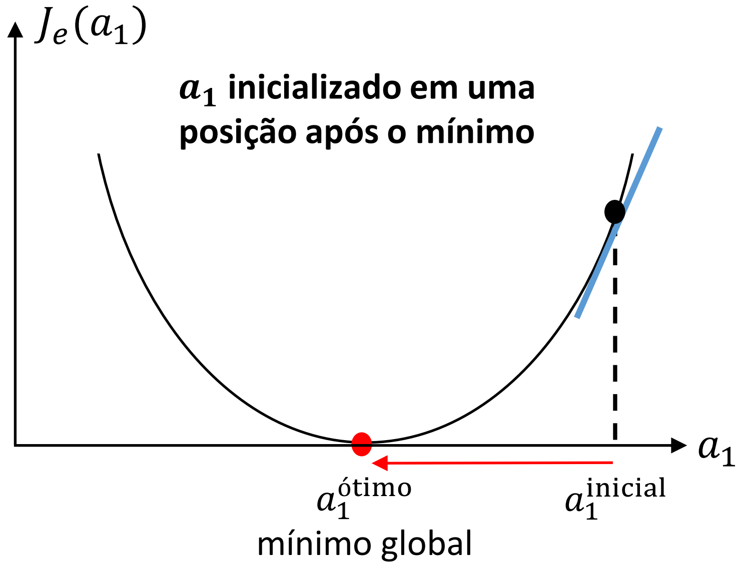
$J_e(\boldsymbol{a})$
a
valor inicial


$J_e(\boldsymbol{a})$
a
valor inicial
$a_{\text{ótimo}}$



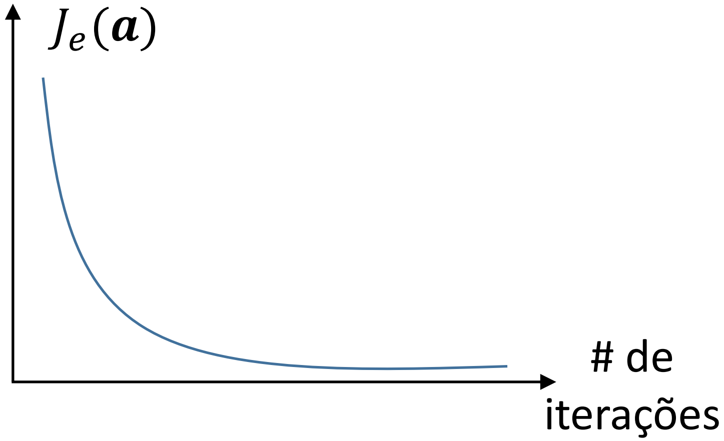
gradiente negativo: $a_1 = a_1^{\text{inicial}} + \alpha \nabla J_e(a_1)$

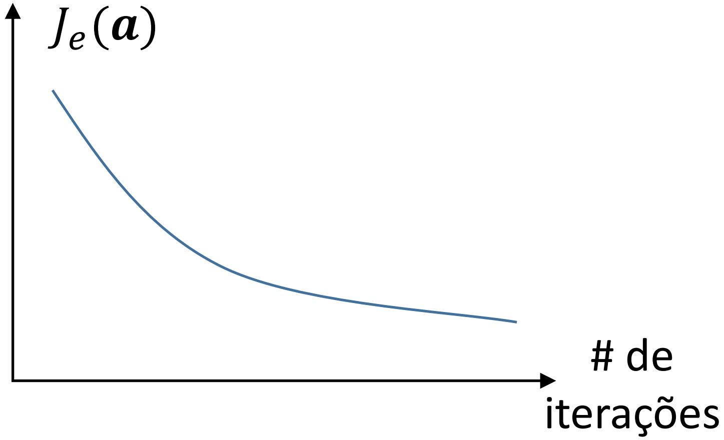
a_1 aumenta e se aproxima do mínimo

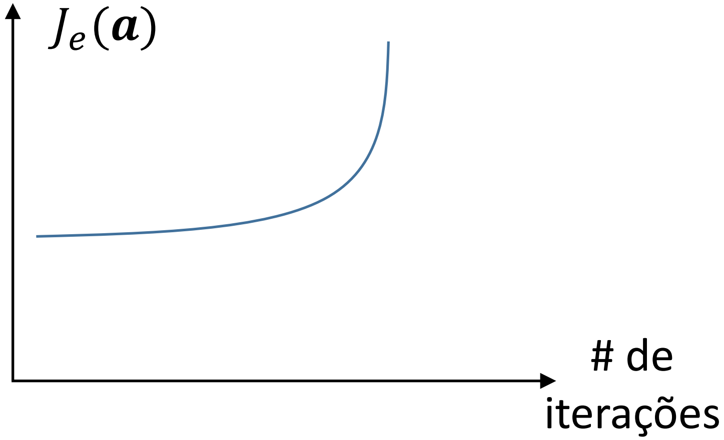


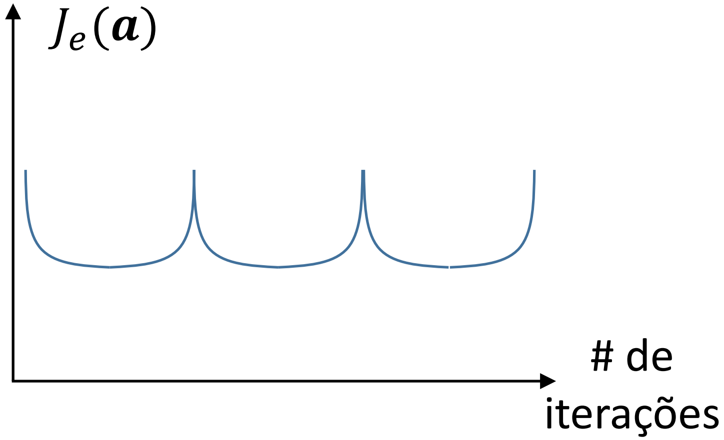
gradiente positivo: $a_1 = a_1^{\text{inicial}} - \alpha \nabla J_e(a_1)$

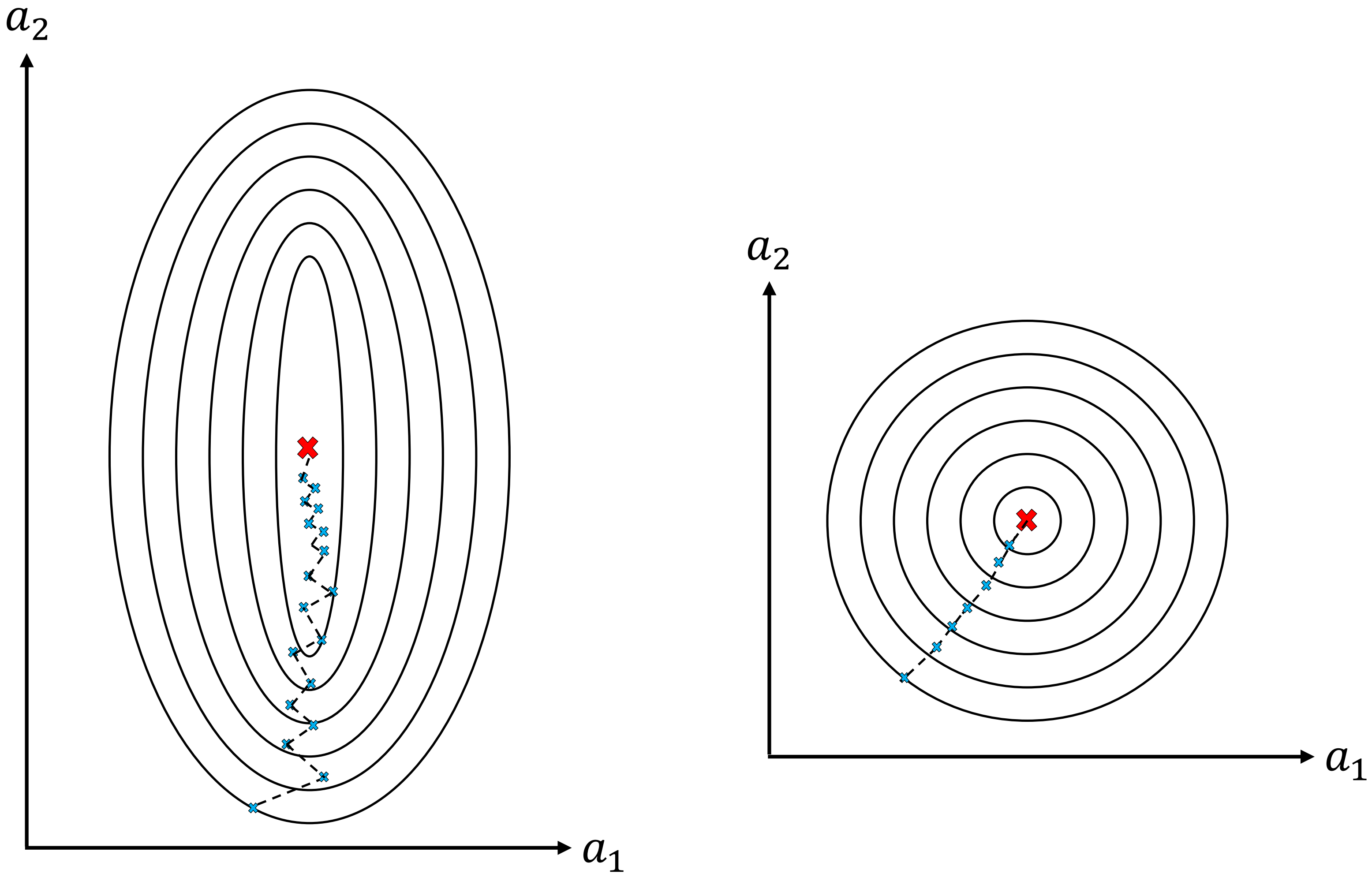
a_1 diminiu e se aproxima do mínimo


$J_e(\boldsymbol{a})$
de iterações

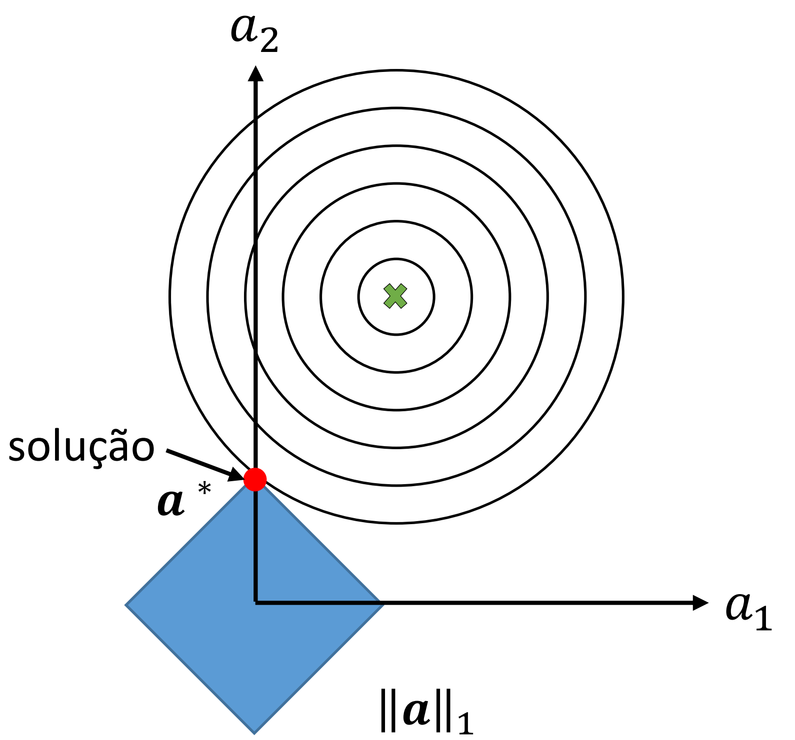

$J_e(\boldsymbol{a})$
de iterações


$J_e(\boldsymbol{a})$
de iterações

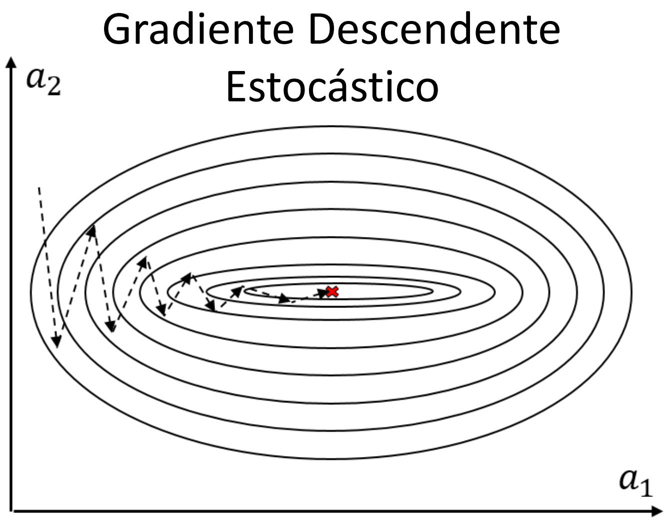

$J_e(\boldsymbol{a})$
de iterações

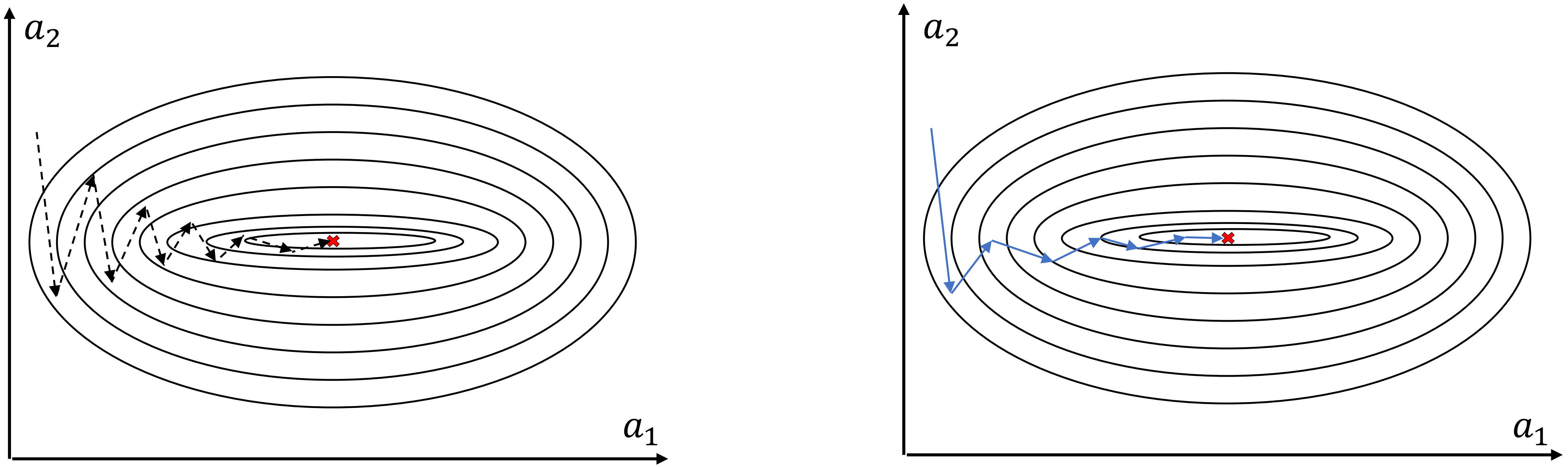


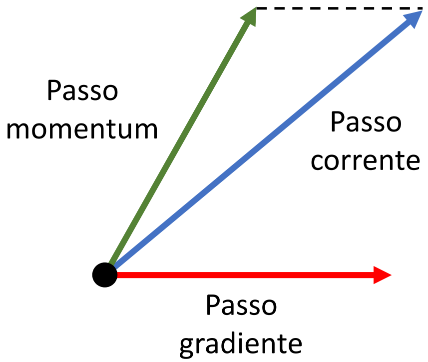
a_2
a_1
a_2
a_1



a_2
a_1
solução
$\boldsymbol{a}^*$
$\|\boldsymbol{a}\|_1$
a_2
a_1
solução
$\boldsymbol{a}^*$
$\|\boldsymbol{a}\|_2^2$


Gradiente Descendente
Estocástico
a_2
a_1


a_2
a_1
a_2
a_1


Passo
momentum
Passo
corrente
Passo
gradiente


THE RAVINE