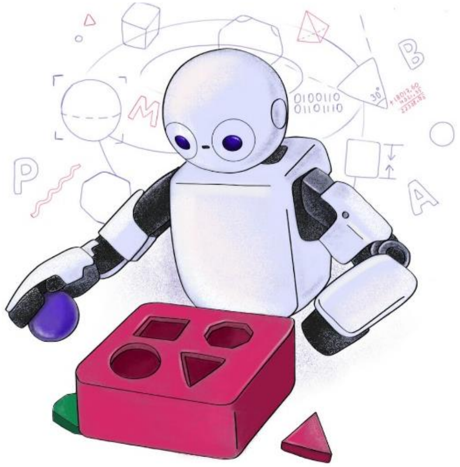
T319 - Introdução ao Aprendizado de Máquina: *Regressão Linear (Parte III)*



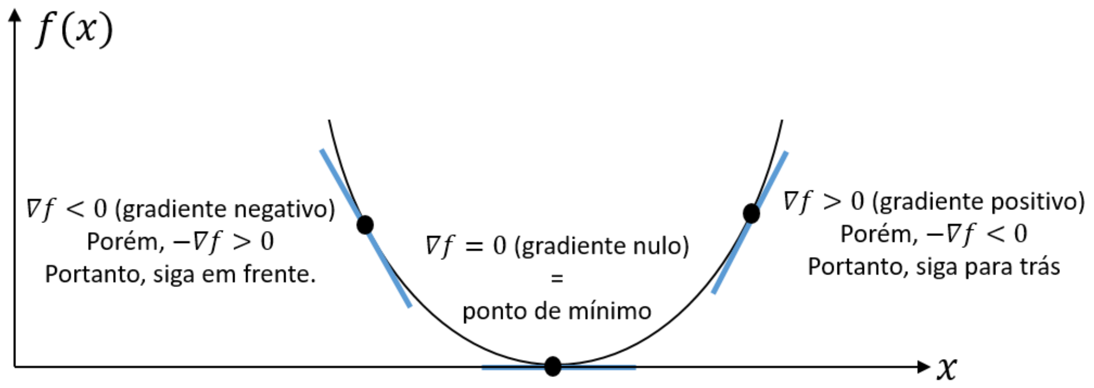
Felipe Augusto Pereira de Figueiredo
felipe.figueiredo@inatel.br

Inatel

Recapitulando

- No tópico anterior, falamos sobre 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 antes, 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

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

- Portanto, para ***andarmos na direção apontada pelo vetor gradiente***, usamos uma ***porcentagem*** do seu valor.
- Essa porcentagem é dada pelo ***passo de aprendizagem***, α, que é sempre um valor maior do que zero.

Escolha do passo de aprendizagem

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

- 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***.
- ***Porém, qual deve ser o tamanho desse passo?***

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***):

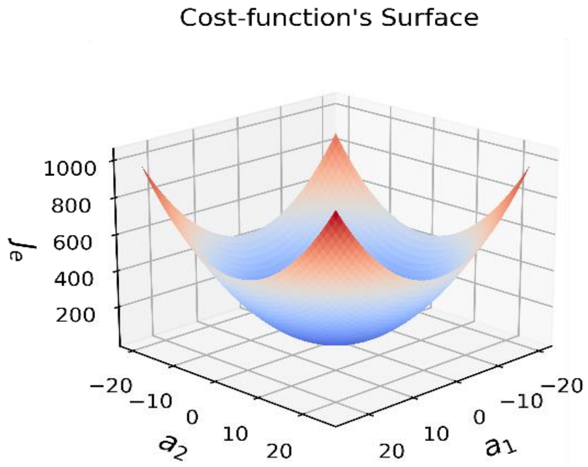
$$\ldots, 0.001, 0.003, 0.01, 0.03, 0.1, 0.3, 1.0, \ldots$$

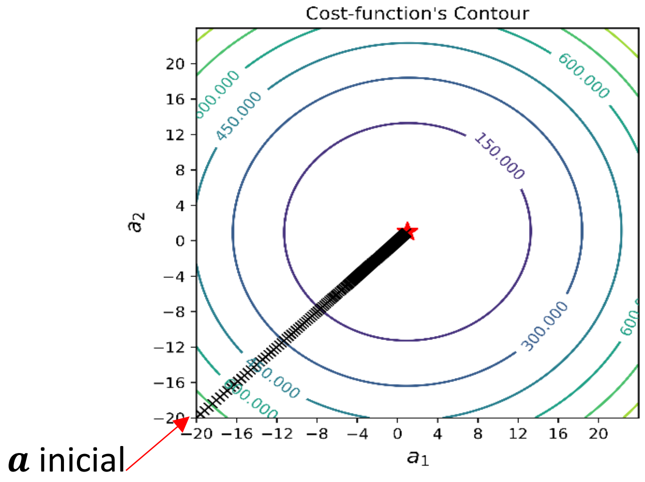
$3\times$ $\approx 3\times$ $3\times$ $\approx 3\times$ $3\times$ $\approx 3\times$

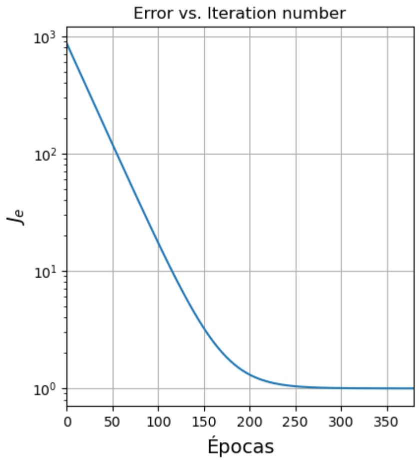
Exemplo: selecionando_o_passo_de_aprendizagem.ipynb

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***.

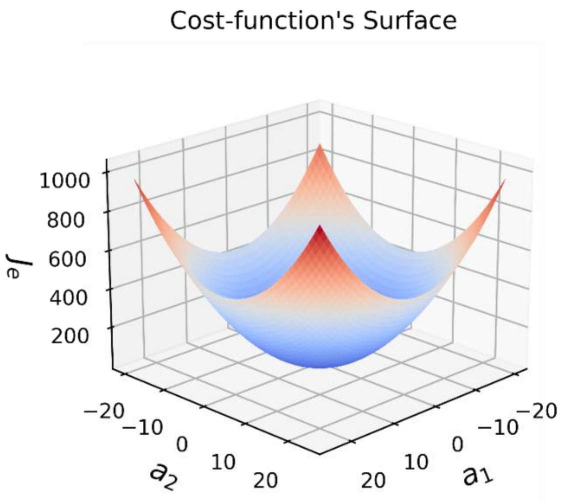


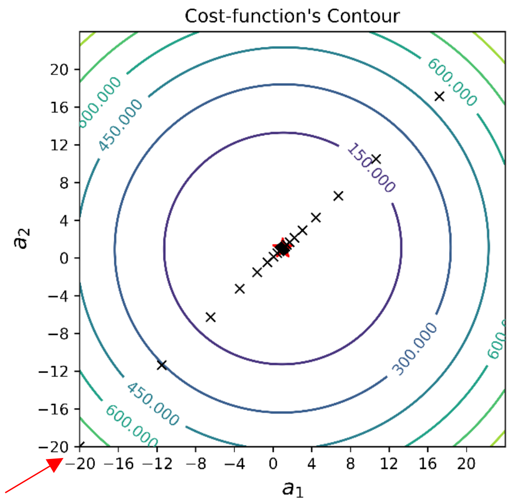




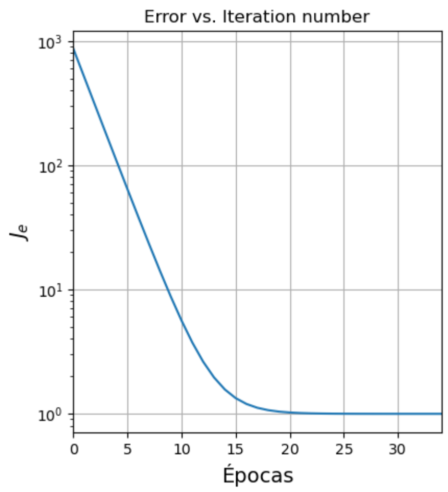
Passo de aprendizado grande

- 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.



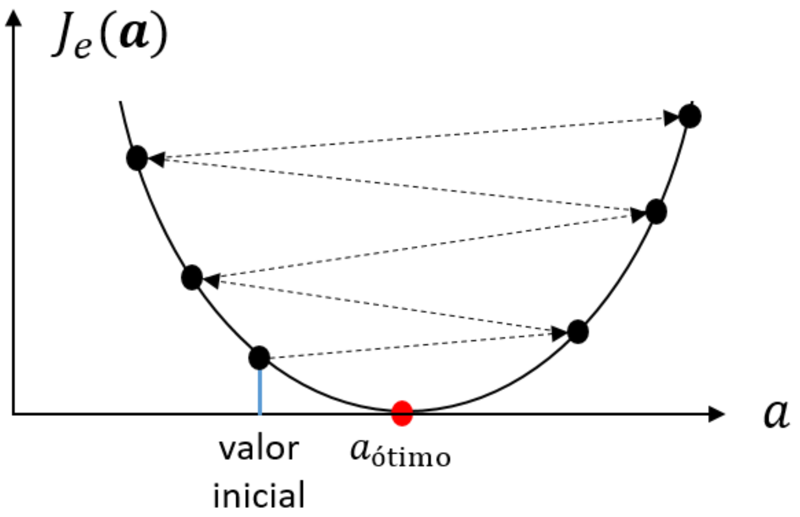


$\boldsymbol{a}$ inicial



Passo de aprendizado grande

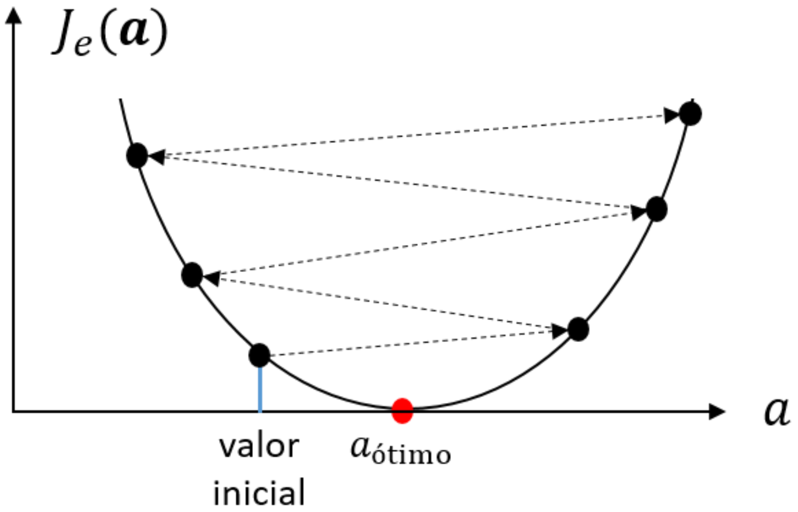
feedback positivo → estouro da precisão numérica



- 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

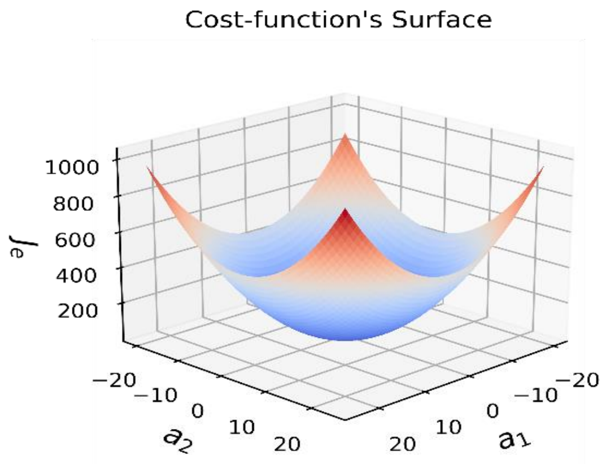
feedback positivo → estouro da precisão numérica

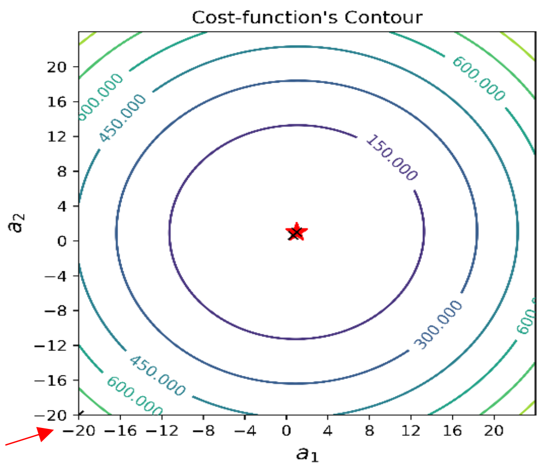


- Nesse caso ocorre um ***ciclo de feedback positivo*** onde ***a cada época*** os valores dos ***gradientes*** e, consequentemente, dos ***pesos se tornam maiores e maiores*** até que ocorra o ***estouro da representação numérica***.
    - Problema que ocorre quando uma variável não pode mais representar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

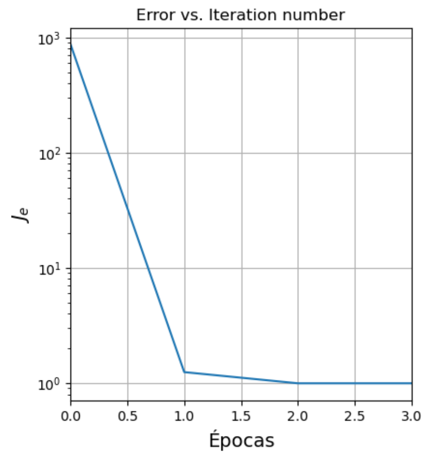
Passo de aprendizado ideal

- 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.

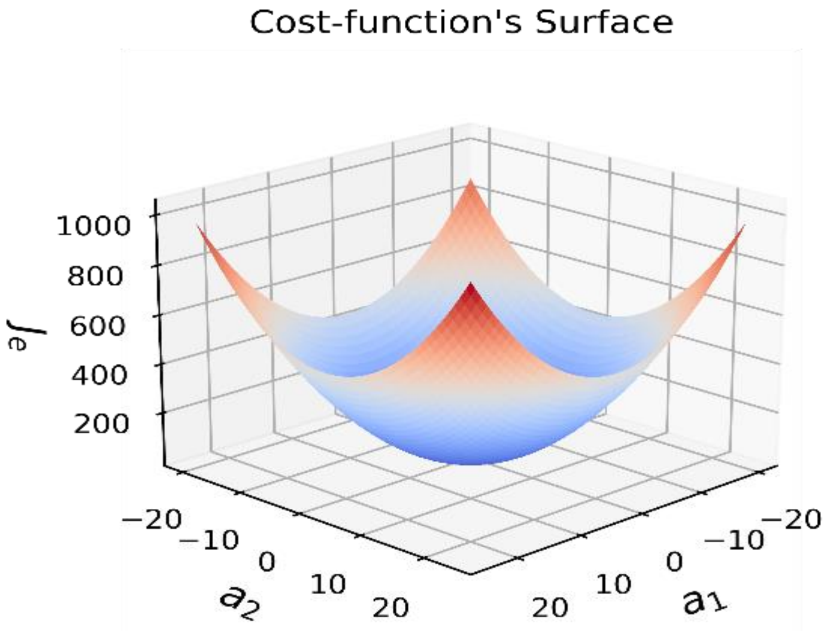




$\boldsymbol{a}$
inicial

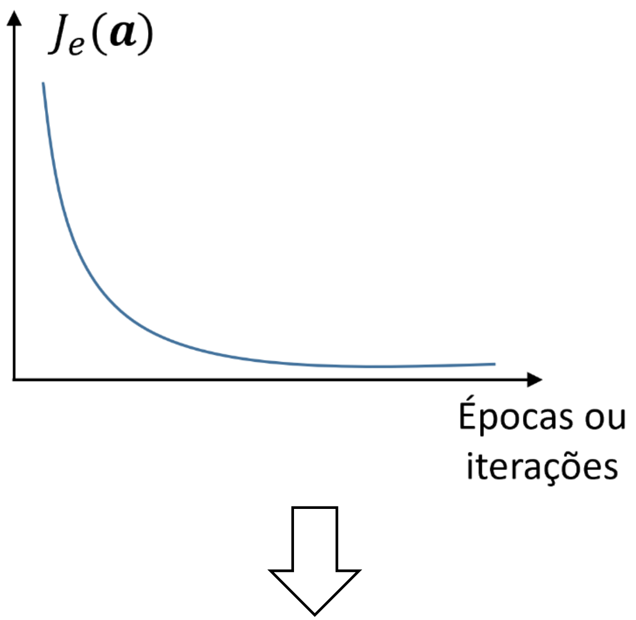


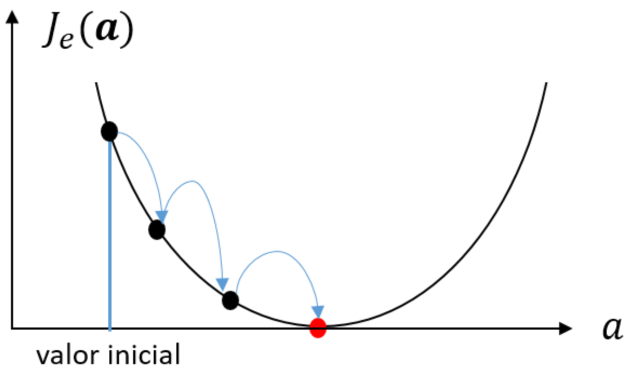
Analisando o treinamento de um modelo



- ***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 iterações*** de treinamento para analisar o aprendizado de um modelo.

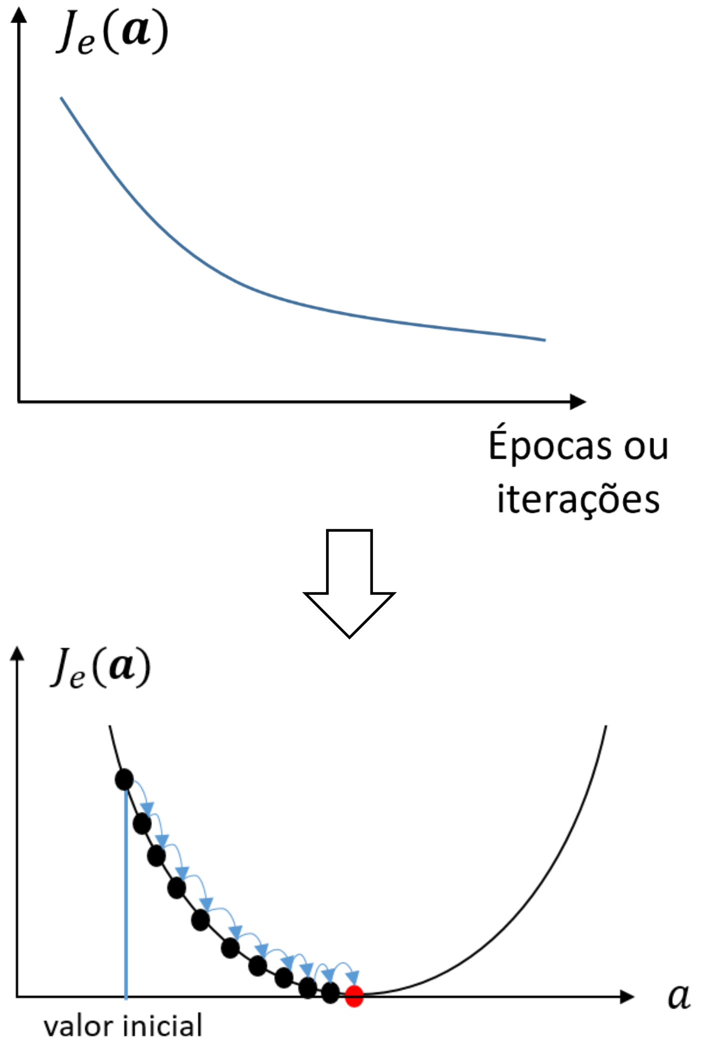
Analisando o treinamento de um modelo





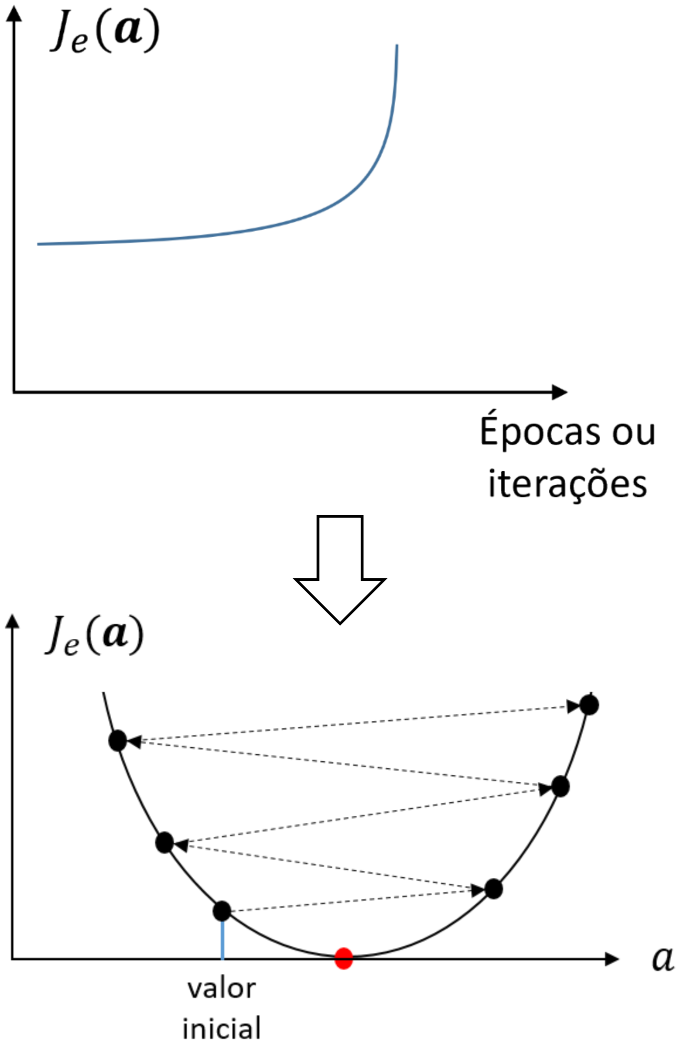
- A figura ao lado mostra o ***comportamento esperado*** quando o ***passo tem o tamanho ideal***.
- A ***convergência*** nesse caso é ***rápida***.
  - O ***erro diminui rapidamente nas primeiras épocas*** (ou iterações).
  - Conforme o treinamento continua, o ***erro se estabiliza e exibe uma redução 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.
  - Por exemplo, o treinamento pode ser encerrado quando o erro entre duas épocas consecutivas for menor do que um valor pré-definido (e.g., 1e-5).

Analisando o treinamento de um modelo



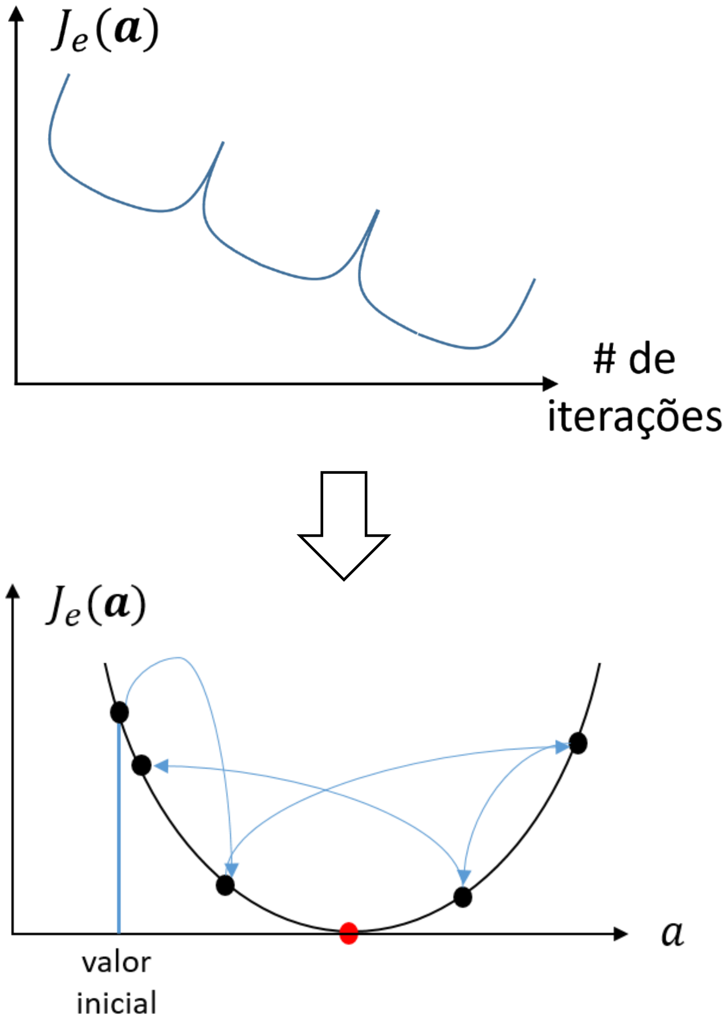
- A figura mostra o caso onde o ***passo de aprendizagem é muito pequeno***.
- Nesse caso, a ***convergência é muito lenta***.
- ***Após várias épocas*** de treinamento, o ***erro ainda não se estabilizou***.
- Levaria ***muito tempo*** para que o modelo atingisse o ***ponto de mínimo***.

Analisando o treinamento de um modelo



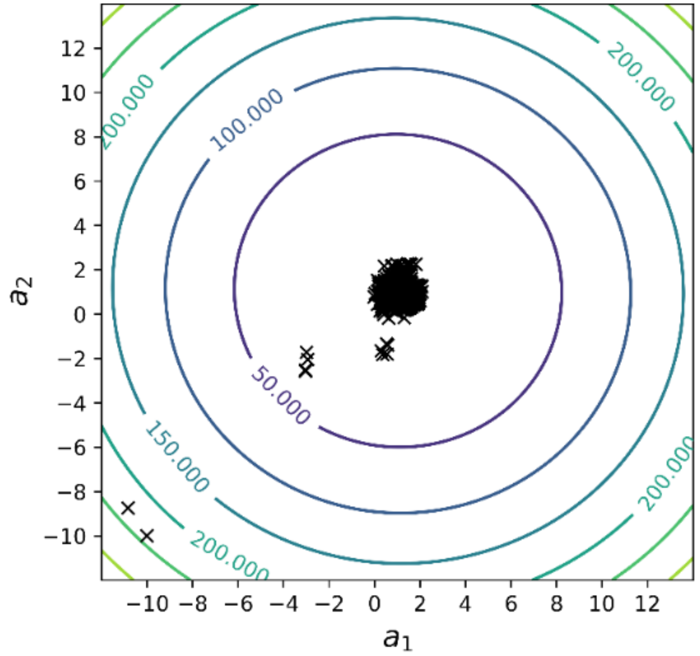
- A figura mostra o caso onde o ***passo de aprendizagem é muito grande***.
- Nesse caso, ocorre ***divergência***.
- Ou seja, o ***erro aumenta mais e mais ao longo do treinamento***, indicando que o algoritmo está se ***distanciando do ponto de mínimo***.
- Se o treinamento continuar, os gradientes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

Analisando 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***, aumentando e diminuindo.
- Por ventura, a ***convergência pode ocorrer após algumas épocas***.

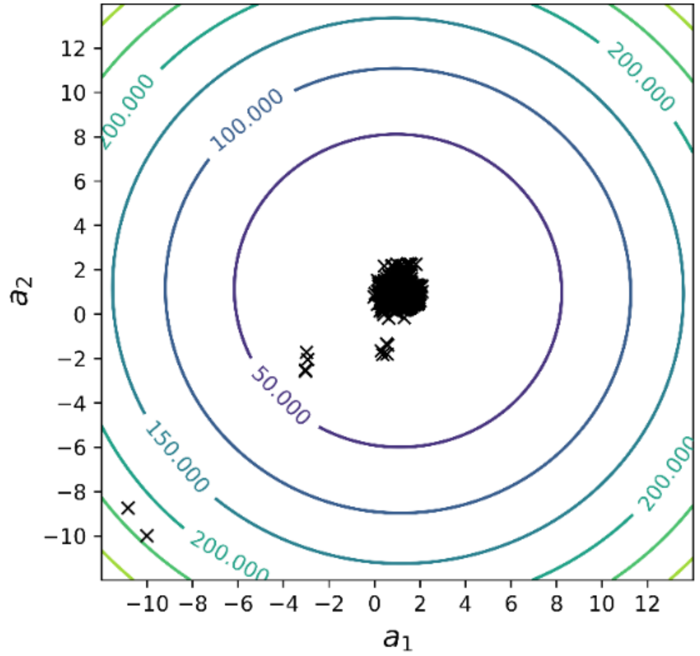
Melhorando a convergência das versões estocásticas



Gradiente descendente estocástico (SGD)

- As versões estocásticas do GD, i.e., SGD e mini-*batch* (principalmente quando MB é pequeno), são mais rápidas e menos complexas computacionalmente que o GDB.
- Porém, elas têm um ***caminho irregular para o ponto de mínimo***.
  - Devido à estimativa do vetor gradiente.
- Além disso, quando as ***amostras*** do conjunto de treinamento estão ***contaminadas com ruido***, eles ***podem não convergir*** para o mínimo (i.e., oscilam ao redor dele).

Melhorando a convergência das versões estocásticas



Gradiente descendente estocástico (SGD)

- 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***.

$$\boldsymbol{a}(i+1) = \boldsymbol{a}(i) - \boxed{\alpha(i)} \nabla \widehat{J_e}\,(\boldsymbol{a}(i)),$$

onde i é número da iteração de atualização atual e $\nabla \widehat{J_e}\,(\boldsymbol{a}(i))$ 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 de forma que haja a convergência.
- Veremos a seguir 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:
  - **Decaimento 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.
  - **Decaimento 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.
  - **Decaimento temporal**: é dado pela equação $\alpha(i) = {}^{\alpha_0}/_{(1+ki)}$ onde α_0, k e i têm 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***, $\boldsymbol{v}$, à equação de atualização dos pesos, ***tornando as atualizações menos ruidosas***, e, consequentemente, ***acelerando a convergência*** do algoritmo.

$$\boldsymbol{v}(i) = \mu\boldsymbol{v}(i-1) + (1-\mu)\nabla\widehat{J_e}\left(\boldsymbol{a}(i)\right),$$
$$\boldsymbol{a}(i+1) = \boldsymbol{a}(i) - \alpha\boldsymbol{v}(i).$$

onde $\nabla\widehat{J_e}\left(\boldsymbol{a}(i)\right)$ 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.

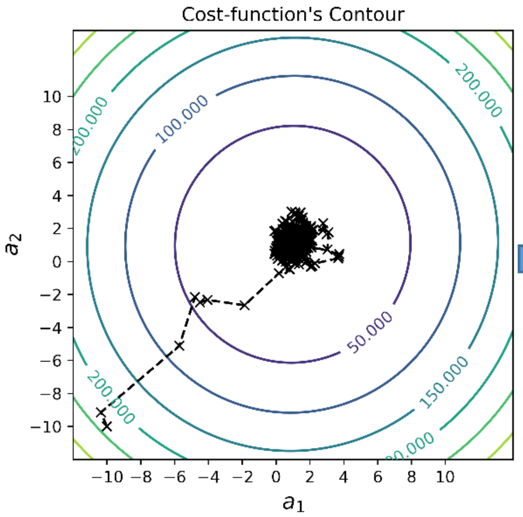
- Em geral, o passo de aprendizagem é constante, mas pode decair também.
- A ***desvantagem*** é que nós precisamos encontrar as valores ideais dos ***hiperparâmetros*** α e μ.

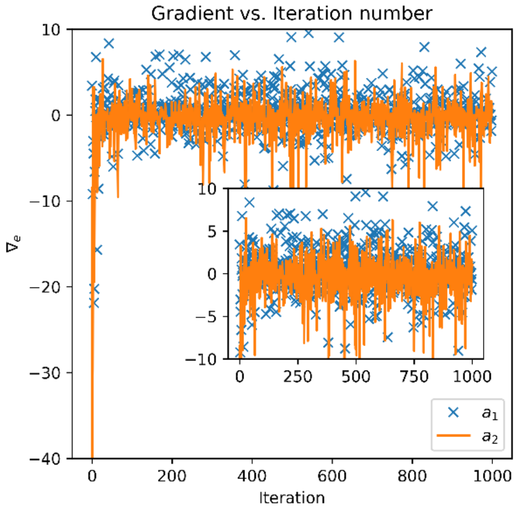
Ajuste dos pesos e de seu termo de atualização

- Na ***variação adaptativa***, o passo de aprendizagem é ***ajustado adaptativamente*** de acordo com a ***inclinação da superfície de erro***.
- 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 do termo momentum.
- As técnicas mais conhecidas são RMSProp, AdaGrad e Adam.

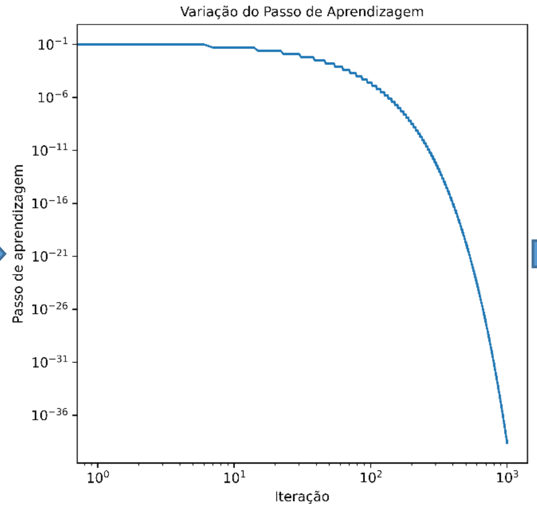
Exemplo de redução programada com GDE

Sem redução gradual



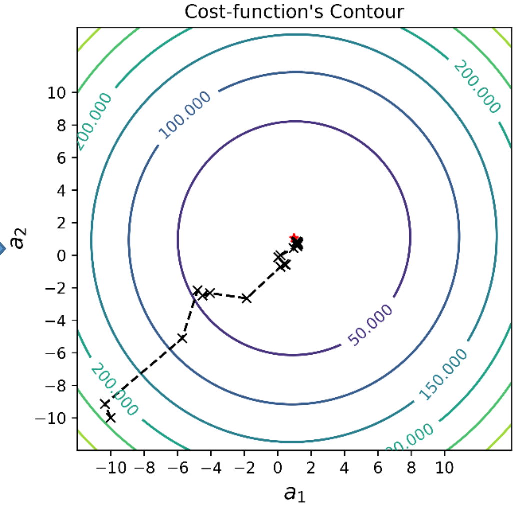


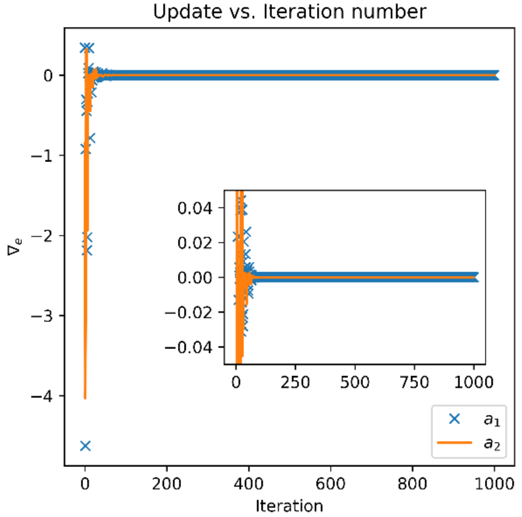
Redução gradual por degraus




```python
# 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
```

Com redução gradual



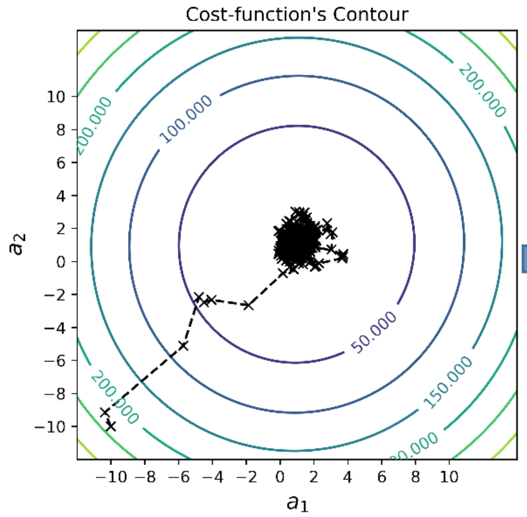


- O caminho com ***decaimento gradual*** também não é regular para o ponto de mínimo.
- Ele apresenta ***algumas mudanças de direção*** ao longo do caminho.
- O passo não influencia na direção, apenas no tamanho do deslocamento.

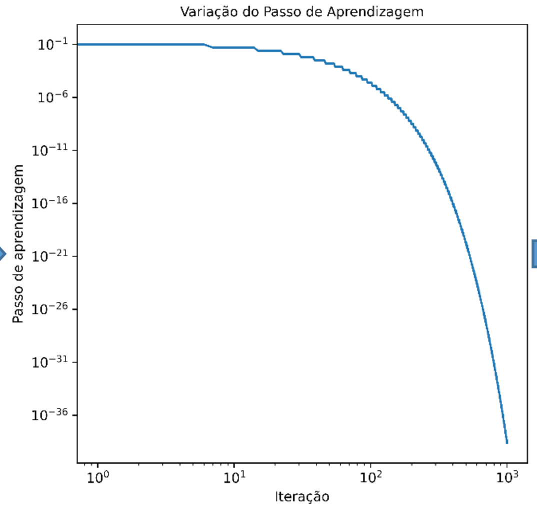
Exemplo: gde_com_redução_gradual.ipynb

Exemplo de redução programada com GDE

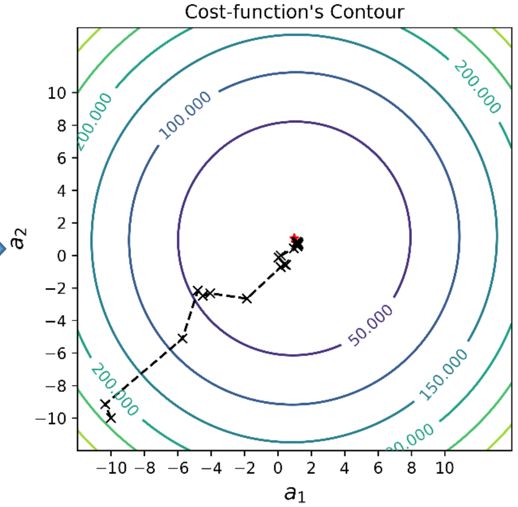
Sem redução gradual

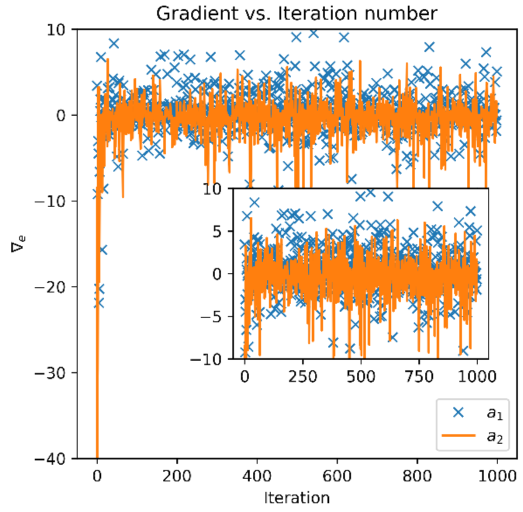


Redução gradual por degraus

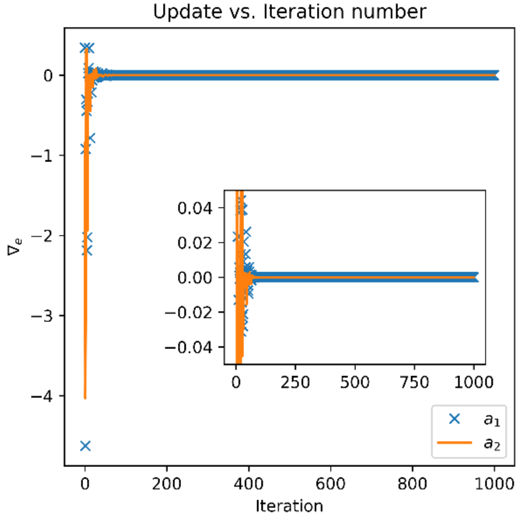


Com redução gradual





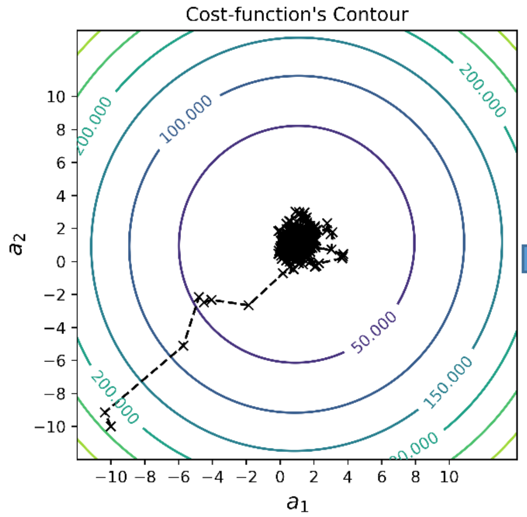

```
# learning schedule: Gradual decay.
def stepDecay(alpha_init, t, beta=6.0, drop=0.5):
    '''Gradual decay.'''
    alpha = alpha_init * math.pow(drop, math.floor((1+t)/beta))
    return alpha
```

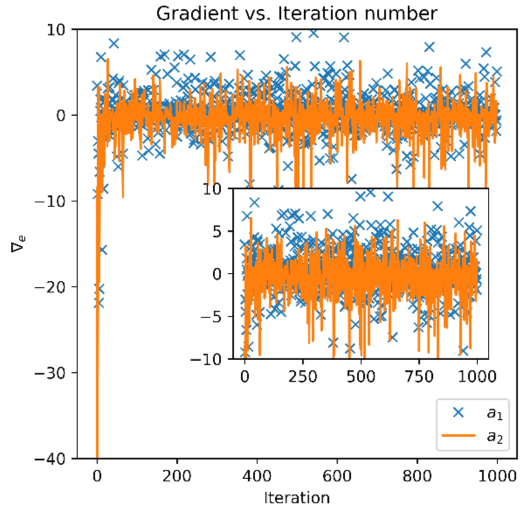


- Porém, a ***oscilação em torno do mínimo é bastante reduzida*** devido à ***diminuição gradual*** do passo de aprendizagem, α.
- Conseguimos observar o efeito da redução de α nas figuras que mostram os elementos do vetor gradiente e de atualização.

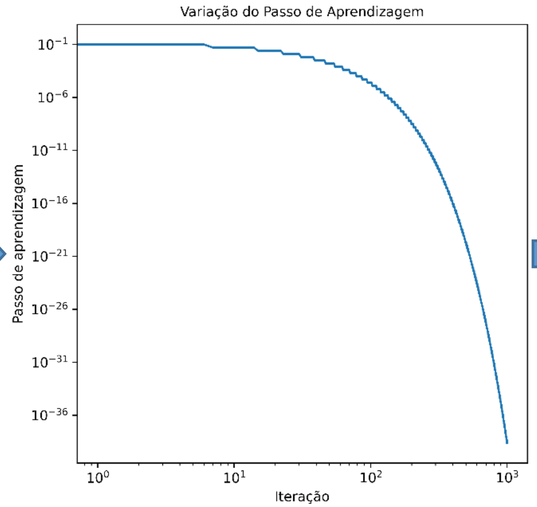
Exemplo de redução programada com GDE

Sem redução gradual



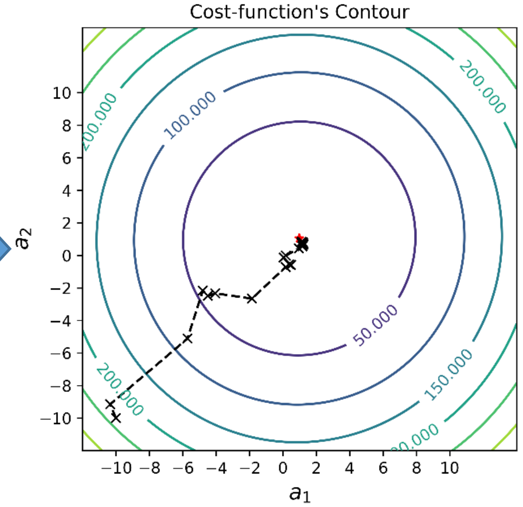


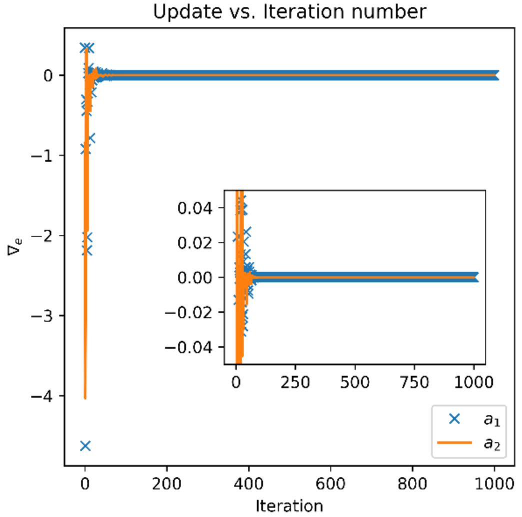
Redução gradual por degraus




```python
# 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
```

Com redução gradual



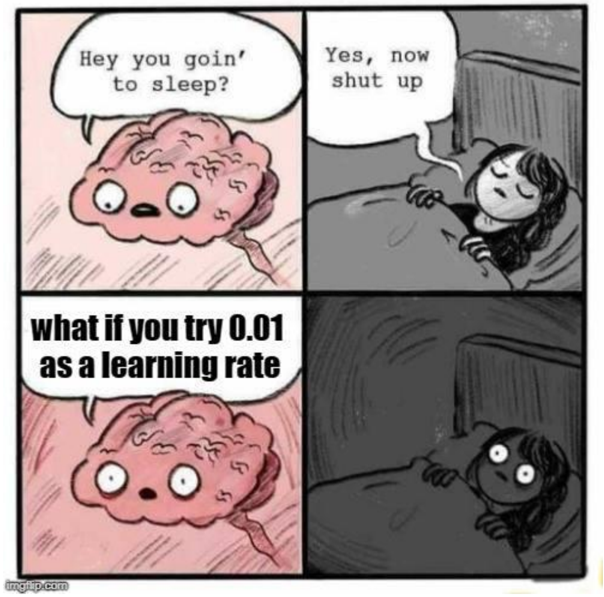


- **Conclusão**: um passo de aprendizagem que tem seu valor reduzido ao longo das iterações de treinamento permite que que ***versões estocásticas do gradiente descendente se estabilizem*** próximo ao ponto de mínimo global.

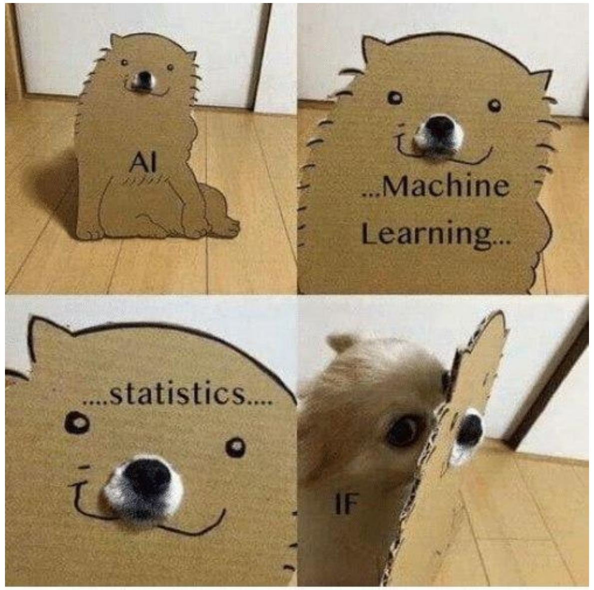
Tarefas

- **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 -> Recordings -> Laboratório #4
  - Se atentem aos prazos de entrega.
  - Instruções para resolução e entrega dos laboratórios.

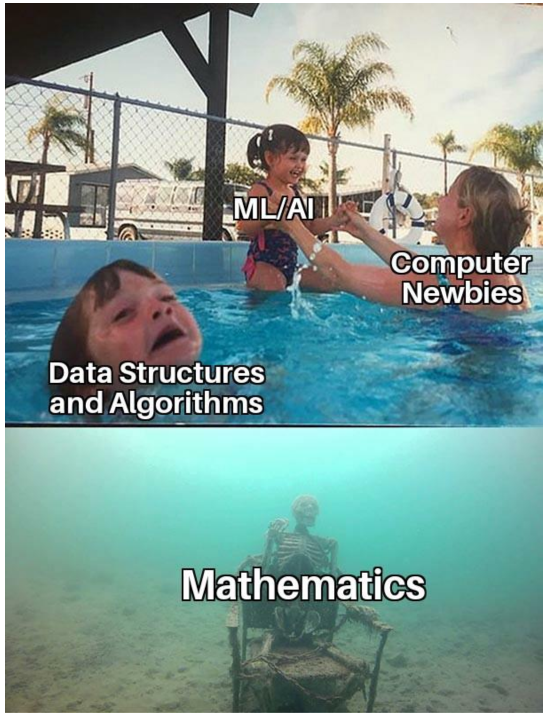
Obrigado!



When someone asks why you never stops talking about machine learning

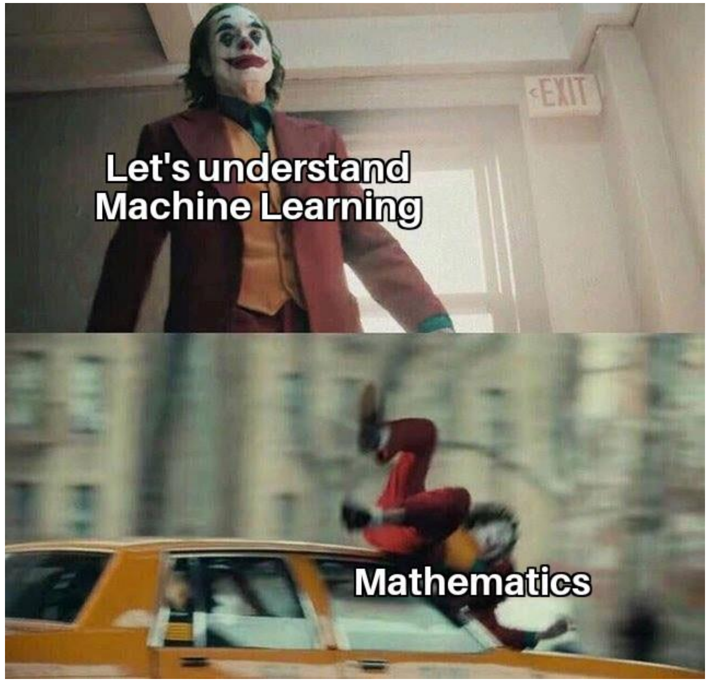


IF IF IF IF IF IF IF IF IF WE!

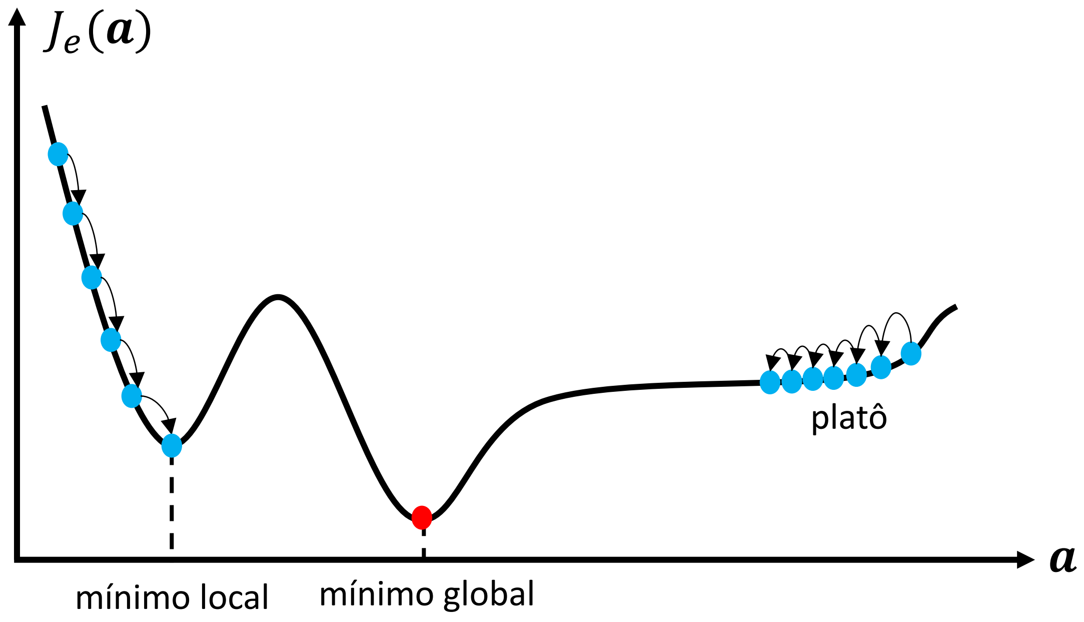


Albert Einstein: Insanity Is Doing the Same Thing Over and Over Again and Expecting Different Results

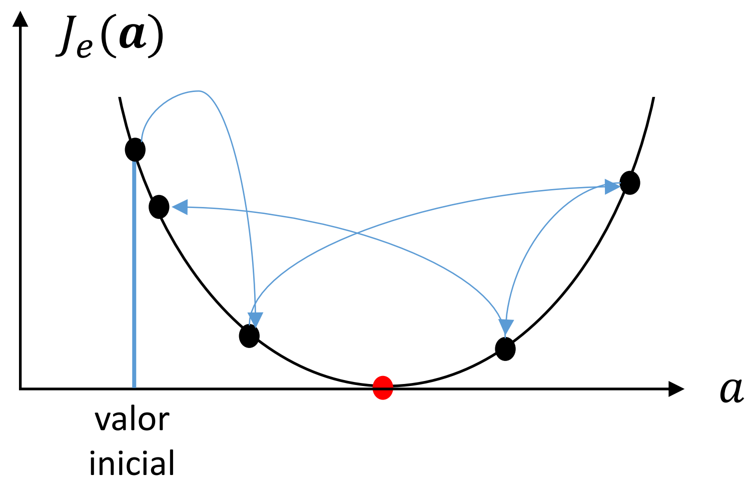
Machine learning:



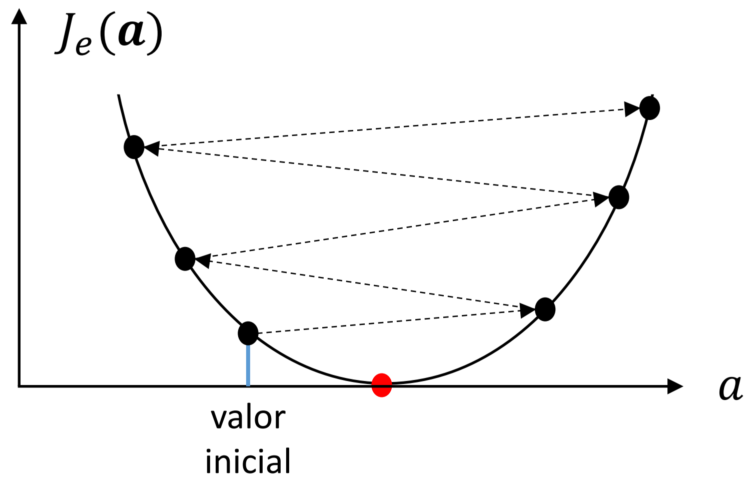
FIGURAS



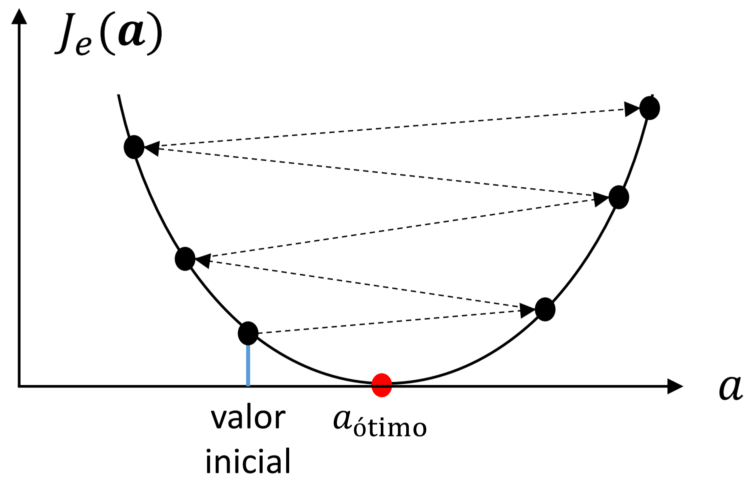
$J_e(\boldsymbol{a})$
$\boldsymbol{a}$
mínimo local
mínimo global
platô

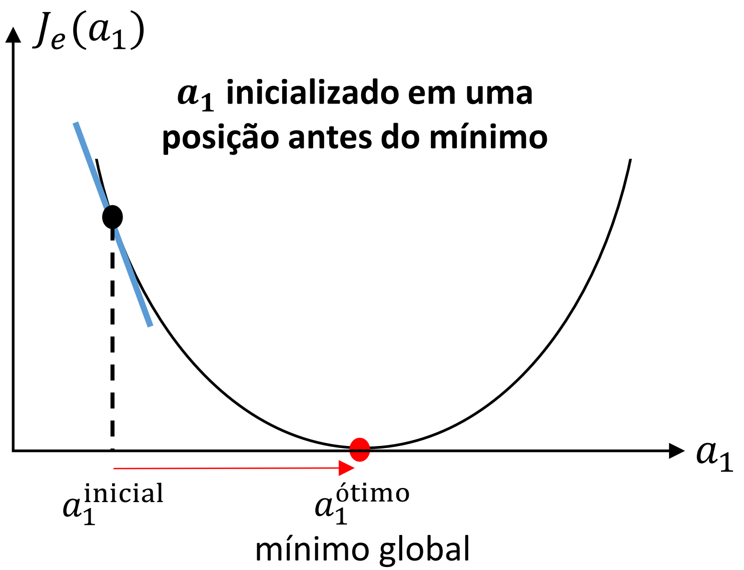


$J_e(\boldsymbol{a})$
a
valor
inicial



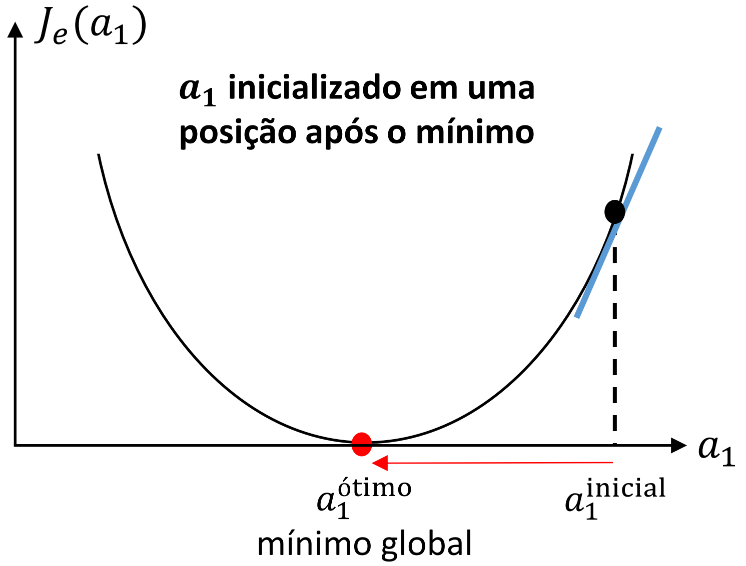
$J_e(\boldsymbol{a})$
a
valor
inicial


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



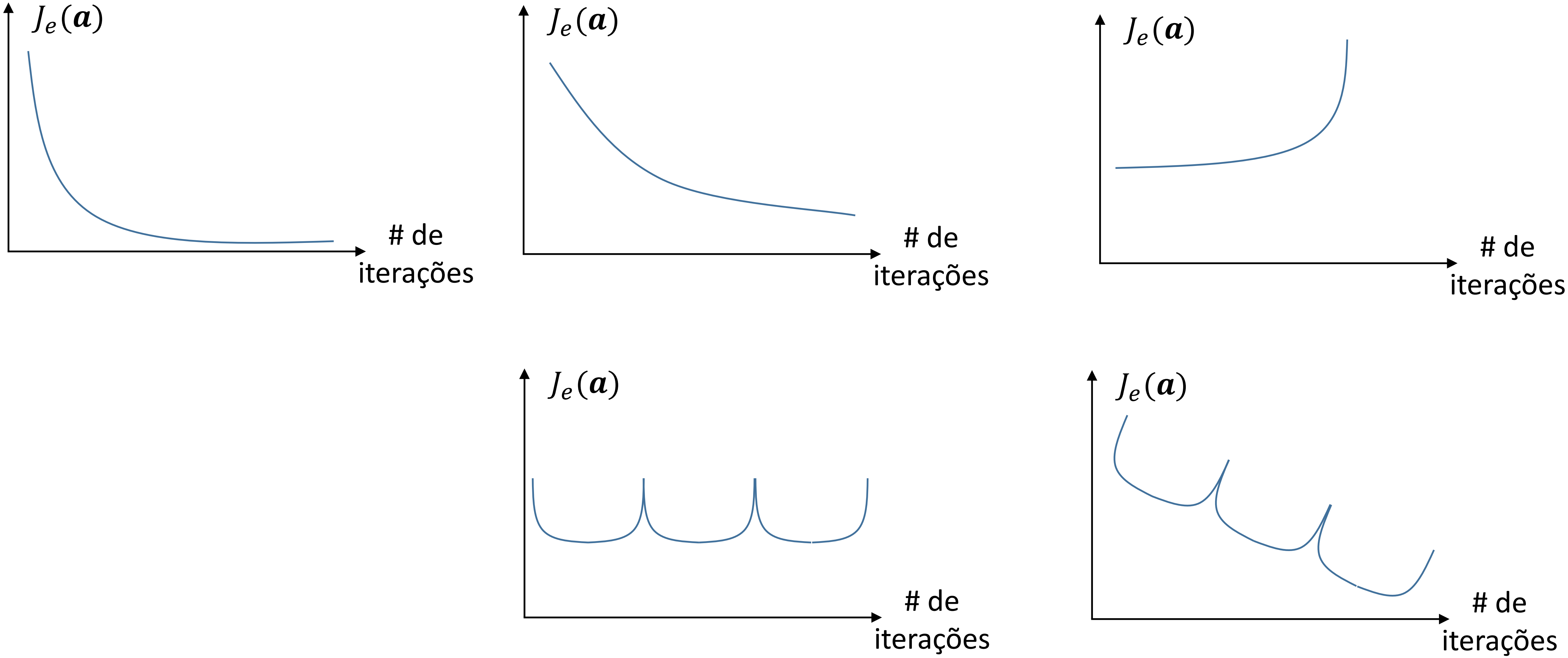
gradiente negativo: $a_1 = a_1^{\text{inicial}} + \alpha \nabla J_e(a_1)$

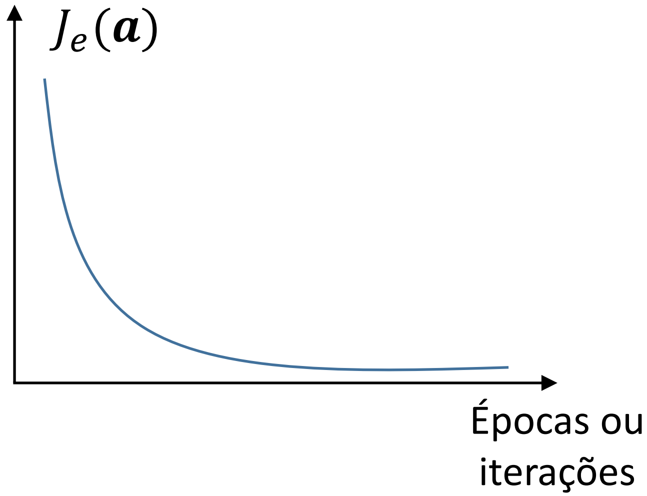
a_1 aumenta e se aproxima do mínimo

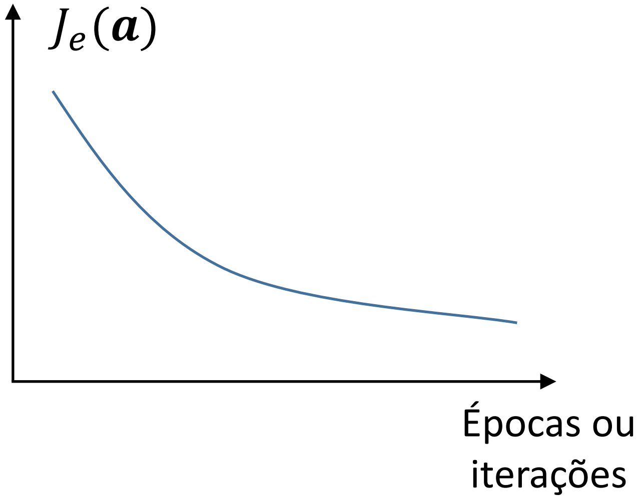


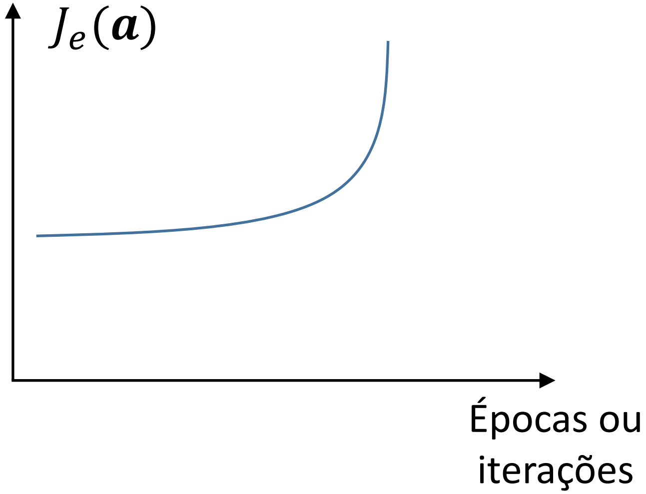
gradiente positivo: $a_1 = a_1^{\text{inicial}} - \alpha \nabla J_e(a_1)$

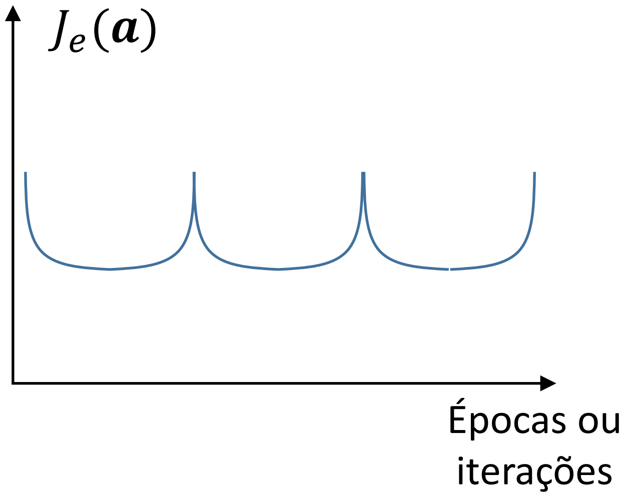
a_1 diminiu e se aproxima do mínimo

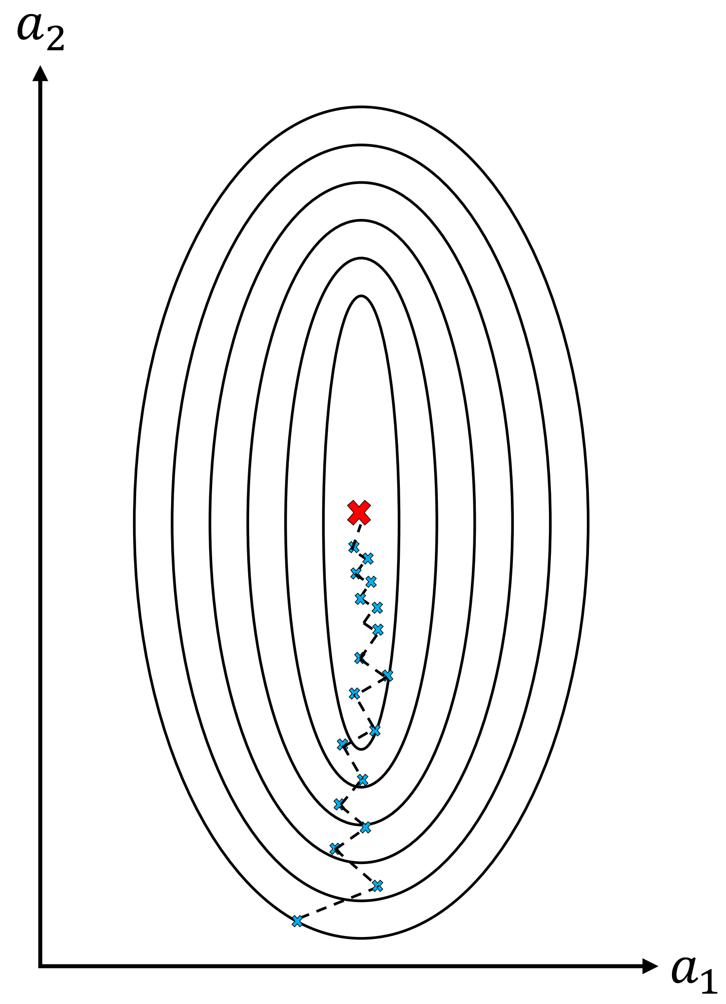

$J_e(\boldsymbol{a})$
de iterações
$J_e(\boldsymbol{a})$
de iterações
$J_e(\boldsymbol{a})$
de iterações
$J_e(\boldsymbol{a})$
de iterações
$J_e(\boldsymbol{a})$
de iterações

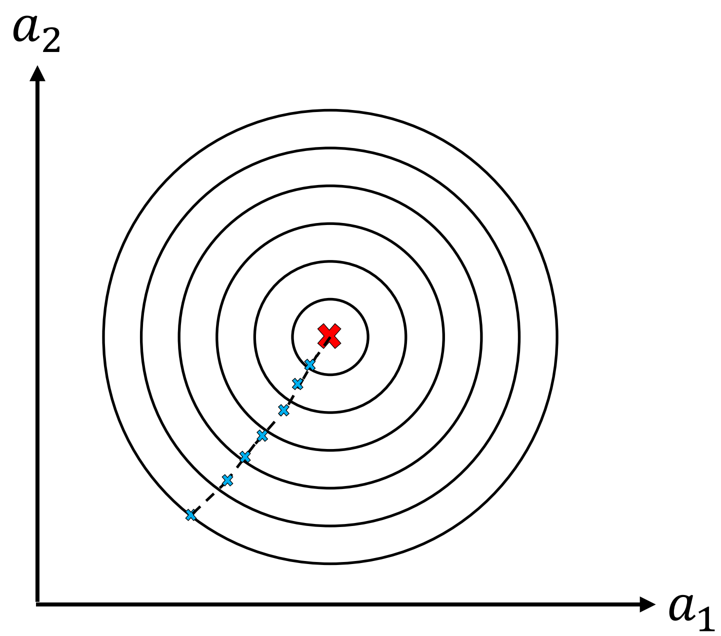

$J_e(\boldsymbol{a})$
Épocas ou iterações

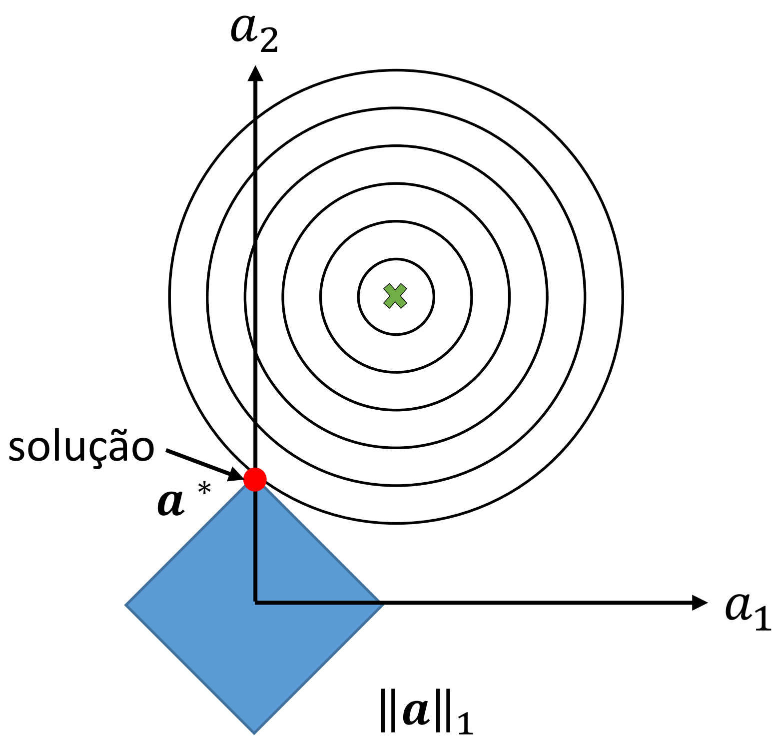

$J_e(\boldsymbol{a})$
Épocas ou iterações


$J_e(\boldsymbol{a})$
Épocas ou iterações

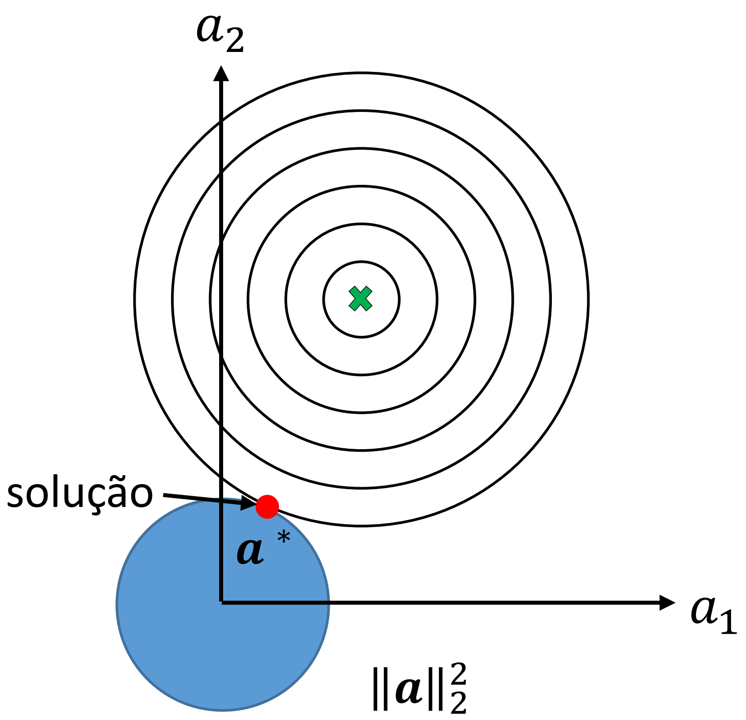

$J_e(\boldsymbol{a})$
Épocas ou iterações


a_2
a_1


a_2
a_1

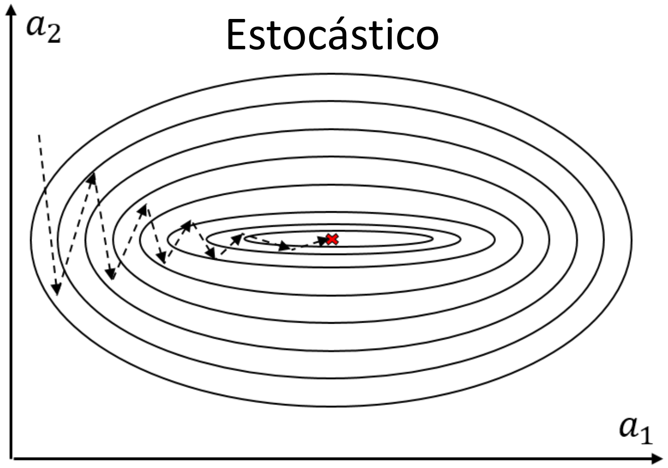


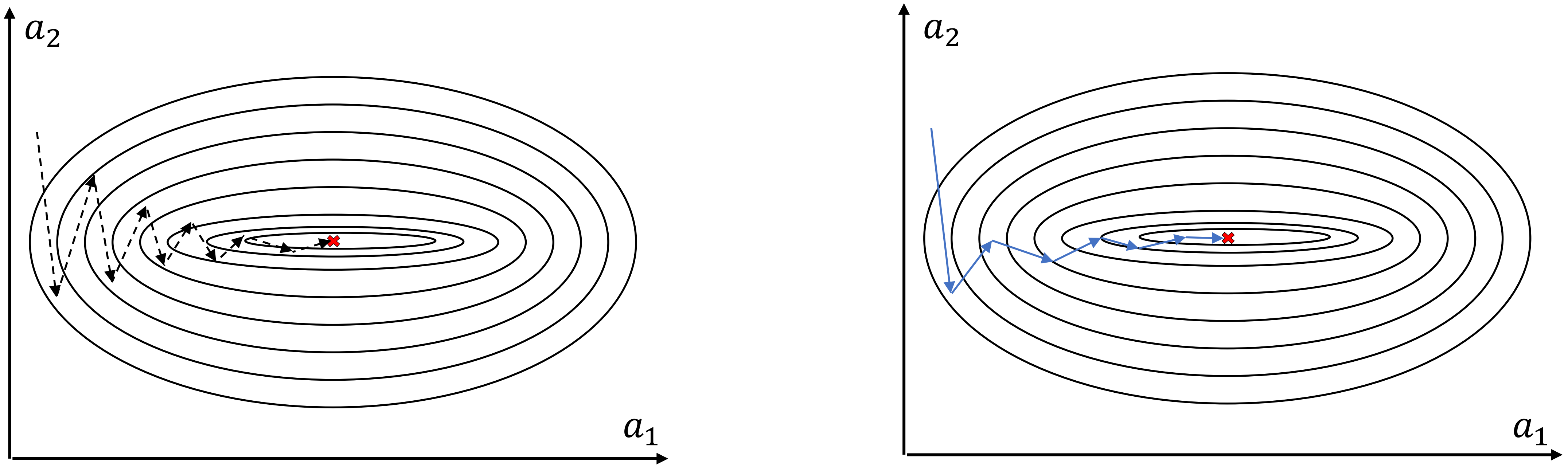
a_2
solução
$\boldsymbol{a}^*$
a_1
$\|\boldsymbol{a}\|_1$

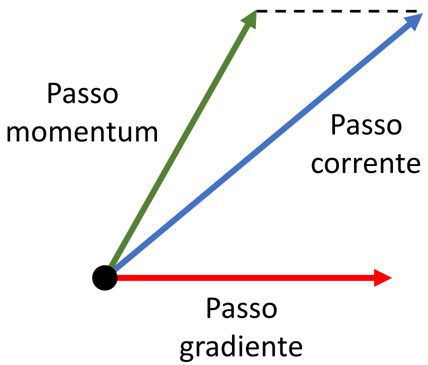


a_2
solução
$\boldsymbol{a}^*$
a_1
$\|\boldsymbol{a}\|_2^2$

Gradiente Descendente Estocástico




a_2
a_1
a_2
a_1


Passo
momentum
Passo
corrente
Passo
gradiente


THE RAVINE