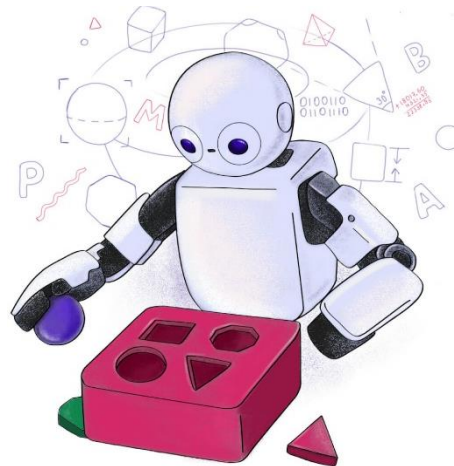


T319 - Introdução ao Aprendizado de Máquina: *Regressão Linear (Parte II)*



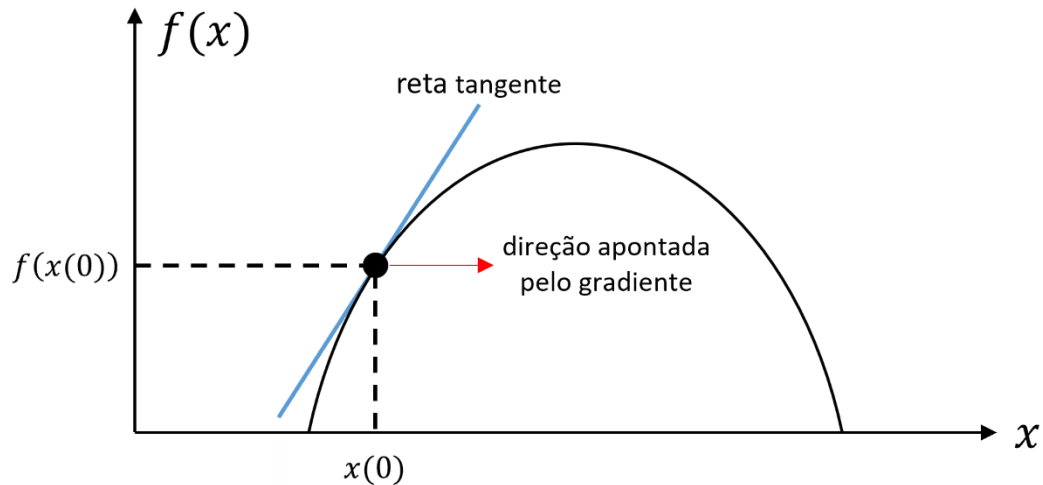
Inatel

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

Recapitulando

- Vimos a **motivação** por trás da **regressão linear**: encontrar funções que **aproximem o comportamento geral** de um conjunto de amostras (normalmente ruidosas).
- Definimos o **problema matematicamente**.
- Vimos como resolver o problema da regressão, i.e., **encontrar os pesos do modelo, através da equação normal e visualmente**.
- Aprendemos o que é a **superfície de erro**.
- Discutimos algumas **desvantagens** (e.g., **complexidade e regressão não-linear**) da equação normal e vislumbramos uma solução para essas desvantagens, a qual começaremos a discutir a seguir.

Vetor gradiente

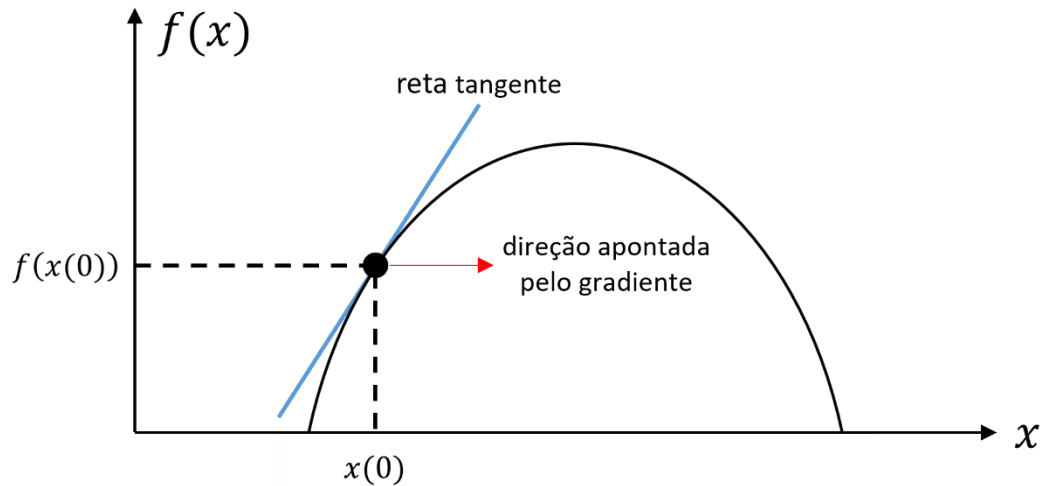


- Vocês se lembram das aulas de cálculo vetorial, onde vocês aprenderam sobre o **vetor gradiente**?

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}$$

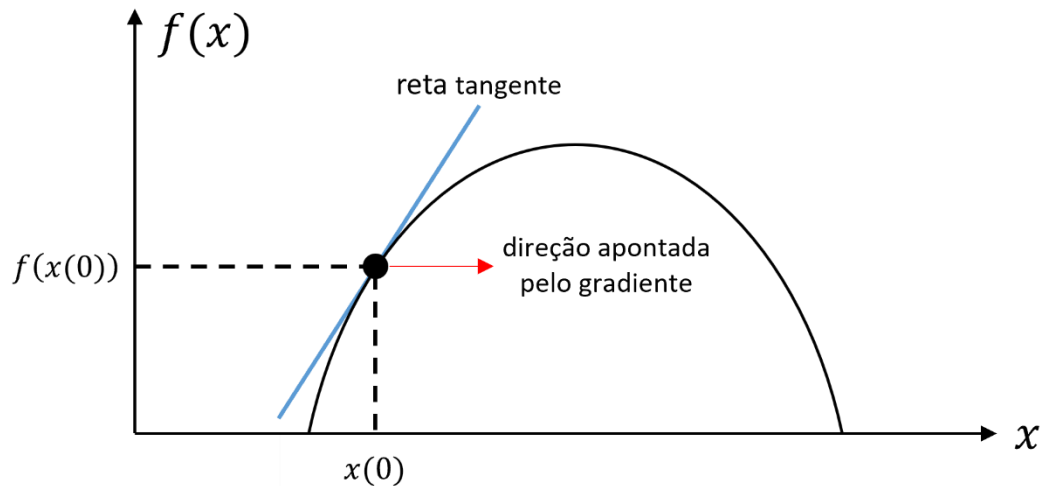
- Qual **informação** ele nos dá sobre a função, $f(\mathbf{x})$?

Vetor gradiente



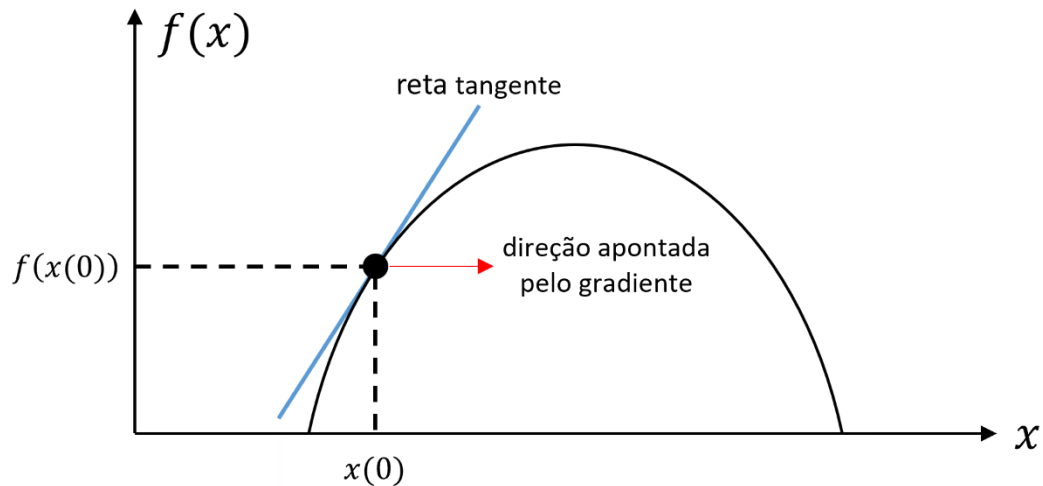
- O vetor gradiente **aponta** na **direção** em que a função $f(x)$ **cresce mais rapidamente a partir do ponto em que é avaliado**.

Vetor gradiente



- As **magnitudes** dos elementos do vetor gradiente indicam a **taxa de crescimento da função** na direção apontada por ele.
 - Quanto maior a magnitude, maior a taxa de crescimento naquela direção.
- Os **sinais** dos elementos do vetor dizem para que “**lado**” (**aumentar ou diminuir**) os valores dos argumentos, x , devem ir para que o **valor de $f(x)$ seja maior do que o atual**.

Vetor gradiente



Obs.: No caso da função, f , ter apenas um argumento, x , o vetor gradiente dá a inclinação de uma **reta** tangente ao ponto onde o vetor é calculado.

- O vetor gradiente pode ser também interpretado como a **inclinação de um hiperplano tangente à função no ponto onde ele é calculado**.
 - Quanto **maior o valor absoluto** do gradiente, **mais inclinado é o hiperplano tangente** naquele ponto.
 - Portanto, **um vetor gradiente igual a 0 indica inclinação nula**.
 - Ou seja, **a função não varia mais em nenhuma direção**.
 - Onde isso ocorre? Nos **extremos da função**, ou seja, em seus **pontos de máximo e de mínimo**.

Vetor gradiente

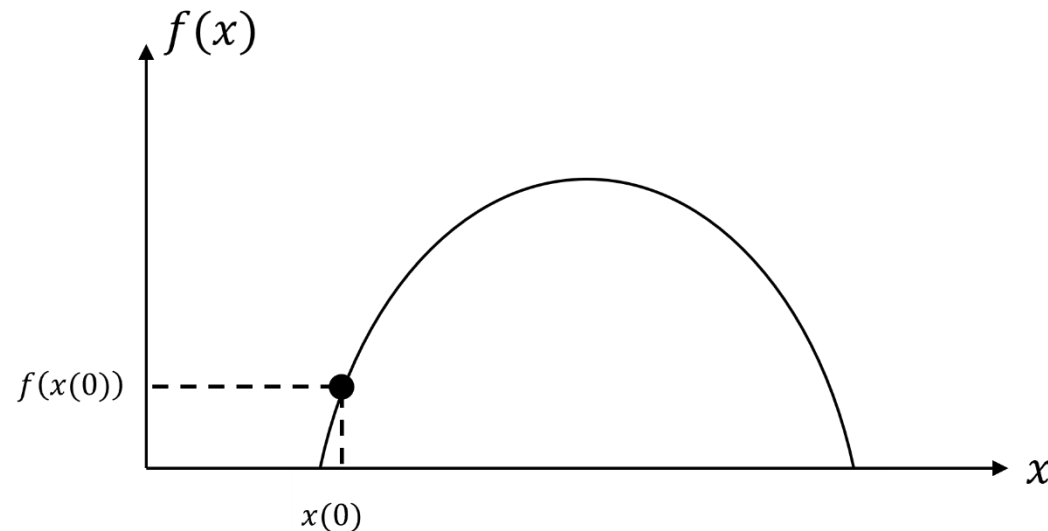
- O **vetor gradiente** de uma função com K argumentos, $f(x_1, x_2, \dots, x_K)$, é definido pela **derivada parcial em relação a cada um de seus argumentos** $x_k, k = 1, \dots, K$:

$$\begin{aligned} & \nabla f(x_1, x_2, \dots, x_K) \\ &= \left[\frac{\partial f(x_1, x_2, \dots, x_K)}{\partial x_1} \quad \frac{\partial f(x_1, x_2, \dots, x_K)}{\partial x_2} \quad \dots \quad \frac{\partial f(x_1, x_2, \dots, x_K)}{\partial x_K} \right]^T. \end{aligned}$$

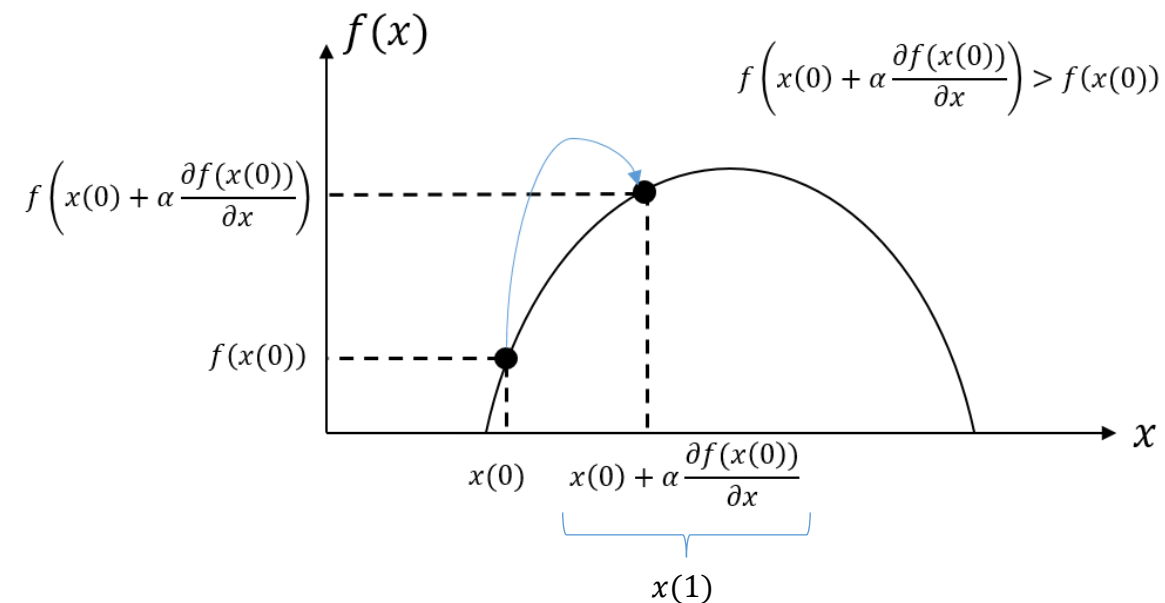
- Notem que o vetor gradiente é representado pelo símbolo *Nabla*, ∇ , e é definido como um **vetor coluna**, com **número de elementos igual ao número de argumentos da função**.
- **OBS.:** Na sequência, por questões didáticas, mas sem perda de generalidade, nós vamos assumir uma função com apenas um argumento, $f(x)$.

O vetor gradiente indica o caminho para o ponto de máximo da função

- Imaginem o ponto inicial, $x(0)$, com valor $f(x(0))$ na figura abaixo.
- Se quisermos que o valor de $f(x)$ aumente, devemos aumentar ou diminuir o valor de $x(0)$?
- Ou seja, qual **direção** devemos seguir para **maximizar** o valor de $f(x)$?



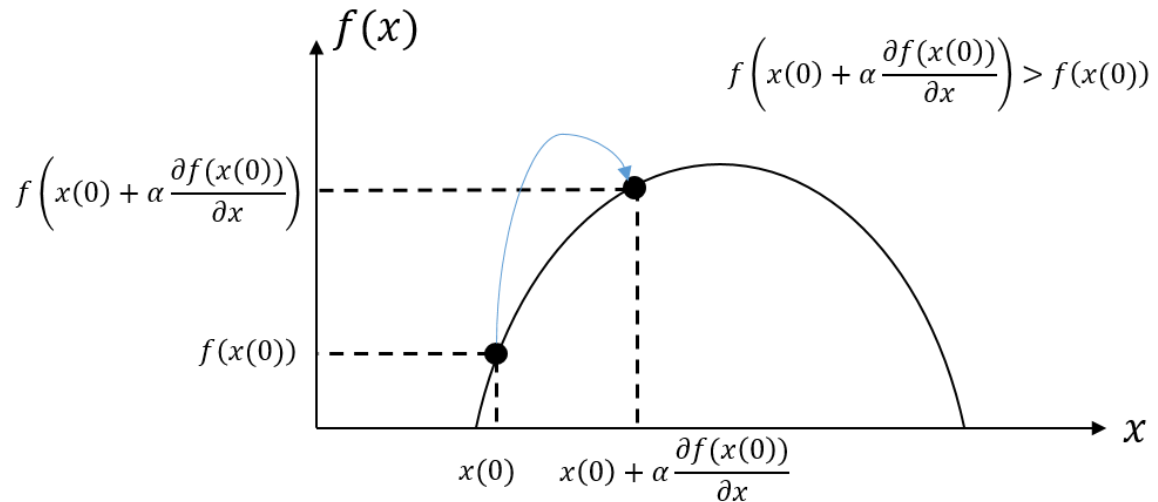
O vetor gradiente indica o caminho para o ponto de máximo da função



- O vetor gradiente calculado no ponto $x(0)$, $\nabla f(x(0))$, diz **em qual direção** devemos caminhar para **aumentar o valor da função** $f(x)$ mais rapidamente.
- Se **adicionarmos** uma **porcentagem***, α , do gradiente ao valor de $x(0)$, teremos que o **novo ponto**, $x(1)$, terá um valor de $f(x(1))$ **maior do que o anterior**, i.e.,
$$f\left(\underbrace{x(0) + \alpha \frac{\partial f(x(0))}{\partial x}}_{x(1)}\right) > f(x(0)).$$

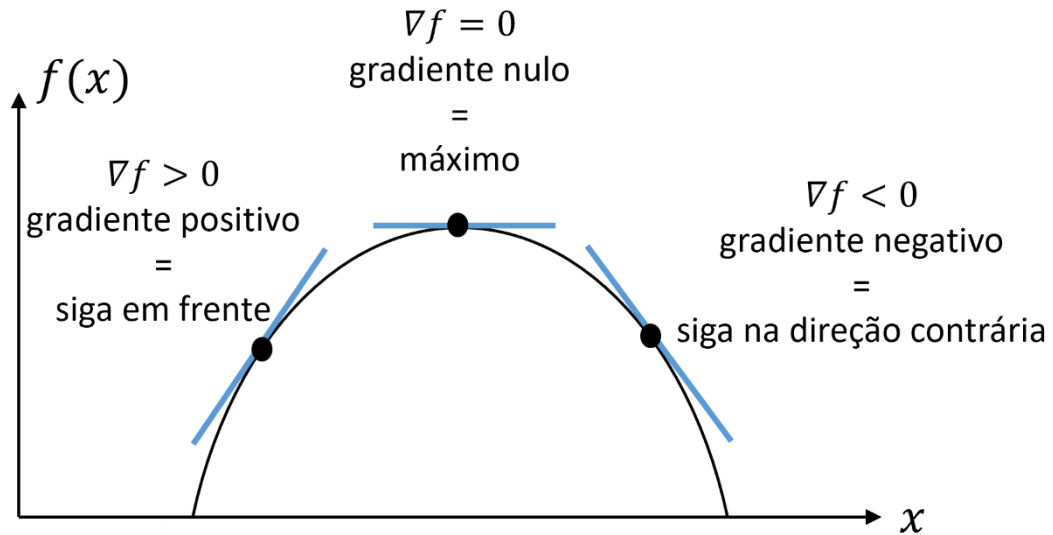
* O vetor gradiente dá a direção e não a distância até o ponto de máximo.

O vetor gradiente indica o caminho para o ponto de máximo da função



- Se, a cada **ponto atual**, nós calcularmos o vetor gradiente e adicionarmos uma **porcentagem** dele ao ponto, teremos um **novo ponto** que leva a um **valor da função $f(x)$ maior do que o valor anterior**.
- Portanto, podemos criar um **procedimento** que vá **iterativamente caminhando** em **direção ao ponto de máximo da função**.
- Vamos entender como isso pode ser feito.

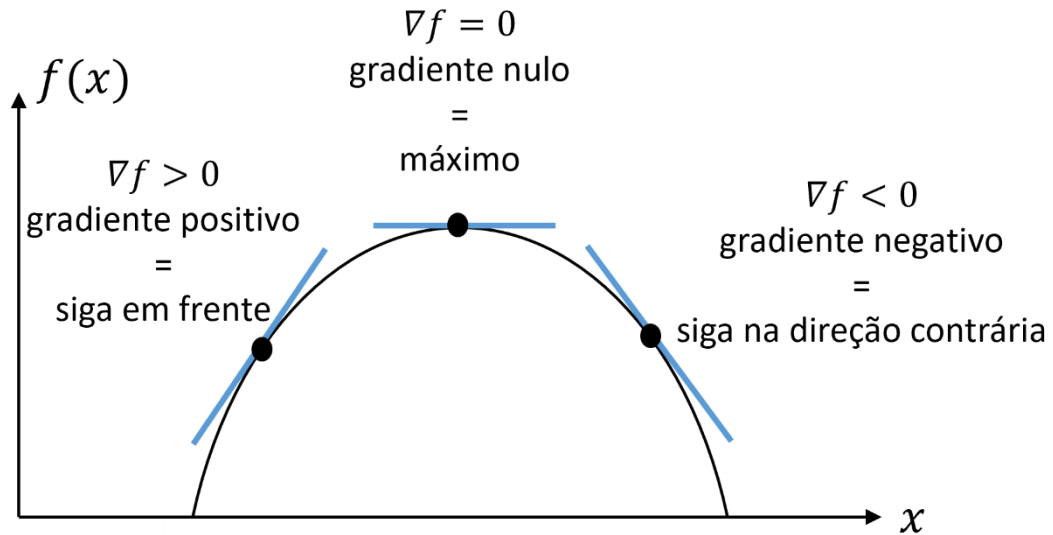
Algoritmo do gradiente ascendente



- Se o vetor gradiente de $f(x)$ em um **ponto** $x(n)$ qualquer dá a **inclinação da reta tangente à função naquele ponto**, então, nesse **ponto**, um valor de gradiente com sinal:

- + (reta com inclinação positiva) indica que o **ponto de máximo está à frente do ponto atual**.
- - (reta com inclinação negativa) indica que o **ponto de máximo está atrás do ponto atual**.
- 0 (reta com inclinação nula) indica que **ponto de máximo foi encontrado**.

Algoritmo do gradiente ascendente



- Portanto, *seguindo na direção* indicada pelo *vetor gradiente*, *chegamos* ao *ponto de máximo da função*.
- Um *algoritmo iterativo de otimização* que *siga a direção* indicada pelo *vetor gradiente* para encontrar o *ponto de máximo* de uma função é conhecido como *gradiente ascendente*.
- Mas como ele funciona?

Algoritmo do gradiente ascendente

- Inicializa-se o argumento $x(0)$ com um valor arbitrário, em geral, um valor **aleatório**.
- A cada **iteração**, i , calcula-se o **vetor gradiente** da função $f(x)$ no ponto atual, $x(i)$, e atualiza-se o valor do argumento usando uma porcentagem do gradiente, ou seja

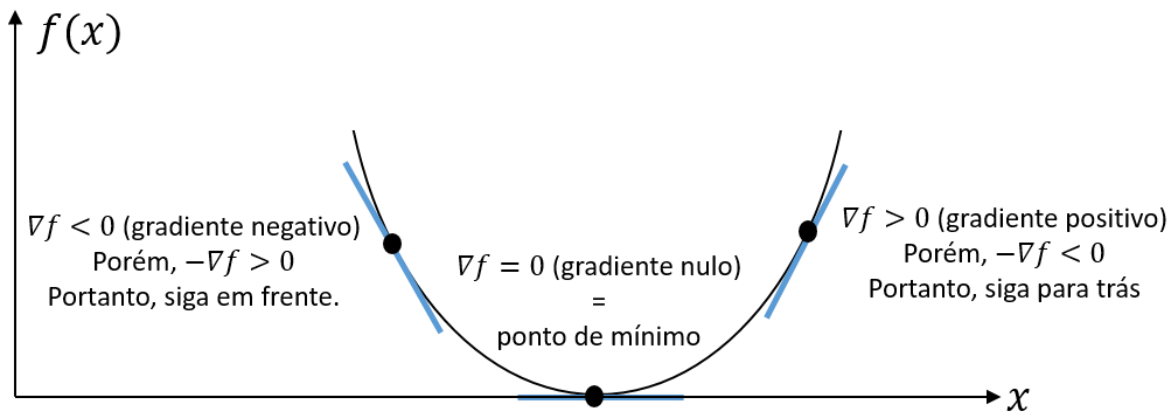
$$x(i + 1) = x(i) + \alpha \nabla f(x(i)), i \geq 0.$$

- De tal forma, que a cada **iteração** se tenha
$$f(x(i + 1)) > f(x(i)), i \geq 0.$$
- As iterações se repetem até que o **ponto de máximo** seja atingido, ou seja, $\nabla f(x(i)) = 0$ e, conseqüentemente, o argumento x **não sofra mais atualizações** (i.e., o algoritmo convergiu).
 - Chamamos de **convergência** quando a variação da função $f(x)$ entre iterações consecutivas é muito pequena, ou seja, o valor é praticamente constante.

Porém, se vocês se lembram, no problema da regressão linear nós queremos *encontrar o ponto de mínimo da função de erro* ao invés do seu máximo.

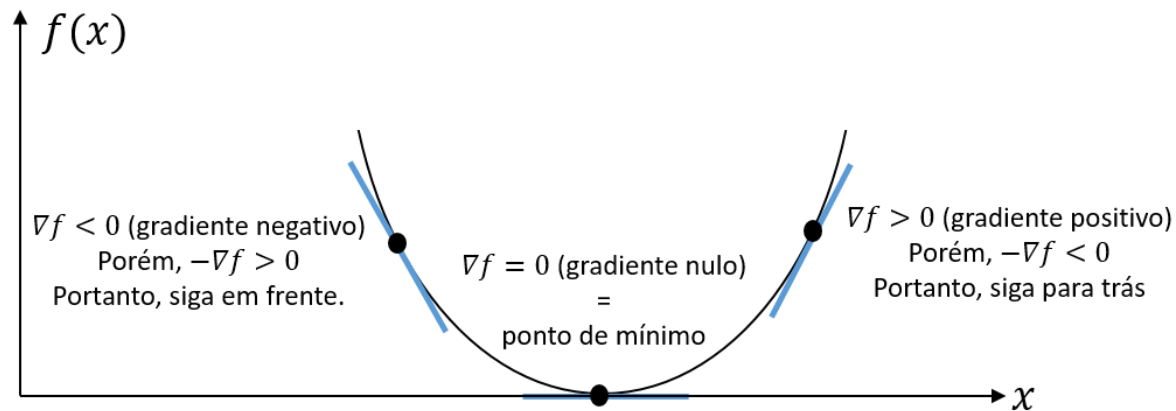
O que fazer?

Algoritmo do gradiente descendente



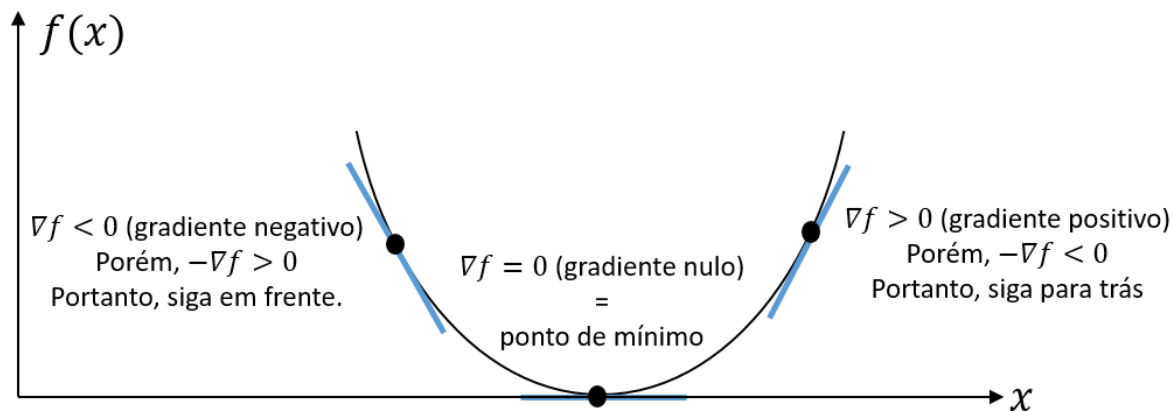
- Se para encontrarmos o **ponto de máximo** de uma função basta seguirmos a direção apontada pelo vetor gradiente.
- Portanto, para encontrarmos o **ponto de mínimo**, basta seguirmos na **direção oposta a apontada pelo vetor gradiente** em um determinado ponto, $x(i)$
$$-\nabla f(x(i)).$$

Algoritmo do gradiente descendente



- Quando seguimos na ***direção contrária a da máxima taxa de crescimento***, dada pelo ***vetor gradiente***, estamos indo na ***direção de decrescimento mais rápido da função***.
- Portanto, um elemento do vetor gradiente com sinal:
 - - (reta com inclinação negativa) indica que o ***ponto de mínimo está à frente***.
 - + (reta com inclinação positiva) indica que o ***ponto de mínimo está atrás***.
 - 0 (reta com inclinação nula) indica que ***ponto de mínimo foi encontrado***.

Algoritmo do gradiente descendente



- Assim, um **algoritmo iterativo de otimização** que siga na **direção contrária** a indicada pelo **vetor gradiente** para encontrar o **ponto de mínimo** de uma função é chamado de **gradiente descendente (GD)**.

Algoritmo do gradiente descendente

- Inicializa-se o argumento $x(0)$ com um valor arbitrário, em geral, um valor **aleatório**.
- A cada **iteração**, i , calcula-se o **vetor gradiente** da função $f(x)$ no ponto atual, $x(i)$, e atualiza-se o valor do argumento usando uma porcentagem do gradiente, ou seja

$$x(i + 1) = x(i) \ominus \alpha \nabla f(x(i)), i \geq 0.$$

Única diferença para o gradiente ascendente.

- De tal forma, que a cada **iteração** se tenha
$$f(x(i + 1)) < f(x(i)), i \geq 0.$$
- As iterações se repetem até que o **ponto de mínimo** seja atingido, ou seja, $\nabla f(x(i)) = 0$ e, conseqüentemente, o argumento x **não sofra mais atualizações** (i.e., o algoritmo convergiu).
 - **Convergência**: é quando o valor de x e, conseqüentemente, de $f(x)$ entre iterações consecutivas é praticamente constante.

Observação

- Os conceitos vistos até agora foram apresentados para uma função com um único argumento, $f(x)$.
- Porém todos eles são válidos para funções com vários argumentos, $f(x_0, x_1, \dots, x_K)$.
- Esse será o caso das funções que iremos utilizar em breve.
- No nosso caso, a função será a do **erro quadrático médio (EQM)**, que terá como **argumentos** os **pesos da função hipótese**.

Como neste curso queremos *minimizar a função de erro*, iremos focar no *gradiente descendente*.

Características do gradiente descendente

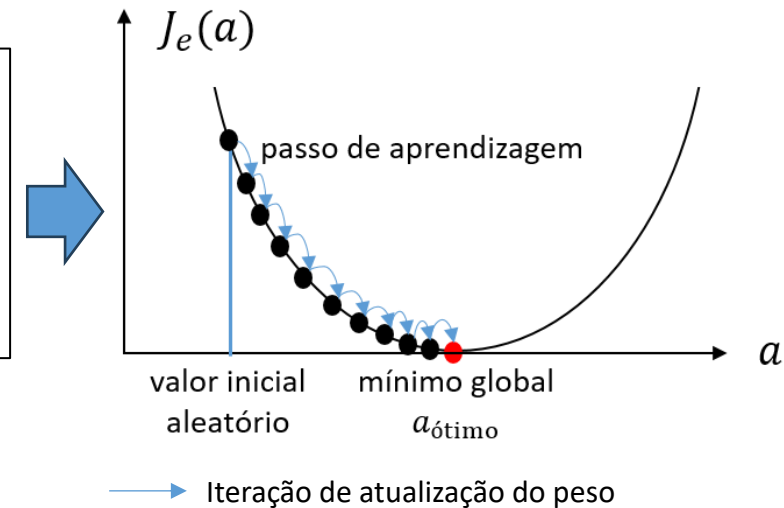
- Algoritmo **genérico de otimização**: pode ser aplicado não apenas a problemas de aprendizado de máquina, mas a **qualquer problema que envolva encontrar os parâmetros que minimizam uma função**.
- O único requisito é que essa função seja **diferenciável**.
 - No caso da regressão linear, a função de erro deve ser diferenciável.
- Escalona melhor do que o método da **equação normal** para grandes conjuntos de dados.
- É de fácil implementação.
- Não precisamos nos preocupar com matrizes **mal condicionadas**, ou seja, matrizes com **determinante próximo de 0** (i.e., quase **singulares**).
- Pode ser usado com modelos não-lineares.

*Como aplicamos o algoritmo do **gradiente descendente** ao problema da **regressão linear**?*

*Ou seja, como encontramos os **pesos ótimos** da **função hipótese** usando o gradiente descendente?*

O algoritmo do gradiente do descendente

$\mathbf{a} \leftarrow$ inicializa o vetor de pesos em um ponto aleatório do espaço de pesos
loop até convergir ou atingir o número máximo de iterações **do**
 $\nabla J_e(\mathbf{a}) \leftarrow$ cálculo do vetor gradiente, $\frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}}$
 $\mathbf{a} \leftarrow \mathbf{a} - \alpha \times \nabla J_e(\mathbf{a})$ (*regra de atualização dos pesos*)



- **OBS.:** O *passo de aprendizagem*, α , dita o tamanho do deslocamento dado na direção oposta a apontada pelo **vetor gradiente**.
 - Ele é sempre um valor maior do que zero.
- Na sequência, encontraremos o **vetor gradiente** da **função de erro**.

Calculando o vetor gradiente

- Para calcularmos o vetor gradiente, vamos considerar o **EQM** como **função de erro** e a **função do hiperplano** como **função hipótese**:

$$\hat{y}(n) = h(n) = a_0 + a_1 x_1(n) + \cdots + a_K x_K(n) = \sum_{i=0}^K a_i x_i(n) = \mathbf{a}^T \mathbf{x}(n),$$

onde n é o **número do exemplo** (ou amostra), K é o **número atributos**, $a_i, \forall i$ e $x_i, \forall i$ são os **pesos e atributos da função hipótese**, respectivamente, $x_0 = 1$ (i.e., atributo de *bias*) e \mathbf{a} e $\mathbf{x}(n)$ são vetores coluna com todos os pesos e atributos da n -ésima amostra, respectivamente.

- Agora podemos encontrar o vetor gradiente.

Calculando o vetor gradiente

- O **vetor gradiente** da **função de erro em relação aos pesos** é dado por

$$\begin{aligned}\frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{a}} \left[\frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} (y(n) - \hat{y}(n))^2 \right] \\ &= -\frac{2}{N} \sum_{n=0}^{N-1} [y(n) - \hat{y}(n)] \mathbf{x}(n) = \boxed{-\frac{2}{N} \mathbf{X}^T (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})},\end{aligned}$$

Versão matricial do vetor gradiente

onde \mathbf{X} é a matriz de atributos com dimensão $(N \times K + 1)$ e \mathbf{y} e $\hat{\mathbf{y}}$ são vetores coluna $(N \times 1)$ com todos os valores esperados e de saída da função hipótese para os N exemplos coletados, respectivamente.

- **OBS.:** Esse cálculo pode ser diretamente estendido para polinômios.

Atualizando os pesos

- Substituindo o ***vetor gradiente*** na ***equação de atualização dos pesos***, temos

$$\mathbf{a} = \mathbf{a} - \alpha \frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = \mathbf{a} \boxed{+} \alpha \frac{2}{N} \sum_{n=0}^{N-1} [y(n) - \hat{y}(n)] \mathbf{x}(n) = \mathbf{a} \boxed{+} \frac{2\alpha}{N} \mathbf{X}^T (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}).$$

- Percebam que o vetor gradiente é a ***média da diferença*** entre o rótulo e a saída da função hipótese vezes os atributos ***tomada ao longo de todos os N exemplos do conjunto de treinamento.***
- **Observações:**
 - O sinal + é devido ao vetor gradiente encontrado ter sinal negativo.
 - Por ser constante, o termo $2/N$ pode ser absorvido por α .

Atualizando os pesos

\mathbf{a} ← inicializa o vetor de pesos em um ponto aleatório do espaço de pesos
loop até convergir ou atingir o número máximo de iterações do

$$\mathbf{a} \leftarrow \mathbf{a} + \alpha \frac{2}{N} \sum_{n=0}^{N-1} [y(n) - \hat{y}(n)] \mathbf{x}(n)$$

- Lembrem-se que *a cada iteração* (i.e., *loop*) do gradiente descendente, precisamos *calcular o vetor gradiente*.
- Isso envolve *calcular o somatório acima para cada iteração*.
- Assim, *se o conjunto de treinamento e o modelo forem muito grandes*, o *treinamento pode ser muito longo e consumir muita CPU e memória*.

Versões do gradiente descendente

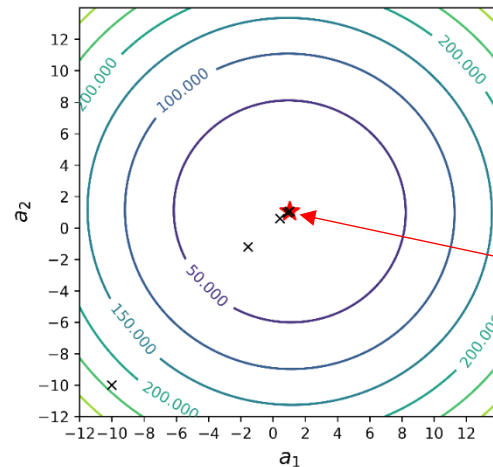
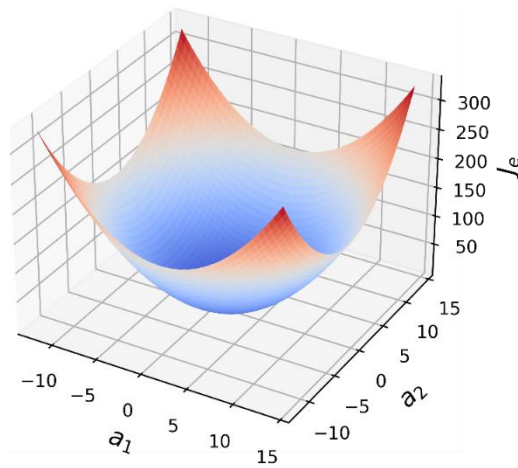
- Portanto, para lidar com essa situação, podemos ter **3 versões diferentes, dependendo da quantidade de exemplos** considerados no somatório do vetor gradiente:
 - ***Gradiente descendente em batelada (GDB)***
 - ***Gradiente descendente estocástico (GDE)***
 - ***Gradiente descendente em mini-lotes (GDML)***

Gradiente descendente em batelada

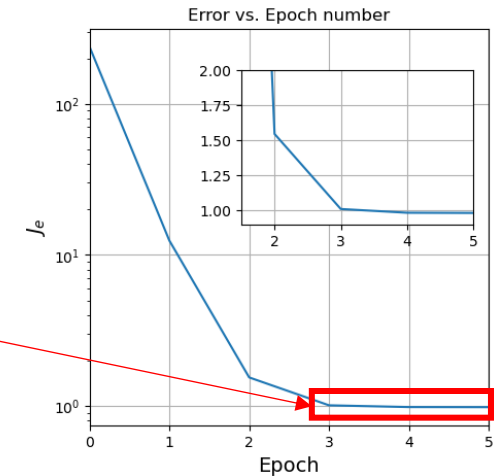
$$\mathbf{a} = \mathbf{a} + \alpha \frac{2}{N} \sum_{n=0}^{N-1} [y(n) - \hat{y}(n)] \mathbf{x}(n).$$

- Considera **todos os exemplos** do conjunto de treinamento para calcular o vetor gradiente.
- Pode ser **computacionalmente custoso** dependendo do tamanho do modelo e do conjunto de dados.
 - Por processar todos os exemplos a cada iteração, pode ser lento e consumir muita CPU e memória com conjuntos muito grandes.
- **Convergência** para o mínimo global é **garantida** quando a função de erro é **convexa** e o passo de aprendizagem, α , não for muito grande.
- É a versão que **obtem os melhores resultados**.

Características do GD em batelada



convergência



- Por usar todos os exemplos, **segue diretamente**, sem alterar a direção, para o **ponto de mínimo**.
 - Nesse exemplo, segue uma linha reta entre a_1 e a_2 , pois a taxa de decrescimento da superfície de erro é igual para os dois pesos (contornos são circulares).
- **Convergência é garantida** dado que o **passo de aprendizagem não seja muito grande** e se **espere tempo suficiente**.
 - Não fica “oscilando” em torno do ponto de mínimo após alcançá-lo, pois o vetor gradiente neste ponto é praticamente nulo.

Gradiente descendente estocástico

$$\mathbf{a} = \mathbf{a} + \alpha 2[y(n_{\text{random}}) - \hat{y}(n_{\text{random}})]\mathbf{x}(n_{\text{random}}).$$

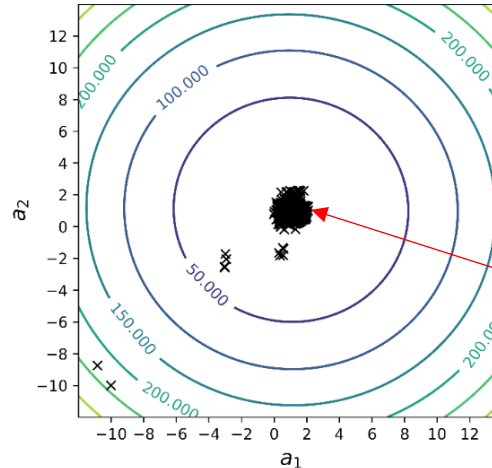
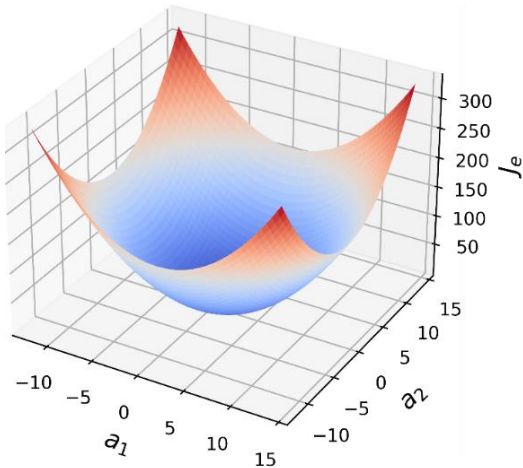
- Utiliza a cada iteração de atualização **apenas um exemplo** do conjunto de treinamento para calcular uma **estimativa estocástica do gradiente**.
 - É estocástica pois a cada iteração toma-se **uma amostra aleatória** do conjunto de treinamento para calcular a estimativa do vetor gradiente.
- Por usar uma estimativa, **não segue diretamente a direção de máxima declividade da função de erro, mudando de direção várias vezes**.

Gradiente descendente estocástico

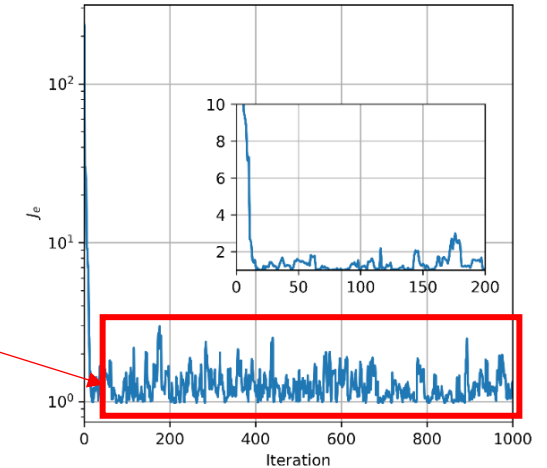
$$\mathbf{a} = \mathbf{a} + \alpha 2[y(n_{\text{random}}) - \hat{y}(n_{\text{random}})]\mathbf{x}(n_{\text{random}}).$$

- Quando os *dados de treinamento estão contaminados com ruído*, a *estimativa* do gradiente é *ruidosa*, fazendo com que a *convergência não ocorra* ou *não seja garantida*.
 - O algoritmo pode *oscilar* em torno do ponto de mínimo *sem nunca convergir*.
- Entretanto, é mais rápido, usando menos CPU e memória do que o GDB.

Características do GD estocástico



Não
converge



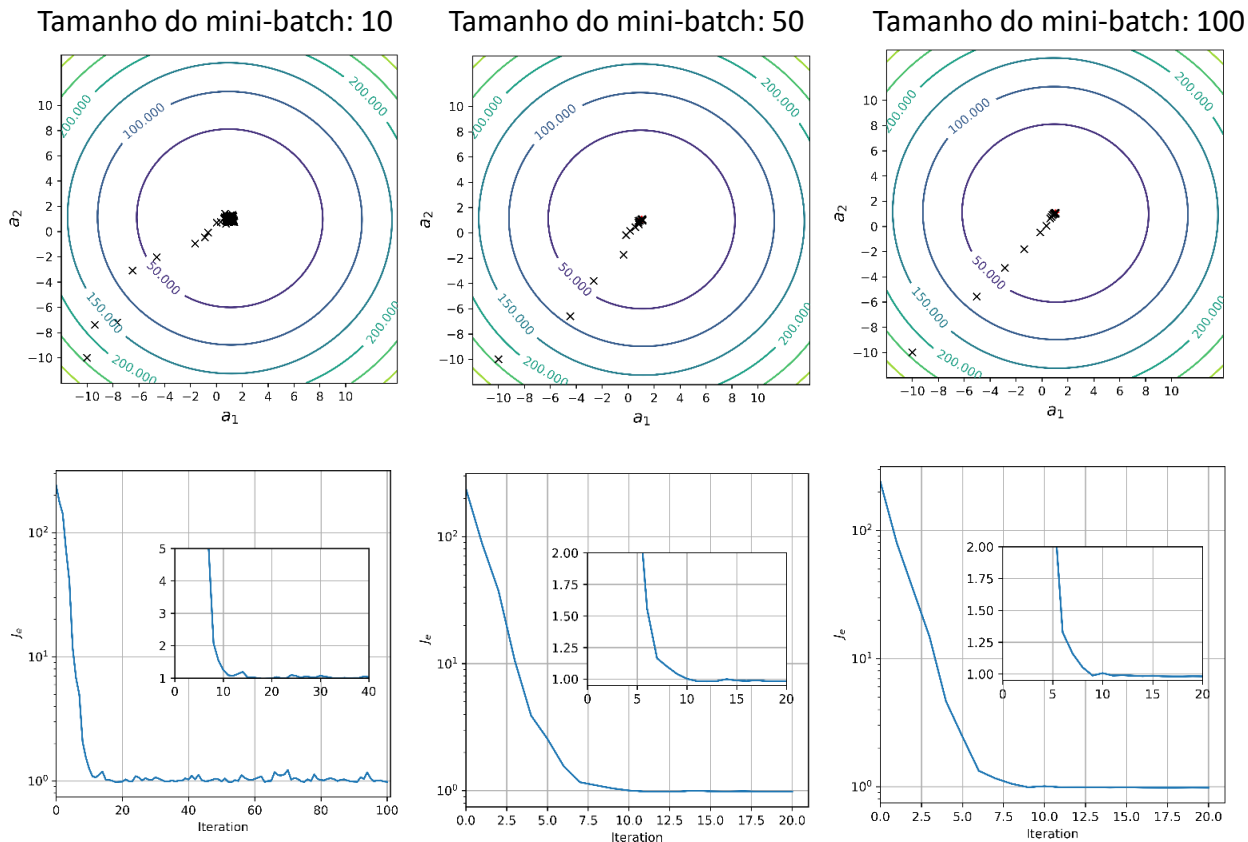
- ***Apresenta um caminho *irregular* para o mínimo, mudando de direção várias vezes.***
- ***Quando as amostras contém ruído (caso acima), não converge para o ponto de mínimo, “oscilando” em torno dele.***
 - Essa oscilação também pode ser vista na curva de erro.
- Algumas técnicas podem ser usadas para torná-lo mais comportado e talvez convergir: redução do passo, *early-stop*, momentum, etc.

Gradiente descendente em mini-lotes

$$\mathbf{a} = \mathbf{a} + \alpha \frac{2}{MB} \sum_{n=0}^{MB-1} [y(n) - \hat{y}(n)] \mathbf{x}(n).$$

- Utiliza a cada iteração um **subconjunto aleatório de exemplos**, de tamanho MB , do conjunto de treinamento para o cálculo do gradiente.
- Em geral, $1 < MB < N$, portanto é mais rápido que o GDB e mais preciso e estável do que o GDE.
- Porém, por MB ser variável, essa versão é vista como uma **generalização** das duas versões anteriores, pois MB pode ser feito igual a 1 ou N .
- Em caso de **amostras ruidosas**, a convergência depende do tamanho de MB , **quanto maior, melhor é a estimativa** do vetor gradiente e, consequentemente, **maior a chance de convergência**.

Características do GD em mini-lotes



- Vejam que conforme MB aumenta,
 - o progresso se torna menos irregular do que o do GDE,
 - e a oscilação ao redor do ponto de mínimo diminui.
- Tem comportamento mais próximo do GD em batelada para mini-lotes maiores.
- Para MB pequenos, pode se beneficiar de técnicas para torná-lo mais comportado e talvez convergir.
 - Essas técnicas podem ajudar a **balancear rapidez e convergência**.

Tarefas

- **Quiz:** “*T319 - Quiz - Regressão: Parte II*” que se encontra no MS Teams.
- **Exercício Prático:** [**Laboratório #3**](#).
 - Pode ser acessado através do link acima (Google Colab) ou no GitHub.
 - Vídeo explicando o laboratório: Arquivos -> Recordings -> Laboratório #3
 - Se atentem aos prazos de entrega.
 - [Instruções para resolução e entrega dos laboratórios.](#)

Referências

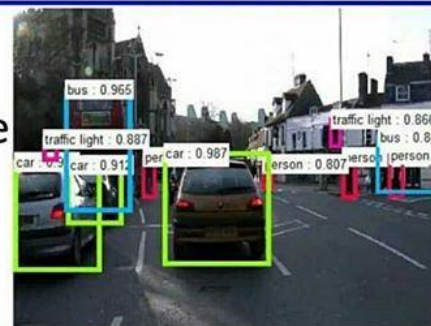
- [1] Marcos Eduardo Valle, “Derivadas Direcionais e o Vetor Gradiente”,
<https://www.ime.unicamp.br/~valle/Teaching/MA211/Aula6.pdf>
- [2] Marcos Eduardo Valle, “Fatoração de Cholesky e Condicionamento de uma Matriz.”
<https://www.ime.unicamp.br/~valle/Teaching/MS211/Aula06.pdf>
- [3] IFSul, “Matrizes, Determinantes e Sistemas Lineares”,
<http://tics.ifsul.edu.br/matriz/conteudo/disciplinas/algl/ue/1/4.html>

Obrigado!

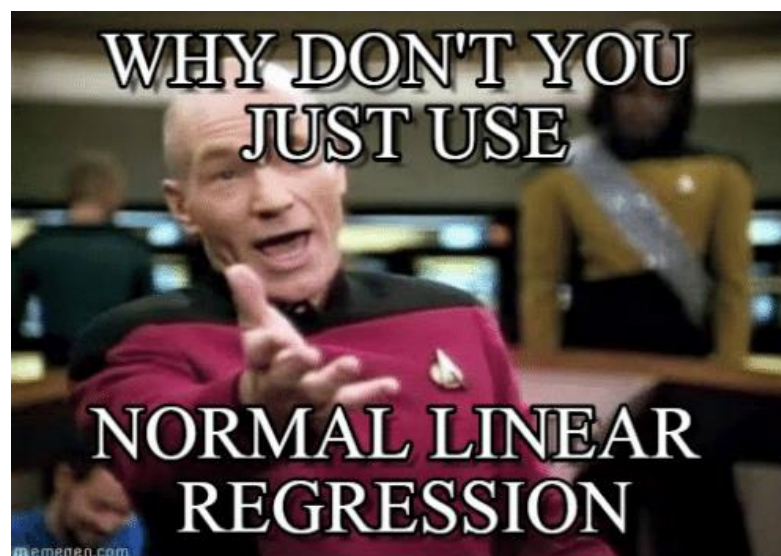
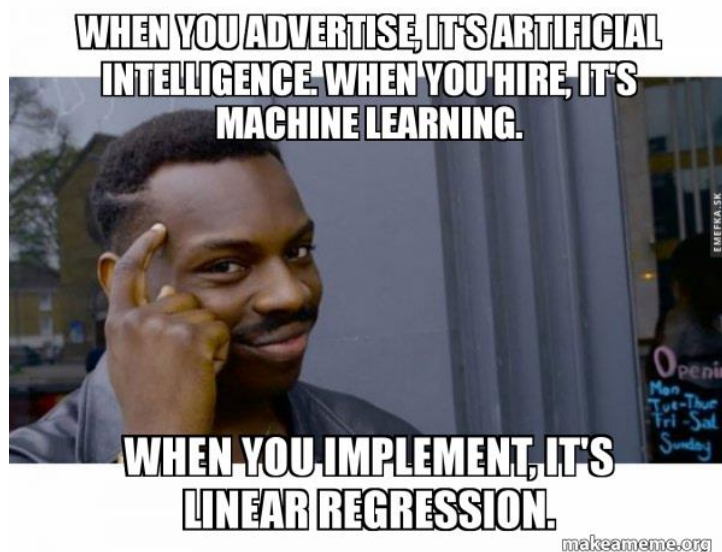
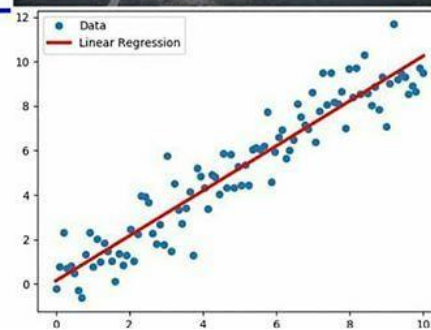


Online Courses

What they promise
you will learn



What you actually
learn



LEARNING ML/DL
FROM UNIVERSITY

ONLINE COURSES

FROM YOUTUBE

FROM ARTICLES

FROM MEMES



Anexo I:

Cálculo do vetor gradiente

Cálculo do vetor gradiente

Vamos considerar o hiperplano como a função hipótese

$$\hat{y}(n) = \mathbf{a}^T \mathbf{x}(n).$$

O vetor gradiente é calculado como

$$\frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = \left[\frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial a_0} \quad \dots \quad \frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial a_K} \right]^T.$$

Assim, o vetor gradiente da função de erro em relação aos pesos é dado por

$$\frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{a}} \left[\frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} (y(n) - \hat{y}(n))^2 \right].$$

Cálculo do vetor gradiente

Como a operação de derivada é distributiva, podemos reescrever a equação acima como

$$\frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial (y(n) - \hat{y}(n))^2}{\partial \mathbf{a}}.$$

Substituindo a função hipótese na equação acima, temos

$$\frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial (y(n) - \mathbf{a}^T \mathbf{x}(n))^2}{\partial \mathbf{a}}.$$

Cálculo do vetor gradiente

Aplicando a regra da cadeia, reescrevemos a equação anterior como

$$\frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = -\frac{2}{N} \sum_{n=0}^{N-1} (y(n) - \mathbf{a}^T \mathbf{x}(n)) \frac{\partial \mathbf{a}^T \mathbf{x}(n)}{\partial \mathbf{a}}.$$

Sabendo que a derivada de $\frac{\partial \mathbf{a}^T \mathbf{x}(n)}{\partial \mathbf{a}}$ é igual a $\mathbf{x}(n)$, reescrevemos a equação anterior como

$$\frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = -\frac{2}{N} \sum_{n=0}^{N-1} [y(n) - \hat{y}(n)] \mathbf{x}(n).$$

Cálculo do vetor gradiente

Fazendo $y(n) - \hat{y}(n) = d(n)$

$$\begin{aligned}\frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} &= -\frac{2}{N} \sum_{n=0}^{N-1} [y(n) - \hat{y}(n)] \mathbf{x}(n) \\ &= -\frac{2}{N} \left\{ d(0) \begin{bmatrix} x_0(0) \\ \vdots \\ x_K(0) \end{bmatrix} + d(1) \begin{bmatrix} x_0(1) \\ \vdots \\ x_K(1) \end{bmatrix} + \cdots + d(N-1) \begin{bmatrix} x_0(N-1) \\ \vdots \\ x_K(N-1) \end{bmatrix} \right\} \\ &= -\frac{2}{N} \left\{ \begin{bmatrix} d(0)x_0(0) + d(1)x_0(1) + \cdots + d(N-1)x_0(N-1) \\ \vdots \\ d(0)x_K(0) + d(1)x_K(1) + \cdots + d(N-1)x_K(N-1) \end{bmatrix} \right\}.\end{aligned}$$

Notem que a equação acima é um **vetor coluna** com dimensão $K + 1 \times 1$.

Cálculo do vetor gradiente

Podemos reescrever a equação (i.e., vetor) anterior como uma multiplicação matricial

$$\frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = -\frac{2}{N} \begin{bmatrix} x_0(0) & x_0(1) & \cdots & x_0(N-1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_K(0) & x_K(1) & \cdots & x_K(N-1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d(0) \\ d(1) \\ \vdots \\ d(N-1) \end{bmatrix}$$

Percebam que temos a multiplicação de uma matriz com dimensão $K + 1 \times N$ por um vetor coluna de dimensão $N \times 1$.

A matriz contém em cada linha todos os valores de $n = 0$ a $n = N - 1$ de um **único** atributo.

O vetor contém em cada linha a diferença $d(n) = y(n) - \hat{y}(n)$ para $n = 0$ até $n = N - 1$.

Cálculo do vetor gradiente

Se definirmos uma matriz que contém todos os N exemplos de todos os $K + 1$ atributos e que tem dimensão $N \times K + 1$

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_0(0) & \cdots & x_K(0) \\ x_0(1) & \cdots & x_K(1) \\ \vdots & & \vdots \\ x_0(N-1) & \cdots & x_K(N-1) \end{bmatrix},$$

e dois vetores coluna com dimensões $N \times 1$ contendo todos os valores esperados (i.e., rótulos) e todos os valores preditos

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y(0) \\ \vdots \\ y(N-1) \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{\mathbf{y}} = \begin{bmatrix} \hat{y}(0) \\ \vdots \\ \hat{y}(N-1) \end{bmatrix}$$

Cálculo do vetor gradiente

Usando a matriz e os vetores definidos no slide anterior, podemos reescrever o vetor gradiente como

$$\begin{aligned} & \frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} \\ &= -\frac{2}{N} \begin{bmatrix} x_0(0) & x_0(1) & \cdots & x_0(N-1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_K(0) & x_K(1) & \cdots & x_K(N-1) \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} y(0) \\ y(1) \\ \vdots \\ y(N-1) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \hat{y}(0) \\ \hat{y}(1) \\ \vdots \\ \hat{y}(N-1) \end{bmatrix} \right) \\ &= -\frac{2}{N} \mathbf{X}^T (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) \end{aligned}$$

O resultado da multiplicação matricial acima continuando resultando em um **vetor coluna** com dimensão $K + 1 \times 1$, ou seja, $(K + 1 \times N) \times (N \times 1) = K + 1 \times 1$.

Equação de atualização dos pesos

Utilizando o resultado anterior, podemos reescrever a equação de atualização dos pesos como

$$\begin{aligned}\mathbf{a} &= \mathbf{a} - \alpha \frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} \\ &= \mathbf{a} + \alpha \frac{2}{N} \mathbf{X}^T (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}).\end{aligned}$$

A soma acima deve resultar em um vetor coluna com dimensão $K + 1 \times 1$, pois esta é a dimensão dos dois vetores sendo somados.

Lembrem-se que $K + 1 \times 1$ é a dimensão do vetor \mathbf{a} , o qual contém todos os pesos do modelo e que $\frac{2}{N} \mathbf{X}^T (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})$ tem dimensão $K + 1 \times 1$ também.

Equação de atualização dos pesos

Podemos reescrever a equação de atualização dos pesos como

$$\begin{aligned}
 \mathbf{a} &= \mathbf{a} - \alpha \frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = \begin{bmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_K \end{bmatrix} - \alpha \begin{bmatrix} \frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial a_0} \\ \vdots \\ \frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial a_K} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_K \end{bmatrix} + \alpha \frac{2}{N} \begin{bmatrix} x_0(0) & x_0(1) & \cdots & x_0(N-1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_K(0) & x_K(1) & \cdots & x_K(N-1) \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} y(0) \\ y(1) \\ \vdots \\ y(N-1) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \hat{y}(0) \\ \hat{y}(1) \\ \vdots \\ \hat{y}(N-1) \end{bmatrix} \right) \\
 &= \begin{bmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_K \end{bmatrix} + \alpha \frac{2}{N} \left\{ \begin{bmatrix} d(0)x_0(0) + d(1)x_0(1) + \cdots + d(N-1)x_0(N-1) \\ \vdots \\ d(0)x_K(0) + d(1)x_K(1) + \cdots + d(N-1)x_K(N-1) \end{bmatrix} \right\}.
 \end{aligned}$$

Anexo II:

Cálculo do vetor gradiente de uma função hipótese com 2 pesos

Cálculo do vetor gradiente

Função hipótese com 2 pesos, a_1 e a_2

$$\hat{y}(n) = h(\mathbf{x}(n)) = a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n).$$

A função de erro é dada por

$$J_e(\mathbf{a}) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} [y(n) - (a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n))]^2.$$

Cálculo do vetor gradiente

Cada elemento do vetor gradiente é dado por

$$\begin{aligned}\frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial a_k} &= \frac{\partial \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} [y(n) - (a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n))]^2}{\partial a_k} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial [y(n) - (a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n))]^2}{\partial a_k} \\ &= -\frac{2}{N} \sum_{n=0}^{N-1} [y(n) - (a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n))] x_k(n), k = 1, 2\end{aligned}$$

Operação da derivada parcial é distributiva.

FIGURAS

