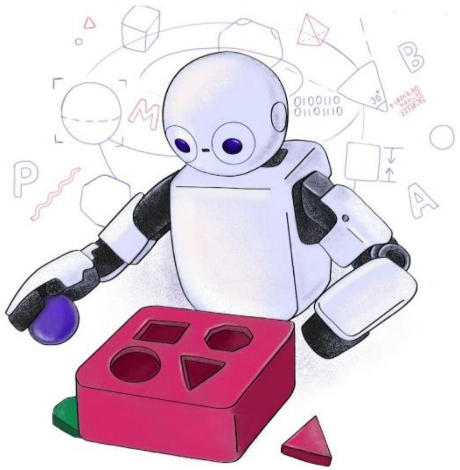
T319 - Introdução ao Aprendizado de Máquina: *Regressão Linear (Parte II)*



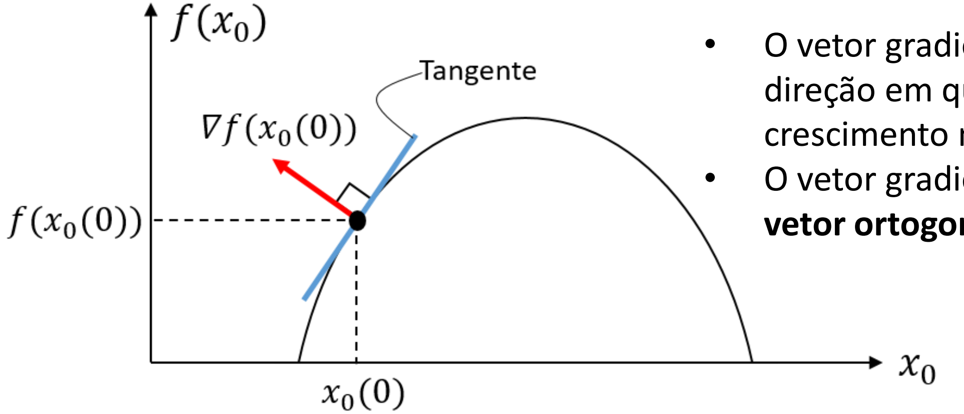
Inatel

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

Recapitulando

- Vimos a ***motivação*** por trás da ***regressão linear***: encontrar funções que aproximem o fenômeno gerador por trás das observações ruidosas.
- Definimos o ***problema matematicamente***.
- Vimos como resolver o problema da regressão, i.e., ***encontrar os pesos do modelo, através da equação normal***.
- Aprendemos o que é uma ***superfície de erro***.
- Discutimos algumas ***desvantagens*** (e.g. ***complexidade***, ***regressão não-linear***) da equação normal e vislumbramos uma possível solução para essas desvantagens, a qual discutiremos a seguir.

Vetor Gradiente



- O vetor gradiente, ∇f, indica a magnitude e a direção em que a função, f, tem a taxa de crescimento mais rápida.
- O vetor gradiente em um ponto específico é um **vetor ortogonal** à reta tangente àquele ponto.

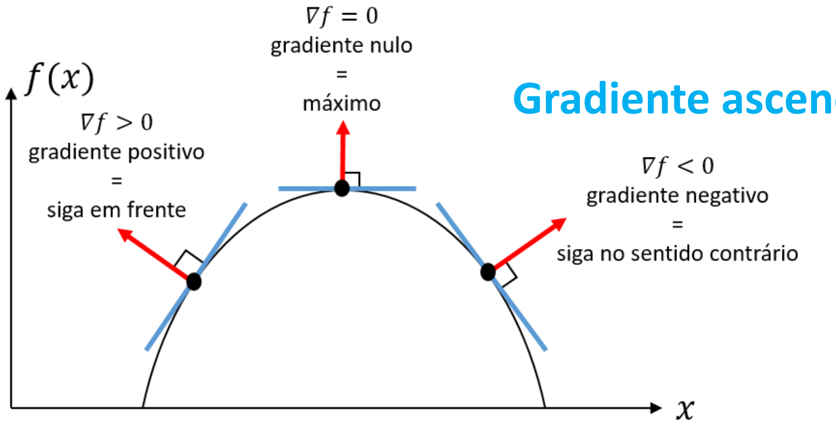
- Vocês se lembram das aulas de cálculo vetorial, onde vocês aprenderam sobre o ***vetor gradiente***?
  - ***Vetor gradiente*** é um vetor que indica a ***magnitude*** (i.e., ***taxa***) e a ***direção*** na qual, por ***deslocamento a partir de um ponto especifico***, obtém-se o ***maior incremento possível*** no valor de uma função, f.
- O ***vetor gradiente*** de uma função $f(x_0, x_1, \dots, x_K)$ é definido pela derivada parcial em relação a cada um de seus argumentos $x_k, k = 0, \dots, K$:

$$\nabla f(x_0, x_1, \dots, x_K) = \left[\frac{\partial f(x_0,x_1,\dots,x_K)}{\partial x_0} \quad \frac{\partial f(x_0,x_1,\dots,x_K)}{\partial x_1} \quad \cdots \quad \frac{\partial f(x_0,x_1,\dots,x_K)}{\partial x_K}\right]^T.$$

- Cada elemento do ***vetor gradiente*** indica a ***magnitude*** e a ***direção*** de máxima variação da função em ***relação àquele argumento***.
- Se imaginem parados em um ponto $x_0(0), x_1(0), \dots, x_K(0)$ no domínio de f, o vetor $\nabla f(x_0(0), x_1(0), \dots, x_K(0))$ diz em qual direção devemos caminhar para aumentar o valor de f mais rapidamente, ou seja

$$f\left(x_0(0) + \alpha \frac{\partial f(x_0,x_1,\dots,x_K)}{\partial x_0}, \dots, x_K(0) + \alpha \frac{\partial f(x_0,x_1,\dots,x_K)}{\partial x_K}\right) > f(x_0(0), \dots, x_K(0)).$$

Gradiente Ascendente



Gradiente ascendente

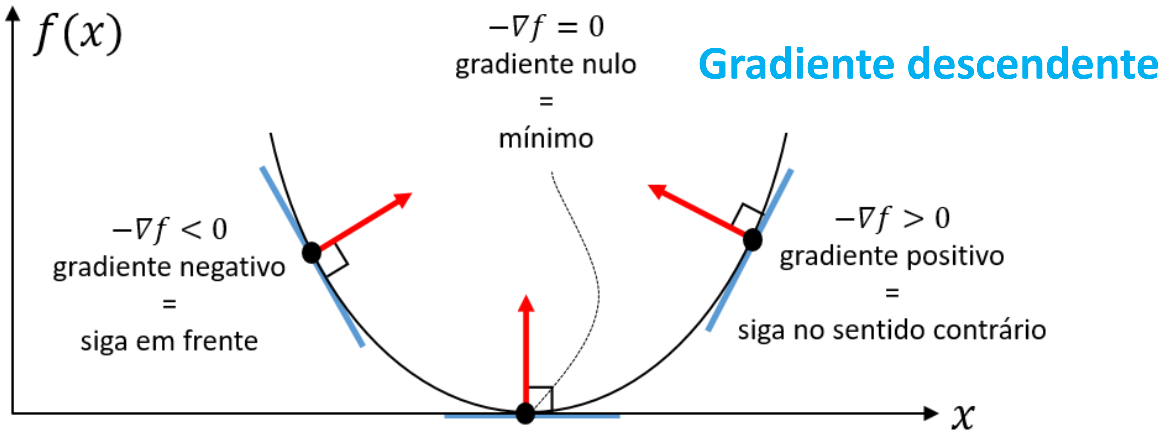
A ***derivada parcial*** dá a ***inclinação*** da ***reta tangente*** ao ponto.

- Em um ***ponto específico***, cada elemento do ***vetor gradiente*** com valor:
  - + (inclinação positiva) significa que o ponto de máximo esta à frente.
  - - (inclinação negativa) significa que o ponto de máximo está atrás.
  - 0 (inclinação nula) significa que ponto de máximo foi encontrado.

  Importante
- Portanto, seguindo na direção indicada pelo ***vetor gradiente***, chegamos ao ponto de máximo da função, $f(x_0, x_1, \dots, x_K)$ ou $f(\boldsymbol{x})$ em forma vetorial.
- Assim, um algoritmo de otimização ***iterativo*** que siga a direção indicada pelo ***vetor gradiente*** para encontrar o ***ponto de máximo*** de uma função $f(\boldsymbol{x})$ é conhecido como ***gradiente ascendente***.
- A cada iteração, o algoritmo calcula o ***vetor gradiente*** da função $f(\boldsymbol{x})$ num ponto específico, $\boldsymbol{x}(l)$, e atualiza os valores dos argumentos da função de tal forma, que a cada ***iteração*** se tenha:

$$f(\boldsymbol{x}(l+1)) = f\big(\boldsymbol{x}(l) + \nabla f(\boldsymbol{x}(l))\big) > f(\boldsymbol{x}(l)), l \geq 0.$$

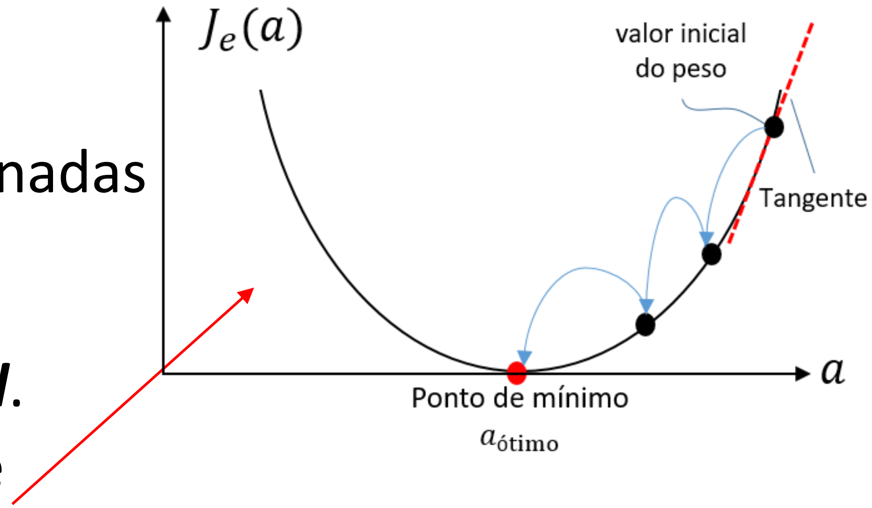
Gradiente Descendente



- Mas e se formos na ***direção contrária*** a da máxima taxa de crescimento, dada pelo ***vetor gradiente***, $\nabla f(\boldsymbol{x})$, ou seja $-\nabla f(\boldsymbol{x})$?
  - Neste caso, iremos na direção de **decrescimento** mais rápido da função, $f(\boldsymbol{x})$.
- Portanto, um algoritmo de otimização ***iterativo*** que siga a direção contrária à indicada pelo ***vetor gradiente*** para encontrar o ***ponto de mínimo*** de uma função $f(\boldsymbol{x})$ é conhecido como ***gradiente descendente***.
- A cada iteração, o algoritmo calcula o ***vetor gradiente*** da função $f(\boldsymbol{x})$ num ponto específico, $\boldsymbol{x}(l)$, e atualiza os valores dos argumentos da função de tal forma, que a cada ***iteração*** se tenha:
$$f(\boldsymbol{x}(l+1)) = f\big(\boldsymbol{x}(l) - \nabla f(\boldsymbol{x}(l))\big) < f(\boldsymbol{x}(l)), l \geq 0.$$
- Nesta disciplina, como precisamos minimizar o erro, iremos focar neste algoritmo.

Características do Gradiente Descendente

- Algoritmo de ***otimização iterativo*** e ***genérico***: encontra soluções ótimas para uma ampla gama de problemas.
  - Por exemplo, é utilizado em vários problemas de aprendizado de máquina e otimização.
- Escalona melhor do que o método da ***equação normal*** para grandes conjuntos de dados.
- É de fácil implementação.
- Não é necessário se preocupar com matrizes mal-condicionadas (determinante próximo de 0, i.e., quase ***singulares***).
- Pode ser usado com modelos não-lineares.
- O único requisito é que a ***função de erro*** seja ***diferenciável***.
- Quando aplicado a problemas de **regressão**, a ideia geral é atualizar os pesos, ***a***, ***iterativamente***, a fim de ***minimizar*** a ***função de erro,*** ou seja, encontrar seu ***ponto de mínimo***.
- A seguir, veremos como aplicar o algoritmo do ***gradiente descendente*** ao problema da ***regressão linear***.

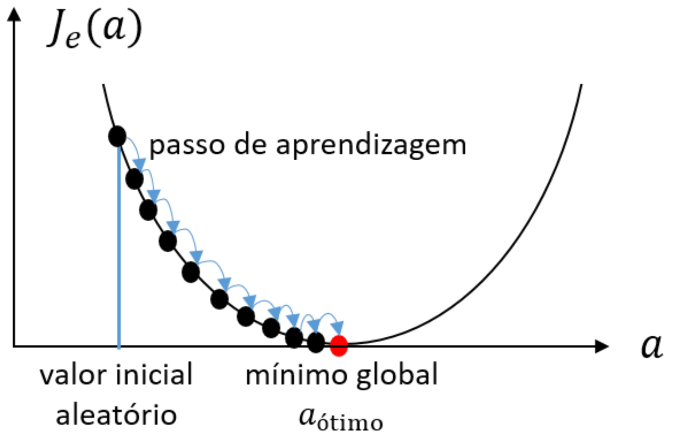


O Algoritmo do Gradiente do Descendente (GD)

- O algoritmo inicializa o vetor de pesos, $\boldsymbol{a}$, em um ponto aleatório do ***espaço de pesos*** e então, os atualiza na ***direção oposta*** a do ***vetor gradiente*** até que algum critério de convergência seja atingido, indicando que um ***mínimo local*** ou o ***global*** da ***função de erro*** foi encontrado.

$\boldsymbol{a} \leftarrow$ inicializa em um ponto qualquer do espaço de pesos
loop até convergir **ou** atingir número máximo de épocas **do**

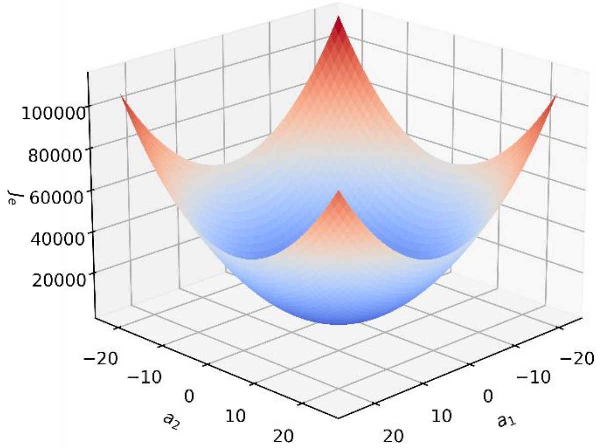
$$\boldsymbol{a} \leftarrow \boldsymbol{a} - \alpha \frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial \boldsymbol{a}}$$



- Onde $\alpha > 0$ é o ***passo de aprendizagem*** e $\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial \boldsymbol{a}}$ é o ***vetor gradiente*** da ***função de erro***.
- O ***passo de aprendizagem*** dita o tamanho dos passos/deslocamentos dados na direção oposta a do ***gradiente***. Ele pode ser constante ou decair com o tempo.
- Na sequência, veremos como encontrar o ***vetor gradiente*** da função de erro e implementar o algoritmo do ***gradiente descendente***.

Exemplo

[Exemplo: exemplo_regressao_linear_gradiente_descendente.ipynb]



Usaremos uma ***função hipótese*** com 2 pesos, a_1 e a_2, sendo $a_0 = 0$

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

A função de erro é dada por

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

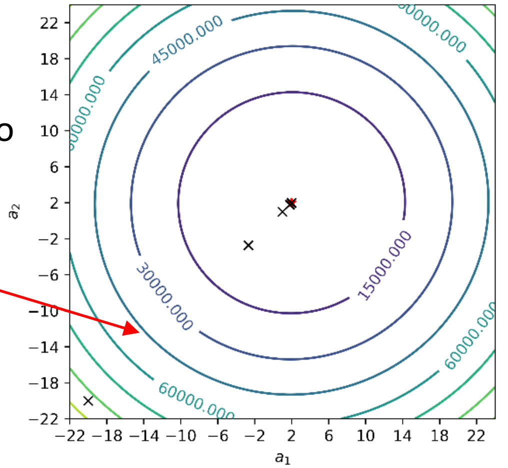
Cada elemento do vetor gradiente é dado por

$$\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial a_k} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial \left[y(n) - \left(a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n) \right) \right]^2}{\partial a_k}$$

$$= -\frac{2}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \left[y(n) - \left(a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n) \right) \right] x_k(n), k = 1,2$$

Operação da derivada parcial é distributiva.

Superfície de contorno com o caminho feito pelo algoritmo até a convergência.



A **equação de atualização** dos pesos $a_k, k = 1$ e 2 é dada por

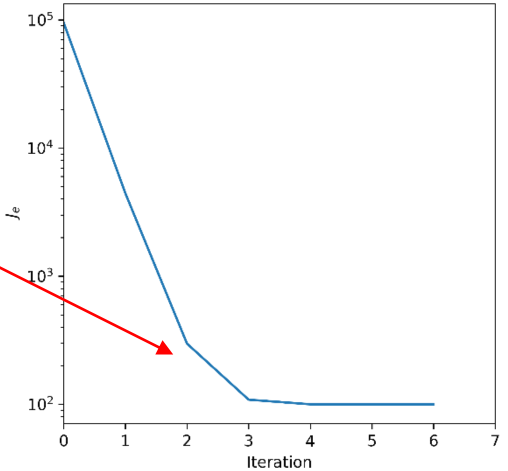
$$a_k = a_k - \alpha \frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial a_k}$$

$$a_k = a_k + \alpha \sum_{n=0}^{N-1} \left[y(n) - \left(a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n) \right) \right] x_k(n), \; k = 1,2.$$

Forma matricial: $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a} - \alpha \boldsymbol{X}^T (\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}})$

onde o termo $\frac{2}{N}$ foi absorvido pelo ***passo de aprendizagem***, α.

Curva do EQM em função do número de épocas.



Versões do Gradiente Descendente

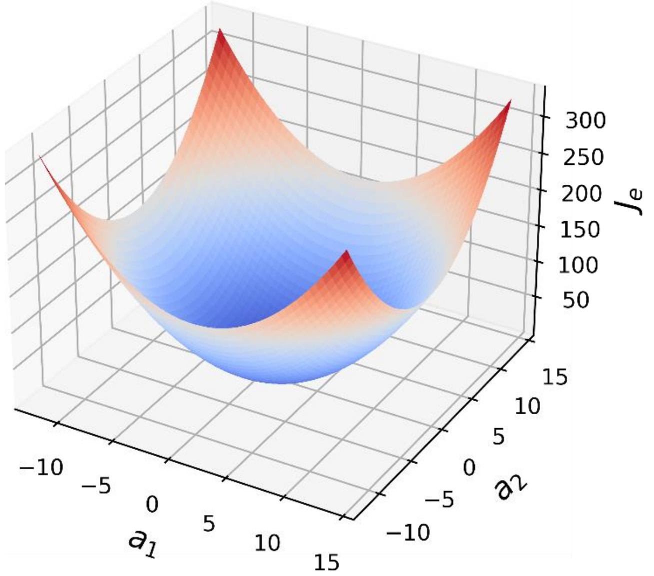
Existem 3 diferentes versões para a implementação do algoritmo do Gradiente Descendente: Batelada, Estocástico e Mini-Batch.

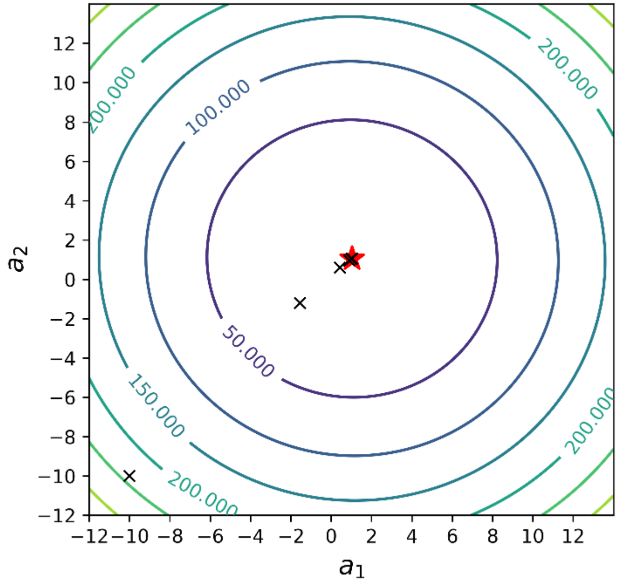
- **Batelada** (do inglês ***batch***): a cada época do algoritmo, ***todos*** os exemplos de treinamento são considerados no processo de treinamento do modelo. Esta versão foi a utilizada no exemplo anterior.

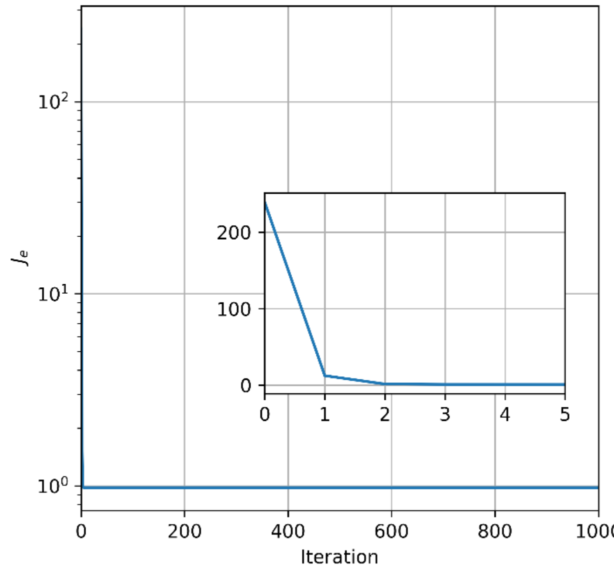
$$a_k = a_k + \alpha \boxed{\textstyle\sum_{n=0}^{N-1}} \left[y(n) - \left(a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n) \right) \right] x_k(n), \; k = 1, \dots, K$$

- **Características**:
  - Utilizado quando se possui previamente todos os atributos e rótulos de treinamento, ou seja, o conjunto de treinamento.
  - **Convergência garantida**, dado que o passo de aprendizagem tenha o tamanho apropriado e se espere tempo suficiente.
  - **Convergência pode ser bem lenta**, dado que o modelo é apresentado a todos os exemplos a cada época.

Características do GD em Batelada







- Segue diretamente para o mínimo global.
- Atinge o mínimo global em aproximadamente 3 épocas.
- Nesse caso específico, 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).
- Não fica "*oscilando*" em torno do mínimo após alcançá-lo, pois o vetor gradiente neste ponto é praticamente nulo.

[Exemplo: batch_gradient_descent_with_figures.ipynb]()

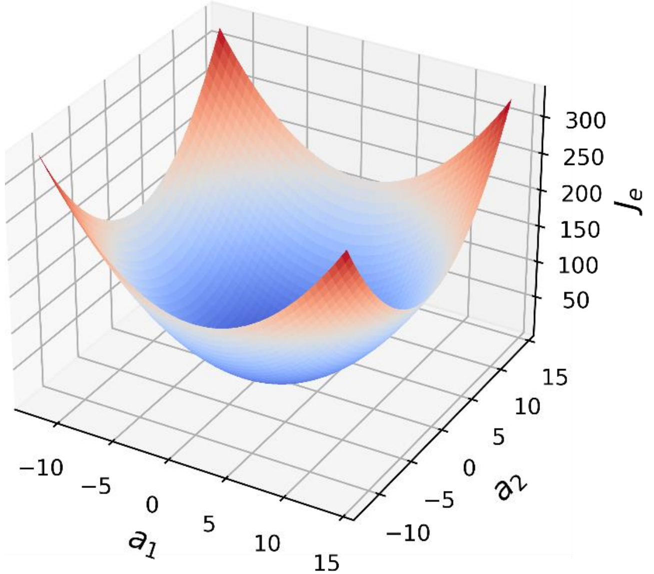
Versões do Gradiente Descendente

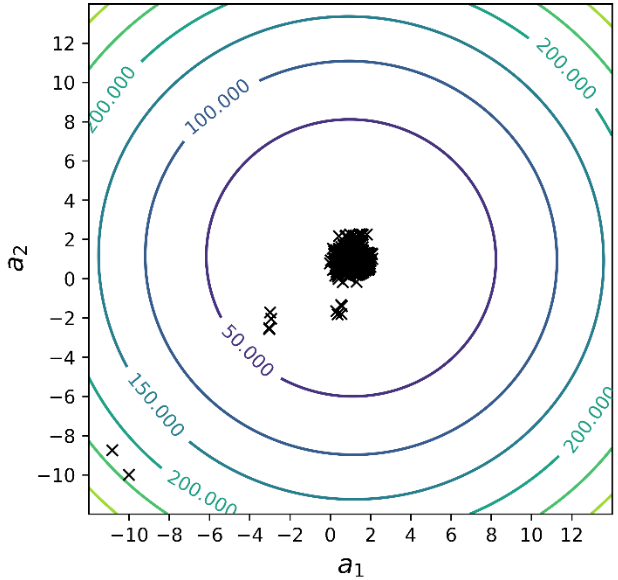
- **Gradiente Descendente Estocástico (GDE)**: também conhecido como ***online*** ou ***incremental*** (exemplo-a-exemplo). Com esta versão, os pesos do modelo são atualizados a cada novo exemplo de treinamento.

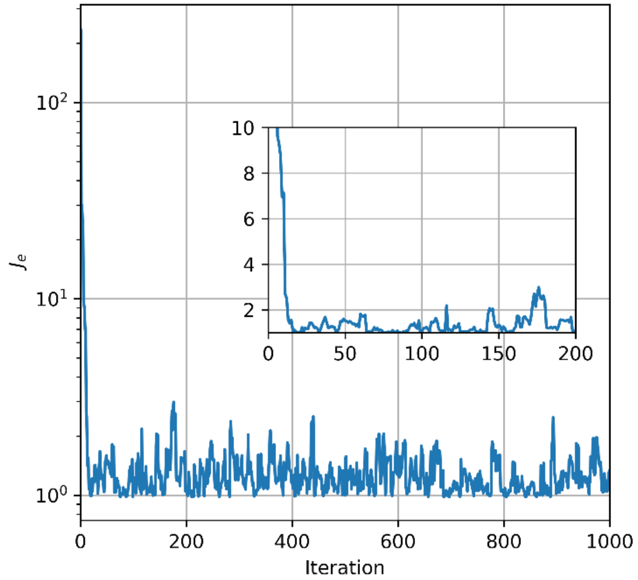
$$a_k = a_k + \alpha\left[y(n) - \left(a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n)\right)\right]x_k(n),\ k = 1, \dots, K$$

- **Características:**
  - ***Aproximação estocástica do gradiente***: gradiente é calculado com um único exemplo.
  - Utilizado quando os **atributos e rótulos** são **obtidos sequencialmente**.
  - Ou quando o **conjunto de treinamento é muito grande**.
  - **Computacionalmente mais rápido** e **menos custoso em termos de memória** que o GD em batelada.
  - **Convergência não é garantida** com um passo de aprendizagem fixo. O algoritmo pode oscilar em torno do mínimo sem nunca convergir para o valor ótimo.
  - Esquemas de variação do passo de aprendizagem podem ajudar a garantir a convergência.

Características do GD Estocástico







- Devido à sua natureza estocástica, **não apresenta um caminho regular para o mínimo**, mudando de direção várias vezes.
- Por aproximar o gradiente com apenas um exemplo, as **derivadas parciais são "ruidosas"**.
- Por serem ruidosas, o algoritmo não converge suavemente para o mínimo: "*oscila*" em torno dele.
- Quando o treinamento termina, os valores finais dos pesos são bons, mas podem não ser ótimos.
- A convergência ocorre apenas na média.
- Tempo de treinamento é menor: com apenas uma época o algoritmo já se aproxima do ponto ótimo.
- Necessita de um esquema de ajuste do passo de aprendizagem, α, para ficar mais "*comportado*".

[Exemplo: stocastic_gradient_descent_with_figures.ipynb]

Versões do Gradiente Descendente

- **Mini-batch**: é um meio-termo entre as duas versões anteriores. O conjunto de treinamento é dividido em vários subconjuntos (***mini-batches***) com elementos aleatórios (i.e., par atributo/rótulo), onde os pesos do modelo são ajustados a cada mini-batch.

$$a_k = a_k + \alpha \boxed{\sum_{n=0}^{MB-1}} \left[y(n) - \left(a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n) \right) \right] x_k(n),\ k = 1, \dots, K$$

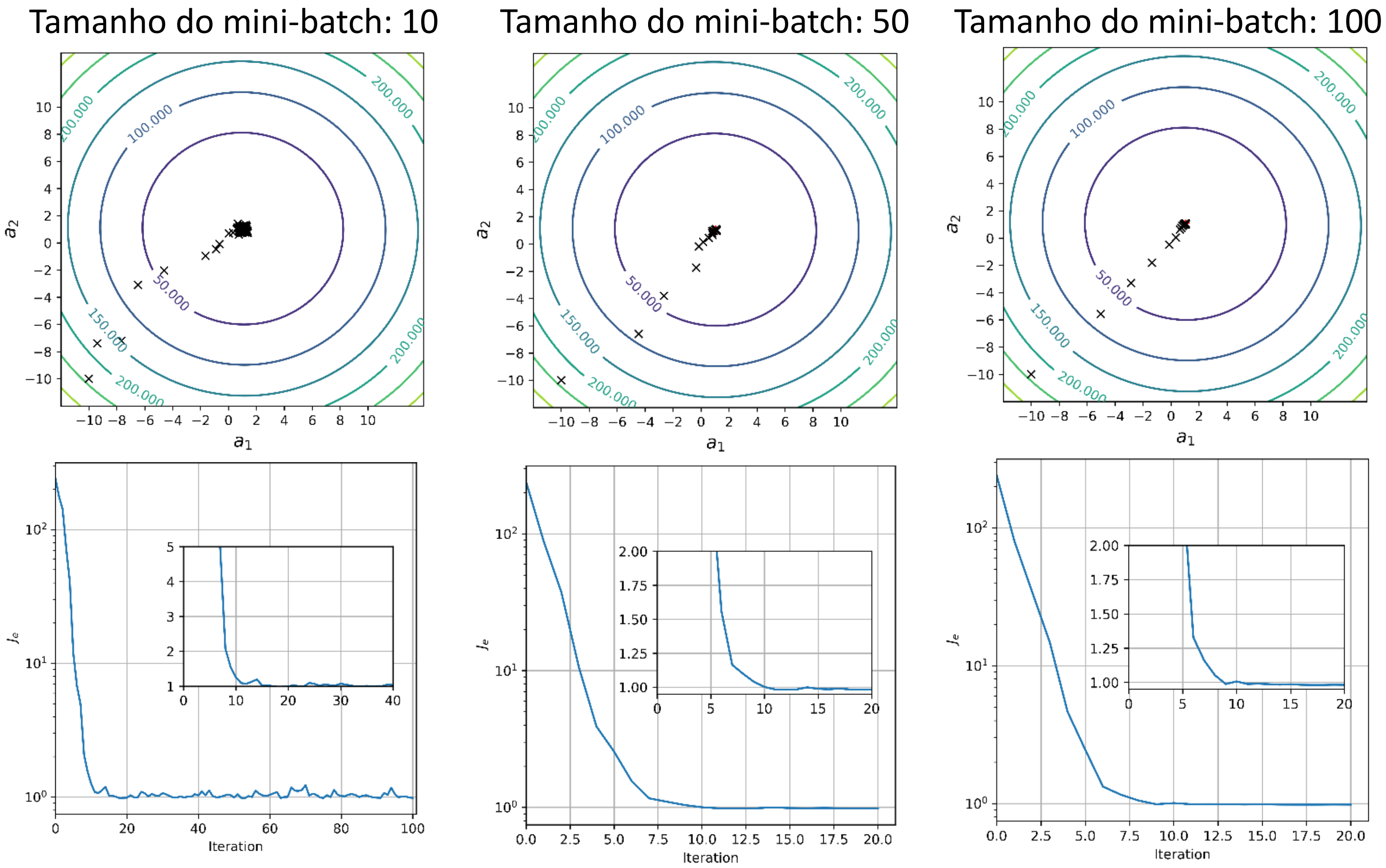
onde MB é o tamanho do mini-batch.

Características:

- Pode ser visto como uma ***generalização*** das 2 versões anteriores:
  - Caso $MB = \mathrm{N}$, então ele se torna o GD em batelada.
  - Caso $MB = 1$, então ele se torna o GD estocástico.
- Computacionalmente mais rápido do que o GD em batelada, mas mais lento do que o GD estocástico.
- Convergência depende do tamanho do mini-batch.
- Pode usar esquemas de variação do passo de aprendizagem para melhorar a convergência.

Características do GD com Mini-Batch

- ***Progresso menos irregular*** do que com o GDE, especialmente com mini-batches maiores.
- Como resultado, essa versão ***oscila menos ao redor do mínimo global*** do que o GDE.
- Tem ***comportamento mais próximo do GD em batelada*** para mini-batches maiores.
- ***Oscilação*** em torno do mínimo ***diminui conforme o tamanho do mini-batch aumenta***.
- Pode também ser usado com um ***esquema de variação do passo de aprendizagem***.



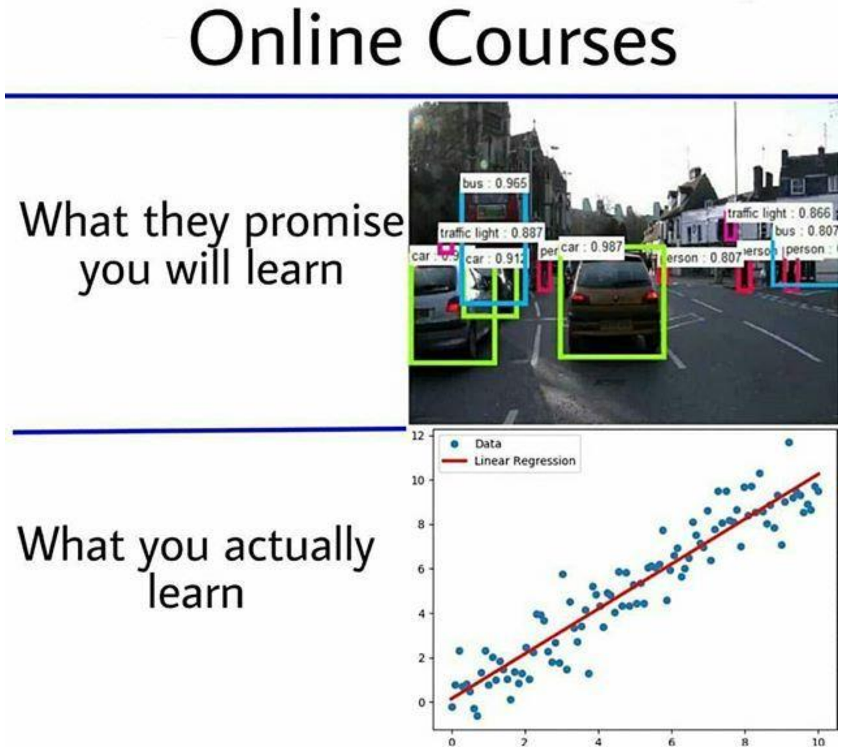
[Exemplo: mini_batch_gradient_descent_with_figures.ipynb]()

Tarefas

- **Quiz**: "*T319 - Quiz - Regressão: Parte II*" que se encontra no MS Teams.
- **Exercício Prático**: **Laboratório #3**.
  - 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.
  - **Laboratórios podem ser feitos em grupo, mas as entregas devem ser individuais.**

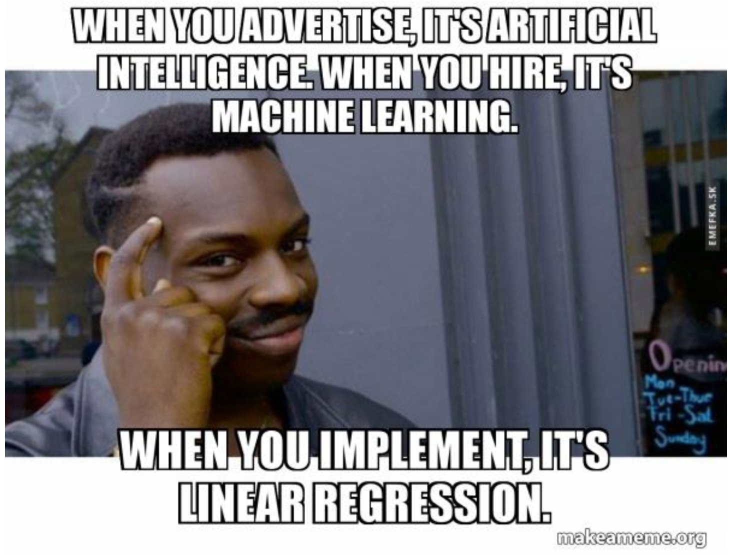
Obrigado!

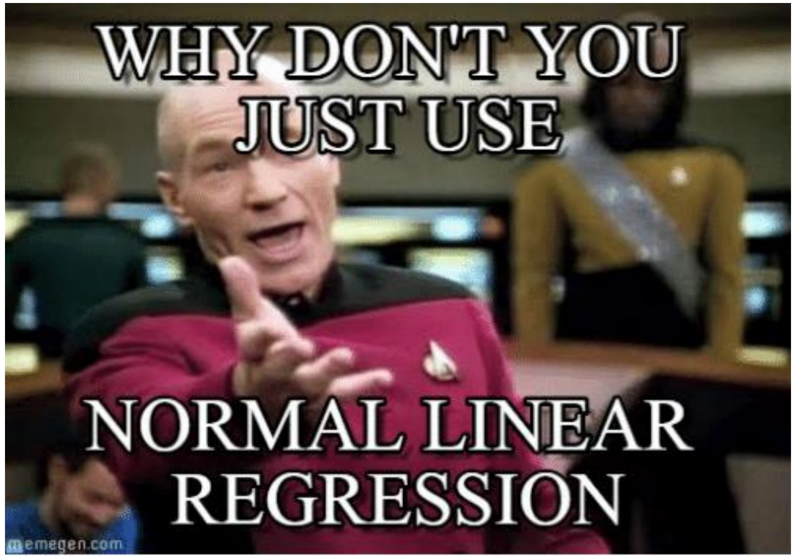

Deep Learning
linear regression


Online Courses
What they promise you will learn
What you actually learn
Data
Linear Regression


Linear Regression is NOT Machine Learning
CHANGE MY MIND


LEARNING ML,DL FROM UNIVERSITY
ONLINE COURSES
FROM YOUTUBE
FROM ARTICLES
FROM MEMES


WHEN YOU ADVERTISE, IT'S ARTIFICIAL INTELLIGENCE. WHEN YOU HIRE, IT'S MACHINE LEARNING.
WHEN YOU IMPLEMENT, IT'S LINEAR REGRESSION.
makeameme.org


WHY DON'T YOU JUST USE
NORMAL LINEAR REGRESSION
memegen.com