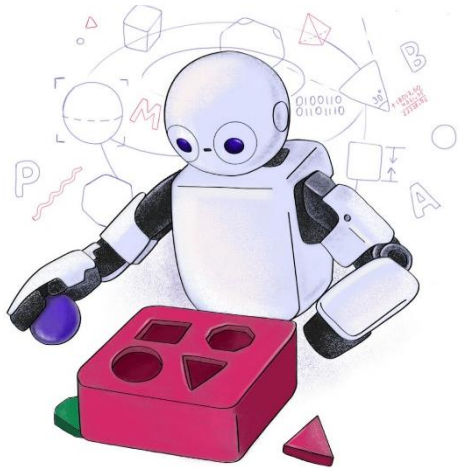
T319 - Introdução ao Aprendizado de Máquina: *Regressão Linear (Parte III)*



Inatel

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

Recapitulando

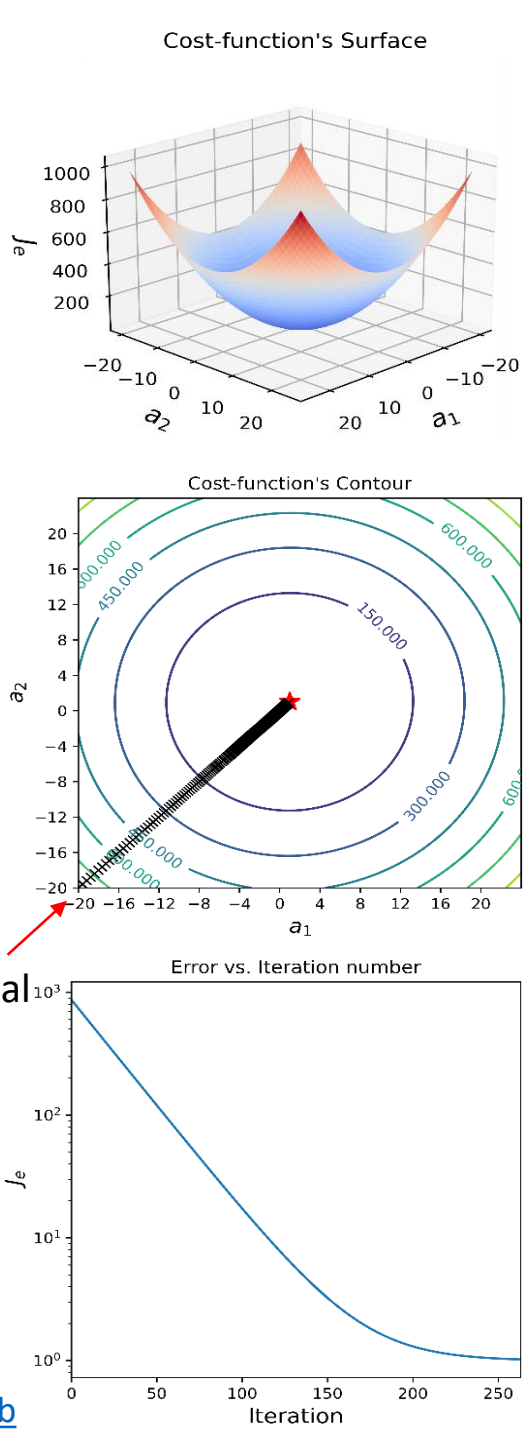
- Discutimos sobre o vetor gradiente.
- Aprendemos dois algoritmos que usam o vetor gradiente para a resolução de problemas de otimização.
  - Gradiente Ascendente para problemas de maximização.
  - Gradiente Descendente para problemas de minimização.
- Vimos as três versões do gradiente descendente e as comparamos.
  - Batelada
  - Estocástico
  - Mini-Batch
- Nesta parte, discutiremos o quão importante é o ajuste do passo de aprendizagem, α.

Escolha do Passo de Aprendizagem

- Conforme nós vimos, enquanto a ***taxa*** e a ***direção*** de ***máximo declive*** da ***função de erro*** são determinadas pelo valor negativo do ***vetor gradiente*** da função, o ***passo de aprendizagem*** determina o quão grande a atualização dos pesos é feita naquela direção.

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

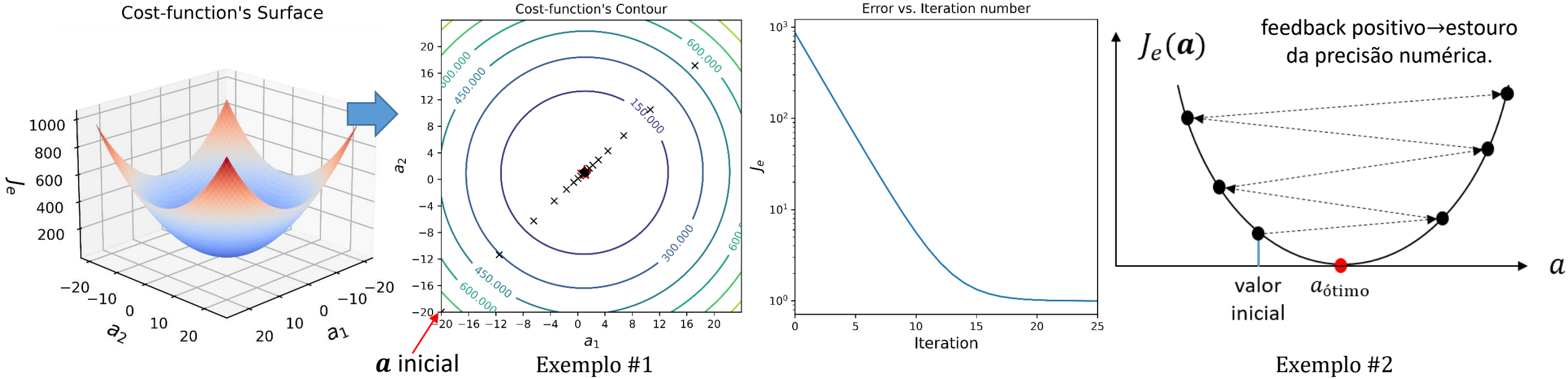
- Portanto, a **escolha do passo de aprendizagem (hiperparâmetro) é muito importante**:
  - Caso ele seja muito pequeno, a convergência do algoritmo será lenta.
  - **Exemplo**: com $\alpha = 0.01$, o algoritmo atinge o valor ótimo após mais de 250 épocas.
    - Passos muito curtos, fazem com que o algoritmo 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.
- Se α for grande, mas não tão grande assim, o algoritmo fica "pulando" ou "oscilando" de um lado para o outro da superfície de erro até que ele converge, por sorte (veja exemplo #1).
- Em outros casos, quado α é muito grande, a cada iteração o algoritmo "pula" para um valor mais alto que antes, e assim, divergindo (veja exemplo #2).

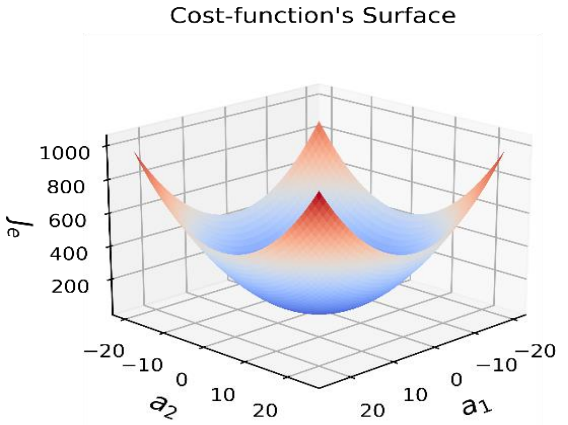


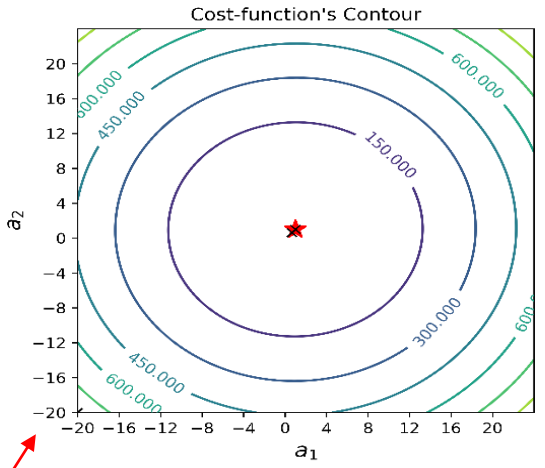
Escolha do Passo de Aprendizagem

- Portanto, o valor do ***passo de aprendizagem*** deve ser ***explorado*** para se encontrar um ***valor ideal*** 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, a escolha do ***passo de aprendizagem*** pode ser bastante demorada.
- Uma regra empírica para ***exploração*** do passo de aprendizagem é usar a seguinte sequência (***ajuste manual***):

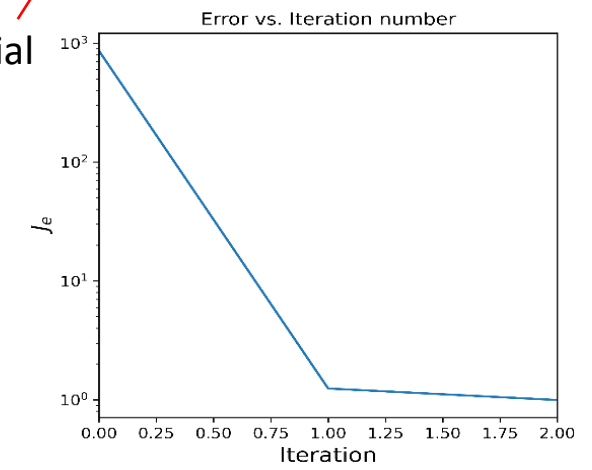
$$\ldots, 0.001, 0.003, 0.01, 0.03, 0.1, 0.3, 1.0, \ldots$$

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





a inicial



Como depurar o algoritmo do GD?

- Uma maneira de se ***depurar*** o algoritmo do ***gradiente descendente,*** principalmente quando não é possível se plotar o gráfico da superfície de contorno, é plotar o gráfico do erro (EQM) em função do número de iterações.
  - Figura A ⇒ Passo ideal: convegência rápida
    - ***Erro diminui rapidamente nas primeiras épocas*** e depois diminui quase que a uma ***taxa constante***, pois os pesos não são mais praticamente atualizados (mínimo da função foi atingido).
    - Convergência pode ser declarada, por exemplo, quando o erro entre duas iterações subsequentes for menor do que um limiar pré-definido (e.g., 1e-3).
  - Figura B ⇒ Passo pequeno demais: convergência lenta.
  - Figuras C e D ⇒ Passo grande demais: divergência (C) e oscilação (D).

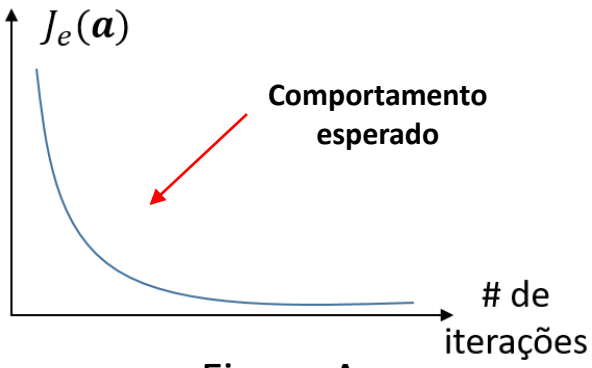


Figura A

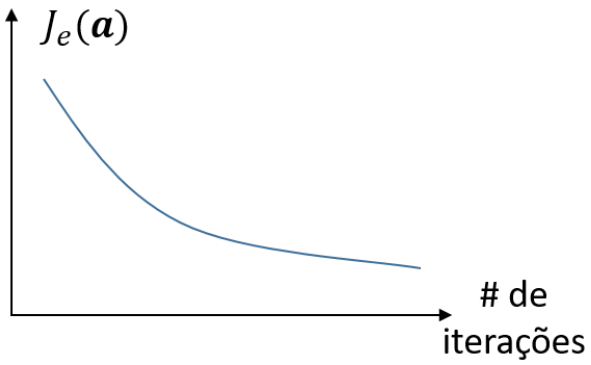


Figura B

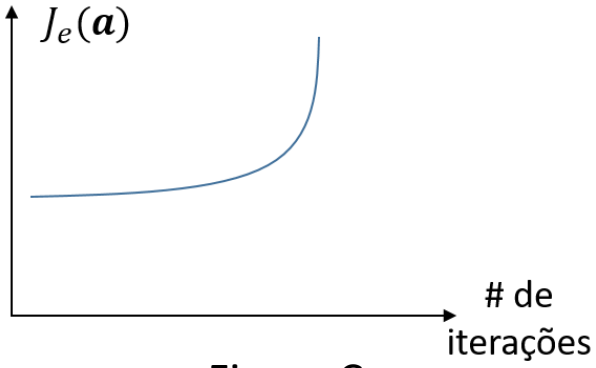


Figura C

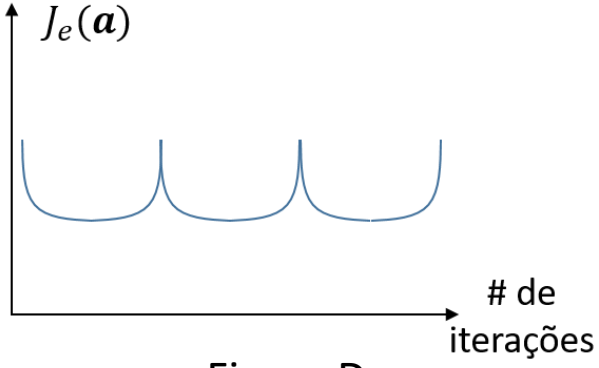
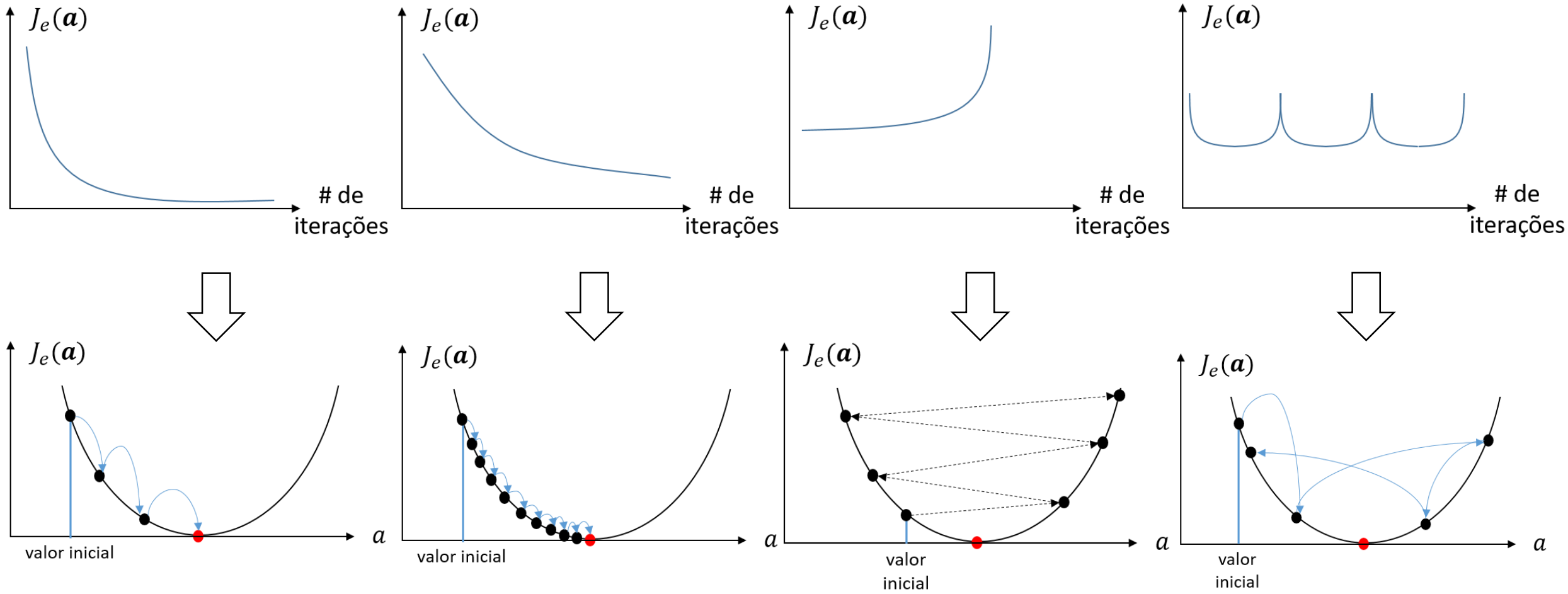


Figura D

Como depurar o algoritmo do GD?



Como configurar o passo de aprendizagem?

Além do ***ajuste manual*** (escolha de α por tentativa e erro), podemos também usar as seguintes abordagens para configurar α:

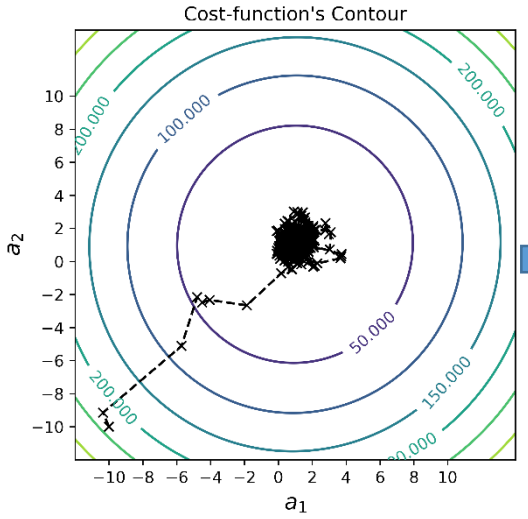
- **Redução programada**: redução de α ao longo do processo de treinamento, ou seja, ao longo das iterações, de forma a garantir a convergência.
- **Termo momentum**: adiciona a ***média do histórico de atualizações*** à equação de atualização dos pesos, tornando as atualizações menos ruidosas, e, consequentemente, acelerando a convergência do algoritmo.
- As duas últimas abordagens são usadas com GDE e mini-batch para garantir a convergência.
- **Variação adaptativa**: α é adaptativamente ajustado de acordo com a inclinação da superfície, além disso, usa passos diferentes para cada peso do modelo, os atualizando de forma independente de acordo com a inclinação na direção destes pesos.
  - **Vantagem**: na maioria dos casos, não é necessário se ajustar manualmente nenhum ***hiperparâmetro*** como no caso dos esquemas de redução programada.

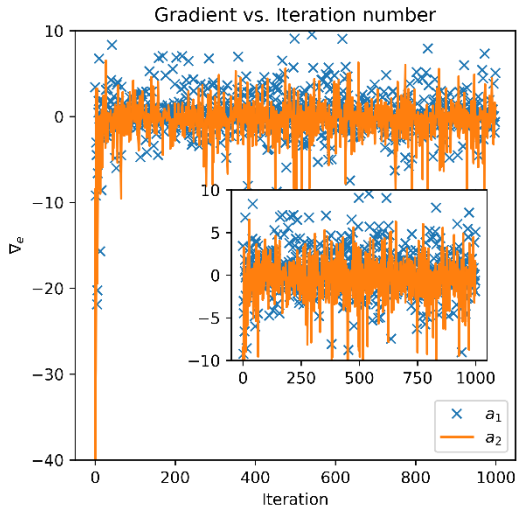
Redução Programada do Passo de Aprendizagem

- Os três tipos mais comuns para a ***redução programada*** de α são:
  - **Decaimento gradual**: também conhecido como ***decaimento por etapas*** ou ***por degraus***. Reduz a taxa de aprendizagem inicial, α_0, de um fator, τ_0, a cada número pré-definido de iterações, β. Um valor típico para reduzir a taxa de aprendizado é de $\tau_0 = 0.5$ a cada β de iterações.
  - **Decaimento exponencial**: é expresso pela equação $\alpha = \alpha_0 e^{-kt}$, onde α_0 e k são hiperparâmetros e t é o número da iteração corrente.
  - **Decaimento temporal**: é expresso pela equação $\alpha = {}^{\alpha_0}/_{(1+kt)}$ onde α_0 e k são hiperparâmetros e t é o número da iteração corrente.
- Na prática, o ***decaimento gradual*** é o mais utilizado entre os 3, pois seus ***hiperparâmetros*** (a taxa de decaimento, τ_0, e o intervalo para redução, β) são mais interpretáveis do que o hiperparâmetro k, que dita a taxa de decaimento do passo de aprendizagem.
- Mas percebam que ainda temos que encontrar os ***hiperparâmetros***.

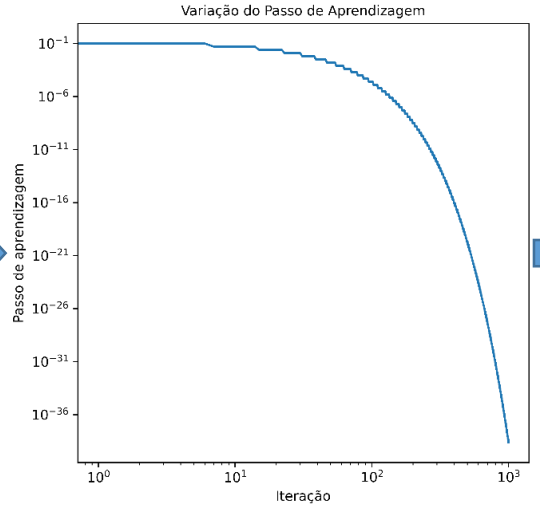
Exemplo: GDE com Redução Programada de α

GDE sem redução programada



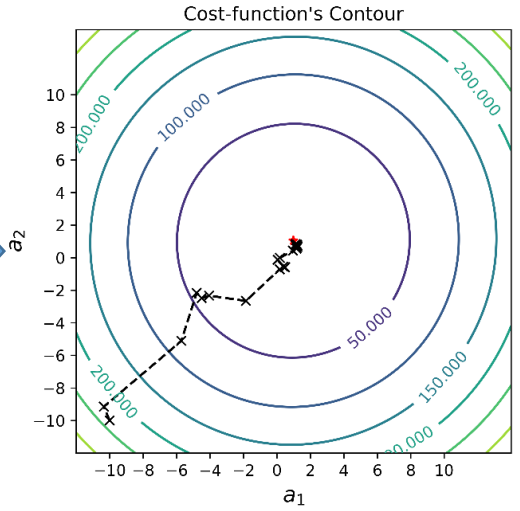


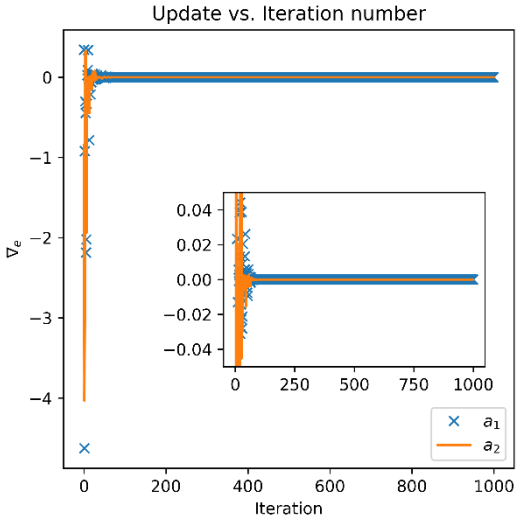
Redução programada




```
# learning schedule: Gradual decay.
def stepDecay(alpha_init, t, beta=8.0, drop=0.5):
    '''Gradual decay.'''
    alpha = alpha_init * math.pow(drop, math.floor((1+t)/beta))
    return alpha
```

GDE com redução programada





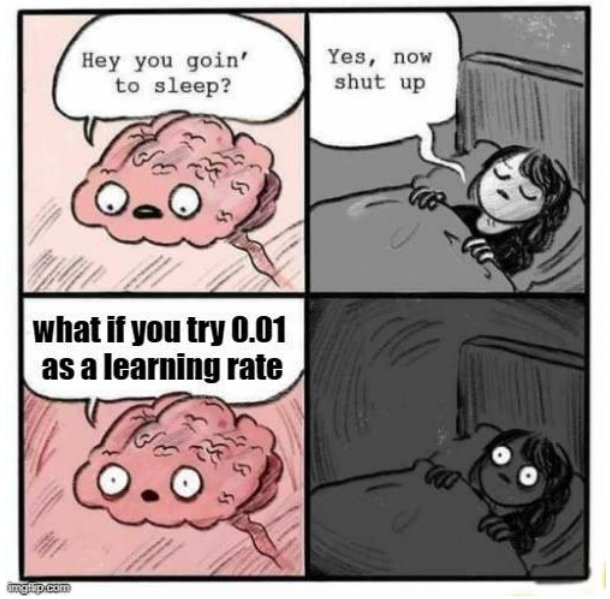
- Exemplo usando GDE com ***decaimento gradual***.
- O caminho com ***decaimento gradudal*** também não é regular para o ponto de mínimo.
- Apresenta ***algumas mudanças de direção*** ao longo do caminho.
- Porém, a ***oscilação em torno do mínimo é bastante reduzida*** devido à ***diminuição gradual*** de α.
- Conseguimos visualizar melhor o efeito da redução de α nas figuras que mostram o gradiente.
- **Conclusão**: um passo de aprendizagem que diminui ao longo das iterações permite que o algoritmo se estabilize próximo ao ponto de mínimo global.

Exemplo: stocastic_gradient_descent_with_learning_schedule_and_with_figures.ipynb

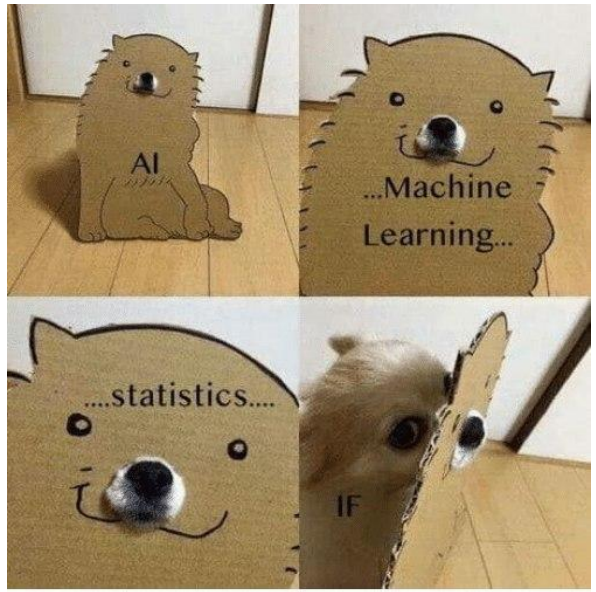
Tarefas

- **Quiz**: “*T319 - Quiz - Regressão: Parte III*” que se encontra no MS Teams.
- **Exercício Prático**: **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.
  - **Laboratórios podem ser feitos em grupo, mas as entregas devem ser individuais.**

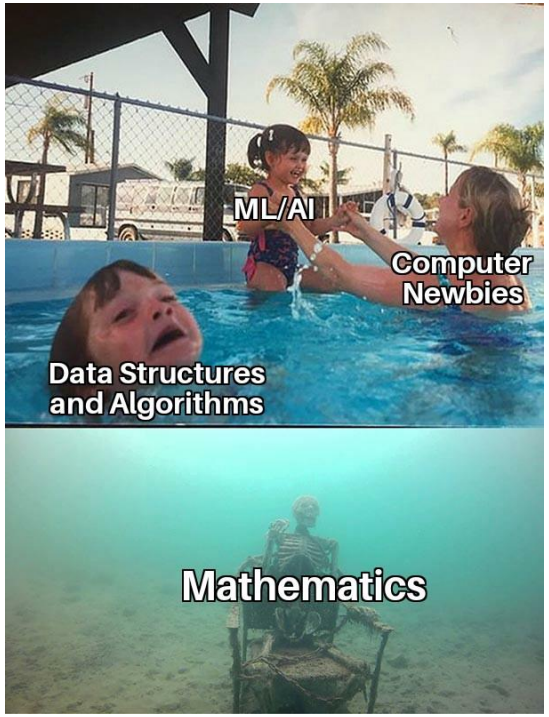
Obrigado!



When someone asks why you never stops talking about machine learning

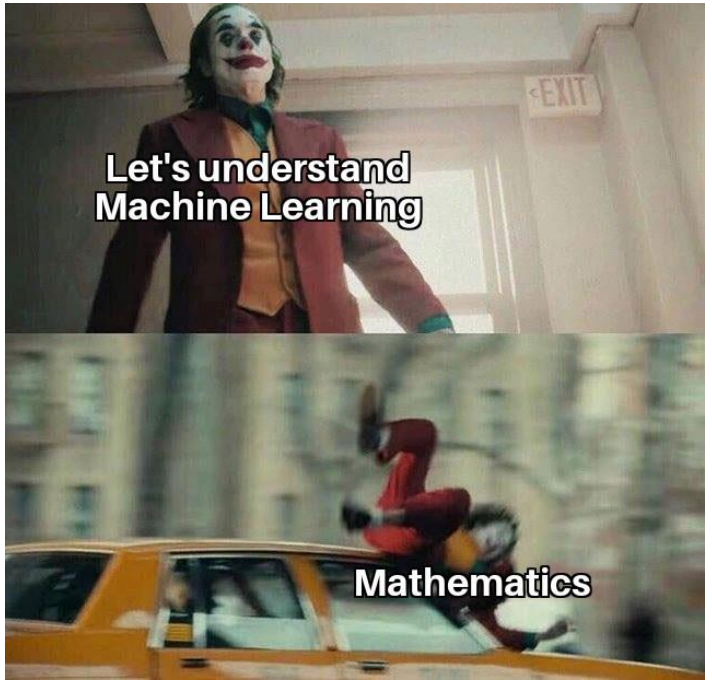


IF IF IF IF IF IF IF IF IF WE!

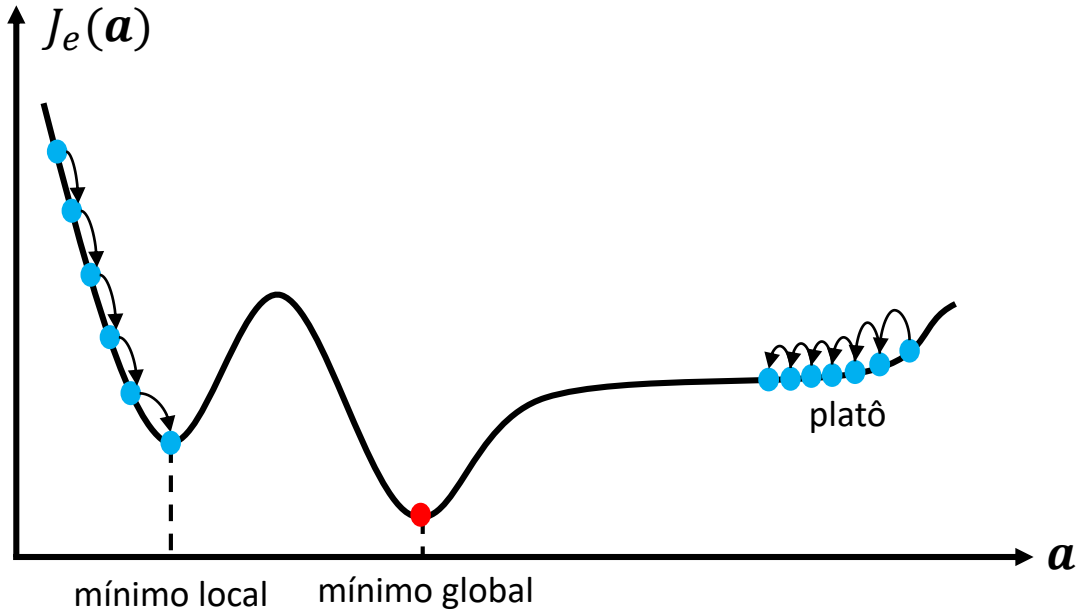


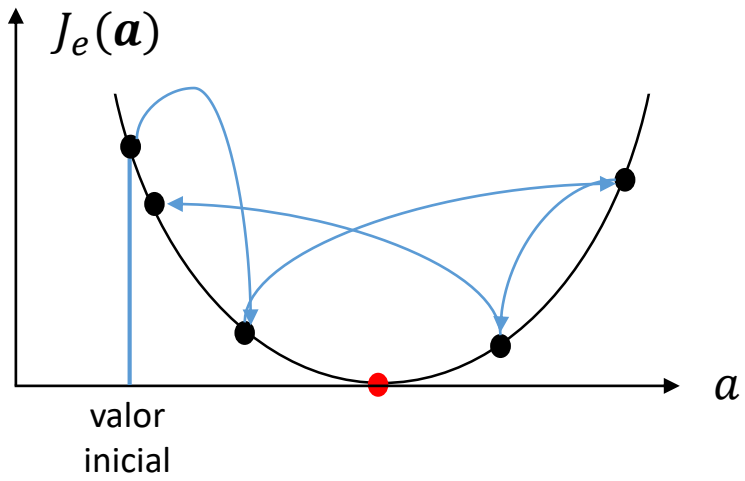
Albert Einstein: Insanity Is Doing the Same Thing Over and Over Again and Expecting Different Results

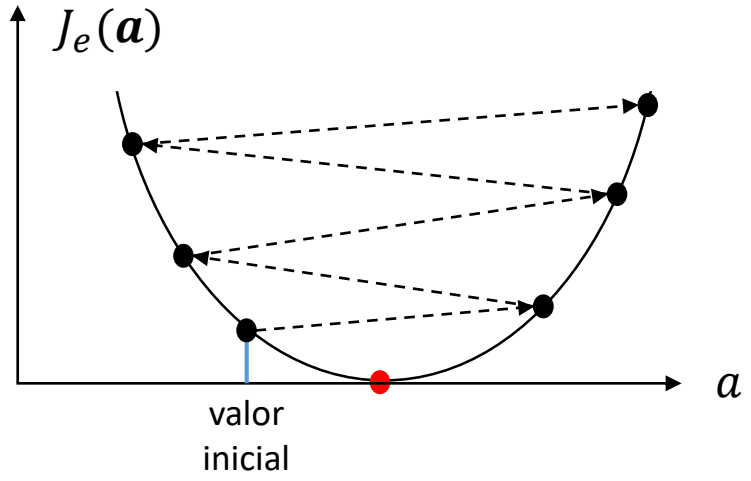
Machine learning:

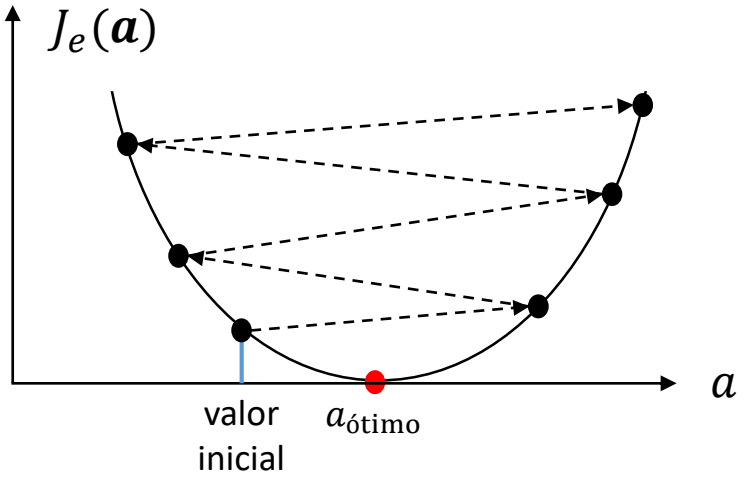


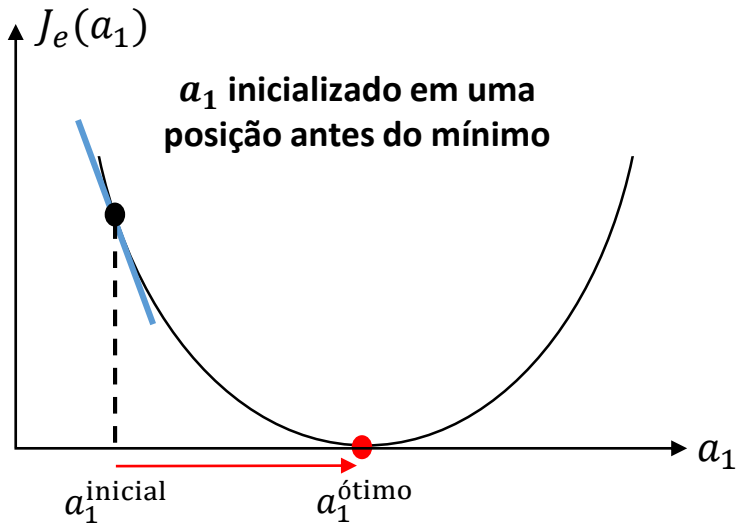
FIGURAS


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


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

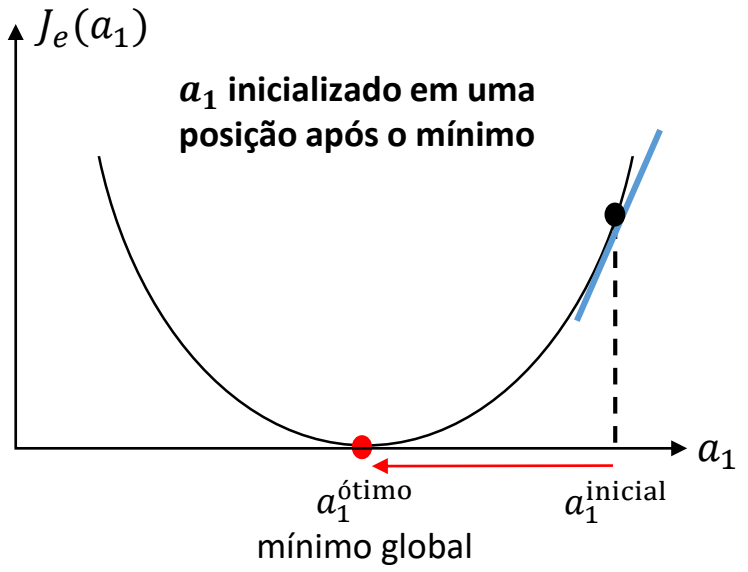

$J_e(\boldsymbol{a})$
a
valor
inicial


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



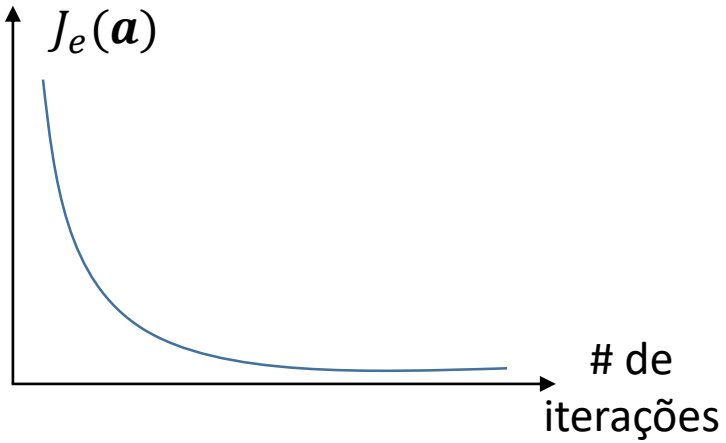
gradiente negativo: $a_1 = a_1^{\text{inicial}} + \alpha \nabla J_e(a_1)$

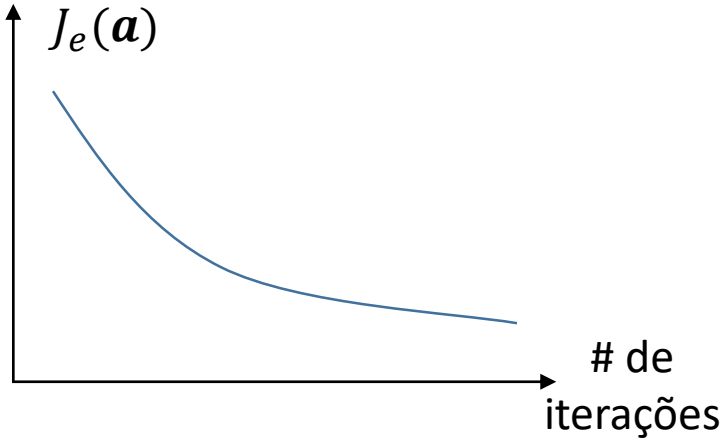
a_1 aumenta e se aproxima do mínimo

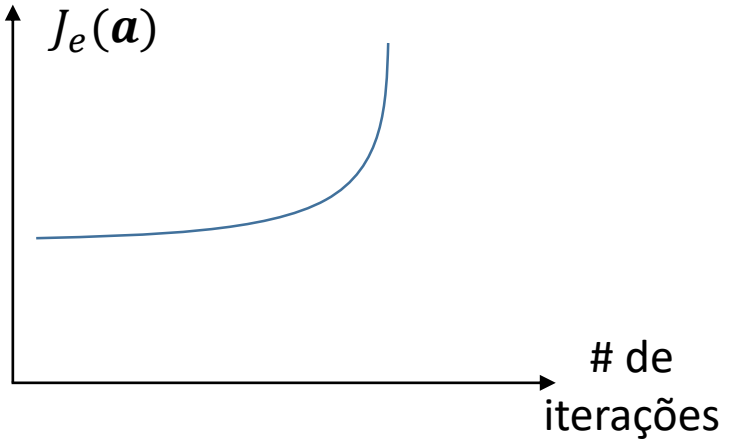


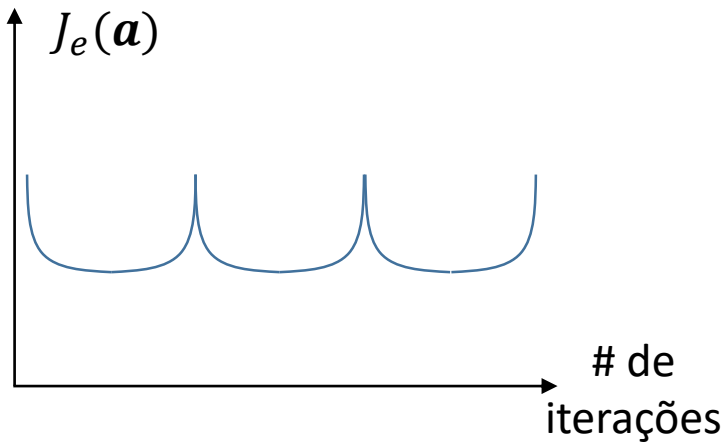
gradiente positivo: $a_1 = a_1^{\text{inicial}} - \alpha \nabla J_e(a_1)$

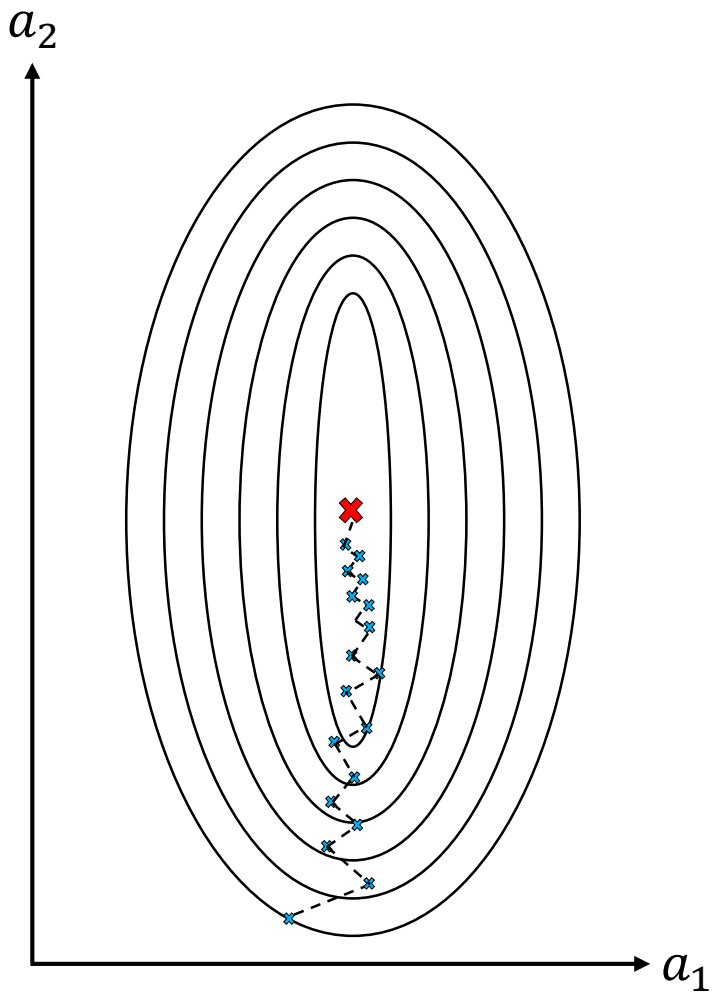
a_1 diminiu e se aproxima do mínimo

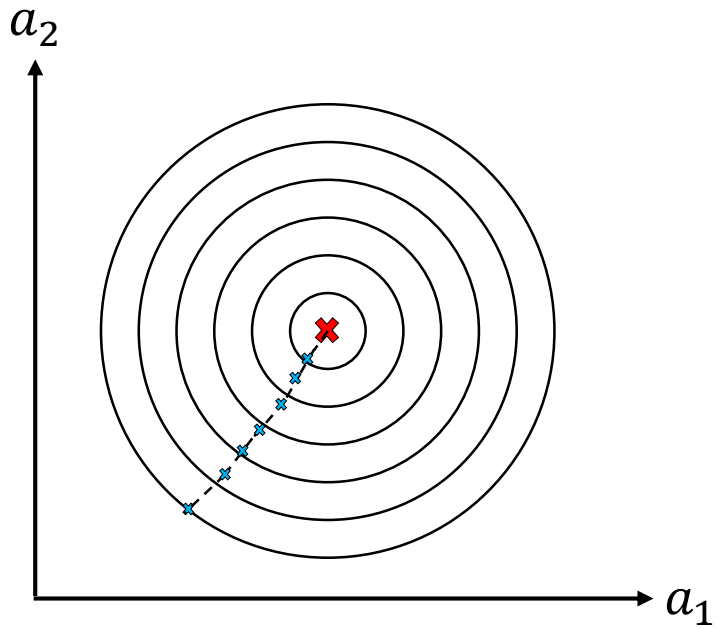

$J_e(\boldsymbol{a})$
de
iterações

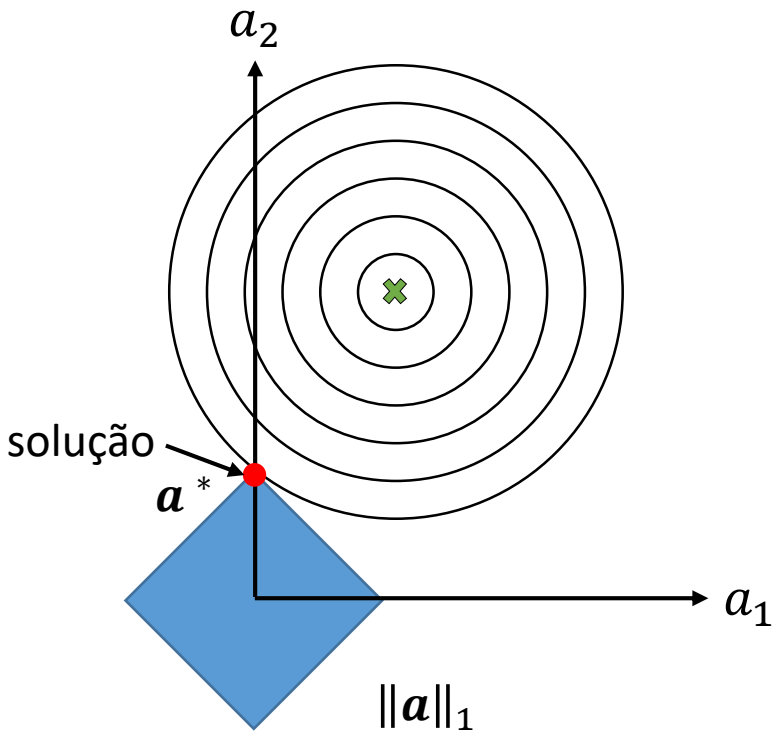

$J_e(\boldsymbol{a})$
de
iterações

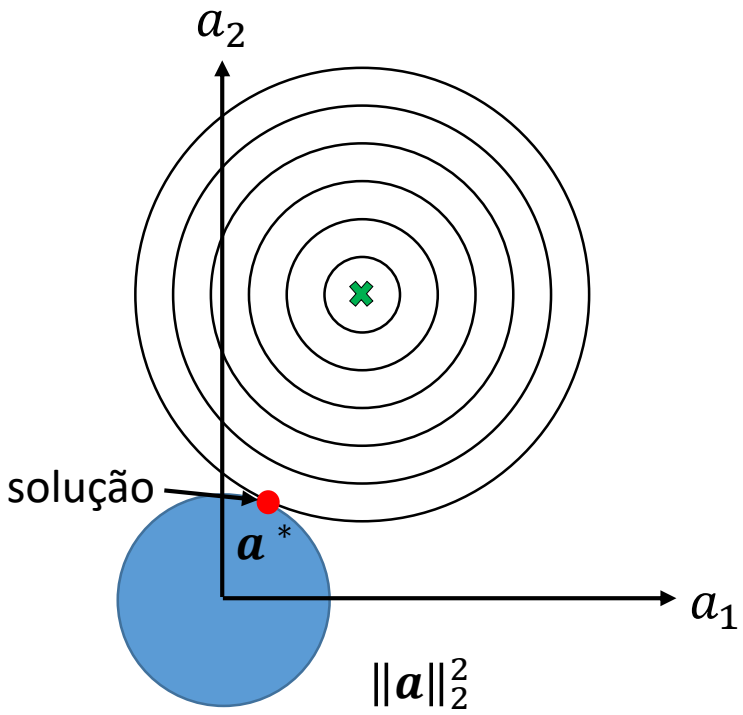

$J_e(\boldsymbol{a})$
de
iterações


$J_e(\boldsymbol{a})$
de
iterações

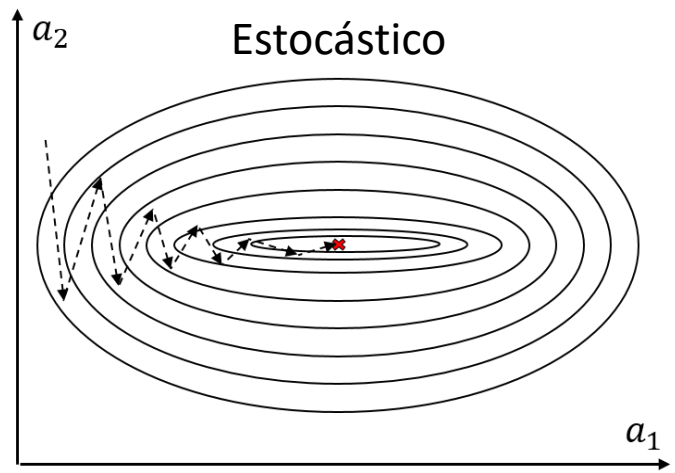

a_2
a_1

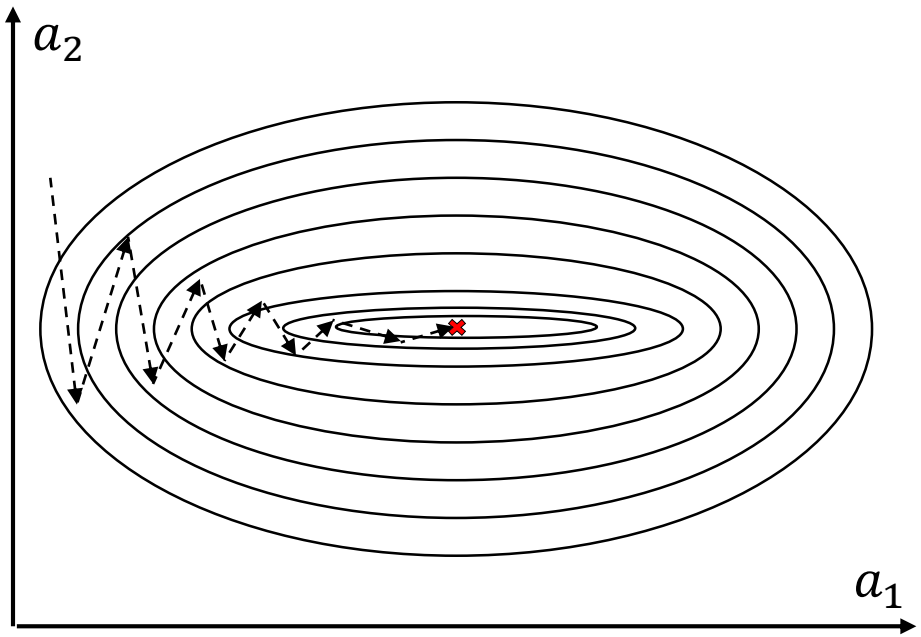

a_2
a_1

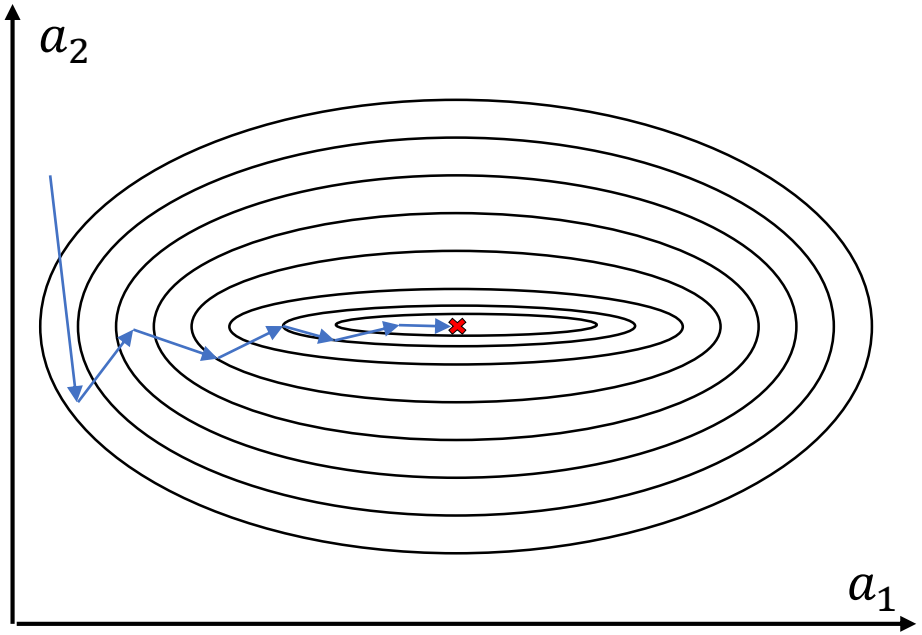

a_2
solução
$\boldsymbol{a}^*$
a_1
$\|\boldsymbol{a}\|_1$

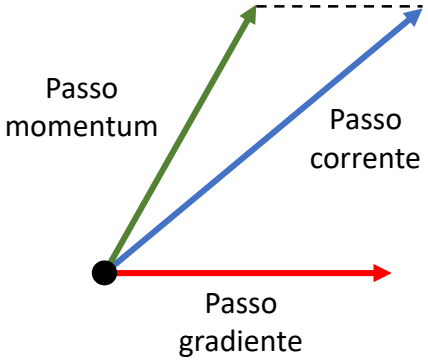

a_2
solução
$\boldsymbol{a}^*$
a_1
$\|\boldsymbol{a}\|_2^2$

Gradiente Descendente Estocástico




a_2
a_1


a_2
a_1


Passo
momentum
Passo
corrente
Passo
gradiente


THE RAVINE