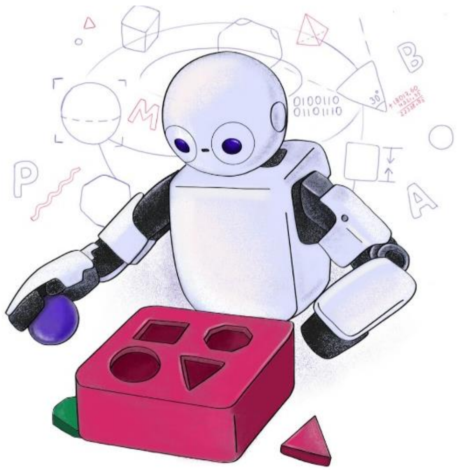
T319 - Introdução ao Aprendizado de Máquina: *Regressão Linear (Parte II)*

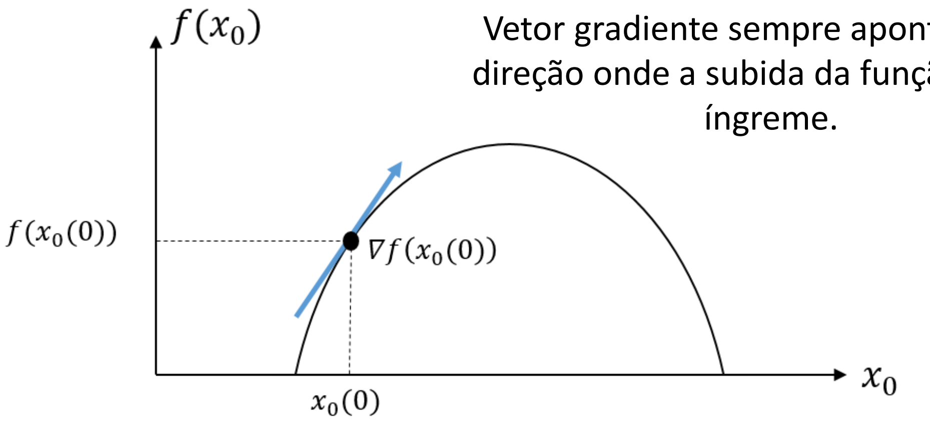


Felipe Augusto Pereira de Figueiredo
felipe.figueiredo@inatel.br

Recapitulando

- Vimos a motivação por trás da regressão: encontrar curvas que nos ajudem a prever valores.
- 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 da equação normal e apresentamos uma solução para essas desvantagens, a qual discutiremos a seguir.

Vetor Gradiente



Vetor gradiente sempre aponta para a direção onde a subida da função é mais íngreme.

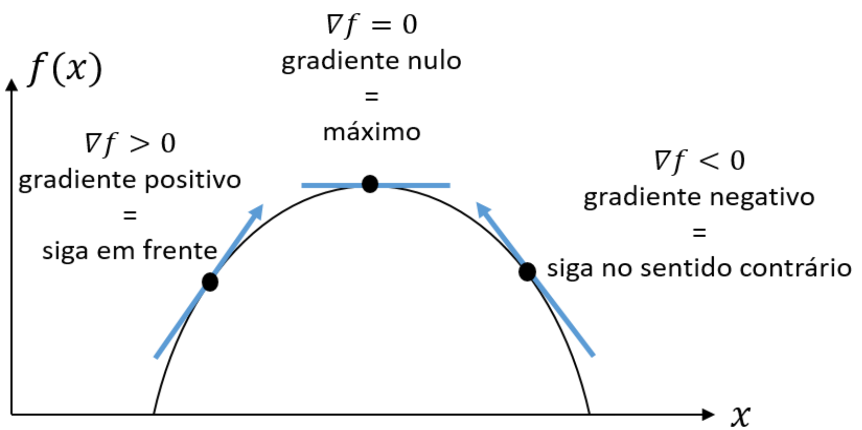
- Vocês se lembram das aulas de cálculo vetorial, onde vocês aprenderam sobre o ***vetor gradiente***?
  - ***Vetor gradiente*** é um vetor que indica a direção e o sentido no qual, por deslocamento a partir de um ponto especifico, obtém-se o maior incremento possível no valor de uma função, f.
- O ***vetor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

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

onde $\nabla f(x_0, x_1, \dots, x_K)$ é o vetor que indica a direção e o sentido em que a função, $f(x_0, x_1, \dots, x_K)$, tem a taxa de crescimento mais rápida.

- Notem, que cada elemento do ***vetor gradiente*** indica a direção e o sentido de máxima variação em relação àquele argumento da função.
- 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 e sentido devemos caminhar para aumentar o valor de f mais rapidamente.

Gradiente Ascendente



Gradiente ascendente

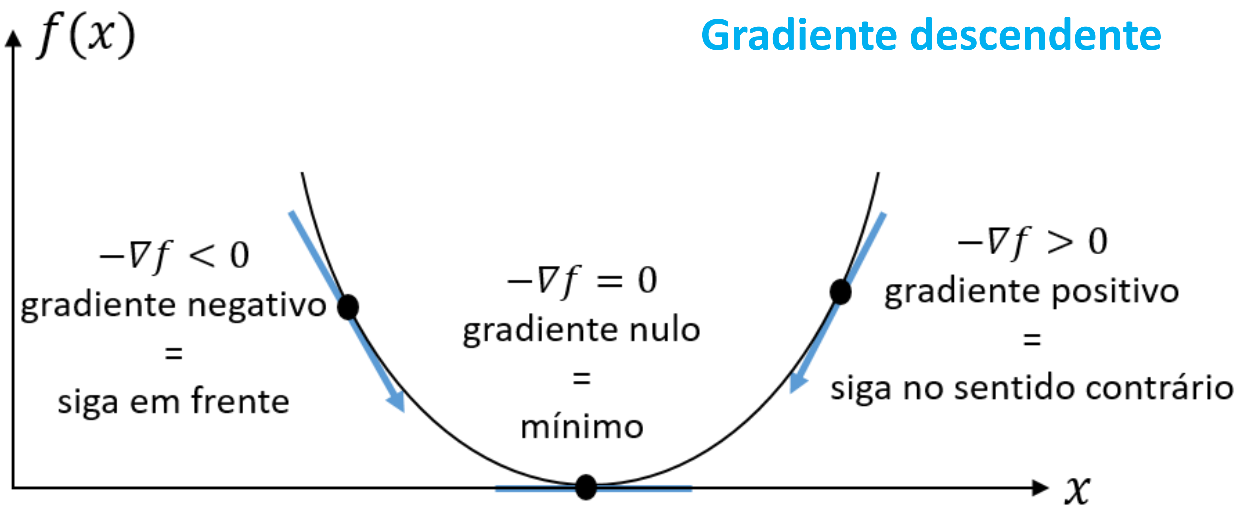
- O valor do ***vetor gradiente*** em um ponto é um ***vetor tangente*** àquele ponto, onde um elemento do vetor com valor:
  - + significa que o ponto de máximo esta à frente.
  - - significa que o ponto de máximo está atrás.
  - 0 significa que ponto de máximo foi encontrado.

Importante

- Portanto, o ***vetor gradiente*** nos permite encontrar o ponto de ***máximo*** da função, $f(x_0, x_1, \dots, x_K)$.
  - Seguindo na direção e sentido indicados pelo ***vetor gradiente***, chegamos ao ponto de máximo da função.
- Assim, um algoritmo de otimização ***iterativo*** que siga a direção e sentido indicados pelo ***vetor gradient***e para encontrar o ***ponto de máximo*** de $f(x_0, x_1, \dots, x_K)$ é conhecido como ***gradiente ascendente***.

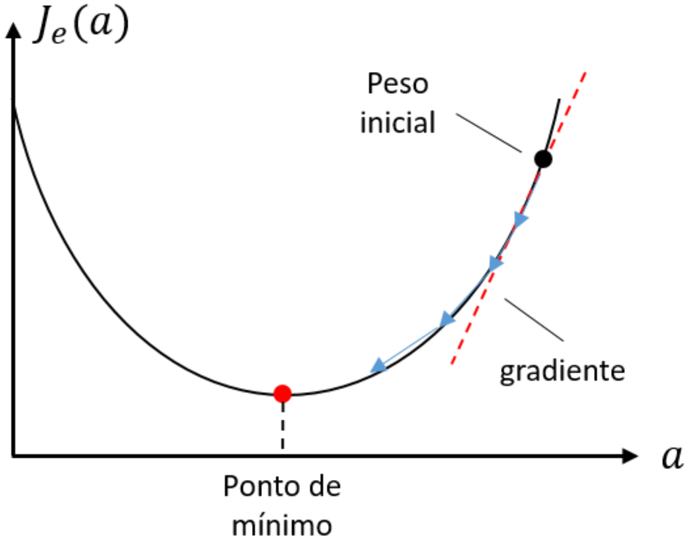
Gradiente Descendente

- Mas e se formos no sentido contrário a da taxa de crescimento, dada pelo ***vetor gradiente***, $\nabla f(x_0, x_1, \dots, x_K)$, ou seja $-\nabla f(x_0, x_1, \dots, x_K)$?
  - Nesta caso, iremos na direção de **decrescimento** mais rápido da função, $f(x_0, x_1, \dots, x_K)$.
- Portanto, um algoritmo de otimização ***iterativo*** que siga a direção e sentido contrário ao indicado pelo ***vetor gradiente*** para encontrar o ***ponto de mínimo*** de $f(x_0, x_1, \dots, x_K)$ é conhecido como ***gradiente descendente***.



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 ajustar 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***.

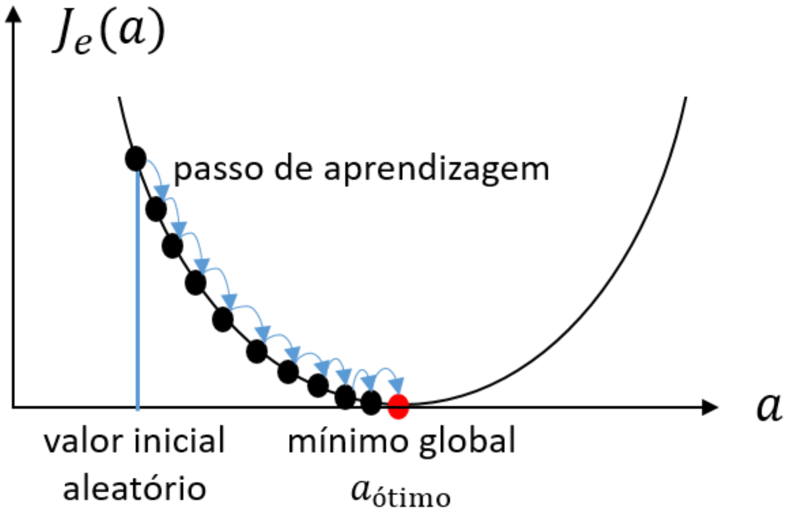


O Algoritmo do Gradiente do Descendente (GD)

- O algoritmo inicializa os pesos, $\boldsymbol{a}$, em um ponto aleatório do ***espaço de pesos*** e então, os atualiza no ***sentido oposto*** ao do ***gradiente*** até que algum critério de convergência seja atingido, indicando que um ***mínimo local*** ou o ***global*** da ***função de erro*** foi encontrado.

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

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



onde α é a ***taxa/passo de aprendizagem*** e $\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial a_i}$ é o gradiente da ***função de erro*** em relação ao peso a_i.

- A ***taxa de aprendizagem*** dita o tamanho dos passos/deslocamentos dados na direção e sentido oposto ao do ***gradiente***.

O Algoritmo do Gradiente do Descendente (GD)

- O ***passo de aprendizagem***, α, pode ser constante ou pode decair com o tempo à medida que o processo de aprendizado prossegue.
- **OBS**.: Os pesos, $\boldsymbol{a}$, **devem ser atualizados simultaneamente**, caso contrário o algoritmo apresentará comportamento desconhecido.
- O pseudo-algoritmo abaixo apresenta a atualização simultânea de todos os **pesos**.

$\boldsymbol{a} \leftarrow$ inicializa em um ponto qualquer do espaço de pesos
loop até convergir **ou** atingir número máximo de épocas **do**
$\quad\quad \boldsymbol{a} \leftarrow \boldsymbol{a} - \alpha \nabla J_e(\boldsymbol{a})$

onde $\boldsymbol{a}$ é o vetor com os ***pesos*** e $\nabla J_e(\boldsymbol{a}) = \left[\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial a_0} \quad \cdots \quad \frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial a_K}\right]^T$ é o ***vetor gradiente***, o qual contém o gradiente com relação a todos os ***pesos***.

- Na sequência, veremos como encontrar o ***vetor gradiente*** da função de erro e implementar o algoritmo do ***gradiente descendente***.

Exemplo #1

[Exemplo 1: linear_regression_with_gradient_descent_exemplo1.ipynb]

Neste exemplo, usaremos uma ***função hipótese*** com 2 pesos, a_1e 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

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

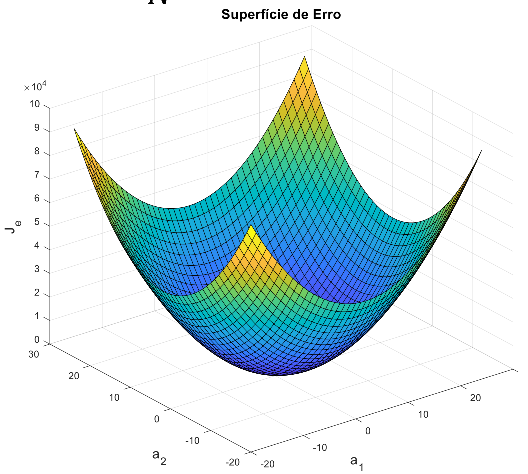
Operação da derivada parcial é distributiva.

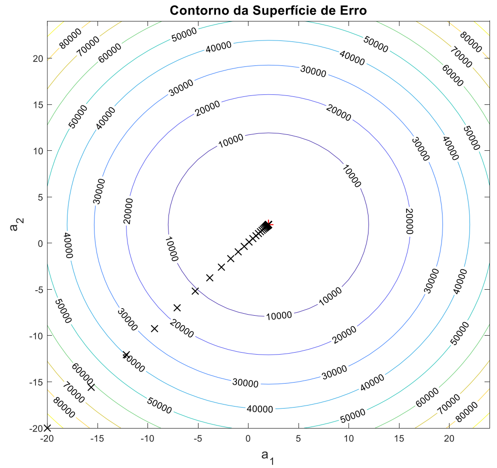
E atualização dos pesos $a_k, k = 1$ e 2 dada por

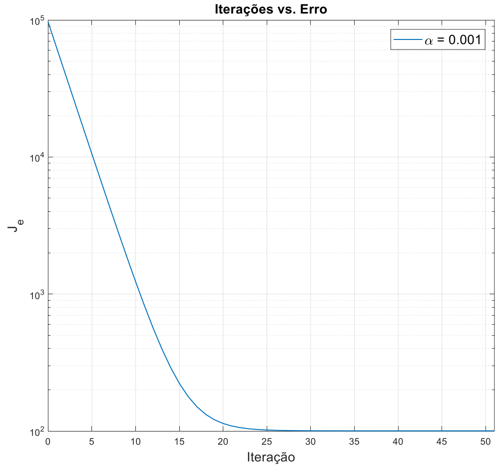
$$\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial a_k} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial \left[y(n) - \left(a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n)\right)\right]^2}{\partial a_k} = -\frac{2}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \left[y(n) - \left(a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n)\right)\right] x_k(n), \qquad k = 1,2,$$

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

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







Exemplo #2

Exemplo: linear_regression_with_gradient_descent_exemplo2.ipynb

Agora consideramos uma ***função hipótese*** com os pesos, a_0e a_1,

$$\hat{y}(n) = h\big(\boldsymbol{x}(n)\big) = a_0 + a_1 x_1(n).$$

A ***função de erro*** é dada por

$$J_e(\boldsymbol{a}) = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\Big[y(n) - \big(a_0 + a_1 x_1(n)\big)\Big]^2.$$

E a atualização dos pesos $a_k, k = 0$ e 1 é dada por

$$\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial a_k} = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\frac{\partial\Big[y(n) - \big(a_0 + a_1 x_1(n)\big)\Big]^2}{\partial a_k} = -\frac{2}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\Big[y(n) - \big(a_0 + a_1 x_1(n)\big)\Big]x_k(n)\,, k = 0, 1,$$

$$a_k = a_k - \alpha\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial a_k} \therefore a_k = a_k + \alpha\sum_{n=0}^{N-1}\Big[y(n) - \big(a_0 + a_1 x_1(n)\big)\Big]\,x_k(n),\ k = 0{,}1,$$

onde $x_0(n) = 1\ \forall n$.

OBS.1: Temos o termo de bias nesta função hipótese, portanto, não se esqueçam da coluna de ‘1’s na implementação do código.

OBS.2: Para executar este exemplo, é necessário instalar a biblioteca ffmpeg com o comando: conda install ffmpeg

Generalizando a equação de atualização

- Baseado no que vimos nos exemplos anteriores, podemos generalizar a ***equação de atualização do pesos*** da seguinte forma:

$$\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial a_k} = -\frac{2}{N}\sum_{n=0}^{N-1}[y(n) \ - \hat{y}(n)]x_k(n)\,, \forall k,$$

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

$$a_k = a_k + \alpha\sum_{n=0}^{N-1}[y(n) \ - \hat{y}(n)]x_k(n)\,, \forall k.$$

- Essa equação pode ser aplicada a qualquer problema de regressão linear.
- Apenas não se esqueçam de que quando $k = 0$, $x_0(n) = 1, \forall n$.

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 iteração (nesse caso, uma época) do algoritmo, ***todos*** os exemplos de treinamento são considerados no processo de treinamento do modelo. Esta versão foi a utilizada nos exemplos anteriores.

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

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.
- **Convergência pode ser bem lenta**, dado que o modelo é apresentado a todos os exemplos a cada época.

Versões do Gradiente Descendente

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

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

Características:

- Aproxima o gradiente através de uma ***estimativa estocástica***: aproximação através do gradiente calculado com um único exemplo de treinamento.
- Pode ser utilizado quando os atributos e rótulos são obtidos sequencialmente, ou seja, de forma online, exemplo a exemplo.
- Ou quando o conjunto de treinamento é muito grande. Nesse caso, escolhe-se aleatoriamente um par atributo/rótulo a cada iteração (i.e., atualização dos pesos).
- Computacionalmente mais rápido 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 valores ótimos.
- Esquemas de variação do passo de aprendizagem podem ajudar a garantir a convergência.
- O gradiente ruidoso, calculado com um único exemplo, ajuda o modelo a escapar de regiões com vários mínimos locais ou irregulares para uma região com o mínimo global.

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.

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

onde MB é o tamanho do mini-batch.

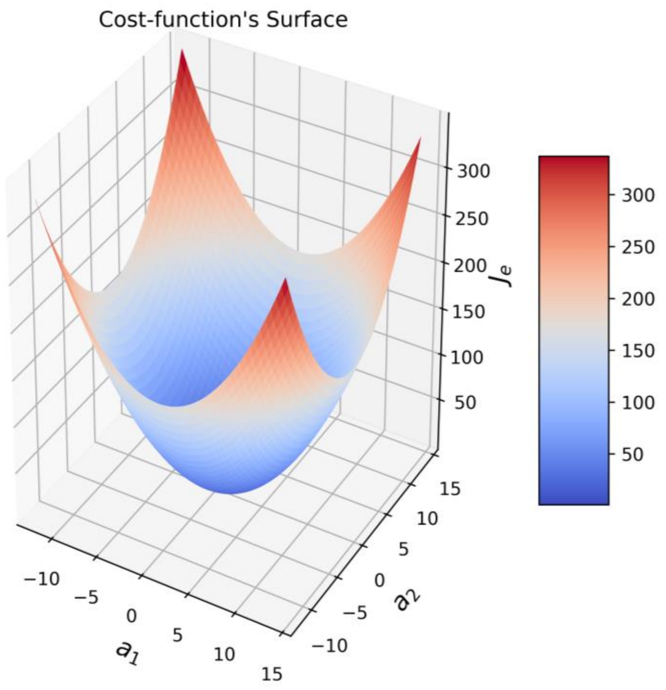
Características:

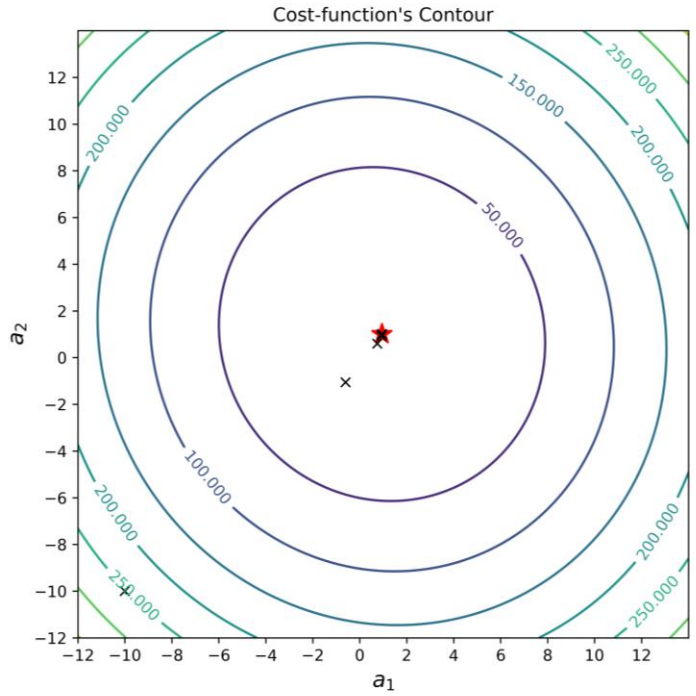
- Pode ser visto como uma generalização das 2 versões anteriores:
  - Caso $MB = \text{N}$, então se torna o GD em batelada.
  - Caso $MB = 1$, então se torna o GD estocástico.
- Computacionalmente mais rápido do que o GD em batelada, mas mais lento do que o GD estocástico.
- Convergência depende do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

Implementação: GD em Batelada

Exemplo: batch_gradient_descent_with_figures.ipynb

```
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]

# Constant learning rate.
eta = 0.1
# Number of iterations.
n_iterations = 1000

# Random initialization.
a = np.random.randn(2,1)

# Batch gradient-descent loop.
for iteration in range(n_iterations):
    gradients = -2/N * X.T.dot(y - X.dot(a))
    a = a - eta * gradients
```

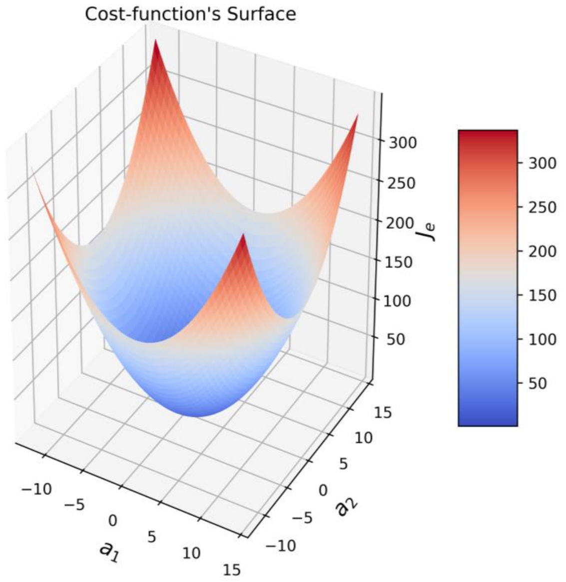


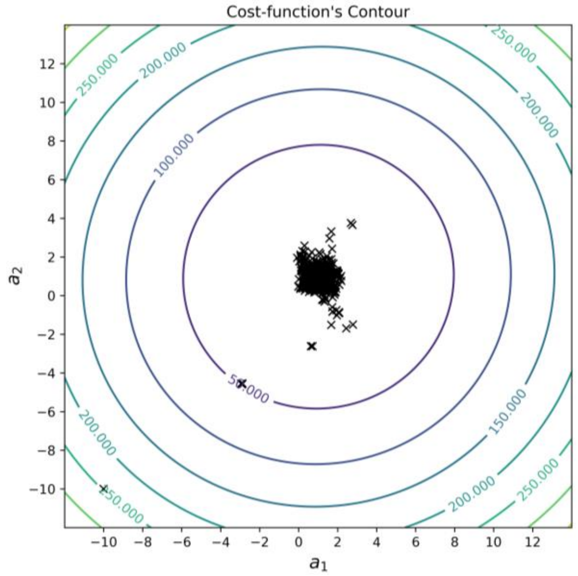


- Segue diretamente para o mínimo global.
- Atinge o mínimo global em 4 épocas.
- Nesse caso específico, segue linha reta entre a_0 e a_1 pois a taxa de decrescimento da superfície de erro é igual para os dois pesos (contornos são circulares).
- Não fica "*oscilando*" em torno do mínimo após alcançá-lo.
- Algoritmo para no mínimo pois o vetor gradiente no ponto ótimo é praticamente nulo.

Implementação: GD Estocástico

```
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
# Constant learning rate.
alpha = 0.1

# Random initialization of parameters.
a = np.random.randn(2,1)
# Stocastic gradient-descent loop.
for epoch in range(n_epochs):
    for i in range(N):
        random_index = np.random.randint(N)
        xi = X[random_index:random_index+1]
        yi = y[random_index:random_index+1]
        gradients = -2*xi.T.dot(yi - xi.dot(a))
        a = a - alpha * gradients
```





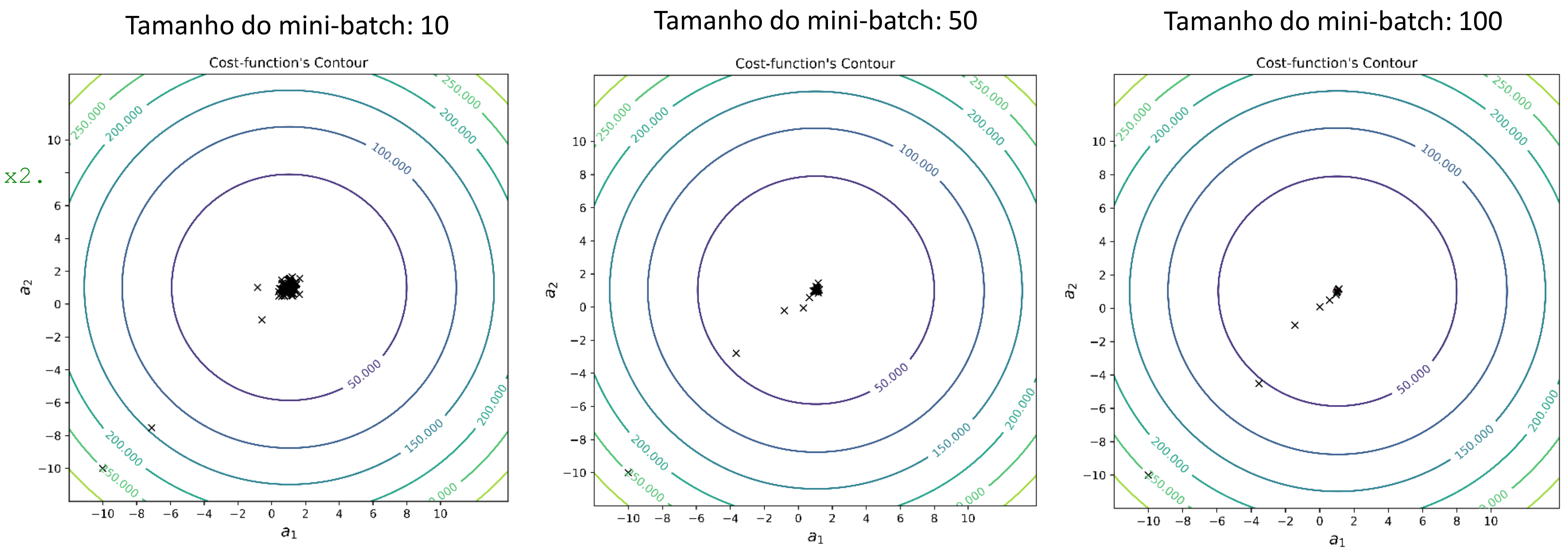
Exemplo: stocastic_gradient_descent_with_figures.ipynb

- Devido à sua natureza estocástica, não apresenta um caminho regular/direto para o mínimo, mudando de direção várias vezes (gradiente ruidoso devido a aproximação do gradiente).
- Por aproximar o gradiente com apenas um exemplo, nem sempre irá na direção ideal, porque as derivadas parciais são ”ruidosas”.
- O algoritmo não converge suavemente para o mínimo, fica “*oscilando*” ou “*ricocheteando*” em torno dele.
- Quando o treinamento termina, os valores finais dos pesos são bons, mas não são ótimos.
- A convergência ocorre apenas na média.
- Tempo de treinamento é menor, nesse caso, 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*”. Por exemplo, pode-se diminuir o valor do passo conforme o algoritmo caminhe em direção ao mínimo.

Implementação: GD com Mini-Batch

```python
import numpy as np

# Define the number of examples.
M = 1000

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

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

# Constant learning rate.
alpha = 0.1
# Number of iterations.
n_iterations = 1000

# Random initialization.
a = np.random.randn(2,1)

# Mini-batch size.
mb_size = 10

# Mini-batch gradient-descent loop.
for epoch in range(n_epochs):
    sdi = random.sample(range(0, N), N)
    for i in range(0, N//mb_size):
        bi = sdi[i*mb_size:mb_size*(i+1)]

        xi = X[bi]
        yi = y_noisy[bi]

        gradients = -(2.0/mb_size)*xi.T.dot(yi - xi.dot(a))
        a = a - alpha*gradients
```

[Exemplo: mini_batch_gradient_descent_with_figures.ipynb]()



- O progresso do algoritmo é menos irregular do que com o GD estocástico, especialmente com mini-batches grandes o suficiente.
- Como resultado, o mini-batch oscila menos ao redor do mínimo global do que o GDE.
- Tem comportamento mais próximo do GD em batelada para mini-bacthes 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.

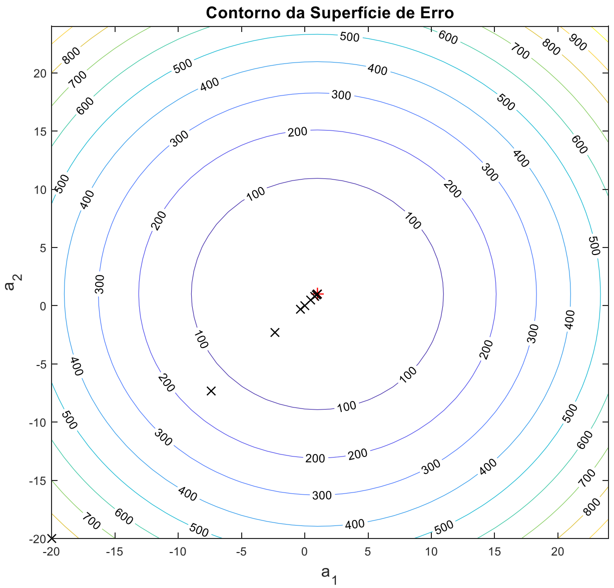
Comparação das versões de GD

- Todos se aproximam do mínimo, mas o GD em ***batch*** caminha diretamente para lá.
- Enquanto ***GDE*** e o ***mini-batch*** continuam a caminhar (*dançar*) ao redor do mínimo (tangente diferente de zero, pois estimativa do gradiente é ruidosa).
- O progresso do ***mini-batch*** é menos irregular do que com o ***GDE***, mas depende do tamanho do mini-batch.
- Mas não se esqueçam, o ***batch*** leva mais tempo para executar cada época do que o ***GDE*** e o **mini-batch**, os quais também podem alcançar o mínimo e se estabilizarem lá caso uma boa estratégia para ajuste do ***passo de aprendizagem*** seja usada.

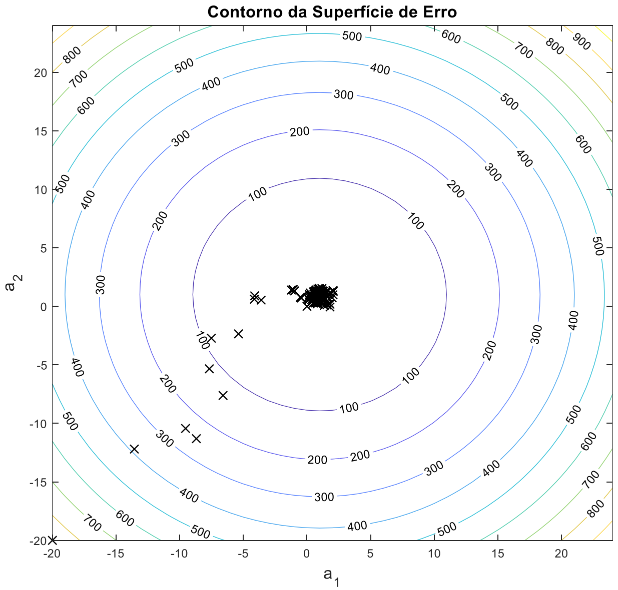
Função observável

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

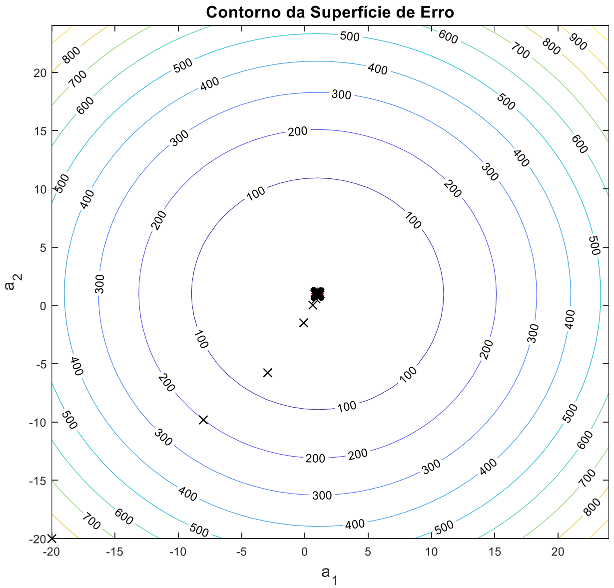
Batch



Gradiente Descendente Estocástico



Mini-Batch (MB size: 100)

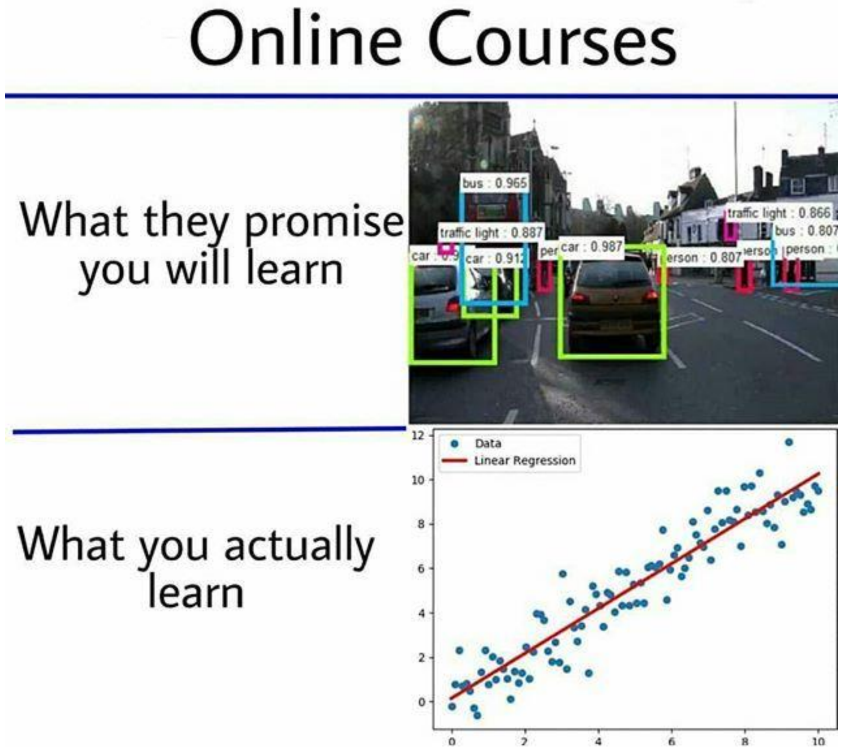


Tarefas

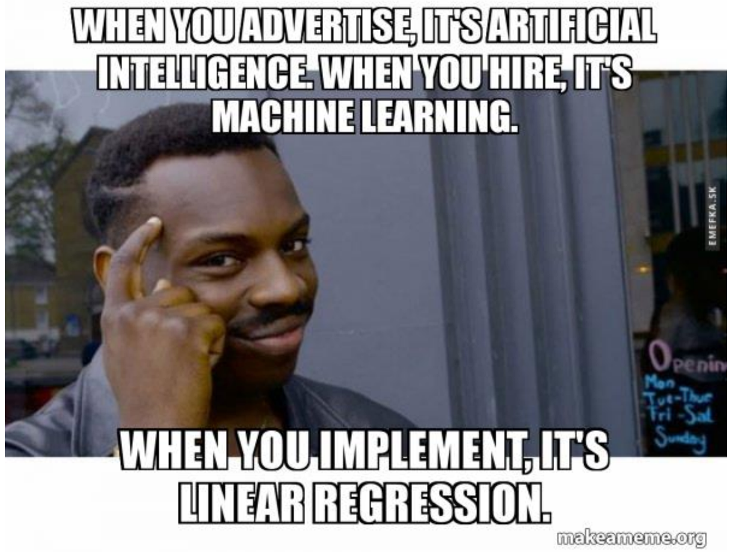
- **Quiz**: *“T319 - Quiz - Regressão: Parte II (1S2021)”* que se encontra no MS Teams.
- **Exercício Prático**: **Laboratório #3**.
  - Pode ser baixado do MS Teams ou do GitHub.
  - Pode ser respondido através do link acima (na nuvem) ou localmente.
  - Instruções para resolução e entrega dos laboratórios.

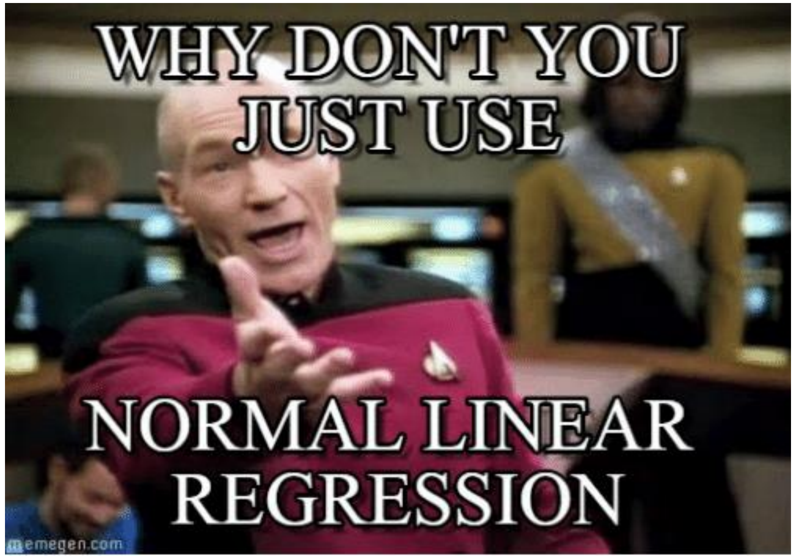
Obrigado!


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


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


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