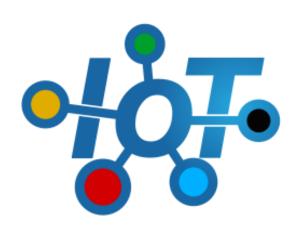
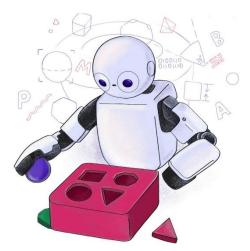
TP557 - Tópicos avançados em loT e Machine Learning: *Minimizando o erro*





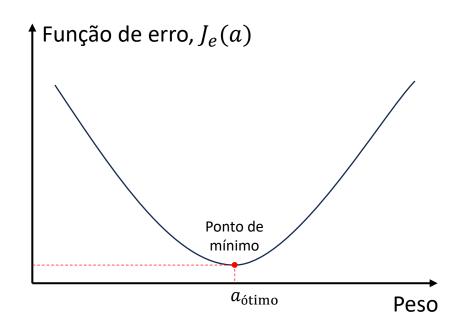


Felipe Augusto Pereira de Figueiredo felipe.figueiredo@inatel.br

O que vamos ver?

- Anteriormente, vimos como funciona o processo (loop) de treinamento.
 - 1. Damos um palpite.
 - 2. Medimos a precisão desse palpite com a função de erro.
 - 3. Então usamos a informação do erro para dar outro palpite, esperando que ele seja um pouco melhor do que o anterior.
- Em geral, esse processo se repete até que o erro seja minimizado.
- A ideia é que quanto menor o erro, mais preciso é o seu palpite.
- Portanto, neste tópico, exploraremos como minimizar o erro.

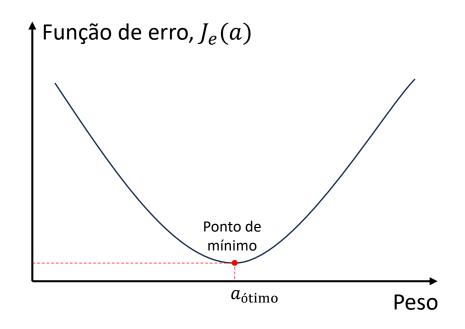
Vetores gradiente



A função de erro, $J_e(a)$, quantifica a diferença entre $y \in \hat{y}$.

- Vamos primeiro ver com vetores gradiente nos ajudam a minimizar o erro.
- Ou seja, entender como eles nos ajudam a encontrar o ponto de mínimo da função de erro.
- Consequentemente, entenderemos como o algoritmo de otimização (ou treinamento) dos modelos funciona.
- **OBS**.: Vamos usar $J_e(a)$ para definir uma função de erro genérica.

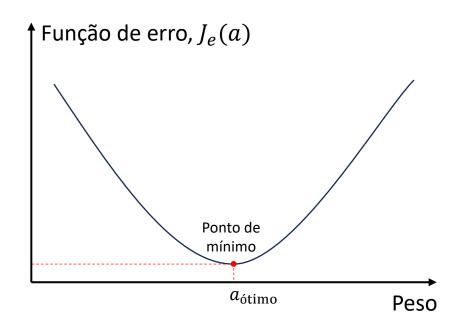
Função de erro



$$J_e(a) = MSE = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (\hat{y}_n(a) - y_n)^2$$

- Lembrem-se que a função de erro é função dos pesos.
- Ou seja, o erro varia se variarmos os valores dos pesos.
- Portanto, variando os pesos, conseguimos, em alguns casos, visualizar a superfície de erro.
- O ponto mais baixo dessa superfície nos dá os valores dos pesos que minimizam a função de erro.

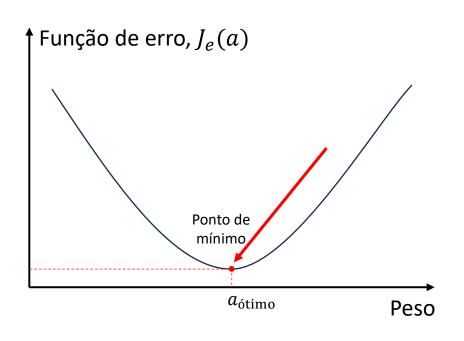
Formato da função de erro



$$J_e(a) = MSE = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (\hat{y}_n(a) - y_n)^2$$

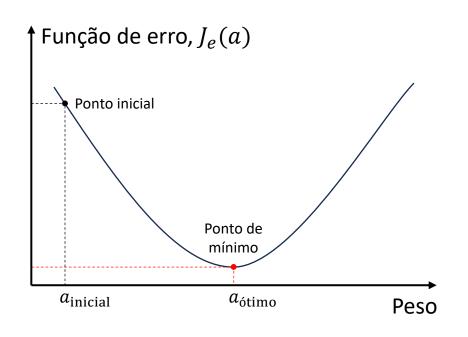
- Lembrem-se que a função de erro que usamos anteriormente, a função do EQM, é quadrática.
- E como vimos no exemplo, funções quadráticas têm a forma de parábolas convexas.
- A convexidade é importante pois garante que a função tenha apenas um ponto de mínimo, o mínimo global.
- Isso permite que encontremos a solução ótima de forma mais eficiente.

Ponto de mínimo de uma função convexa



- Se queremos encontrar o mínimo da função, basta buscarmos a parte mais baixa da parábola.
- Não importa quais sejam os valores dos pesos e onde a função de erro é plotada no gráfico, nós sempre teremos certeza de que o mínimo está na parte inferior da parábola.

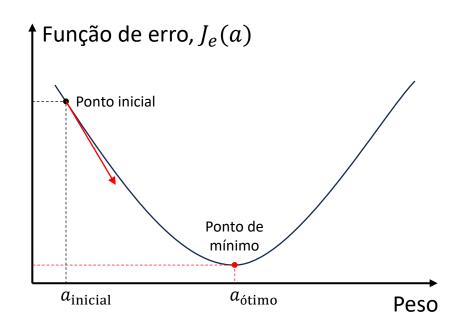
O erro indica o caminho a ser seguido



- Assim, se dermos um palpite (ponto inicial) sobre os valores dos pesos da função hipótese, como mostrado ao lado, e calcularmos o erro, ele será alto e, consequentemente, saberemos que estamos longe do ponto de mínimo.
- Portanto, quanto menor o erro, mais próximo estaremos do ponto ótimo.
- OBS.: Em geral, o erro nunca será igual a 0 devido aos dados estarem corrompidos por ruído.

Como encontramos o ponto de mínimo através do erro?

Vetor gradiente

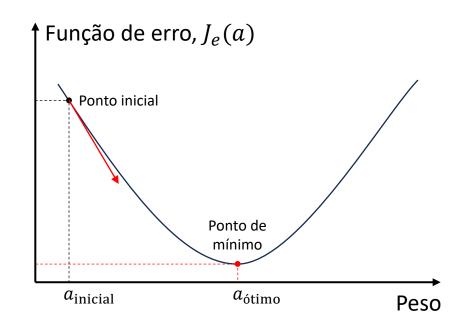


 Se nós diferenciarmos a função de erro em um ponto qualquer em relação aos pesos, nós obtemos o vetor gradiente

$$\nabla J_e(\boldsymbol{a}) = \frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial \boldsymbol{a}}.$$

• Ele sempre aponta na direção de maior crescimento da função a partir de um determinado ponto.

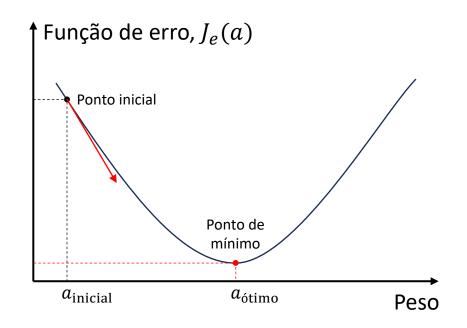
Vetor gradiente



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

- O gradiente pode ser também interpretado como a inclinação de um plano tangente à curva no ponto onde ele é calculado.
 - Quanto maior o valor absoluto do gradiente, mais inclinada é a reta tangente naquele ponto.
 - Portanto, um valor igual a 0 indica inclinação nula.
 - Onde isso ocorre? Em pontos de máximo e de mínimo.

Vetor gradiente



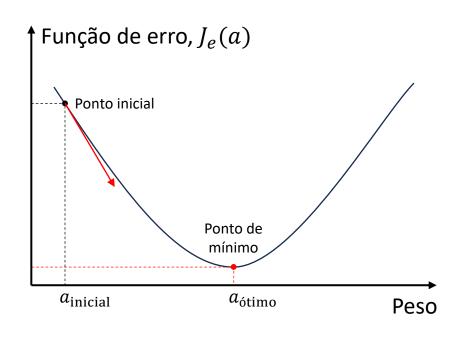
O objetivo é minimizar a função de erro *indo na* direção contrária a indicada pelo gradiente.

- Porém, queremos *encontrar o mínimo* da função, o que devemos fazer?
- Basta irmos na direção oposta a indicada pelo vetor gradiente (i.e., negativo do gradiente)

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

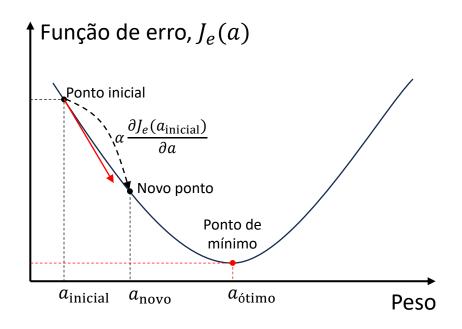
• O negativo do gradiente aponta para a direção de maior decréscimo da função a partir de um dado ponto.

Qual a distância até o mínimo?



- Entretanto, o gradiente não dá informação sobre a distância até o ponto de mínimo, mas pelo menos sabemos a direção correta.
- Podemos fazer a analogia com uma bola solta em uma ladeira.
- A gravidade dá a direção até a parte mais baixa da ladeira, mas não dá a distância até lá.

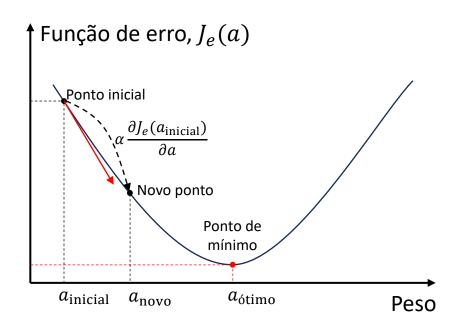
Passo de aprendizagem

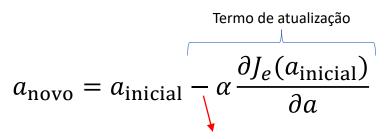


$$a_{\text{novo}} = a_{\text{inicial}} - \alpha \frac{\partial J_e(a_{\text{inicial}})}{\partial a}$$

- Portanto, se quisermos seguir até o ponto de mínimo a partir de um ponto qualquer, podemos dar um passo na direção apontada pelo gradiente.
- Nós sabemos a direção do mínimo e podemos escolher o tamanho do passo para darmos naquela direção.
- O passo de aprendizagem determina a porcentagem do gradiente que é adicionada aos pesos.
- A equação ao lado é chamada de equação de atualização dos pesos.

Passo de aprendizagem

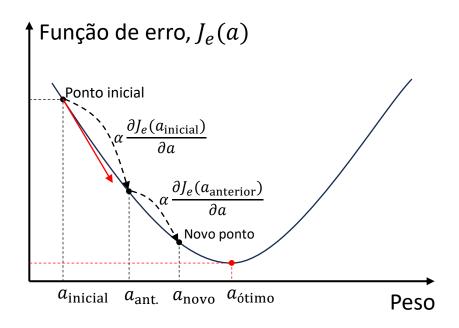




sentido aposto ao apontado pelo gradiente

- O tamanho do passo é frequentemente chamado de taxa ou passo de aprendizagem e é, normalmente, denotado pela letra grega α .
- Se o peso atual está à esquerda do mínimo, o termo de atualização faz com que o novo peso seja maior do que o anterior.
- Se o peso atual está à direita do mínimo, o termo de atualização faz com que o novo peso seja menor do que o anterior.

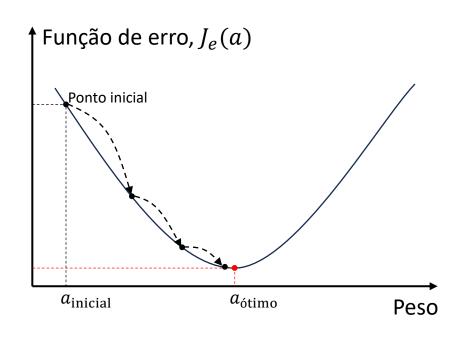
Otimização iterativa



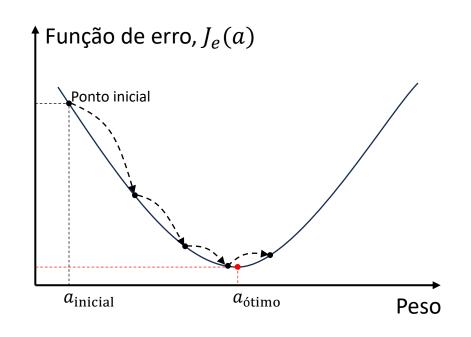
$$a_{\text{novo}} = a_{\text{anterior}} - \alpha \frac{\partial J_e(a_{\text{anterior}})}{\partial a}$$

Equação de atualização dos pesos

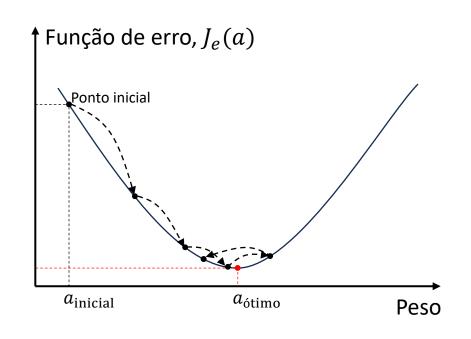
- Portanto, dada a direção do gradiente e um passo de aprendizagem, agora podemos iterativamente dar passos em direção ao ponto de mínimo.
- A cada *iteração* calculamos o gradiente no ponto atual, atualizamos os pesos com uma porcentagem do gradiente e calculamos o gradiente no novo ponto.
- Repetimos esse processo até que a inclinação da reta tangente ao ponto atual se torne igual a 0, indicando que o ponto de mínimo foi atingido.
- O que ocorre quando o gradiente é 0?



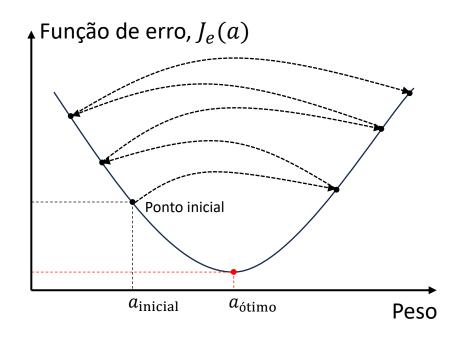
- O objetivo é que a cada nova iteração, nos movamos para mais e mais perto do ponto de mínimo, $a_{\rm \acute{o}timo}$.
- Porém, devemos tomar cuidado, com o tamanho do passo de aprendizagem.
- O valor do passo de aprendizagem é um *hiperparâmetro* crucial para o GD.
 - Hiperparâmetros são parâmetros do modelo que não são aprendidos durante o treinamento, mas sim definidos pelo desenvolvedor antes do treinamento.
- Ele influencia a velocidade e a convergência do treinamento.



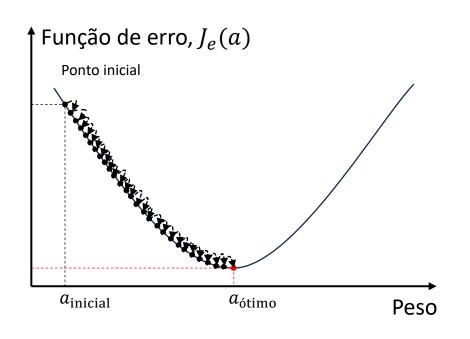
 Se o passo de aprendizagem for muito grande, podemos ultrapassar o ponto de mínimo.



• Se o passo de aprendizagem for *muito grande*, o processo de otimização pode ficar *ziguezagueando* de um lado para o outro do fundo da função *sem nunca atingir o ponto de mínimo*.

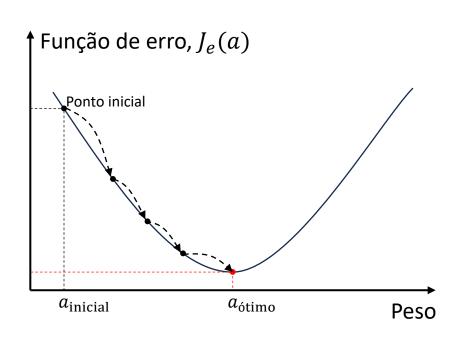


- Dependendo do quão grande for o valor do passo de aprendizagem, pode ocorrer até a divergência ao invés da convergência.
- Ou seja, ao invés de se aproximar do ponto de mínimo, o algoritmo se distancia dele a cada iteração.
- Se isso ocorrer, após algumas iterações, ocorre o estouro da precisão numérica das variáveis envolvidas na regra de atualização dos pesos.



- Outra questão, *menos problemática* que passos grandes, é a situação oposta.
- Passos muito pequenos fazem com que se leve muito tempo, i.e., iterações, para atingir o ponto de mínimo.
- Se cada iteração levar um tempo razoável para ser executada, o tempo necessário para se atingir o ponto de mínimo pode ser muto grande.
- Porém, *se esperarmos* tempo suficiente, a *convergência é garantida*.

Qual o tamanho de passo de aprendizagem usar?



- É importante escolhermos um passo de aprendizagem que acelere a convergência sem causar oscilações em torno do ponto de mínimo.
- Em geral, um bom valor para o passo é encontrado por *tentativa e erro*.
- Uma forma mais avançada é ajustar o passo ao longo das iterações.
 - Usamos valores grandes no início, em pontos distantes do mínimo, e o reduzimos gradualmente ao longo das iterações.

Formas de se ajustar o passo de aprendizagem

Taxa constante

$$a(i+1) = a(i) - \alpha \frac{\partial J_e(a(i))}{\partial a}$$

Decaimento linear e exponencial

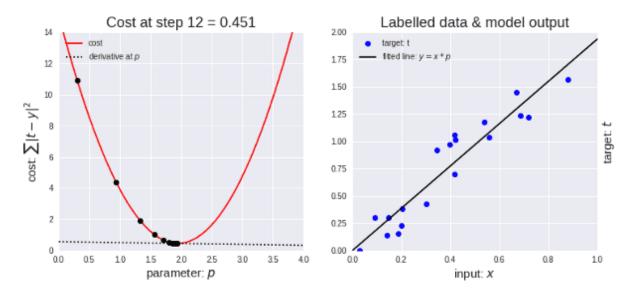
$$a(i+1) = a(i) - \alpha(i) \frac{\partial J_e(a(i))}{\partial a}$$

Adaptação automática

$$a(i+1) = a(i) - \alpha(i) \frac{\partial J_e(a(i))}{\partial a}$$
Um passo por elemento do gradiente

- Existem várias técnicas de ajuste do valor do passo de aprendizagem durante o treinamento para melhorar o modelo, como:
 - Taxa constante,
 - Decaimento linear e exponencial,
 - Adaptação automática com os algoritmos Adagrad, RMSProp e Adam.
- As duas primeiras usam um passo para todos os pesos, já a última, usa um passo independente por peso.
- Cada técnica visa otimizar a convergência e o desempenho do modelo.

Gradiente descendente



 $a \leftarrow$ inicializa em um ponto qualquer do espaço de pesos loop até convergir ou atingir o número máximo de iterações do

$$a \leftarrow a - \alpha \frac{\partial J_e(a)}{\partial a}$$
 (eq. de atualização dos pesos)

- Esse *processo iterativo de otimização* que discutimos até agora é chamado de *gradiente descendente (GD)*.
- Ele está por trás do aprendizado de vários algoritmos de ML: regressão linear, regressão logística, redes neurais em geral, máquinas de vetores de suporte, aprendizado por reforço, etc.
- Como veremos, o GD pode ser implementado de 3 formas diferentes dependendo de como calculamos o gradiente.

Versões do gradiente descendente

- Para entendermos as 3 versões do GD, vamos primeiro encontrar o vetor gradiente, $\frac{\partial J_e(a)}{\partial a}$, e substituí-lo na equação de atualização dos pesos.
- Considerando o EQM como função de erro e a seguinte função hipótese

$$\hat{y}(n) = a_0 + a_1 x_1(n) + \dots + a_K x_K(n) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x_i(n) = \mathbf{a}^T \mathbf{x}(n),$$
Equação do hiperplano

onde K é o número de entradas (chamadas de **atributos**), a_i , $\forall i$ e x_i , $\forall i$ são os pesos e entradas da função, respectivamente, $x_0 = 1$ (**atributo de bias**) e a e

• Agora podemos encontrar o vetor gradiente.

Versões do gradiente descendente

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

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

onde X é uma matriz $(N \times K + 1)$ com todos os atributos para os N instantes de tempo considerados (i.e., N é o **número de exemplos coletados**) e y e \hat{y} são vetores coluna $(N \times 1)$ com todos os valores esperados e de saída da função hipótese para os N instantes de tempo considerados, respectivamente.

• Esse cálculo pode ser diretamente estendido a polinômios.

Versões do gradiente descendente

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

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

- Podemos ter *3 versões diferentes, dependendo da quantidade de exemplos*, *M*, considerados no somatório acima:
 - Gradiente descendente em batelada (GDB).
 - Gradiente descendente estocástico (GDE).
 - Gradiente descendente em mini-lotes (GDML).

Gradiente descendente em batelada

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

- Utiliza *todos os exemplos* do conjunto de treinamento (i.e., M=N) para o cálculo do gradiente.
- Pode ser computacionalmente complexo dependendo do tamanho do modelo e do conjunto de dados.
 - Por processar todos os exemplos, pode ser lento em conjuntos muito grandes e consumir muita memória.
- Convergência para o mínimo global é garantida quando a função de erro é convexa.
- É a versão que obtém os melhores resultados.

Gradiente descendente estocástico

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

- Utiliza *apenas um exemplo* do conjunto de treinamento (i.e., M=1) para calcular uma *estimativa estocástica do gradiente*.
 - Versão estocástica pois a cada iteração toma-se uma amostra aleatória do conjunto para calcular a estimativa do gradiente.
- Quando os dados de treinamento são ruidosos, a estimativa do gradiente é ruidosa, fazendo com que a convergência não ocorra ou não seja garantida.
- Entretanto, é mais rápido e usa menos CPU e memória do que o GDB.

Gradiente descendente em mini-lotes

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

- Utiliza um *subconjunto de exemplos*, MB, do conjunto de treinamento (M = MB) para o cálculo do gradiente.
- Por, em geral, usar um *subconjunto* de exemplos, 1 < MB < N, 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.
- Portanto, por ser flexível, é a *versão mais usada no treinamento de redes neurais*.

Exemplo

• Gradiente descendente.



Atividades

- Quiz: "TP557 Minimizando o erro".
- Exercício: Gradiente descendente.

Perguntas?

Obrigado!

Anexo: Cálculo do vetor gradiente

Considerando o hiperplano como a função hipótese $\hat{v}(n) = \boldsymbol{a}^T \boldsymbol{x}(n)$.

O vetor gradiente é calculado como

$$\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial \boldsymbol{a}} = \begin{bmatrix} \partial J_e(\boldsymbol{a}) & \cdots & \partial J_e(\boldsymbol{a}) \\ \partial a_0 & \cdots & \partial a_K \end{bmatrix}^T$$

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

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

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

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

Substituindo a função hipótese na equação acima, temos
$$\frac{\partial J_e(a)}{\partial a} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\partial \left(y(n) - a^T x(n)\right)^2}{\partial a}.$$

Aplicando a regra da cadeia, reescrevemos a equação anterior como

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

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

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

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

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

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

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

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.

Se definirmos uma matriz que contém todos os N exemplos de todos os

$$K+1 \text{ atributos e que tem dimensão } N\times K+1$$

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

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

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

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

$$\frac{\partial J_{e}(\boldsymbol{a})}{\partial \boldsymbol{a}} = -\frac{2}{N} \begin{bmatrix} x_{0}(0) & x_{0}(1) & \cdots & x_{0}(N-1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{K}(0) & x_{K}(1) & \cdots & x_{K}(N-1) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} y(0) \\ y(1) \\ \vdots \\ y(N-1) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \hat{y}(0) \\ \hat{y}(1) \\ \vdots \\ \hat{y}(N-1) \end{bmatrix} \end{pmatrix} = -\frac{2}{N} \boldsymbol{X}^{T} (\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}})$$

O resultado da multiplicação matricial acima continua 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

$$\mathbf{a} = \mathbf{a} - \alpha \frac{\partial J_e(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}}$$
$$= \mathbf{a} + \alpha \frac{2}{N} \mathbf{X}^T (\mathbf{y} - \widehat{\mathbf{y}}).$$

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

Equação de atualização dos pesos

Podemos reescrever a equação de atualização dos pesos como
$$a = a - \alpha \frac{\partial J_e(a)}{\partial a} = \begin{bmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_K \end{bmatrix} - \alpha \begin{bmatrix} \frac{\partial J_e(a)}{\partial a_0} \\ \vdots \\ \frac{\partial J_e(a)}{\partial a_K} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_K \end{bmatrix} + \alpha \frac{2}{N} \begin{bmatrix} x_0(0) & x_0(1) & \cdots & x_0(N-1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_K(0) & x_K(1) & \cdots & x_K(N-1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y(0) \\ y(1) \\ \vdots \\ y(N-1) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \hat{y}(0) \\ \hat{y}(1) \\ \vdots \\ \hat{y}(N-1) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_K \end{bmatrix} + \alpha \frac{2}{N} \begin{bmatrix} d(0)x_0(0) + d(1)x_0(1) + \cdots + d(N-1)x_0(N-1) \\ \vdots \\ d(0)x_K(0) + d(1)x_K(1) + \cdots + d(N-1)x_K(N-1) \end{bmatrix}$$
.