Lista_4-Raphael_Levy

April 23, 2023

[1]:
```
import numpy as np
from sklearn.cluster import KMeans
from sklearn.datasets import fetch_california_housing
from sklearn.model_selection import train_test_split
```

Instruções gerais: Sua submissão deve conter: 1. Um "ipynb" com seu código e as soluções dos problemas 2. Uma versão pdf do ipynb

Caso você opte por resolver as questões de "papel e caneta" em um editor de LaTeX externo, o inclua no final da versão pdf do 'ipynb'— submetendo um único pdf.

1 Trabalho de casa 04: Seleção de modelo e hiperparametros

1. O código abaixo carrega o banco de dados *California housing*. Divida o banco de dados em treino, teste e validação. Use o conjunto de validação para escolher o coeficiente de regularização c para um modelo de regressão linear com penalização L_2. Use a fórmula analítica para estimar os pesos do modelo de regressão. Plote os MSE no conjunto de treino e validação em função de c. Comente o resultado. Avalie a performance do modelo ótimo no conjunto de teste e também comente.

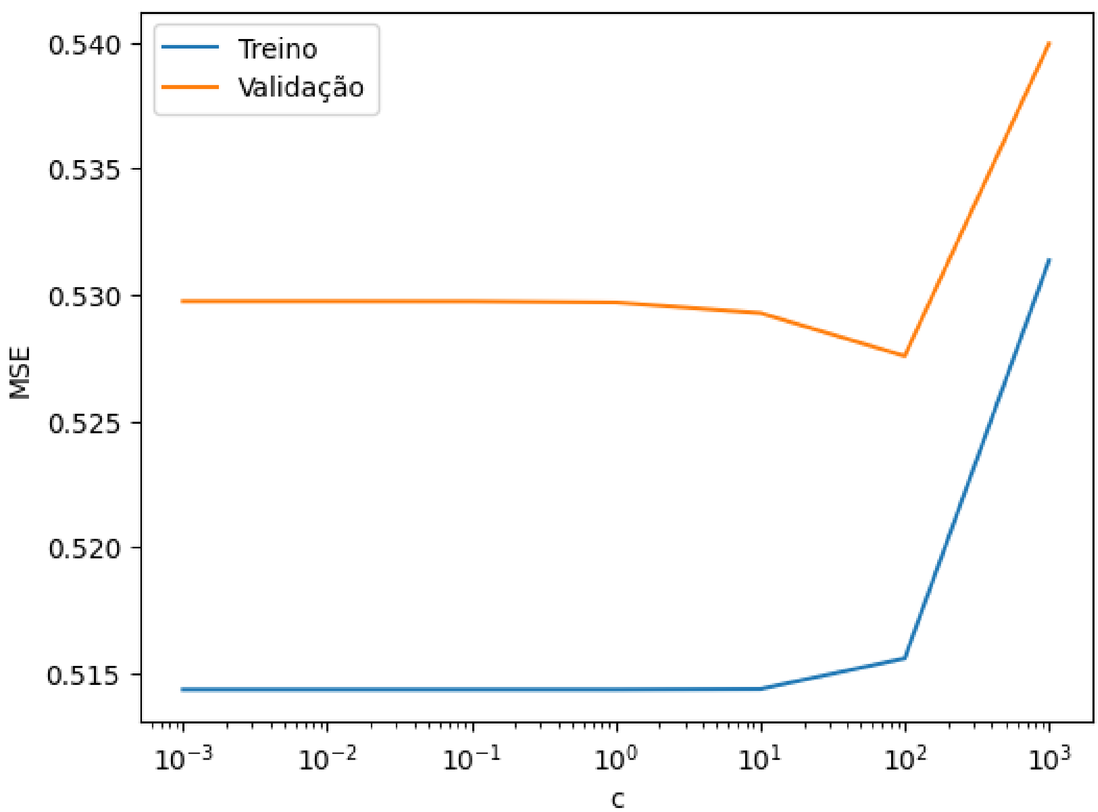
[2]:
```
SEED = 42
np.random.seed(SEED)

X, y = fetch_california_housing(return_X_y=True)
```

[3]:
```
X_train_val, X_test, y_train_val, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.2,␣
 ↪random_state=SEED)
X_train, X_val, y_train, y_val = train_test_split(X_train_val, y_train_val,␣
 ↪test_size=0.25, random_state=SEED)
```

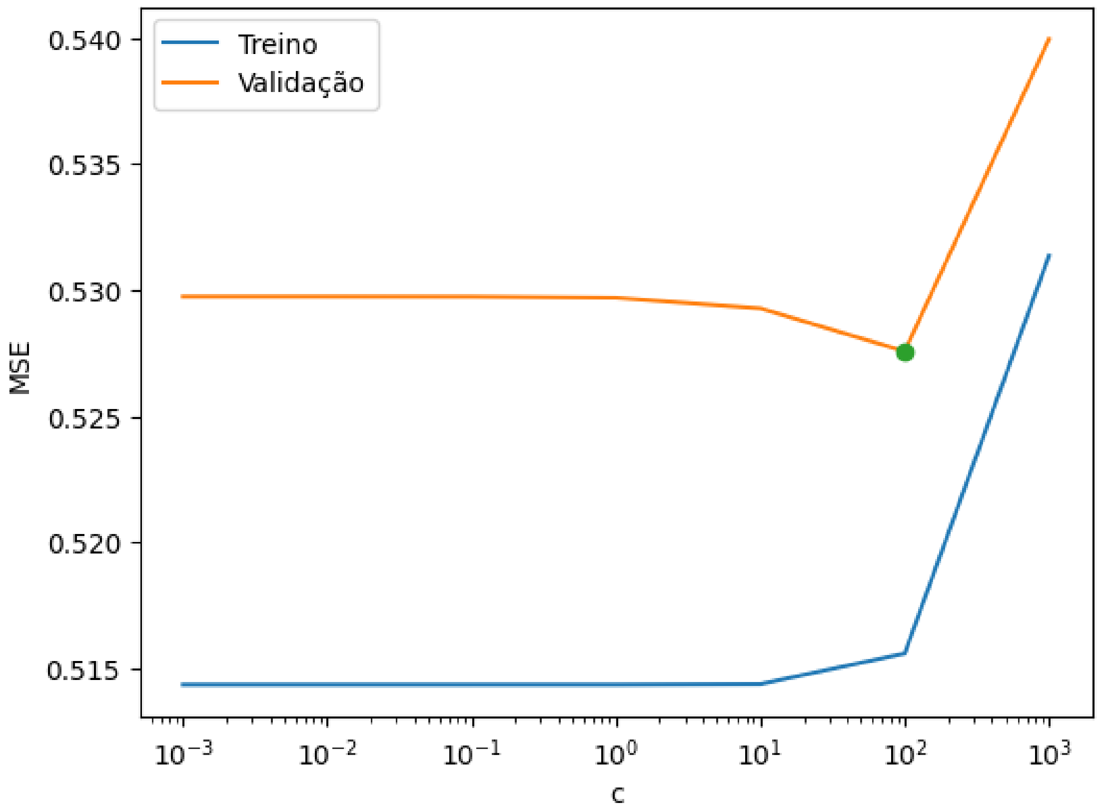
[4]:
```
from sklearn.linear_model import Ridge
from sklearn.metrics import mean_squared_error


# Valores de c a serem testados
cs = np.logspace(-3, 3, num=7)

train_mse = []
```

```python
val_mse = []

for c in cs:
    # Treina o modelo
    model = Ridge(alpha=c)
    model.fit(X_train, y_train)

    # Calcula o MSE no conjunto de treino e validação
    train_mse.append(mean_squared_error(y_train, model.predict(X_train)))
    val_mse.append(mean_squared_error(y_val, model.predict(X_val)))
```

[5]:
```python
import matplotlib.pyplot as plt

plt.plot(cs, train_mse, label='Treino')
plt.plot(cs, val_mse, label='Validação')
plt.xscale('log')
plt.xlabel('c')
plt.ylabel('MSE')
plt.legend()
plt.show()
```



[6]:
```
i = np.argmin(val_mse)
x_min_val = cs[i]
y_min_val = val_mse[i]
plt.plot(cs, train_mse, label='Treino')
plt.plot(cs, val_mse, label='Validação')
plt.plot(x_min_val, y_min_val, marker='o')
plt.xscale('log')
plt.xlabel('c')
plt.ylabel('MSE')
plt.legend()
plt.show()
```



[7]:
```
x_min_val
```

[7]: 100.0

[8]:
```
y_min_val
```

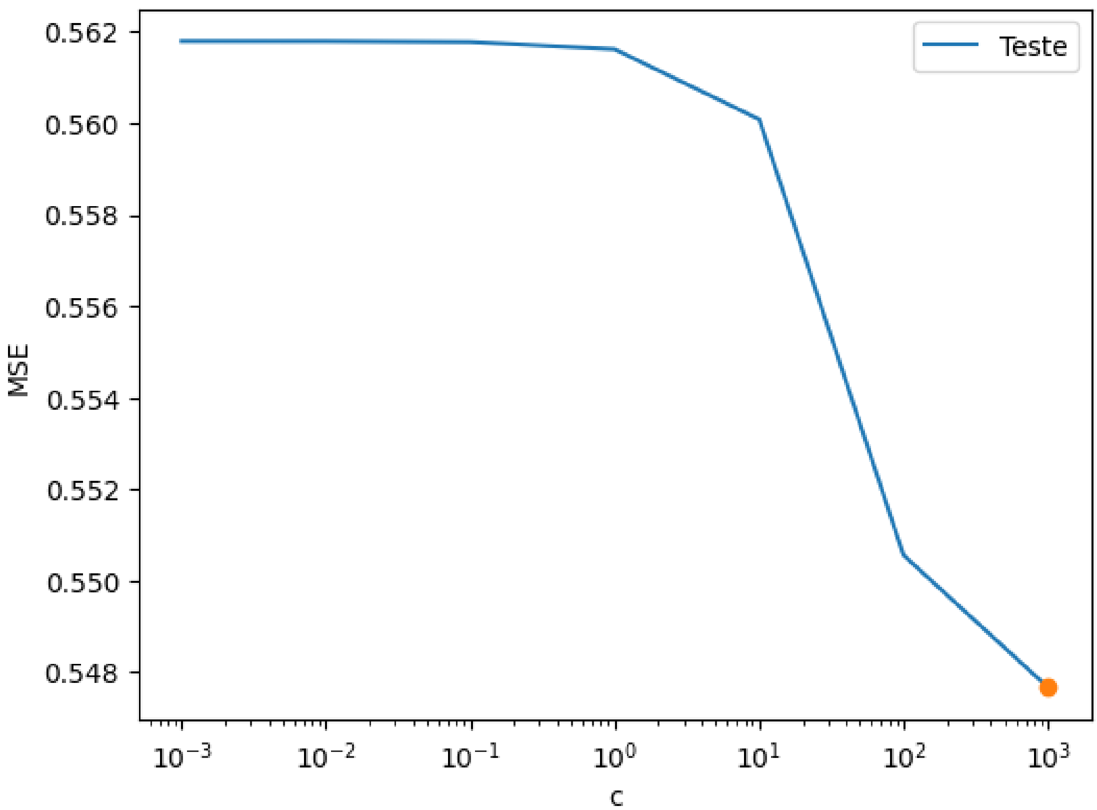
[8]: 0.5275765246861027

[9]:
```python
best_c = x_min_val

model = Ridge(alpha=best_c)
model.fit(X_train_val, y_train_val)

test_mse = mean_squared_error(y_test, model.predict(X_test))
print(f'MSE no conjunto de teste: {test_mse:.4f}')
```

```
MSE no conjunto de teste: 0.5497
```

[10]:
```python
test_mse = []
for c in cs:
    # Treina o modelo
    model = Ridge(alpha=c)
    model.fit(X_train, y_train)

    # Calcula o MSE no conjunto de treino e validação
    test_mse.append(mean_squared_error(y_test, model.predict(X_test)))
```

[11]:
```python
i = np.argmin(test_mse)
x_min_test = cs[i]
y_min_test = test_mse[i]
plt.plot(cs, test_mse, label='Teste')
plt.plot(x_min_test, y_min_test, marker='o')
plt.xscale('log')
plt.xlabel('c')
plt.ylabel('MSE')
plt.legend()
plt.show()
```



[12]:
```
x_min_test
```

[12]: 1000.0

[13]:
```
y_min_test
```

[13]: 0.547669688513095

Dada a fórmula analítica para estimação dos pesos do modelo de regressão:

$$\hat{\beta} = (X^T X + cI)^{-1} X^T y$$

Podemos usá-la então para estimar os pesos usando o c ideal que encontramos aplicando o MSE no conjunto de validação:

[14]:
```
best_c
```

[14]: 100.0

[15]:
```
X_train_val = np.concatenate((X_train, X_val), axis=0)
y_train_val = np.concatenate((y_train, y_val), axis=0)
```

```
# Estima os pesos do modelo
c = best_c
I = np.eye(X_train_val.shape[1])
XtX_cI_inv = np.linalg.inv(X_train_val.T @ X_train_val + c*I)
beta = XtX_cI_inv @ X_train_val.T @ y_train_val

print(beta)
```

```
[ 5.04277122e-01  1.59801851e-02 -1.60666277e-01  7.92890994e-01
  9.20281892e-06 -4.34234083e-03 -6.67758831e-02 -1.70941285e-02]
```

2. Implemente 5-fold *nested cross validation* para escolher entre os métodos k-NN e regressão linear com regularização L_2 (similar ao exercício acima). Considere $k \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$ e $c \in \{0, 1, 10, 100\}$. Use o mesmo banco de dados do último exercício e comente o resultado. Em média, qual valor de hiperparametro resulta na melhor performance para o método escolhido? (Use 5-fold cross validation regular para isso)

Obs.: para simplificar sua vida, use o k-NN para regressão do scikit-learning com distância euclidiana.

[16]:
```
# Hiperparâmetros para o k-NN
k_values = [1, 2, 3, 4, 5]

# Hiperparâmetros para a regressão linear com regularização L2
c_values = [0, 1, 10, 100]
```

[17]:
```
from sklearn.model_selection import KFold
from sklearn.neighbors import KNeighborsRegressor
from sklearn.model_selection import cross_val_score

# Definindo a estratégia de validação cruzada para o processo de seleção de␣
 ↪modelo
outer_cv = KFold(n_splits=5, shuffle=True, random_state=42)

# Definindo as listas para armazenar as métricas de desempenho dos modelos
knn_scores = []
linreg_scores = []

# Loop externo para a validação cruzada
for train_val_index, test_index in outer_cv.split(X, y):
    # Divisão do conjunto de treino e validação
    X_train_val, X_test = X[train_val_index], X[test_index]
    y_train_val, y_test = y[train_val_index], y[test_index]

    # Definindo a estratégia de validação cruzada interna para a seleção de␣
 ↪hiperparâmetros
    inner_cv = KFold(n_splits=5, shuffle=True, random_state=42)
```

```
    # Busca pelos melhores hiperparâmetros do k-NN
    knn_best_score = None
    knn_best_params = None
    for k in k_values:
        knn = KNeighborsRegressor(n_neighbors=k)
        knn_score = cross_val_score(knn, X_train_val, y_train_val, cv=inner_cv,␣
↪scoring='neg_mean_squared_error')
        knn_score = -np.mean(knn_score)
        if knn_best_score is None or knn_score < knn_best_score:
            knn_best_score = knn_score
            knn_best_params = {'k': k}
    knn_scores.append(knn_best_score)

    # Busca pelos melhores hiperparâmetros da regressão linear com regularização␣
↪L2
    linreg_best_score = None
    linreg_best_params = None
    for c in c_values:
        linreg = Ridge(alpha=c)
        linreg_score = cross_val_score(linreg, X_train_val, y_train_val,␣
↪cv=inner_cv, scoring='neg_mean_squared_error')
        linreg_score = -np.mean(linreg_score)
        if linreg_best_score is None or linreg_score < linreg_best_score:
            linreg_best_score = linreg_score
            linreg_best_params = {'c': c}
    linreg_scores.append(linreg_best_score)

# Cálculo da média das métricas de desempenho para cada modelo
knn_mean_score = np.mean(knn_scores)
linreg_mean_score = np.mean(linreg_scores)

print('KNN scores:', knn_scores)
print('KNN mean score:', knn_mean_score)
print('Best k:', k)
print(" ")
print('Ridge regression scores:', linreg_scores)
print('Ridge regression mean score:', linreg_mean_score)
print('Best c:', c)
```

```
KNN scores: [1.1642754275617304, 1.168352328147758, 1.179164644195872,
1.1628296532740954, 1.150992774006951]
KNN mean score: 1.1651229654372812
Best k: 5

Ridge regression scores: [0.5223451793773618, 0.5259037883831157,
0.5304420008551423, 0.5567452655678536, 0.5217951976548812]
```

```
Ridge regression mean score: 0.531446286367671
Best c: 100
```

2 Exercício de "papel e caneta"

1. Nas nota de aula, derivamos o "dilema viés-variância" calculando o MSE esperado entre a função alvo de aprendizado f e a predição do nosos modelo $h_{\mathcal{D}}$:

$$\mathbb{E}_{x,\mathcal{D}}\left[\left(h_{\mathcal{D}}(x)-f\left(x\right)\right)^{2}\right]=\mathbb{E}_{x}[\underbrace{\mathrm{Var}_{\mathcal{D}}[h_{\mathcal{D}}(x)]}_{\text{Variância}}]+\mathbb{E}_{x}[(\underbrace{\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[h_{\mathcal{D}}(x)-f\left(x\right)]}_{\text{Viés}})^{2}].$$

Com isso em mente, adapte nossa derivação para o caso em que as respostas de teste $f(x)$ são corrompidas por um ruído aditivo aleatório ϵ com média zero e variância finita $\mathrm{Var}[\epsilon]=\sigma^{2}$, i.e., ovbservamos $f'(x)=f(x)+\epsilon$. Mais concretamente, trabalhe a seguinte esperança para derivar uma decomposição similar à da nota de aula:

$$\mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[\left(h_{\mathcal{D}}(x)-f'\left(x\right).\right)^{2}\right]$$

Compare a diferença entre a decomposição que você obteve e a da nota de aula.

Dica: sua decomposição deve se diferenciar da acima em apenas um termo aditivo, que envolve uma esperança sobre x e y.

Para adaptar a derivação do dilema viés-variância para o caso em que as respostas de teste $f(x)$ são corrompidas por um ruído aditivo aleatório ϵ com média zero, temos, primeiramente:

$$\mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[\left(h_{\mathcal{D}}(x)-f'\left(x\right)\right)^{2}\right]=\mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}^{2}(x)-2.h_{\mathcal{D}}(x).f'\left(x\right)+f'^{2}\left(x\right)\right],$$

que podemos reescrever como

$$\begin{gathered}\mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}^{2}(x)\right]-2\mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x).f'\left(x\right)\right]+\mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[f'^{2}\left(x\right)\right]=\\=\mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}^{2}(x)\right]-2\mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x).(f\left(x\right)+\epsilon)\right]+\mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[(f\left(x\right)+\epsilon)^{2}\right]\end{gathered}$$

devido à linearidade do valor esperado.

Agora, como a variância é dada por $\mathrm{Var}(x)=\mathbb{E}[x-\mathbb{E}[x]]^{2}=\mathbb{E}[x^{2}]-(\mathbb{E}[x])^{2}$, podemos aplicá-la da seguinte maneira:

$$\begin{gathered}\mathrm{Var}(h_{\mathcal{D}}(x))=\mathbb{E}[h_{\mathcal{D}}^{2}(x)]-(\mathbb{E}[h_{\mathcal{D}}(x)])^{2}\Rightarrow\mathbb{E}[h_{\mathcal{D}}^{2}(x)]=\mathrm{Var}(h_{\mathcal{D}}(x))+(\mathbb{E}[h_{\mathcal{D}}(x)])^{2}\\\mathrm{Var}(f\left(x\right)+\epsilon)=\mathbb{E}[(f\left(x\right)+\epsilon)^{2}]-(\mathbb{E}[f\left(x\right)+\epsilon])^{2}\Rightarrow\mathbb{E}[(f\left(x\right)+\epsilon)^{2}]=\mathrm{Var}(f\left(x\right)+\epsilon)+(\mathbb{E}[f\left(x\right)+\epsilon])^{2}=\\=\mathbb{E}[f^{2}\left(x\right)+2.f\left(x\right).\epsilon+\epsilon^{2}]\end{gathered}$$

Desmembrando o valor esperado acima:

$$\begin{gathered}\mathbb{E}[(f\left(x\right)+\epsilon)^{2}]=\mathbb{E}[f^{2}\left(x\right)+2.f\left(x\right).\epsilon+\epsilon^{2}]=\mathbb{E}[f^{2}\left(x\right)]+2\mathbb{E}[f\left(x\right).\epsilon]+\mathbb{E}[\epsilon^{2}]=\\=\mathbb{E}[f^{2}\left(x\right)]+2f\left(x\right).\mathbb{E}[\epsilon]+\mathbb{E}[\epsilon^{2}]=f^{2}\left(x\right)+2f\left(x\right).\mathbb{E}[\epsilon]+\mathbb{E}[\epsilon^{2}]\end{gathered}$$

Dado que a média de ϵ é igual a zero, $\text{Var}(\epsilon) = \mathbb{E}[\epsilon^2] - (\mathbb{E}[\epsilon])^2 = \mathbb{E}[\epsilon^2] - 0 = \sigma^2$.

Agora, fazendo as contas para $\mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x).f'(x)\right]$:

$$\mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x).f'(x)\right] = \mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x).(f(x)+\epsilon)\right] =$$
$$= \mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x).f(x) + h_{\mathcal{D}}(x).\epsilon)\right] = \mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x).f(x)\right] + \mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x).\epsilon\right] =$$
$$= f(x)\,\mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right] + \mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right].\mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[\epsilon\right]$$

Novamente usando que a média de ϵ é zero, temos que $\mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x).f'(x)\right] = f(x)\,\mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right]$. Assim,

$$\mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[\left(h_{\mathcal{D}}(x) - f'(x)\right)^2\right] = \mathbb{E}_{x,\epsilon,\mathcal{D}}\left[h^2_{\mathcal{D}}(x) - 2.h_{\mathcal{D}}(x).f'(x) + f'^2(x)\right] =$$
$$= \mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h^2_{\mathcal{D}}(x)\right]\right] + \mathbb{E}_x\left[-2.\mathbb{E}_{\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right].f'(x) + f'^2(x)\right] =$$
$$= \mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h^2_{\mathcal{D}}(x)\right] - \mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right]^2\right] + \mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right]^2 - 2.\mathbb{E}_{\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right].f'(x) + f'^2(x)\right] =$$
$$= \mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h^2_{\mathcal{D}}(x)\right] - \mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right]^2\right] + \mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right]^2 - 2.\mathbb{E}_{\epsilon,\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right].f'(x) + f^2(x) + \sigma^2\right] =$$
$$= \mathbb{E}_x[\underbrace{\text{Var}_{\mathcal{D}}[h_{\mathcal{D}}(x)]}_{\text{Variância}}] + \mathbb{E}_x[(\underbrace{\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[h_{\mathcal{D}}(x) - f(x)]}_{\text{Viés}})^2] + \sigma^2$$

[ ]: