Advanced Institute for Artificial Intelligence

Regressão

Advanced Institute for Artificial Intelligence

https://advancedinstitute.ai

Regressão: Definição

Regressão: O que é?

- Tenta **prever** valores numéricos diretamente **a partir de atributos** de um novo exemplo.

Exemplos

- **Prever** a temperatura de amanhã **a partir** das condições atmosféricas.
- **Estimar** o preço de uma casa **a partir** de seu tamanho.

Mais Formalmente.....

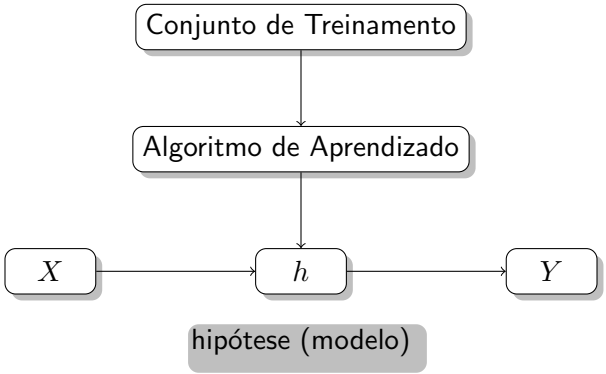
Definição do problema

- Prever uma variável quantitativa $Y \in \mathbb{R}$ (*resposta*)
- A partir de variáveis preditoras $X_1, \ldots, X_n \in \mathbb{R}$
- **Objetivo:** Encontrar o modelo h:

$$Y = h(X_1, \ldots, X_n)$$

Estratégia:

- Utilizar um conjunto de exemplos (*dataset*) onde a resposta correta é conhecida para "aprender" um modelo.



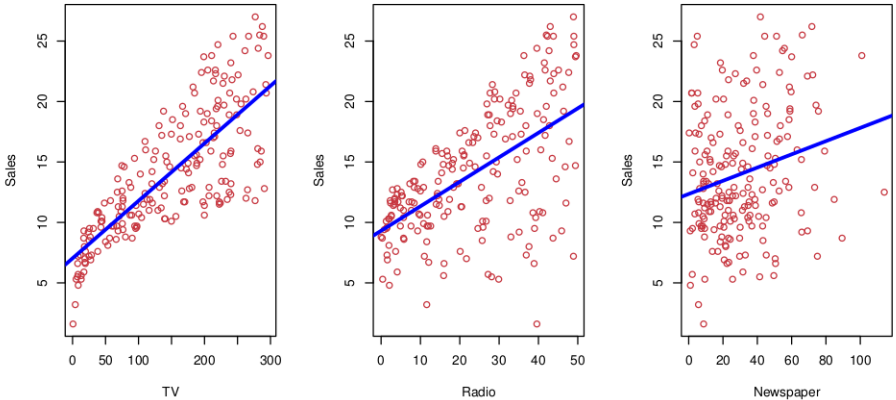
Aprendendo o Modelo

Idealmente, o algoritmo para aprender o modelo deve:

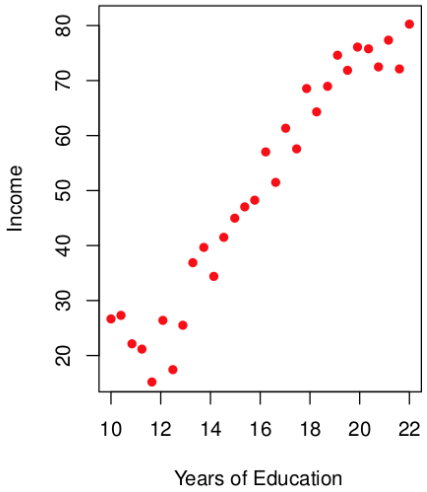
- Ser capaz de reconstruir o fenômeno modelado com maior precisão possível
- Requerer o mínimo possível de dados para o aprendizado
- Representar o modelo da maneira mais simples o possível (Navalha de Occam)

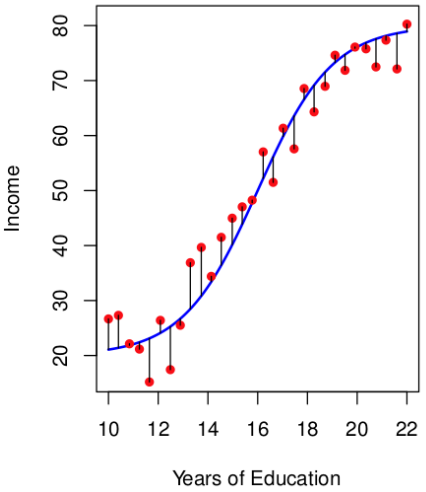
- Não há uma "resposta correta" para todos os problemas
- Existem muitos tipos de modelos (modelos lineares, árvores, redes neurais, etc.)

Volume de vendas em função da verba de publicidade em diferentes meios



Renda em função da escolaridade

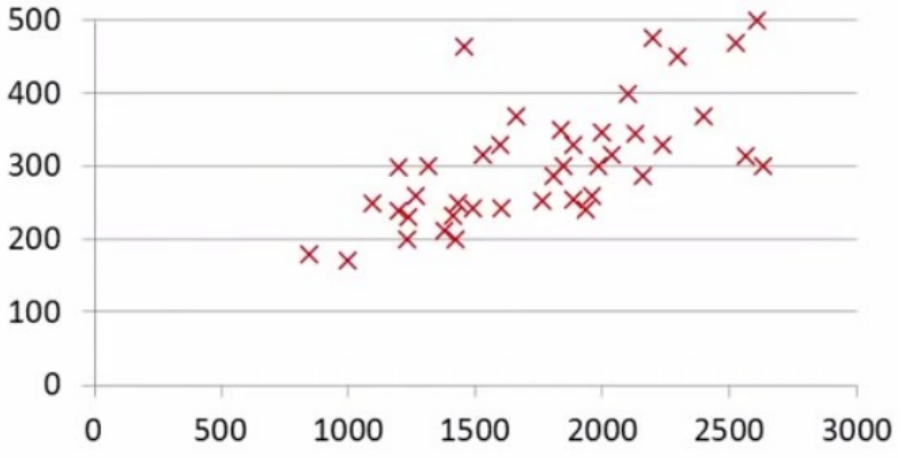




O Conjunto de treinamento pode ser visualizado como uma tabela

Tamanho em pé^2	Preço ($) em 1000's
2104	460
1416	232
1534	315
852	178
...	...

Table: Preço de habitação por tamanho em Portland (OR)


500
400
300
200
100
0
0
500
1000
1500
2000
2500
3000

Advanced
Institute for
Artificial
Intelligence

Regressão Linear Univariada

Caso: Apenas um atributo

Hipótese

- variável de resposta tem uma relação linear com os atributos.

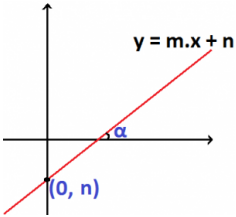
$$Y = \theta_0 + \theta_1 x + \epsilon$$

h é representado como uma reta:

$$h(\theta) = \theta_0 + \theta_1 x$$

Equação da Reta:

$$y = mx + n$$



- $m =$ coeficiente angular
- $n =$ coeficiente linear

$$y = mx + n$$

$$h(\theta) = \theta_0 + \theta_1 x$$

Objetivo: Achar melhor reta (θ) de acordo com os dados de treinamento

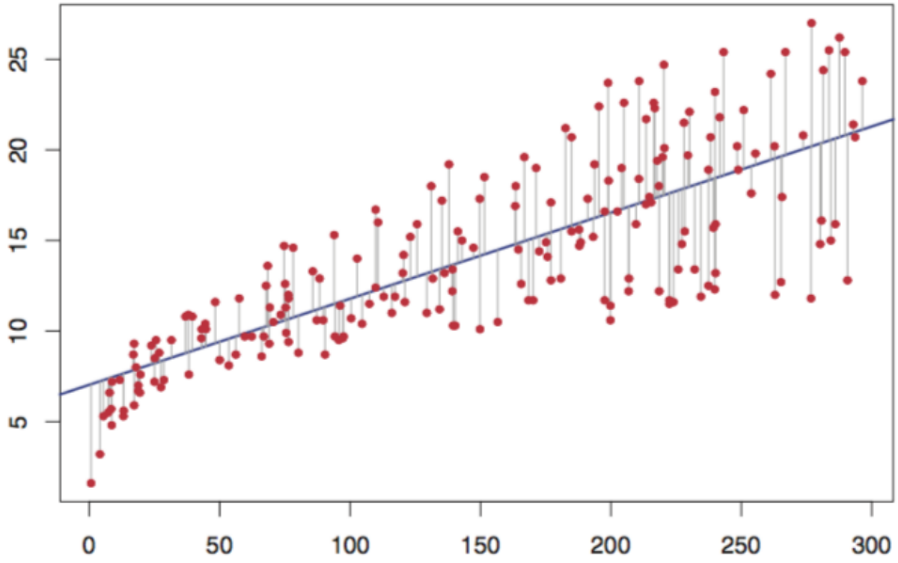
E o que seria a melhor reta?

- Encontrar a reta h que passe o mais próximo possível de todos os pontos

Resíduo

- Diferença entre o valor y real e a estimativa $\widehat{y} = h_\theta(x)$

$$\epsilon = y^i - \widehat{y}$$


25
20
15
10
5
0
50
100
150
200
250
300

- Uma maneira de calcular θ_0 e θ_1 é se basear na soma do quadrado dos resíduos (RSS - *residual sum of squares*)

$$J(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i^2$$

- Uma maneira de calcular θ_0 e θ_1 é se basear na soma do quadrado dos resíduos (RSS - *residual sum os squares*)

$$J(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i^2$$

$$J(\theta) = \sum_{i=1}^{n} (y^i - \widehat{y})^2$$

- Uma maneira de calcular θ_0 e θ_1 é se basear na soma do quadrado dos resíduos (RSS - *residual sum os squares*)

$$J(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i^2$$

$$J(\theta) = \sum_{i=1}^{n} (y^i - \widehat{y})^2$$

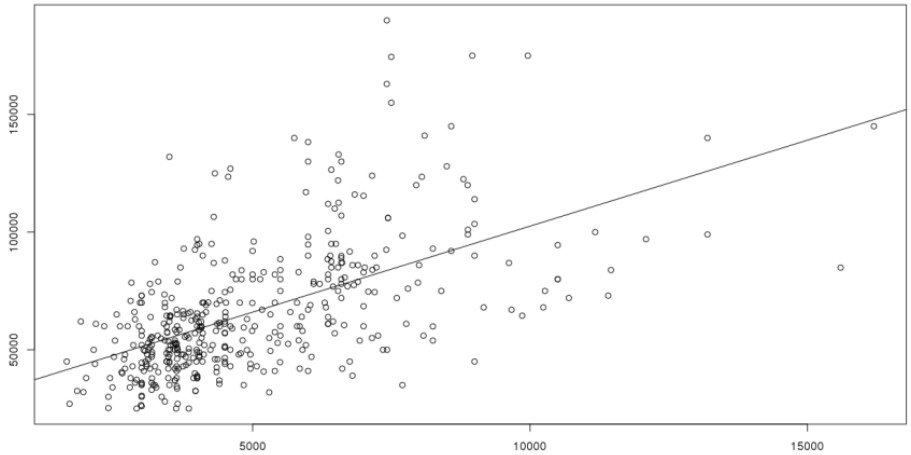
$$J(\theta) = \sum_{i=1}^{n} (y^i - (\theta_0 + \theta_1 x^i))^2$$

θ_0 e θ_1 devem ser escolhidos de modo a minimizar o RSS. Solução: Método dos mínimos quadrados (Least Squares)

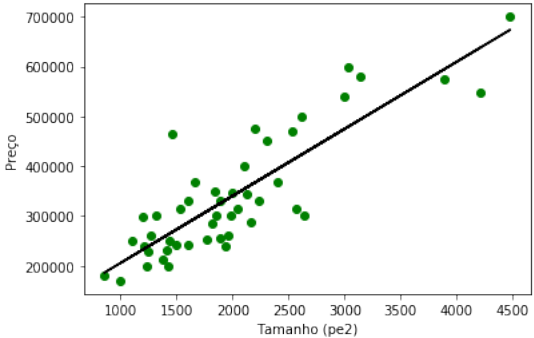
$$\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_j x^j \qquad \bar{y} = \frac{1}{n}\sum_j y^j$$

$$\theta_1 = \frac{\sum_j (x^j - \bar{x})(y^j - \bar{y})}{\sum_i (x^j - \bar{x})^2} \qquad \theta_0 = \bar{y} - \theta_1 \bar{x}$$

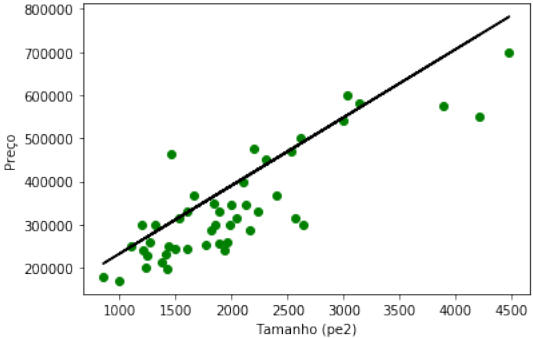
Como saber se o resultado foi bom?



O próprio RSS pode ser utilizado



(a) Modelo 1: RSS $= 1.93 \times 10^{11}$



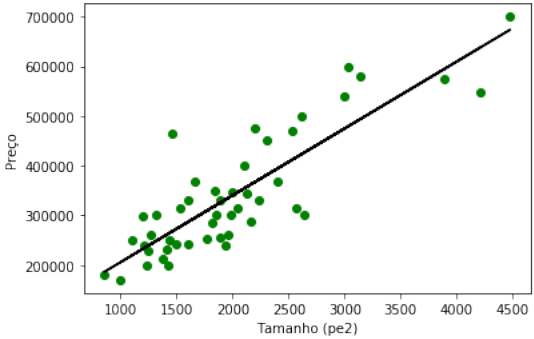
(b) Modelo 2: RSS $= 3.28 \times 10^{11}$

Estatística R^2

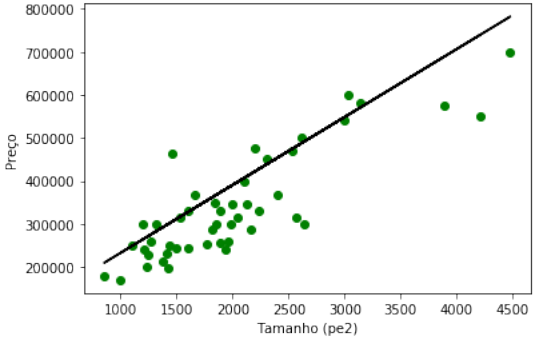
- Mede a proporção da variabilidade de Y que pode ser explicada por X.

$$TSS = \sum_j (y^j - \bar{y})^2 \qquad RSS = \sum_j (y^j - \widehat{y})^2$$

$$R^2 = \frac{TSS - RSS}{TSS}$$



(c) Modelo 1: $R^2 = 0.63$



(d) Modelo 2: $R^2 = 0.54$

Advanced
Institute for
Artificial
Intelligence

Regressão Linear Multivariada

- Na maior parte dos problemas práticos, utilizar apenas um atributo **não é o suficiente** para estimar a resposta
- Neste caso, a Regressão Linear deve estimar um Hiperplano como modelo h.

Regressão Linear com Múltiplas Variáveis

Hipótese

$$Y = h_\theta(X) = \theta_0 + \theta_1 X_1 + \cdots + \theta_n X_n$$

Tamanho em pé^2	número de quartos	Preço ($) em 1000's
2104	3	460
1416	3	232
1534	3	315
852	2	178
...		...

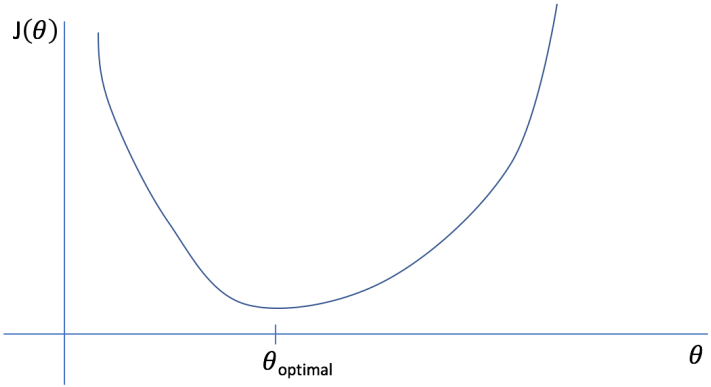
- Assim como no caso univariado, valores de θ devem ser escolhidos baseados no conjunto de treinamento
- O método dos mínimos quadrados também funciona para o caso multivariado
- Outra possibilidade de realizar o aprendizado é através do método de **Descida do Gradiente** (*Gradient Descent*)

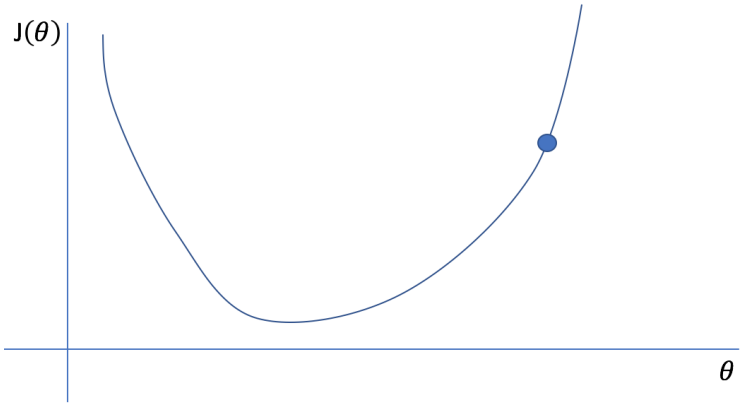
Descida do Gradiente

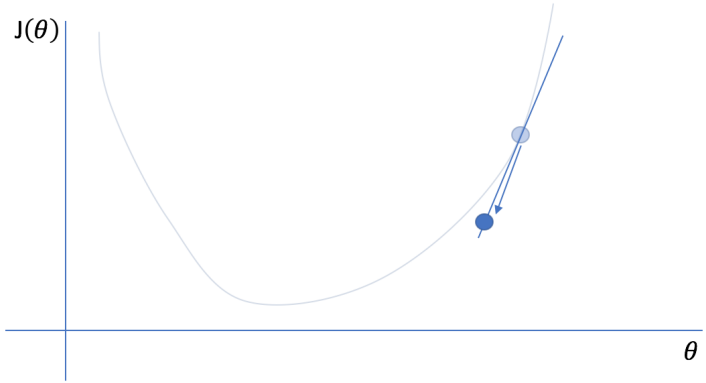
- Partindo da função de custo de **Erro Quadrático Médio**

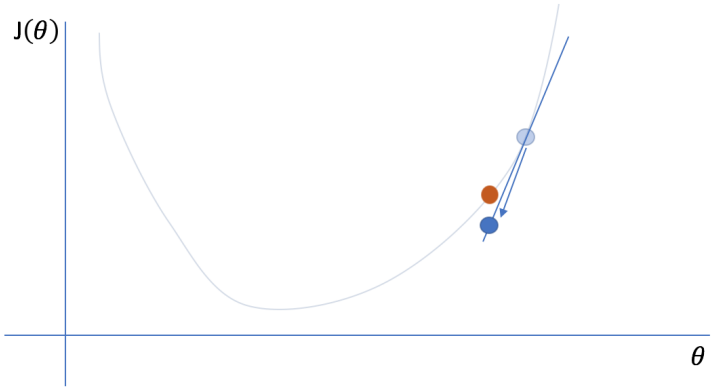
$$J(\theta) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{n} (y^i - h_\theta(\boldsymbol{x}^i))^2$$

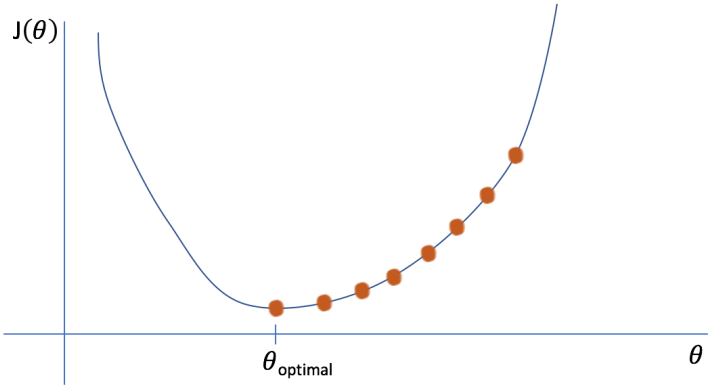
- Definir parâmetros θ que minimizem J


J(θ)
θ optimal
θ


J(θ)
θ

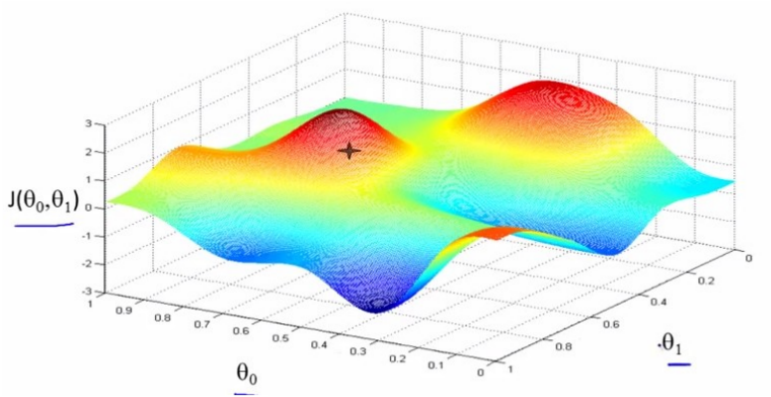

J(θ)
θ

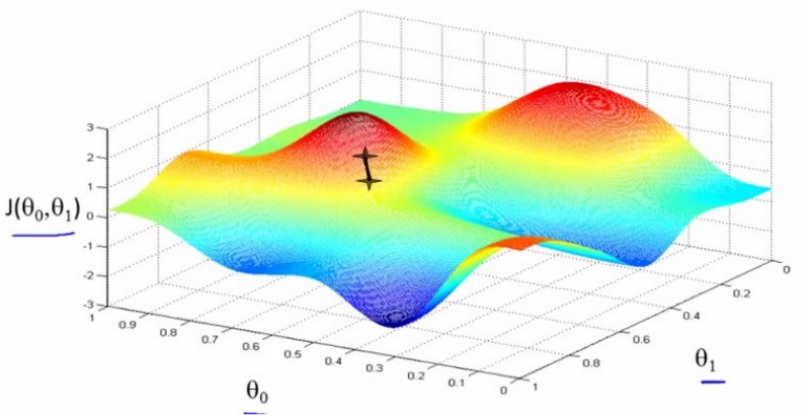

J(θ)
θ

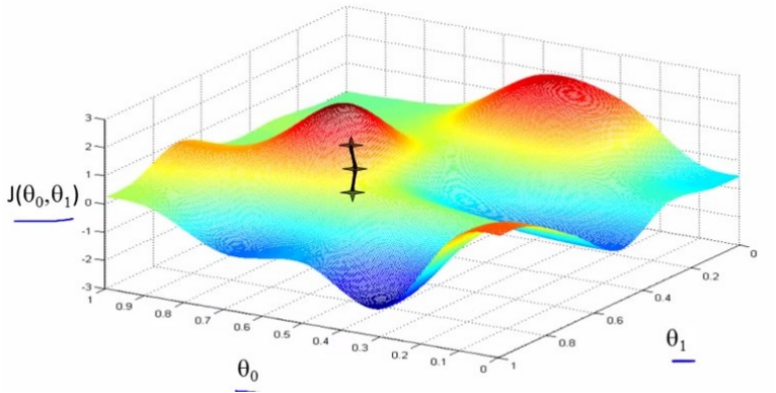

J(θ)
θ optimal
θ

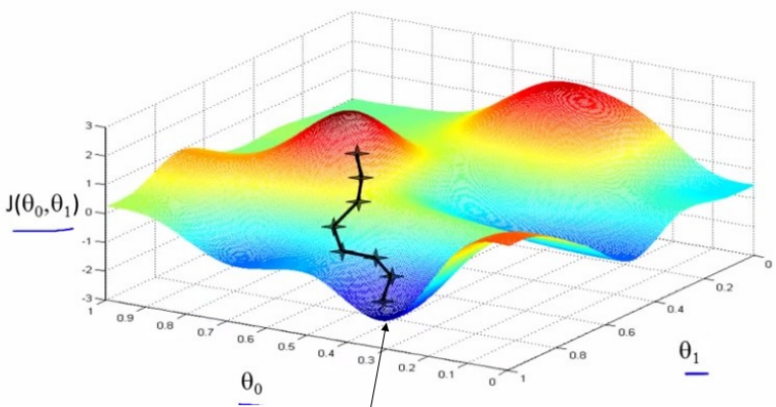
Algoritmo Gradiente Descendente

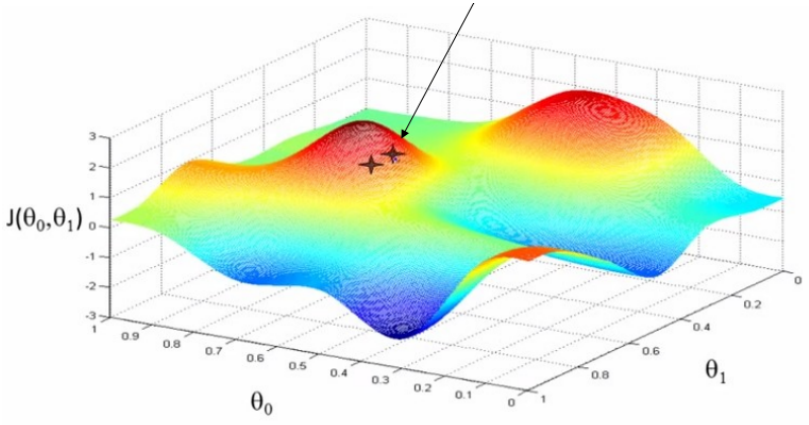
1. Iniciar θ aleatoriamente
2. Modificar valores de θ (seguindo o gradiente), para reduzir J até que um valor mínimo seja atingido.

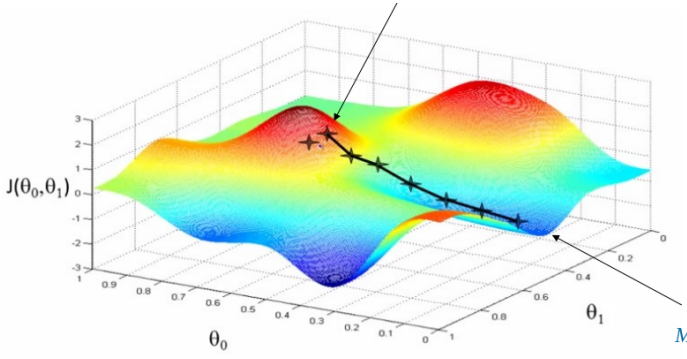

J(θ0,θ1)
θ0
θ1


J(θ0,θ1)
3
2
1
0
-1
-2
-3
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
θ0
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
θ1


J(θ0,θ1)
θ0
θ1


J(θ0,θ1)
θ0
θ1
Mínimo local


J(θ0,θ1)
3
2
1
0
-1
-2
-3
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
θ0
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
θ1



Mínimo local

Como computar a atualização?

- Repetir até a convergência, para cada parâmetro θ:

$$\theta_i := \theta_i - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_i} J(\theta)$$

- α é a taxa de aprendizado, que controla o "salto" na atualização dos parâmetros

$$\theta_i := \theta_i - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_i} J(\theta)$$

$$i = 0 : \frac{\partial}{\partial \theta_i} J(\theta) = \frac{1}{m} \sum h_\theta(\boldsymbol{x}^i) - y^i$$

$$i = 1 : \frac{\partial}{\partial \theta_i} J(\theta) = \frac{1}{m} \sum (h_\theta(\boldsymbol{x}^i) - y^i) x_1^i$$

Aplicando Descida do Gradiente

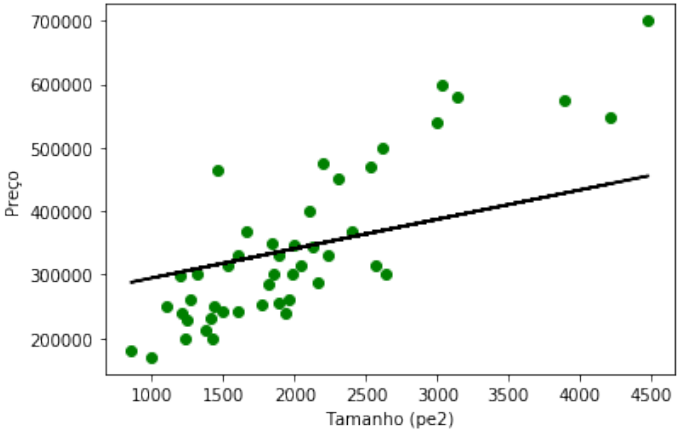


Figure: Repetindo **1** vez o treinamento. $RSS = 4.2 \times 10^{12}$, $R^2 = -5.76$

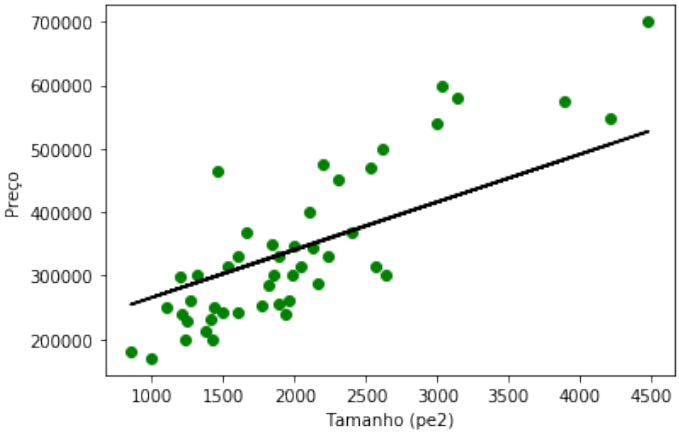


Figure: Repetindo **2** vezes o treinamento. $RSS = 2.9 \times 10^{11}$, $R^2 = -0.79$

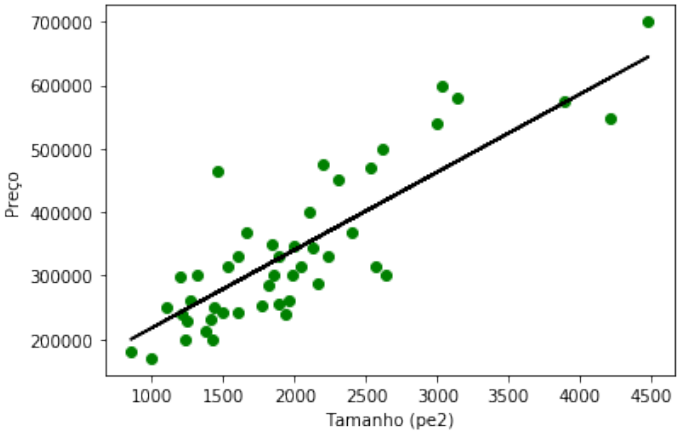


Figure: Repetindo **7** vezes o treinamento. $RSS = 1.9 \times 10^{11}$, $R^2 = 0.55$

Vantagens

- Aprendizado eficiente
- Modelo simples de se visualizar e compreender

Desvantagens

- Muitos problemas reais não são lineares

Advanced
Institute for
Artificial
Intelligence

Regressão por K Vizinhos mais Próximos

Regressão KNN (K-Nearest Neighbours)

Hipótese

- Y pode ser estimada se baseando nos k exemplos mais próximos na base de treinamento.

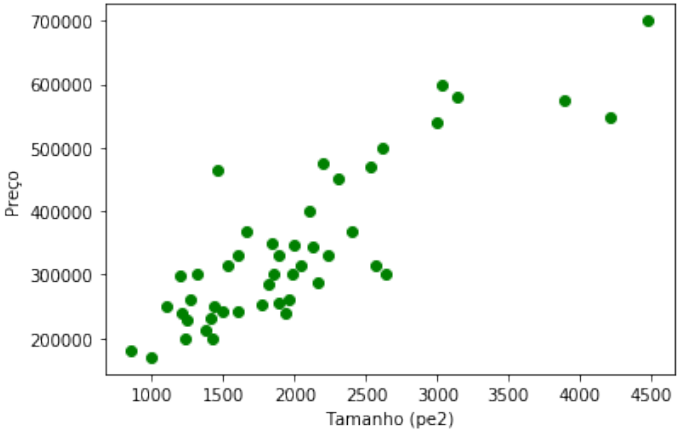
$$h_K(\boldsymbol{x}) = \sum_{j \in \mathcal{N}_K} w_j(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}^j) y^j$$

- Onde K é o número de vizinhos, $\mathcal{N}_K$ é o conjunto de amostras presentes na K-vizinhança e w_j é o peso de $\boldsymbol{x}$ em relação a $\boldsymbol{x}^j$

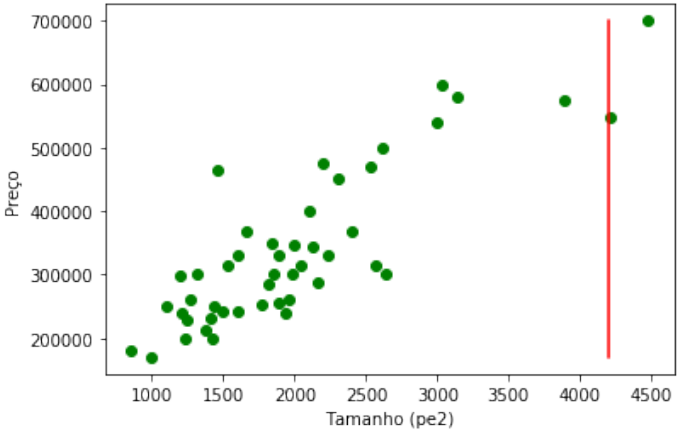
- Assumindo que todas as amostras têm o mesmo peso:

$$h_K(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{K} \sum_{j \in \mathcal{N}_K} y^j$$

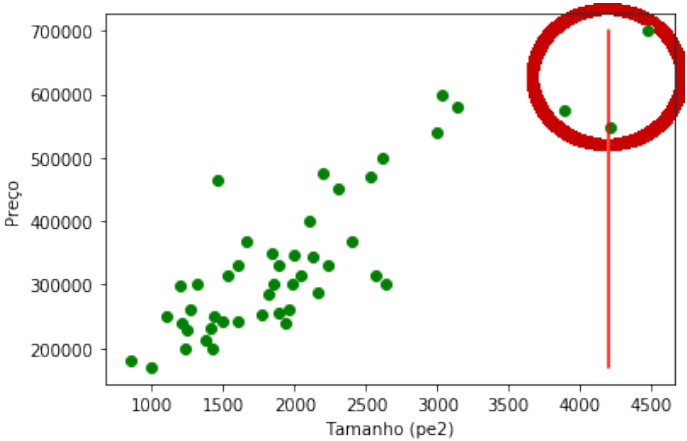
- Não é necessário um processo de treinamento


Preço
700000
600000
500000
400000
300000
200000
1000
1500
2000
2500
3000
3500
4000
4500
Tamanho (pe2)

Imagine que queremos prever o preço de uma casa com tamanho $= 4200$

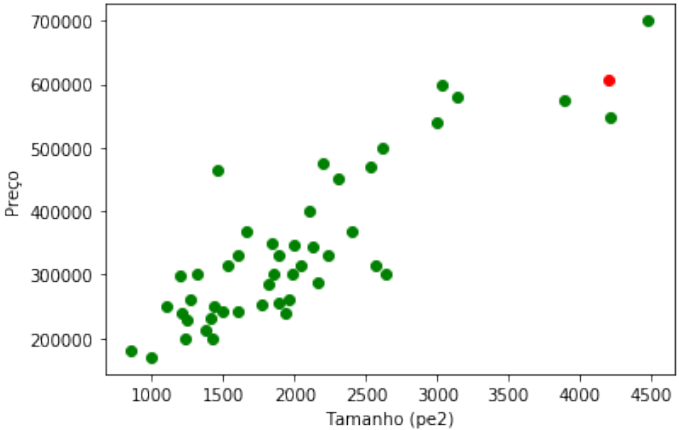


Se $K = 3$, devemos encontrar os 3 exemplos mais próximos do valor desejado



O valor previsto é definido como a média destes valores

$$Y = \frac{1}{3}(699900 + 573900 + 549000) = 607600$$


700000
600000
500000
400000
300000
200000
Preço
1000
1500
2000
2500
3000
3500
4000
4500
Tamanho (pe2)

Parâmetros Necessários para KNN

1. $K \rightarrow$ número de vizinhos
2. Uma métrica de distância para encontrar os vizinhos "mais próximos"
3. Uma forma de definir o peso para cada exemplo

Exemplos de modelos aprendidos com KNN

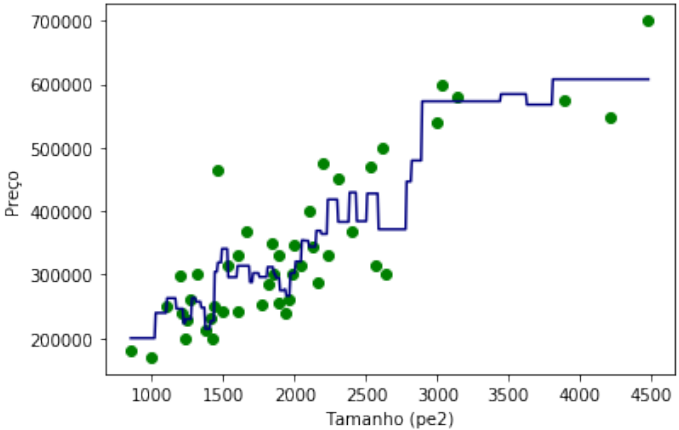


Figure: $K = 3$

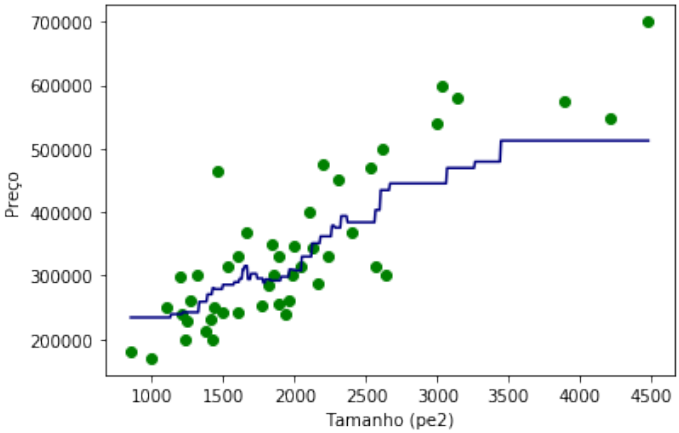

700000
600000
500000
400000
300000
200000
Preço
1000
1500
2000
2500
3000
3500
4000
4500
Tamanho (pe2)

Figure: $K = 10$

Vantagens

- O modelo aprendido não precisa ser linear
- Não há fase de treinamento
- Poucos parâmetros a serem definidos

Desvantagens

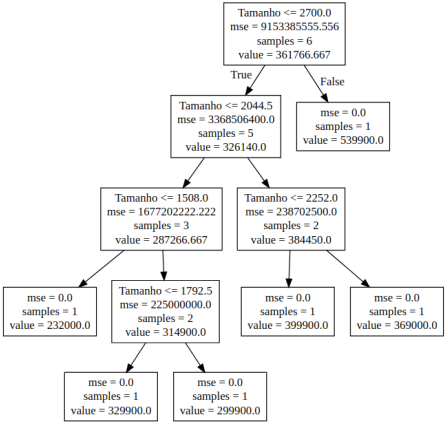
- Processo de inferência muito custoso
- Sensitividade a ruído e escala

Advanced Institute for Artificial Intelligence

Árvore de Regressão

Árvore de Regressão

- Aprende uma estrutura de árvore que "divide" o conjunto de treinamento de acordo com os valores dos atributos
- Resulta em um modelo fácil de **visualizar** e **interpretar**, muito utilizado em domínios em que uma solução "caixa-preta" é inaceitável

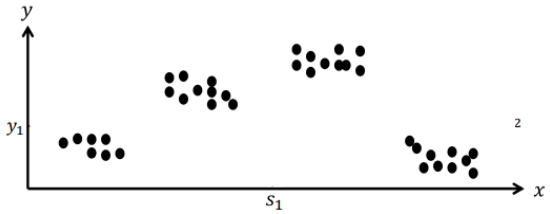

Tamanho <= 2700.0
mse = 9153385555.556
samples = 6
value = 361766.667
True
False
Tamanho <= 2044.5
mse = 3368506400.0
samples = 5
value = 326140.0
mse = 0.0
samples = 1
value = 539900.0
Tamanho <= 1508.0
mse = 1677202222.222
samples = 3
value = 287266.667
Tamanho <= 2252.0
mse = 238702500.0
samples = 2
value = 384450.0
mse = 0.0
samples = 1
value = 232000.0
Tamanho <= 1792.5
mse = 225000000.0
samples = 2
value = 314900.0
mse = 0.0
samples = 1
value = 399900.0
mse = 0.0
samples = 1
value = 369000.0
mse = 0.0
samples = 1
value = 329900.0
mse = 0.0
samples = 1
value = 299900.0

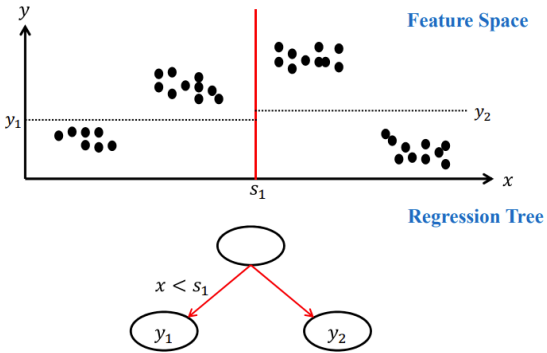
Como aprender a árvore?

Repetir iterativamente até que um critério de parada seja atingido:

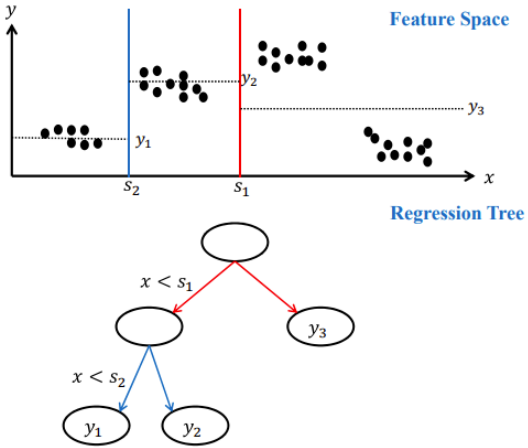
1. Encontrar o melhor valor para particionar cada atributo
2. Selecionar a melhor partição entre as definidas no passo anterior
3. Particionar os dados de treinamento conforme escolhido no passo anterior

Particionando a Árvore





A Predição para uma amostra é definida como uma média do valor y de todos os exemplos no conjunto de treinamento que caem naquela mesma partição.


Feature Space
y
x
y_1
y_2
y_3
s_1
s_2
Regression Tree
$x < s_1$
$x < s_2$
y_1
y_2
y_3

Vantagens

- Pouco afetada pela escala dos atributos
- Intuitiva e fácil de se compreender

Desvantagens

- Pequenas alterações nos dados podem resultar em grandes alterações na árvore resultante
- Valores preditos na regressão não são muito precisos
- Processo de treinamento relativamente custoso