Regressão Linear

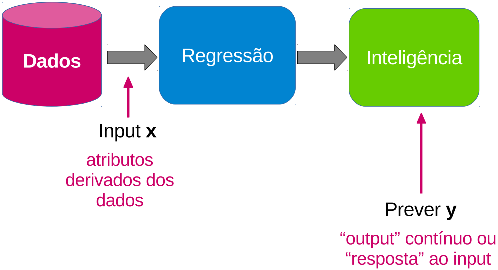
Prof. Dr. Leandro Balby Marinho

Aprendizagem de Máquina

Roteiro

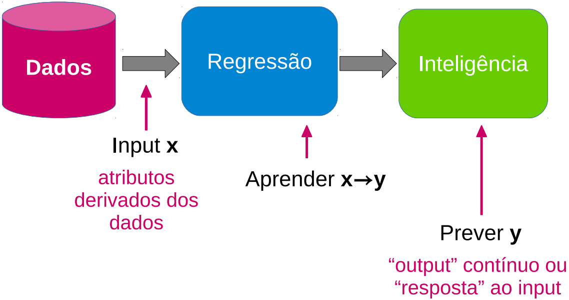
Regressão

De atributos para previsão.



Regressão

De atributos para previsão.



Salário depois de formado

- De quanto será o seu salário depois de formado? ($y =$R\$)
- Depende de $x =$ anos de estudo, desempenho geral, desempenho em disciplinas específicas, participação em projetos, fluência em inglês, ...

Previsão de preços de ações

- Qual será o preço de determinada ação amanhã? (y).
- Depende de $x =$ histórico de preço recente da ação, notícias recentes, commodities relacionadas,....

Popularidade de Tweet

- Quantas pessoas vão retuitar o meu tweet? (y).
- Depende de $x = \#$ seguidores, atributos do texto tuitado, popularidade da hashtag, # retweets passados, ...

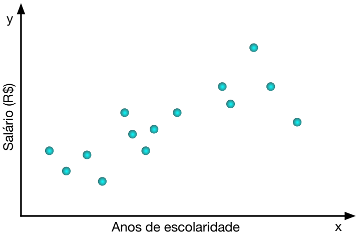
Predição de Salário

Anos de Escolaridade	Salário Anual (em milhares de R$)
8	26
8	21
10	26
11	36
⋮	⋮

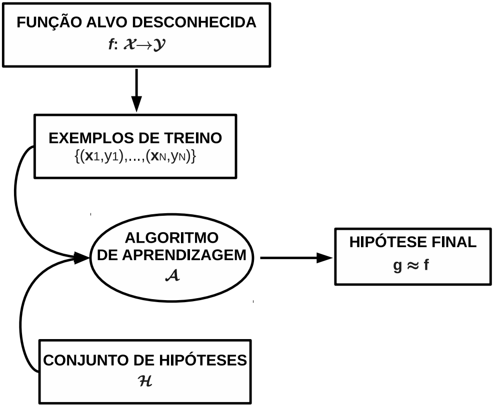
Dado que eu tenho x anos de escolaridade, qual será meu salário?

Componentes da Aprendizagem

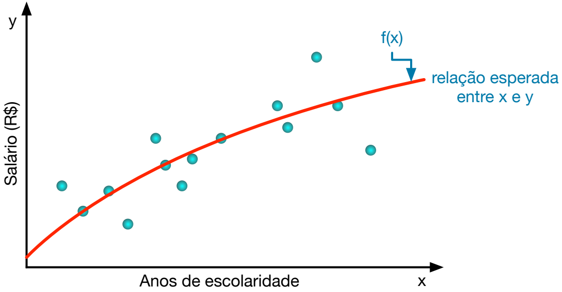
- Entrada: x
- Saída: y
- Função alvo: $f : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$
- Dados de Treino: $\mathcal{D}^{\text{train}} := \{(x_1, y_1), \ldots, (x_N, y_N)\}$
- Hipótese: $g : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$



Componentes da Aprendizagem [Yaser, 2012]

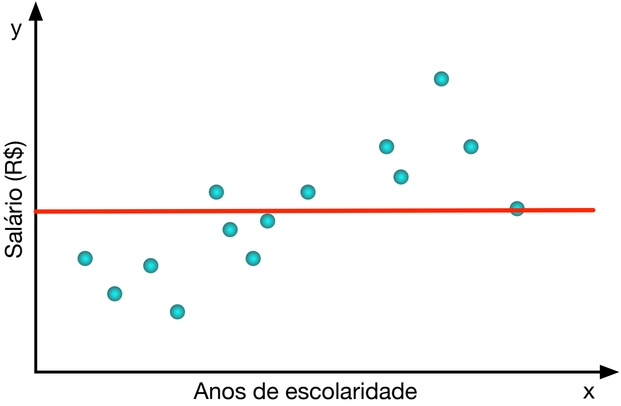


Modelo: Como assumimos que o mundo funciona

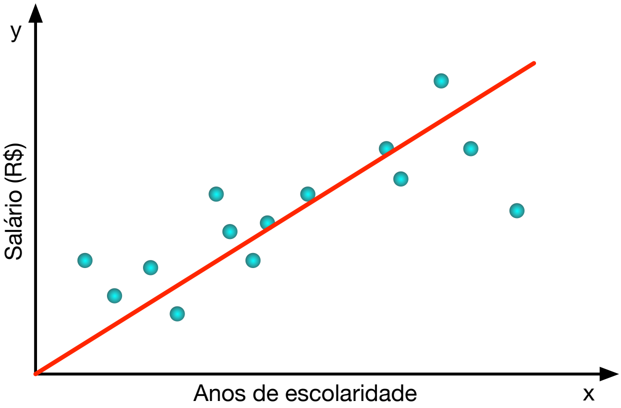


Modelo de Regressão: $y_i = f(x_i) + \epsilon_i$, tal que $E[\epsilon] = 0$

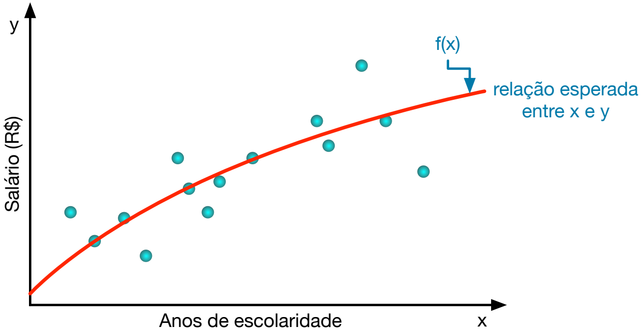
Tarefa 1: Que modelo usar?



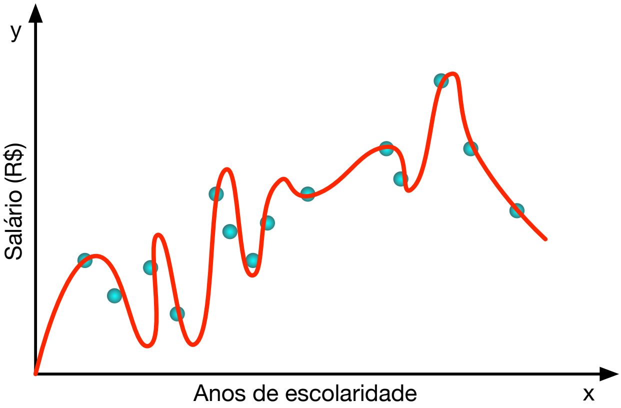
Tarefa 1: Que modelo usar?



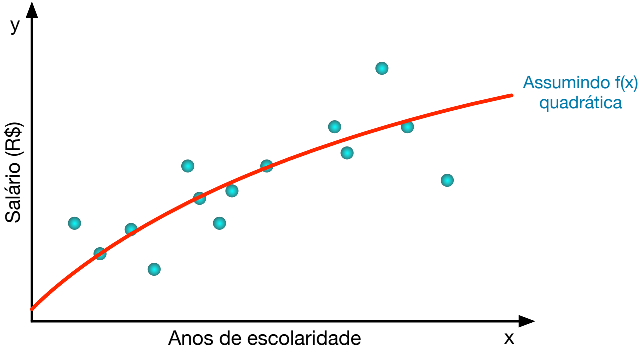
Tarefa 1: Que modelo usar?



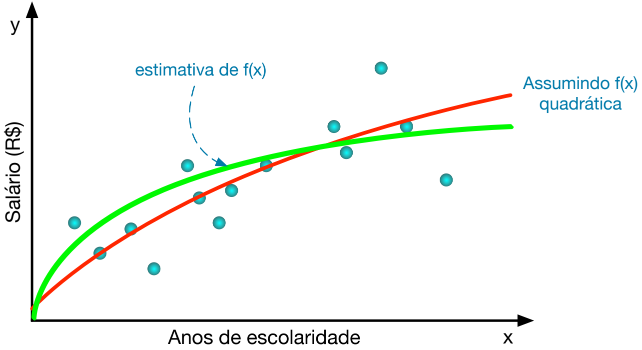
Tarefa 1: Que modelo usar?



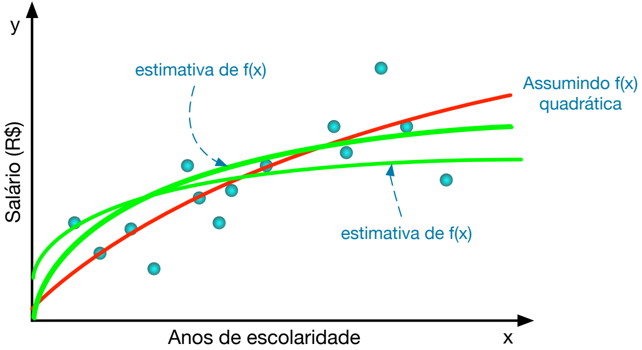
Tarefa 2: Dado $f(x)$, como estimar $\hat{f}(x)$ dos dados?



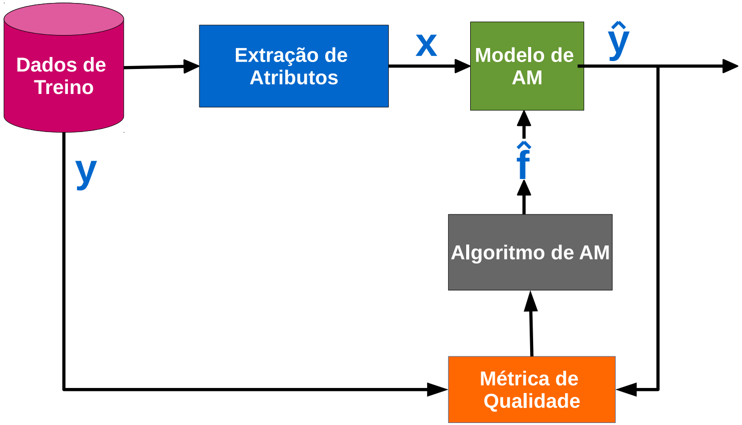
Tarefa 2: Dado $f(x)$, como estimar $\hat{f}(x)$ dos dados?



Tarefa 2: Dado $f(x)$, como estimar $\hat{f}(x)$ dos dados?



Regressão Workflow



Roteiro

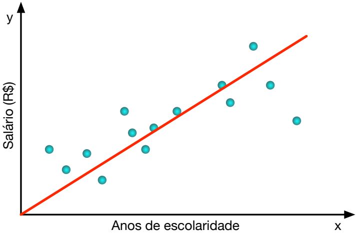
Regressão Linear Simples

Assume-se que a relação entre a variável de entrada e saída é **linear**:

$$f(x) = w_0 + w_1 x$$

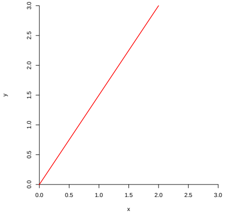
onde w_0 e w_1 são chamados de parâmetros do modelo. Cada observação é então definida por

$$y_i = w_0 + w_1 x_i + \epsilon_i$$

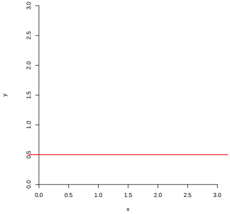


Parâmetros do Modelo

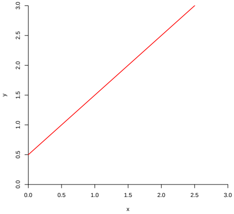
$$w_0 \ldots \quad \text{Coeficiente linear}$$
$$w_1 \ldots \quad \text{Coeficiente angular}$$



$w_0 = 0, w_1 = 1.5$



$w_0 = 0.5, w_1 = 0$

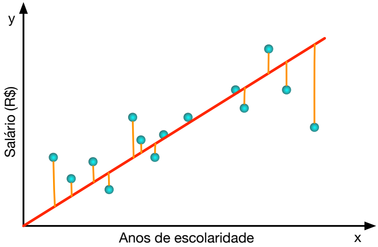


$w_0 = 0.5, w_1 = 1.5$

Custo de uma única linha de regressão

Custo: Soma dos erros quadrados

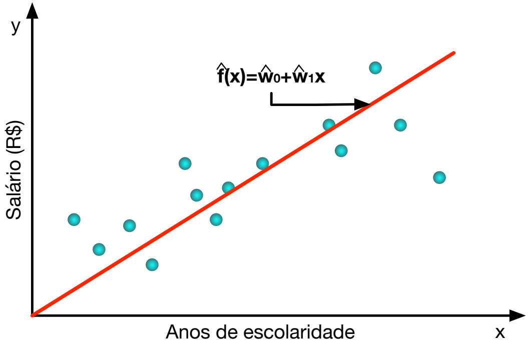
$$\mathrm{RSS}(w_0, w_1) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - [w_0 + w_1 x_i])^2$$



Para diferentes escolhas de w_0 e w_1 tem-se diferentes RSS.

Modelo vs linha de regressão

- Modelo de regressão linear: $y_i = w_0 + w_1 + \epsilon_i$
- Parâmetros estimados: $\hat{w}_0, \hat{w}_1$

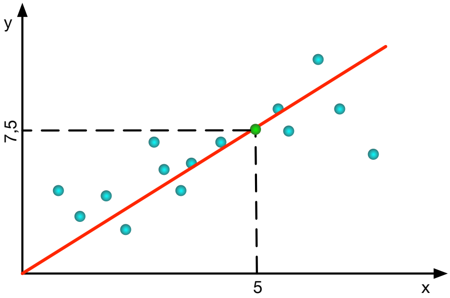


Usando o modelo aprendido

- Por exemplo, para $x = 5$:

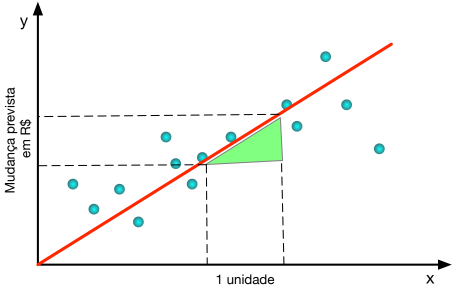
$$\hat{y} = \hat{f}(5) = \hat{w}_0 + 5\hat{w}_1$$

- Assumindo por exemplo: $\hat{w}_0 = 0, \hat{w}_1 = 1.5$
- $\hat{y} = 7,5$



Interpretando a Linha de Regressão

- $\hat{y} = \hat{w}_0 + \hat{w}_1 x$
- $w_0 \ldots$ valor de $\hat{y}$ quando $\hat{w}_1 = 0$
- $w_1 \ldots$ mudança prevista em $\hat{y}$ por mudança de uma unidade em x.



Roteiro

1. Introdução

2. Regressão Linear Simples

3. Aprendizado de Parâmetros

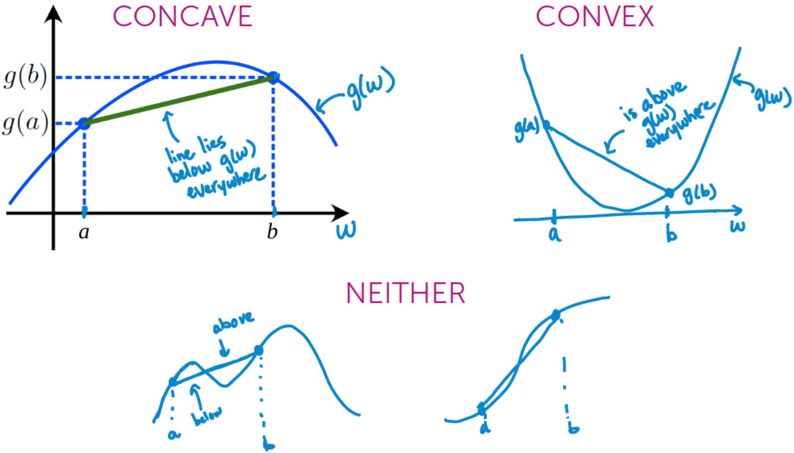
Regressão como um Problema de Otimização

- **Ideia: Escolha w_0, w_1 tal que $\hat{y} \approx y$ nos dados de treino.**
- Especificamente, escolha w_0, w_1 tal que o RSS seja mínimo:

$$\underset{w_0, w_1}{\operatorname{argmin}} \operatorname{RSS}(w_0, w_1)$$

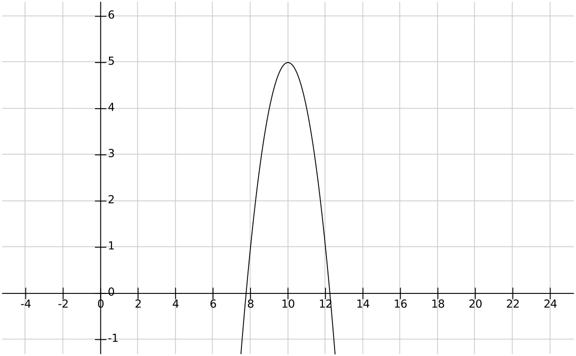
- Esse método também é chamado de mínimios quadrados ou *Ordinary Least Squares (OLS)*

Funções Côncavas e Convexas



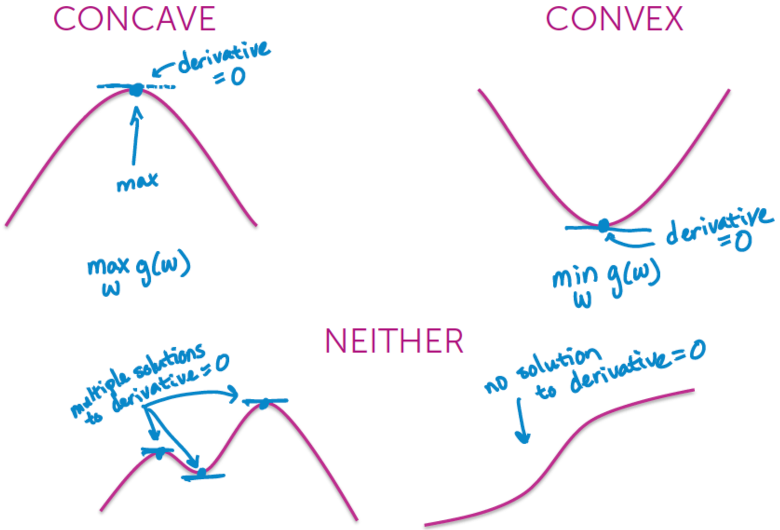
Máximos e Mínimos em uma Dimensão

Qaul o valor de w que maximiza a função $g(w) = 5 - (w - 10)^2$?



Calcule a derivada e iguale a zero (por que?)

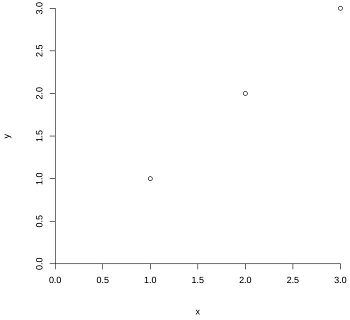
Achando Máximos e Mínimos de Forma Analítica



Formato da Função de Erro

Considere $\mathcal{D}^{\text{train}} = \{(1,1),(2,2),(3,3)\}$

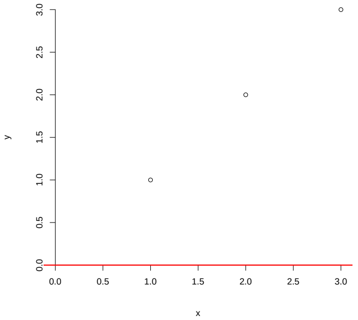
Mantendo $w_0 = 0$ fixo.



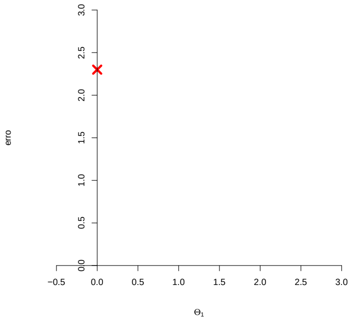
Formato da Função de Erro

Considere $\mathcal{D}^{\text{train}} = \{(1,1),(2,2),(3,3)\}$

Mantendo $w_0 = 0$ fixo.



RSS($w_1 = 0$)

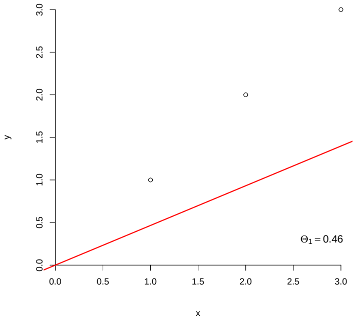


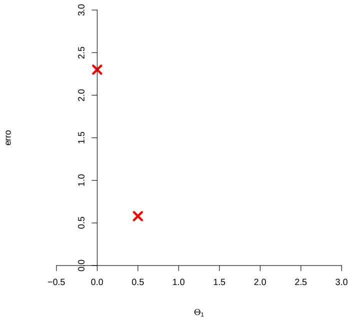
Formato da Função de Erro

Considere $\mathcal{D}^{\text{train}} = \{(1,1),(2,2),(3,3)\}$

Mantendo $w_0 = 0$ fixo.

RSS($w_1 = 0.5$)

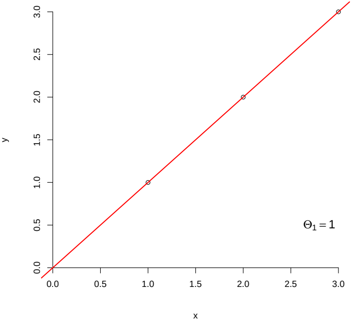




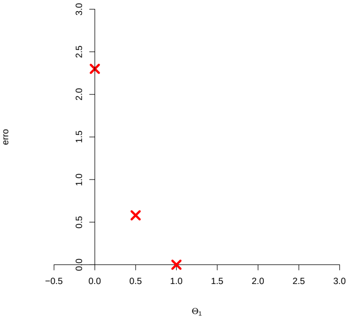
Formato da Função de Erro

Considere $\mathcal{D}^{\text{train}} = \{(1,1),(2,2),(3,3)\}$

Mantendo $w_0 = 0$ fixo.



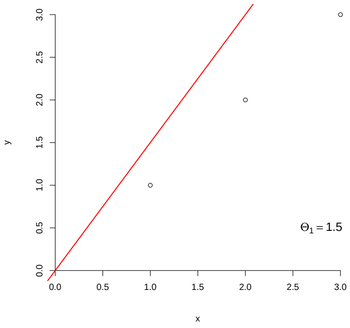
$\text{RSS}(w_1 = 1)$



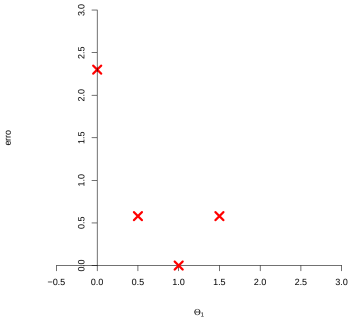
Formato da Função de Erro

Considere $\mathcal{D}^{\text{train}} = \{(1,1),(2,2),(3,3)\}$

Mantendo $w_0 = 0$ fixo.



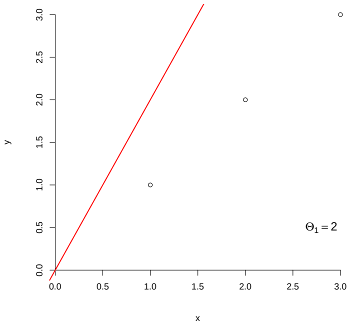
RSS($w_1 = 1.5$)



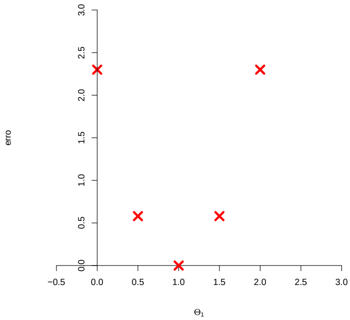
Formato da Função de Erro

Considere $\mathcal{D}^{\text{train}} = \{(1,1),(2,2),(3,3)\}$

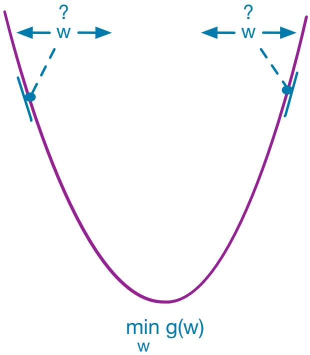
Mantendo $w_0 = 0$ fixo.



RSS($w_1 = 2.0$)

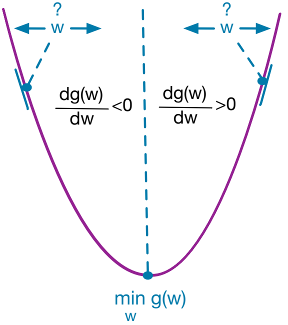


Mínimo via Hill Descent



- Quando a derivada é positiva queremos diminuir w.
- Quando negativa queremos aumentar w.

Mínimo via Hill Descent

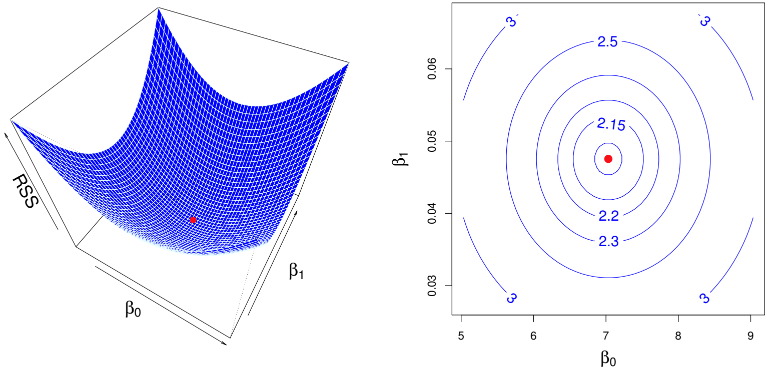


Hill-Descent

1 **while** not converged

2 $$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \alpha \frac{d}{dw} g(w^{(t)})$$

Formato da Função de Erro em duas Dimensões



Derivadas Parciais

Para uma função multivariada, como $f(x,y) = x^2y$, calcular derivadas parciais se resume a:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} x^2 y}_{\text{trate } y \text{ como constante}} = 2xy$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} x^2 y}_{\text{trate } x \text{ como constante}} = x^2 \cdot 1$$

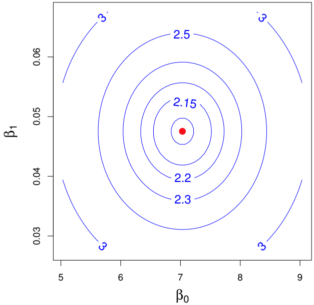
Gradiente

O gradiente de uma função multivariada $f(x, y, \ldots)$, denotada por ∇f, empacota todas suas derivadas parciais em um vetor:

$$\nabla f = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

O gradiente aponta para a direção onde a função está mudando mais rapidamente.

Gradiente Descendente



Gradient-Descent

1 **while** not converged

2 $\mathbf{w}^{(t+1)} = \mathbf{w}^{(t)} - \alpha \nabla g\left(\mathbf{w}^{(t)}\right)$

Note que agora $\mathbf{w}$ e $\nabla g(\mathbf{w})$ são vetores.

Calculando o gradiente de RSS

Lembrando que: $\text{RSS}(w_0, w_1) = \sum_{i=1}^{N}(y_i - [w_0 + w_1 x_i])^2$

Derivada em relação a w_0:

$$\frac{\partial}{\partial w_0}\text{RSS}(w_0, w_1) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial}{\partial w_0}(y_i - [w_0 + w_1 x_i])^2$$

$$\frac{\partial}{\partial w_1}\text{RSS}(w_0, w_1) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial}{\partial w_1}(y_i - [w_0 + w_1 x_i])^2$$

Note que a derivada da soma é a soma das derivadas.

Derivada em relação a w_0:

Lembrando que: $\mathrm{RSS}(w_0, w_1) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - [w_0 + w_1 x_i])^2$

$$\frac{\partial}{\partial w_0} \mathrm{RSS}(w_0, w_1) = \sum_{i=1}^{N} 2(y_i - [w_0 + w1 x_i])(-1)$$
$$= -2 \sum_{i=1}^{N} (y_i - [w_0 + w1 x_i])$$

Derivada em relação a w_1

Lembrando que: $\mathrm{RSS}(w_0, w_1) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - [w_0 + w_1 x_i])^2$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial w_1} \mathrm{RSS}(w_0, w_1) &= \sum_{i=1}^{N} 2(y_i - [w_0 + w1 x_i])(-x_i) \\
&= -2 \sum_{i=1}^{N} (y_i - [w_0 + w1 x_i]) x_i
\end{aligned}
$$

Gradiente de RSS

$$\nabla \text{RSS}(w_0, w_1) = \begin{pmatrix} -2\sum_{i=1}^{N}(y_i - [w_0 + w_1 x_i]) \\ -2\sum_{i=1}^{N}(y_i - [w_0 + w_1 x_i])x_i \end{pmatrix}$$

Estimativa dos Coeficientes

Podemos achar os parâmetros ótimos de forma fechada, igualando suas derivadas a 0.

$$\hat{w}_0 = \bar{y} - \hat{w}_1 \bar{x}$$

$$\hat{w}_1 = \frac{\sum_{i=1}^{N} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{N} (x_i - \bar{x})^2}$$

Também chamadas de equações normais.

Prova para w_0

$$\frac{\partial}{\partial w_0}\text{RSS}(w_0, w_1) = -2\sum_{i=1}^{N}(y_i - [w_0 + w_1 x_i]) = 0$$

$$Nw_0 = \sum_{i=1}^{N} y_i - w_1 \sum_{i=1}^{N} x_i$$

$$w_0 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} y_i - \frac{w1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i$$

$$w_0 = \bar{y} - w_1\bar{x}$$

Algoritmo Regressão Simples

RegSimples($\mathcal{D}^{\text{train}}$)

$\text{tmp}_x = 0$
$\text{tmp}_y = 0$
for $i = 1$ **to** N
    $\text{tmp}_x = \text{tmp}_x + x_i$
    $\text{tmp}_y = \text{tmp}_y + y_i$
$\bar{x} = \text{tmp}_x / N$
$\bar{y} = \text{tmp}_y / N$
$a = 0$
$b = 0$
for $i = 1$ **to** n
    $a = a + (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}_i)$
    $b = b + (x_i - \bar{x})^2$
$w_1 = a/b$
$w_0 = \bar{y} - w_1 \bar{x}$
return (w_0, w_1)

Gradiente Descendente

- Comece com algum valor para w_0, w_1.
- Atualize w_0, w_1 iterativamente, **reduzindo** $\text{RSS}(w_0, w_1)$, até atingir o mínimo.
- **Ideia: Atualize** w_0, w_1 **proporcionalmente as derivadas parciais (gradiente) da função de erro em relação a** w_0, w_1.

Algoritmo Gradiente Descendente

GradientDescent(α, ϵ)

initialize w_0, w_1

while $||\nabla \text{RSS}(w_0, w_1)|| \geq \epsilon$

$$\text{tmp}_0 = w_0 + 2\alpha \sum_{i=1}^{N} (y_i - [w_0 + w_1 x_i])$$

$$\text{tmp}_1 = w_1 + 2\alpha \sum_{i=1}^{N} (y_i - [w_0 + w_1 x_i])(x_i)$$

$w_0 = \text{tmp}_0$

$w_1 = \text{tmp}_1$

return (w_0, w_1)

Convergência e tamanho da taxa de aprendizagem

- Taxas grandes podem grandes ultrapassar o alvo repetidamente.
- Taxas pequenas podem deixar a aprendizagem muito lenta.
- Normalmente o valor ideal é achado via validação cruzada (mais adiante no curso).
- Uma alternativa é diminuir a taxa com o aumento de interações:

$$\alpha^{(t)} = \frac{\alpha}{t} \quad \text{ou} \quad \frac{\alpha}{\sqrt{t}}$$

Referências

- Gareth James, Daniela Witten, Trevor Hastie, Robert Tibshirani. An Introduction to Statistical Learning with Applications in R. Springer, 2013.
- Yaser S. Abu-Mostafa, Malik Magdon-Ismail. Learning from Data. AMLBook, 2012.
- Emily Fox and Carlos Guestrin. Machine Learning Specialization. Curso online disponível em https://www.coursera.org/specializations/machine-learning. Último acesso: 31/08/2017.