Lab 1 - BCC406/PCC177

REDES NEURAIS E APRENDIZAGEM EM PROFUNDIDADE

Pacote NumPy e Tensor do PyTorch

Prof. Eduardo e Prof. Vander

Objetivos:

· Exercitar n-dimensional arrays.

Data da entrega: 06/10/2025

- Complete o código (marcado com 'ToDo') e quando requisitado, escreva textos diretamente nos notebooks. Onde tiver None, substitua pelo seu código.
- Execute todo notebook e salve tudo em um PDF nomeado como "NomeSobrenome-LabX.pdf"
- Envie o PDF e o o .ipynb via Formulário Google.

Sugestão de leitura:

- Ler <u>Capítulo 2 do livro texto</u>. Dê ênfase para as seções 2.3 e 2.4. Sugerimos fortemente abrir com o Colab e executar estas duas seções passo a passo.
- Ler Capítulo 3 do livro texto.

< NumPy

NumPy é uma das bibliotecas mais populares para computação científica. Ela foi desenvolvida para dar suporte a operações com *arrays* de *N* dimensões e implementa métodos úteis para operações de álgebra linear, geração de números aleatórios, etc.

Criando arrays (5pt)

```
# Primeiramente, vamos importar a biblioteca
import numpy as np
# Usaremos a função zeros para criar um array de uma dimensão de tamanho 5
np.zeros(5)
array([0., 0., 0., 0., 0.])
# Da mesma forma, para criar um array de duas dimensões:
np.zeros((3,4))
array([[0., 0., 0., 0.],
       [0., 0., 0., 0.],
       [0., 0., 0., 0.]])
# ToDo: Crie um array de três dimensões com o shape (3, 3, 3)
np.zeros((3, 3, 3))
array([[[0., 0., 0.],
        [0., 0., 0.],
[0., 0., 0.]],
       [[0., 0., 0.],
        [0., 0., 0.],
[0., 0., 0.]],
       [[0., 0., 0.],
[0., 0., 0.],
[0., 0., 0.]]])
```

Vocabulário comum

- Em NumPy, cada dimensão é chamada eixo (axis).
- Um array é uma lista de axis e uma lista de tamanho dos axis é o que chamamos de **shape** do array.
 - Por exemplo, o shape da matrix acima é (3, 4).

3 24

• O tamanho (*size*) de uma array é o número total de elementos, por exemplo, no array 2D acima = (3 * 4 = 12).

```
# Criando e mostrando o array
a = np.zeros((3,4))
array([[0., 0., 0., 0.], [0., 0., 0.],
       [0., 0., 0., 0.]])
# Verificando o shape do array
a.shape
(3, 4)
# Verificando a quantidade de dimensões de um array
a.ndim
2
# Verificando a quantidade de elemntos no array
a.size
12
# ToDo : Criar um array de 3 dimensões, de shape (2,3,4) e mostrar o shape, quantidade de dimensões
a = np.zeros((2, 3, 4))
print(a)
print(a.shape)
print(a.ndim)
print(a.size)
[[[0. 0. 0. 0.]
  [0. 0. 0. 0.]
  [0. 0. 0. 0.]]
 [[0. 0. 0. 0.]
[0. 0. 0. 0.]
  [0. 0. 0. 0.]]]
(2, 3, 4)
24
# ToDo : Criar um array de 3 dimensões mas trocando a função zeros por ones e mostrar o shape, quantid
a = np.ones((2, 3, 4))
print(a)
print(a.shape)
print(a.ndim)
print(a.size)
[[[1. 1. 1. 1.]
[1. 1. 1. 1.]
  [1. 1. 1. 1.]]
 [[1. 1. 1. 1.]
  [1. 1. 1. 1.]
  [1. 1. 1. 1.]]]
(2, 3, 4)
24
# ToDo : Criar um array de 3 dimensões mas trocando a função zeros por full e mostrar o shape, quantic
a = np.full((2, 3, 4), 5)
print(a)
print(a.shape)
print(a.ndim)
print(a.size)
[[[5 5 5 5]
  [5 5 5 5]
[5 5 5 5]]
 [[5 5 5 5]
  [5 5 5 5]
[5 5 5 5]]]
(2, 3, 4)
```

```
# ToDo : Criar um array de 3 dimensões mas trocando a função zeros por empty e mostrar o shape, quanta a = np.empty((2, 3, 4))
print(a)
print(a.shape)
print(a.ndim)
print(a.size)

[[[1. 1. 1. 1.]
[1. 1. 1.]
[1. 1. 1.]]
[[1. 1. 1.]]
[[1. 1. 1.]]
[[2, 3, 4)
3
24
```

ToDo: O que você pode dizer sobre cada uma das quatro funções que você usou?

zeros: cria array preenchido com 0.

ones: cria array preenchido com 1.

full: cria array preenchido com um valor definido.

empty: cria array sem inicializar valores (lixo de memória).

O comando *np.arange*

Você pode criar um array usando a função arange, similar a função range do Python.

```
# Criando um array
np.arange(1, 5)
array([1, 2, 3, 4])

# Para criar com ponto flutuante
np.arange(1.0, 5.0)
array([1., 2., 3., 4.])

# ToDo : crie um array com arange, variando de 1 a 5, com um passo de 0.5
np.arange(1.0, 5.0, 0.5)
array([1., 1.5, 2., 2.5, 3., 3.5, 4., 4.5])
```

Os comandos np.rand e np.randn

O *NumPy* tem várias funções para criação de números aleatórios. Estas funções são muito úteis para inicialização dos pesos das redes neurais. Por exemplo, abaixo criamos uma matrix (3, 4) inicializada com números em ponto flutuante (*floats*) e distribuição uniforme:

Abaixo um matriz inicializada com distribuição gaussiana (normal distribution) com média 0 e variância 1

```
[ 0.98716216, -2.24266924, -0.30400973, -0.70843055]],

[[-0.81976387,  0.00279809, -0.35599406, -0.40666468],

[ 1.29867245,  0.51317321, -0.05362184,  0.47836815],

[-1.27766356, -0.12697755,  1.43027034,  0.25040025]]]])
```

A biblioteca MatplotLib

Vamos usar a biblioteca matplotlib (para mais detalhes veja o <u>tutorial de *matplotlib*</u>) para plotar dois arrays de tamanho 10.000, um inicializado com distribuição normal e o outro com uniforme

```
%matplotlib inline import matplotlib.pyplot as plt
```

Primeiro os dados que serão plotados precisam ser criados

```
array_a = np.random.randn(10000)
array_b = np.random.randn(10000)
```

Depois eles podem ser plotados

```
plt.hist(array_a, density=True, bins=100, histtype="step", color="blue", label="rand")
plt.hist(array_b, density=True, bins=100, histtype="step", color="red", label="randn")
plt.axis([-2.5, 2.5, 0, 1.1])
plt.legend(loc = "upper left")
plt.title("Distribuições aleatőrias")
plt.xlabel("Valor")
plt.ylabel("Densidade")
plt.show()
                               Distribuições aleatórias
                 rand
    1.0
                 randn
    0.8
 Densidade
    0.6
    0.4
                  0.2
    0.0
               -2
                             -1
                                           0
                                                         1
                                                                       2
                                         Valor
```

Tipo de dados (dtype)

Você pode ver qual o tipo de dado pelo atributo dtype. Verifique abaixo:

```
c = np.arange(1, 5)
print(c.dtype, c)
int64 [1 2 3 4]
```

```
# ToDo: Crie um um array aleatório de shape (2, 3, 4) e verifique o seu tipo d = np.random.randn(2, 3, 4) print(d.dtype, d)

float64 [[[ 0.93438195  0.39970972  1.16630012  0.47328075] [ 1.67489884 -0.25314604 -0.14906415 -0.57788085] [-1.7523415  0.79962879  0.48479152 -0.2824134 ]]
```

```
\hbox{\tt [[-1.26362736-0.12422629\ 0.47441827-0.73472944]}
 [-0.78479461 1.0860352 0.42086812 1.22441504]
[-0.67578086  0.50677444  -0.66903631  0.09884928]]]
```

Tipos disponíveis: int8, int16, int32, int64, uint8 | 16 | 32 | 64, float16 | 32 | 64 e complex64 | 128. Veja a documentação para a lista completa.

```
Atributo itemsize
O atributo (itemsize) retorna o tamanho em bytes
    e = np.arange(1, 5, dtype=np.complex64)
    e.itemsize
    8
    # Na memória, um array é armazenado de forma contígua
    f = np.array([[1,2],[1000, 2000]], dtype=np.int32)
    f.data
    <memory at 0x7d68c11928e0>
    # ToDo: Crie arrays de shape (2, 2) dos tipos int8, int64, float16, float64, complex64 e complex128
    arr_1 = np.ones((2, 2), dtype=np.int8)
arr_2 = np.ones((2, 2), dtype=np.int64)
    arr_3 = np.ones((2, 2), dtype=np.float16)
    arr_4 = np.ones((2, 2), dtype=np.float64)
    arr_5 = np.ones((2, 2), dtype=np.complex64)
    arr_6 = np.ones((2, 2), dtype=np.complex128)
    print(arr_1)
    print()
    print(arr_2)
    print()
    print(arr_3)
    print()
    print(arr_4)
    print()
    print(arr_5)
    print()
    print(arr_6)
    [[1 \ 1]]
```

```
[1 1]]
[[1 1]
[1 1]]
[[1. 1.]
[1. 1.]]
[[1. 1.]
[1. 1.]]
[[1.+0.j 1.+0.j]
[1.+0.j 1.+0.j]]
[[1.+0.j 1.+0.j]
[1.+0.j 1.+0.j]]
```

ToDo: O que você pode dizer sobre esses arrays criados?

Cada array tem o mesmo shape (2, 2) e valores iguais a 1, mas diferem pelo tipo de dado armazenado:

int8: inteiros de 8 bits, variam de -128 a 127.

int64: inteiros de 64 bits, usados para números inteiros muito grandes.

float16: números decimais em 16 bits, baixa precisão e baixo uso de memória.

float64: números decimais em 64 bits, alta precisão (padrão do NumPy).

complex64: números complexos em 64 bits (32 bits para parte real e 32 bits para parte imaginária).

complex128: números complexos em 128 bits (64 bits para parte real e 64 bits para parte imaginária).

Reshaping

Alterar o shape de uma array é muto fácil com NumPy e muito útil para adequação das matrizes para métodos de machine learning. Contudo, o tamanho (size) não pode ser alterado.

```
# 0 núemro de dimensões também é chamado de rank
g = np.arange(24)
print(g)
print("Rank:", g.ndim)

[ 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23]
Rank: 1
```

```
g.shape = (6, 4)
print(g)
print("Rank:", g.ndim)

[[ 0  1  2  3]
  [ 4  5  6  7]
  [ 8  9  10  11]
  [12  13  14  15]
  [16  17  18  19]
  [20  21  22  23]]
Rank: 2
```

```
g.shape = (2, 3, 4)
print(g)
print("Rank:", g.ndim)

[[[ 0  1   2   3]
      [ 4  5   6   7]
      [ 8  9  10  11]]

[[12  13  14  15]
      [16  17  18  19]
      [20  21  22  23]]]
Rank: 3
```

Mudando o formato do dado (*reshape*)

```
g2 = g.reshape(4,6)
print(g2)
print("Rank:", g2.ndim)

[[ 0 1 2 3 4 5]
  [ 6 7 8 9 10 11]
  [12 13 14 15 16 17]
  [18 19 20 21 22 23]]
Rank: 2
```

```
# Pode-se alterar diretamente um item da matriz, pelo índice
g2[1, 2] = 999
g2

array([[ 0,  1,  2,  3,  4,  5],
        [ 6,  7, 999,  9,  10,  11],
        [ 12,  13,  14,  15,  16,  17],
        [ 18,  19,  20,  21,  22,  23]])
```

Repare que o objeto ('g ') foi modificado também!

Todas a operçãoes aritméticas comuns podem ser feitas com o ndarray

```
a = np.array([14, 23, 32, 41])
b = np.array([5, 4, 3,
print("a + b = ", a + b)
print("a - b =", a - b)
print("a * b =", a * b)
print("a / b =", a / b)
print("a // b =", a // b)
print("a % b =", a % b)
print("a ** b =", a ** b)
a + b = [19 \ 27 \ 35 \ 43]
a - b = [9 19 29 39]
a * b = [70 92 96 82]
a / b = [2.8]
                     5.75
                               10.66666667 20.5
a // b = [2 5 10 20]
a % b = [4 3 2 1]
a ** b = [537824 279841 32768 1681]
```

Repare que a multiplicação acima NÃO é um multiplicação de martizes

Arrays devem ter o mesmo shape, caso contrário, NumPy vai aplicar a regra de *broadcasting* (Ver seção 2.1.3 do <u>livro texto</u>). Pesquise sobre a operação ed bradcasting do NumPy e explique com suas palavras, abaixo:

ToDo: Explique o conceito de broadcasting.

O *broadcasting* no NumPy permite realizar operações entre arrays de shapes diferentes, ajustando automaticamente suas dimensões para que sejam compatíveis. Isso é feito sem copiar dados na memória, tornando as operações mais eficientes. Fonte: https://numpy.org/doc/stable/user/basics.broadcasting.html.

Regras principais:

- 1. As dimensões são comparadas da direita para a esquerda.
- 2. São compatíveis se forem iguais ou uma delas for 1.
- 3. Arrays com menos dimensões têm dimensões faltantes assumidas como tamanho 1.

Iteração e Concatenação de arrays de NumPy

Repare que você pode iterar pelos ndar rays, e que ela é feita pelos axis.

```
for m in c:
    print("Item:")
    print(m)

Item:
[[ 0  1  2   3]
    [ 4  5  6   7]
    [ 8  9  10  11]]
Item:
[[12  13  14  15]
    [16  17  18  19]
    [20  21  22  23]]
```

```
# Para iterar por todos os elementos
for i in c.flat:
    print("Item:", i)
Item: 0
Item: 1
Item: 2
Item: 3
Item: 4
Item: 5
Item: 6
Item: 7
Item: 8
Item: 9
Item: 10
Item: 11
Item: 12
Item: 13
Item: 14
Item: 15
Item: 16
Item: 17
Item: 18
Item: 19
Item: 20
Item: 21
Item: 22
Item: 23
```

Também é possível concatenar ndarrays, e isso pode ser feito em um eixo específico.

```
# ToDo: imprima o shape resultante da concatenação dos arrays de shape a = (2, 3, 4) e b = (2, 3, 4)
a = np.full((2, 3, 4), 1.0)
b = np.full((2, 3, 4), 2.0)
print(np.concatenate((a, b), axis=0).shape)
print(np.concatenate((a, b), axis=1).shape)
print(np.concatenate((a, b), axis=2).shape)

(4, 3, 4)
(2, 6, 4)
(2, 3, 8)
```

Transposta

```
[2, 7],
[3, 8],
[4, 9]])
```

Produto de matrizes

```
n2 = np.arange(15).reshape(5, 3)
n2

array([[ 0,  1,  2],
       [ 3,  4,  5],
       [ 6,  7,  8],
       [ 9,  10,  11],
       [12,  13,  14]])
```

```
# ToDo: Crie um array de 1 a 25 com shape (5, 5) e faça a multiplicação por uma matriz de zeros de (
a = np.arange(1, 26).reshape(5, 5)
b = np.zeros((5, 1))
c = a @ b # multiplicação matricial
print("a = \n", a)
print("b = \n", b)
print("c = \n", c)
a =
[[ 1 2 3 4 5]
[ 6 7 8 9 10]
[11 12 13 14 15]
[16 17 18 19 20]
 [21 22 23 24 25]]
[[0.]
 [0.]
 [0.]
 [0.]
[0.]]
c =
 [[0.]
 [0.]
 [0.]
 [0.]
 [0.]]
```

Matriz Inversa

ToDo: O que a função (linalg.inv) faz?

A função $\overline{\text{np.linalg.inv}}$ calcula a matriz inversa de uma matriz quadrada A, ou seja, retorna uma matriz B tal que $A \cdot B = I$, onde I é a matriz identidade.

Matriz identidade

```
# ToDo: Crie uma matriz identidade de tamanho (5, 5)
np.identity(5)

array([[1., 0., 0., 0., 0.],
       [0., 1., 0., 0.],
       [0., 0., 1., 0., 0.],
       [0., 0., 0., 1., 0.],
       [0., 0., 0., 0., 1.]])
```

Produto Interno (Dot Product)

O produto interno de dois vetores, é uma operação que resulta em um único número escalar. Geometricamente, ele está relacionado ao comprimento dos vetores e ao ângulo entre eles. Em machine learning, o produto interno é a base para o cálculo de similaridades (como a similaridade de cosseno) e é a operação central nas camadas densamente conectadas das redes neurais.

```
v1, v2 = np.array([1, 2, 3, 4]), np.array([5, 6, 7, 8])

# Exemplo de produto interno usando np.dot()
prod_interno_dot = np.dot(v1, v2)
print("Produto interno (np.dot):", prod_interno_dot)

# ToDo: Verifique se o produto interno entre os dois vetores é o mesmo em ambos os casos.
# 0 resultado deve ser (1*4) + (2*5) + (3*6) = 4 + 10 + 18 = 32
v1, v2 = np.array([1, 2, 3]), np.array([4, 5, 6])
print("Produto interno (np.dot): ", np.dot(v1, v2))

Produto interno (np.dot): 70
Produto interno (np.dot): 32
```

O produto interno também está relacionado à norma (comprimento) de um vetor:

$$\|\mathbf{a}\| = \sqrt{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}}$$

```
# ToDo: Calcule a norma do vetor v1.
# Dica: Use a função np.sqrt() para a raiz quadrada.
# O resultado deve ser sqrt(1^2 + 2^2 + 3^2) = sqrt(14) ~= 3.74

norma_v1 = np.sqrt(np.dot(v1, v1))
print("Norma do vetor v1:", norma_v1)

Norma do vetor v1: 3.7416573867739413
```

Usando a definição de produto interno, podemos encontrar o ângulo entre os vetores:

$$\cos(\theta) = \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{\|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\|}$$

```
# ToDo: Calcule o cosseno do ângulo entre os vetores v1 e v2.
# Use o produto interno e as normas calculadas.

prod_interno_v1_v2 = np.dot(v1, v2) # Use np.dot(v1, v2)
norma_v1 = np.sqrt(np.dot(v1, v1))
norma_v2 = np.sqrt(np.dot(v2, v2))

cos_theta = prod_interno_v1_v2 / (norma_v1 * norma_v2)
print("Cosseno do ângulo entre v1 e v2:", cos_theta)

Cosseno do ângulo entre v1 e v2: 0.9746318461970762
```

ToDo: O que você pode dizer sobre o produto interno entre dois vetores? E qual a relação entre o resultado do produto interno e a similaridade de cosseno entre eles?

O produto interno (ou escalar) entre dois vetores u e v é definido como a soma dos produtos de suas componentes:

$$\mathbf{u}\cdot\mathbf{v}=\sum_{i}u_{i}v_{i}$$

Ele mede o quanto os vetores estão alinhados na mesma direção.

A similaridade de cosseno entre dois vetores é o produto interno normalizado pelos comprimentos dos vetores:

$$\cos(\theta) = \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}{\|\mathbf{u}\| \|\mathbf{v}\|}$$

Ou seja, quanto maior o produto interno relativo aos comprimentos dos vetores, maior a similaridade de direção entre eles.

Fonte: Mathematical Methods for Physicists - Arfken, Harris & Weber - 7th Edition

PyTorch

```
# ToDo: Repitir TODOS OS TESTES ACIMA com o objeto ndarray do Pytorch
import torch
# ==========
# Criação de tensores
# ==========
zeros = torch.zeros((3, 3))
ones = torch.ones((2, 4))
full = torch.full((2, 2), 7)
empty = torch.empty((2, 3))
print("Zeros:\n", zeros)
print("Ones:\n", ones)
print("Full:\n", full)
print("Empty (conteúdo aleatório):\n", empty)
print()
# ==========
# Arange / Range
# ===========
arange1 = torch.arange(0, 5, step=1)
arange2 = torch.arange(1, 5, step=0.5)
print("Arange1:", arange1)
print("Arange2:", arange2)
print()
# ==========
   Números aleatórios
# ==========
rand_uniforme = torch.rand((2, 3))  # uniforme [0,1)
rand_normal = torch_randn((2, 3))  # normal_padrão
rand_normal = torch.randn((2, 3))
                                     # normal padrão
print("Uniforme:\n", rand uniforme)
print("Normal:\n", rand_normal)
print()
 Propriedades do tensor
# =============
tensor = torch.rand((3, 4))
print("Shape:", tensor.shape)
print("Número de dimensões (ndim):", tensor.ndim)
print("Número de elementos (numel):", tensor.numel())
print("Tipo (dtype):", tensor.dtype)
print("Bytes por elemento (element_size):", tensor.element_size())
print()
```

```
# ==========
# Tipos de dados diferentes
t int = torch.tensor([1, 2, 3], dtype=torch.int64)
t_float = torch.tensor([1.0, 2.0, 3.0], dtype=torch.float32)
t_complex = torch.tensor([1+2j, 3+4j], dtype=torch.complex64)
print("Int64:", t_int)
print("Float32:", t_float)
print("Complex64:", t_complex)
print()
# ===========
# Reshape e transposição
# =========
a = torch.arange(6)
a_reshaped = a.reshape((2, 3))
a_transposed = a_reshaped.T
print("Original:", a)
print("Reshape 2x3:\n", a_reshaped)
print("Transposta:\n", a_transposed)
print()
# Operações aritméticas
# -----
a = torch.tensor([1, 2, 3])
b = torch.tensor([4, 5, 6])
print("Soma:", a + b)
print("Subtração:", a - b)
print("Multiplicação:", a * b)
print("Divisão:", a / b)
print("Divisão inteira:", a // b)
print("Resto:", a % b)
print("Exponenciação:", a ** 2)
print()
# =========
# Broadcasting
# =========
x = torch.ones((2, 3))
y = torch.tensor([1, 2, 3])
print("Broadcast (x + y):\n", x + y)
print()
# ============
# Iteração e concatenação
for row in x:
   print("Iteração linha:", row)
concat = torch.cat((x, x), dim=0)
print("Concatenação na dimensão 0:\n", concat)
print()
# Produto de matrizes e identidade
A = torch.rand((2, 3))
B = torch.rand((3, 2))
C = torch.matmul(A, B) # ou A @ B
I = torch.eye(3)
                    # matriz identidade 3x3
print("Produto de matrizes A @ B:\n", C)
print("Matriz identidade 3x3:\n", I)
```

```
print()
# Matriz inversa
# ==========
M = torch.rand((3, 3))
inv M = torch.linalg.inv(M)
print("Matriz M:\n", M)
print("Inversa de M:\n", inv_M)
print()
# Produto interno (dot product)
v1, v2 = torch.tensor([1, 2, 3]), torch.tensor([4, 5, 6])
prod_interno_dot = torch.dot(v1, v2)
print("Produto interno (torch.dot):", prod_interno_dot.item())
# =========
# Norma do vetor
# ==========
norma_v1 = torch.sqrt(torch.dot(v1, v1).float())
print("Norma do vetor v1:", norma_v1.item())
print()
# Cosseno do ângulo entre dois vetores
prod_interno_v1_v2 = torch.dot(v1, v2).float()
norma_v2 = torch.sqrt(torch.dot(v2, v2).float())
cos theta = prod interno v1 v2 / (norma v1 * norma v2)
print("Cosseno do ângulo entre v1 e v2:", cos_theta.item())
[-0.9964, 0.1367, 1.8188]])
Shape: torch.Size([3, 4])
Número de dimensões (ndim): 2
Número de elementos (numel): 12
Tipo (dtype): torch.float32
Bytes por elemento (element_size): 4
Int64: tensor([1, 2, 3])
Float32: tensor([1., 2., 3.])
Complex64: tensor([1.+2.j, 3.+4.j])
Original: tensor([0, 1, 2, 3, 4, 5])
Reshape 2x3:
tensor([[0, 1, 2],
     [3, 4, 5]])
Transposta:
tensor([[0, 3],
      [1, 4],
      [2, 5]])
Soma: tensor([5, 7, 9])
```

[0.4787, 0.6303]])

Regressão linear com pytorch

Utilize o dataset Diabetes do (scikit-learn) para resolver um problema de regressão linear em PyTorch.

- 1. Carregue e normalize os dados.
- 2. Resolva o problema de duas formas:
 - o (a) Usando a solução analítica (equação normal ou pseudo-inversa) apenas com tensores.
 - **(b)** Treinando um modelo nn.Linear com gradiente descendente.
- 3. Compare os resultados obtidos (MSE e R^2) e discuta a diferença entre os pesos encontrados nos dois métodos.

Sugestão de leitura: Capítulo 3 do livro texto.

```
# % -----
# Regressão no Diabetes (scikit-learn) com PyTorch
# A) Solução analítica (pseudo-inversa)
# B) Treinamento com gradiente (nn.Linear)
# ------
import torch
import torch.nn as nn
import torch.optim as optim
from sklearn.datasets import load diabetes
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.metrics import mean_squared_error, r2_score
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
# Dispositivo (usa GPU se disponível)
device = torch.device("cuda" if torch.cuda.is available() else "cpu")
# 1) Carregar dados do dataset Diabetes
X_np, y_np = load_diabetes(return_X_y=True) # X: (442,10), y: (442,)
# 2) Dividir dados em treino e teste
X_{tr}, X_{te}, y_{tr}, y_{te} = train_{test_split}(X_{np}, y_{np}, test_{size}=0.2, random_{state}=42)
# 3) Normalização dos dados (média 0 e desvio padrão 1)
scaler = StandardScaler()
X_tr = scaler.fit_transform(X_tr)
X_te = scaler.transform(X_te)
# 4) Conversão para tensores do PyTorch (e envio para GPU se disponível)
X_{tr_t} = torch.tensor(X_{tr_t}, dtype=torch.float32, device=device)
X_te_t = torch.tensor(X_te, dtype=torch.float32, device=device)
y_tr_t = torch.tensor(y_tr, dtype=torch.float32, device=device).view(-1, 1)
y_te_t = torch.tensor(y_te, dtype=torch.float32, device=device).view(-1, 1)
# A) Solução analítica (pseudo-inversa)
# ______
# Adiciona coluna de 1s para o bias (intercepto)
X_{tr_bias} = torch.cat([torch.ones(X_{tr_t.shape}[0], 1, device=device), X_{tr_t}], dim=1)
X_te_bias = torch.cat([torch.ones(X_te_t.shape[0], 1, device=device), X_te_t], dim=1)
# Calcula os pesos usando pseudo-inversa (equação normal)
w_analytical = torch.linalg.pinv(X_tr_bias) @ y_tr_t
# Faz predição nos dados de teste
y_pred_analytical = X_te_bias @ w_analytical
```

```
# Calcula métricas de erro e ajuste
mse_a = mean_squared_error(y_te, y_pred_analytical.cpu().detach().numpy())
r2_a = r2_score(y_te, y_pred_analytical.cpu().detach().numpy())
# B) Regressão Linear com nn.Linear + SGD
# Cria modelo linear
model = nn.Linear(X_tr_t.shape[1], 1).to(device)
# Define função de perda e otimizador
criterion = nn.MSELoss()
optimizer = optim.SGD(model.parameters(), lr=0.01)
# Treinamento do modelo
epochs = 1000
for epoch in range(epochs):
   # Predição nos dados de treino
   y pred = model(X tr t)
   # Calcula a perda
   loss = criterion(y pred, y tr t)
   # Backpropagation
   optimizer.zero grad()
   loss.backward()
   optimizer.step()
# Predição nos dados de teste após treinamento
y_pred_model = model(X_te_t).detach().cpu().numpy()
# Calcula métricas de erro e ajuste
mse_b = mean_squared_error(y_te, y_pred_model)
r2_b = r2_score(y_te, y_pred_model)
# Comparação dos resultados
print("=== Solução Analítica ===")
print(f"MSE: {mse a:.4f}")
print(f"R^2 : \{r2\_a:.4f\}")
print("\n=== Regressão Treinada ===")
print(f"MSE: {mse b:.4f}")
print(f"R^2 : \{r2_b:.4f\}")
print("\n=== Comparação dos pesos ===")
# Mostra os primeiros 5 pesos e bias para comparação
print("Pesos analíticos (primeiros 5):", w_analytical.view(-1)[:5].cpu().numpy())
print("Pesos treinados (primeiros 5):", list(model.parameters())[0].detach().cpu().numpy()[0][:5])
print("Bias analítico:", w_analytical[0].item())
print("Bias treinado :", list(model.parameters())[1].item())
# Plot comparativo usando seaborn regplot com parâmetros em LaTeX
# Plot comparativo usando seaborn regplot com parâmetros em LaTeX
sns.set(style="whitegrid")
plt.figure(figsize=(12, 8))
# Pega os pesos e bias do modelo nn.Linear
w_nn = list(model.parameters())[0].detach().cpu().numpy().flatten()
b_nn = list(model.parameters())[1].item()
w_anal = w_analytical.view(-1).cpu().numpy()
# Cria strings LaTeX para os labels apenas com método (sem listar pesos)
label_analytical = r"$\text{Analítico}$"
label nn = r"$\text{nn.Linear}$"
# Ponto real vs predito (analítico)
sns.regplot(
   x=y te,
   y=y_pred_analytical.cpu().detach().numpy(),
```

```
color='orange',
    label=label_analytical,
    scatter_kws={'alpha':0.6}
# Ponto real vs predito (modelo nn.Linear)
sns.regplot(
    x=y_te,
    y=y_pred_model,
    color='green',
    label=label_nn,
    scatter_kws={'alpha':0.6}
# Configuração dos eixos e título
plt.xlabel("Valores Reais")
plt.ylabel("Valores Preditos")
plt.title("Comparação: Solução Analítica vs nn.Linear")
# Legenda com fonte menor e caixa semi-transparente
plt.legend(fontsize=12, framealpha=0.4, loc='upper left')
plt.show()
 == Solução Analítica ===
MSE: 2900.1936
R^2 : 0.4526
=== Regressão Treinada ===
MSE: 2885.7159
R^2 : 0.4553
=== Comparação dos pesos ==
Pesos analíticos (primeiros 5): [153.73654
                                              1.7537557 -11.511811
                                                                    25.607115
                                                                                16.828873 1
Pesos treinados (primeiros 5): [ 1.9378772 -11.433249
                                                         26.268246
                                                                    16.607763
                                                                                -9.853201 ]
Bias analítico: 153.73654174804688
Bias treinado : 153.73617553710938
                                       Comparação: Solução Analítica vs nn.Linear
   300
               Analítico
               nn Linear
   250
   200
 Valores Preditos
   150
   100
    50
                50
                                 100
                                                  150
                                                                                     250
                                                                                                      300
                                                                    200
                                                      Valores Reais
```

No experimento de regressão linear utilizando o dataset Diabetes do scikit-learn, os dados foram carregados, normalizados e tratados como tensores do PyTorch. O problema foi resolvido de duas formas: pela solução analítica, com cálculo direto dos pesos via pseudo-inversa da equação normal, e pelo treinamento de um modelo nn.Linear otimizado com gradiente descendente estocástico. Os resultados foram bastante próximos: a solução analítica apresentou MSE de 2900.1936 e R^2 de 0.4526, enquanto o modelo treinado obteve MSE de 2885.8741 e R^2 de 0.4553. A comparação dos pesos mostra diferenças pequenas nos coeficientes, mas ambos os métodos convergem

para valores semelhantes, com bias praticamente idêntico. Isso evidencia que a otimização iterativa consegue recuperar resultados equivalentes à solução exata, ainda que sujeita a pequenas variações numéricas.