Exercicio 1 - Decomposição de Viés e Variância do Erro de Teste

September 23, 2025

Exercício 1 - Decomposição de Viés e Variância do Erro de Teste

• Aluno: Giovanni Martins de Sá Júnior

• Disciplina: Introdução à Inteligência Computacional

• Professor: Cristiano Leite de Castro

Objetivo

- Neste notebook, será implementado a resolução do Exercício 1, visando observar e estmar empiricamente a decomposição viés-variância do Erro de Teste (MSETest) para modelos de regressão polinomial de diferentes graus, em função da flexibilidade de cada um deles. Deste modo, a discussão da resolução proposta passará pelas seguintes etapas, que serão discutidas na sequência:
 - Definição do problema e das funções alvo.
 - Geração dos dados (conjunto de treinamento e teste).
 - Ajuste dos modelos polinomiais.
 - Cálculo da decomposição viés-variância.
 - Discussão e visualização dos resultados.

Definição do problema e das funções alvo

• As funções geradoras são especificados no enunciado:

```
1. f1(x) = (x-2)(2x+1)/(1+x^2)
2. f2(x) = \sin(x)
3. f3(x) = \sin(2x) * \exp(x/5)
```

```
[1]: # Definição das funções
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import math

def f1(x):
    return ((x-2.0) * (2*x + 1.0)) / (1.0 + x**2)

def f2(x):
    return np.sin(x)

def f3(x):
```

```
return np.sin(2.0 * x) * np.exp(x / 5.0)
```

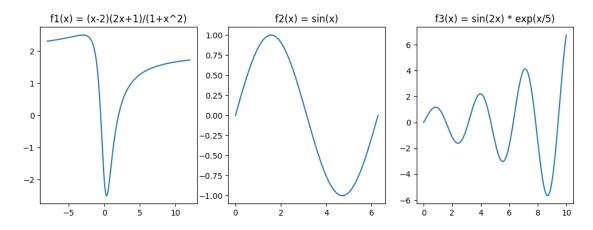
```
[2]: # Visualização inicial das funções
x1 = np.linspace(-8, 12, 500)
x2 = np.linspace(0, 2*math.pi, 500)
x3 = np.linspace(0, 10, 500)

plt.figure(figsize=(12, 4))
plt.subplot(1, 3, 1)
plt.plot(x1, f1(x1))
plt.title('f1(x) = (x-2)(2x+1)/(1+x^2)')

plt.subplot(1, 3, 2)
plt.plot(x2, f2(x2))
plt.title('f2(x) = sin(x)')

plt.subplot(1, 3, 3)
plt.plot(x3, f3(x3))
plt.title('f3(x) = sin(2x) * exp(x/5)')
```

[2]: Text(0.5, 1.0, 'f3(x) = sin(2x) * exp(x/5)')



1. Geração dos dados

 Para a avaliação de desempenho dos modelos, precisamos simular os datasets de treino. Deste modo, cada dataset será gerado com N = 50 pontos, amostrados de forma aleatória seguindo uma distribuição uniforme no intervalo de interesse, e o valor da saída será perturbado por um ruído gaussiano com média zero e variância ².

```
[3]: # Geração de dados

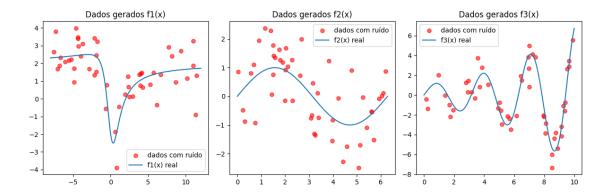
RANDOM_SEED = 42

np.random.seed(RANDOM_SEED)
```

```
def generate_dataset(f, x_min, x_max, N, sigma):
    x = np.random.uniform(x_min, x_max, size=N)
    eps = np.random.normal(0, sigma, size=N)
    y = f(x) + eps
    return x.reshape(-1, 1), y

N_TRAIN = 50
SIGMA = 1.0
```

```
[4]: # Visualização dos dados
     x_train1, y_train1 = generate_dataset(f1, -8, 12, N_TRAIN, SIGMA)
     x_train2, y_train2 = generate_dataset(f2, 0, 2*math.pi, N_TRAIN, SIGMA)
     x_train3, y_train3 = generate_dataset(f3, 0, 10, N_TRAIN, SIGMA)
     # Plotando datasets com ruído
     plt.figure(figsize=(12, 4))
     plt.subplot(1, 3, 1)
     plt.scatter(x_train1, y_train1, color='red', alpha=0.6, label='dados com ruído')
     plt.plot(x1, f1(x1), label='f1(x) real')
     plt.title('Dados gerados f1(x)')
     plt.legend()
     plt.subplot(1, 3, 2)
     plt.scatter(x_train2, y_train2, color='red', alpha=0.6, label='dados com ruído')
     plt.plot(x2, f2(x2), label='f2(x) real')
     plt.title('Dados gerados f2(x)')
     plt.legend()
     plt.subplot(1, 3, 3)
     plt.scatter(x_train3, y_train3, color='red', alpha=0.6, label='dados com ruído')
     plt.plot(x3, f3(x3), label='f3(x) real')
     plt.title('Dados gerados f3(x)')
     plt.legend()
     plt.tight_layout()
     plt.show()
```



2. Ajuste de modelos polinomiais

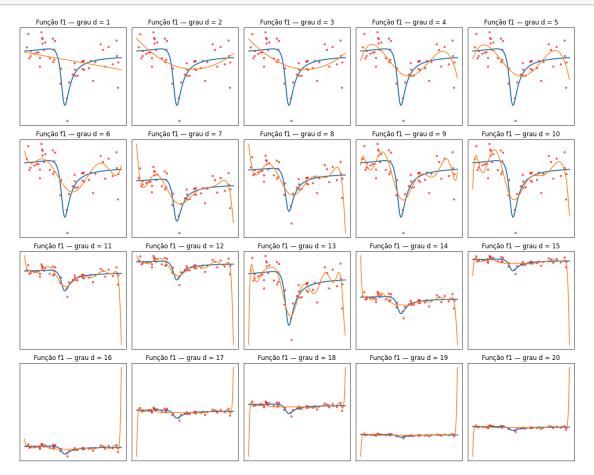
- O próximo passo é treinar modelos polinomiais. Utilizamos regressão linear combinada com transformação polinomial das entradas:
- 1. Graus de 1 até 20.
- 2. O objetivo é observar como o aumento do grau reduz o viés, mas aumenta a variância.

```
[5]: from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
     from sklearn.linear_model import LinearRegression
     from sklearn.pipeline import make_pipeline
     def fit_polynomial_model(x_train, y_train, degree):
         model = make_pipeline(PolynomialFeatures(degree=degree, include_bias=True),_
      →LinearRegression())
         model.fit(x_train, y_train)
         return model
     def plot_polynomial_fits(x_train, y_train, f, x_range, func_name):
         plt.figure(figsize=(15, 12))
         for i, d in enumerate(range(1, 21), 1):
             model = fit_polynomial_model(x_train, y_train, d)
             y_pred = model.predict(x_range.reshape(-1, 1))
             plt.subplot(4, 5, i)
             plt.scatter(x_train, y_train, color="red", s=10, alpha=0.6)
             plt.plot(x_range, f(x_range), label="f(x)", linewidth=2)
             plt.plot(x_range, y_pred, label=f"grau {d}")
             plt.title(f"{func_name} - grau d = {d}")
             plt.xticks([]); plt.yticks([])
         plt.tight_layout()
         plt.show()
```

• Na primeira função a ser analisada, $f1(x) = (x-2)(2x+1)/(1+x^2)$, os gráficos iniciais demonstram que em graus baixos, o modelo linear é consideravelmente simples subajustando para os dados dispostos. À medida que aumentamos o grau desse polinômio (por exemplo,

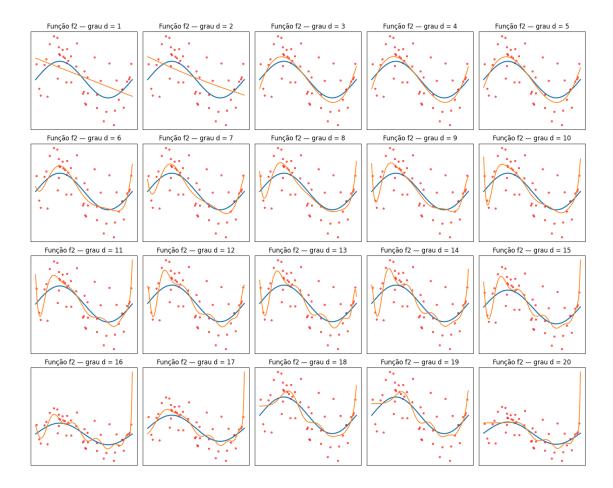
em d=4, 5, ...), o modelo passa a se ajustar melhor à curva real da função. Por outro outro, para valores muitos altos do grau do polinômio, como a partir de d=15, o modelo tornase excessivamente flexivel, ajustando-se inclusive ao ruído, que denota um comportamento incorreto.

[6]: plot_polynomial_fits(x_train1, y_train1, f1, x1, "Função f1")



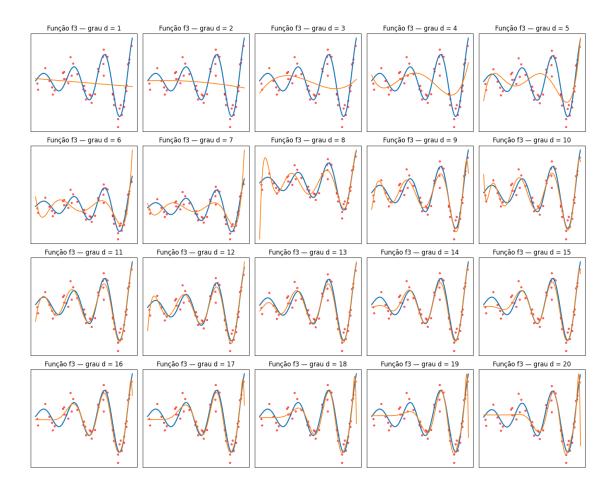
• Para a segunda função de estudo, f2(x) = sin(x), a regressão polinomial se ajusta melhor à função seno. Tal como no primeiro caso, para valores muito pequenos de d (d = 1 ou d = 2), o modelo apresenta o comportamento de underfitting, não se ajustando à maior parte dos dados de estudo. À medida que o modelo aumenta o grau do polinômio (a partir de d = 3), a curva de seno já era modelada de uma maneira mais eficiente. Modelos de graus muito altos (ex: d > 8, mas especialmente d > 11), trazem outro comportamento não desejado, que é o do overfitting.

[7]: plot_polynomial_fits(x_train2, y_train2, f2, x2, "Função f2")



• Na terceira função de estudo, a $\mathbf{f3(x)} = \sin(2\mathbf{x}) * \exp(\mathbf{x/5})$ apresenta um comportamento particularmente diferente dos outros dois primeiros exemplos, uma vez que ao se aumentar o valor de x, a função apresentar um caráter exponencial. Dada a sua complexidade, graus menos de polinômios apresentam muita dificuldade em se ajustar à função de estudo. Deste modo, aumentamos o grau do polinômio, o modelo tende a se adaptar melhor ao comportamento da função original. Contudo, dada a complexidade deste terceiro caso, o modelo apresenta um grau de dificuldade até maior em se adequar, de tal forma que a tendência de overfitting só é notada mais tardiamente em comparação aos dois primeiros exemplos.

[8]: plot_polynomial_fits(x_train3, y_train3, f3, x3, "Função f3")



3. Cálculo do viés-variância

- Neste terceiro momento, repetimos o treinamento várias vezes para capturar a variabilidade dos modelos. Para isso, cada modelo será treinado por 100 conjuntos de dados distintos, em que cada conjunto apresentará 50 amostras.
- No cálculo abaixo, bias2_avg representa o cálculo do viés quadrático, var_fhat_avg representa a média de dispersão das predições de cada modelo, var_eps representa irredutível, ou seja, a variância do ruído. Finalmente, mse_test_avg representa a média do erro médio de todo o processo.

```
predictions = {d: np.zeros((num_repeats, len(x_test))) for d in degrees}
f_x = f(x_{test})
for k in trange(num_repeats, desc='Repetições', leave=False):
    x_train, y_train = generate_dataset(f, x_min, x_max, n_train, sigma)
    for d in degrees:
        model = fit_polynomial_model(x_train, y_train, d)
        predictions[d][k, :] = model.predict(X_test)
results = {}
for d in degrees:
    preds = predictions[d]
    mean_pred = preds.mean(axis=0)
    var_fhat = preds.var(axis=0, ddof=0)
    bias2 = (f_x - mean_pred) ** 2
    var_eps = sigma ** 2
    results[d] = {
        'bias2_avg': np.mean(bias2),
        'var_fhat_avg': np.mean(var_fhat),
        'var_eps': var_eps,
        'mse_test_avg': np.mean(bias2 + var_fhat + var_eps)
    }
return results
```

```
[10]: results_f1 = run_experiment(f1, -8, 12, 0.1) results_f1
```

```
[10]: {1: {'bias2_avg': np.float64(1.3975746548510726),
        'var_fhat_avg': np.float64(0.08085696893069264),
        'var_eps': 1.0,
        'mse test avg': np.float64(2.4784316237817654)},
       2: {'bias2_avg': np.float64(0.9438721078007389),
        'var_fhat_avg': np.float64(0.11161987301841607),
        'var_eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(2.055491980819155)},
       3: {'bias2_avg': np.float64(0.9442030962001768),
        'var_fhat_avg': np.float64(0.19672222664307082),
        'var_eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(2.140925322843248)},
       4: {'bias2_avg': np.float64(0.6545056622771342),
        'var_fhat_avg': np.float64(0.2252244128838711),
        'var_eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(1.8797300751610053)},
       5: {'bias2_avg': np.float64(0.60912313554116),
        'var_fhat_avg': np.float64(0.4087367662846189),
```

```
'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(2.017859901825779)},
6: {'bias2_avg': np.float64(0.4954515415438699),
 'var_fhat_avg': np.float64(0.8583487904734575),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(2.3538003320173275)},
7: {'bias2 avg': np.float64(0.39617951356953585),
 'var_fhat_avg': np.float64(0.5776982722497379),
 'var eps': 1.0,
 'mse test avg': np.float64(1.9738777858192738)},
8: {'bias2_avg': np.float64(0.4911774596705116),
 'var_fhat_avg': np.float64(5.9591220394020015),
 'var eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(7.450299499072511)},
9: {'bias2_avg': np.float64(0.3462538266802317),
 'var_fhat_avg': np.float64(2.3403520591678637),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(3.6866058858480955)},
10: {'bias2_avg': np.float64(3.6882667114024716),
 'var_fhat_avg': np.float64(197.85729393519946),
 'var_eps': 1.0,
 'mse test avg': np.float64(202.54556064660193)},
11: {'bias2_avg': np.float64(5.546054377843865),
 'var_fhat_avg': np.float64(579.0485182644335),
 'var eps': 1.0,
 'mse test avg': np.float64(585.5945726422773)},
12: {'bias2_avg': np.float64(2.762223269017057),
 'var_fhat_avg': np.float64(65.24137663075825),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(69.00359989977532)},
13: {'bias2_avg': np.float64(7.1050851091411005),
 'var_fhat_avg': np.float64(94.81169958687903),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(102.91678469602013)},
14: {'bias2_avg': np.float64(25.56432683813241),
 'var_fhat_avg': np.float64(2796.8439969718484),
 'var eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(2823.4083238099806)},
15: {'bias2 avg': np.float64(307.4993502322696),
 'var_fhat_avg': np.float64(31430.909381807156),
 'var eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(31739.408732039432)},
16: {'bias2_avg': np.float64(232.43412649551945),
 'var_fhat_avg': np.float64(15123.969861959727),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(15357.403988455246)},
17: {'bias2_avg': np.float64(652.6753005868632),
```

```
'var_fhat_avg': np.float64(28192.021953276937),
        'var_eps': 1.0,
        'mse test avg': np.float64(28845.697253863797)},
       18: {'bias2_avg': np.float64(86.92562120922558),
        'var_fhat_avg': np.float64(37904.58626487005),
        'var_eps': 1.0,
        'mse test avg': np.float64(37992.51188607928)},
       19: {'bias2_avg': np.float64(113.57175367786336),
        'var_fhat_avg': np.float64(20171.227285468896),
        'var eps': 1.0,
        'mse test avg': np.float64(20285.79903914676)},
       20: {'bias2_avg': np.float64(1981.1435808014207),
        'var_fhat_avg': np.float64(140806.97395924226),
        'var_eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(142789.1175400437)}}
[11]: results_f2 = run_experiment(f2, 0, 2*math.pi, 0.1)
      results f2
[11]: {1: {'bias2_avg': np.float64(0.19855061712729713),
        'var_fhat_avg': np.float64(0.047086168640245764),
        'var_eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(1.2456367857675428)},
       2: {'bias2_avg': np.float64(0.19924767017044195),
        'var fhat avg': np.float64(0.06891009672926297),
        'var eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(1.268157766899705)},
       3: {'bias2_avg': np.float64(0.005062520387018814),
        'var_fhat_avg': np.float64(0.07910230529067731),
        'var eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(1.0841648256776961)},
       4: {'bias2_avg': np.float64(0.006276126431711524),
        'var_fhat_avg': np.float64(0.12131927297440288),
        'var eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(1.1275953994061143)},
       5: {'bias2_avg': np.float64(0.0014868867884351323),
        'var_fhat_avg': np.float64(0.1753634963916883),
        'var_eps': 1.0,
        'mse test avg': np.float64(1.1768503831801234)},
       6: {'bias2_avg': np.float64(0.0016066130396627212),
        'var_fhat_avg': np.float64(0.21920169742702506),
        'var_eps': 1.0,
        'mse test avg': np.float64(1.2208083104666878)},
       7: {'bias2_avg': np.float64(0.007530922013746488),
        'var fhat avg': np.float64(0.4910533995226876),
        'var_eps': 1.0,
```

```
'mse_test_avg': np.float64(1.4985843215364336)},
8: {'bias2_avg': np.float64(0.023562012390669032),
 'var_fhat_avg': np.float64(1.6070232213580358),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(2.6305852337487052)},
9: {'bias2_avg': np.float64(0.2025388557070248),
 'var_fhat_avg': np.float64(10.7746383434693),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(11.977177199176325)},
10: {'bias2_avg': np.float64(0.4927207005967297),
 'var_fhat_avg': np.float64(26.052151936859318),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(27.544872637456056)},
11: {'bias2_avg': np.float64(0.9952254834153254),
 'var_fhat_avg': np.float64(73.79739139738764),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(75.79261688080295)},
12: {'bias2_avg': np.float64(0.5612421639253942),
 'var_fhat_avg': np.float64(23.999229009003574),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(25.560471172928967)},
13: {'bias2_avg': np.float64(0.874691578275933),
 'var_fhat_avg': np.float64(67.81768873834497),
 'var eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(69.6923803166209)},
14: {'bias2 avg': np.float64(2.452468382574782),
 'var_fhat_avg': np.float64(221.06292307365715),
 'var eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(224.51539145623192)},
15: {'bias2_avg': np.float64(9.349275267321568),
 'var_fhat_avg': np.float64(779.1814301588718),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(789.5307054261933)},
16: {'bias2_avg': np.float64(17.421758080838313),
 'var_fhat_avg': np.float64(1343.5630405530649),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(1361.984798633903)},
17: {'bias2_avg': np.float64(41.60353663047111),
 'var fhat avg': np.float64(4061.3202971573396),
 'var eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(4103.923833787811)}.
18: {'bias2_avg': np.float64(103.76722278834391),
 'var_fhat_avg': np.float64(9824.074196088752),
 'var eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(9928.841418877097)},
19: {'bias2_avg': np.float64(187.60211103457422),
 'var_fhat_avg': np.float64(15009.694589838902),
```

```
'var_eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(15198.296700873478)},
       20: {'bias2_avg': np.float64(215.75923161858097),
        'var_fhat_avg': np.float64(23912.730880245053),
        'var_eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(24129.490111863634)}}
[12]: results_f3 = run_experiment(f3, 0, 10, 0.1)
      results f3
[12]: {1: {'bias2 avg': np.float64(6.386755522666771),
        'var_fhat_avg': np.float64(0.297037011309138),
        'var eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(7.683792533975908)},
       2: {'bias2_avg': np.float64(6.365718779185264),
        'var_fhat_avg': np.float64(0.6095829512237481),
        'var_eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(7.975301730409013)},
       3: {'bias2_avg': np.float64(6.385805627616581),
        'var_fhat_avg': np.float64(1.1831222851144616),
        'var_eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(8.568927912731041)},
       4: {'bias2_avg': np.float64(5.786146413332391),
        'var_fhat_avg': np.float64(1.9517015109649212),
        'var_eps': 1.0,
        'mse test avg': np.float64(8.73784792429731)},
       5: {'bias2_avg': np.float64(4.668204416394637),
        'var_fhat_avg': np.float64(3.1061640182533576),
        'var_eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(8.774368434647995)},
       6: {'bias2_avg': np.float64(4.308547011770292),
        'var_fhat_avg': np.float64(11.61628215008675),
        'var_eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(16.92482916185704)},
       7: {'bias2_avg': np.float64(5.13003488579244),
        'var_fhat_avg': np.float64(12.699110046420769),
        'var_eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(18.82914493221321)},
       8: {'bias2_avg': np.float64(10.750859534457666),
        'var_fhat_avg': np.float64(91.71963758620844),
        'var eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(103.47049712066608)},
       9: {'bias2 avg': np.float64(0.7366665142110705),
        'var_fhat_avg': np.float64(38.09983283847938),
        'var eps': 1.0,
        'mse_test_avg': np.float64(39.83649935269045)},
```

```
10: {'bias2_avg': np.float64(8.48570369355806),
 'var_fhat_avg': np.float64(89.9996807880708),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(99.48538448162886)},
11: {'bias2_avg': np.float64(0.20265362849723204),
 'var_fhat_avg': np.float64(20.356037311456728),
 'var eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(21.55869093995396)},
12: {'bias2_avg': np.float64(2.530897314068357),
 'var_fhat_avg': np.float64(59.99389201053844),
 'var eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(63.52478932460679)},
13: {'bias2_avg': np.float64(5.322918178833284),
 'var_fhat_avg': np.float64(131.9798014529996),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(138.30271963183287)},
14: {'bias2_avg': np.float64(0.9526090542116616),
 'var_fhat_avg': np.float64(138.9487186673274),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(140.90132772153905)},
15: {'bias2_avg': np.float64(13.000146516979898),
 'var_fhat_avg': np.float64(709.7547819483619),
 'var_eps': 1.0,
 'mse test avg': np.float64(723.7549284653418)},
16: {'bias2_avg': np.float64(184.40719158590815),
 'var_fhat_avg': np.float64(3290.254912637777),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(3475.6621042236848)},
17: {'bias2_avg': np.float64(176.28090666105894),
 'var_fhat_avg': np.float64(6639.024520000707),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(6816.305426661766)},
18: {'bias2_avg': np.float64(43.452966333159),
 'var_fhat_avg': np.float64(897.7688546660937),
 'var_eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(942.2218209992527)},
19: {'bias2_avg': np.float64(601.7753041241159),
 'var_fhat_avg': np.float64(5237.099730018417),
 'var eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(5839.875034142532)},
20: {'bias2_avg': np.float64(1966.6278738877563),
 'var_fhat_avg': np.float64(17809.975996414636),
 'var eps': 1.0,
 'mse_test_avg': np.float64(19777.60387030239)}}
```

4. Discussão e visualização dos resultados

• Nas três funções, foi observado um mesmo comportamento no que se refere ao viés quadrático

(Bias^2), variância (f-hat) e erro de teste (MSEtest). Apesar da distorção dos gráficos ocasionada pela variância e erro de teste, o viés quadrático começa maior e decai à medida que o polinômio aumenta o seu respectivo grau, fazendo com que os modelos se adequem melhor às curvas. Por outro lado, a variância começa pequena e cresce exponenciamente uma vez que o modelo passa a se adequar aos dados ruidosos. Por esse motivo, o Erro de Teste tende a acompanhar este comportamento de crescer ao se aumentar demasiadamente o grau do polinômio, ao se observar o comportamento de overfitting.

```
[13]: for name, results in zip(["f1", "f2", "f3"], [results f1, results f2,]
       →results_f3]):
          bias2_avg = [results[d]['bias2_avg'] for d in DEGREES]
          var_fhat_avg = [results[d]['var_fhat_avg'] for d in DEGREES]
          var_eps = [results[d]['var_eps'] for d in DEGREES]
          mse_avg = [results[d]['mse_test_avg'] for d in DEGREES]
          plt.figure(figsize=(10, 6))
          plt.plot(DEGREES, var_eps, label=r'$Var(\epsilon)$', linestyle='--')
          plt.plot(DEGREES, var_fhat_avg, label=r'$Var(\hat{f})$')
          plt.plot(DEGREES, bias2_avg, label=r'$Bias^2$')
          plt.plot(DEGREES, mse_avg, label=r'$MSE_{test}$', linewidth=2, marker='o')
          plt.xlabel('Grau do polinômio (d)')
          plt.ylabel('Erro médio')
          plt.title(f'Decomposição Viés-Variância - {name}(x)')
          plt.legend()
          plt.grid(True)
          plt.show()
```

