In [ ]:
```python
from collections import defaultdict
from typing import Self

import numpy as np
from sklearn.datasets import fetch_california_housing
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.neighbors import KNeighborsRegressor
import matplotlib.pyplot as plt
```

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.

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.

In [ ]:
```python
SEED = 0
np.random.seed(SEED)

X, y = fetch_california_housing(return_X_y=True)

X_train, X_test, y_train, 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, y_train, test_size=0.2, random_state=SEED
)
```

In [ ]:
```python
# Regressão Linear com penalização L2 (Ridge Regression)
class RidgeRegression:
    def __init__(self, c: float) -> None:
        self.c = c
        self.theta: np.ndarray = None

    def fit(self, X: np.ndarray, y: np.ndarray) -> Self:
        n, m = X.shape
        self.X = np.c_[np.ones((n, 1)), X]
        I = np.eye(m + 1)
        I[0, 0] = 0
        # Use a fórmula analítica para estimar os pesos do modelo de regressão
        self.theta = np.linalg.pinv(self.X.T @ self.X + self.c * I) @ self.X.T @ y
        # self.theta = np.linalg.solve(self.X.T @ self.X + self.c * I, self.X.T @ y)
        return self

    def predict(self, X: np.ndarray) -> np.ndarray:
        n = X.shape[0]
        X = np.c_[np.ones((n, 1)), X]
        return X @ self.theta

# Calcula o erro quadrático médio
def mse(y_true: np.ndarray, y_pred: np.ndarray) -> float:
    return np.mean((y_true - y_pred) ** 2)
```

In [ ]:
```python
c_values = np.logspace(-5, 5, num=1000)
best_mse = float('inf')
best_c = None

# Para cada valor de c, treina o modelo usando a penalização L2 e calcula o erro quadrático médio
for c in c_values:
    theta = RidgeRegression(c)
    theta.fit(X_train, y_train)
    y_pred = theta.predict(X_val)
    error = mse(y_val, y_pred)
    # Atualiza o melhor valor de c
    if error < best_mse:
        best_mse = error
        best_c = c

print(f'Melhor coeficiente de regularização: {best_c}')
```

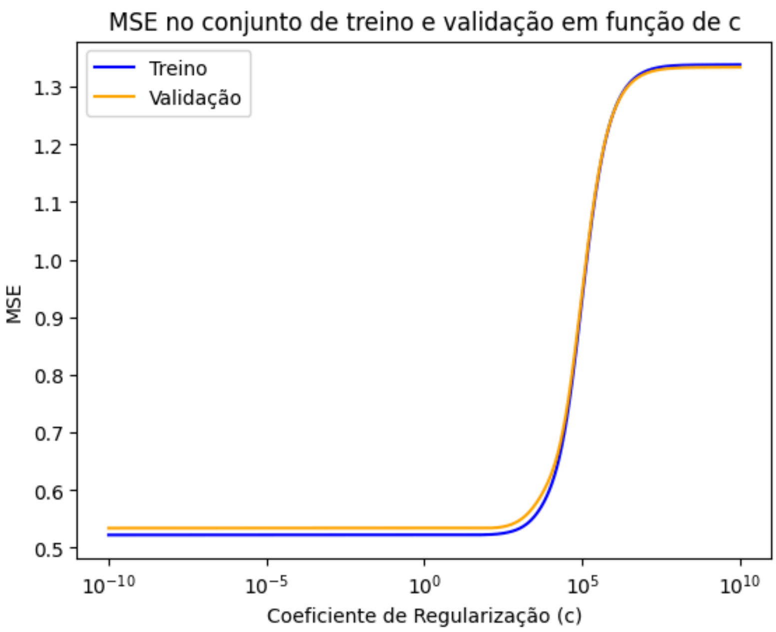
```
Melhor coeficiente de regularização: 49.16903577628021
```

In [ ]:
```python
# Plote os MSE no conjunto de trieno e validação em função de c.
train_errors = []
val_errors = []
```

```
for c in c_values:
    theta = RidgeRegression(c)
    theta.fit(X_train, y_train)
    y_pred_train = theta.predict(X_train)
    y_pred_val = theta.predict(X_val)

    train_errors.append(mse(y_train, y_pred_train))
    val_errors.append(mse(y_val, y_pred_val))
```

In [ ]:
```
plt.plot(c_values, train_errors, label='Treino', color='blue')
plt.plot(c_values, val_errors, label='Validação', color='orange')
plt.xscale('log')
plt.xlabel('Coeficiente de Regularização (c)')
plt.xticks([1e-10, 1e-5, 1, 1e5, 1e10])
plt.ylabel('MSE')
plt.legend()
plt.title('MSE no conjunto de treino e validação em função de c')
plt.show()
```



Ao avaliar a performance do modelo ótimo no conjunto de teste, temos que:

In [ ]:
```
class_ = RidgeRegression(best_c)
class_.fit(X_train, y_train)

y_test_pred = class_.predict(X_test)
test_error = mse(y_test, y_test_pred)

print(f'Mse com melhor c ({best_c}): {test_error}')
```

```
Mse com melhor c (49.16903577628021): 0.5387399362584148
```

Podemos ver que o melhor coeficiente de regularização é ≈ 49.16 e o erro no conjunto de teste com esse coeficiente é ≈ 0.538. Pelo gráfico, quando c continua a aumentar após esse ponto ótimo, o erro no conjunto de treino começa a aumentar. Isso é indicativo de que para valores muito altos de c, o modelo pode começar a sofrer de overfitting, o que significa que está começando a ser penalizado em excesso pela regularização, perdendo a capacidade de se ajustar bem até mesmo aos dados de treino.

Questão 2

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.

Obs. 2: para mais informações sobre o K-fold *nested cross-validation*, recomendamos esses materiais:

- Algoritmo e breve explicação: a autora apresenta uma boa explicação do assunto acompanhada de uma descrição do algoritmo;
- Ilustrações e explicação acompanhada de código: ajuda a visualizar melhor o que é *nested cross-validation*; vale lembrar que seu código, diferente do dos exemplos desse link, não deve utilizar scikit-learn para implementar a *cross-validation*.

In [ ]:
```
class KFold:
    def __init__(
        self, n_splits: int, seed: int | None = None
    ) -> None:
        # Número de divisões (folds)
```

```
        self.n_splits = n_splits
        self.seed = seed

    def split(self, X: np.ndarray, y: np.ndarray):
        n = X.shape[0]
        np.random.seed(self.seed)
        # Cria uma permutação aleatória dos índices
        indices = np.random.permutation(n)
        # Para cada divisão na validação cruzada
        for i in range(self.n_splits):
            # Calcula o índice de início e fim da divisão atual
            start = i * n // self.n_splits
            end = (i + 1) * n // self.n_splits

            # Cria os índices de treino e validação
            train = np.concatenate([indices[:start], indices[end:]])
            validation = indices[start:end]

            # Retorna os conjuntos de treino e validação
            yield X[train], X[validation], y[train], y[validation]
```

In [ ]:
```
class CrossValidation:
    def __init__(
        self, class_: type, parameters: list[float],
        n_splits: int, seed: int | None = None, log_results: bool = False
    ) -> None:
        self.class_ = class_
        self.parameters = parameters
        self.n_splits = n_splits # Número de folds
        self.seed = seed
        self.log_results = log_results
        # Cada valor terá um array com os erros de cada fold
        self.errors: defaultdict[float, np.ndarray] = None

    def fit(self, X: np.ndarray, y: np.ndarray) -> Self:
        # Inicializa o dicionário de erros com arrays de zeros
        default_constructor = lambda: np.zeros(self.n_splits)
        self.errors = defaultdict(default_constructor)
        # Cria um objeto KFold para a validação cruzada
        kfold = KFold(self.n_splits, self.seed)

        # Para cada fold, treina o modelo com cada parâmetro e calcula o erro
        for i, (X_train, X_val, y_train, y_val) in enumerate(kfold.split(X, y)):
            for value in self.parameters:
                model = self.class_(value).fit(X_train, y_train)
                y_pred = model.predict(X_val) # Faz a predição
                error = mse(y_val, y_pred) # Calcula o erro
                self.errors[value][i] += error # Adiciona o erro ao array do parâmetro

                if self.log_results:
                    print(f'Parâmetro: {value} - Fold {i + 1} - MSE: {error:.5f}')
        return self

    @property
    def best_parameter(self):
        # Retorna o parâmetro com o menor erro médio
        return min(self.errors, key=lambda k: self.errors[k].mean())

    @property
    def best_model(self):
        # Retorna o modelo com o melhor parâmetro
        return self.class_(self.best_parameter)
```

In [ ]:
```
# Concatena os conjuntos de treino e validação
X_train = np.concatenate([X_train, X_val]) #
y_train = np.concatenate([y_train, y_val])
```

In [ ]:
```
n_splits = 5
kfold = KFold(n_splits, SEED)

# Configuração dos parâmetros para cada modelo
config = {
    KNeighborsRegressor: list(range(1, 6)),
    RidgeRegression: [0, 1, 10, 100]
}

# Inicializa um dicionário para armazenar os erros de cada modelo
errors = {
    class_: np.zeros(n_splits) for class_ in config.keys()
}

print('Iniciando a validação cruzada...')
# Para cada classe de modelo e seus parâmetros
for class_, params in config.items():
    # Para cada divisão da validação cruzada
    for i, (X_train_, X_val, y_train_, y_val) in enumerate(kfold.split(X_train, y_train)):
        # Cria um objeto CrossValidation para o modelo atual
        cv = CrossValidation(class_, params, n_splits, SEED, log_results=True)
        cv.fit(X_train_, y_train_)
        # Obtém o melhor modelo e ajusta aos dados de treino
```

```python
        best_model = cv.best_model.fit(X_train_, y_train_)
        # Faz a previsão para os dados de validação
        y_pred = best_model.predict(X_val)
         # Calcula o erro quadrático médio da previsão
        error = mse(y_val, y_pred)
         # Armazena o erro no dicionário de erros
        errors[class_][i] = error
        print(f'Modelo: {class_.__name__} - Fold: {i + 1} - MSE: {error:.5f}\n')

print("\n")

# Obtém a classe de modelo que teve o menor erro médio
best_class = min(errors, key=lambda k: errors[k].mean())
cv = CrossValidation(
    best_class, config[best_class], n_splits, SEED, log_results=True
).fit(X_train, y_train)
# Obtém o melhor modelo e ajusta aos dados de treino
best_model = cv.best_model.fit(X_train, y_train)
# Faz a previsão para os dados de teste
y_pred = best_model.predict(X_test)
# Calcula o erro quadrático médio da previsão
error = mse(y_test, y_pred)

print(f'\n\nMelhor modelo: {best_class.__name__}')
print(f'Melhor valor do parâmetro: {cv.best_parameter}')
print(f'MSE no conjunto de teste: {error:.5f}')
```

```
Iniciando a validação cruzada...
Parâmetro: 1 - Fold 1 - MSE: 1.75532
Parâmetro: 2 - Fold 1 - MSE: 1.41781
Parâmetro: 3 - Fold 1 - MSE: 1.29262
Parâmetro: 4 - Fold 1 - MSE: 1.23878
Parâmetro: 5 - Fold 1 - MSE: 1.19658
Parâmetro: 1 - Fold 2 - MSE: 1.65331
Parâmetro: 2 - Fold 2 - MSE: 1.37090
Parâmetro: 3 - Fold 2 - MSE: 1.26333
Parâmetro: 4 - Fold 2 - MSE: 1.20202
Parâmetro: 5 - Fold 2 - MSE: 1.18925
Parâmetro: 1 - Fold 3 - MSE: 1.64711
Parâmetro: 2 - Fold 3 - MSE: 1.34047
Parâmetro: 3 - Fold 3 - MSE: 1.24270
Parâmetro: 4 - Fold 3 - MSE: 1.19901
Parâmetro: 5 - Fold 3 - MSE: 1.18478
Parâmetro: 1 - Fold 4 - MSE: 1.72897
Parâmetro: 2 - Fold 4 - MSE: 1.37842
Parâmetro: 3 - Fold 4 - MSE: 1.27584
Parâmetro: 4 - Fold 4 - MSE: 1.24874
Parâmetro: 5 - Fold 4 - MSE: 1.24406
Parâmetro: 1 - Fold 5 - MSE: 1.66751
Parâmetro: 2 - Fold 5 - MSE: 1.31643
Parâmetro: 3 - Fold 5 - MSE: 1.19303
Parâmetro: 4 - Fold 5 - MSE: 1.15675
Parâmetro: 5 - Fold 5 - MSE: 1.14222
Modelo: KNeighborsRegressor - Fold: 1 - MSE: 1.17717

Parâmetro: 1 - Fold 1 - MSE: 1.78848
Parâmetro: 2 - Fold 1 - MSE: 1.38571
Parâmetro: 3 - Fold 1 - MSE: 1.27794
Parâmetro: 4 - Fold 1 - MSE: 1.24126
Parâmetro: 5 - Fold 1 - MSE: 1.20836
Parâmetro: 1 - Fold 2 - MSE: 1.68897
Parâmetro: 2 - Fold 2 - MSE: 1.40651
Parâmetro: 3 - Fold 2 - MSE: 1.30841
Parâmetro: 4 - Fold 2 - MSE: 1.25722
Parâmetro: 5 - Fold 2 - MSE: 1.23531
Parâmetro: 1 - Fold 3 - MSE: 1.70898
Parâmetro: 2 - Fold 3 - MSE: 1.35699
Parâmetro: 3 - Fold 3 - MSE: 1.24524
Parâmetro: 4 - Fold 3 - MSE: 1.17956
Parâmetro: 5 - Fold 3 - MSE: 1.15081
Parâmetro: 1 - Fold 4 - MSE: 1.71908
Parâmetro: 2 - Fold 4 - MSE: 1.37988
Parâmetro: 3 - Fold 4 - MSE: 1.28036
Parâmetro: 4 - Fold 4 - MSE: 1.24625
Parâmetro: 5 - Fold 4 - MSE: 1.22163
Parâmetro: 1 - Fold 5 - MSE: 1.70841
Parâmetro: 2 - Fold 5 - MSE: 1.38332
Parâmetro: 3 - Fold 5 - MSE: 1.24517
Parâmetro: 4 - Fold 5 - MSE: 1.20512
Parâmetro: 5 - Fold 5 - MSE: 1.18386
Modelo: KNeighborsRegressor - Fold: 2 - MSE: 1.12266

Parâmetro: 1 - Fold 1 - MSE: 1.72272
Parâmetro: 2 - Fold 1 - MSE: 1.37460
Parâmetro: 3 - Fold 1 - MSE: 1.28364
Parâmetro: 4 - Fold 1 - MSE: 1.22465
Parâmetro: 5 - Fold 1 - MSE: 1.20042
Parâmetro: 1 - Fold 2 - MSE: 1.66707
Parâmetro: 2 - Fold 2 - MSE: 1.34209
Parâmetro: 3 - Fold 2 - MSE: 1.24584
Parâmetro: 4 - Fold 2 - MSE: 1.20308
Parâmetro: 5 - Fold 2 - MSE: 1.18887
Parâmetro: 1 - Fold 3 - MSE: 1.69736
Parâmetro: 2 - Fold 3 - MSE: 1.29671
Parâmetro: 3 - Fold 3 - MSE: 1.17307
Parâmetro: 4 - Fold 3 - MSE: 1.13417
Parâmetro: 5 - Fold 3 - MSE: 1.11981
Parâmetro: 1 - Fold 4 - MSE: 1.71002
Parâmetro: 2 - Fold 4 - MSE: 1.34999
Parâmetro: 3 - Fold 4 - MSE: 1.26377
Parâmetro: 4 - Fold 4 - MSE: 1.23511
Parâmetro: 5 - Fold 4 - MSE: 1.22939
Parâmetro: 1 - Fold 5 - MSE: 1.65337
Parâmetro: 2 - Fold 5 - MSE: 1.31728
Parâmetro: 3 - Fold 5 - MSE: 1.21814
Parâmetro: 4 - Fold 5 - MSE: 1.19094
Parâmetro: 5 - Fold 5 - MSE: 1.17652
Modelo: KNeighborsRegressor - Fold: 3 - MSE: 1.19060

Parâmetro: 1 - Fold 1 - MSE: 1.80430
Parâmetro: 2 - Fold 1 - MSE: 1.37533
Parâmetro: 3 - Fold 1 - MSE: 1.24405
Parâmetro: 4 - Fold 1 - MSE: 1.21824
Parâmetro: 5 - Fold 1 - MSE: 1.21221
Parâmetro: 1 - Fold 2 - MSE: 1.74097
Parâmetro: 2 - Fold 2 - MSE: 1.38627
Parâmetro: 3 - Fold 2 - MSE: 1.29452
Parâmetro: 4 - Fold 2 - MSE: 1.24377
Parâmetro: 5 - Fold 2 - MSE: 1.23728
```

```
Parâmetro: 1 - Fold 3 - MSE: 1.71840
Parâmetro: 2 - Fold 3 - MSE: 1.39132
Parâmetro: 3 - Fold 3 - MSE: 1.23480
Parâmetro: 4 - Fold 3 - MSE: 1.16684
Parâmetro: 5 - Fold 3 - MSE: 1.15630
Parâmetro: 1 - Fold 4 - MSE: 1.73332
Parâmetro: 2 - Fold 4 - MSE: 1.38973
Parâmetro: 3 - Fold 4 - MSE: 1.29674
Parâmetro: 4 - Fold 4 - MSE: 1.26968
Parâmetro: 5 - Fold 4 - MSE: 1.24921
Parâmetro: 1 - Fold 5 - MSE: 1.71110
Parâmetro: 2 - Fold 5 - MSE: 1.40023
Parâmetro: 3 - Fold 5 - MSE: 1.29523
Parâmetro: 4 - Fold 5 - MSE: 1.24565
Parâmetro: 5 - Fold 5 - MSE: 1.21723
Modelo: KNeighborsRegressor - Fold: 4 - MSE: 1.09486

Parâmetro: 1 - Fold 1 - MSE: 1.69179
Parâmetro: 2 - Fold 1 - MSE: 1.37314
Parâmetro: 3 - Fold 1 - MSE: 1.26815
Parâmetro: 4 - Fold 1 - MSE: 1.20707
Parâmetro: 5 - Fold 1 - MSE: 1.18616
Parâmetro: 1 - Fold 2 - MSE: 1.75173
Parâmetro: 2 - Fold 2 - MSE: 1.38882
Parâmetro: 3 - Fold 2 - MSE: 1.29921
Parâmetro: 4 - Fold 2 - MSE: 1.25612
Parâmetro: 5 - Fold 2 - MSE: 1.22988
Parâmetro: 1 - Fold 3 - MSE: 1.65945
Parâmetro: 2 - Fold 3 - MSE: 1.34657
Parâmetro: 3 - Fold 3 - MSE: 1.20575
Parâmetro: 4 - Fold 3 - MSE: 1.12561
Parâmetro: 5 - Fold 3 - MSE: 1.10188
Parâmetro: 1 - Fold 4 - MSE: 1.68729
Parâmetro: 2 - Fold 4 - MSE: 1.34609
Parâmetro: 3 - Fold 4 - MSE: 1.26499
Parâmetro: 4 - Fold 4 - MSE: 1.21440
Parâmetro: 5 - Fold 4 - MSE: 1.19072
Parâmetro: 1 - Fold 5 - MSE: 1.68352
Parâmetro: 2 - Fold 5 - MSE: 1.35247
Parâmetro: 3 - Fold 5 - MSE: 1.28545
Parâmetro: 4 - Fold 5 - MSE: 1.26551
Parâmetro: 5 - Fold 5 - MSE: 1.23472
Modelo: KNeighborsRegressor - Fold: 5 - MSE: 1.19681

Parâmetro: 0 - Fold 1 - MSE: 0.60892
Parâmetro: 1 - Fold 1 - MSE: 0.60896
Parâmetro: 10 - Fold 1 - MSE: 0.60931
Parâmetro: 100 - Fold 1 - MSE: 0.61272
Parâmetro: 0 - Fold 2 - MSE: 0.48636
Parâmetro: 1 - Fold 2 - MSE: 0.48639
Parâmetro: 10 - Fold 2 - MSE: 0.48670
Parâmetro: 100 - Fold 2 - MSE: 0.48945
Parâmetro: 0 - Fold 3 - MSE: 0.51642
Parâmetro: 1 - Fold 3 - MSE: 0.51644
Parâmetro: 10 - Fold 3 - MSE: 0.51664
Parâmetro: 100 - Fold 3 - MSE: 0.51862
Parâmetro: 0 - Fold 4 - MSE: 0.56085
Parâmetro: 1 - Fold 4 - MSE: 0.56064
Parâmetro: 10 - Fold 4 - MSE: 0.55889
Parâmetro: 100 - Fold 4 - MSE: 0.54842
Parâmetro: 0 - Fold 5 - MSE: 0.53541
Parâmetro: 1 - Fold 5 - MSE: 0.53541
Parâmetro: 10 - Fold 5 - MSE: 0.53542
Parâmetro: 100 - Fold 5 - MSE: 0.53596
Modelo: RidgeRegression - Fold: 1 - MSE: 0.54518

Parâmetro: 0 - Fold 1 - MSE: 0.53472
Parâmetro: 1 - Fold 1 - MSE: 0.53474
Parâmetro: 10 - Fold 1 - MSE: 0.53488
Parâmetro: 100 - Fold 1 - MSE: 0.53651
Parâmetro: 0 - Fold 2 - MSE: 0.51201
Parâmetro: 1 - Fold 2 - MSE: 0.51203
Parâmetro: 10 - Fold 2 - MSE: 0.51221
Parâmetro: 100 - Fold 2 - MSE: 0.51394
Parâmetro: 0 - Fold 3 - MSE: 0.53063
Parâmetro: 1 - Fold 3 - MSE: 0.53065
Parâmetro: 10 - Fold 3 - MSE: 0.53084
Parâmetro: 100 - Fold 3 - MSE: 0.53276
Parâmetro: 0 - Fold 4 - MSE: 0.54860
Parâmetro: 1 - Fold 4 - MSE: 0.54838
Parâmetro: 10 - Fold 4 - MSE: 0.54646
Parâmetro: 100 - Fold 4 - MSE: 0.53483
Parâmetro: 0 - Fold 5 - MSE: 0.53272
Parâmetro: 1 - Fold 5 - MSE: 0.53272
Parâmetro: 10 - Fold 5 - MSE: 0.53271
Parâmetro: 100 - Fold 5 - MSE: 0.53318
Modelo: RidgeRegression - Fold: 2 - MSE: 0.51636

Parâmetro: 0 - Fold 1 - MSE: 0.55090
Parâmetro: 1 - Fold 1 - MSE: 0.55066
Parâmetro: 10 - Fold 1 - MSE: 0.54867
Parâmetro: 100 - Fold 1 - MSE: 0.53691
```

```
Parâmetro: 0 - Fold 2 - MSE: 0.51825
Parâmetro: 1 - Fold 2 - MSE: 0.51822
Parâmetro: 10 - Fold 2 - MSE: 0.51802
Parâmetro: 100 - Fold 2 - MSE: 0.51722
Parâmetro: 0 - Fold 3 - MSE: 0.62958
Parâmetro: 1 - Fold 3 - MSE: 0.62964
Parâmetro: 10 - Fold 3 - MSE: 0.63016
Parâmetro: 100 - Fold 3 - MSE: 0.63469
Parâmetro: 0 - Fold 4 - MSE: 0.52796
Parâmetro: 1 - Fold 4 - MSE: 0.52797
Parâmetro: 10 - Fold 4 - MSE: 0.52809
Parâmetro: 100 - Fold 4 - MSE: 0.52947
Parâmetro: 0 - Fold 5 - MSE: 0.50108
Parâmetro: 1 - Fold 5 - MSE: 0.50111
Parâmetro: 10 - Fold 5 - MSE: 0.50139
Parâmetro: 100 - Fold 5 - MSE: 0.50400
Modelo: RidgeRegression - Fold: 3 - MSE: 0.55655

Parâmetro: 0 - Fold 1 - MSE: 0.51410
Parâmetro: 1 - Fold 1 - MSE: 0.51411
Parâmetro: 10 - Fold 1 - MSE: 0.51424
Parâmetro: 100 - Fold 1 - MSE: 0.51598
Parâmetro: 0 - Fold 2 - MSE: 0.54363
Parâmetro: 1 - Fold 2 - MSE: 0.54362
Parâmetro: 10 - Fold 2 - MSE: 0.54352
Parâmetro: 100 - Fold 2 - MSE: 0.54387
Parâmetro: 0 - Fold 3 - MSE: 0.55551
Parâmetro: 1 - Fold 3 - MSE: 0.55539
Parâmetro: 10 - Fold 3 - MSE: 0.55444
Parâmetro: 100 - Fold 3 - MSE: 0.55006
Parâmetro: 0 - Fold 4 - MSE: 0.51305
Parâmetro: 1 - Fold 4 - MSE: 0.51307
Parâmetro: 10 - Fold 4 - MSE: 0.51331
Parâmetro: 100 - Fold 4 - MSE: 0.51576
Parâmetro: 0 - Fold 5 - MSE: 0.51661
Parâmetro: 1 - Fold 5 - MSE: 0.51663
Parâmetro: 10 - Fold 5 - MSE: 0.51680
Parâmetro: 100 - Fold 5 - MSE: 0.51897
Modelo: RidgeRegression - Fold: 4 - MSE: 0.52516

Parâmetro: 0 - Fold 1 - MSE: 0.51920
Parâmetro: 1 - Fold 1 - MSE: 0.51921
Parâmetro: 10 - Fold 1 - MSE: 0.51932
Parâmetro: 100 - Fold 1 - MSE: 0.52056
Parâmetro: 0 - Fold 2 - MSE: 0.56302
Parâmetro: 1 - Fold 2 - MSE: 0.56301
Parâmetro: 10 - Fold 2 - MSE: 0.56292
Parâmetro: 100 - Fold 2 - MSE: 0.56290
Parâmetro: 0 - Fold 3 - MSE: 0.53374
Parâmetro: 1 - Fold 3 - MSE: 0.53375
Parâmetro: 10 - Fold 3 - MSE: 0.53386
Parâmetro: 100 - Fold 3 - MSE: 0.53501
Parâmetro: 0 - Fold 4 - MSE: 0.53807
Parâmetro: 1 - Fold 4 - MSE: 0.53795
Parâmetro: 10 - Fold 4 - MSE: 0.53691
Parâmetro: 100 - Fold 4 - MSE: 0.53040
Parâmetro: 0 - Fold 5 - MSE: 0.51364
Parâmetro: 1 - Fold 5 - MSE: 0.51366
Parâmetro: 10 - Fold 5 - MSE: 0.51384
Parâmetro: 100 - Fold 5 - MSE: 0.51566
Modelo: RidgeRegression - Fold: 5 - MSE: 0.50769



Parâmetro: 0 - Fold 1 - MSE: 0.54443
Parâmetro: 1 - Fold 1 - MSE: 0.54443
Parâmetro: 10 - Fold 1 - MSE: 0.54448
Parâmetro: 100 - Fold 1 - MSE: 0.54518
Parâmetro: 0 - Fold 2 - MSE: 0.51525
Parâmetro: 1 - Fold 2 - MSE: 0.51526
Parâmetro: 10 - Fold 2 - MSE: 0.51533
Parâmetro: 100 - Fold 2 - MSE: 0.51636
Parâmetro: 0 - Fold 3 - MSE: 0.55665
Parâmetro: 1 - Fold 3 - MSE: 0.55664
Parâmetro: 10 - Fold 3 - MSE: 0.55657
Parâmetro: 100 - Fold 3 - MSE: 0.55655
Parâmetro: 0 - Fold 4 - MSE: 0.52646
Parâmetro: 1 - Fold 4 - MSE: 0.52632
Parâmetro: 10 - Fold 4 - MSE: 0.52516
Parâmetro: 100 - Fold 4 - MSE: 0.51734
Parâmetro: 0 - Fold 5 - MSE: 0.50528
Parâmetro: 1 - Fold 5 - MSE: 0.50531
Parâmetro: 10 - Fold 5 - MSE: 0.50554
Parâmetro: 100 - Fold 5 - MSE: 0.50769


Melhor modelo: RidgeRegression
Melhor valor do parâmetro: 100
MSE no conjunto de teste: 0.53104
```

Neste código comparamos o KNN (K-Nearest Neighbors) e a Regressão Linear com regularização L2, variando os parâmetros k e c respectivamente, e selecionamos os melhores hiperparâmetros para cada modelo com base no erro quadrático médio do conjunto de validação.

A partir dos resultados da validação cruzada aninhada, foi possível identificar que a regressão com regularização L2 teve um melhor desempenho em média, com um valor de $c = 100$ como o melhor hiperparâmetro. O MSE obtido no conjunto de teste para esse modelo foi de ≈ 0.531.

A seleção do modelo Ridge Regression sobre o k-NN sugere que a regularização $L2$ foi benéfica para lidar com a complexidade do modelo e prevenir o overfitting, levando a uma melhor generalização nos dados de teste.

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 nosso modelo $h_{\mathcal{D}}$:

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

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, i.e., observamos $f'(x) = f(x) + \epsilon$. Mais concretamente, trabalhe a seguinte esperança para derivar uma decomposição similar à da nota de aula:

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

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.

Resposta:

Pelas notas de aula, vimos que:

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

Ao somar $\mathbb{E}_{x,\mathcal{D}}[h_{\mathcal{D}}(x)]^2 - \mathbb{E}_{x,\mathcal{D}}[h_{\mathcal{D}}(x)]^2$ à última linha para obter:

$$\mathbb{E}_{x,\mathcal{D}}\left[(h_{\mathcal{D}}(x) - f'(x))^2\right] = \underbrace{\mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)^2\right] - \mathbb{E}_{\mathcal{D}}[h_{\mathcal{D}}(x)]^2\right]}_{(1)} + \underbrace{\mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[h_{\mathcal{D}}(x)]^2 + f'(x)^2 - 2\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right]f'(x)\right]}_{(2)}$$

Sabendo que a fórmula da variância é $Var(X) = \mathbb{E}[X^2] - \mathbb{E}[X]^2$, temos que (1) é:

$$\mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)^2\right] - \mathbb{E}_{\mathcal{D}}[h_{\mathcal{D}}(x)]^2\right] = \mathbb{E}_x\left[Var_{\mathcal{D}}[h_{\mathcal{D}}(x)]\right]$$

Agora vamos expandir o termo (2) que depende de $f'(x)$:

$$\mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[h_{\mathcal{D}}(x)]^2 + f'(x)^2 - 2\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right]f'(x)\right] = \mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[h_{\mathcal{D}}(x)]^2\right] + \underbrace{\mathbb{E}_x\left[f'(x)^2\right]}_{(3)} - 2\underbrace{\mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right]f'(x)\right]}_{(4)}$$

Desenvolvendo (3):

$$\mathbb{E}_x\left[f'(x)^2\right] = \mathbb{E}_x\left[(f(x) + \epsilon)^2\right] = \mathbb{E}_x\left[f(x)^2 + 2f(x)\epsilon + \epsilon^2\right]$$

$$= \mathbb{E}_x\left[f(x)^2\right] + 2\epsilon\underbrace{\mathbb{E}_x\left[f(x)\right]}_{0} + \mathbb{E}_x\left[\epsilon^2\right] = \mathbb{E}_x\left[f(x)^2\right] + \underbrace{\mathbb{E}_x\left[\epsilon^2\right]}_{\sigma^2}$$

Novamente pela fórmula de variância, temos que:

$$\mathbb{E}_x Var(\epsilon) = \mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_\epsilon\left[\epsilon^2\right] - \mathbb{E}_\epsilon[\epsilon]^2\right] = \mathbb{E}_x\left[\sigma^2 - 0\right] = \sigma^2$$

Então, temos que $\mathbb{E}_x\left[f'(x)^2\right] = \mathbb{E}_x\left[f(x)^2\right] + \mathbb{E}_x Var(\epsilon)$.

Por fim, desenvolvendo (4):

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right]f'(x)\right] &= \mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right](f(x) + \epsilon)\right] \\ &= \mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right]f(x)\right] + \mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right]\epsilon\right] \\ &= \mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right]f(x)\right]\end{aligned}$$

Pois, $\mathbb{E}x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right]\epsilon\right] = \mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right]\underbrace{\mathbb{E}x[\epsilon]}_{0} = 0$

Substituindo (3) e (4) em (2), temos que:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[h_{\mathcal{D}}(x)]^2 + f'(x)^2 - 2\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right]f'(x)\right] &= \mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[h_{\mathcal{D}}(x)]^2\right] + \mathbb{E}_x\left[f(x)^2\right] + \mathbb{E}_x Var(\epsilon) - 2\mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x)\right]f(x)\right] \\ &= \mathbb{E}_x\left[\left(\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x) - f(x)\right]\right)^2\right] + \mathbb{E}_x Var(\epsilon)\end{aligned}$$

E portanto,

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{x,\mathcal{D}}\left[\left(h_{\mathcal{D}}(x) - f'(x)\right)^2\right] &= (1) + (2) \\ &= \underbrace{\mathbb{E}_x\left[Var_{\mathcal{D}}[h_{\mathcal{D}}(x)]\right]}_{\text{Variância}} + \underbrace{\mathbb{E}_x\left[\left(\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[h_{\mathcal{D}}(x) - f(x)\right]\right)^2\right]}_{Viés} + \underbrace{\mathbb{E}_x Var(\epsilon)}_{\text{Ruído}}\end{aligned}$$

Diferentemente da decomposição original, temos um termo adicional que representa o ruído presente nos dados, representado por $\mathbb{E}_x Var(\epsilon)$. Na decomposição original, ao usar apenas $f(x)$, obtínhamos:

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