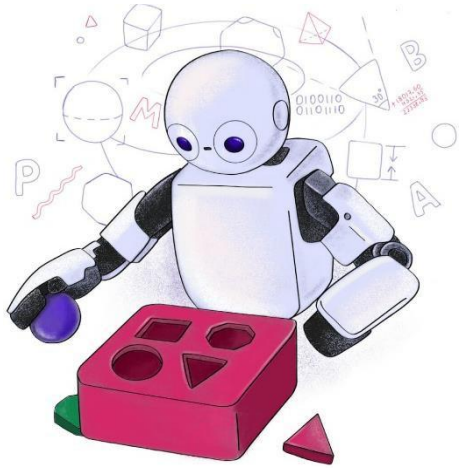
TP555 - Inteligência Artificial e Machine Learning: *Regressão com Modelos Não-Lineares com Relação aos Atributos*

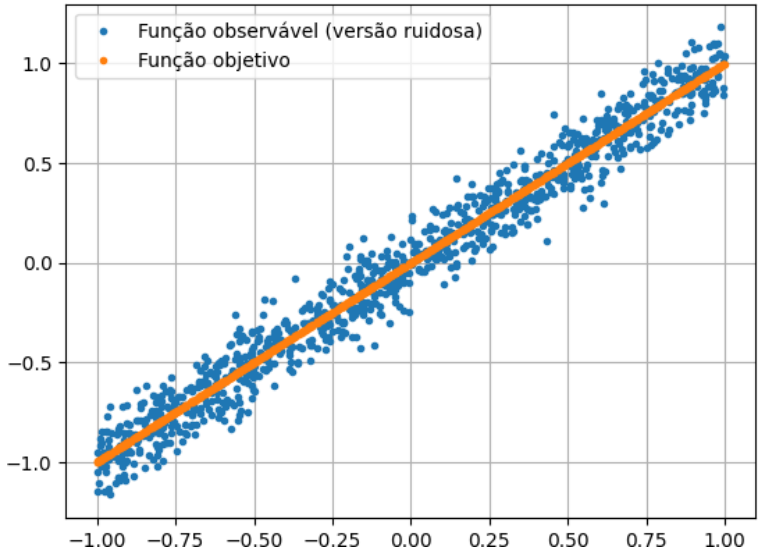


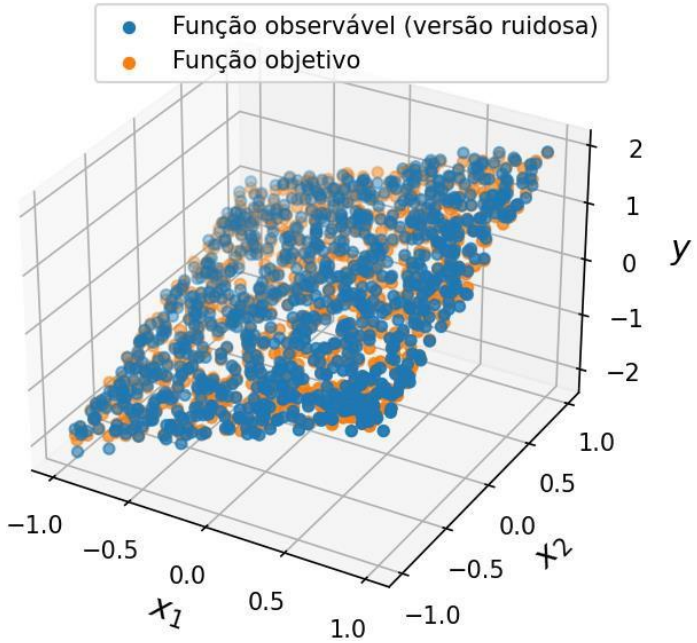
Esse material foi desenvolvido e gentilmente cedido pelo Prof. Dr. Felipe Augusto Pereira de Figueiredo, do Inatel.(felipe.figueiredo@inatel.br)

Inatel

Prof. Dr. Luiz Augusto Melo Pereira
luiz.melo@inatel.br

Até agora, usamos ***funções hipótese com formato de hiperplanos***, e.g., retas e planos, para aproximar ***mapeamentos lineares*** entre os atributos e o valor esperado, mas ***e se os mapeamentos forem não lineares***?

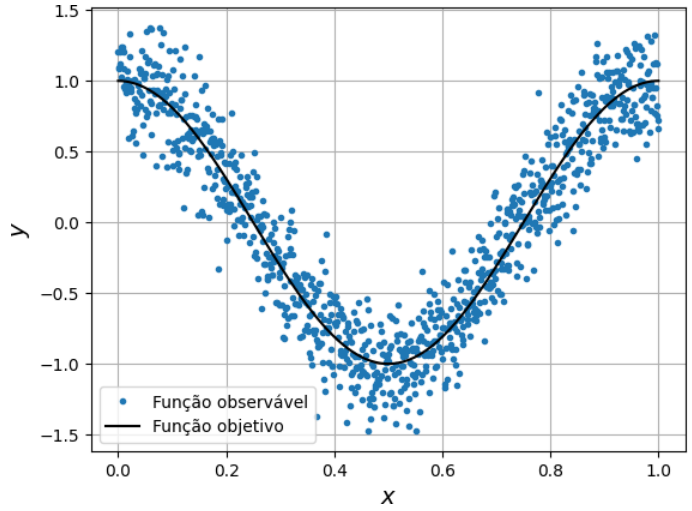


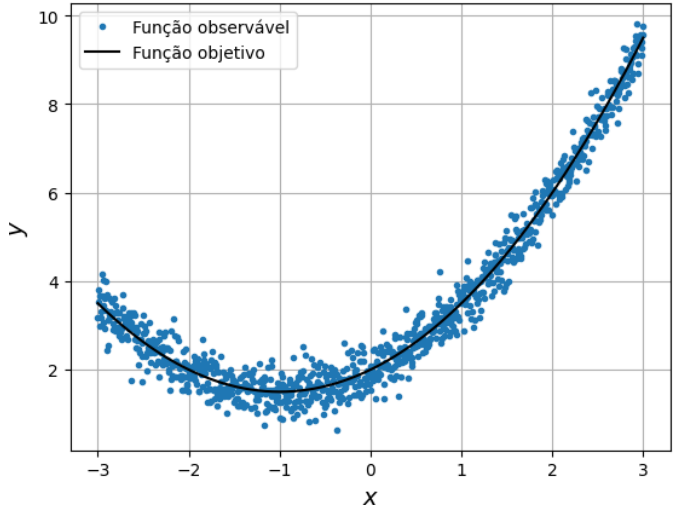


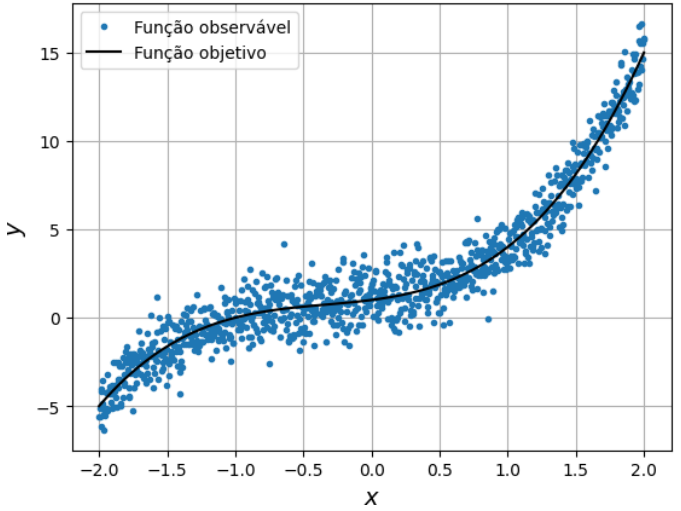
O que podemos fazer quando ***hiperplanos não se ajustam bem aos dados***?

Mapeamentos não lineares

- Observem as figuras abaixo, uma ***reta*** claramente ***não seria uma boa escolha para aproximar esses mapeamentos não lineares***.
  - ***Retas não capturariam o comportamento das funções abaixo***, pois elas não têm ***complexidade ou flexibilidade*** (i.e., graus de liberdade) o suficiente para isso.
- Portanto, qual tipo de função hipótese seria mais apropriada para aproximar esses comportamentos não lineares?







Extensão para modelos não-lineares com relação aos atributos

- ***Modelos não-lineares*** constroem uma aproximação por meio da ***combinação linear de funções-base não-lineares***, da forma

$$h(\boldsymbol{x}) = \hat{y}(\boldsymbol{x}) = a_0 + a_1 b_1(\boldsymbol{x}) + \cdots + a_M b_M(\boldsymbol{x}),$$

onde $b_m(\boldsymbol{x})$: $\mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}$, denota a i-ésima ***função-base***.

- Portanto, por ser linear com relação aos pesos, os r***esultados encontrados anteriormente são facilmente estendidos para o caso não-linear*** bastando redefinir o ***vetor de atributos***, $\boldsymbol{x}(i)$, como o ***vetor de funções-base***

$$\boldsymbol{x}(i) = \left[1, b_1\left(\boldsymbol{x}(i)\right), \ldots, b_M\left(\boldsymbol{x}(i)\right)\right]^{\mathrm{T}}$$

- Exemplos de funções base:
  - $b_m(x) = x_1 * x_2$
  - $b_m(x) = \log_{10} x_1$
  - $b_m(x) = x_1^2$

Linearização

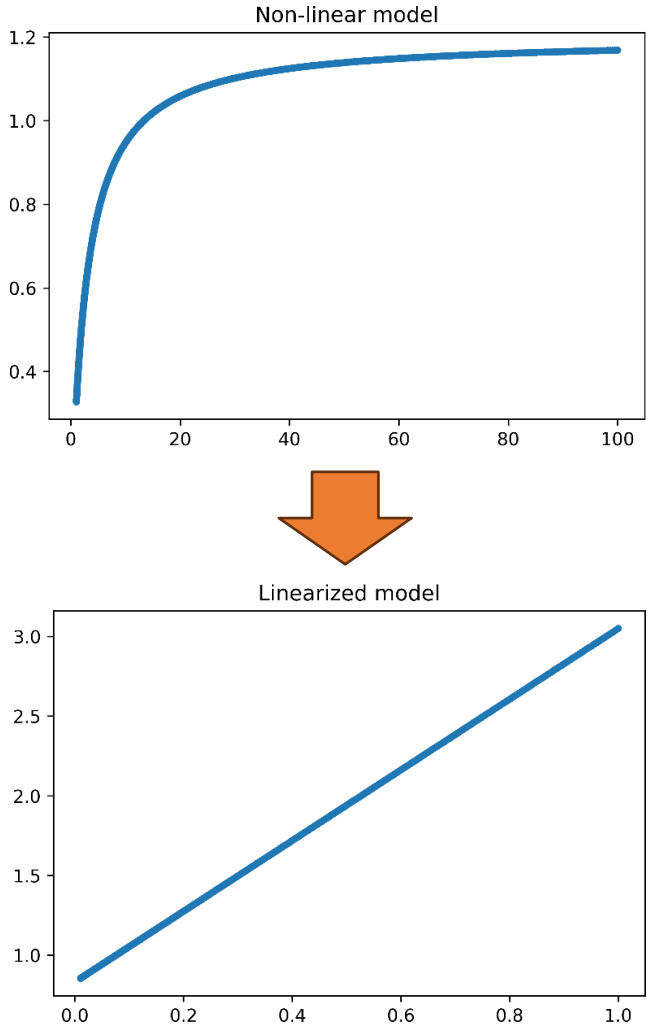
- Em geral, processos e modelos físicos ***não são lineares*** (e desta vez em relação aos pesos também), o que dificulta sua interpretação.
- Porém, existem ***modelos não-lineares*** que são ***intrinsecamente lineares***, pois podem ser tornados lineares em relação aos pesos ***através de uma modificação***.
- Por exemplo, as equações abaixo podem ser transformadas em uma combinação linear de funções base não lineares.

$$y = a_0 {x_1}^{a_1} e^{a_2 x_2},$$

$$y = \frac{a_0 x_1}{a_1 + x_1}.$$

- A vantagem é que modelos lineares são mais fáceis de interpretar.

Exemplo: Linearização



A equação,

$$y = \frac{a_0 x_1}{a_1 + x_1}.$$

pode ser reescrita como

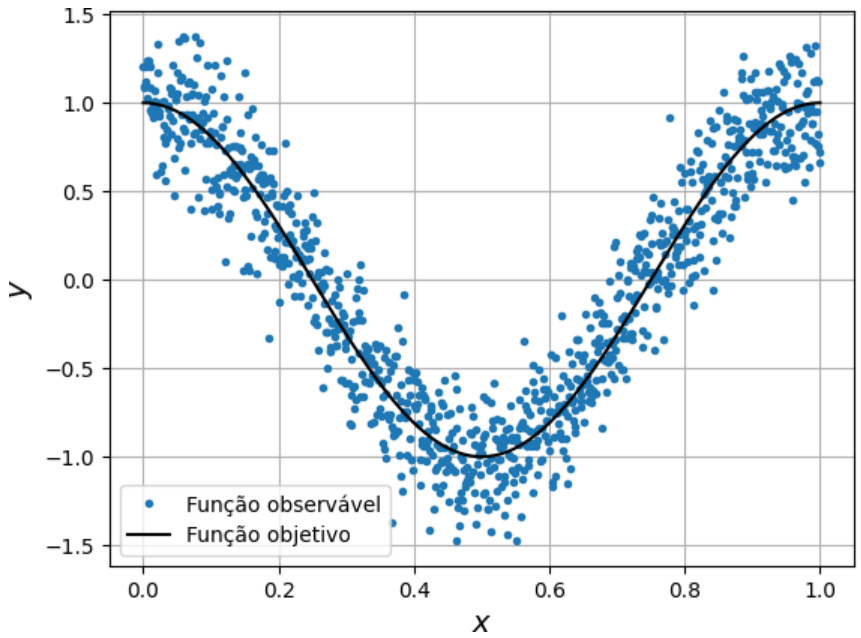
$$\frac{1}{y} = \frac{a_1 + x_1}{a_0 x_1} = \frac{1}{a_0} + \frac{a_1}{a_0}\frac{1}{x_1} = a_0' + a_1' x_1',$$

que é linear em relação aos pesos transformados.

- Depois do modelo ser linearizado, os pesos podem ser encontrados com a equação normal ou com o gradiente descendente.

Exemplo: model_linearization.ipynb

Regressão polinomial



- O teorema da aproximação de ***Stone-Weierstrass*** diz que *"qualquer função contínua no intervalo fechado [a, b] pode ser uniformemente aproximada por um* ***polinômio****"*.
- Portanto, podemos aproximar ***qualquer tipo de mapeamento (linear ou não linear)*** com ***polinômios***, bastando apenas ***encontrar o grau (ou ordem) ideal***.

Regressão polinomial

- Exemplo de um polinômio de grau 4* com três atributos, x_1, x_2 e x_3

$$y\,(x_1, x_2, x_3) = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_1 x_3 + a_5 {x_1}^3 + a_4 x_1 x_2 {x_3}^2$$

- O grau do polinômio é o maior valor resultante da soma dos expoentes dos atributos de um monômio
- Percebam que em alguns monômios existe a ***combinação dos atributos originais***, formando novos atributos (ou ***funções base***).
- Um problema com polinômios é que a presença de ***outliers*** nos dados de treinamento impacta o desempenho do modelo.

Exemplo: polynomial_regression_example_with_outliers.ipynb

Regressão polinomial

- Por simplicidade didática, inicialmente, nós consideraremos ***funções hipóteses polinomiais em uma variável*** (i.e., com ***um*** atributo)

$$h(x_1(n)) = a_0 + a_1 x_1(n) + a_2 {x_1}^2(n) + \cdots + a_M {x_1}^M(n) = \boldsymbol{a}^T \boldsymbol{x}(n),$$

onde $n = 1 \ldots N$ é o número da amostra, M é o grau do polinômio, $\boldsymbol{a} = [a_0\, a_1\ a_2\ \ldots\ a_M]^T \in \mathbb{R}^{M+1\times 1}$, $\boldsymbol{x}(n) = [x_0\ x_1(n)\ {x_1}^2(n)\ \ldots\ {x_1}^M(n)]^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{M+1\times 1}$ e $x_0 = 1$ é o atributo de *bias,* associado ao peso de *bias*, a_0.

- ***Todos resultados encontrados anteriormente*** (equação normal, vetor gradiente para implementação do algoritmo do gradiente descendente, escalonamento) ***são diretamente estendidos para funções hipótese polinomiais***.

Regressão polinomial

- Só precisamos nos lembrar que o ***vetor de atributos***, $\boldsymbol{x}$, e consequentemente, a ***matriz de atributos***, $\boldsymbol{X}$, são ***compostos pelas funções base***.
- Por exemplo, para a seguinte ***função hipótese polinomial***

$$h\left(x_1(n)\right) = a_0 + a_1 x_1(n) + a_2 {x_1}^2(n) + \cdots + a_M {x_1}^M(n),$$

a ***matriz de atributos polinomial***, $\boldsymbol{X}$, fica da seguinte forma

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_1(0) & x_1^2(0) & \dots & x_1^M(0) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_1(N-1) & x_1^2(N-1) & \dots & x_1^M(N-1) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times M+1},$$

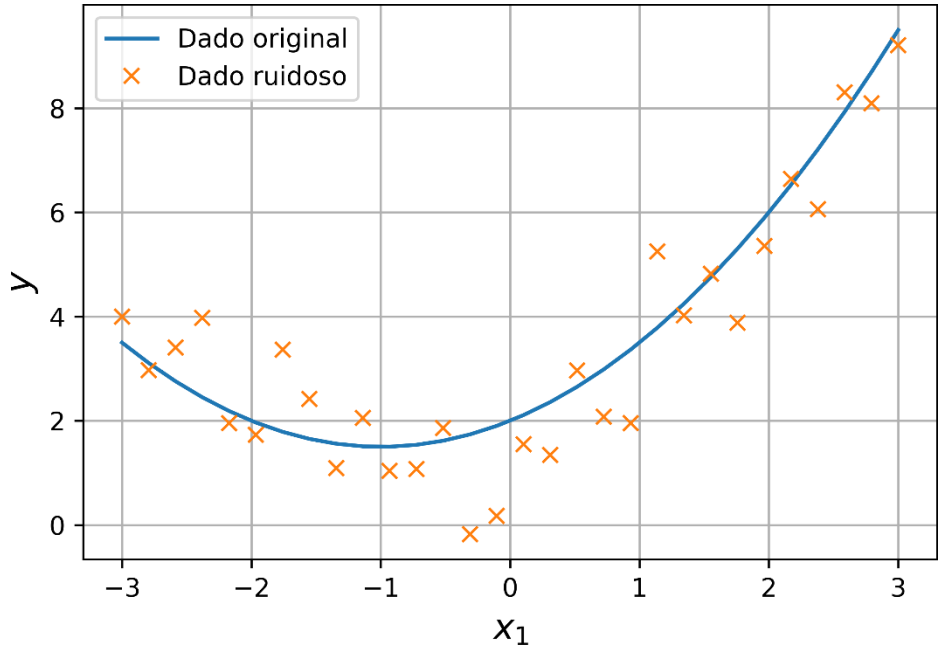
onde cada coluna contém uma ***função base***.

* A biblioteca SciKit-Learn possui uma função que cria essas matrizes automaticamente a partir dos atributos originais.

Exemplo: polynomial_features_from_scikit.ipynb

Porém, o desafio agora é ***encontrar o grau do polinômio*** que melhor aproxime os dados.

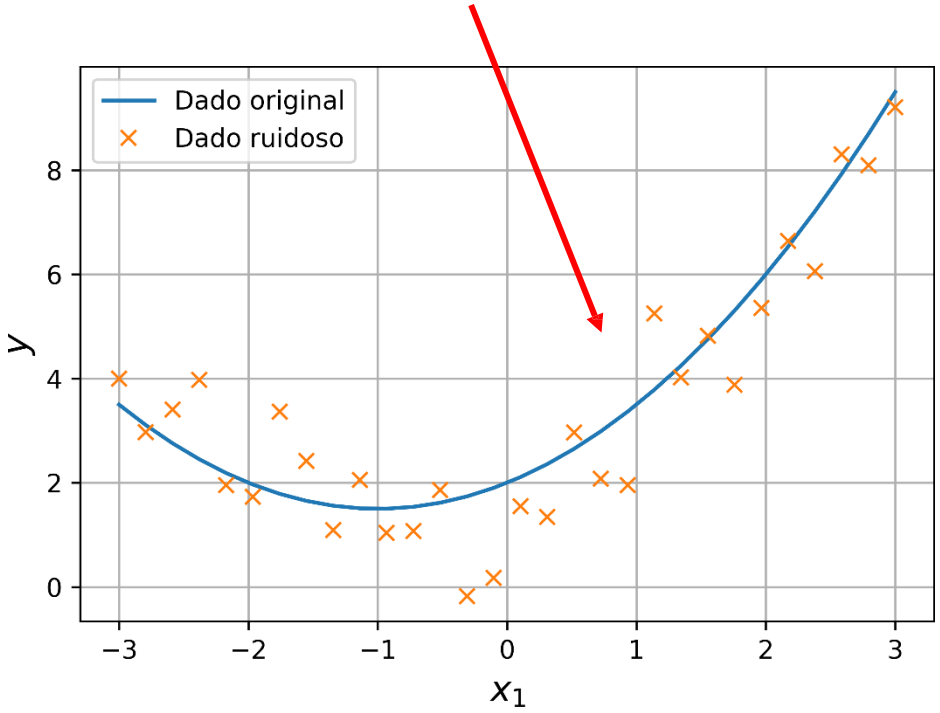
Exemplo de regressão usando polinômio



Usando apenas os ***dados ruidosos***, ***qual a ordem e pesos de um polinômio*** para que ele se aproxime da ***função objetivo*** da melhor forma possível?

Exemplo de regressão usando polinômio

Função objetivo: polinômio de ordem 2.



A partir do dados ruidosos, queremos encontrar um polinômio (pesos e ordem) que melhor se aproxime da função objetivo.

- Para exemplificar essa questão da busca pela ordem do polinômio aproximador geramos ***30 exemplos*** da seguinte função objetivo (polinômio de ordem 2)

$$y\left(x_1(n)\right) = 2 + x_1(n) + 0.5{x_1}^2(n),$$

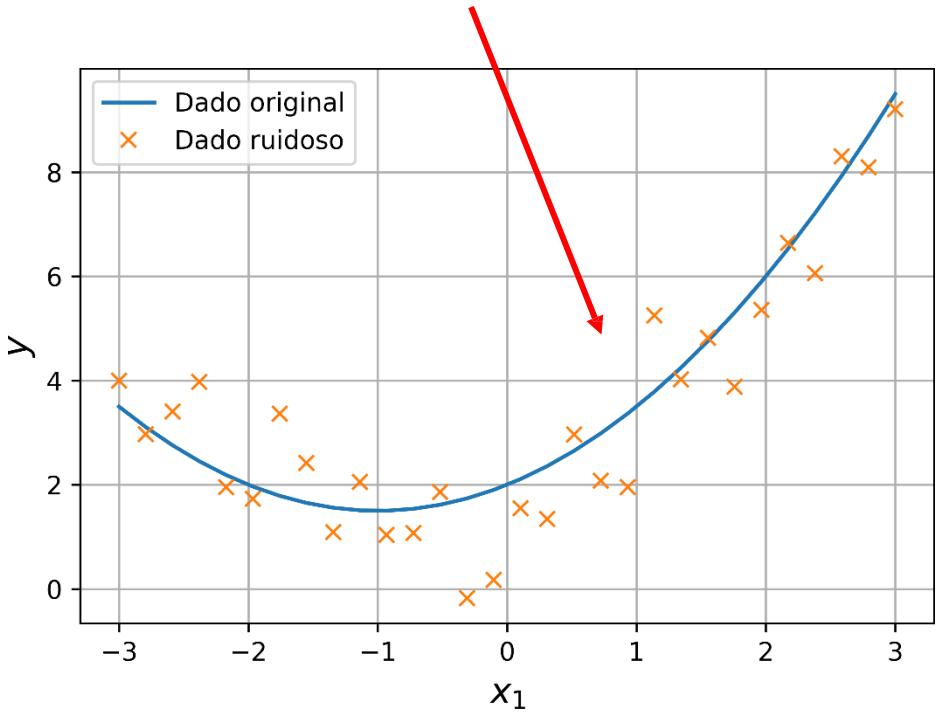
e adicionamos ruído Gaussiano branco, $w(n)$

$$y_{\text{noisy}}\left(x_1(n)\right) = y\left(x_1(n)\right) + w(n),$$

onde $x_1(n)$ são valores linearmente espaçados entre -3 e 3 e $w(n) \sim N(0,1)$.

Exemplo de regressão usando polinômio

Função objetivo: polinômio de ordem 2.



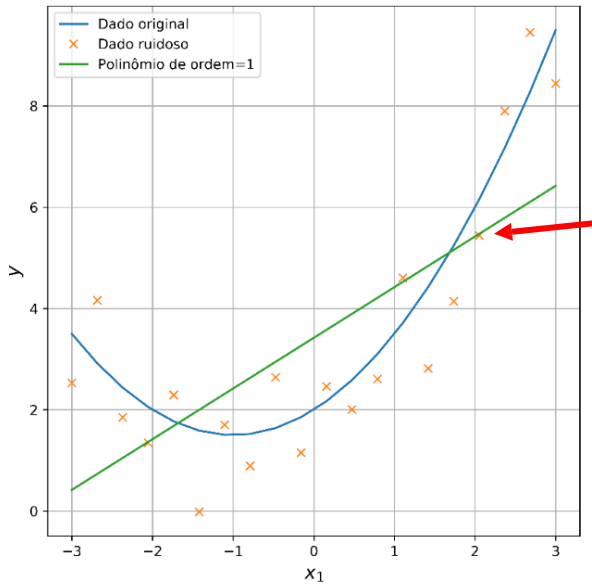
A partir do dados ruidosos, queremos encontrar um polinômio (pesos e ordem) que melhor se aproxime da função objetivo.

- Vamos usar uma ***função hipótese polinomial*** para ***aproximar a função objetivo a partir dos dados ruidosos***.
- Porém, surge uma dúvida, ***e se não soubéssemos a ordem por trás do modelo gerador, qual grau deveríamos utilizar***?

Exemplo: polynomial_regression.ipynb

Regressão polinomial: Qual ordem usar?

Polinômio de ordem 1.



Reta não é flexível o suficiente para se contorcer e aproximar o comportamento da função objetivo.

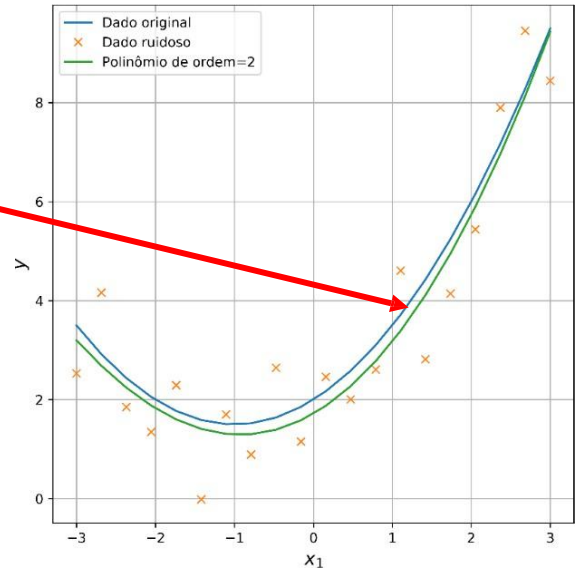
Flexibilidade e **grau de generalização** muito baixos.

- Polinômio de ordem 1 (i.e., reta) não tem flexibilidade o suficiente para aproximar o comportamento por trás das amostras ruidosas, ou seja, a função objetivo.
- O erro (MSE) é alto para exemplos dos conjuntos de treinamento e de validação (i.e., exemplos não vistos durante o treinamento).
- Efeito conhecido como ***subajuste*** ou ***underfitting***: ***flexibilidade*** e ***grau de generalização*** muito baixos.

Regressão polinomial: Qual ordem usar?

Polinômio de ordem 2.

Ordem ótima pois é a mesma do modelo gerador.

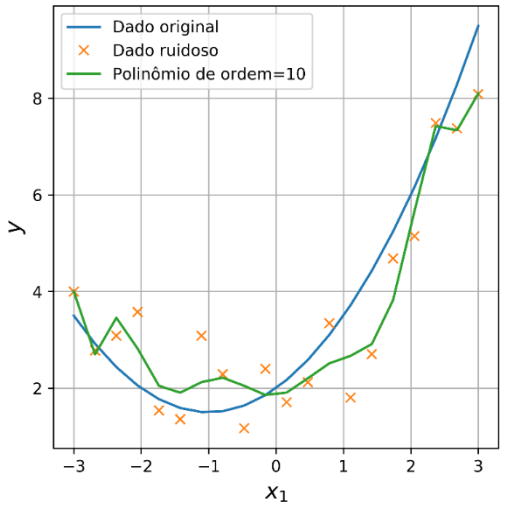


Encontra relação de compromisso entre **flexibilidade** e **generalização**: **flexibilidade** e **grau de generalização** em ***equilíbrio***.

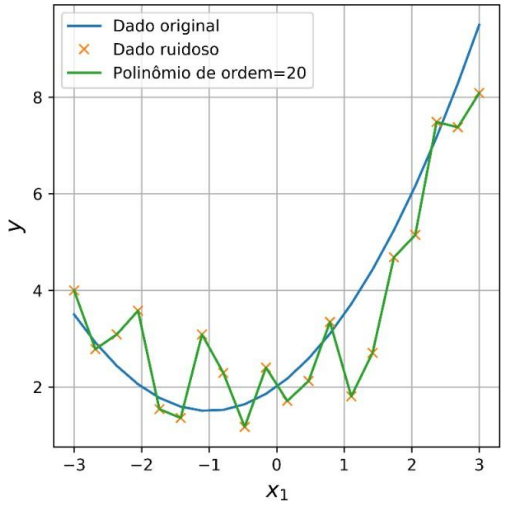
- Porém, como esperado, o polinômio de ordem 2 produz a melhor aproximação da função objetivo, errando pouco para exemplos dos conjuntos de treinamento e validação.
  - Esse modelo encontra uma relação de compromisso entre ***flexibilidade*** e ***grau de generalização***.
  - Essa aproximação será melhor quanto maior for o conjunto de treinamento e/ou menor o ruído.

Regressão polinomial: Qual ordem usar?

Polinômio de ordem 10.



Polinômio de ordem 20.



Polinômio de ordem 30.

- Polinômios com ordem maior do que 2 tendem a produzir ***aproximações perfeitas*** dos exemplos disponíveis, i.e., o modelo acaba ***memorizando*** os exemplos de treinamento.
- O erro para as amostras do conjunto de treinamento é muito baixo.
- Porém, essa aproximação se distancia bastante do modelo gerador.
- Portanto, esses modelos apresentarão ***erros significativamente maiores*** quando forem apresentados a exemplos de validação.
- Efeito conhecido como ***sobreajuste*** ou ***overfitting***: ***flexibilidade*** muito alta e ***grau de generalização*** muito baixo.

Resumo sobre subajuste e sobreajuste

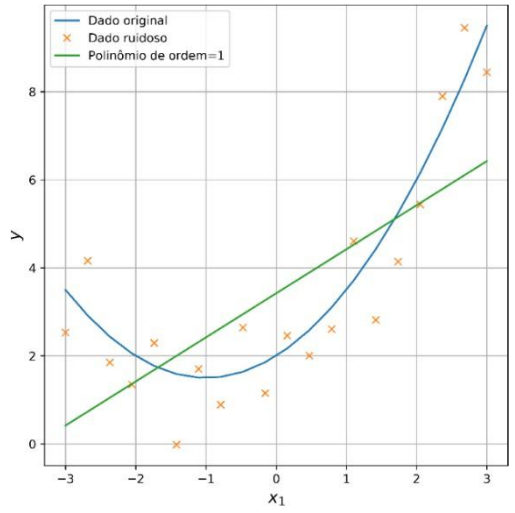
- **Subajuste**: situação em que o modelo falha em aproximar o ***mapeamento verdadeiro devido à falta de flexibilidade (ou capacidade)***.
  - Ocorre devido ao modelo não ter graus de liberdade suficientes para a aproximação.
  - O modelo produz ***erros significativos tanto quando apresentado ao próprio conjunto de treinamento quanto a dados inéditos***.
  - Se o modelo está subajustando, mesmo que o número de exemplos aumente indefinidamente, esta situação não vai desaparecer, é necessário ***aumentar a flexibilidade do modelo***, ou seja, no caso da regressão polinomial, sua ordem.

Resumo sobre subajuste e sobreajuste

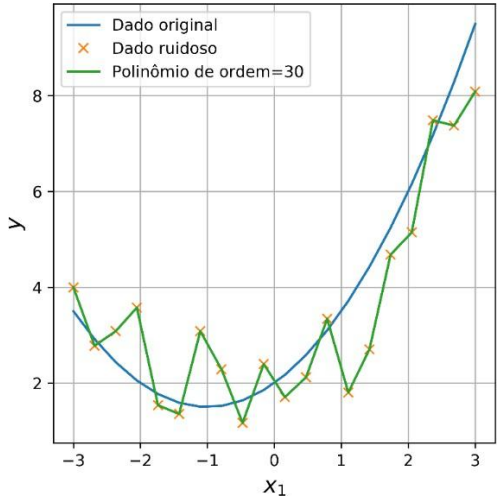
- **Sobreajuste**: situação em que o modelo se ajusta tão bem aos exemplos de treinamento que ele aprende até o ruído presente nos mesmos (baixo ***erro de treinamento***).
- Porém, o modelo produz erros significativos quando apresentado a dados inéditos (alto erro de ***erro de validação***).
  - Ocorre devido ao alto grau de flexibilidade do modelo.
  - Se o modelo está sobreajustando, então é necessário ***diminuir sua flexibilidade*** ou ***aumentar o conjunto de treinamento*** até que o erro de validação fique próximo do erro de treinamento.
- Nosso objetivo será encontrar um modelo que apresente uma relação de compromisso entre ***flexibilidade*** e ***capacidade de generalização***.
  - Flexibilidade suficiente para capturar o comportamento geral e generalizar bem.

Observações quanto à regressão polinomial

Polinômio de ordem 1



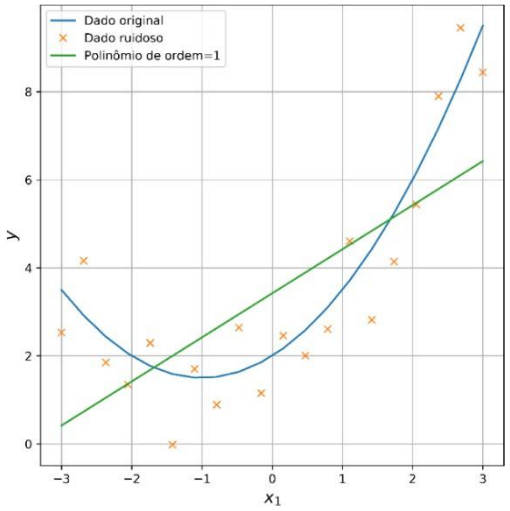
Polinômio de ordem 30



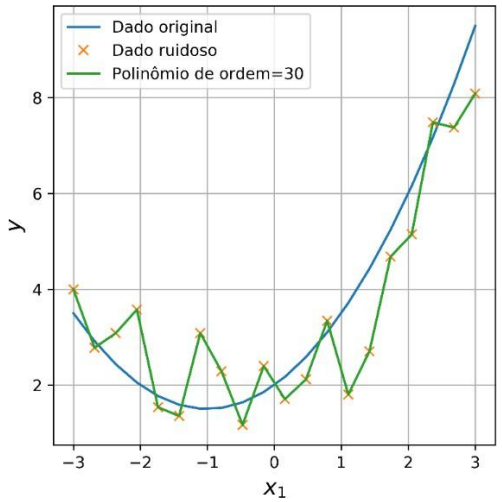
- O objetivo da regressão é encontrar um modelo com ***alta capacidade de generalização*** a ***partir do conjunto de treinamento dado***.
- Porém, vimos que ***polinômios de ordem inferior ao da função objetivo*** ***não conseguem aproximar*** o ***mapeamento verdadeiro***, pois eles ***não têm complexidade o suficiente*** para capturar a curvatura da função.

Observações quanto à regressão polinomial

Polinômio de ordem 1



Polinômio de ordem 30

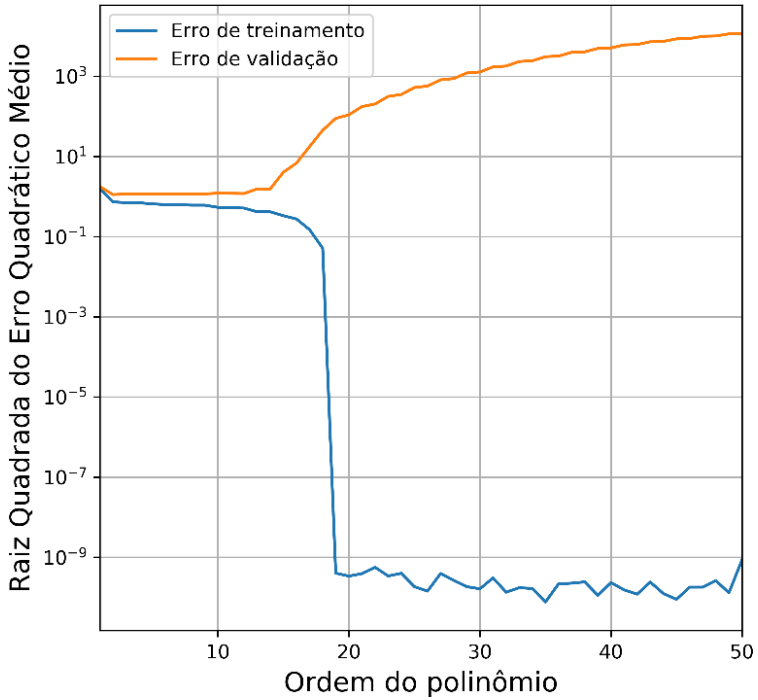


- Notamos também que é ***possível encontrar uma aproximação ótima com relação aos exemplos de treinamento*** que produz um mapeamento, $\hat{y} = h(\boldsymbol{x})$, que ***difere significativamente do mapeamento verdadeiro***.
- Portanto, precisamos encontrar ***estratégias*** que nos ***auxiliem a identificar*** um modelo que apresenta um bom ***balanço entre flexibilidade e capacidade de generalização***, se distanciando de modelos que ***subajustam*** ou ***sobreajustam***.

Observações quanto à regressão polinomial

- Uma estratégia simples e bastante usada para selecionar o modelo é ***comparar os erros de treinamento e validação***.
- Para isso, geralmente, dividimos o ***conjunto total de amostras*** em conjuntos de
  - ***Treinamento***: usado para treinar o modelo.
  - ***Validação***: usado para ajustar os hiperparâmetros do modelo (e.g., passo de aprendizagem, ordem).
  - ***Teste***: usado para avaliar a capacidade de generalização do modelo.
- OBS.: Esses conjuntos devem ter amostras diferentes, mas ***devem ser representativos do fenômeno sendo modelado***.

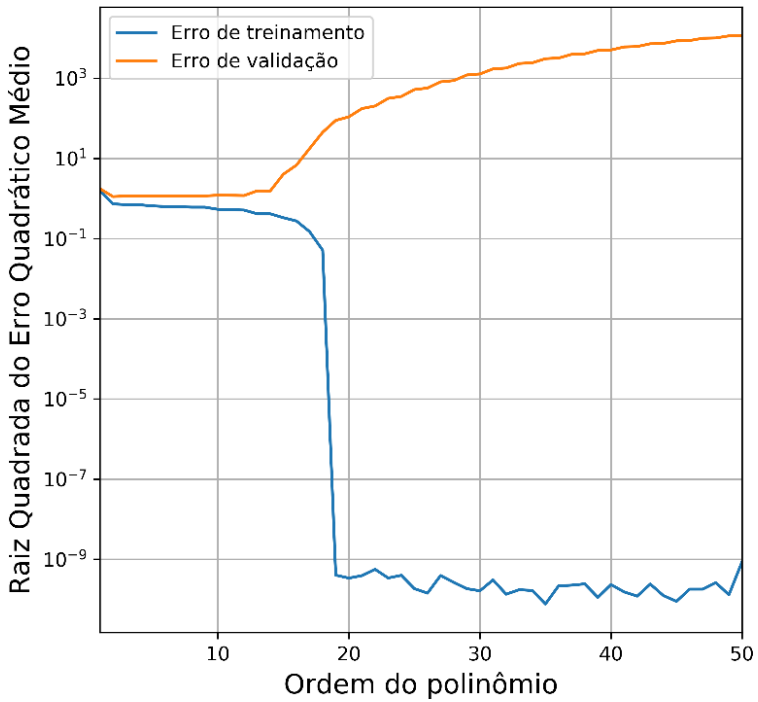
Erro de treinamento versus erro de validação



- Como vimos, o ***erro de treinamento*** diminui com o aumento da ordem do polinômio, porém, isso não significa que estamos obtendo um modelo melhor.
- Modelos mais complexos, com erro de treinamento pequeno, não necessariamente são modelos que ***generalizam*** melhor.
- Esses modelos tendem a apresentar alto ***erro de validação***.

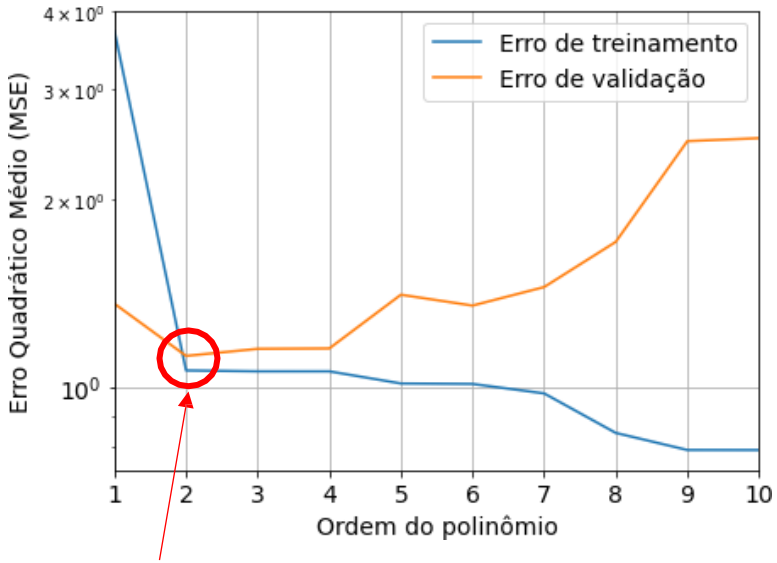
Exemplo: training_error_versus_validation_error.ipynb

Erro de treinamento versus erro de validação



- Já modelos com baixa complexidade apresentam alto erro de treinamento e de validação.
- Por outro lado, os ***modelos ideais*** mapeiam valores não vistos durante o treinamento em valores muito próximos aos esperados, i.e., generalizam.
- Portanto, modelos que ***generalizam bem*** apresentam ***erros de validação e de treinamento pequenos e próximos.***

Flexibilidade e generalização de um modelo



Modelo ótimo: relação de compromisso entre flexibilidade e capacidade de generalização.

- A ***flexibilidade (ou complexidade)*** de um modelo diz respeito à sua ***capacidade de aprender as regularidades ou características dos dados do conjunto de treinamento***.
  - Medida através do **erro de treinamento**.
- O ***grau de generalização*** de um modelo diz respeito a ***qualidade da aproximação gerada por ele quando exposto a dados não vistos durante o seu treinamento***.
  - Medido através do **erro de validação**.
- O ***modelo ideal*** é aquele que encontra uma ***relação de compromisso*** entre a ***flexibilidade*** e a ***capacidade de generalização***.

Erros envolvidos no processo de aproximação

- O processo de aproximação (i.e., predição) envolve dois tipos de erros:
  - ***Redutível***;
  - ***Irredutível***.
- O erro ***redutível*** é dividido em erros de
  - Variância;
  - Viés;
  - Computação;
  - Amostragem.

Erros envolvidos no processo de aproximação

- **Erro de *variância* (ou estimação)**: é o erro devido à ***sensibilidade excessiva do modelo a variações nos dados de treinamento***, ou seja, esse erro ***mede o quanto o modelo varia com os dados de treinamento***.
  - Depende do nível de complexidade do modelo.
  - Um modelo com alto grau de complexidade (e.g., polinômio de alto grau) com relação à quantidade de amostras de treinamento apresenta ***alta variância*** e, portanto, se ***sobreajusta***.
  - Em outras palavras, a ***alta variância*** faz com que um modelo ***aprenda o ruído*** presente no conjunto de treinamento, resultando em ***baixo erro de treinamento e alto erro de validação***.

Erros envolvidos no processo de aproximação

- **Erro de viés (em inglês, bias)**: é o ***erro devido a suposições erradas feitas sobre os dados***, ou seja, sobre o formato do modelo gerador.
  - Também conhecido como ***erro de representação*** ou ***aproximação***.
  - Depende do nível de ***complexidade do modelo*** usado para a aproximação.
    - Um modelo com baixa complexidade provavelmente não irá capturar o comportamento do modelo gerador.
  - Modelos com ***alto viés*** tendem a ***subajustar*** aos dados de treinamento, perdendo relações importantes entre os atributos e os valores esperados.
  - Ou seja, um ***alto valor de viés*** leva a ***altos erros tanto de treinamento quanto de validação***.
  - Em outras palavras, o ***modelo é muito simples*** para representar a relação entre as variáveis de entrada e a saída.

Exemplo: variancia_e_vies.ipynb

Erros envolvidos no processo de aproximação

- **Erro de computação**: é o erro decorrente do fato de que ***nem sempre é possível explorar devidamente o espaço de hipóteses***.
  - Também conhecido como **erro de otimização**.
  - **Motivos possíveis**: mínimos locais, limitação dos recursos computacionais para a busca/treinamento do modelo e uso de representação numérica de precisão finita (i.e., int8 e arredondamento).
    - Por exemplo, erros de arredondamento podem se acumular ao longo do tempo.
- **Erro de amostragem**: ocorre quando o ***conjunto de treinamento não é representativo da população de interesse***.
  - Leva a um modelo que ***não generaliza bem***.

Erros envolvidos no processo de aproximação

- **Erro irredutível**: é o erro devido ao ruído contido nos dados.
  - Também conhecido como ***erro de Bayes***.
  - Como o próprio nome diz, é o erro que ***não pode ser reduzido*** mesmo com modelos ideais (i.e., boa relação de compromisso entre erros de variância e de viés).
  - Por melhor que seja o modelo, os dados geralmente terão uma certa quantidade de ruído que não pode ser removida.

polynomial_regression_mse_big_data_set.ipynb
bias_variance_tradeoff.ipynb

Como escolhemos a melhor hipótese?

Validação cruzada

- A validação cruzada é uma técnica utilizada para ***avaliar quantitativamente o desempenho*** de um ***modelo*** e ***garantir que ele generalize bem para dados inéditos***, evitando assim problemas de subajuste ou sobreajuste.
- O processo de validação cruzada envolve ***dividir o conjunto total de dados em subconjuntos*** e realizar ***rodadas de treinamento e validação*** do modelo com ***diferentes combinações desses subconjuntos***.
- A validação cruzada é uma ferramenta importante para ***comparar e selecionar modelos*** e para ***ajustar hiperparâmetros*** como, por exemplo, o ***passo de aprendizagem***, o ***grau do polinômio*** da função hipótese, etc.

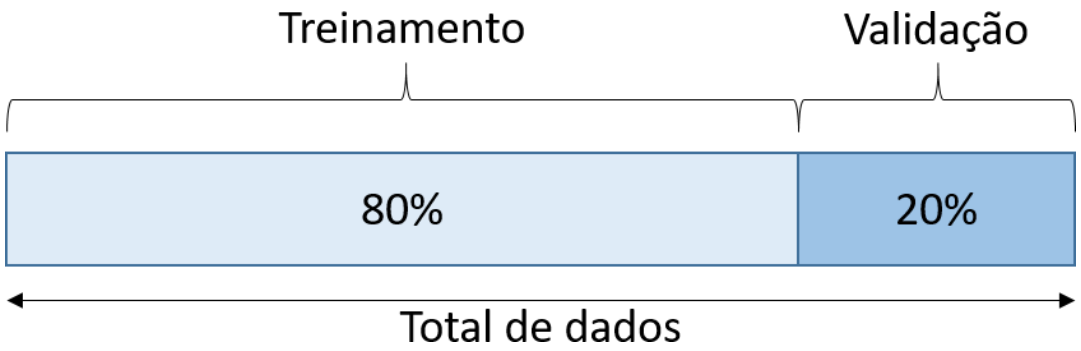
Validação cruzada

- O ***objetivo*** da ***validação cruzada*** é encontrar um ***ponto de equilíbrio*** entre a ***flexibilidade*** e a ***capacidade de generalização*** do modelo.
- Um ***modelo equilibrado*** é
  - Flexível o suficiente para se ajustar ao comportamento geral dos dados.
  - Capaz de predizer saídas próximas às esperadas para exemplos não usados durante seu treinamento.
- A ***flexibilidade*** de um modelo é ***estimada*** através do ***erro de treinamento*** e a ***capacidade de generalização*** é ***estimada*** através do ***erro de validação*** ou ***teste***.
  - Erro de treinamento é calculado com os dados usados para o treinamento do modelo.
  - Erro de validação ou teste é calculado com dados inéditos.

Validação cruzada

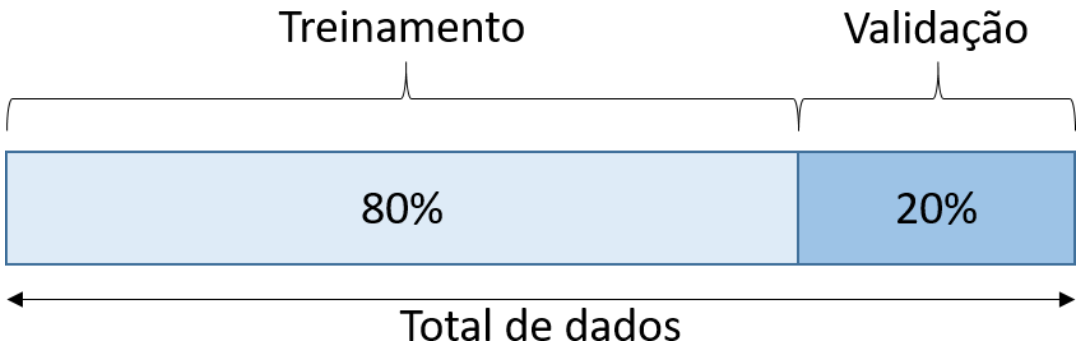
- No caso onde queremos usar a ***validação cruzada*** para ***encontrar o grau ideal da função hipótese polinomial***, o ***comportamento destes dois erros*** vai nos ajudar a verificar ***quais graus fazem o modelo se ajustar demais ou insuficientemente*** aos dados de treinamento.
- As estratégias de validação cruzada mais utilizadas e que veremos a seguir são:
  - *Holdout*
  - k*-fold*
  - *Leave-p-out*

Holdout



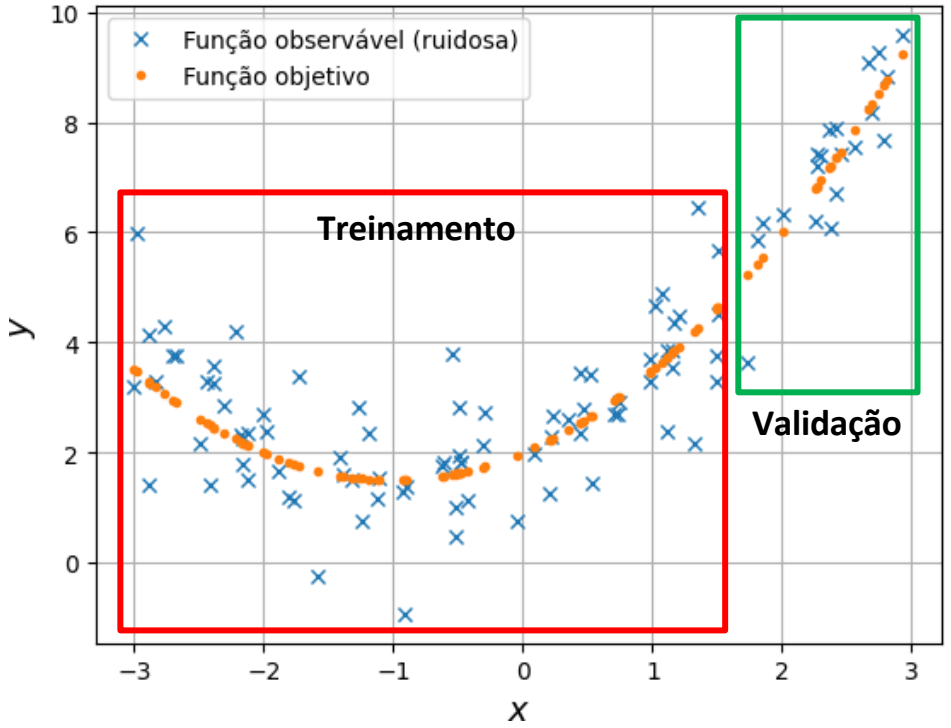
- É a estratégia de validação cruzada ***mais simples e rápida***, pois ela ***divide*** o conjunto total de dados em ***apenas dois subconjuntos***, um para ***treinamento*** e outro para ***validação*** (ou teste) do modelo.
- Consequentemente, realiza-se ***apenas um treinamento e uma validação do modelo***.

Holdout



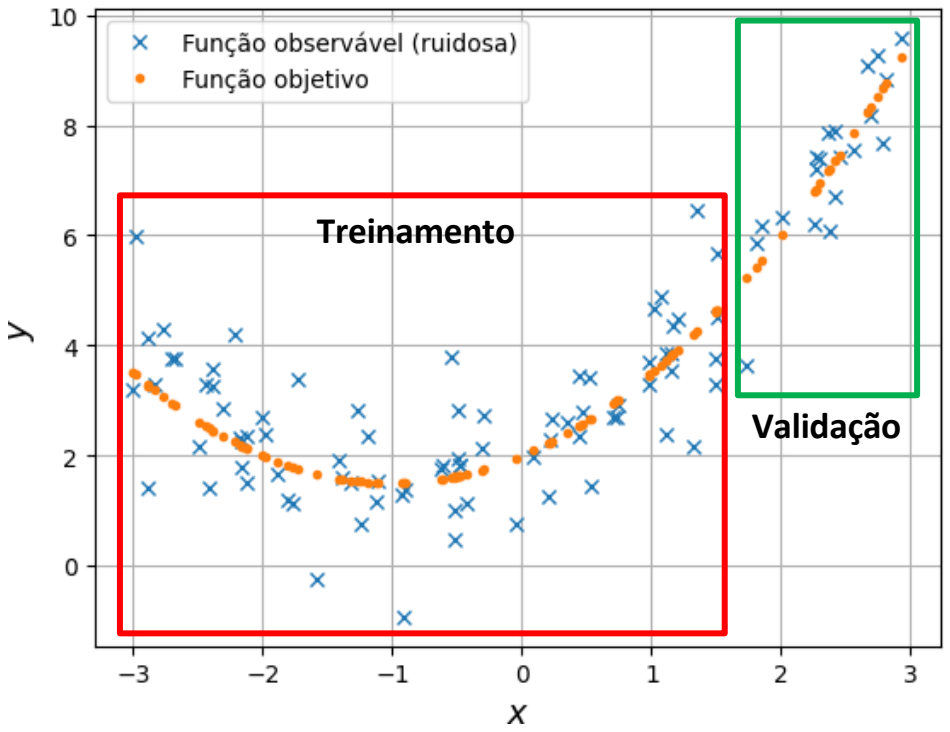
- Em geral, mas é opcional, o conjunto total de dados é ***embaralhado de forma aleatória antes da divisão***.
- Normalmente, divide-se o conjunto total de dados em 70 a 80% para treinamento e 30 a 20% para validação.

Holdout



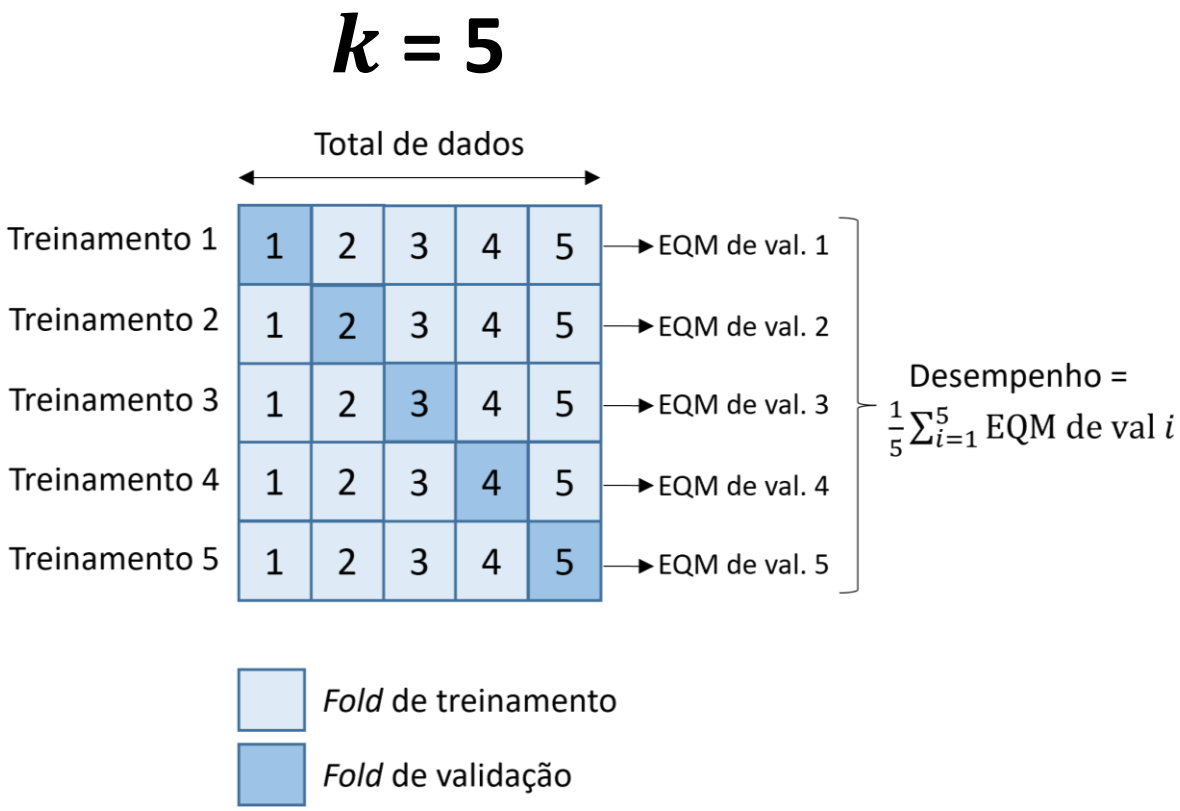
- Entretanto, o modelo treinado e validado com esta estratégia pode ***apresentar desempenho ruim se a divisão*** dos dados ***não for representativa do padrão presente nos dados***.
  - Problema conhecido como ***viés de seleção***.
- O desempenho do modelo pode ser muito diferente dependendo da divisão dos dados.

Holdout



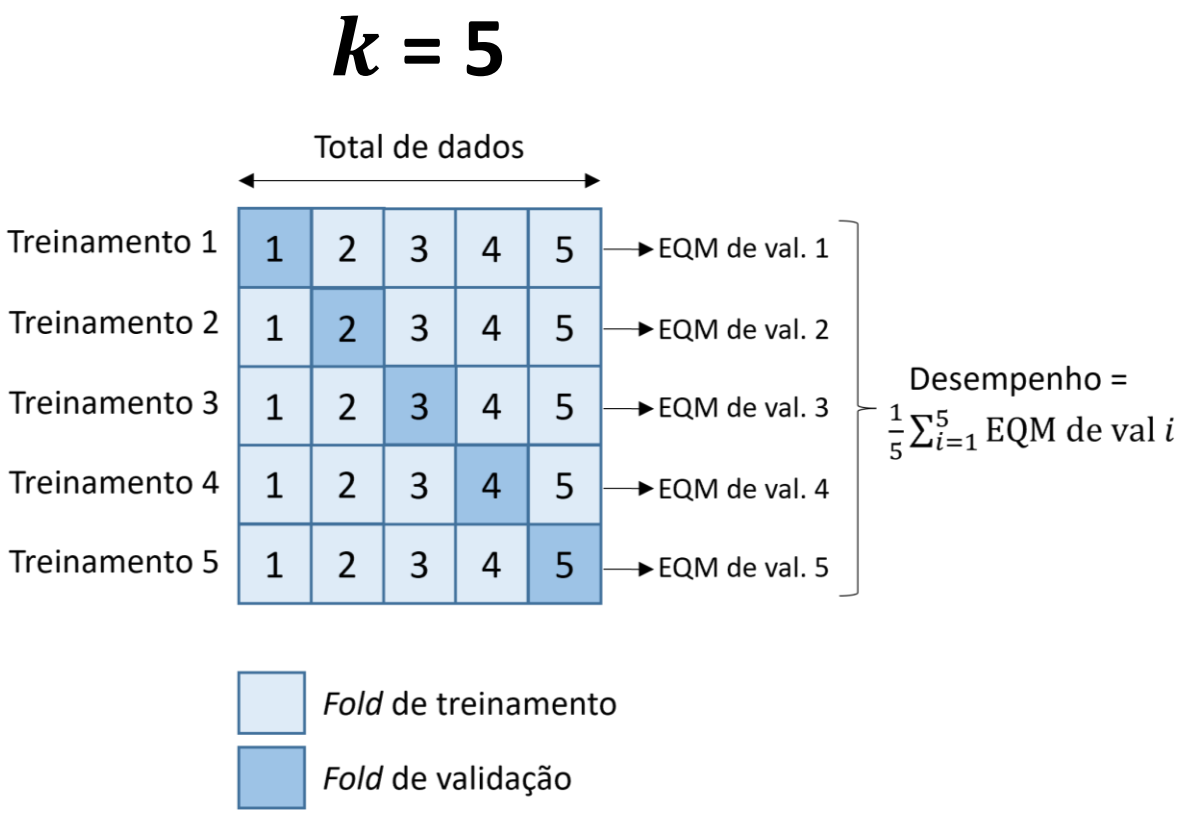
- Além disso, ***apenas uma rodada de treinamento e validação*** pode ***não fornecer*** uma ***estimativa robusta do desempenho*** do modelo.
- Em geral, usa-se o *holdout* quando o ***conjunto de dados é muito grande***, o que ***minimiza estes problemas***.

k-fold



- É uma estratégia mais elaborada do que a do *holdout*.
- A estratégia consiste em embaralhar (opcional) e ***dividir o conjunto total de dados em k partes*** (ou *folds*) ***iguais***.
- O ***modelo é treinado k vezes***, cada vez usando ***k-1*** partes como conjunto de treinamento e a parte restante como conjunto de validação.
- O ***EQM com o conjunto de validação*** é calculado ***ao final de cada treinamento***.

k-fold



- Ao final dos k treinamentos, calcula-se a ***média*** e o ***desvio padrão*** dos k EQMs de validação para fornecer uma ***avaliação geral do desempenho do modelo.***
- Em geral, utiliza-se k = 5 ou 10.
- Porém, k deve ser escolhido de forma que os *folds* sejam ***representativos do padrão presente nos dados*.**

k-fold

- O *k-fold* é a estratégia de validação cruzada mais usada por
  - fornecer ***indicações mais claras*** sobre desempenho do modelo, devido à média dos $\boldsymbol{k}$ valores de EQM.
  - ***minimizar os possíveis efeitos provocados pelo viés de seleção***, pois o modelo é treinado e validado $\boldsymbol{k}$ vezes, cada vez com uma divisão diferente dos dados.
    - Isso faz com que a avaliação do modelo se torne menos sensível à divisão dos dados.
- Entretanto, em relação ao *holdout*, o *k-fold* tem um tempo de validação maior (cerca de $\boldsymbol{k}$ vezes), pois deve-se realizar $\boldsymbol{k}$ treinamentos e validações, enquanto que com o *holdout*, realiza-se apenas um treinamento e validação.

Leave-*p*-out

- ***Valida*** um modelo usando ***todas as combinações possíveis*** de ***p*** exemplos como ***conjunto de validação*** e os ***N-p*** restantes como conjunto de treinamento.
- Para um conjunto de dados com N amostras, essa estratégia produz

$$\binom{N}{p} = \frac{N!}{p!\,(N-p)!},$$

pares de conjuntos treinamento e validação, portanto, a ***complexidade computacional desta estratégia aumenta drasticamente com p***.

- Exemplos para $N = 100$:
  - p = 1 -> 100 combinações
  - p = 2 -> 4.950 combinações
  - p = 5 -> 75.287.520 combinações

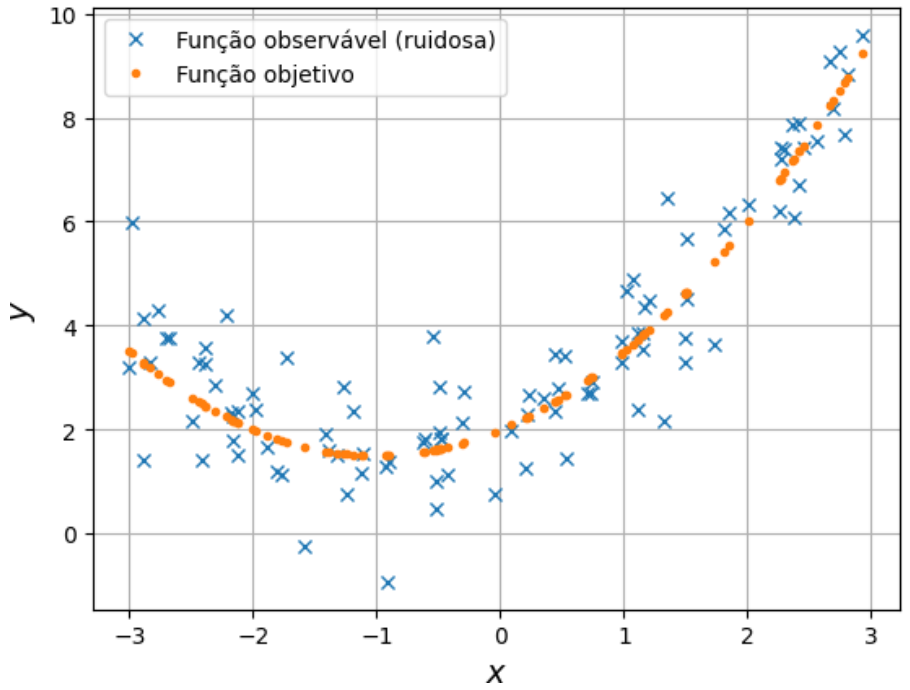
Leave-*p*-out

- Fornece ***estimativas de erro e desvio padrão mais precisas*** do que as abordagens anteriores, pois tem-se ***mais etapas de treinamento e validação***.
- **Desvantagem**
  - É uma ***estratégia exaustiva***, pois treina e valida o modelo para ***todas as combinações possíveis de p amostras*** e, para uma base de dados grande e um valor de ***p*** moderadamente grande, pode se tornar inviável computacionalmente.
- No caso do k-Fold, quando **k=N** (i.e., número ***folds*** igual ao número total de exemplos), então o k-Fold se torna equivalente à estratégia **leave-one-out**, ou seja, ***p*** = 1.

Qual estratégia utilizar?

- O ***leave-p-out dá indicações mais claras*** de qual ordem usar, ***pois usa um maior número de pares treinamento e validação***, aumentando a confiabilidade da média e do desvio padrão do EQM.
  - Porém, ela é bastante custosa em relação ao tempo necessário para se executá-lo.
  - Portanto, deve-se utilizá-la com ***bases relativamente pequenas e pequenos valores para o parâmetro p***.
- Para bases maiores, o ***k-fold*** é uma opção melhor e mais eficiente do que o ***holdout*** e menos custosa do que o ***leave-p-out***.
- Para bases muito grandes, o ***holdout*** dá boas indicações sobre qual ordem utilizar.
  - A probabilidade dos conjuntos de treinamento e validação obtidos com o ***holdout*** não serem ***representativos*** é inversamente proporcional ao tamanho do conjunto original.

Validação cruzada para encontrar o grau do polinômio aproximador



- Para exemplificar o uso das estratégias de validação cruzada para encontrar o grau ideal do polinômio aproximador, vamos usar a seguinte função observável

$$y_{noisy} = y + w,$$

onde y é a função objetivo e w é o ruído, o qual tem amostras retiradas de uma distribuição Gaussiana com média zero e variância unitária.

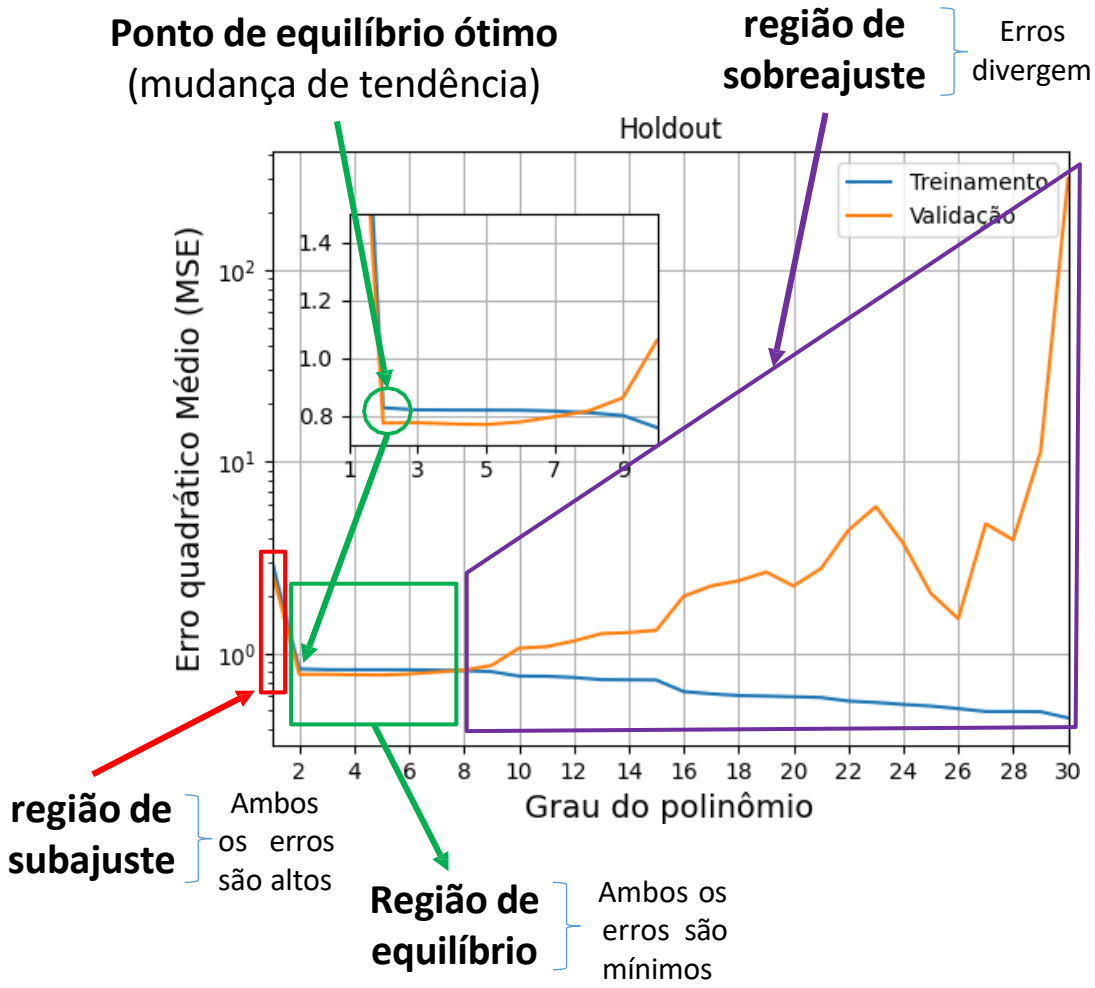
- A função objetivo é um polinômio de segundo grau definido como

$$y = 2 + x + 0.5x^2,$$

onde x é o atributo, o qual varia entre -3 a 3.

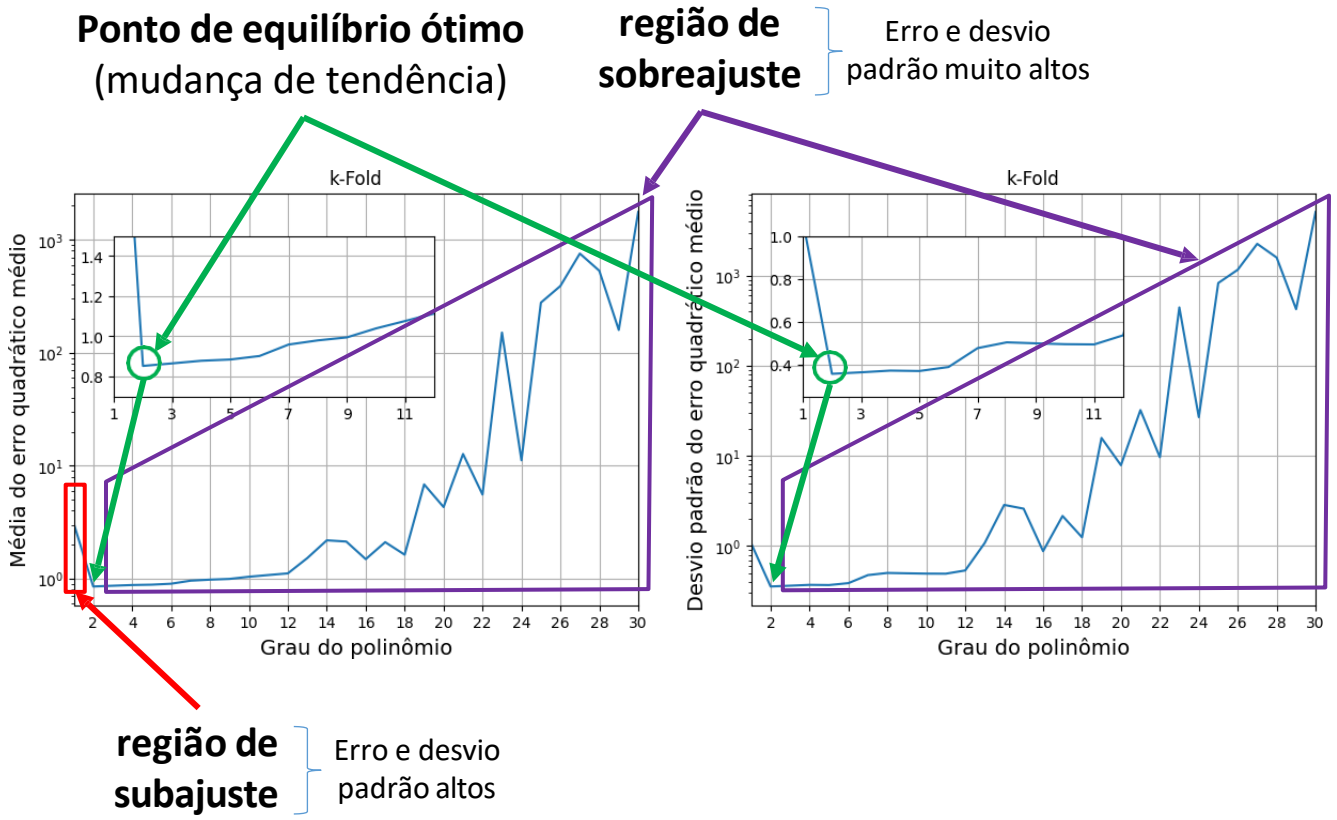
Exemplo: validacao_cruzada.ipynb

Usando *holdout* para encontrar o grau do polinômio aproximador



- Divisão: 70% para o conjunto de treinamento e 30% para o conjunto de validação.
- Tempo médio para validação cruzada *holdout* com N = 100 é de ≈ 150 [ms].
- Erro de treinamento ***diminui*** conforme o grau do polinômio aumenta.
- Erro de validação ***aumenta*** conforme o grau do polinômio aumenta.
- Qual grau escolher?
  - Valor para o qual ***ambos os erros sejam mínimos*** (balanço entre flexibilidade e capacidade de generalização) e que tenha ***menor complexidade computacional***.

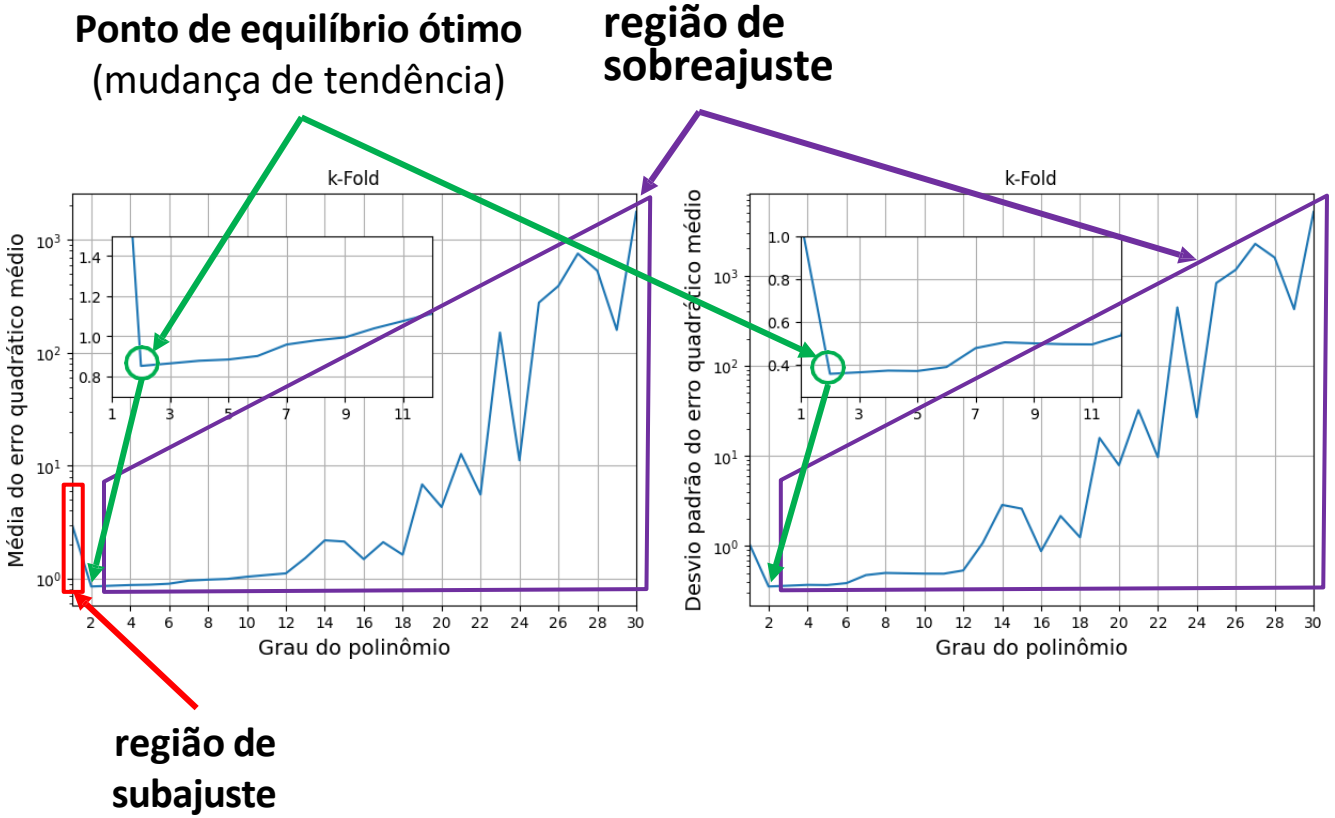
Usando k-fold para encontrar o grau do polinômio aproximador



- k = 10 *folds*: 10 treinamentos com 9 *folds* para treinamento e 1 para validação.
- Os gráficos mostram a média e o desvio padrão do EQM de validação para as 10 etapas de treinamento para cada grau avaliado.
- A média e o desvio padrão do EQM diminuem, passando pelo ponto de equilíbrio, e depois aumentam com o grau do polinômio.
- Qual grau escolher?
  - Valor onde ***ambos, média e desvio padrão do EQM, sejam mínimos*** e que tenha ***menor complexidade computacional***.

* Tempo médio para validação cruzada k-*fold* com N = 100 e k = 10 exemplos é de ≈ 1.5 [s].

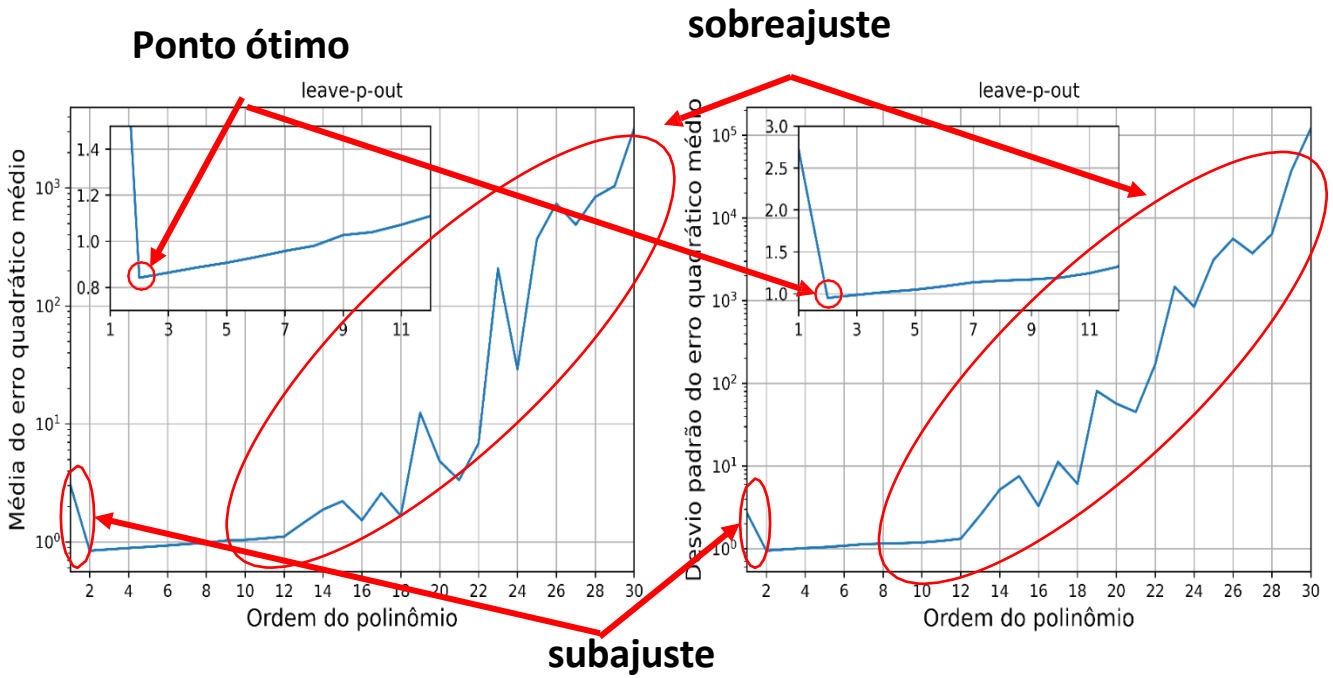
Usando k-fold para encontrar o grau do polinômio aproximador



- Conforme o modelo se sobreajusta aos dados de treinamento, o ***desvio padrão do erro de validação aumenta devido à redução de sua capacidade de generalização.***
- Ou seja, o modelo aprendido se distancia muito do comportamento geral dos dados.

- Modelos ***muito flexíveis*** (mais do que o necessário) apresentam desvios padrão do erro de treinamento muito baixo e do erro de validação muito alto, indicando ***sobreajuste***.
- Modelos pouco flexíveis (menos do que o necessário) têm ambos os desvios padrão dos erros altos, indicando ***subajuste***.

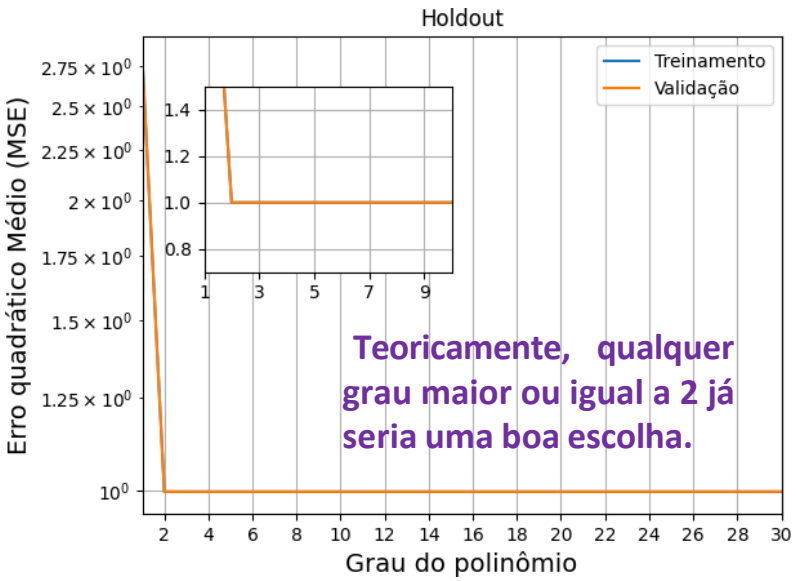
Usando leave-p-out para encontrar o grau do polinômio aproximador

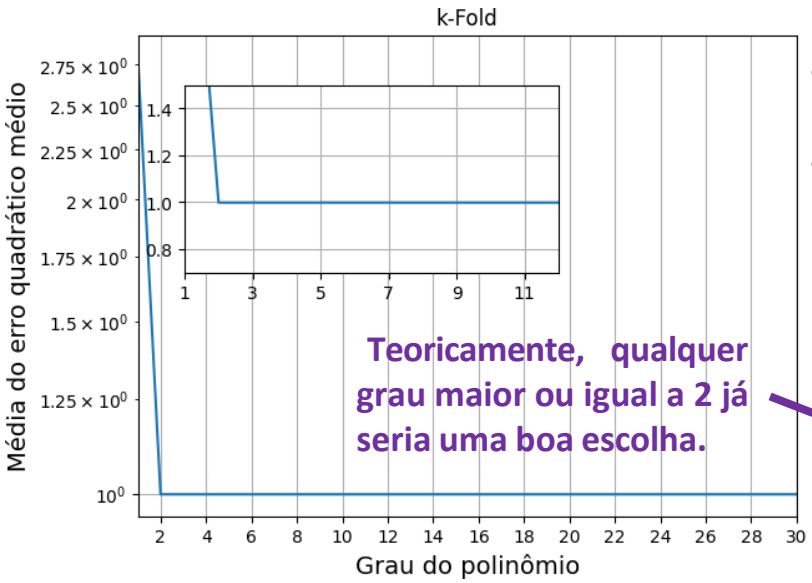


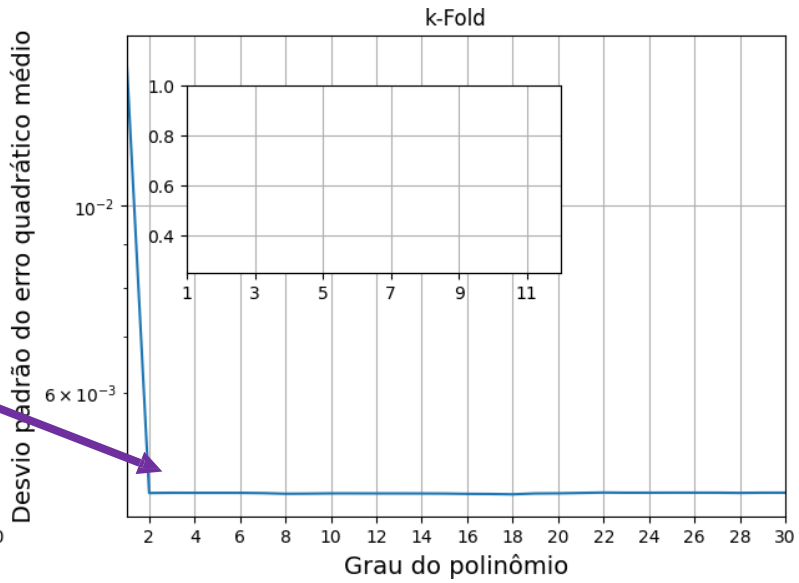
- Com p = 2 temos 4950 combinações possíveis com 98 exemplos para treinamento e 2 para validação.
- Os gráficos mostram a média e o desvio padrão do EQM de validação para as 4950 etapas de treinamento e validação para cada grau avaliado.
- A média e o desvio padrão do EQM diminuem, passando pelo ponto de equilíbrio, e depois aumentam com o grau do polinômio.
- Qual grau escolher?
  - Valor onde ***ambos, média e desvio padrão do EQM, sejam mínimos*** e que tenha ***menor complexidade computacional***.

* Tempo médio para validação cruzada leave-p-out com N = 100 e p = 2 é de ≈ 5 [m].

Qual grau escolher quando vários são possíveis?







- Observem as figuras.
- ***Qual grau devemos escolher quando os erros (holdout) ou a média e o desvio padrão dos erros (k-fold) são mínimos e praticamente constantes para vários graus de polinômio?***
  - Isso ocorre quando o número de exemplos é muito maior do que a flexibilidade (i.e., grau) do modelo.

Qual grau escolher quando vários são possíveis?

- A resposta é aplicar a ***navalha de Occam***.
- A ***navalha de Occam*** é um princípio lógico que sugere que, ***entre várias explicações igualmente plausíveis*** para um conjunto de observações, a ***mais simples deve ser preferida***.
  - Ou seja, deve-se ***preferir explicações mais simples às mais complexas***.
- Portanto, usando a ***navalha de Occam*** escolhemos a ***função hipótese polinomial com menor grau*** (i.e., menos complexa), ***mas que se ajusta bem ao comportamento geral dos dados***.
  - Ou seja, escolhemos o modelo mais simples em termos de quantidade de cálculos, mas que possua uma boa capacidade de generalização.

Para casa

- Leiam o material sobre curvas de aprendizado:
  - Usadas para avaliar:
    - Qual é o ***melhor nível de complexidade de um modelo.***
    - O quanto o ***modelo se beneficia de mais dados.***
    - A ***otimização dos hiperparâmetros*** de um modelo.
  - https://github.com/luiz10ml/tp555-ml/blob/main/slides/TP555_Curvas_de_Aprendizado.pdf

Regularização: penalizando a complexidade dos modelos

- Anteriormente, nós vimos como escolher o melhor modelo de regressão utilizando ***validação cruzada*** ou ***curvas de aprendizado***.
  - Em ambos os casos, escolhemos o modelo ***menos complexo***, ***mas que generaliza bem***.
- Uma abordagem alternativa é ***minimizar conjuntamente o erro e a complexidade da função hipótese***.
- Essa abordagem combina ***medidas de erro e de complexidade em uma única função de erro***, possibilitando que encontremos uma ***função hipótese*** com
  - a complexidade/flexibilidade ideal,
  - os pesos que minimizam o erro.

Regularização: penalizando a complexidade dos modelos

- Existem duas técnicas que seguem essa abordagem:
  - **Regularização**: ***penaliza funções hipótese muito complexas***, ou seja, muito flexíveis.
  - **Early-stopping**: encerra o treinamento de ***algoritmos iterativos*** (e.g., gradiente descendente) quando o erro de validação for o menor possível
    - Chamado de ***regularização temporal***.
- O objetivo das duas técnicas é deixar o modelo ***mais regular*** (i.e., menos complexo) de tal forma que ele ***não se sobreajuste*** ao conjunto de treinamento.

Regularização: penalizando a complexidade dos modelos

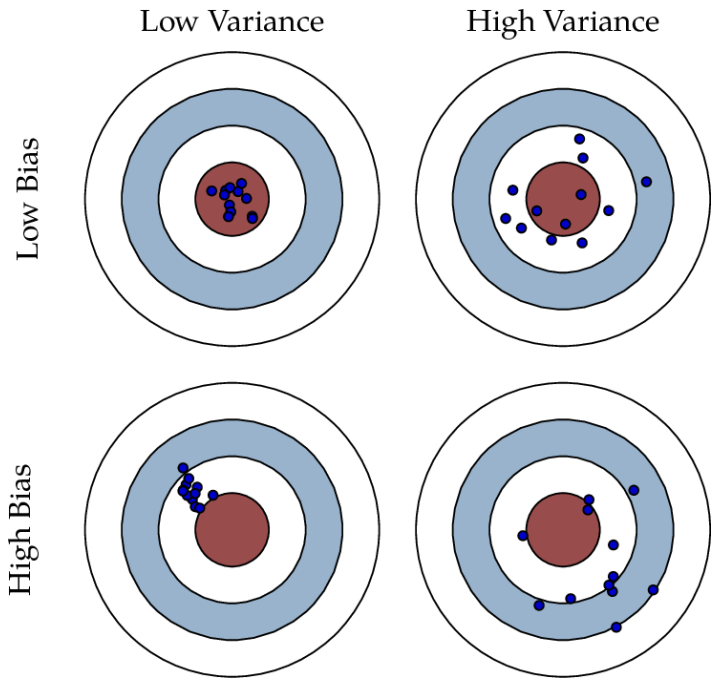
- Um claro sinal de um modelo que se ***sobreajustou*** ***aos dados de treinamento***, são ***pesos com magnitudes extremamente altas***.
- Portanto, a ideia por trás da ***regularização*** é ***restringir o aumento da magnitude dos pesos*** de forma a ***reduzir o risco de sobreajuste.***
- Para tanto, incorpora-se ao ***processo de treinamento*** ***restrições*** proporcionais a alguma ***norma*** do ***vetor de pesos***.

Regularização: penalizando a complexidade dos modelos

- ***Técnicas de regularização reduzem o risco de sobreajuste*** do modelo ao conjunto de treinamento, ***aumentando sua capacidade de generalização***.
- Quanto menos graus de liberdade o modelo tiver, mais difícil será para ele se ***sobreajustar*** aos dados de treinamento.
- A ***regularização*** força o algoritmo de aprendizado não apenas a capturar o ***comportamento geral por trás das amostras***, mas também a ***manter os pesos do modelo os menores possíveis***.

Exemplo: absolute_value_of_weights_when_model_overfits.ipynb

Regularização: penalizando a complexidade dos modelos



- Por ***restringir a magnitude dos pesos***, essas técnicas também são conhecidas como técnicas de ***shrinkage*** (i.e., redução ou encolhimento).
- Essas técnicas permitem diminuir a ***variância*** do modelo ao custo de introduzir algum ***viés***.
  - Encontrar uma ***relação de compromisso*** entre ***viés e variância*** permite que ***minimizemos o erro de generalização do modelo***.

Regularização: penalizando a complexidade dos modelos

- **OBS**.: Em geral, aplica-se o ***escalonamento de atributos*** quando se utiliza regularização.
  - ***Sem escalonamento***, um modelo pode atribuir ***pesos*** desproporcionalmente ***grandes aos atributos com escalas maiores***.
  - Isso é particularmente ***problemático para a regularização***, pois ***pesos grandes podem sofrer mais penalização*** simplesmente por sua magnitude maior.
  - Se os atributos não estiverem na mesma escala, os ***pesos desses atributos serão afetados de maneira diferente pela penalização***, o que pode levar a distorções nos resultados.
  - O ***escalonamento*** garante que todos os ***pesos sejam penalizados de forma justa e proporcional***.
- As principais técnicas de regularização são: *Rigde*, LASSO e *elastic-net*.

Regressão Ridge

- Ao invés de ***minimizarmos*** apenas o ***erro quadrático médio***, como fizemos antes, introduzimos um ***termo de penalização*** ***(ou regularização)*** proporcional à ***norma Euclidiana*** (i.e., a norma L2) do vetor de pesos

$$\min_{\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^{K+1\times 1}} (\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{a}\|^2 + \lambda\|\boldsymbol{a}\|_2^2)$$

onde $\lambda \geq 0$ é o ***fator de regularização***, $\boldsymbol{X}$ é a matriz de atributos, $\boldsymbol{a}$ é o vetor de pesos e $\|\boldsymbol{a}\|_2^2 = \sum_{i=1}^{K} a_i^2$.

- Se $\|\boldsymbol{a}\|_2^2$ aumenta, λ deve diminuir para que o erro seja minimizado.
- **OBS**.: O somatório inicia em 1 e não em 0, pois o peso a_0 não influencia na ***complexidade*** do modelo a qual se deve apenas à ordem do modelo.
  - a_0 apenas dita o ***deslocamento*** em relação ao eixo das ordenadas e não influência na complexidade da ***função hipótese***, pois não é multiplicado por nenhum atributo.

Regressão Ridge

- Reescrevendo o problema da regularização como um ***problema de otimização com restrição***, temos

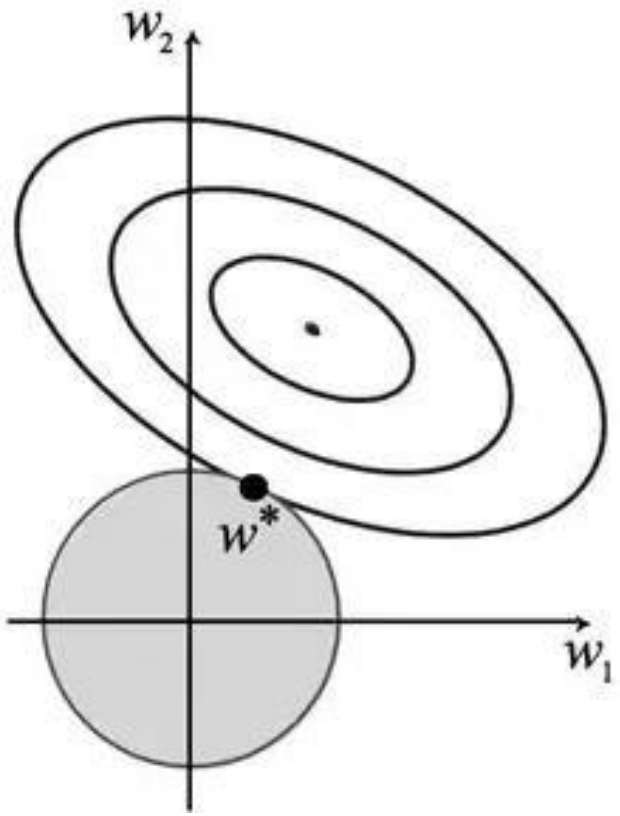
$$\min_{\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^{K+1\times 1}} \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{a}\|^2$$

$$\text{s. a. } \|\boldsymbol{a}\|_2^2 \leq c,$$

onde c restringe a magnitude dos pesos (***raio da região de factibilidade***) e é inversamente proporcional à λ.

- Observem que
  - Conforme o valor de c diminui, menor poderá ser a magnitude dos pesos, até que no limite, quando $c \to 0$, então $a_i \to 0, \forall i$.
  - Por outro lado, conforme c aumenta, maior poderá ser a magnitude dos pesos, até que no limite, quando $c \to \infty$, então a_i pode assumir qualquer valor.
  - Portanto, o parâmetro c (e, consequentemente, λ) ***controla o compromisso entre a redução do erro e a limitação da magnitude dos pesos***.

Regressão Ridge



- ***Região de factibilidade***: região com os possíveis valores que os pesos podem assumir.
- O parâmetro c dá o raio da região.
- O ***raio do círculo*** formando a região de factibilidade **é inversamente proporcional ao fator de regularização, λ**.
- A equação de ***erro regularizado***,

$$\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{a}\|^2 + \lambda\|\boldsymbol{a}\|_2^2,$$

continua sendo quadrática com relação aos pesos, e, portanto, a ***superfície de erro continua sendo convexa***.

Regressão Ridge

- Assim, podemos encontrar uma solução de ***forma fechada*** seguindo o mesmo procedimento que usamos para encontrar a ***equação normal***

$$\boldsymbol{a} = \left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} + \lambda\boldsymbol{I}'\right)^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}, \text{ onde } \boldsymbol{I}' = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

derivada do termo de regularização

matriz identidade com o primeiro elemento igual a 0, pois não penalizamos o peso de bias.

- **Observações**
  - Mesmo que a matriz $\boldsymbol{X}$ não tenha ***posto completo*** (i.e., matriz singular), a inversa na equação acima sempre existirá devido à adição do termo $\lambda\boldsymbol{I}'$.
  - Como a ***norma L2*** é ***diferenciável***, a regressão *Ridge* também pode ser resolvida iterativamente através do ***algoritmo do gradiente descendente***.
  - O ***termo de regularização*** deve ser ***adicionado apenas à função de erro durante o treinamento***. Depois que o modelo é treinado, a avaliação de seu desempenho não utiliza a regularização.

Regressão Ridge com gradiente descendente

$$J_e(\boldsymbol{a}) = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1}\big(y(i) - \hat{y}(i)\big)^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1}\big(y(i) - h(\boldsymbol{x}(i), \boldsymbol{a})\big)^2$$

$$J_e(\boldsymbol{a}) = \frac{1}{N}\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{a}\|^2 + \lambda\|\boldsymbol{a}\|_2^2$$

$$\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial a_K} = -\frac{2}{N}\sum_{i=0}^{N-1}[y(i) - \hat{y}(i)]\, x_k(i) + 2\lambda a_k, \qquad k = 1, \ldots, K$$

$$\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial a_0} = -\frac{2}{N}\sum_{i=0}^{N-1}[y(i) - \hat{y}(i)]\, x_0(i),$$

← Gradiente com relação aopeso de bias

$$\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial \boldsymbol{a}} = -\frac{2}{N}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{a}) + 2\lambda\boldsymbol{I}'\boldsymbol{a},$$

← **Equação geral** do vetor gradiente em formato matricial.

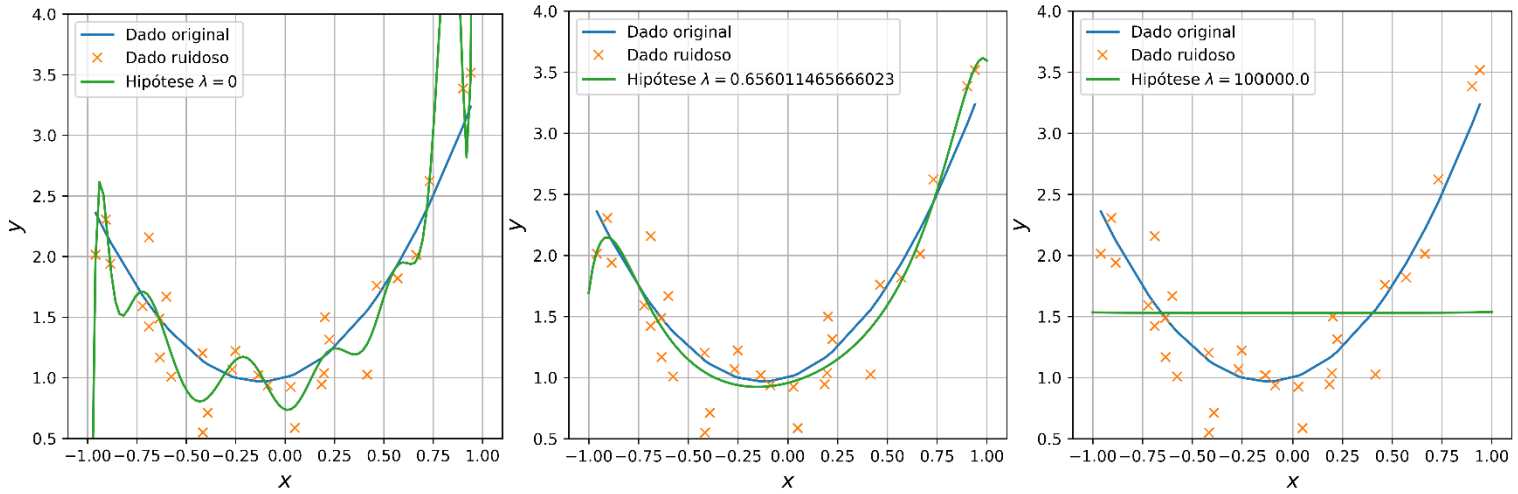
onde $\boldsymbol{I}'$ é uma ***matriz identidade*** de tamanho $K + 1$, onde o primeiro elemento é feito igual a 0, pois não queremos regularizar o peso de bias.

- A ***equação de atualização dos pesos*** é dada por

derivada do termo de regularização

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a} + 2\alpha\left[\frac{1}{N}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{a}) - \lambda\boldsymbol{I}'\boldsymbol{a}\right].$$

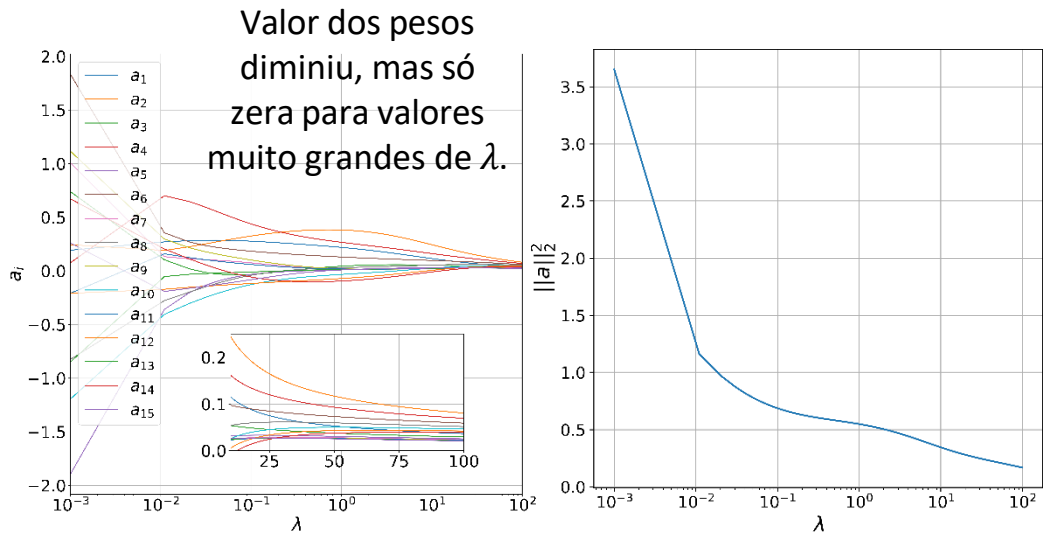
Regressão Ridge: Exemplo



- Com $\lambda = 0$, regressão Ridge se torna a regressão polinomial sem regularização.
- Conforme λ aumenta, o modelo não se "*contorce*" tanto e passa a se ajustar aos dados de treinamento.
- Se λ continuar aumentando, todos os pesos acabarão muito próximos de zero e o resultado será uma linha reta que passa pela ***média dos dados de treinamento (i.e., o valor do peso de bias)***.

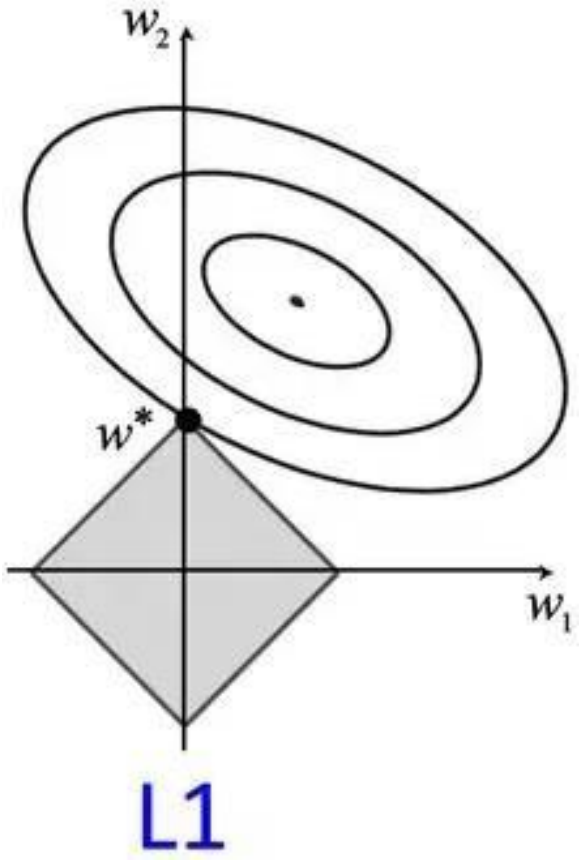
Exemplo: ridge_regression.ipynb

Regressão Ridge: Exemplo



- **O aumento de λ leva a hipóteses menos complexas.**
- Isso reduz a variância do modelo, mas aumenta seu bias, i.e., ele tende a ***subajustar***.
- Conforme λ aumenta, os pesos e a norma L2 do vetor de pesos diminuem.
- Utiliza-se técnicas de ***validação cruzada*** para encontrar o valor ideal de λ.

Regressão LASSO



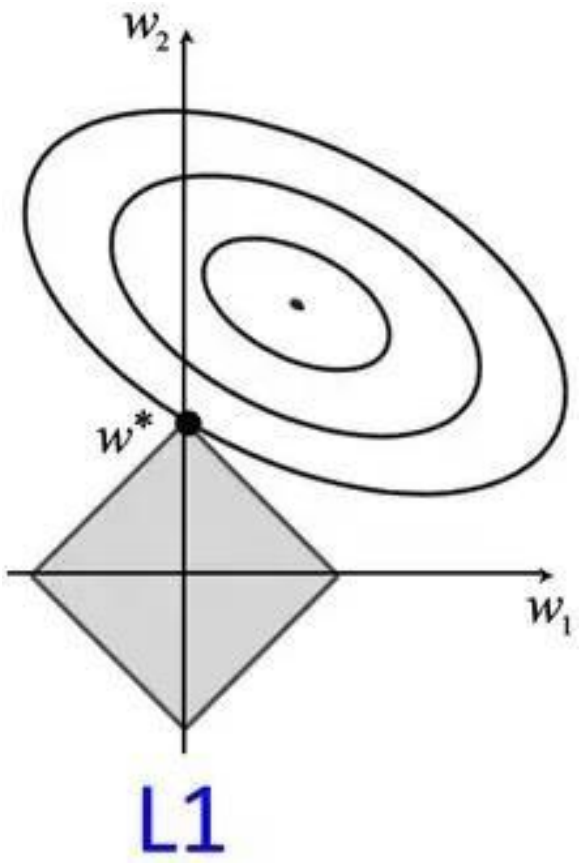
- A ***regressão LASSO*** (do inglês *Least Absolute Shrinkage and Selection Operator*) adiciona à função de erro um ***termo de penalização*** proporcional à **norma L1** do vetor de pesos.

$$\min_{\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^{K+1\times 1}} (\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{a}\|^2 + \lambda \|\boldsymbol{a}\|_1)$$

onde $\|\boldsymbol{a}\|_1 \sum_{i=1}^{K} |a_i|$ e $\lambda \geq 0$ ***é o fator de regularização***.

- A ***região factibilidade*** da norma L1 tem formato de uma diamante (quadrado rotacionado).

Regressão LASSO



- Podemos re-escrever o ***problema de regularização*** acima como um ***problema de otimização com restrição*** da seguinte forma

$$\min_{\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^{K+1\times 1}} \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{a}\|^2$$

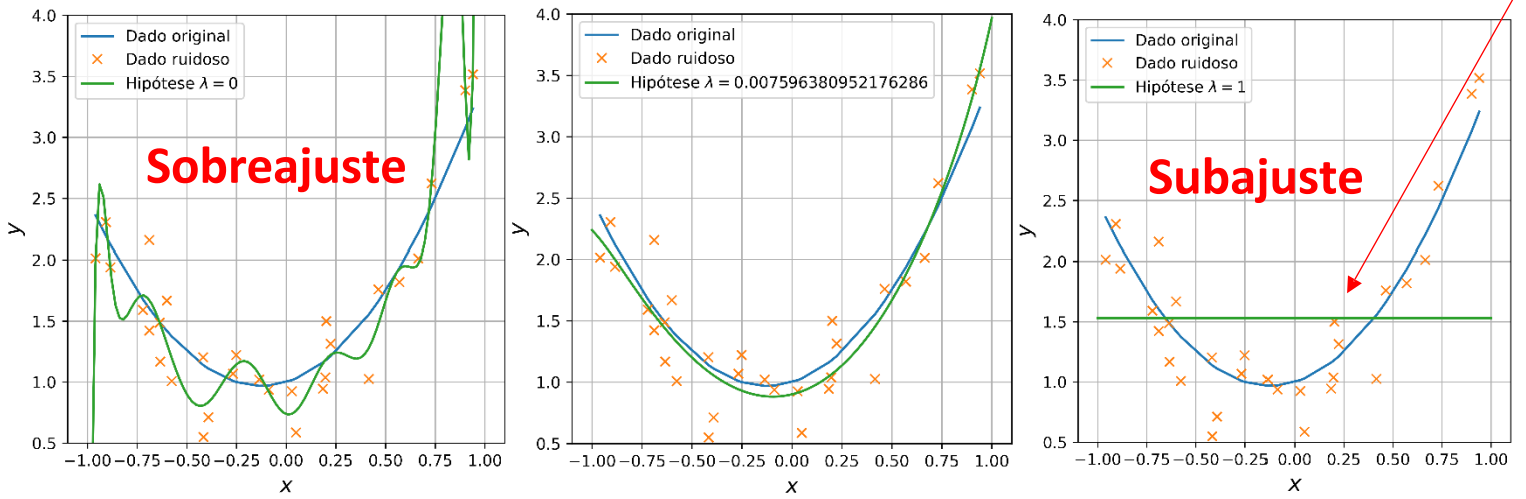
$$\text{s. a.} \|\boldsymbol{a}\|_1 \leq c,$$

onde c restringe a magnitude dos pesos e é ***inversamente proporcional à λ.***

- c restringe a ***área do quadrado*** e é igual a distância da origem até qualquer um dos vértices.
- **OBS**.: Assim como na regressão de Ridge, a_0 também não faz parte do cálculo da norma.

Regressão LASSO: Exemplo

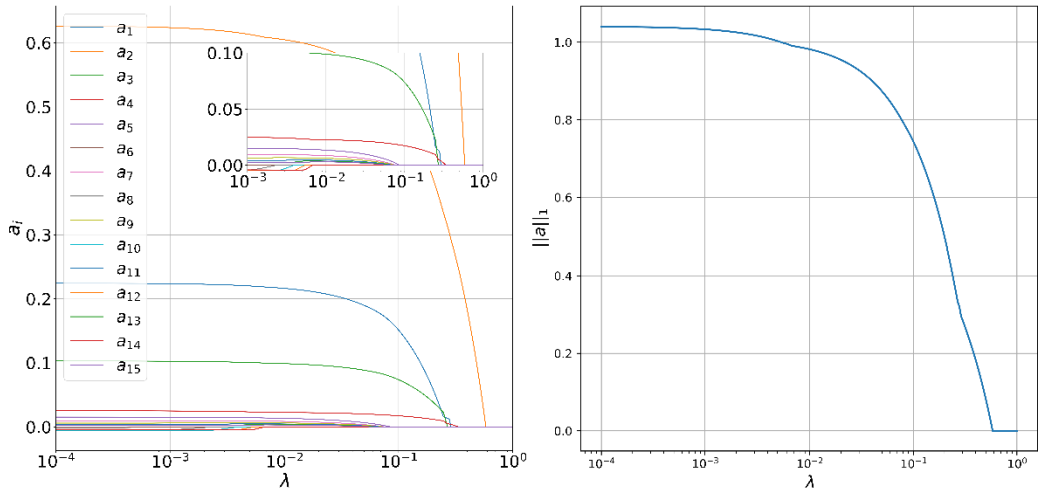
Valor dos pesos se torna igual a zero, restringindo a flexibilidade da hipótese a uma reta.



- Valores pequenos de λ fazem LASSO se comportar como regressão tradicional e valores muito grandes fazem os pesos serem anulados.
- A regularização com ***norma L1*** tem como ***vantagem*** a produção de ***modelos esparsos***.
  - Ou seja, vários elementos do vetor de pesos acabam sendo ***anulados***, ***indicando que os atributos correspondentes são irrelevantes*** para o processo de regressão.

Exemplo: lasso_regression.ipynb

Regressão LASSO: Exemplo



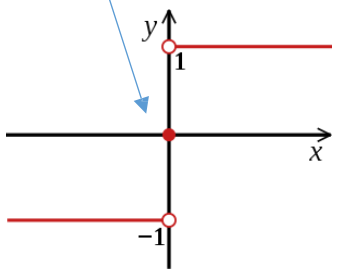
- Isso sugere a ocorrência implícita de um ***processo de seleção automática de atributos***, que leva a ***modelos*** mais ***regulares***, ou seja, ***menos complexos***.
- **Desvantagem**: como a ***norma L1*** não possui derivada no ponto $a_i = 0, \forall i$, o problema da minimização ***não possui solução em forma fechada, mas pode ser implementado com o GD***.
- Utiliza-se técnicas de validação cruzada para encontrar o valor ideal de λ.

Regressão LASSO com gradiente descendente

$$J_e(\boldsymbol{a}) = \frac{1}{N}\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{a}\|^2 + \lambda\|\boldsymbol{a}\|_1 = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1}\left(y(i) - \hat{y}(i)\right)^2 + \lambda\sum_{k=1}^{K}|a_k|$$

$$\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial a_k} = -\frac{2}{N}\sum_{i=0}^{N-1}[y(i) - \hat{y}(i)]x_k(i) + \lambda\ \text{sign}\ (a_k), \qquad k = 1, \ldots, K$$

indeterminação



$\frac{\partial|x|}{\partial x} = \text{sign}(x), \text{para } x \neq 0.$

$$\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial a_0} = -\frac{2}{N}\sum_{i=0}^{N-1}[y(i) - \hat{y}(i)]x_0(i)\,,$$

Gradiente com relação ao peso de bias

$$\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial \boldsymbol{a}} = -\frac{2}{N}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{a}) + \lambda\boldsymbol{I}'\text{sign}(\boldsymbol{a}),$$

Equação geral do vetor gradiente em formato matricial.

onde $\boldsymbol{I}'$ é uma ***matriz identidade*** de tamanho $K + 1$, onde o primeiro elemento é feito igual a 0 e *a* ***função sign*** ou ***signum*** é uma função matemática ímpar que extrai o sinal de um número real.

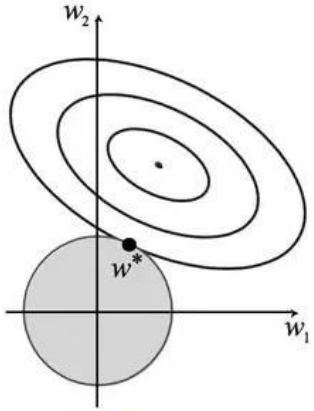
- A ***equação de atualização dos pesos*** é dada por

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a} + \alpha\left[\frac{2}{N}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{a}) - \frac{\lambda}{2}\boldsymbol{I}'\text{sign}(\boldsymbol{a})\right].$$

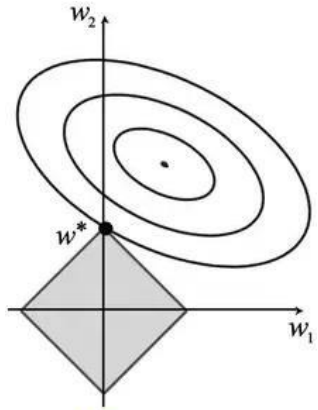
Implementações práticas consideram que sign(0) = 0.

Vantagem da regressão LASSO sobre Ridge

- A vantagem da regressão LASSO sobre a Ridge está na ***forma de quadrado da região de factibilidade*** criada pela penalização com a norma L1.
- Uma ***região de factibilidade em forma de diamante*** leva à ***eliminação de alguns dos pesos*** (i.e., os pesos são zerados).
  - A regressão LASSO tende a produzir modelos esparsos.
- Os pesos que são zerados são aqueles ***correspondentes aos atributos que são menos relevantes para a predição do modelo*** (ou seja, que não contribuem para a predição).
- Isso pode ser útil para ***reduzir a complexidade do modelo*** e ***melhorar sua capacidade de generalização*** e ***deixá-lo mais interpretável***.
- Além disso, a regressão LASSO também pode ser usada para ***seleção de recursos***, onde os ***atributos mais relevantes são selecionados automaticamente e os outros descartados***.



L2



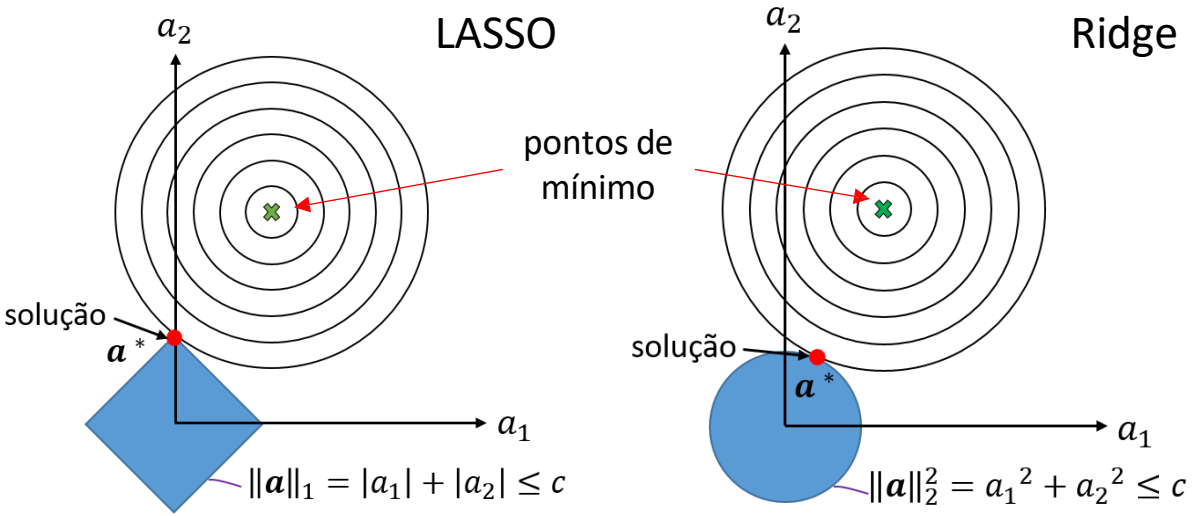
L1

Vantagem da regressão LASSO sobre Ridge

- A ***regressão Ridge*** não apresenta esta característica, pois ela ***tende a manter os pesos não nulos*** (i.e., os pesos nunca são totalmente anulados), produzindo ***modelos com pesos pequenos e distribuídos ao longo dos atributos***.
- Podemos também entender a diferença entre as regressões Ridge e LASSO ao compreender que:
  - A norma L2 ***penaliza (i.e., encolhe) mais fortemente pesos com magnitudes grandes e penaliza menos fortemente pesos com magnitudes pequenas*** (devido ao quadrado na norma L2).
  - Já a norma L1 ***penaliza agressivamente todos os pesos***, o que significa que a ***norma L1 tende a reduzir os pesos para zero de forma mais uniforme*** do que a norma L2 (devido a usar apenas o valor absoluto dos pesos).

Por que a regressão LASSO produz modelos esparsos?

- O quadrado azul representa o conjunto de pontos $\boldsymbol{a}$ no espaço de pesos bidimensional que tenham norma L1 menor do que c.
- A solução deve estar dentro do quadrado, o mais próximo do mínimo.



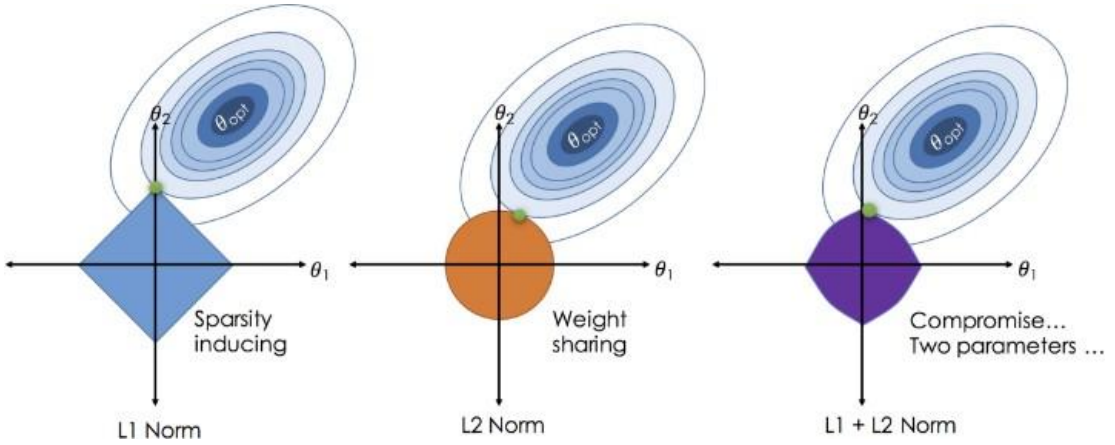
- O círculo azul representa o conjunto de pontos $\boldsymbol{a}$ no espaço de pesos bidimensional que tenham norma L2 menor do que c.
- A solução deve estar dentro do círculo, o mais próximo do mínimo.

- A figura mostra as ***curvas de nível*** da ***função de erro*** de um problema de regressão linear com dois pesos (a_1 e a_2) e as regiões do ***espaço de hipóteses*** onde as restrições L1 e L2 são válidas.
- A solução para ambos os métodos corresponde ao ponto, dentro da ***região de factibilidade mais próximo do ponto de mínimo*** da função de erro.
- É fácil ver que para uma posição arbitrária do mínimo, será comum que um ***vértice*** (ou cantos) do quadrado seja o ponto mais próximo do ponto de mínimo da função de erro.
- Os ***vértices*** na ***região de factibilidade*** da restrição L1 aumentam as chances de alguns pesos assumirem o valor zero, pois são eles que possuem valor igual a zero em alguma das dimensões (i.e., pesos).

Limitações

- Por não fazer ***seleção de atributos***, a regressão Ridge resulta em um modelo:
  - ***Com baixa interpretabilidade***: não se consegue determinar quais atributos são e não são importantes para a predição.
  - ***Complexo***: por ***manter todos os pesos no modelo, necessita de uma maior quantidade de cálculos*** para realizar predições, se tornando computacionalmente intensiva quando se lida com um grande número de atributos.
- A regressão LASSO:
  - ***Pode não selecionar o melhor atributo quando há forte correlação positiva*** entre dois ou mais atributos.
  - Se o ***fator de regularização não for ideal***, pode levar a um ***modelo muito simples*** que não inclui todas os atributos importantes (devido à seleção de atributos).
  - ***Numericamente instável*** para valores pequenos do ***fator de regularização, principalmente para casos subdeterminados, i.e., K > N.***
- Nesses casos, a regressão Elastic-Net é mais indicada, pois minimiza as limitações das duas regressões.

Elastic-Net



O hiperparâmetro κ dita a relação de compromisso entre as duas regularizações.

- ***Elastic-net*** é uma regularização que combina as regressões Ridge e LASSO de forma a ***resolver as limitações de ambas***.
- Realiza ***seleção automática de atributos*** e ***regularização*** simultaneamente.
- Nada mais é do que uma ***combinação linear*** entre as penalizações baseadas nas normas L1 e L2 do vetor de pesos.

$$\min_{\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^{K+1\times 1}} \left(\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\phi a}\|^2 + \lambda[\kappa\|\boldsymbol{a}\|_1 + (1-\kappa)\boldsymbol{a}_2^2]\right),$$

onde $\kappa \in [0, 1]$ é o ***fator de elasticidade*** entre as duas normas, ou seja, estabelece uma ***relação de compromisso entre as duas normas***.

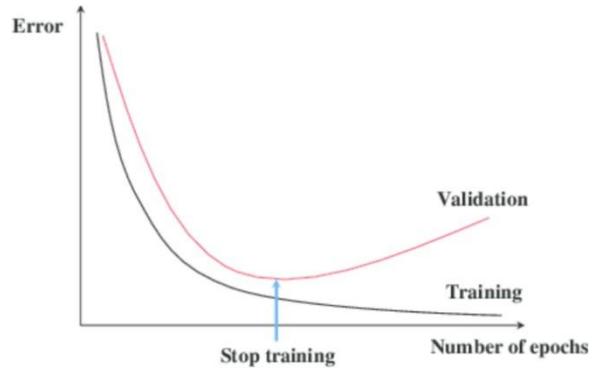
- Quando κ = 0, é equivalente à regressão Ridge, e quando κ = 1, ela é equivalente a regressão LASSO.
- A seleção dos hiperparâmetros κ e λ pode ser feita por meio de ***validação cruzada***.

Exemplo: elastic_net_regression.ipynb

Quando utilizar cada tipo de regressão?

- **Regressão Ridge**: é um bom começo. No entanto, se você suspeitar que apenas alguns atributos são realmente úteis, você deve preferir LASSO ou Elastic-Net.
- **Regressão LASSO**: boa para ***seleção automática de atributos***.
  - No entanto, pode se comportar erraticamente se o ***número de atributos, K, for maior que o número de exemplos de treinamento, N***. Nesse caso, ele ***encontra no máximo N pesos diferentes de zero***, mesmo que os *K* atributos sejam relevantes.
  - Se houverem ***atributos fortemente correlacionados entre si***, ela ***seleciona um deles aleatoriamente e ignora os demais***, o que não é bom para a interpretação do modelo.
  - Nestes casos, deve-se usar a regressão Elastic-Net.
- **Regressão Elastic-Net**: é mais versátil que as anteriores, pois o fator de elasticidade, κ, pode ser ajustado de forma a encontrar uma relação de compromisso entre as normas L1 e L2.
  - Quando há vários atributos correlacionados entre si, a regressão LASSO provavelmente escolherá um deles aleatoriamente, enquanto o Elastic-Net provavelmente ***escolherá todos***, facilitando a ***interpretação do modelo***.
  - Uma proporção de 50% (i.e., $\kappa = 0.5$) entre as penalizações L1 e L2 é uma boa escolha inicial para esse parâmetro.

Early-stopping: Parada antecipada



- O algoritmo do ***gradiente descendente*** tende a aprender modelos cada vez mais ***complexos*** à medida que o número de épocas aumenta.
  - Ou seja, ele se ***sobreajusta*** ao conjunto de treinamento ao longo do tempo.
- Uma forma de se ***regularizar*** algoritmos de ***aprendizado iterativo***, como o ***gradiente descendente***, é interromper seu treinamento assim que o ***erro de validação*** comece a crescer sistematicamente.
- Essa abordagem é chamada de ***early-stopping*** e pode ser vista como uma ***regularização temporal***.
- Assim como as outras abordagens, ela tem o objetivo de evitar o ***sobreajuste*** de um modelo.
- Ao se ***regularizar no tempo***, a complexidade do modelo pode ser controlada, melhorando sua ***generalização***.
- Mas como saber quando interromper o treinamento?
  - Ou seja, qual é o critério de parada?

Early-stopping: critério de parada

- Existem duas estratégias para se definir o critério de parada:
  - Interromper o treinamento quando o valor do ***erro de validação*** aumentar por ***P*** épocas sucessivas, sendo o parâmetro ***P*** chamado de ***paciência***.
    - **Problema**: como o erro de validação pode oscilar bastante (e.g., SGD) e apresentar um comportamento pouco previsível, nem sempre é fácil se desenvolver detectores automáticos de mínimos e encerrar o treinamento.
  - Outra estratégia é permitir que o treinamento prossiga por um determinado número de épocas, mas sempre armazenando os pesos associados ao ***menor erro de validação***. Ao final do treinamento, os ***pesos associados ao menor erro de validação são considerados*** para realizar predições com o modelo.

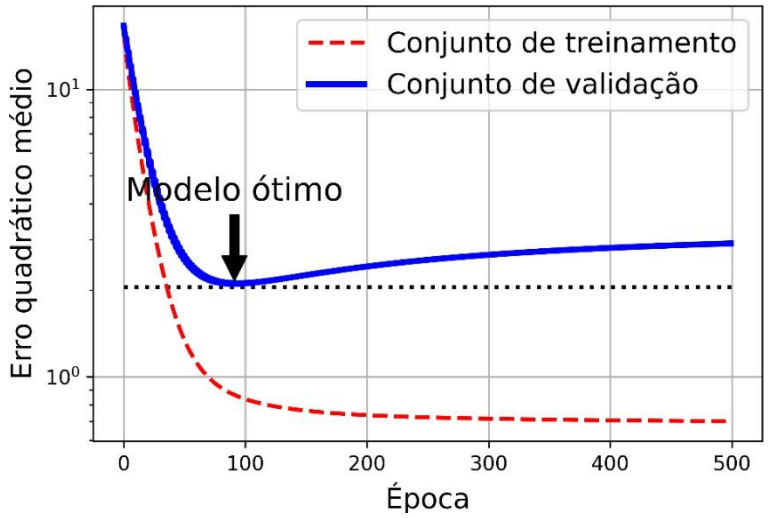
Early-stopping: exemplo

- A figura mostra os erros de treinamento e validação de um modelo de regressão polinomial com grau igual a 90 treinado usando-se o GDE com apenas 70 amostras.
- A função observável é dada por

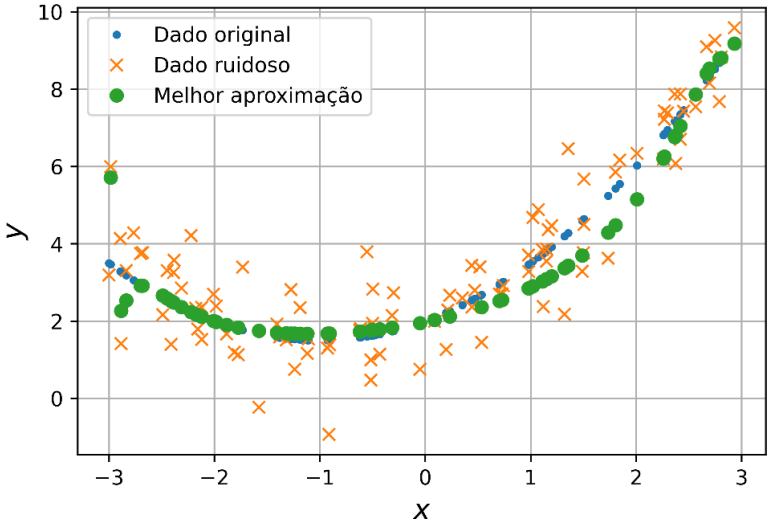
$$y_{\text{noisy}} = 2 + x + 0.5x^2 + w,$$

onde $x \sim U(-3,3)$ e $w \sim N(0,1)$

Função verdadeira



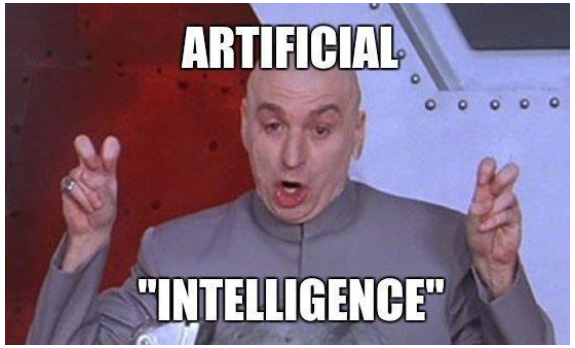
- A ***ordem do modelo é muito maior do que a ordem da função verdadeira*** (alta flexibilidade), além de ser maior do que o número de amostras de treinamento (sobreajuste).
- À medida que as épocas passam, o algoritmo aprende e seu erro de treinamento diminui, juntamente com o erro de validação.
- No entanto, após aproximadamente 100 épocas, o erro de validação para de diminuir e começa a crescer.
- Isso indica que o modelo começou a ***sobreajustar*** aos dados de treinamento.
- Com a parada antecipada, usa-se os pesos que resultaram no menor erro de validação ao longo de todo o treinamento, garantindo que o modelo apresente uma boa ***generalização***.

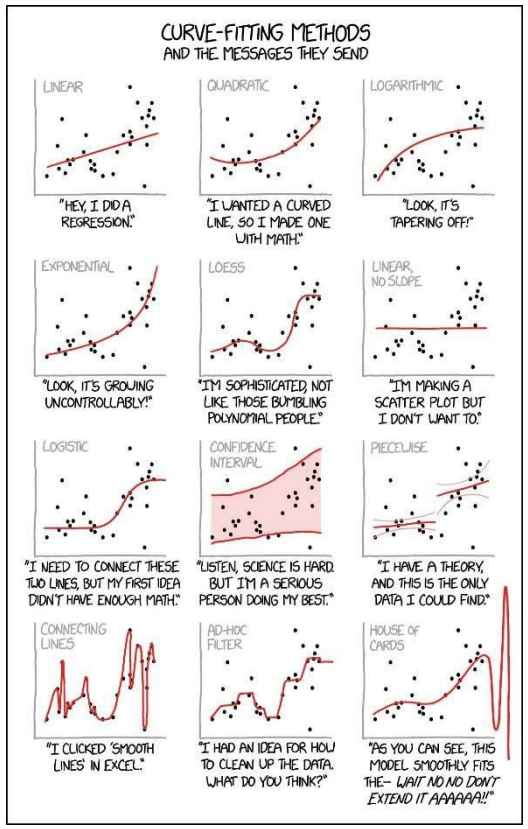


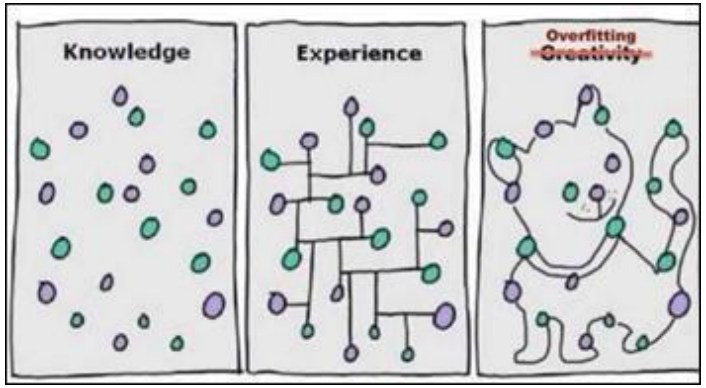
Exemplo: early_stopping.ipynb

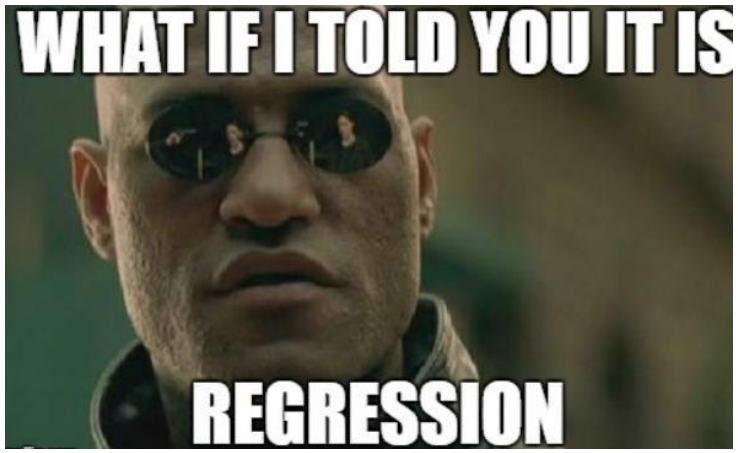
Obrigado!


THIS IS YOUR MACHINE LEARNING SYSTEM?
YUP! YOU POUR THE DATA INTO THIS BIG PILE OF LINEAR ALGEBRA, THEN COLLECT THE ANSWERS ON THE OTHER SIDE.
WHAT IF THE ANSWERS ARE WRONG?
JUST STIR THE PILE UNTIL THEY START LOOKING RIGHT.
DATA
ANSWERS


ARTIFICIAL
"INTELLIGENCE"


CURVE-FITTING METHODS
AND THE MESSAGES THEY SEND
LINEAR
"HEY, I DID A REGRESSION."
QUADRATIC
"I WANTED A CURVED LINE, SO I MADE ONE WITH MATH."
LOGARITHMIC
"LOOK, IT'S TAPERING OFF!"
EXPONENTIAL
"LOOK, IT'S GROWING UNCONTROLLABLY!"
LOESS
"I'M SOPHISTICATED, NOT LIKE THOSE BUMBLING POLYNOMIAL PEOPLE."
LINEAR, NO SLOPE
"I'M MAKING A SCATTER PLOT BUT I DON'T WANT TO."
LOGISTIC
"I NEED TO CONNECT THESE TWO LINES, BUT MY FIRST IDEA DIDN'T HAVE ENOUGH MATH."
CONFIDENCE INTERVAL
"LISTEN, SCIENCE IS HARD. BUT I'M A SERIOUS PERSON DOING MY BEST."
PIECEWISE
"I HAVE A THEORY, AND THIS IS THE ONLY DATA I COULD FIND."
CONNECTING LINES
"I CLICKED 'SMOOTH LINES' IN EXCEL."
AD-HOC FILTER
"I HAD AN IDEA FOR HOW TO CLEAN UP THE DATA. WHAT DO YOU THINK?"
HOUSE OF CARDS
"AS YOU CAN SEE, THIS MODEL SMOOTHLY FITS THE— WAIT NO NO DON'T EXTEND IT AAAAAA!!"

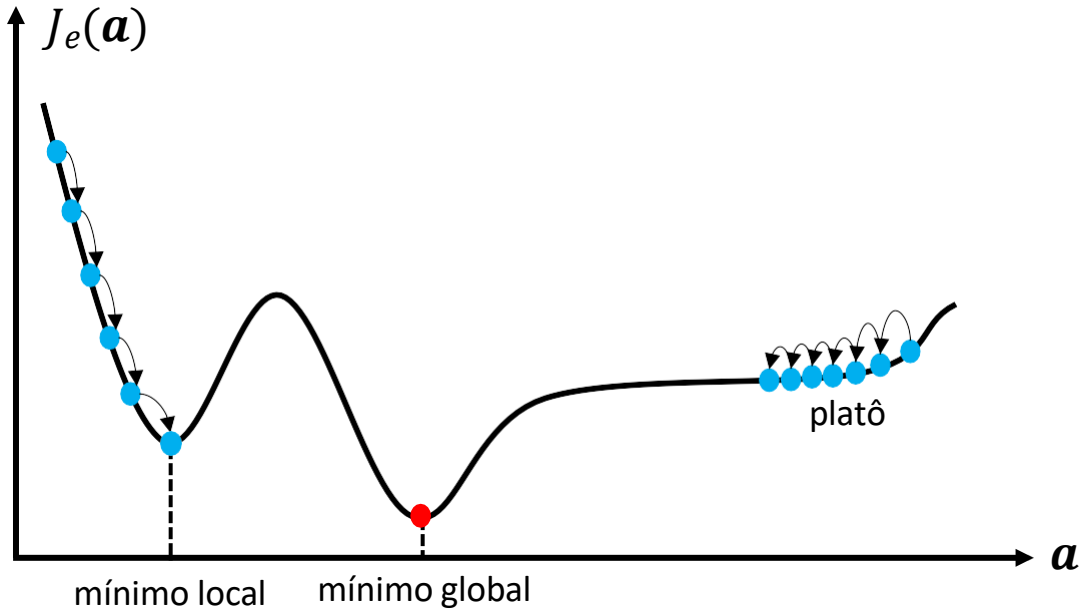

Knowledge
Experience
Overfitting
Creativity

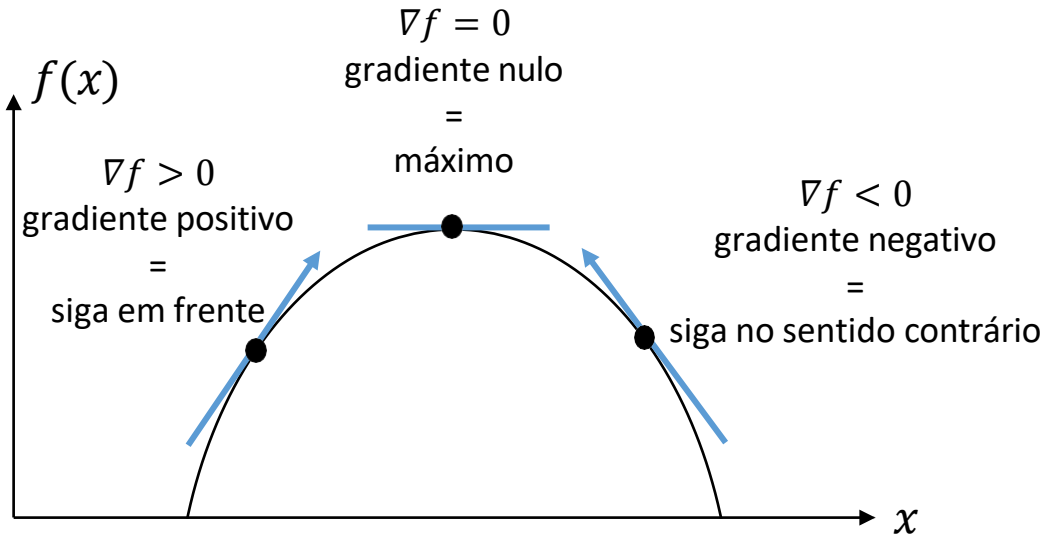

WHAT IF I TOLD YOU IT IS
REGRESSION

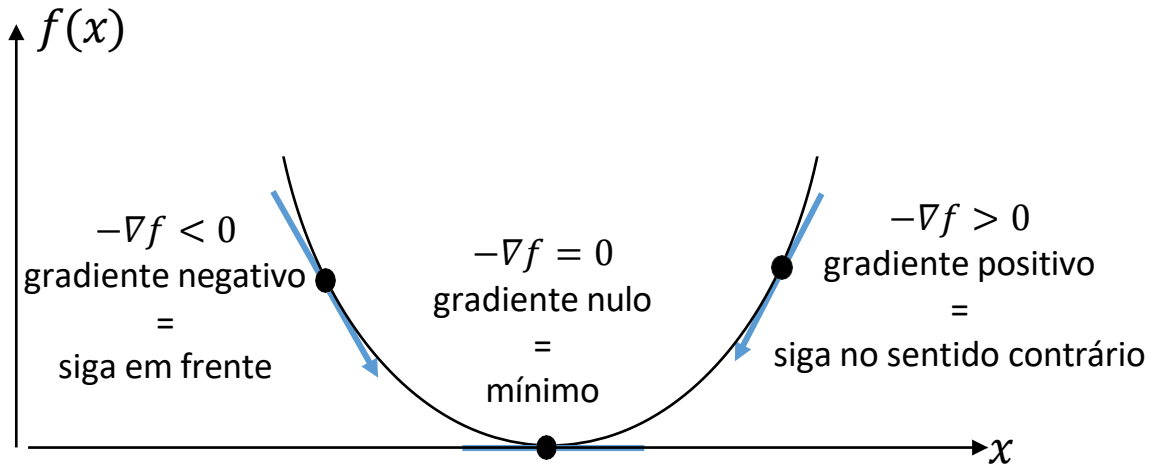

WHOA
I KNOW LINEAR REGRESSION

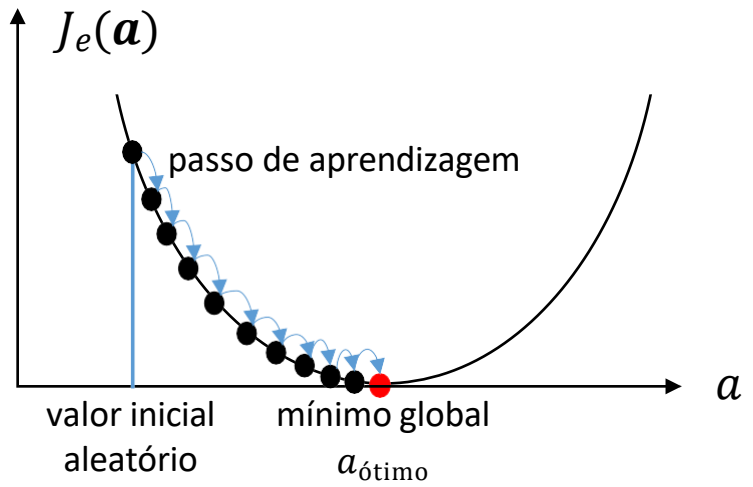

LETS LEARN
REGRESSION
memegenerator.net

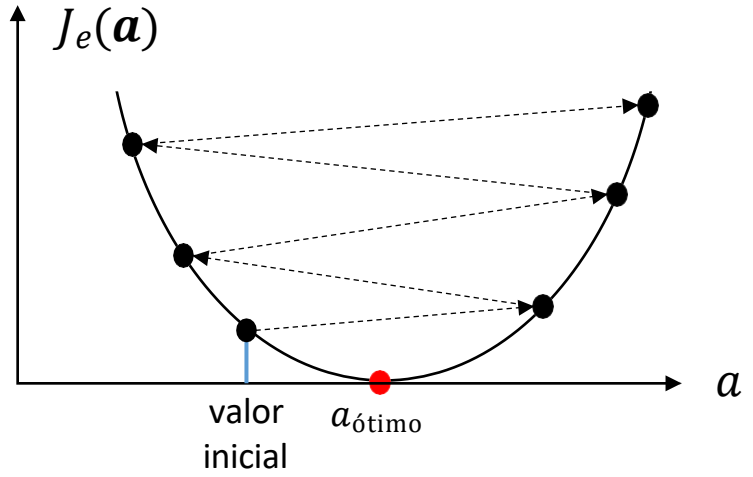
FIGURAS

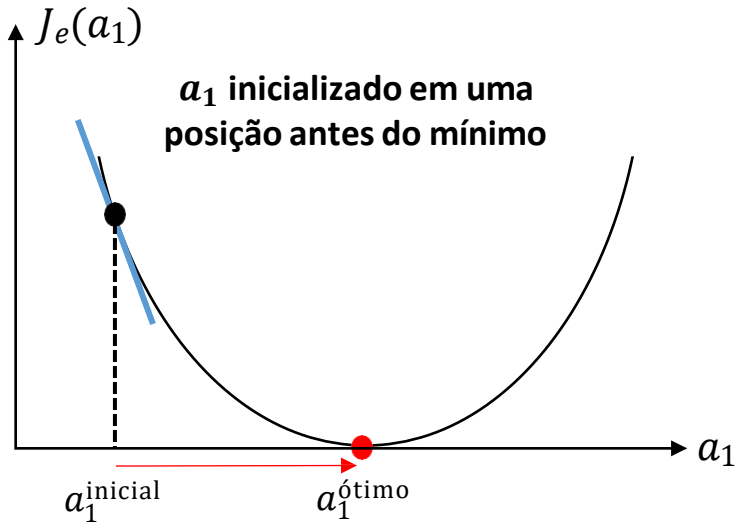

$J_e(\boldsymbol{a})$
platô
$\boldsymbol{a}$
mínimo local
mínimo global


$f(x)$
$\nabla f = 0$
gradiente nulo
=
máximo
$\nabla f > 0$
gradiente positivo
=
siga em frente
$\nabla f < 0$
gradiente negativo
=
siga no sentido contrário
x


$f(x)$
$-\nabla f < 0$
gradiente negativo
=
siga em frente
$-\nabla f = 0$
gradiente nulo
=
mínimo
$-\nabla f > 0$
gradiente positivo
=
siga no sentido contrário
x

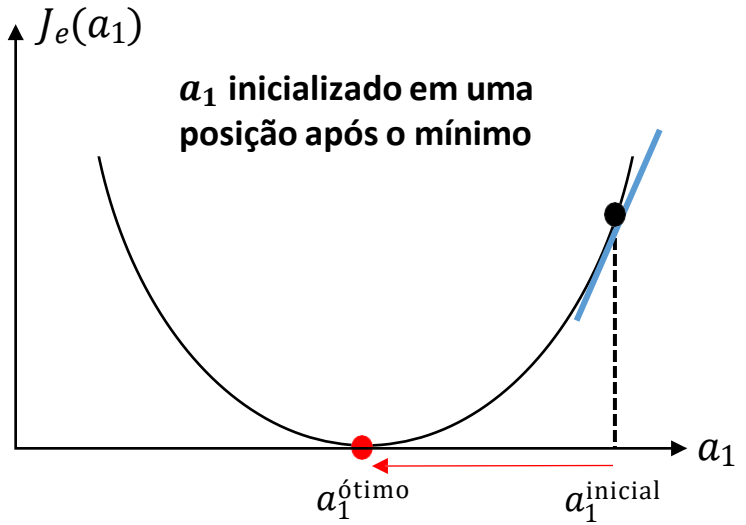

$J_e(\boldsymbol{a})$
passo de aprendizagem
a
valor inicial
aleatório
mínimo global
$a_{\text{ótimo}}$


$J_e(\boldsymbol{a})$
a
valor
inicial
$a_{\text{ótimo}}$



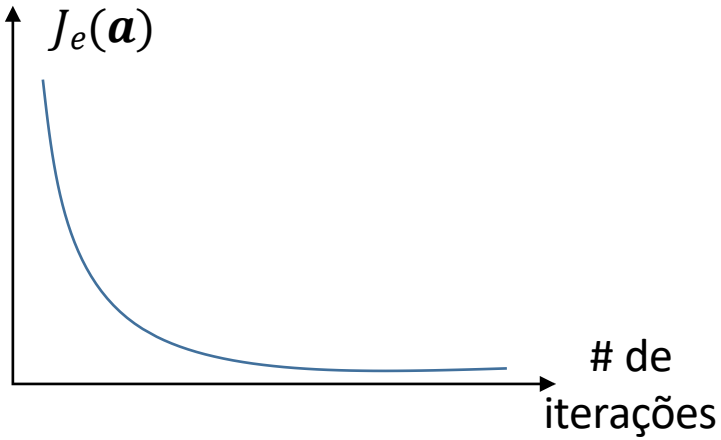
gradiente negativo: $a_1 = a_1^{\text{inicial}} + \alpha \nabla J_e(a_1)$

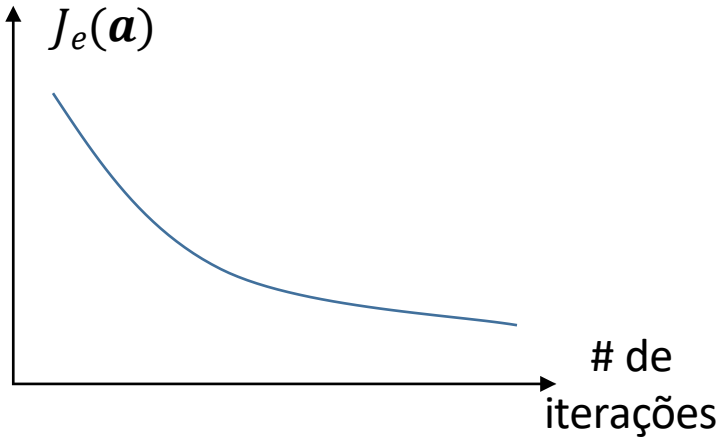
a_1 aumenta e se aproxima do mínimo

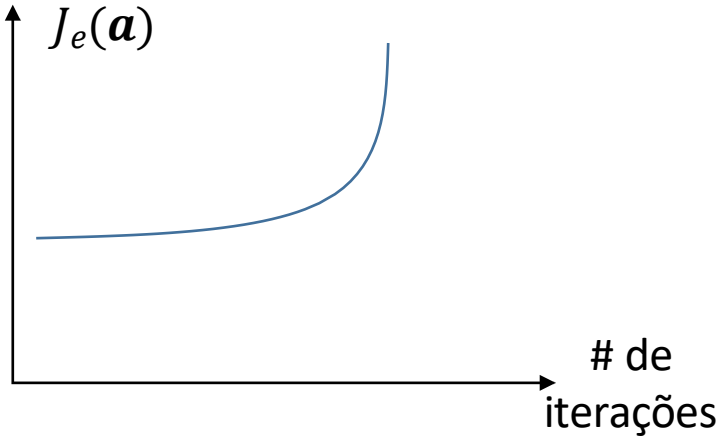


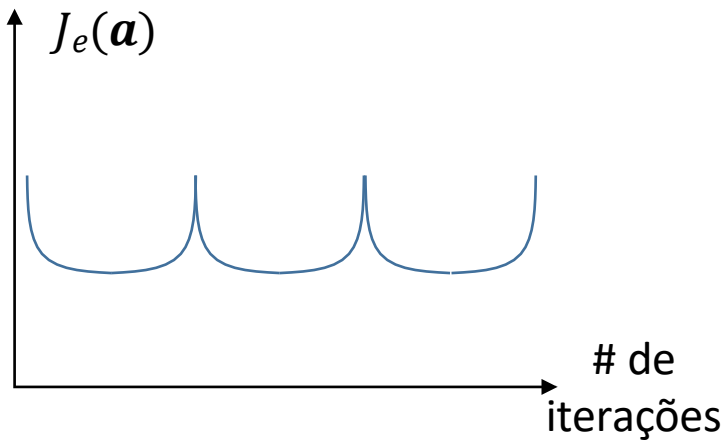
gradiente positivo: $a_1 = a_1^{\text{inicial}} - \alpha \nabla J_e(a_1)$

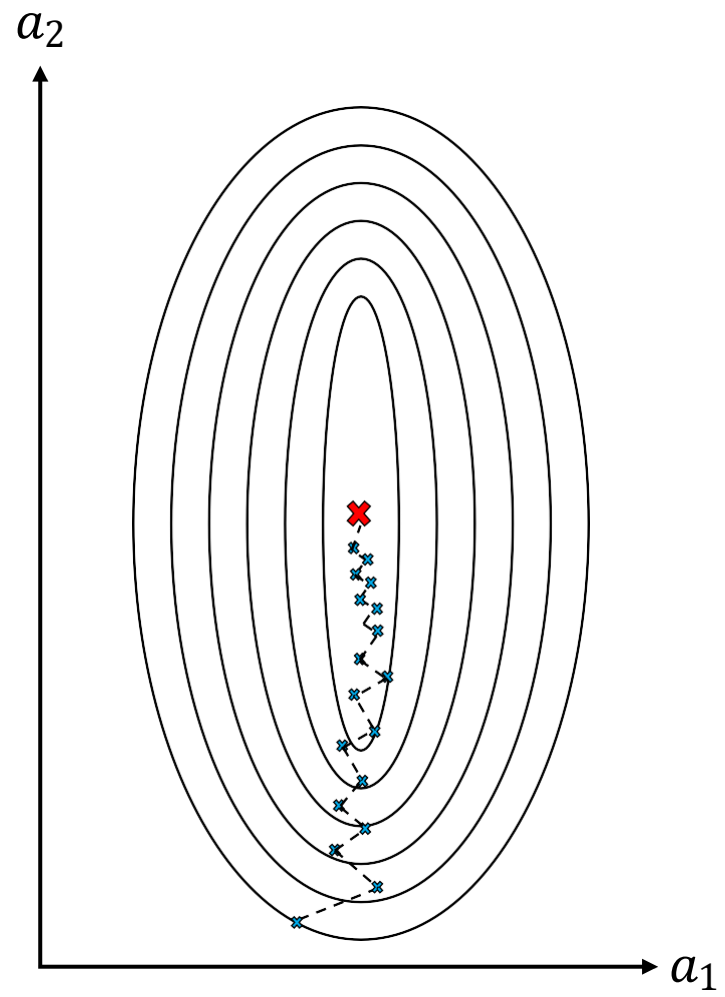
a_1 diminiu e se aproxima do mínimo

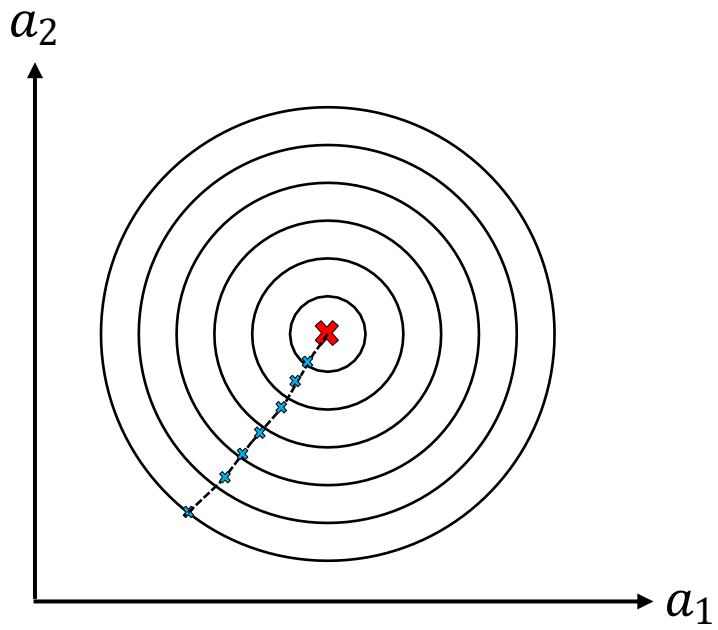

$J_e(\boldsymbol{a})$
de
iterações

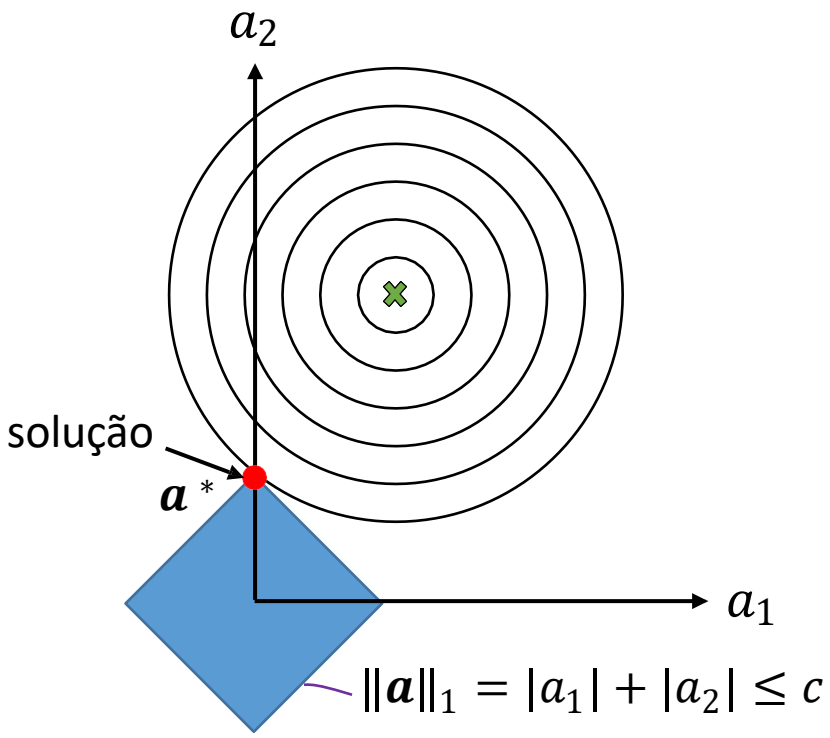

$J_e(\boldsymbol{a})$
de
iterações

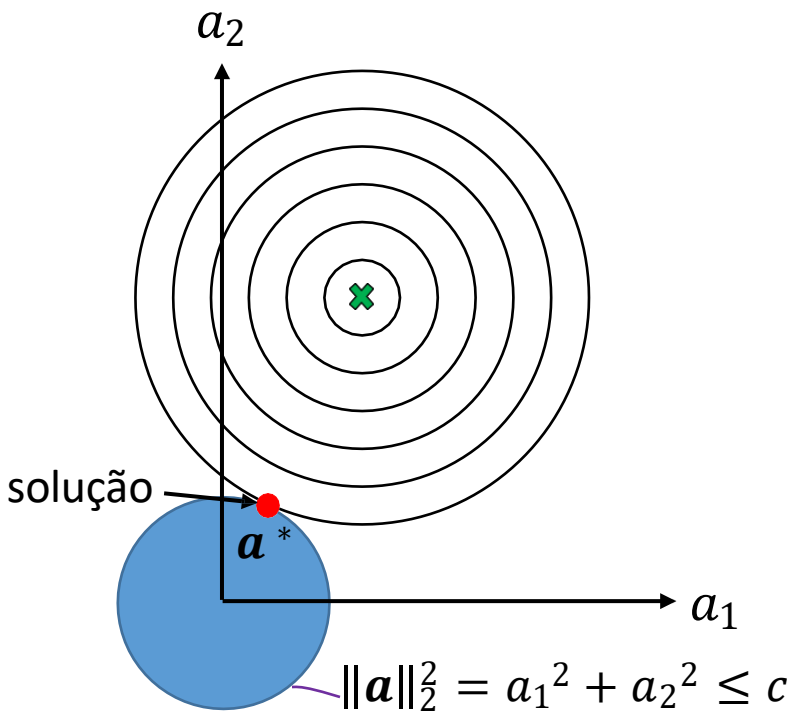

$J_e(\boldsymbol{a})$
de
iterações

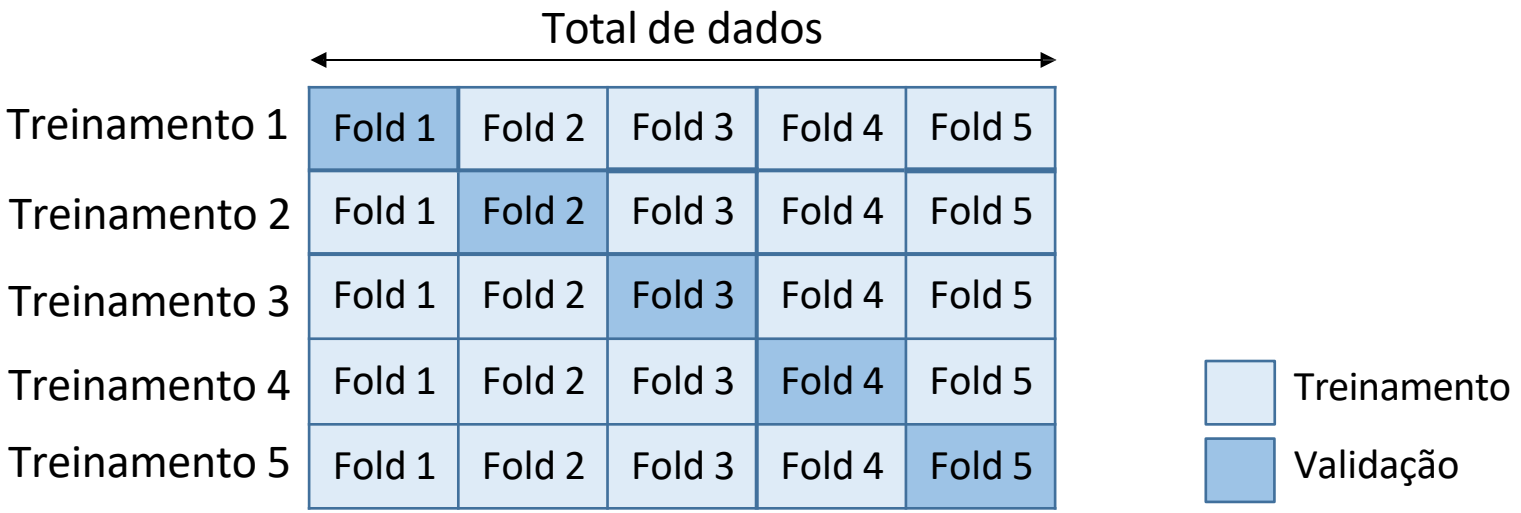

$J_e(\boldsymbol{a})$
de
iterações


a_2
a_1

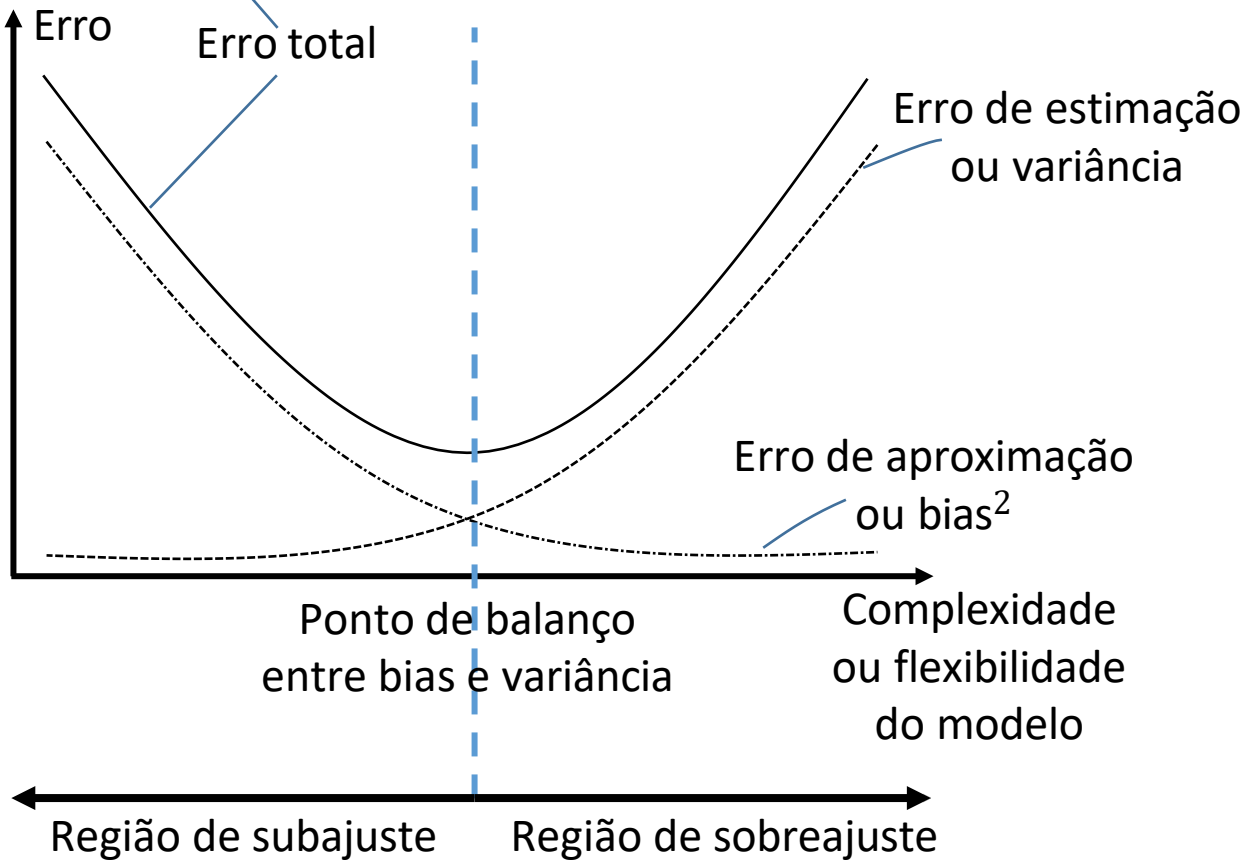

a_2
a_1


a_2
solução
$\boldsymbol{a}^*$
a_1
$\|\boldsymbol{a}\|_1 = |a_1| + |a_2| \leq c$

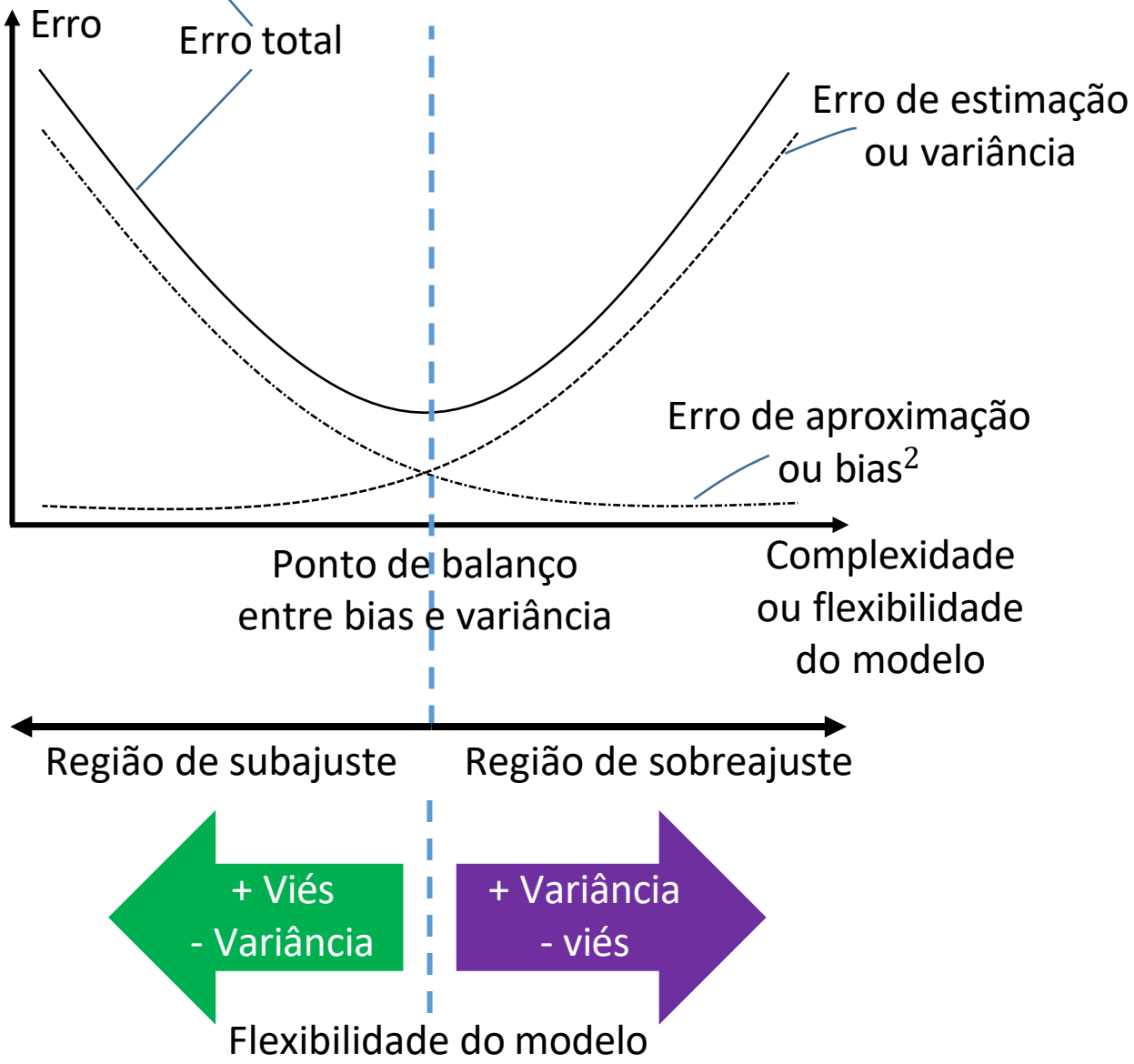

a_2
solução
$\boldsymbol{a}^*$
a_1
$\|\boldsymbol{a}\|_2^2 = {a_1}^2 + {a_2}^2 \leq c$

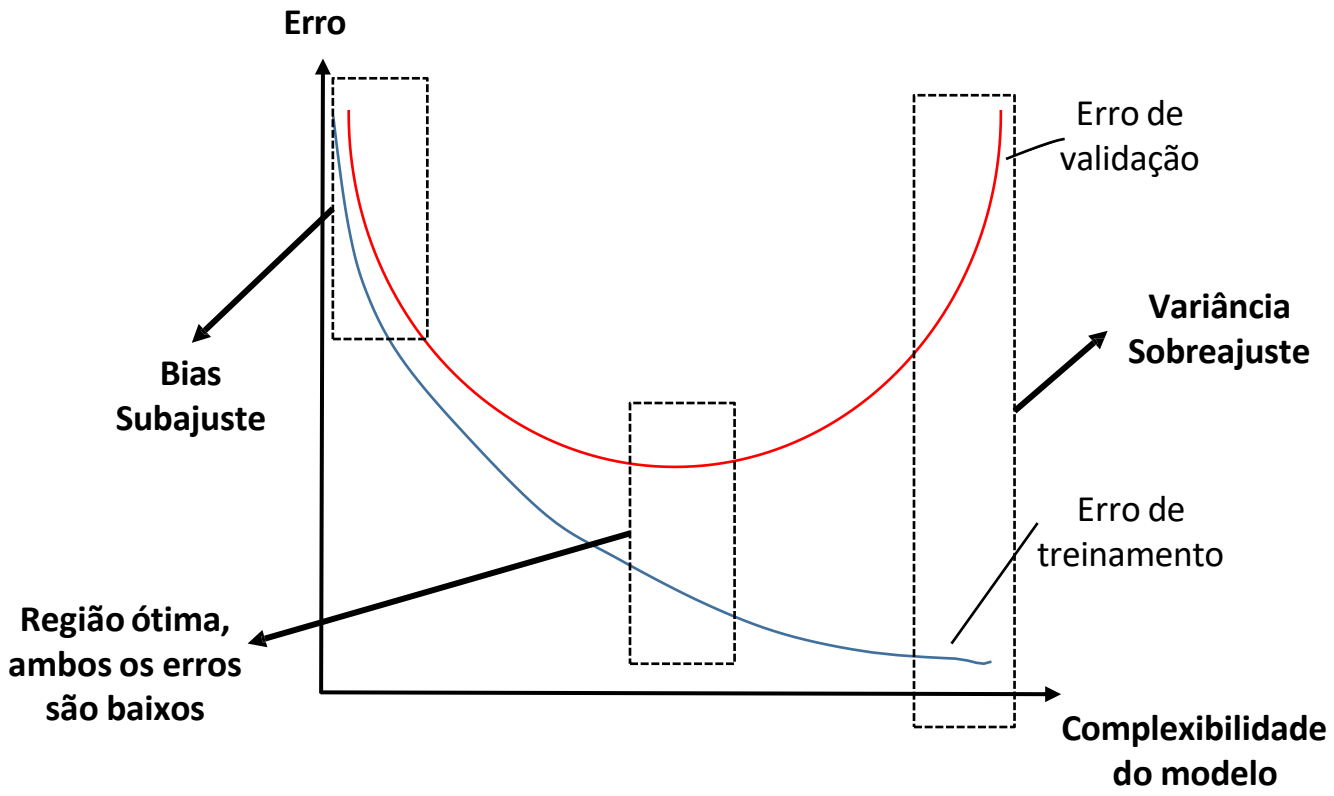

Total de dados
Treinamento 1
Treinamento 2
Treinamento 3
Treinamento 4
Treinamento 5
Fold 1
Fold 2
Fold 3
Fold 4
Fold 5
Treinamento
Validação

$$E\left[\left(y_{noisy} - \hat{y}\right)^2\right] = \text{bias}^2 + \text{variância} + \text{erro irredutível}$$



$$E\left[\left(y_{noisy} - \hat{y}\right)^2\right] = \text{bias}^2 + \text{variância} + \text{erro irredutível}$$




Erro
Erro de validação
Variância
Sobreajuste
Bias
Subajuste
Erro de treinamento
Região ótima, ambos os erros são baixos
Complexibilidade do modelo