Inteligência Artificial

Raoni F. S. Teixeira

Aula 6 - Regressão não-linear e Regularização

1 Introdução

A Figura 1 mostra um conjunto de treinamento $\mathcal{T} = \{(x^{(1)}, y^{(1)}), \ldots, (x^{(M)}, y^{(M)})\}$ com $M = 10$ pontos extraídos de uma relação não linear entre as variáveis de entrada e saída, x e y. Esses dados foram gerados a partir da função $\sin(2\pi x)$ com a adição de ruído aleatório.

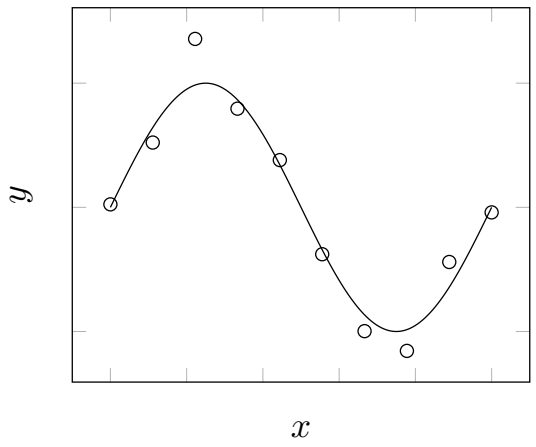


Figura 1: Conjunto de treinamento com $M = 10$ pontos, mostrando uma relação não linear entre x e y. A curva representa a função $\sin(2\pi x)$, que descreve o relacionamento subjacente entre x e y.

Esta aula mostra como aplicar as ideias da anterior para prever relações não lineares.

2 Regressão Não Linear

Para lidar com a não linearidade nos dados, a hipótese h pode ser representada como um polinômio de grau K:

$$h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 + \cdots + \theta_K x^K = \sum_{i=0}^{K} \theta_i x^i, \tag{1}$$

em que $\theta \in \mathbb{R}^{K+1}$ é um vetor parâmetros e x^i é a entrada elevada à i-ésima potência.

Para visualizar que este polinômio é linear, definimos um mapeamento ϕ como:

$$\phi(x) = \begin{bmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \\ \vdots \\ x^K \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{K+1}. \tag{2}$$

No espaço transformado $\phi(x)$, o modelo torna-se linear:

$$h_\theta(x) = \underbrace{\theta^T \phi(x)}_{\text{combinação linear}}. \tag{3}$$

Embora linear nesse espaço, ele continua sendo não linear no espaço original.

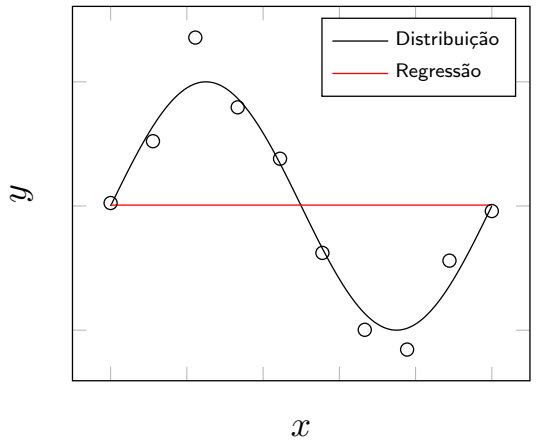
A escolha do mapeamento ϕ é crítica e depende da aplicação e dos dados. Incluí-lo com polinômios ou outras combinações das variáveis permite capturar relações complexas, mas aumentar K excessivamente pode levar ao *overfitting* — quando um modelo estatístico se ajusta muito bem ao conjunto de treinamento, mas é ineficaz para prever novos resultados.

A Figura 2 ilustra regressões com polinômios de graus K = 0, 1, 3 e 9, baseados nos dados da Figura 1. Os polinômios constante ($K = 0$) e de primeira ordem ($K = 1$) apresentados nas Figuras 2a e 2b não se ajustaram bem à função $\sin(2\pi x)$. O polinômio de terceira ordem ($K = 3$) da Figura 2c teve o melhor ajuste. Já o polinômio de ordem mais alta ($K = 9$) da Figura 2d ajustou-se perfeitamente aos dados de treinamento, passando exatamente por cada ponto e resultando em custo $J(\theta) = 0$. No entanto, o modelo está em overfitting pois representa mal a função $\sin(2\pi x)$.

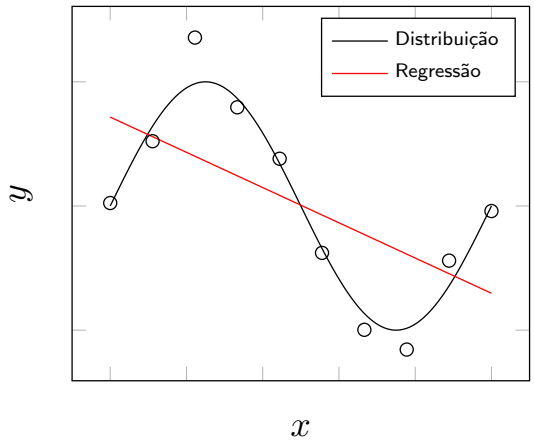
Para avaliar o desempenho do modelo em dados ainda não vistos, usamos a métrica em um conjunto de teste independente:

$$E_{\text{RMS}} = \sqrt{2\frac{J(\theta^*)}{M}}, \tag{4}$$

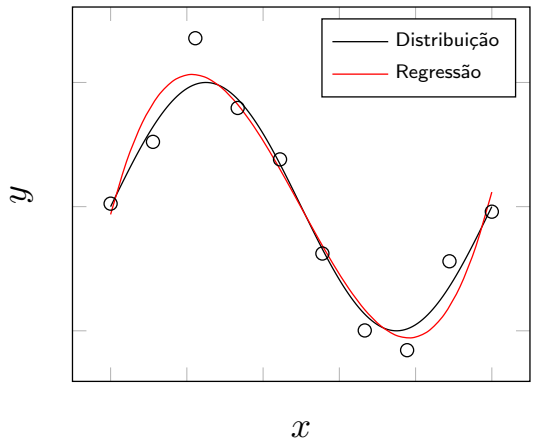
em que $J(\theta^*)$ é o custo mínimo do modelo após o treinamento e M é o número de amostras.



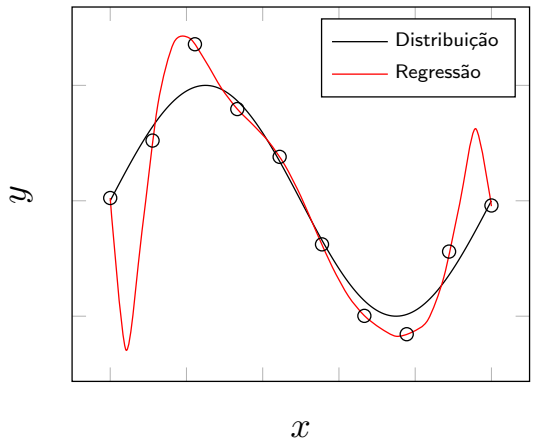
(a) Polinômio de grau $K = 0$.



(b) Polinômio de grau $K = 1$.



(c) Polinômio de grau $K = 3$.



(d) Polinômio de grau $K = 9$.

Figura 2: Comparação de ajustes de polinômios em diferentes graus ($K = 0, 1, 3, 9$).

Esta métrica mede o erro na mesma escala dos valores previstos, tornando os modelos comparáveis independentemente do tamanho do conjunto de dados.

A Figura 3 mostra o resultado de E_{RMS} para conjuntos de treinamento e teste, considerando diferentes graus de polinômio. O erro no conjunto de teste indica o quão bem o modelo prevê novos valores de y com base em observações de x. Como vemos na Figura 3, valores pequenos de K produzem erros altos no conjunto de teste, pois esses polinômios são rígidos e não capturam as variações da função $\sin(2\pi x)$. Os polinômios com graus entre 3 e 8 produzem erros menores e consequentemente uma boa representação da função original.

Quando $K = 9$, o erro no conjunto de treinamento é zero. Isso ocorre porque o polinômio

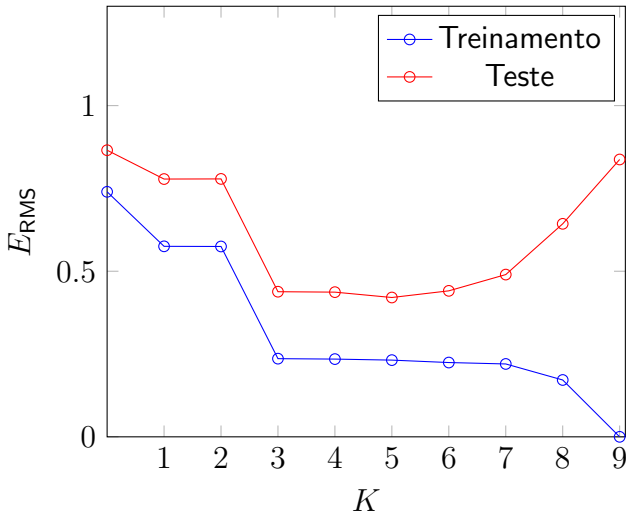


Figura 3: Raiz do erro quadrático médio para treinamento e teste e diferentes graus de polinômios. Tamanho do conjunto de treinamento $M = 10$.

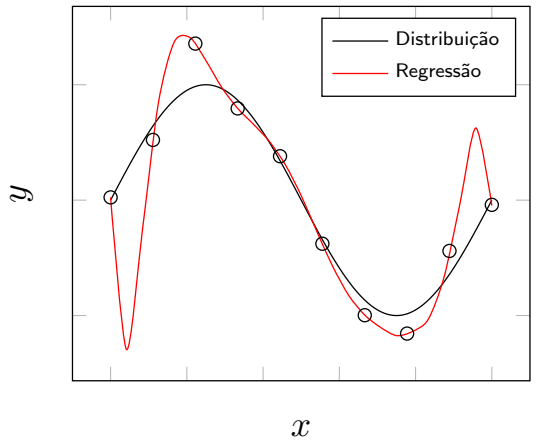
com os 10 coeficientes $\theta_0, \ldots, \theta_9$ tem graus de liberdade suficientes para ajustar-se perfeitamente aos 10 pontos do conjunto de treinamento. No entanto, o erro no conjunto de teste aumenta muito, pois a função resultante, $h_\theta(x)$, oscila excesivamente (veja Figura 2d).

Esse resultado pode parecer contraintuitivo: como um polinômio de ordem mais alta contém todas as ordens inferiores, era de se esperar que ele fosse pelo menos tão bom quanto um polinômio de ordem menor, como o de $K = 3$ por exemplo. Além disso, poderíamos pensar que como a série de potências de $\sin(2\pi x)$ inclui termos de todas as ordens, o desempenho do modelo deveria melhorar continuamente com o aumento de K.

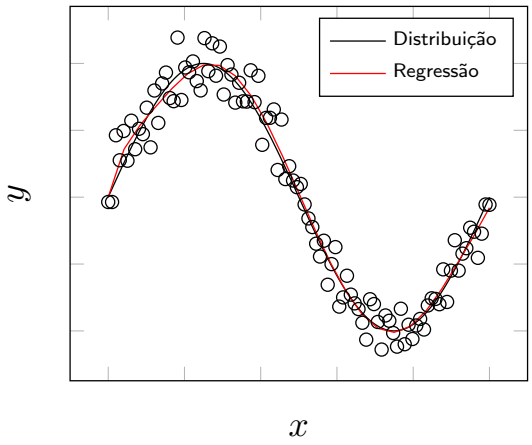
Também é útil analisar como o desempenho de um modelo muda conforme o tamanho do conjunto de dados varia, como mostra a Figura 4. Observe que quanto mais dados temos, mais complexo (ou flexível) o modelo pode ser e menos *overfitting*.

3 Regularização

A regularização é uma abordagem para lidar com alta dimensionalidade. Ela adiciona um termo de penalidade à função de custo, restringindo o crescimento excessivo dos coeficientes e prevenindo o *overfitting*.



(a) Polinômio de grau $K = 9$ e quantidade de amostras $M = 10$.



(b) Polinômio de grau $K = 9$ e quantidade de amostras $M = 100$.

Figura 4: Comparação de ajustes de polinômios com diferentes tamanhos de amostras ($M = 10$ e $M = 100$).

A regularização $L2$ (ou *ridge regression*) modifica a função de custo da seguinte forma:

$$J(\theta) = \frac{1}{2M} \sum_{i=1}^{M} (h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \underbrace{\frac{\lambda}{2} \sum_{j=1}^{n} \theta_j^2}_{\text{regularização}}, \tag{5}$$

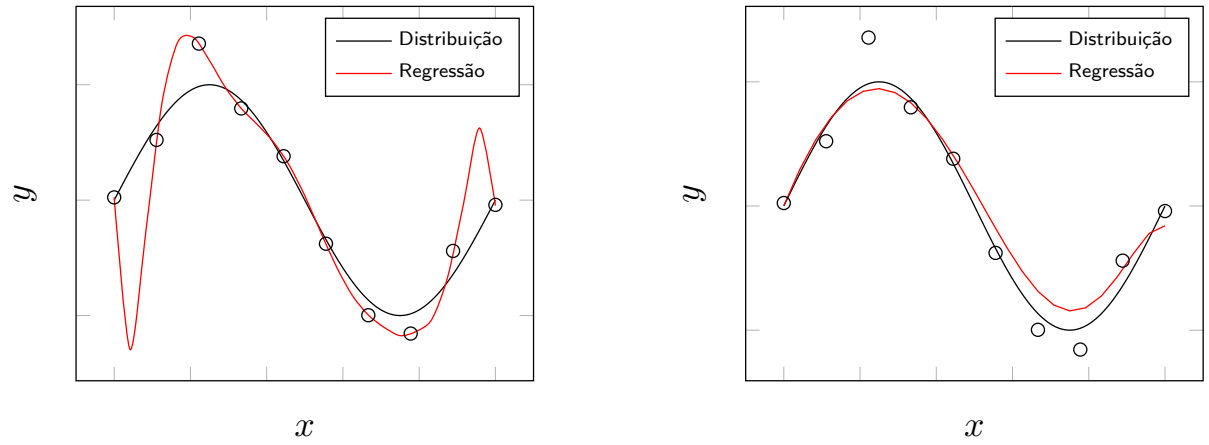
em que λ controla o peso da regularização. Valores maiores de λ aumentam a penalização dos coeficientes, favorecendo soluções mais simples. Valores muito pequenos de λ podem levar ao overfitting.

Outra regularização comum é o $L1$ (ou *lasso regression*), que usa a norma $L1$:

$$J(\theta) = \frac{1}{2M} \sum_{i=1}^{M} (h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \underbrace{\lambda \sum_{j=1}^{n} |\theta_j|}_{\text{regularização}}. \tag{6}$$

A regularização $L1$ favorece soluções esparsas com muitos coeficientes valendo zero, o que facilita a interpretação do modelo e a seleção de características.

Essas técnicas ajudam a controlar a complexidade do modelo e melhoram sua capacidade de generalização, especialmente, em alta dimensionalidade e com poucas amostras. A Figura 5 mostra o efeito da regularização em um polinômio de grau $K = 9$ com $M = 10$ amostras. Ao contrário de sua contraparte sem regularização, o modelo regularizado se ajusta bem à função $\sin(2\pi x)$.



(a) Sem regularização (b) Com regularização

Figura 5: Efeito da regularização no ajuste de um polinômio mantendo o grau ($K = 9$) e quantidade de amostras ($M = 10$).

	θ_9	θ_8	θ_7	θ_6	θ_5	θ_4	θ_3	θ_2	θ_1	θ_0
Com Reg.	-5.97	-2.17	2.32	6.30	7.70	3.96	-5.77	-14.09	7.55	0.00
Sem Reg.	5570.18	-70859.78	136500.03	-144864.80	92122.05	-35595.19	8041.13	-964.83	51.06	-0.01

Tabela 1: Coeficientes dos polinômios de graus $K = 9$ com e sem regularização.

A Tabela 1 evidencia o impacto da regularização nos coeficientes dos polinômios: os coeficientes de maior ordem ficam menores com a regularização. O coeficiente de grau 8, θ_8, por exemplo, é 10 mil vezes maior no modelo não regularizado.

4 Exercícios

1. Como o mapeamento ϕ, usado em regressão não linear, afeta a capacidade de o modelo capturar relações complexas entre as variáveis de entrada e saída?

2. Quais fatores determinam a complexidade de um modelo de regressão não linear? Como essa complexidade afeta o desempenho, especialmente em relação ao overfitting e à generalização?