Regularização para redução da sobreestimação

UFPR
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

Engenharia Elétrica

Onde estamos e para onde vamos

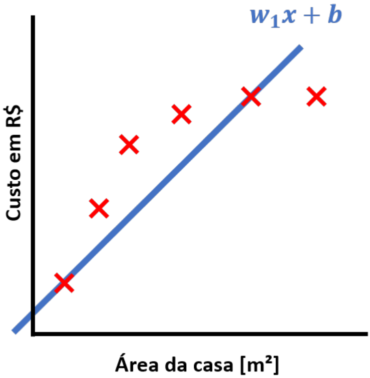
Na aula anterior, implementamos o algoritmo de **Regressão Logística**.

Nesta aula, vamos aprender sobre **sobreestimação**, também conhecida pelo termo *overfitting*, sendo esse um problema comum que nosso modelo pode apresentar em algumas situações.

Pergunta:

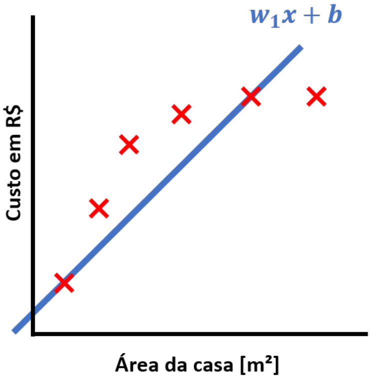
Mas afinal, o que é *overfitting*?

Um exemplo vindo da Regressão



Perguntas

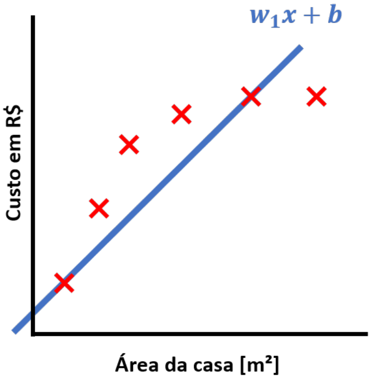
1. O modelo acima se ajusta bem aos dados?



Perguntas

1. O modelo acima se ajusta bem aos dados?
2. O modelo subestima ou sobreestima os dados?

Um exemplo vindo da Regressão



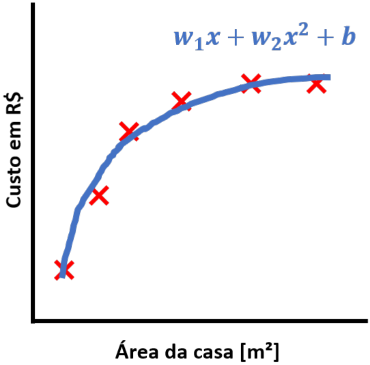
Perguntas

1. O modelo acima se ajusta bem aos dados?
2. O modelo subestima ou sobreestima os dados?

Termos:

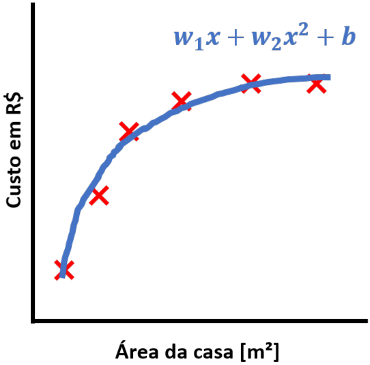
underfit = **high bias** $\rightarrow$ O modelo não é capaz de explicar suficientemente o comportamento presente nos dados.

Um exemplo vindo da Regressão



Perguntas

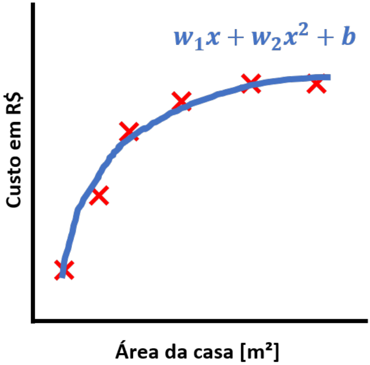
1. Esse segundo modelo se ajusta bem aos dados?



Perguntas

1. Esse segundo modelo se ajusta bem aos dados?
2. O modelo subestima ou sobreestima os dados?

Um exemplo vindo da Regressão

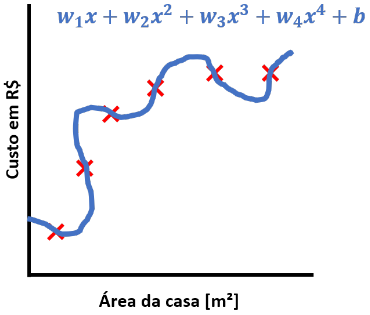


Perguntas

1. Esse segundo modelo se ajusta bem aos dados?
2. O modelo subestima ou sobreestima os dados?

Termos:

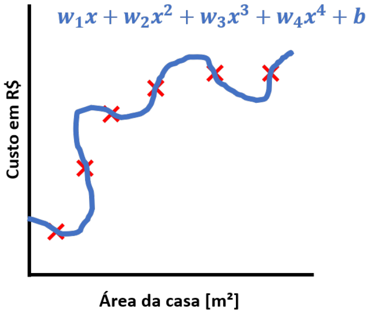
Generalização $\rightarrow$ é a capacidade que um modelo tem (ou não) de performar bem para dados não usados durante seu treinamento.



Perguntas

1. Esse terceiro modelo se ajusta perfeitamente aos dados de treinamento?

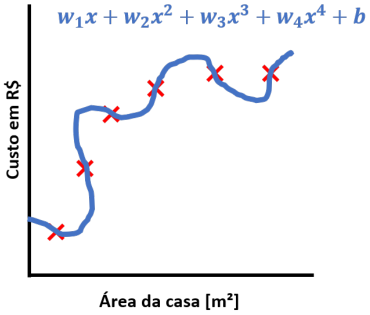
Um exemplo vindo da Regressão



Perguntas

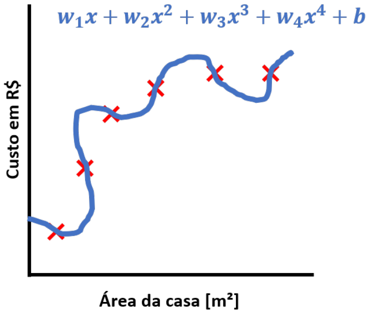
1. Esse terceiro modelo se ajusta perfeitamente aos dados de treinamento?
2. Qual seria o valor da função custo $J(\overrightarrow{w}, b)$ para esse caso?

Um exemplo vindo da Regressão



Perguntas

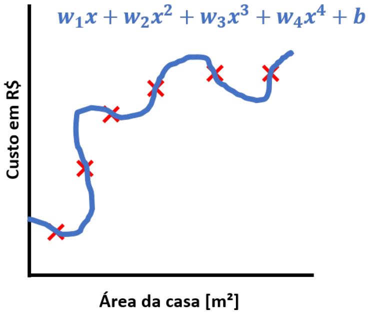
1. Esse terceiro modelo se ajusta perfeitamente aos dados de treinamento?
2. Qual seria o valor da função custo $J(\overrightarrow{w}, b)$ para esse caso?
3. Qual é o problema com esse modelo então?



Perguntas

1. Esse terceiro modelo se ajusta perfeitamente aos dados de treinamento?
2. Qual seria o valor da função custo $J(\overrightarrow{w}, b)$ para esse caso?
3. Qual é o problema com esse modelo então?
4. O modelo subestima ou sobreestima os dados?

Um exemplo vindo da Regressão



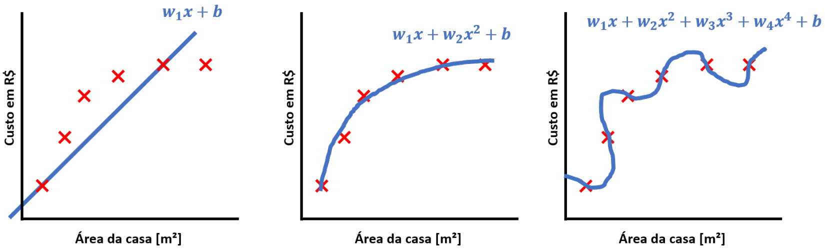
Perguntas

1. Esse terceiro modelo se ajusta perfeitamente aos dados de treinamento?
2. Qual seria o valor da função custo $J(\vec{w}, b)$ para esse caso?
3. Qual é o problema com esse modelo então?
4. O modelo subestima ou sobreestima os dados?

Termos:

overfit = **high variance** $\rightarrow$ O modelo se ajustou mais do que deveria aos dados que lhe foram mostrados.

Um exemplo vindo da Regressão



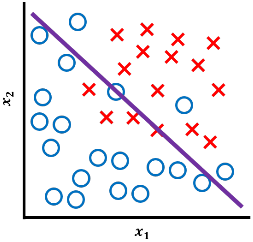
Pergunta

Qual dos três modelos acima você escolheria?

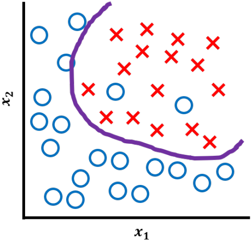
Conclusões

- Modelos muito simples, com poucos parâmetros, podem não ser suficientes para explicar o comportamento presente nos dados
- Por outro lado, modelos muito complexos, com um excesso de parâmetros, podem explicar perfeitamente bem os dados de treinamento, mas não generalizar bem para novos dados

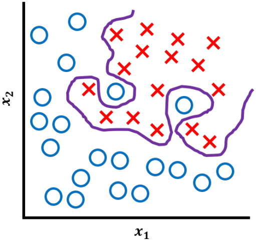
As mesmas conclusões se aplicam para problemas de **classificação**



$z = w_1x_1 + w_2x_2 + b$
$f_{\vec{w},b}(\vec{x}) = g(z)$



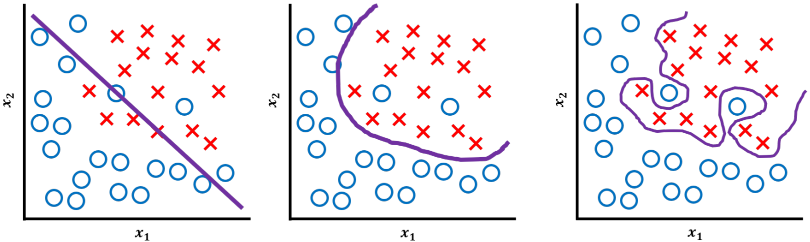
$z = w_1x_1 + w_2x_2$
$+w_3x_1^2 + w_4x_2^2$
$+w_5x_1x_2 + b$



$z = w_1x_1 + w_2x_2$
$+w_3x_1^2x_2 + w_4x_1^2x_2^2$
$+w_5x_1^2x_2^3 + w_6x_1^3x_2$
$+ \cdots + b$

Perguntas

1. Qual modelo subestima os dados?
2. Qual modelo parece super ok?
3. Qual modelo sobreestima os dados?



$$z = w_1x_1 + w_2x_2 + b$$
$$f_{\vec{w},b}(\vec{x}) = g(z)$$

$$z = w_1x_1 + w_2x_2$$
$$+w_3x_1^2 + w_4x_2^2$$
$$+w_5x_1x_2 + b$$

$$z = w_1x_1 + w_2x_2$$
$$+w_3x_1^2x_2 + w_4x_1^2x_2^2$$
$$+w_5x_1^2x_2^3 + w_6x_1^3x_2$$
$$+\cdots+b$$

Pergunta

Seja x_1: diâmetro do tumor e x_2: idade do paciente.

Qual dos três modelos acima você escolheria para estimar a probabilidade de um novo paciente estar ou não com um tumor maligno?

Pergunta:

O nosso objetivo é criar um modelo capaz de prever valores de saída corretamente para **novas amostras**, ou seja, que **generalize bem**.

Quando um modelo se ajuste bem aos dados de treinamento, mas não funciona bem para novas amostras que não estavam presentes no seu treinamento, isso é exemplo de:

A) Sobreestimação

B) Subestimação

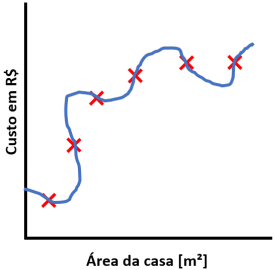
C) Um modelo que generaliza bem

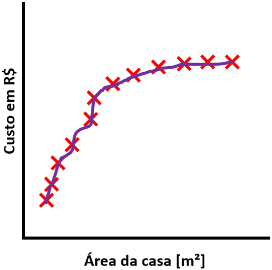
Como resolver o problema de overfitting?

Como resolver o problema de overfitting?

Opção 1

Colete e utilize mais dados durante o treinamento:





Observação

Infelizmente, coletar mais dados nem sempre é uma opção.

Como resolver o problema de overfitting?

Opção 2

Selecione as características mais relevantes:

Área da casa [m²] (x_1)	Número de quartos (x_2)	Idade [anos] (x_3)	...	Distância até mercado (x_{100})	Custo (y)

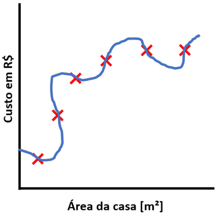
Observações

- Muitas características + poucos dados podem levar à sobreestimação.
- Use a intuição para selecionar: distância até o mercado mais próximo é de fato importante?
- **Desvantagem**: Características relevantes podem ser ignoradas (informação relevante perdida).

Como resolver o problema de overfitting?

Opção 3

Regularização



$$f(x) = 28x - 385x^2 + 39x^3 - 174x^4 + 100$$

- Em muitos casos, o overfitting ocorre pois alguns parâmetros do modelo assumem valores muito elevados (exemplo: $w_2 = -385$ e $w_4 = -174$)
- Regularização permite que os parâmetros existam, mas gera uma penalização elevada caso eles sejam excessivamente elevados.
- Olhando o caso específico acima, é esperado que w_2 tenha de fato um valor ligeiramente elevado, pois ele será responsável pelo "comportamento de parábola" passível de ser observado nos dados. Entretanto, não é esperado que w_3 e w_4 sejam elevados.
- Em problemas mais complexos, isso não é visual, e teremos que lidar com isso de uma forma mais generalizada e sistematizada.
- Nesse sentido, em geral, regularizamos apenas os parâmetros w_j do modelo.
- Regularizar também o parâmetro b geralmente não gera muito impacto.

Como resolver o problema de overfitting?

Opção 1

Coletar mais dados

Opção 2

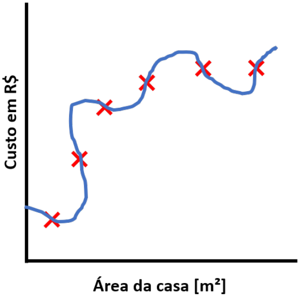
Selecionar as características

Opção 3

Regularização $\rightarrow$ Estudaremos agora com mais detalhes como implementar!

Veremos agora como implementar a Regularização na prática

No exemplo abaixo, se escolhermos valores excessivamente grandes para w_3 e w_4 podemos ter overfitting.



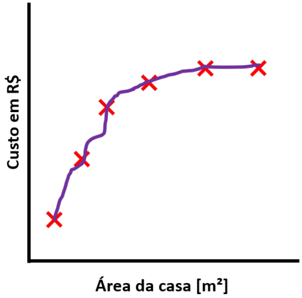
$$f(x) = w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + b$$

Pergunta:

O que acontece se estimarmos os parâmetros $\vec{w}$,b por meio da função custo modificada:

$$J(\vec{w}, b) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right) - y^{(i)} \right)^2 + 1000 w_3^2 + 1000 w_4^2 \quad ?$$

OBS: Note que estamos penalizando valores elevados para w_3 e w_4 multiplicando ambos por um valor escalar elevado e adicionando esses termos à função custo $J(\vec{w}, b)$.



$$f(x) = w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + b$$

Resposta:

- Os parâmetros w_3 e w_4 serão garantidamente pequenos, 0.001 e 0.002 por exemplo.
- Com isso, a chance de overfitting é drasticamente reduzida.
- Por outro lado, w_3 e w_4 ainda permanecem presentes no modelo, contribuindo para que o modelo explique bem os dados.
- Na prática, penalizamos todos os parâmetros w_j do modelo, para $j = 1, \cdots, n$
- Geralmente isso leva a modelos com resposta mais suave e que não sobreestimam os dados.

Implementando a Regularização (caso geral)

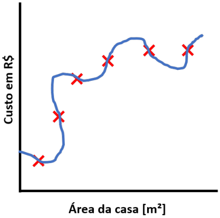
Área da casa [m²] (x_1)	Número de quartos (x_2)	Idade [anos] (x_3)	...	Distância até mercado (x_{100})	Custo (y)

No caso geral, como não sabemos quais características são mais importantes, penalizamos todos os parâmetros w_j, usando a função custo:

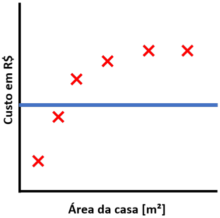
$$J(\vec{w}, b) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left(f_{\vec{w},b} \left(\vec{x}^{(i)} \right) - y^{(i)} \right)^2 + \frac{\lambda}{2m} \sum_{j=1}^{n} w_j^2$$

- λ é chamado de **parâmetro de regularização**, e é ≥ 0.
- Ao escolhermos $\lambda = 0$, eliminamos completamente o efeito da regularização.
- Note que, o primeiro termo da função custo busca adequar o modelo aos dados.
- Enquanto o segundo termo busca manter os parâmetros w_j pequenos.

Extremos:



$f(x) = w_1x + w_2x^2 + w_3x^3 + w_4x^4 + b$



$f(x) = w_1x + w_2x^2 + w_3x^3 + w_4x^4 + b$

Função custo com regularização

$$J(\vec{w}, b) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left(f_{\vec{w},b} \left(\vec{x}^{(i)} \right) - y^{(i)} \right)^2 + \frac{\lambda}{2m} \sum_{j=1}^{n} w_j^2$$

Perguntas

- Em qual caso acima foi escolhido $\lambda = 0$?
- Em qual caso acima foi escolhido $\lambda = 10^{10}$?

Pergunta:

Considere um algoritmo que inclui um parâmetro de regularização λ. Aumentar λ tenderá a

A) Aumentar os valores de $w_1, w_2, \cdots, w_n$

B) Reduzir os valores de $w_1, w_2, \cdots, w_n$

C) Reduzir o parâmetro b

D) Aumentar o parâmetro b

Vamos agora resumir como implementar o método do gradiente com regularização tanto para Regressão Linear como também para Regressão Logística

Apenas lembrando que:

- Regressão Linear $\rightarrow$ Problemas de Regressão (y pode assumir infinitos valores possíveis)
- Regressão Logística $\rightarrow$ Problemas de Classificação (y assume apenas um pequeno conjunto de valores)

Regressão Linear com Regularização (resumo)

Função custo:

$$J(\vec{w}, b) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right) - y^{(i)} \right)^2 + \frac{\lambda}{2m} \sum_{j=1}^{n} w_j^2$$

Método do Gradiente: repetir

$$w_j = w_j - \alpha \left[\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right) - y^{(i)} \right) x_j^{(i)} + \frac{\lambda}{m} w_j \right]$$

$$b = b - \alpha \left[\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right) - y^{(i)} \right) \right]$$

Modelo

$$f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right) = \vec{w} \cdot \vec{x} + b$$

Tarefa para casa: Deduzir as derivadas.

Regressão Logística com Regularização (resumo)

Função custo:

$$J(\vec{w}, b) = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left[y^{(i)} \log\left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right)\right) + (1 - y^{(i)}) \log\left(1 - f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right)\right)\right] + \frac{\lambda}{2m} \sum_{j=1}^{n} w_j^2$$

Método do Gradiente: repetir

$$w_j = w_j - \alpha \left[\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right) - y^{(i)}\right) x_j^{(i)} + \frac{\lambda}{m} w_j \right]$$

$$b = b - \alpha \left[\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)\right]$$

Modelo

$$f_{\vec{w},b}(\vec{x}) = \frac{1}{1 + e^{-(\vec{w} \cdot \vec{x} + b)}}$$

Tarefa para casa: Deduzir as derivadas.

De olho no código!

De olho no código!

Buscando consolidar nosso conhecimento acerca de regularização, vamos agora implementar novamente o método de regressão logística fazendo as modificações necessárias.

Acesse o Python Notebook usando o QR code ou o link abaixo:

https://colab.research.google.com/github/xaximpvp2/master/blob/main/codigo_aula12_Regressao_Logistica_com_Regularizacao.ipynb

Acesse os dados necessários para rodar o código usando o QR code ou o link abaixo:

https://ufprbr0-my.sharepoint.com/:t:/g/personal/ricardo_schumacher_ufpr_br/Ee6CfYblcDFEkmfx8FCVXS4B8O-lf5UV3dZunU3R_hY-JQ?e=D1WRIf

OBS: Para adicionar os dados ao ambiente do Colab Notebook, no menu do canto esquerdo da tela do Colab clique em "Arquivos" e depois "Fazer upload para o armazenamento da sessão". Então carregue os arquivos baixados.

Atividade de aula

Parte 1

Rode todo o código. Certifique-se de que você o compreendeu.

Parte 2

1. Explique, com as suas próprias palavras, o conceito de overfitting e as possibilidades de resolução desse problema.
2. Explique, com as suas próprias palavras, como implementar a regularização no método do gradiente.
3. Qual foi a taxa de acerto (acurácia) obtida com o modelo treinado? Explique, com as suas próprias palavras, o que significa essa taxa de acerto. Se necessário, busque pela definição na Internet (ChatGPT, por exemplo).
4. Qual seria a taxa de acerto esperada para um modelo com saída 0/1 aleatória?

Parte 3

1. Modificando códigos das aulas anteriores, implemente a regularização no contexto da Regressão Linear. Não é necessário entregar esta parte da atividade. Fica apenas como um exercício opcional adicional.