Universidade Federal de Santa Catarina
Departamento de Engenharia Elétrica e Eletrônica
EEL7514/EEL7513/EEL410250 - Aprendizado de Máquina

Exercício 3: Regressão Linear & Otimização Numérica

Neste exercício você irá explorar métodos de otimização numérica para treinar um modelo de regressão linear. Em particular, você irá implementar o método do gradiente e analisar sua convergência. Além disso, você irá investigar o efeito da normalização de atributos no comportamento do método. Finalmente, você irá investigar a aplicação de regressão linear em um conjunto de dados real.

Conjunto de dados #1

Inicialmente, utilizaremos o mesmo conjunto de dados do exercício anterior, exceto por uma escala diferente em x.

In [1]:

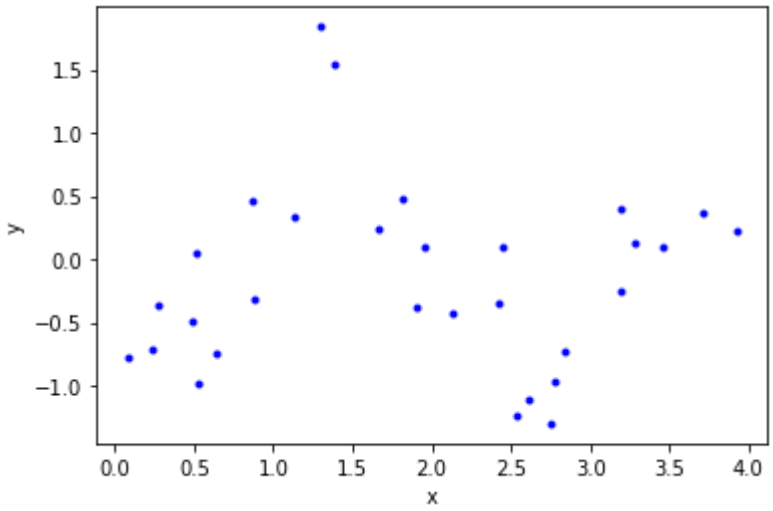
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline

def gen_data(n_samples, x_scale=[0,1], noise=0.5):
    '''Generate univariate regression dataset'''
    x = np.sort(np.random.rand(n_samples))
    y = 6*(-1/6 + x + (x > 1/3)*(2/3-2*x) + (x > 2/3)*(2*x-4/3)) + noise*np.random.rand
    x = x_scale[0] + (x_scale[1]-x_scale[0])*x
    X = x.reshape(-1,1)
    return X, y

def plot_data(X, y):
    '''Plot univariate regression dataset'''
    assert len(X.shape) == 2 and len(y.shape) == 1
    plt.plot(X[:,0],y,'b.'); plt.xlabel('x'); plt.ylabel('y');
    return

def plot_prediction(model, X, y, n_points=100):
    '''Plot dataset and predictions for a univariate regression model'''
    plot_data(X,y)
    if n_points is not None:
        xx = np.linspace(X.min(),X.max(),n_points)
        yy = model.predict(xx.reshape(-1,1))
        plt.plot(xx,yy,'r-')
    y_pred = model.predict(X)
    plt.plot(X[:,0],y_pred,'r.')
    plt.legend(['True', 'Predicted'])
    return
```

O conjunto de dados pode ser gerado e visualizado pelos comandos abaixo (observe a nova escala).

In [2]:

```
np.random.seed(2019*2)
X, y = gen_data(n_samples=30, x_scale=[0,4])
X_val, y_val = gen_data(n_samples=1000, x_scale=[0,4])
X_test, y_test = gen_data(n_samples=1000, x_scale=[0,4])

print(X.shape, y.shape)
print(X_val.shape, y_val.shape)
print(X_test.shape, y_test.shape)

# Plot only the training data!
plot_data(X,y)
```

```
(30, 1) (30,)
(1000, 1) (1000,)
(1000, 1) (1000,)
```



1. Método do gradiente

Resgate a classe do modelo que você implementou no exercício anterior. Iremos reorganizá-la para permitir um método de treinamento alternativo.

1. Utilize a classe abaixo, substituindo na função `_fit_ne` a sua função `fit` implementada anteriormente, com as modificações necessárias. Note que a função `add_powers` foi eliminada (bem como o argumento `d` da inicialização do modelo), sendo substituída pela função `_add_ones` (que simplesmente adiciona uma coluna de 1's). Ou seja, nosso modelo deve implementar puramente uma regressão linear (com regularização L2), sem atributos adicionais. Caso desejemos atributos polinomiais, poderemos usar a classe `PolynomialFeatures` do sklearn. A única vantagem do nosso modelo de regressão próprio em relação ao `Ridge` é permitir utilizar um método de treinamento diferente.
2. Mova a função `mse` para fora da classe, caso contrário não poderemos acessá-la dentro de um `Pipeline`.

Gradiente com regularização l2

$$\nabla J(\mathbf{w}) = \frac{2}{m}\mathbf{X}^T(\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y}) + \lambda\frac{2}{m}\mathbf{L}\mathbf{w}$$

In [3]:

```
class Model():
    # Linear regression with L2 regularization
    def __init__(self, lamb=0, solver='ne', lr=1, maxiter=1000, tol=1e-5):
        # Initialization
        self.lamb = lamb
        self.solver = solver
        self.lr = lr
        self.maxiter = maxiter
        self.tol = tol
        return

    def _add_ones(self, X):
        # Add column of ones
        X_new = np.c_[np.ones(X.shape[0]), X]
        return X_new

    def _fit_ne(self, X, y):
        X = self._add_ones(X)
        w = np.zeros(X.shape[1])

        L = np.identity(X.shape[1])
        L[0][0] = 0

        I = np.identity(X.shape[1])

        m = len(y)
        self.J_ne = []

        self.hessian = (2/m)*(X.T @ X) + (self.lamb*(2/m) *I)
        assert np.linalg.matrix_rank(X.T @ X + self.lamb*L) == X.shape[1], 'Singular ma
        gd =  (2/m)*X.T @ (X @ w - y) + (2/m)*self.lamb*L@w
        w = w - np.linalg.inv(self.hessian) @ gd
        self.w = w

        cost = 1/m*((np.linalg.norm(X@w -y))**2) + (self.lamb/m)*w.T@L@w
        self.J_ne.append(cost)
        return

    def _fit_gd(self, X, y):
        # Fit by gradient descent
        X = self._add_ones(X)
        w = np.zeros(X.shape[1])
        L = np.identity(X.shape[1])
        L[0][0] = 0
        self.J_gd = []
        m = len(y)

        for c in range(self.maxiter):
            gd = (2/m) * X.T @ (X @ w -y) + self.lamb*(2/m)*L @ w
            w = (1 - self.lamb*self.lr*(2/m))*w - self.lr*gd
            cost = 1/m*((np.linalg.norm(X@w -y))**2) + (self.lamb/m)*w.T@L@w
            self.J_gd.append(cost)
            self.w = w

            if np.linalg.norm(gd) < self.tol:
                break

        return

```

```
    def fit(self, X, y):
        if self.solver == 'gd':
            self._fit_gd(X, y)
        elif self.solver == 'ne':
            self._fit_ne(X, y)
        else:
            raise RuntimeError('Unknown solver')
        return self

    def predict(self, X):
        X = self._add_ones(X)
        y_pred = X @ self.w
        return y_pred

def mse(model, X, y):
    m = len(y)
    mse = ((1/m)* np.sum(((model.predict(X) - y)**2)))
    return mse

def mape(model, X, y):
    p = y
    p_pred = model.predict(X)
    return  (np.mean(np.abs((p-p_pred)/p)))*100
```

3. Modifique a função `_fit_ne` para calcular também a matriz hessiana da função custo (regularizada), guardando-a na variável `self.hessian`. Em seguida, após o treinamento usando a solução analítica, estime o grau de condicionamento da hessiana utilizana a função `np.linalg.cond()`.
4. Complete a função `_fit_gd` implementando o método do gradiente. Utilize os parâmetros `self.lr` (taxa de aprendizado), `self.maxiter` (número máximo de iterações) e `self.tol` (critério de parada para a norma do gradiente), e assuma como ponto inicial $\mathbf{w} = (0, \ldots, 0)$. Além de calcular `self.w`, sua função deve criar também uma lista, `self.J_history`, contendo os valores da função custo (regularizada) a cada iteração, a qual será usada para monitorar o treinamento e analisar a taxa de aprendizado.
5. Treine o modelo sem regularização usando `solver='gd'`, trace o gráfico de `J_history` e escolha uma boa taxa de aprendizado. Quantas iterações foram necessárias para convergência?
6. Calcule o MSE de treinamento e de validação e compare-os com os obtidos pela solução analítica. Compare também os vetores $\mathbf{w}$ das duas soluções. (Obs: a saída da célula 5 está mostrada apenas para ilustração. Não é necessário reproduzir exatamente o mesmo texto/gráfico.)
7. (OPCIONAL) O que acontece com o erro de validação à medida que a taxa de aprendizado é reduzida? Como podemos interpretar esse fenômeno?

Resposta do professor:

- w = [-0.20189161 0.02333163]
- Train MSE: 0.517264
- Val MSE: 0.601059
- Condition number: 24.959359

Minha resposta:

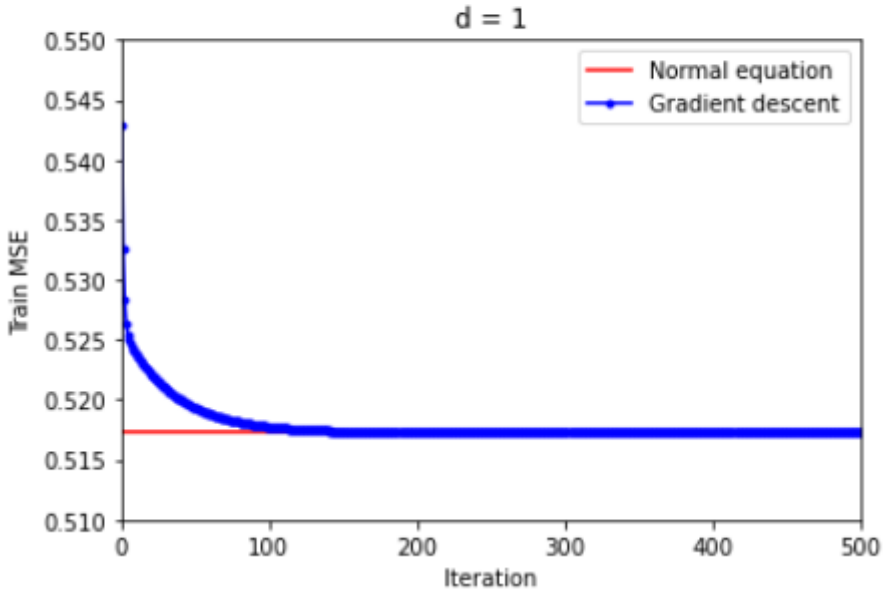
In [4]:

```
# Normal equation
model = Model(solver = 'ne')
model.fit(X,y)
model.fit(X, y)
J_ne = model.J_ne
print('w =', model.w)
print('Train MSE: %f' % mse(model, X, y))
print('Val MSE: %f' % mse(model, X_val, y_val))
print('Condition number: %f' % np.linalg.cond(model.hessian))
```

```
w = [-0.20189161  0.02333163]
Train MSE: 0.517264
Val MSE: 0.601059
Condition number: 24.959359
```

Resposta do professor:

```
w = [-0.20187165  0.0233235 ]
Train MSE: 0.517264
  Val MSE: 0.601058
Iterations: 631
MAPE from optimal w: 0.022371%
```



Minha resposta:

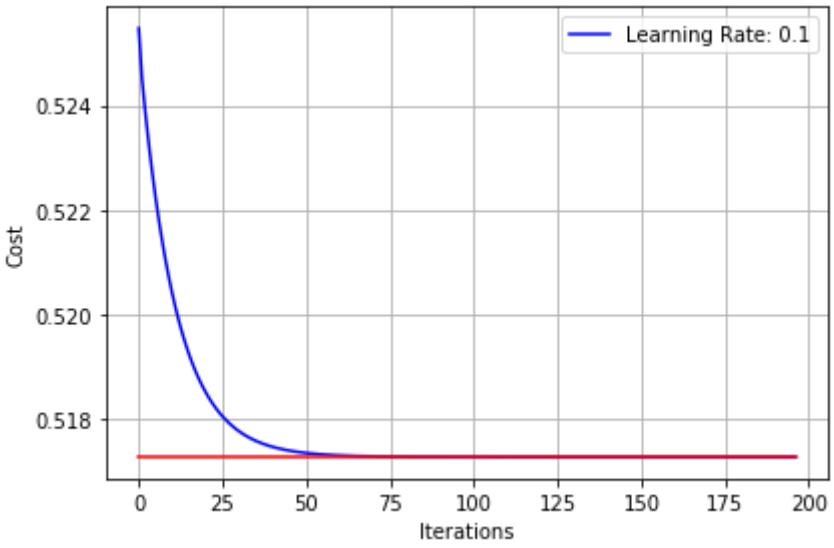
In [5]:

```
#Gradient Descent
model = Model(solver = 'gd', lr=1e-1, maxiter=1000)
model.fit(X,y)
model.fit(X, y)
print('w =', model.w)
print('Train MSE: %f' % mse(model, X, y))
print('Val MSE: %f' % mse(model, X_val, y_val))
print(f'Iterations: {len(model.J_gd)}')
print(mape(model,X,y))
```

```
w = [-0.2018722   0.02332372]
Train MSE: 0.517264
Val MSE: 0.601058
Iterations: 197
123.46660127755706
```

In [6]:

```
values = np.arange(len(model.J_gd))
J_ne_values = np.ones(len(model.J_gd))*J_ne
plt.plot(values, model.J_gd,'b')
plt.plot(values,J_ne_values,'r')
plt.xlabel('Iterations')
plt.ylabel('Cost')
plt.legend([f'Learning Rate: {model.lr}'])
plt.grid()
plt.tight_layout()
```



2. Adicionando atributos

1. Adicione atributos polinomiais de grau `d=2` usando o transformador `PolynomialFeatures` . Em seguida, repita o treinamento via solução analítica e estimação do grau de condicionamento da hessiana.
2. Repita o treinamento usando método do gradiente (incluindo gráfico da função custo) e verifique a dificuldade de convergência. Por que isso ocorre? Foi necessário alterar a taxa de aprendizado? E o número máximo de iterações?
3. Assim como anteriormente, compare o MSE e o $\mathbf{w}$ obtidos com os da solução analítica.
4. Repita os itens anteriores para `d=3` .

Dica

- Não há necessidade de incluir o termo constante nos atributos adicionados, uma vez que o modelo de regressão linear já implementa a adição de coluna de 1's. Assim, utilize `PolynomialFeatures(d, include_bias=False)` .
- Normalmente, é conveniente utilizar a função `make_pipeline` para combinar pré-processamento (transformação de atributos) e modelo de aprendizado (estimador) em um único modelo. Além de deixar o código mais compacto, essa metodologia ajuda a evitar erros de vazamento de informação entre teste e treinamento, pois garante que o transformador será treinado somente com os dados de treinamento. No entanto, como o nosso foco aqui é o treinamento, é mais conveniente primeiramente aplicar a transformação de atributos explicitamente no conjunto de dados, obtendo um conjunto transformado (aqui com sufixo `_new`), o qual é então entregue ao modelo de aprendizado. Embora não seja o caso aqui, essa abordagem também é mais eficiente quando o pré-processamento é particularmente complexo e serão realizados múltiplos treinamentos, assim o pré-processamento só precisa ser realizado uma vez.

Resposta do professor:

- w = [-0.35250239 0.26848578 -0.06441263]
- Train MSE: 0.511996
- Val MSE: 0.611803
- Condition number: 955.280910

Minha resposta:

In [7]:

```
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
```

d = 2

In [8]:

```
# Feature transformation
d = 2
prep = PolynomialFeatures(d,include_bias=False)
X_new = prep.fit_transform(X)
X_val_new = prep.transform(X_val)
# Normal equation
model = Model()
model.fit(X_new, y)
J_ne = model.J_ne

print('w = ',model.w)
print('Train MSE: %f' % mse(model, X_new, y))
print('Val MSE: %f' % mse(model, X_val_new, y_val))
print('Condition number: %f' % np.linalg.cond(model.hessian))
```

```
w =  [-0.35250239  0.26848578 -0.06441263]
Train MSE: 0.511996
Val MSE: 0.611803
Condition number: 955.280910
```

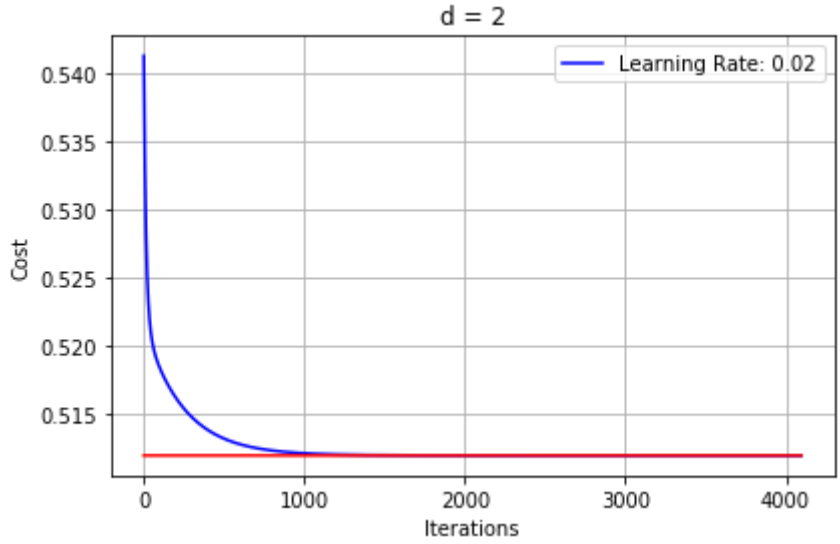
In [9]:

```
# Gradient descent
model = Model(solver = 'gd', lr = 2e-2, maxiter = 4500)
model.fit(X_new, y)
print('w = ',model.w)
print('Train MSE: %f' % mse(model, X_new, y))
print('Val MSE: %f' % mse(model, X_val_new, y_val))
print(f'Iterations: {len(model.J_gd)}')
```

```
w =  [-0.35244342  0.26841033 -0.06439477]
Train MSE: 0.511996
Val MSE: 0.611798
Iterations: 4097
```

In [10]:

```
values = np.arange(len(model.J_gd))
J_ne_values = np.ones(len(model.J_gd))*J_ne
plt.title('d = 2')
plt.plot(values, model.J_gd,'b')
plt.plot(values,J_ne_values,'r')
plt.xlabel('Iterations')
plt.ylabel('Cost')
plt.legend([f'Learning Rate: {model.lr}'])
plt.grid()
plt.tight_layout()
```



2.3. Por que isso ocorre? Foi necessário alterar a taxa de aprendizado? E o número máximo de iterações?

Aumentando o grau do polinomio dificulta a convergencia. Foi necessário reduzir o valor da taxa de aprendizado e aumentar o numero máximo de iterações para aproximar ao mínimo global.

2.4. Repita os itens anteriores para d=3

In [11]:

```
# Feature transformation
d = 3
prep = PolynomialFeatures(d,include_bias=False)
X_new = prep.fit_transform(X)
X_val_new = prep.transform(X_val)
# Normal equation
model = Model()
model.fit(X_new, y)
J_ne = model.J_ne

print('w = ',model.w)
print('Train MSE: %f' % mse(model, X_new, y))
print('Val MSE: %f' % mse(model, X_val_new, y_val))
print('Condition number: %f' % np.linalg.cond(model.hessian))
```

```
w =  [-1.57554215  3.91985205 -2.32464225  0.37687856]
Train MSE: 0.325498
Val MSE: 0.334947
Condition number: 63865.336863
```

In [12]:

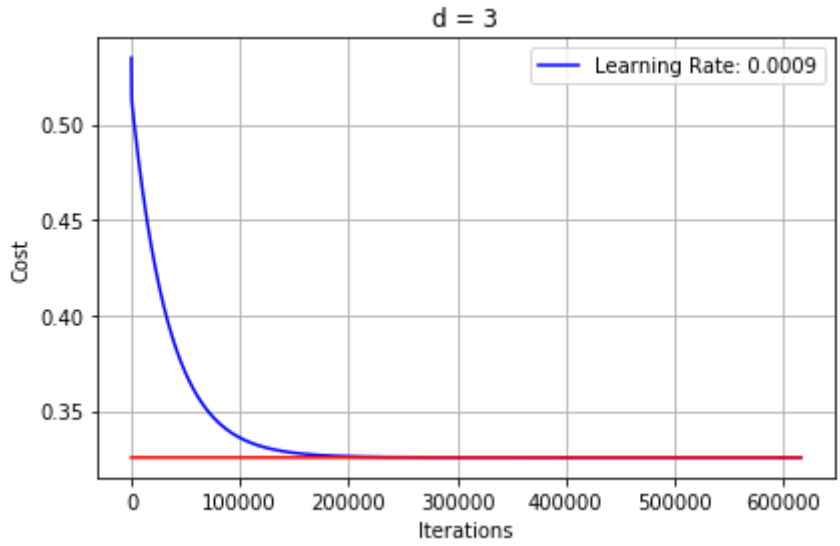
```
# Gradient descent
model = Model(solver = 'gd', lr = 9e-4, maxiter = 620000)
model.fit(X_new, y)
print('w = ',model.w)
print('Train MSE: %f' % mse(model, X_new, y))
print('Val MSE: %f' % mse(model, X_val_new, y_val))
print(f'Iterations: {len(model.J_gd)}')
```

```
w =  [-1.57534334  3.91934363 -2.32435417  0.37683337]
Train MSE: 0.325498
Val MSE: 0.334952
Iterations: 616418
```

In [13]:

```
values = np.arange(len(model.J_gd))
J_ne_values = np.ones(len(model.J_gd))*J_ne
plt.title('d = 3')
plt.plot(values, model.J_gd,'b')
plt.plot(values,J_ne_values,'r')
plt.xlabel('Iterations')
plt.ylabel('Cost')
plt.legend([f'Learning Rate: {model.lr}'])
plt.grid()
plt.tight_layout()
```

```
C:\Users\victo\anaconda3\lib\site-packages\ipykernel_launcher.py:10: UserWar
ning: Creating legend with loc="best" can be slow with large amounts of dat
a.
  # Remove the CWD from sys.path while we load stuff.
C:\Users\victo\anaconda3\lib\site-packages\IPython\core\pylabtools.py:132: U
serWarning: Creating legend with loc="best" can be slow with large amounts o
f data.
  fig.canvas.print_figure(bytes_io, **kw)
```



3. Escalonamento de atributos

Implemente a normalização (escalonamento) de atributos conforme vista em sala, a qual consiste de:

- Subtração da média do atributo, para que passe a ter média nula
- Divisão pelo desvio padrão do atributo, para que passe a ter variância unitária

Esse tipo de normalização também é chamado em alguns contextos de padronização (*standardization*), no sentido de resultar na mesma média (0) e variância (1) de uma variável aleatória gaussiana padrão (*standard*), em contraste com outros tipos de normalização (por exemplo, reescalonamento para a escala [0,1]).

1. Para isso, complete a classe abaixo. Caso deseje confirmar se sua implementação está correta, compare com o transformador `StandardScaler` do módulo `sklearn.preprocessing` .
2. Após implementar corretamente, verifique que seu escalonador funciona corretamente em um pipeline do `sklearn` ; isto é, combine todas as etapas de pré-processamento (transformação de atributos e escalonamento) usando `make_pipeline` . Em seguida, você pode ignorar sua implementação e passar a usar o `StandardScaler` .

3. Refaça os mesmos passos da seção anterior (2.1-2.4) e compare os resultados e o comportamento do algoritmo. Explique.
4. Neste problema, em qual posição o escalonador funciona melhor, antes ou depois da adição de atributos? Cite as evidências que você observou.
5. O uso do escalonador tem impacto do desempenho da solução analítica? Por quê?
6. (OPCIONAL) Experimente outros escalonadores do `sklearn`, como `MinMaxScaler` e `MaxAbsScaler`, e compare o desempenho obtido.

Dicas

- Funções úteis:

  `np.mean(axis=0), np.std(axis=0)`

- Revise as propriedades de broadcasting do NumPy, em particular em operações envolvendo matrizes e arrays 1D.
- Para depurar possíveis erros, lembre-se de verificar o `shape` dos arrays envolvidos.

Alternativamente, o modelo pode ser reexpresso como:

$$\hat{y} = f(\mathbf{x}) = \mathbf{w'}^T\mathbf{x}$$

onde $w'_j = w_j/\sigma_{x_j}$ e $w'_0 = w_0 - \sum_j w_j\bar{x}_j/\sigma_{x_j}$

In [14]:

```
from sklearn.base import BaseEstimator, TransformerMixin
class MyStandardScaler(BaseEstimator, TransformerMixin):
    def fit(self, X, y=None):
        # Compute and store scaler parameters
        self.media = X.mean(axis = 0)
        self.std = X.std(axis = 0)
        return self
    def transform(self, X, y=None):
        # Scale features
        self.fit(X)
        X_new = (X-self.media)/self.std
        return X_new

A = np.array([[1, 1, 1], [2, 4, 8], [3, 9, 27], [4, 16, 64]])

# Pego os valores de media e std armazenados em fit e jogo na fórmula de normalização d
Mystandardize = MyStandardScaler()
print(f"Transform:\n{Mystandardize.transform(A)}\n")
print(f"Media: {Mystandardize.media}")
```

```
Transform:
[[-1.34164079 -1.14458618 -0.98184354]
 [-0.4472136  -0.61631563 -0.69547251]
 [ 0.4472136   0.26413527  0.08182029]
 [ 1.34164079  1.49676654  1.59549575]]

Media: [ 2.5  7.5 25. ]
```

3.1. compare com o transformador StandardScaler do módulo sklearn.preprocessing.

In [15]:

```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
norm_sk = StandardScaler()
norm_sk.fit(A)
print(f"Mean: {norm_sk.mean_}\n")
print(f"Transform:\n{norm_sk.transform(A)}")
```

```
Mean: [ 2.5  7.5 25. ]

Transform:
[[-1.34164079 -1.14458618 -0.98184354]
 [-0.4472136  -0.61631563 -0.69547251]
 [ 0.4472136   0.26413527  0.08182029]
 [ 1.34164079  1.49676654  1.59549575]]
```

3.2. Após implementar corretamente, verifique que seu escalonador funciona corretamente em um pipeline do sklearn; isto é, combine todas as etapas de pré-processamento (transformação de atributos e escalonamento) usando make_pipeline. Em seguida, você pode ignorar sua implementação e passar a usar o StandardScaler.

Verificando o funcionamento do escalonador utilizando Pipeline:

In [16]:

```
from sklearn.pipeline import make_pipeline, Pipeline
```

In [17]:

```
pipe = Pipeline([('scaler', MyStandardScaler())])
```

In [18]:

```
pipe
```

Out[18]:

```
Pipeline(memory=None, steps=[('scaler', MyStandardScaler())], verbose=False)
```

In [19]:

```
#pipe.fit(X)
pipe.transform(A)
```

Out[19]:

```
array([[-1.34164079, -1.14458618, -0.98184354],
       [-0.4472136 , -0.61631563, -0.69547251],
       [ 0.4472136 ,  0.26413527,  0.08182029],
       [ 1.34164079,  1.49676654,  1.59549575]])
```

Implementação

In [20]:

```
def standardized_ne(d, X,y,X_val,y_val,lr=1,maxiter=1000):
    prep = make_pipeline(PolynomialFeatures(d,include_bias=False), StandardScaler())

    X_new = prep.fit_transform(X)
    X_val_new = prep.transform(X_val)

    model = Model(solver='ne',maxiter=maxiter,lr=lr)
    model.fit(X_new, y)
    J_ne = model.J_ne

    print('w = ',model.w)
    print('Train MSE: %f' % mse(model, X_new, y))
    print('Val MSE: %f' % mse(model, X_val_new, y_val))
    print('Condition number: %f' % np.linalg.cond(model.hessian))
    return

def standardized_gd(d, X,y,X_val,y_val,lr=1,maxiter=1000):
    prep = make_pipeline(PolynomialFeatures(d,include_bias=False), StandardScaler())

    X_new = prep.fit_transform(X)
    X_val_new = prep.transform(X_val)

    # Gradient descent
    model = Model(solver = 'gd', lr = lr, maxiter=maxiter)
    model.fit(X_new, y)
    J_gd = model.J_gd

    print('w = ',model.w)
    print('Train MSE: %f' % mse(model, X_new, y))
    print('Val MSE: %f' % mse(model, X_val_new, y_val))
    print(f'Iterations: {len(model.J_gd)}')

    values = np.arange(len(J_gd))
    plt.title(f'd = {d}')
    plt.plot(values, model.J_gd,'b')
    plt.xlabel('Iterations')
    plt.ylabel('Cost')
    plt.legend([f'Learning Rate: {model.lr}'])
    plt.grid()
    plt.tight_layout()
    return
```

==========

d = 1

==========

Valores antigos - ne:

- w = [-0.20189161 0.02333163]
- Train MSE: 0.517264

- Val MSE: 0.601059
- Condition number: 24.959359

In [21]:

```
1 standardized_ne(1,X,y,X_val,y_val)
```

```
w =  [-0.15760574  0.02642926]
Train MSE: 0.517264
Val MSE: 0.601059
Condition number: 1.000000
```

==========

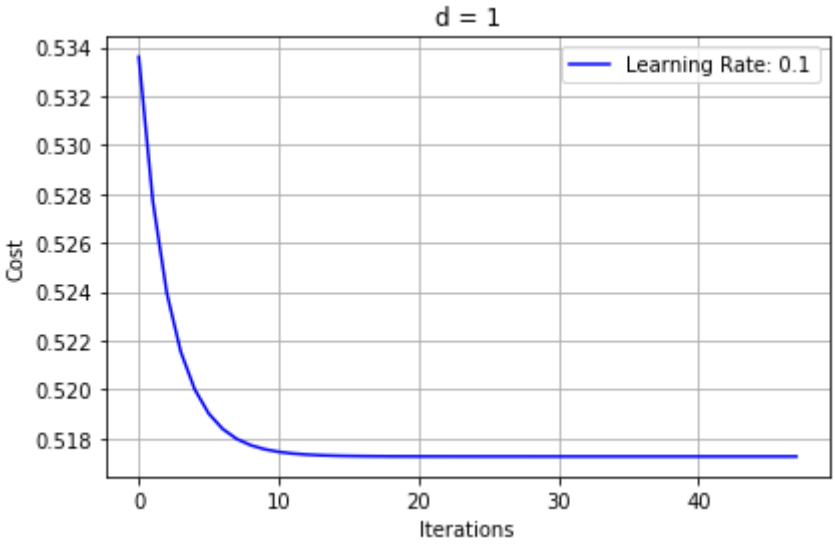
Valores antigos - gd:

- w = [-0.2018722 0.02332372]
- Train MSE: 0.517264
- Val MSE: 0.601058
- Iterations: 197
- lr=1e-1, maxiter=1000

In [22]:

```
1 standardized_gd(1,X,y,X_val,y_val, lr=1e-1)
```

```
w =  [-0.15760222  0.02642867]
Train MSE: 0.517264
Val MSE: 0.601058
Iterations: 48
```



In [ ]:

```
1
```

==========

d = 2

==========

Valores antigos - ne:

- w = [-0.35250239 0.26848578 -0.06441263]
- Train MSE: 0.511996
- Val MSE: 0.611803
- Condition number: 955.280910

Valores atuais - ne:

In [23]:

```
standardized_ne(2,X,y,X_val,y_val)
```

```
w =  [-0.15760574  0.30413138 -0.28703144]
Train MSE: 0.511996
Val MSE: 0.611803
Condition number: 60.533170
```

==========

Valores antigos - gd:

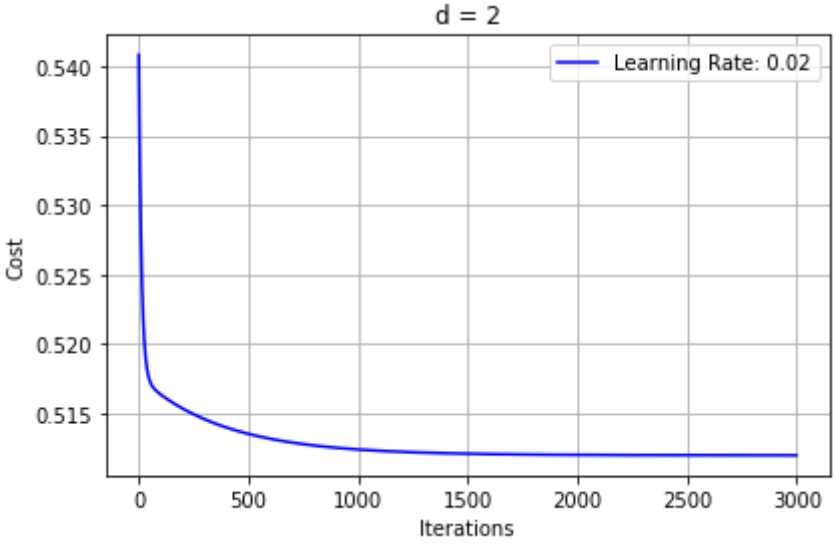
- w = [-0.35244342 0.26841033 -0.06439477]
- Train MSE: 0.511996
- Val MSE: 0.611798
- Iterations: 4097
- lr = 2e-2, maxiter = 4500

Valores atuais - gd:

In [24]:

```
standardized_gd(2,X,y,X_val,y_val, lr=2e-2,maxiter=3000)
```

```
w =  [-0.15760574  0.29816541 -0.28106547]
Train MSE: 0.511998
Val MSE: 0.611473
Iterations: 3000
```



==========

d = 3

==========

Valores antigos - ne:

- w = [-1.57554215 3.91985205 -2.32464225 0.37687856]
- Train MSE: 0.325498
- Val MSE: 0.334947
- Condition number: 63865.336863

Valores atuais -ne:

In [25]:

```
1 standardized_ne(3,X,y,X_val,y_val)
```

```
w =  [ -0.15760574   4.44027247 -10.35892185   6.17476069]
Train MSE: 0.325498
Val MSE: 0.334947
Condition number: 2500.073501
```

==========

Valores antigos - gd:

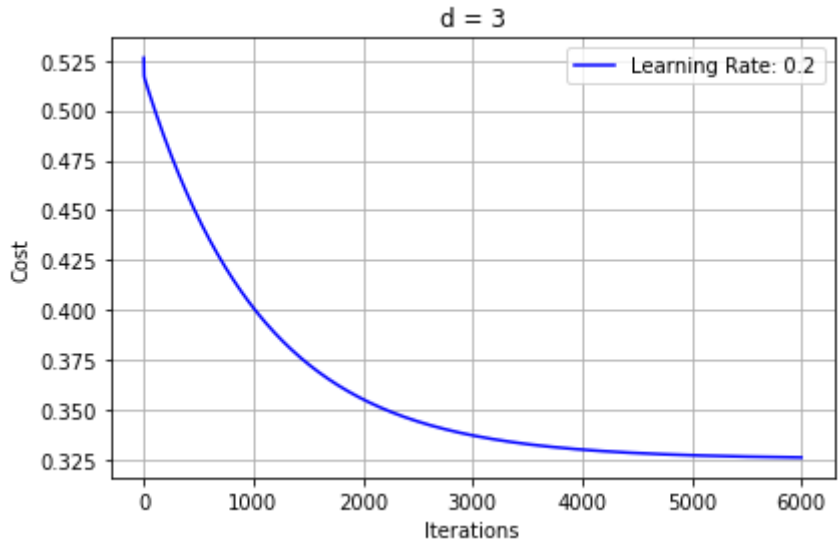
- w = [-1.57534334 3.91934363 -2.32435417 0.37683337]
- Train MSE: 0.325498
- Val MSE: 0.334952
- Iterations: 616418
- lr = 9e-4, maxiter = 620000

Valores atuais - gd:

In [26]:

```
1 standardized_gd(3,X,y,X_val,y_val, lr=2e-1,maxiter=6000)
```

```
w =  [-0.15760574  4.16962583 -9.72277231  5.79476493]
Train MSE: 0.326222
Val MSE: 0.339552
Iterations: 6000
```



==========

Refaça os mesmos passos da seção anterior (2.1-2.4) e compare os resultados e o comportamento do algoritmo. Explique. O método do gradiente permite reduzir o numero de iterações. O método analítico apresentou valores bem menores de condition number, além de convergir muito mais rápido do que o método

do gradiente.

Neste problema, em qual posição o escalonador funciona melhor, antes ou depois da adição de atributos? Cite as evidências que você observou. Depois da adição de atributos. Para o método de newton, os valores de MSE foram bem aproximados do método analítico. As iterações utilizando o método do gradiente foram bem menores. Percebe-se que quanto maior o grau, torna-se mais complexo de convergir até o mínimo global.

O uso do escalonador tem impacto do desempenho da solução analítica? Por quê?Sim. Antes os antributos apresentavam escalas diferentes. Após normalizar, cada atributo passa a ter aproximadamente a mesma escala, priorizando os valores dos atributos. Pode-se analisar que, após o condicionamento, o gradiente apresenta menor dificuldade para convergir.

4. Ainda mais atributos

1. Adicione atributos polinomiais de grau ainda maior (ex: d=4, d=5). O que você observa?
2. Você recomendaria o método do gradiente para um problema desse tipo? Ou seria melhor usar um método de segunda ordem? Explique.

d = 4

In [27]:

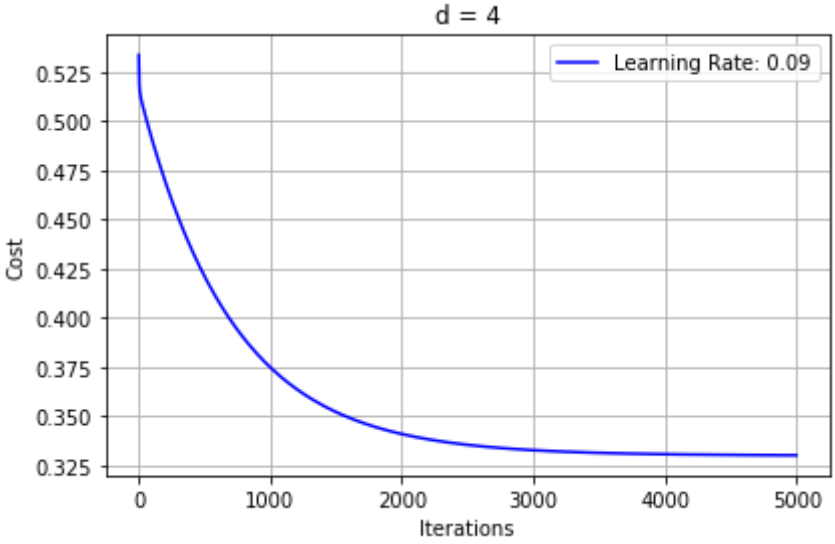
```
1 standardized_ne(4,X,y,X_val,y_val)
```

```
w =  [ -0.15760574   4.39361861 -10.15559895   5.88469504   0.13391458]
Train MSE: 0.325492
Val MSE: 0.335070
Condition number: 85117.554639
```

In [28]:

```
1 standardized_gd(4,X,y,X_val,y_val, lr=9e-2,maxiter=5000)
```

```
w =  [-0.15760574  2.99481152 -4.53902172 -1.66943629  3.4707182 ]
Train MSE: 0.330208
Val MSE: 0.346170
Iterations: 5000
```



d = 6

In [29]:

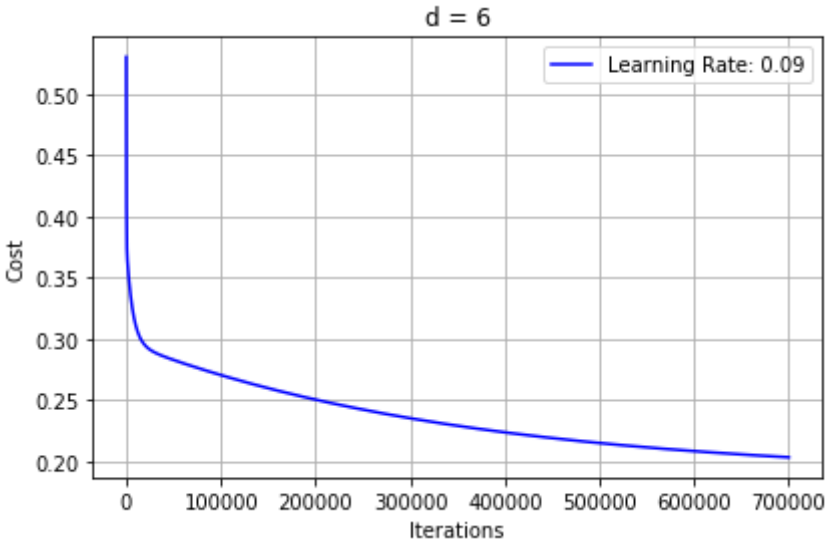
```
1 standardized_ne(6,X,y,X_val,y_val)
```

```
w =  [-1.57605735e-01 -6.86702494e+00  6.69209371e+01 -1.84682744e+02
  2.01576953e+02 -7.88219232e+01  2.00467308e+00]
Train MSE: 0.184140
Val MSE: 0.312047
Condition number: 111117893.791502
```

In [30]:

```
standardized_gd(6,X,y,X_val,y_val, lr=9e-2,maxiter=700000)
```

```
w =  [ -0.15760574  -0.38277974  19.17711622 -48.02558597  14.13100291
  44.25303465 -28.98890834]
Train MSE: 0.203361
Val MSE: 0.290106
Iterations: 700000

C:\Users\victo\anaconda3\lib\site-packages\ipykernel_launcher.py:40: UserWar
ning: Creating legend with loc="best" can be slow with large amounts of dat
a.
C:\Users\victo\anaconda3\lib\site-packages\IPython\core\pylabtools.py:132: U
serWarning: Creating legend with loc="best" can be slow with large amounts o
f data.
  fig.canvas.print_figure(bytes_io, **kw)
```



1. O que você observa? Você recomendaria o método do gradiente para um problema desse tipo? Ou seria melhor usar um método de segunda ordem? Explique. Quanto maior o grau, maior a dificuldade para convergir. Não recomendaria o método do gradiente. O método de segunda ordem seria bem melhor, pela aproximação quadrática utiliza menos recurso computacional e o valor é satisfatório.

5. Conjunto de dados #2

O segundo conjunto de dados que usaremos consiste de dados sobre a venda de casas em King County, USA, entre maio de 2014 e maio de 2015. O objetivo é prever o preço de venda a partir de informações sobre a casa.

In [31]:

```
import pandas as pd
# Original source: http://www.kaggle.com/harlfoxem/housesalesprediction/data
df = pd.read_csv('https://github.com/danilo-silva-ufsc/ml/raw/master/data/kc_house_data
print(df.shape)
df.head()
```

```
(21613, 21)
```

Out[31]:

	id	date	price	bedrooms	bathrooms	sqft_living	sqft_lot	floors
0	7129300520	20141013T000000	221900.0	3	1.00	1180	5650	1.0
1	6414100192	20141209T000000	538000.0	3	2.25	2570	7242	2.0
2	5631500400	20150225T000000	180000.0	2	1.00	770	10000	1.0
3	2487200875	20141209T000000	604000.0	4	3.00	1960	5000	1.0
4	1954400510	20150218T000000	510000.0	3	2.00	1680	8080	1.0

5 rows × 21 columns

Como variável de saída, y, utilize o **logaritmo** neperiano do preço de venda , `price` , i.e., `np.log(price)` . Desta forma o erro na predição de y será função do erro *relativo* na predição do preço, evitando dar peso excessivo aos preços mais altos. Por exemplo, quando a função perda é o erro quadrático, a perda equivale aproximadamente ao quadrado do erro relativo:

$$L(y, \hat{y}) = (\hat{y} - y)^2 = (\log(\hat{p}) - \log(p))^2 = (\log(\hat{p}/p))^2 = (\log(1 + (\hat{p} - p)/p))^2 \approx ((\hat{p} - p)/p)^2$$

Como atributos, utilize apenas as 4 colunas após o preço de venda, i.e.:

- `bedrooms` : número de quartos
- `bathrooms` : número de quartos, em múltiplos de 1/4 (https://www.realtor.com/advice/buy/what-is-a-half-bath/ (https://www.realtor.com/advice/buy/what-is-a-half-bath/))
- `sqft_living` : área da casa, em ft^2
- `sqft_lot` : área do lote, em ft^2

Preparação

1. Prepare e divida o conjunto de dados aleatoriamente em conjuntos de treinamento, validação e teste, nas proporções 60%, 20% e 20%, respectivamente. Para isso, utilize a função `sklearn.model_selection.train_test_split()` .
2. Como função perda para o treinamento, utilize o erro quadrático, e, como métrica de avaliação do modelo, utilize a raiz quadrada do erro quadrático médio. Ambos são equivalentes, mas o segundo resulta em valores numa escala mais agradável para análise e mais fácil de interpretar. Adicionalmente, utilize como métrica de avaliação o erro percentual absoluto médio (https://en.wikipedia.org/wiki/Mean_absolute_percentage_error) (MAPE) do preço de venda (i.e., da variável original `price` , **não** da variável `y = np.log(price)`). Esta métrica é ainda mais fácil de interpretar.

In [32]:

```
# Removing outliers
df = df[df['bedrooms'] < 10]
df = df[df['bathrooms'] < 6]
df = df[df['sqft_living'] < 7000]
df = df[df['sqft_lot'] < 600e3]

X = df[['bedrooms','bathrooms','sqft_living','sqft_lot']].to_numpy()
y = np.log(df['price']).to_numpy()
print(X.shape, y.shape)
```

```
(21560, 4) (21560,)
```

In [33]:

```
from sklearn.model_selection import train_test_split

X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.2, random_state=0
X_train, X_val, y_train, y_val = train_test_split(X_train, y_train, test_size=y_test.sh
del(X,y) # just to make sure we will not use them by mistake. Or set X,y = X_train,y_tr

print(X_train.shape, y_train.shape)
print(X_val.shape, y_val.shape)
print(X_test.shape, y_test.shape)
```

```
(12936, 4) (12936,)
(4312, 4) (4312,)
(4312, 4) (4312,)
```

In [34]:

```
def rmse(model, X, y):
    y_pred = model.predict(X)
    return np.sqrt(mean_squared_error(y_pred,y))
```

In [35]:

```
def mape(model, X, y):
    p = y
    p_pred = model.predict(X)
    return  (np.sum(np.abs((p-p_pred)/p))/len(p))*100
```

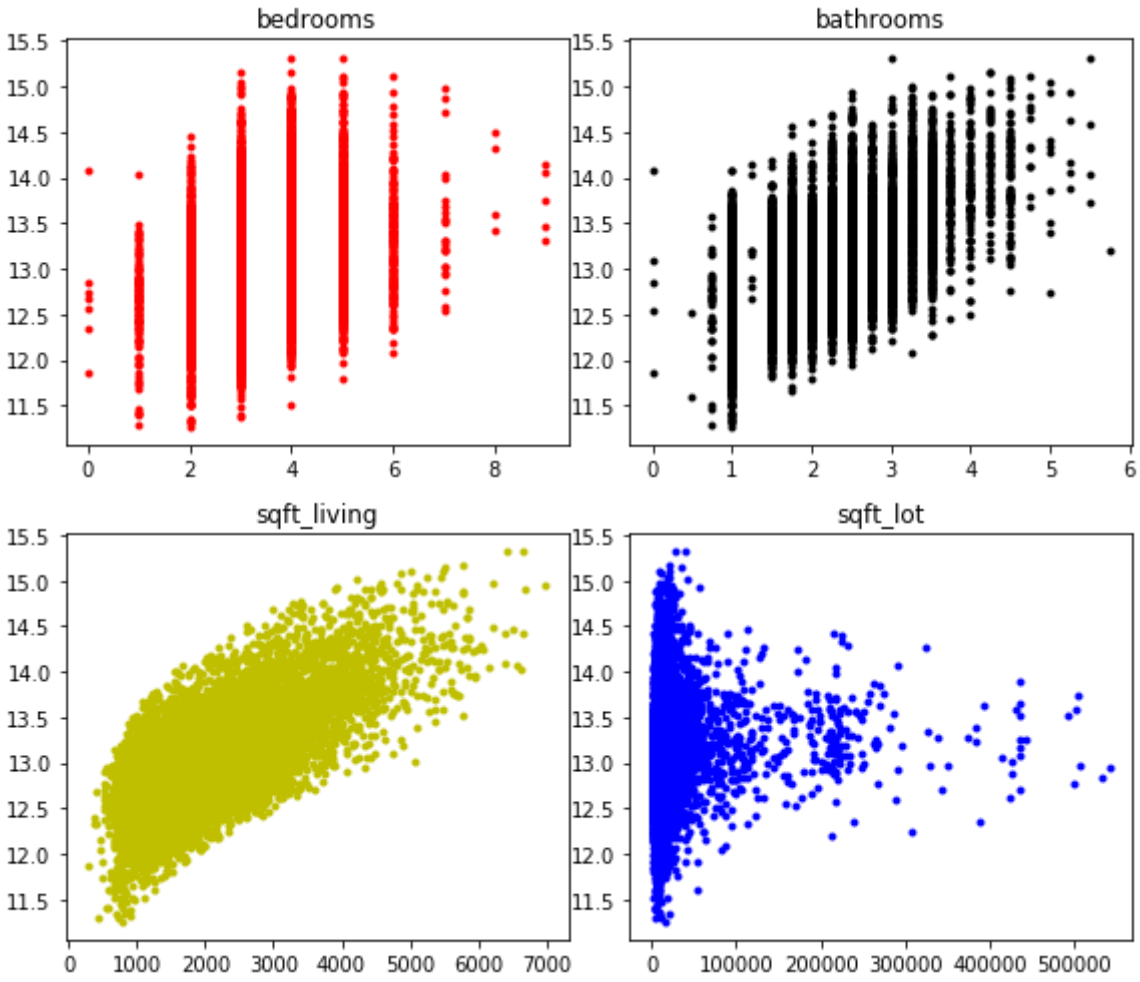
Exploração dos dados

Antes de escolher e começar a treinar um modelo, é útil fazer uma breve exploração dos dados. (Foi dessa exploração inicial que surgiu a ideia, por exemplo, de remover outliers, com aqueles valores específicos.)

3. Para cada atributo, trace o gráfico da variável de saída em função do atributo, **sobre o conjunto de treinamento** (não trace gráficos sobre o conjunto de teste para evitar vazamento de informação). Observe as escalas das variáveis envolvidas e analise se há alguma dependência aparente entre as variáveis. Intuitivamente, qual atributo parece ser mais preditivo do preço do venda?

In [36]:

```
f, axs = plt.subplots(2,2, figsize=(8, 7))

axs[0][0].plot(X_train[:,0],y_train, 'r.')
axs[0][0].set_title('bedrooms')
axs[0][1].plot(X_train[:,1],y_train, 'k.')
axs[0][1].set_title('bathrooms')
axs[1][0].plot(X_train[:,2],y_train, 'y.')
axs[1][0].set_title('sqft_living')
axs[1][1].plot(X_train[:,3],y_train, 'b.')
axs[1][1].set_title('sqft_lot')

plt.tight_layout()
```



Regressão linear

4. Inicialmente você deve treinar um modelo de regressão linear sem regularização e calcular o desempenho da predição (RMSE e MAPE) sobre o conjunto de treinamento e sobre o conjunto de validação. Fique à vontade para usar as funções do `sklearn`, não há necessidade de usar o método do gradiente.
5. Você diria que o modelo treinado sofre de underfitting, overfitting ou nenhum dos dois? Explique.
6. Analisando o vetor de pesos do modelo treinado (`model.coef_`), qual atributo você diria que é o mais importante para a predição? Por quê? Esta observação confirma a sua hipótese do item anterior?

Explique.

Dica

- Para acessar o regressor dentro de um *pipeline* do sklearn, inicialize-o fora do *pipeline* ou acesse-o via `model.steps[-1][1]` .

In [37]:

```
from sklearn.linear_model import LinearRegression
from sklearn.metrics import mean_squared_error
```

In [38]:

```
model = LinearRegression()
model.fit(X_train,y_train)
```

Out[38]:

```
LinearRegression(copy_X=True, fit_intercept=True, n_jobs=None, normalize=Fal
se)
```

In [39]:

```
train_pred = model.predict(X_train)
val_pred = model.predict(X_val)
```

In [40]:

```
print(f"MSE Train: {rmse(model,X_train,y_train)}")
print(f"MAPE Train: {mape(model,X_train,y_train)}\n")
print(f"MSE Val: {rmse(model,X_val, y_val)}")
print(f"MAPE Val: {mape(model,X_val,y_val)}")
```

```
MSE Train: 0.3730442212736104
MAPE Train: 2.323080739214794

MSE Val: 0.3775202582515239
MAPE Val: 2.352042573743753
```

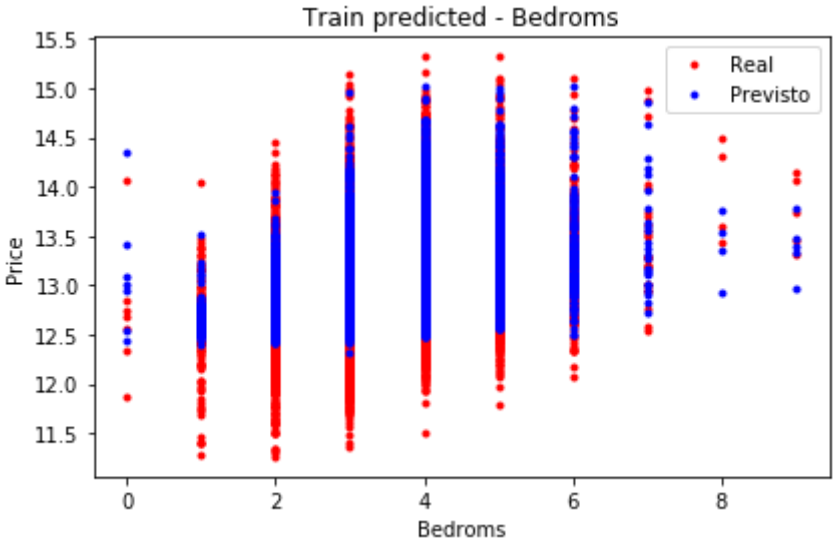
In [41]:

```
def plot_train(X,y,y_pred,title = 'Train predicted - Bedroms', xlabel ='Bedroms', ylabe
    plt.plot(X, y, 'r.')
    plt.plot(X, train_pred, 'b.')
    plt.legend(['Real','Previsto'])
    plt.title(title)
    plt.xlabel(xlabel)
    plt.ylabel(ylabel)
    plt.tight_layout()
    return

def plot_val(X,y,y_pred,title = 'Val predicted - Bedroms', xlabel ='Bedroms', ylabel= '
    plt.plot(X, y, 'r.')
    plt.plot(X, val_pred, 'b.')
    plt.legend(['Real','Previsto'])
    plt.title(title)
    plt.xlabel(xlabel)
    plt.ylabel(ylabel)
    plt.tight_layout()
    return
```

Plot Bedroms

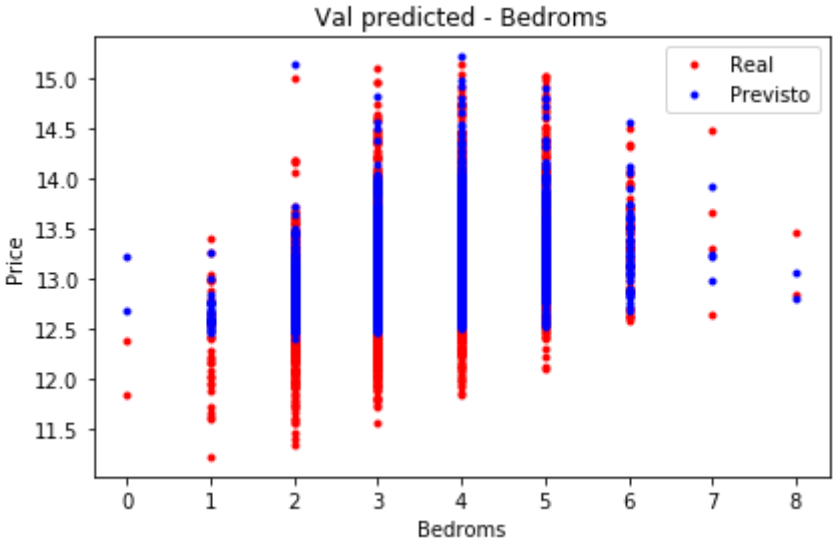
In [42]:

```
plot_train(X_train[:,0],y_train,train_pred)
```



In [43]:

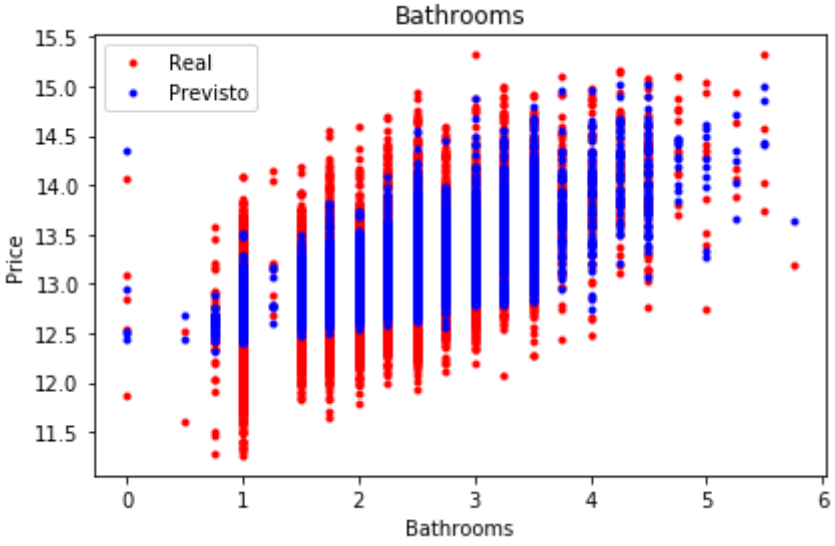
```
1 plot_val(X_val[:,0], y_val, val_pred)
```



Plot Bathrooms

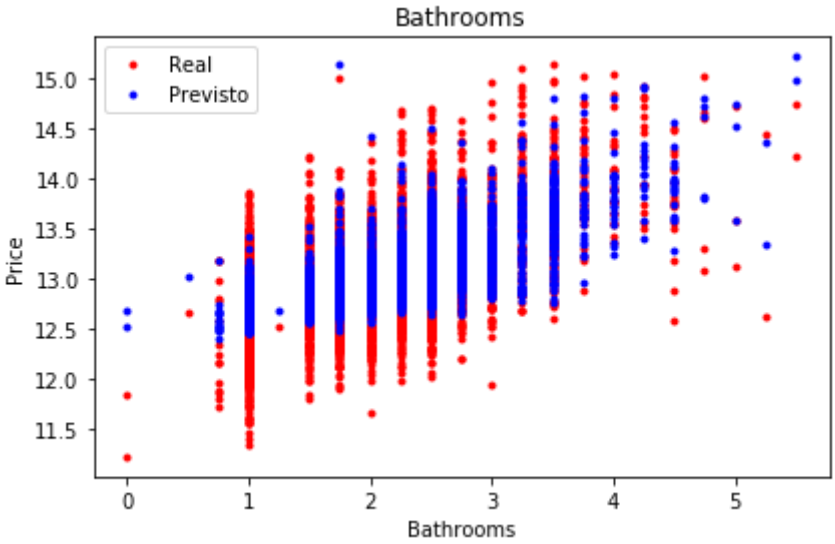
In [44]:

```
1 plot_train(X_train[:,1],y_train,train_pred, title = 'Bathrooms', xlabel = 'Bathrooms')
```



In [45]:

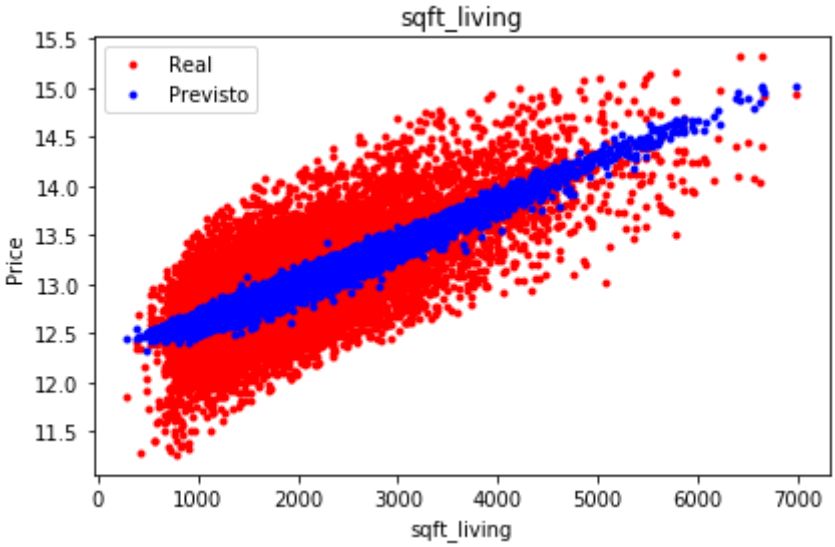
```
1 plot_val(X_val[:,1], y_val, val_pred, title = 'Bathrooms', xlabel = 'Bathrooms')
```



Plot sqft_living

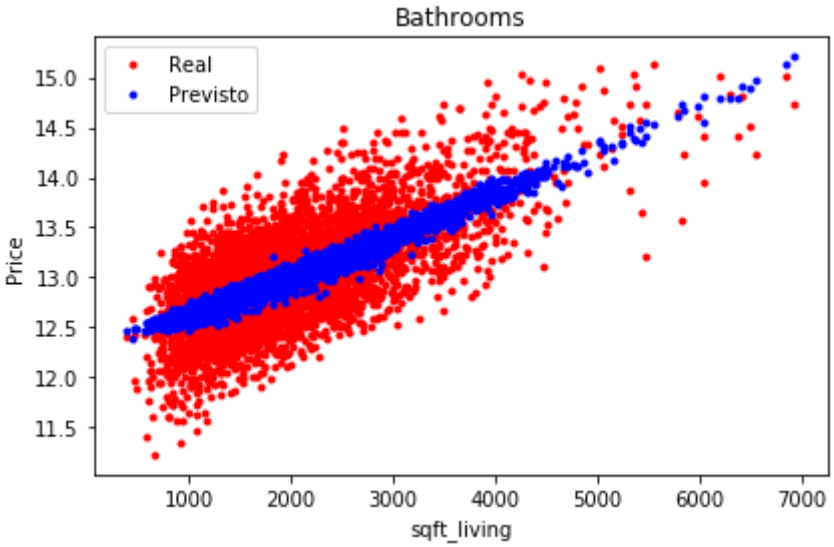
In [46]:

```
1 plot_train(X_train[:,2], y_train,train_pred, title = 'sqft_living', xlabel = 'sqft_livi
```



In [47]:

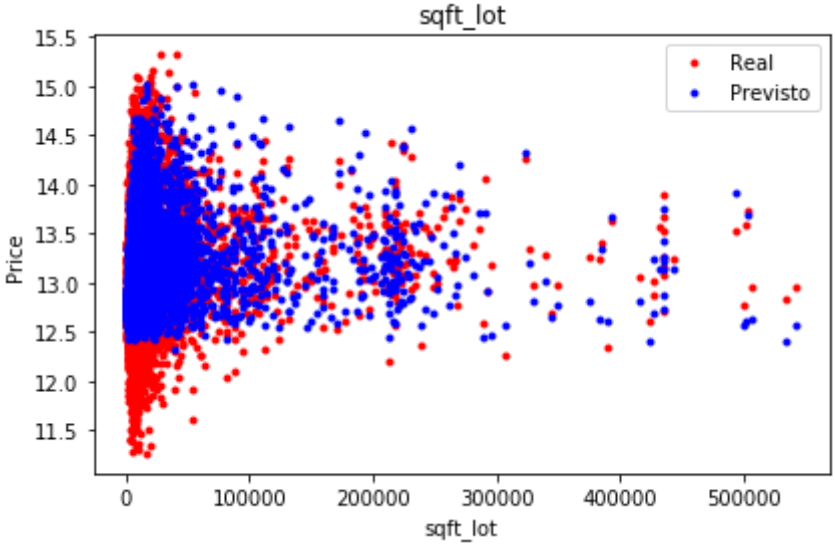
```
1 plot_val(X_val[:,2], y_val, val_pred, title = 'Bathrooms', xlabel = 'sqft_living')
```



Plot sqft_lot

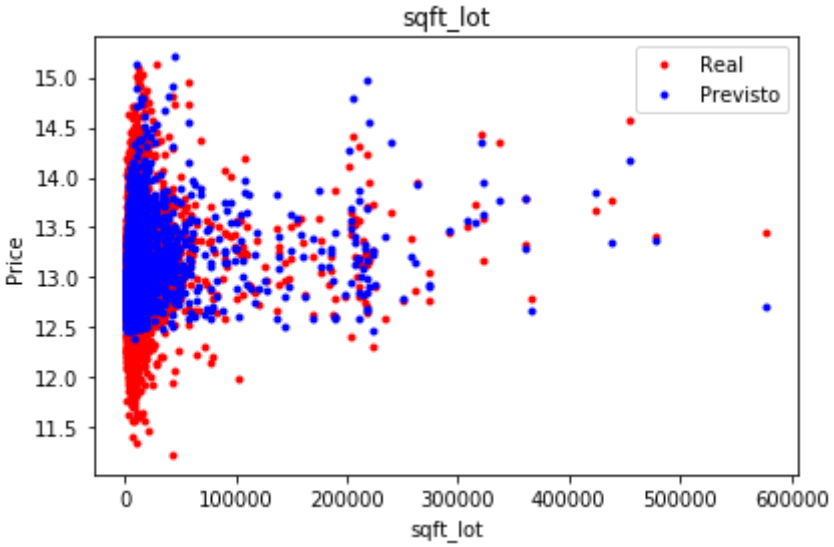
In [48]:

```
1 plot_train(X_train[:,3], y_train,train_pred, title = 'sqft_lot', xlabel = 'sqft_lot')
```



In [49]:

```
plot_val(X_val[:,3], y_val, val_pred, title = 'sqft_lot', xlabel = 'sqft_lot')
```



Você diria que o modelo treinado sofre de underfitting, overfitting ou nenhum dos dois? Explique. Nenhum dos dois. Os modelos de treino e validação apresentam valores de MSE bem próximos.

Analisando o vetor de pesos do modelo treinado (model.coef_), qual atributo você diria que é o mais importante para a predição? Por quê? Esta observação confirma a sua hipótese do item anterior? Explique. Bathrooms, devido ao maior coeficiente de determinação. Confirma, pois os dados de validação tenderam a aproximar sem precisar utilizar métodos de regularização.

In [50]:

```
print(f"Bedroms: {model.coef_[0]}")
print(f"Bathrooms: {model.coef_[1]}")
print(f"sqft_living: {model.coef_[2]}")
print(f"sqft_lot: {model.coef_[3]}")
```

```
Bedroms: -0.077113273618179
Bathrooms: 0.052419478598470494
sqft_living: 0.0004212568862957101
sqft_lot: -4.5131645281671524e-07
```

Aprimorando o modelo

7. Usando o que vimos até agora na disciplina, tente ao máximo melhorar o desempenho do modelo neste conjunto de dados. Reporte o desempenho obtido (RMSE e MAPE).

Dica:

- Reveja os conceitos aprendidos na Aula 2 e no Exercício 2.
- Se desejar aplicar alguma transformação de atributos "customizada", você tem duas opções: criar um transformador customizado do `sklearn` e integrá-lo em uma *pipeline* (ver último item opcional do Exercício 2), ou, *somente se for uma transformação que não envolve estimação de parâmetros*, você pode aplicá-la diretamente a todo o conjunto de dados (matrix $\mathbf{X}$ antes do *split*).

In [51]:

```
import pandas as pd
# Original source: http://www.kaggle.com/harlfoxem/housesalesprediction/data
df = pd.read_csv('https://github.com/danilo-silva-ufsc/ml/raw/master/data/kc_house_data
print(df.shape)
```

```
(21613, 21)
```

In [52]:

```
# Removing outliers
df = df[df['bedrooms'] < 10]
df = df[df['bathrooms'] < 6]
df = df[df['sqft_living'] < 7000]
df = df[df['sqft_lot'] < 600e3]

X = df[['bedrooms','bathrooms','sqft_living','sqft_lot']].to_numpy()
y = np.log(df['price']).to_numpy()
print(X.shape, y.shape)
```

```
(21560, 4) (21560,)
```

Ridge

In [53]:

```
from sklearn.linear_model import Ridge
```

In [54]:

```
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.2, random_state=0
X_train, X_val, y_train, y_val = train_test_split(X_train, y_train, test_size=y_test.sh
del(X,y) # just to make sure we will not use them by mistake. Or set X,y = X_train,y_tr

print(X_train.shape, y_train.shape)
print(X_val.shape, y_val.shape)
print(X_test.shape, y_test.shape)
```

```
(12936, 4) (12936,)
(4312, 4) (4312,)
(4312, 4) (4312,)
```

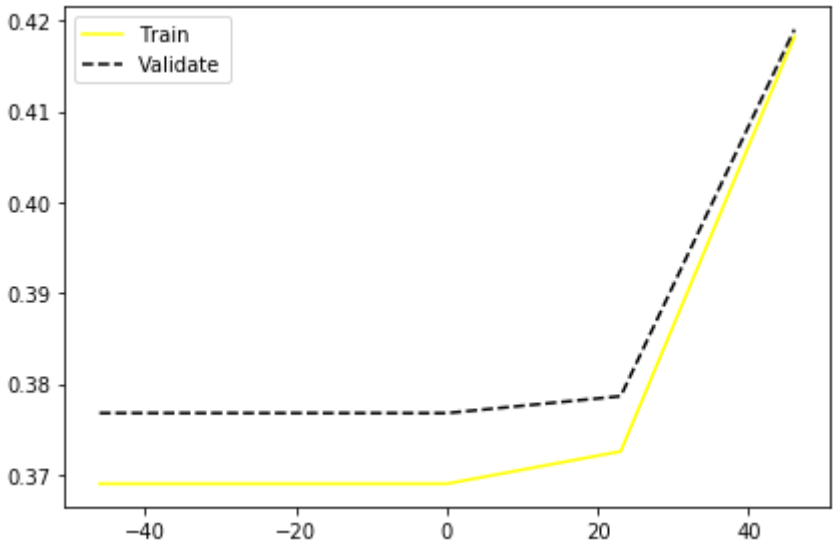
In [55]:

```
poly = PolynomialFeatures(degree = 3)
X_train = poly.fit_transform(X_train)
X_val = poly.fit_transform(X_val)
X_test = poly.fit_transform(X_test)
```

In [56]:

```
alphas = 10**np.linspace(-20,20,num = 5)
alphas

J_train = []
J_val = []

for c in range(len(alphas)):
    lamb = alphas[c]
    ridge = Ridge(alpha = lamb)

    ridge.fit(X_train, y_train)

    ridge_train_pred = ridge.predict(X_train)
    ridge_val_pred = ridge.predict(X_val)

    new_J_train = np.sqrt(mean_squared_error(y_train, ridge_train_pred))
    new_J_val = np.sqrt(mean_squared_error(y_val, ridge_val_pred))

    J_train.append(new_J_train)
    J_val.append(new_J_val)

ln_alpha = np.log(alphas)
plt.plot(ln_alpha,J_train,'yellow')
plt.plot(ln_alpha,J_val,'k--')

plt.legend(['Train','Validate'])
plt.tight_layout()
```

```
C:\Users\victo\anaconda3\lib\site-packages\sklearn\linear_model\_ridge.py:14
8: LinAlgWarning: Ill-conditioned matrix (rcond=3.87308e-56): result may not
be accurate.
  overwrite_a=True).T
C:\Users\victo\anaconda3\lib\site-packages\sklearn\linear_model\_ridge.py:14
8: LinAlgWarning: Ill-conditioned matrix (rcond=3.87308e-46): result may not
be accurate.
  overwrite_a=True).T
C:\Users\victo\anaconda3\lib\site-packages\sklearn\linear_model\_ridge.py:14
8: LinAlgWarning: Ill-conditioned matrix (rcond=3.87308e-36): result may not
be accurate.
  overwrite_a=True).T
C:\Users\victo\anaconda3\lib\site-packages\sklearn\linear_model\_ridge.py:14
8: LinAlgWarning: Ill-conditioned matrix (rcond=3.85304e-26): result may not
be accurate.
  overwrite_a=True).T
```



In [57]:

```
print(f"Menor valor de validação: {round(min(J_val),3)}")
```

```
Menor valor de validação: 0.377
```

In [58]:

```
index_min_MSE = J_val.index(min(J_val))
index_min_MSE
```

Out[58]:

```
2
```

In [59]:

```
alphas[index_min_MSE]
min_lambda = alphas[index_min_MSE]
min_lambda
```

Out[59]:

```
1.0
```

Normalização

In [60]:

```
scaler = StandardScaler()
X_train_norm = scaler.fit_transform(X_train)
X_val_norm = scaler.fit_transform(X_val)
```

In [61]:

```
lamb = 1
model = Ridge(alpha = lamb )
model.fit(X_train_norm,y_train)
print(f"RMSE Train: {rmse(model,X_train_norm,y_train)}")
print(f"MAPE Train: {mape(model,X_train_norm,y_train)}\n")
print(f"RMSE Val: {rmse(model,X_val_norm,y_val)}")
print(f"MAPE Val: {mape(model,X_val_norm,y_val)}")
```

```
RMSE Train: 0.3690420969529713
MAPE Train: 2.29238094166335

RMSE Val: 0.37701968092501503
MAPE Val: 2.3482854215403073
```

(OPCIONAL)

- Tente utilizar mais colunas da tabela original para melhorar o desempenho.
- Utilize um outro conjunto de dados com múltiplos atributos. Sugestão: https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Wine+Quality (https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Wine+Quality)

In [ ]:

```
1
```