Regressão Linear

Advanced Institute for Artificial Intelligence – AI2

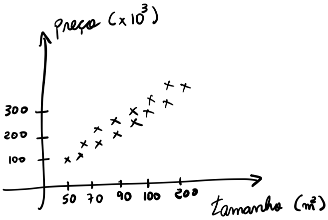
https://advancedinstitute.ai

Regressão Linear Univariada

Em aprendizado de máquina, existem diversos problemas para os quais conhecemos um conjunto de valores de entrada e desejamos **estimar** o valor de saída. Um exemplo bastante comum é a precificação de imóveis, cujo valor de entrada corresponde ao tamanho de uma casa e a saída desejada é o seu preço.

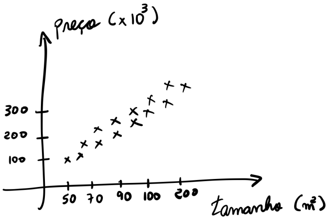
Regressão Linear Univariada

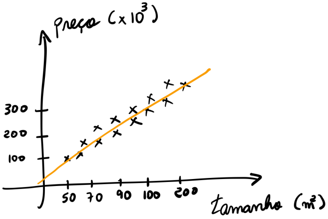
Em aprendizado de máquina, existem diversos problemas para os quais conhecemos um conjunto de valores de entrada e desejamos **estimar** o valor de saída. Um exemplo bastante comum é a precificação de imóveis, cujo valor de entrada corresponde ao tamanho de uma casa e a saída desejada é o seu preço.



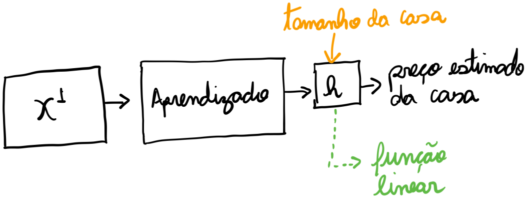
Regressão Linear Univariada

Em aprendizado de máquina, existem diversos problemas para os quais conhecemos um conjunto de valores de entrada e desejamos **estimar** o valor de saída. Um exemplo bastante comum é a precificação de imóveis, cujo valor de entrada corresponde ao tamanho de uma casa e a saída desejada é o seu preço.





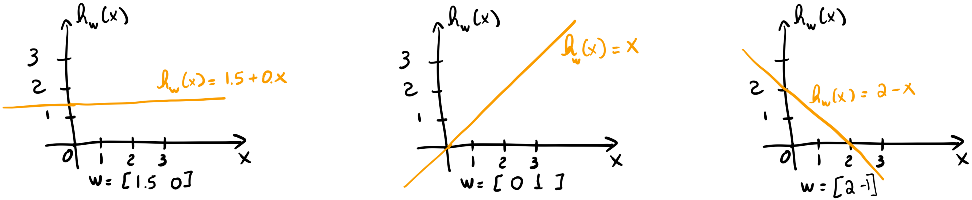
Definição do problema: seja um conjunto de dados $\mathcal{X} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_z, y_z)\}$ tal que $x_i \in \mathbb{R}$ corresponde ao dado de entrada e $y_i \in \mathbb{R}$ denota o seu respectivo valor de saída. Temos, ainda, que $\mathcal{X}$ pode ser **particionado** da seguinte forma: $\mathcal{X} = \mathcal{X}^1 \cup \mathcal{X}^2$, em que $\mathcal{X}^1$ e $\mathcal{X}^2$ denotam os conjuntos de dados de **treinamento** e **teste**, respectivamente. Nosso objetivo é, dado o conjunto de treinamento, aprender uma função $h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ que consiga estimar o valor de uma casa dado o seu tamanho.



A técnica chama-se **Regressão Linear Univariada** porque aprendemos uma **função linear** utilizando apenas **uma** variável de entrada. Desta forma, temos a seguinte formulação para essa função:

$$h_{\boldsymbol{w}}(x) = w_0 + w_1 x, \tag{1}$$

em que w_0 e w_1 denotam os parâmetros do modelo (equação da reta), podendo ser representados como $\boldsymbol{w} = [w_0 \; w_1]$.



Desta forma, como podemos observar, temos diferentes comportamentos para $h_{\boldsymbol{w}}(x)$, a qual é também chamada de **função hipótese**. A ideia principal da regressão linear é escolher o vetor de parâmetros $\boldsymbol{w}$ tal que $h_{\boldsymbol{w}}(x)$ seja a mais próxima possível das saídas das amostras de nosso conjunto de treinamento. Matematicamente falando, temos o seguinte problema de **minimização**:

$$\boldsymbol{w}^* = \arg\min_{\boldsymbol{w}} \left\{ \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} (h_w(x_i) - y_i)^2 \right\}, \tag{2}$$

em que m denota o tamanho do conjunto de treinamento. Essa formulação corresponde ao conhecido **erro médio quadrático**, do inglês *mean squared error* (MSE).

A Equação 2 é usualmente chamada de **função de custo** ou **função de perda**, também conhecida por **erro médio quadrático**. Podemos simplificar a notação escrevendo a Equação 2 da seguinte forma:

$$\boldsymbol{w}^* = \arg\min_{\boldsymbol{w}}\{J(\boldsymbol{w})\}, \tag{3}$$

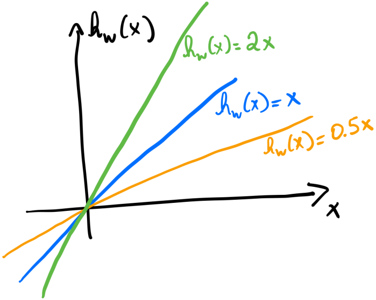
em que

$$J(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}(h_w(x_i) - y_i)^2. \tag{4}$$

No entanto, vamos simplificar um pouco mais o problema e assumir que $\boldsymbol{w} = [0 \ w_1]$, ou seja, vamos assumir que $w_0 = 0$ (a reta passa na origem do sistema de coordenadas).

Assim sendo, a Equação 1 pode ser escrita da seguinte forma:

$$h_{\boldsymbol{w}}(x) = w_0 + w_1 x = w_1 x. \tag{5}$$



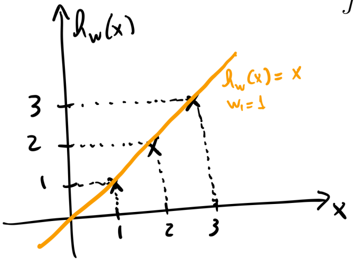
Assumindo, então, que $w_0 = 0$, podemos escrever a Equação 3 da seguinte forma:

$$\boldsymbol{w}^* = \underset{w_1}{\arg\min} \{J(w_1)\}. \tag{6}$$

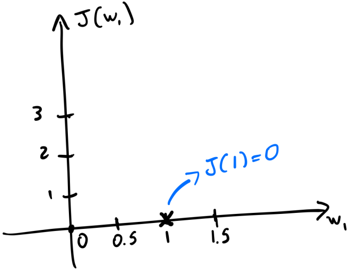
O nosso problema passar a ser, agora, encontrar um valor apropriado para w_1 de tal forma que o valor de $J(w_1)$ seja o menor possível. Resumindo, o que temos definido até então para o problema:

- Função hipótese: $h_{\boldsymbol{w}}(x) \approx w_1 x$
- Função de custo: $J(\boldsymbol{w}) \approx J(w_1)$

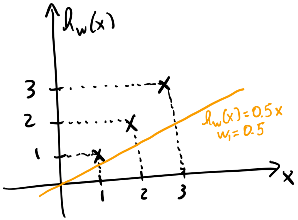
Vamos ilustrar algumas situações para entendermos o comportamento de ambas funções (hipótese e custo). Suponha o conjunto de treinamento $\mathcal{X}^1 = \{(1,1),(2,2),(3,3)\}$. Neste caso, temos que $m = 3$. Ademais, suponha que $h_{\boldsymbol{w}}(x) = x$, ou seja, $w_1 = 1$.



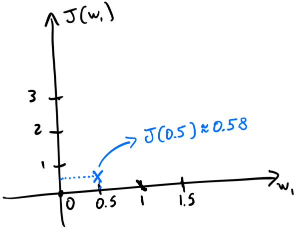
$$
\begin{aligned}
J(w_1) &= \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{3}(h_{\boldsymbol{w}}(x_i) - y_i)^2 \\
&= \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{3}(w_1 x_i - y_i)^2 \\
&= \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{3}(x_i - y_i)^2 \\
&= \frac{1}{2.3}[(1-1)^2 + (2-2)^2 + (3-3)^2] \\
&= 0
\end{aligned}
$$



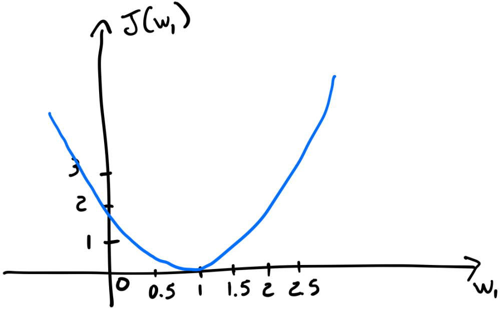
Agora, suponha que a nossa função hipótese é dada por $h_{\boldsymbol{w}}(x) = 0.5x$, ou seja, $w_1 = 0.5$.



$$
\begin{aligned}
J(w_1) &= \frac{1}{2.3}[(0.5-1)^2 + (1-2)^2 + (1.5-3)^2] \\
&= \frac{1}{2.3}(0.25 + 1 + 2.25) \\
&= \frac{1}{6}(3.5) \\
&\approx 0.58
\end{aligned}
$$



Qual o comportamento da função de custo caso tenhamos diferentes valores para w_1?



Desta forma, temos que $\boldsymbol{w}^* = w_1 = 1$ é o valor **ótimo**, ou seja, aquele que minimiza o valor de $J(w_1)$.

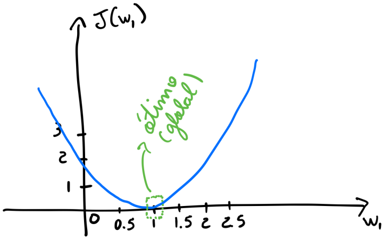
Uma alternativa ao uso do MSE é o chamado **erro médio absoluto**, do inglês *mean absolute error* (MAE). Mas qual o intuito de utilizarmos MSE? Notem que o formato da função de custo nos remete à uma função quadrática!

A pergunta agora é: como podemos escolher bons valores para $\boldsymbol{w} = [w_0 \ w_1]$? Podemos usar o método da **força bruta** testando um número suficientemente grande valores de aleatórios para $\boldsymbol{w}$. É uma boa abordagem?

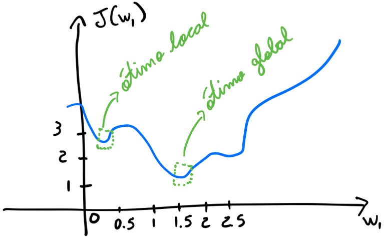
Uma solução é o uso da técnica conhecida por **gradiente descendente**, que faz a busca pelos valores de $\boldsymbol{w}$ baseando-se na **derivada** da função de custo. Como ele funciona?

1. Atribua valores aleatórios para $\boldsymbol{w} = [w_0 \; w_1]$.
2. Avalie a função de custo $J(\boldsymbol{w})$.
3. Caso o **critério de parada tenha sido atingido**, vá para o passo 5.
4. Atualize o vetor $\boldsymbol{w}$ e retorne ao Passo 2.
5. Fim do algoritmo.

Qual o problema? As funções de custo geralmente não são **convexas**.

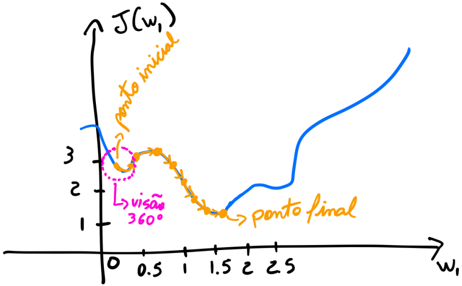


Função convexa



Função não convexa

Gradiente descendente busca a “melhor" solução a partir de um ponto inicial. Com base em informações dadas pela **derivada** da função, ele tende a encontrar um ótimo local ou global. Caso a função seja convexa, ele encontrará o ótimo global. Quais as informações que a derivada nos dá?

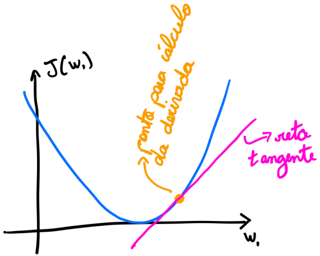


Matematicamente falando, podemos modelar a ideia por meio da **regra de atualização** dos parâmetros de $\boldsymbol{w}$:

$$w_j^{(t+1)} = w_j^{(t)} - \alpha \frac{\partial J(\boldsymbol{w})}{\partial w_j}, \tag{7}$$

em que $j \in \{0, 1\}$ e α corresponde à **taxa de aprendizado**. Já o termo $\dfrac{\partial J(\boldsymbol{w})}{\partial w_j}$ denota a **derivada parcial**, que deverá ser calculada para cada parâmetro de nossa equação da reta.

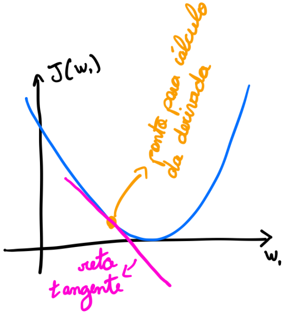
A questão principal que temos agora é: como calcular o termo derivativo, ou seja, as derivadas parciais? Para fins de simplicidade, suponha, novamente que $w_0 = 0$. Assim, nosso objetivo passa a ser o de minimizar $J(w_1)$ para algum valor $w_1 \in \mathbb{R}$.



A derivada em um ponto nos retorna duas principais informações: **direção** e **magnitude**. A primeira é dada pela inclinação (sinal) da reta tangente no ponto que desejamos calcular a derivada.

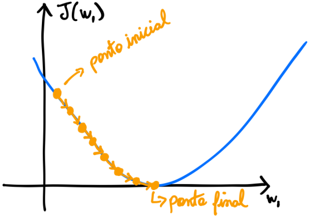
Neste exemplo, a inclinação é positiva, ou seja, $\frac{\partial J(\boldsymbol{w})}{\partial w_j} > 0$. Desta forma, estamos diminuindo o valor de w_1.

Já no exemplo abaixo, temos que a inclinação da reta é negativa, ou seja, $\dfrac{\partial J(\boldsymbol{w})}{\partial w_j} < 0$. Assim, estamos aumentando o valor de w_1.

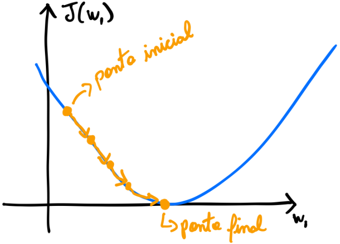


A informação de magnitude é o próprio valor retornado pelo termo derivativo, desconsiderando o sinal.

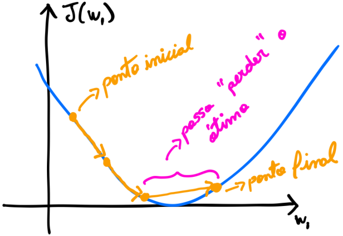
Qual a importância da taxa de aprendizado na Equação 7? Basicamente, baixos valores de α nos levam à uma convergência mais lenta, ao passo que valores maiores podem acelerar esse processo. No entanto, precisamos tomar cuidado com essa escolha.



(a) α pequeno

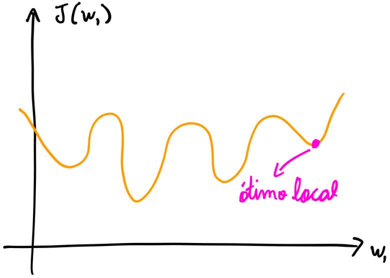


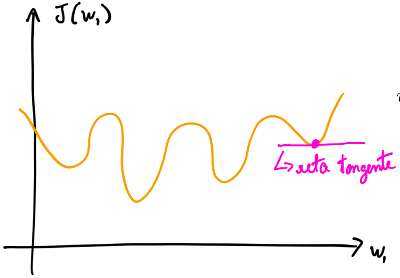
(b) α adequado



(c) α grande

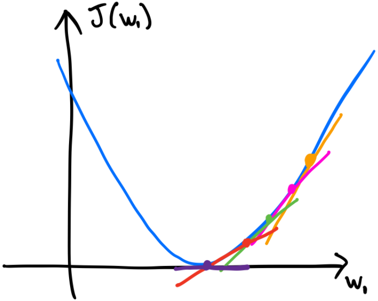
No entanto, o que acontece com o gradiente descendente se a inicialização ocorrer em um ótimo local? A inclinação é igual à 0!





$$
\begin{aligned}
w_1^{(t+1)} &= w_1^{(t)} - \alpha \frac{\partial J(\boldsymbol{w})}{\partial w_j} \\
&= w_1^{(t)} - \alpha .0 \\
&= w_1^{(t)}
\end{aligned}
$$

À medida que aproximamos do ponto ótimo, o próprio gradiente descendente vai tomando passos menores, pois o termo derivativo $\frac{\partial J(\boldsymbol{w})}{\partial w_j} \to 0$.



Precisamos, agora, calcular as derivadas parciais para $\frac{\partial J(\boldsymbol{w})}{\partial w_j}$. Temos que:

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{w})}{\partial w_0} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (h_{\boldsymbol{w}}(x_i) - y_i), \tag{8}$$

e

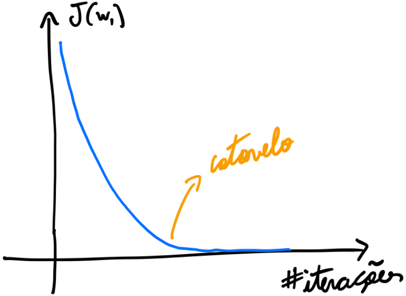
$$\frac{\partial J(\boldsymbol{w})}{\partial w_1} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} [(h_{\boldsymbol{w}}(x_i) - y_i)x_i]. \tag{9}$$

Desta forma, o algoritmo do gradiente descendente pode ser sumarizado da seguinte forma:

1. Atribua valores aleatórios para $\boldsymbol{w} = [w_0 \ w_1]$.
2. Avalie a função de custo $J(\boldsymbol{w})$.
3. Caso o **critério de parada tenha sido atingido**, vá para o passo 7.
4. $w_0^{(t+1)} = w_0^{(t)} - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (h_{\boldsymbol{w}}(x_i) - y_i)$.
5. $w_1^{(t+1)} = w_1^{(t)} - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} [(h_{\boldsymbol{w}}(x_i) - y_i)x_i]$.
6. Retorne ao Passo 2.
7. Fim do algoritmo.

Note que w_0 e w_1 precisam ser atualizados sumultaneamente!

Quais são bons critérios de parada? Podemos utilizar um número fixo de iterações ou verificar quando o valor função de custo não é mais atualizado (erro não diminui).



Regressão Linear Multivariada

Suponha, agora, que tenhamos mais variáveis para representar o problema, visto que utilizar apenas o tamanho da casa não é suficiente para estimarmos o seu valor (número de quartos, capacidade da garagem, piscina, etc).

Neste caso, assuma que n corresponde ao número dessas variáveis, ou seja, temos agora que $\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^n$. Assim sendo, nossa função hipótese possui a seguinte formulação:

$$
\begin{aligned}
h_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x}) &= w_0 + w_1 x^1 + w_2 x^2 + \ldots w_n x^n && (10) \\
&= w_0 + \sum_{j=1}^{n} w_j x^j. && (11)
\end{aligned}
$$

Para fins de simplicidade, vamos assumir que $x^0 = 1$, ou seja, $\boldsymbol{x} = [x^0 \; x^1 \; x^2 \; \ldots \; x^n] \in \mathbb{R}^{n+1}$. Assim sendo, a Equação 11 pode ser escrita da seguinte forma:

$$h_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x}) = w_0 x^0 + \sum_{j=1}^{n} w_j x^j \tag{12}$$

$$= \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}. \tag{13}$$

A equação acima é, na verdade, a equação do hiperplano, ou seja, uma reta multimensional. Desta forma, a regressão linear multivariada generaliza a regressão linear univariada para um número maior de dimensões.

Nosso problema agora passa a ter os seguintes itens:

- Função hipótese: $h_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}$.
- Função de custo: $J(\boldsymbol{w}) = \dfrac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}(h_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x}_i) - y_1)^2$.
- Derivada parcial: $\dfrac{\partial J(\boldsymbol{w})}{\partial w_j} = \dfrac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}[(h_{\boldsymbol{w}}(x_i) - y_i)x_i^j]$.

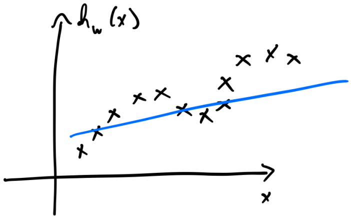
O algoritmo do gradiente descendente é o mesmo do apresentado para a regressão linear univariada.

Como podemos melhorar a convergência durante o aprendizado? Algumas opções:

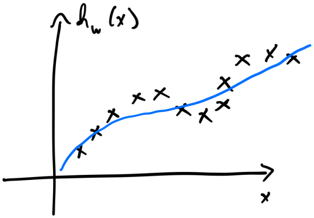
- Gradiente descendente em lotes (*mini-batches*) ou *online*.
- Gradiente descendente estocástico:
  - Bom para grandes conjuntos de dados.
  - Converge mais rápido do que o gradiente descendente (pode não avaliar todo o espaço de busca).
  - Parecido com o gradiente descendente *online*, porém é aplicado sobre amostragens aleatórias do conjunto de treinamento.

Regularização

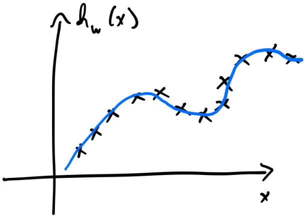
Com o intuito de evitar com que nossos modelos tornem-se muito "especializados", podemos fazer uso de técnicas de **regularização**. Vamos visualizar algumas as três situações que podem ocorrer quando estamos trabalhando com regressão de dados.



Subtreinamento

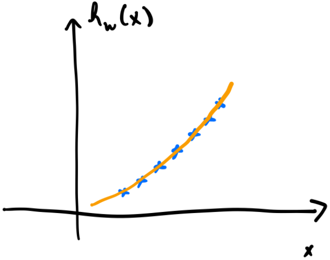


Bom treinamento

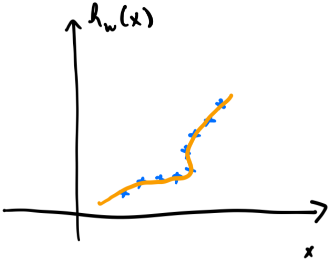


Sobretreinamento

Vamos observar dois exemplos. A tendência é que polinômios com graus maiores sejam mais propensos ao sobretreinamento, dado que conseguem aprender funções mais complexas.



$$h_{\boldsymbol{w}}(x) = w_0 + w_1x + w_2x^2$$



$$h_{\boldsymbol{w}}(x) = w_0 + w_1x + w_2x^2 + w_3x^3 + w_4x^4$$

Como podemos minimizar o efeito dos pesos associados aos graus maiores? Uma solução para penalizá-los seria multiplicá-los por valores altos. Vamos modificar a Equação 2, que corresponde ao erro médio quadrático:

$$\boldsymbol{w}^* = \arg\min_{\boldsymbol{w}} \left\{ \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} (h_w(x_i) - y_i)^2 + \overbrace{500w_3}^{w_3 \approx 0} + \underbrace{500w_4}_{w_4 \approx 0} \right\}. \tag{14}$$

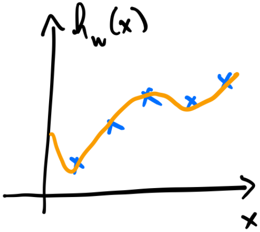
Como o objetivo é minimizar a função de custo, a tendência é que o gradiente descendente atribua valores muito pequenos para w_3 e w_4 no intuito de diminuir a sua influência no valor final. Assim, a regularização visa, de maneira geral, atribuir valores pequenos para os elementos em $\boldsymbol{w}$ de tal forma a termos funções "mais simples".

Desta forma, temos uma nova função de custo por erro médio quadrático, que agora adiciona um termo de regularização à Equação 4:

$$J(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{2m}\left[\sum_{i=1}^{m}(h_w(x_i) - y_i)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{n} w_j^2\right], \tag{15}$$

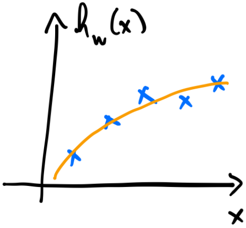
em que λ corresponde ao parâmetro de regularização, o qual controla a relação custo-benefício entre não regularização e sobretreinamento. **Lembrando que a regularização não se aplica à** w_0.

Vejamos qual é o significado prático da taxa de regularização.



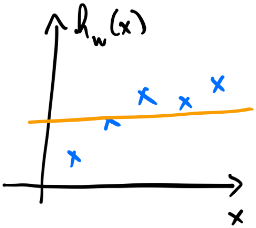
$\lambda = 0$

Sem regularização



$0 < \lambda < \infty$

Algum valor apropriado



$\lambda \to \infty$

$h_{\boldsymbol{w}}(x) = w_0$

As derivadas parciais para $\frac{\partial J(\boldsymbol{w})}{\partial w_j}$ dadas pelas Equações 8 e 9 agora podem ser formuladas da seguinte maneira:

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{w})}{\partial w_0} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(h_{\boldsymbol{w}}(x_i) - y_i), \tag{16}$$

e

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{w})}{\partial w_j} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}[(h_{\boldsymbol{w}}(x_i) - y_i)x_i^j] + \frac{\lambda}{m}w_j. \tag{17}$$

Note que a derivada parcial com relação à w_0 não sofre alterações. O algoritmo do gradiente descendente é o mesmo do que a versão da regressão linear sem a regularização.