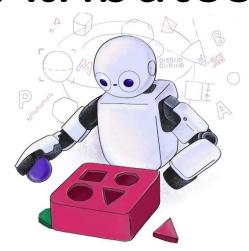
T319 - Introdução ao Aprendizado de Máquina:

Regressão Linear: Escalonamento de Atributos





Felipe Augusto Pereira de Figueiredo felipe.figueiredo@inatel.br

Recapitulando

- Neste documento, veremos um tipo de pré-processamento bastante importante para algoritmos de ML que usam métricas de distância como função de erro.
 - Pré-processamento: Técnicas aplicadas ao conjunto de dados antes do treinamento.

- Em algumas situações, alguns atributos acabam sendo dominantes sobre os demais no sentido de que exercerem grande influência sobre o *erro* cometido pelo modelo.
- Isto pode ocorrer devido à grande diferença de magnitude entre os atributos.
- Essa diferença entre as magnitudes afeta o desempenho de algoritmos de ML que utilizam métricas de distância como função de erro.
 - As diferenças entre as magnitudes dos atributos faz com que as superfícies de erro tenham formato de vale, dificultando a convergência dos algoritmos.

• Dada a seguinte equação hipótese, h(x)

$$\hat{y}(n) = h(x(n)) = a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n).$$

A função de erro é dada por

$$J_e(\mathbf{a}) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \left[y_{\text{noisy}}(n) - \left(a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n) \right) \right]^2.$$

• Caso $x_1(n)\gg x_2(n)$, $\forall i$, então x_1 tem uma influência maior no erro resultante, o que pode ser expresso de forma aproximada como

$$J_e(\mathbf{a}) \approx \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} [y_{\text{noisy}}(n) - a_1 x_1(n)]^2.$$

• Portanto, o erro entre y e h(x(n)) será dominado pelo atributo x_1 .



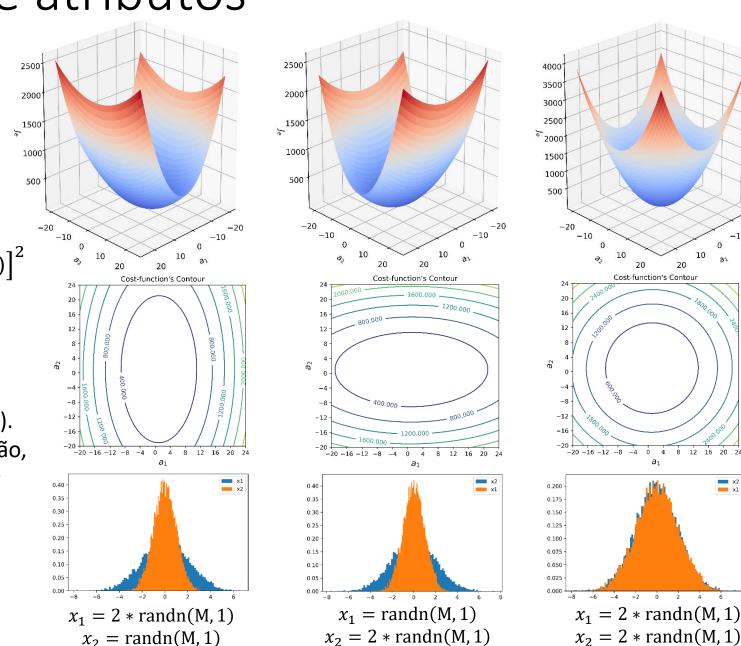
Função objetivo:

$$y(n) = a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n)$$
, onde $a_1 = 1$, $a_2 = 1$.

Para plotar a superfície de erro usamos:

$$J_e(\mathbf{a}) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \left[y_{\text{noisy}}(n) - (\widehat{a_1} x_1(n) + \widehat{a_2} x_2(n)) \right]^2$$

- $x_1 \gg x_2$: erro varia mais rapidamente com variações de $\widehat{a_1}$, resultando num vale.
- A mesma coisa pode ser dita para x_2 e $\widehat{a_2}$ (vale).
- Quando x_1 e x_2 têm intervalo semelhante, então, a variação tanto de $\widehat{a_1}$ quanto de $\widehat{a_2}$ tem **pesos** semelhante na variação do erro (tigela).



O que pode ser feito?

- Para evitar esse problema, o intervalo de variação de todos os atributos deve ser escalonado para que cada atributo contribua com o mesmo peso para o cálculo do erro.
- As duas formas mais comuns de escalonamento são:
 - Normalização Mín-Max
 - Padronização

- Em geral, a *normalização mín-max* faz com que os atributos variem entre 0 e 1.
- A equação usada para normalizar os atributos é apresentada abaixo.

$$x'_{k}(i) = \frac{x_{k}(i) - \min(x_{k})}{\max(x_{k}) - \min(x_{k})}, 0 \le x'_{k}(i) \le 1,$$

onde x_k representa o k-ésimo atributo, i é o número da amostra, $\min(x_k)$ e $\max(x_k)$ são os valores mínimo e máximo, respectivamente, calculados ao longo de todas as amostras do k-ésimo vetor de atributo, x_k .

 Para se normalizar os atributos para intervalos diferentes de 0 e 1, aplica-se a seguinte transformação aos atributos já normalizados

$$x''_k(i) = x'_k(i)(\max - \min) + \min$$

onde min e max são os valores mínimo e máximo do novo intervalo, respectivamente.

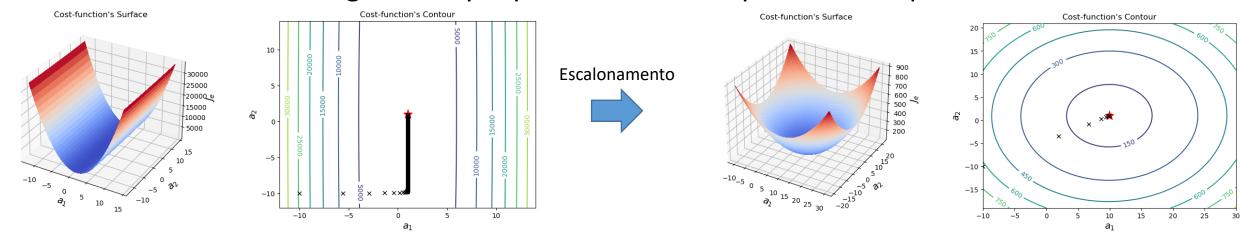
- *Padronização* faz com que os atributos tenham média zero e desvio padrão unitário.
- Observe que, neste caso, os valores não ficam restritos a um intervalo específico.
- A equação usada para normalizar os atributos é apresentada abaixo.

$$x'_k(i) = \frac{x_k(i) - \mu_{x_k}}{\sigma_{x_k}},$$

onde x_k representa o k-ésimo atributo, i é o número da amostra, μ_{x_k} e σ_{x_k} são as estimativas da média e o do desvio padrão, respectivamente, calculados ao longo de todas as amostras do k-ésimo vetor de atributo, x_k .

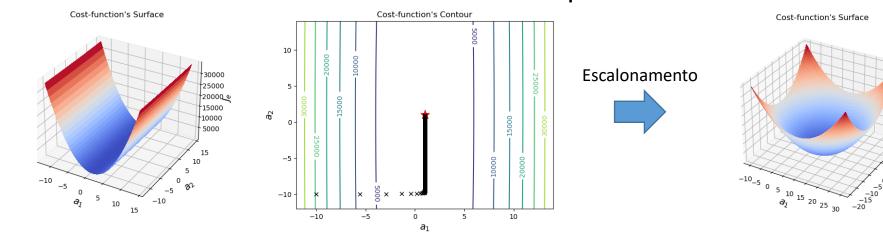
Vantagens do escalonamento de atributos

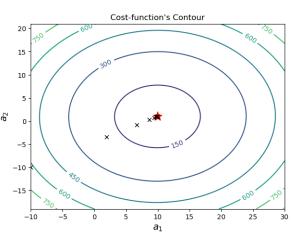
- Ajuda a *acelerar a convergência* do gradiente descendente, pois deixa a superfície de erro mais circular
 - Pois a inclinação da superfície se torna similar em todas as direções.
- Reduz a probabilidade de *problemas de precisão numérica*, mantendo a estabilidade do algoritmo durante o treinamento.
 - Por exemplo, atributos com valores muito grandes podem gerar erros extremamente grandes que podem não ser representados pelas variáveis.



Vantagens do escalonamento de atributos

- Possibilita a comparação justa do peso/influência de cada atributo no modelo.
 - Pois os pesos representam o impacto relativo dos atributos nas predições.
- Evita que atributos com escalas muito diferentes dominem o processo de treinamento.
 - Sem escalonamento, o modelo pode dar mais importância a atributos com intervalos maiores e menos importância aos atributos com intervalos menores.





Observações quanto ao escalonamento de atributos

- Quando temos conjuntos de validação e teste, aplica-se a esses dois conjuntos o escalonamento com os parâmetros (i.e., min, max, média e variância) obtidos com o conjunto de treinamento.
- Isso evita vazamento de informações dos conjuntos de validação e teste no processo de treinamento.
- Além disso, garante a consistência ao longo da validação, teste e inferência, pois aplica-se os mesmos parâmetros de escalonamento a todos os exemplos (i.e., conjuntos).
- Em geral, não se aplica escalonamento aos rótulos, i.e., aos valores de y.
- Porém, se for feito, não se esqueça de desfazer o escalonamento para realizar predições que sejam significativas.

Função geradora:

$$y = x_1 + x_2,$$

onde $x_1 \sim N(10, 100)$, $x_2 \sim N(0, 1)$ e $a_1 = a_2 = 1$.

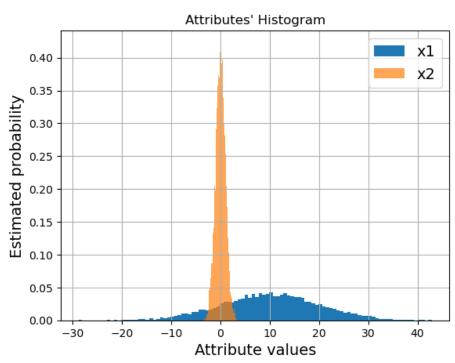
• Função observável ruidosa:

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

onde $w \sim N(0, 1)$

• Função hipótese:

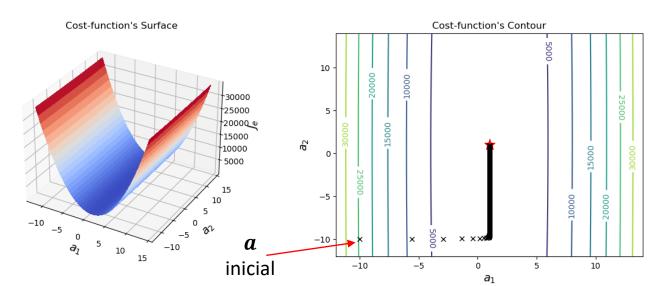
$$\hat{y} = \widehat{a_1} x_1 + \widehat{a_2} x_2.$$



- A superfície de erro tem formato de "V", com maior taxa de variação do erro, i.e., inclinação, na direção de a_1 .
- A taxa de variação do erro é praticamente constante na direção de a_2 (região com inclinação de $\approx 0^\circ$).

• A inclinação praticamente nula na direção de $a_2\,{\rm pode}$ ser vista na superfície de contorno, onde as curvas de erro são praticamente retas

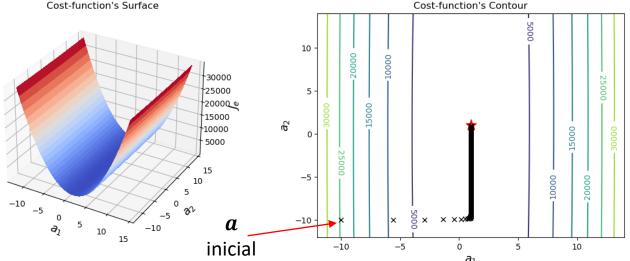
paralelas ao eixo de a_2

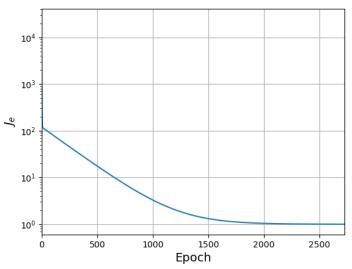


- Como a inclinação da superfície de erro na direção de a_2 é muito pequena, consequentemente, o gradiente naquela direção também é muito pequeno.
- Assim, o treinamento fica lento quando o algoritmo atinge a base do vale, pois as atualizações dos pesos serão muito pequenas.

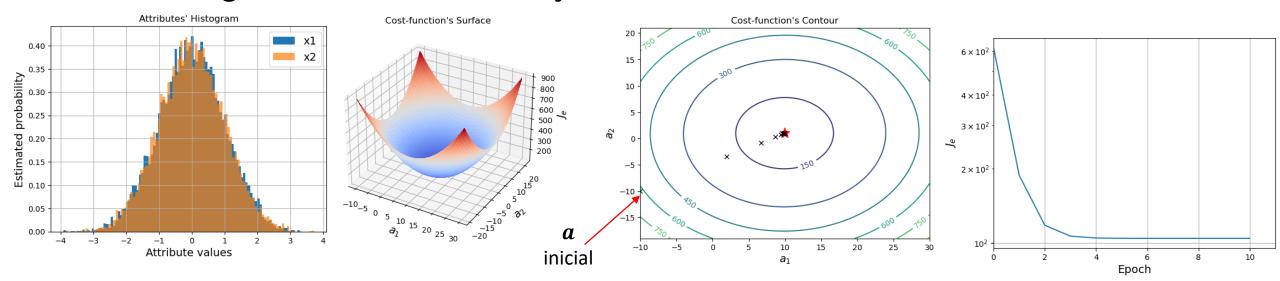
• O gradiente descendente em batelada converge após mais de 2000 épocas.

Cost-function's Surface Cost-function's Contour

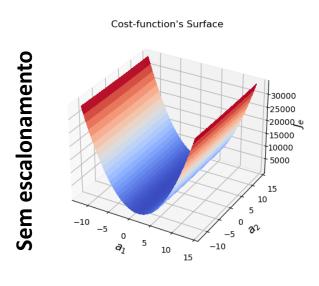


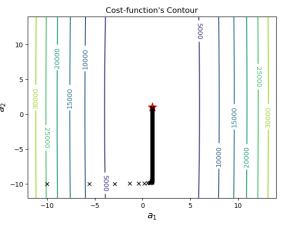


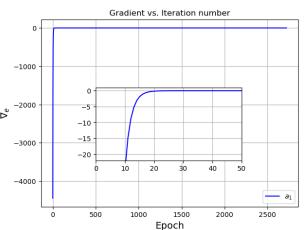
- Agora aplicamos padronização aos atributos.
- Após a padronização, a superfície passa a ter o formato de "tigela".
- As linhas de contorno se tornam mais "circulares", denotando que a superfície tem inclinação similar em todas as direções.
- Nesse exemplo, o algoritmo converge após 4 épocas.
- O treinamento se torna mais rápido, pois a inclinação da superfície se torna mais íngreme em todas as direções.

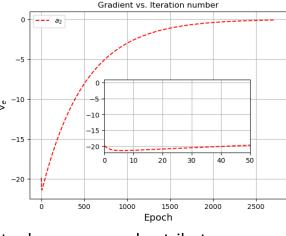


variação do vetor gradiente

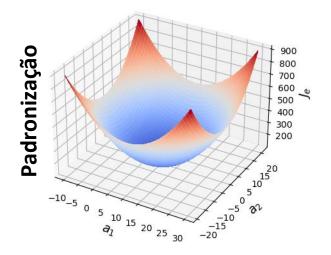


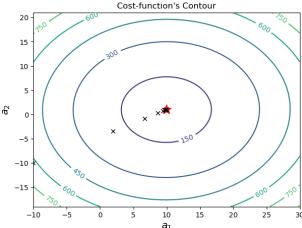


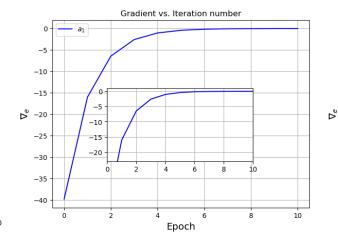


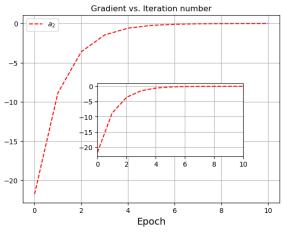


Cost-function's Surface









Pesos de atributos com variação muito grande são atualizados mais rapidamente do que pesos de atributos com variação pequena. x_1 contribui muito mais no valor final do erro, fazendo com que a_1 seja rapidamente atualizado, tendendo a seu valor correto mais rapidamente.

Escalonamento de atributos com a biblioteca SciKit-Learn

Import Class StandardScaler from module Preprocessing of library sklearn responsible for standardizing the data.

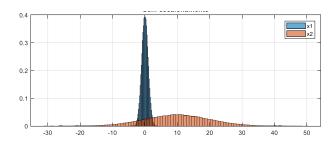
from sklearn.preprocessing import StandardScaler

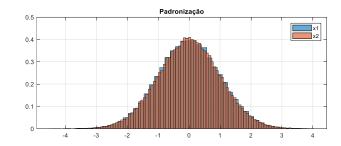
Instantiate a Standard scaler. stdScaler = StandardScaler()

Concatenate both column vectors.

 $X = np.c_[x1, x2]$

Standardize the features. scaled X = stdScaler.fit transform(X)







Import Class MinMaxScaler from module Preprocessing of library sklearn responsible for normalizing the data.

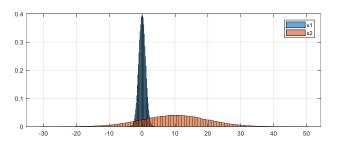
from sklearn.preprocessing **import** MinMaxScaler

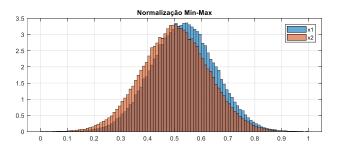
Instantiate a MinMax scaler. By default, the interval is between 0 and 1. minMaxScaler = MinMaxScaler()

Concatenate both column vectors.

 $X = np.c_[x1, x2]$

Standardize the features. scaled X = minMaxScaler.fit transform(X)





Obrigado!

MY HOBBY: EXTRAPOLATING







"It's a non-linear pattern with outliers.....but for some reason I'm very happy with the data."





ONE DOES NOT SIMPLY



FIGURAS

