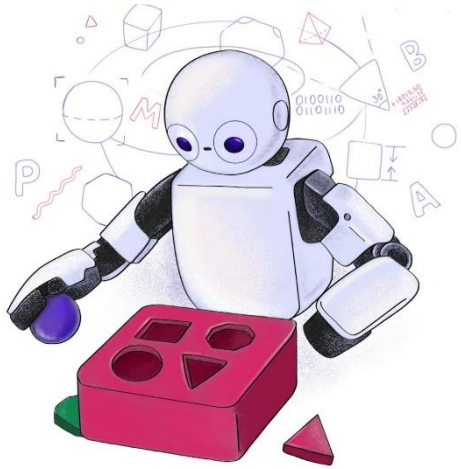
T319 - Introdução ao Aprendizado de Máquina: *Regressão Linear (Parte I)*



Inatel

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

Motivação

- **Exemplo 1**: Estimar o preço de casas.
- **Exemplo 2**: Estimar as vendas de sorvete.

500 m^2

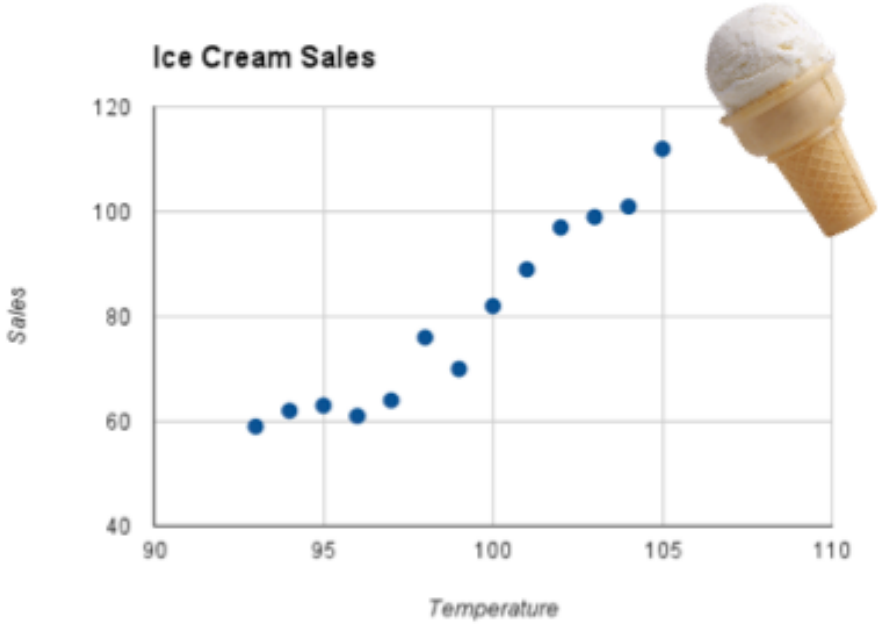
R$ 1.000.000,00

70 m^2

R$ 200.000,00

200 m^2

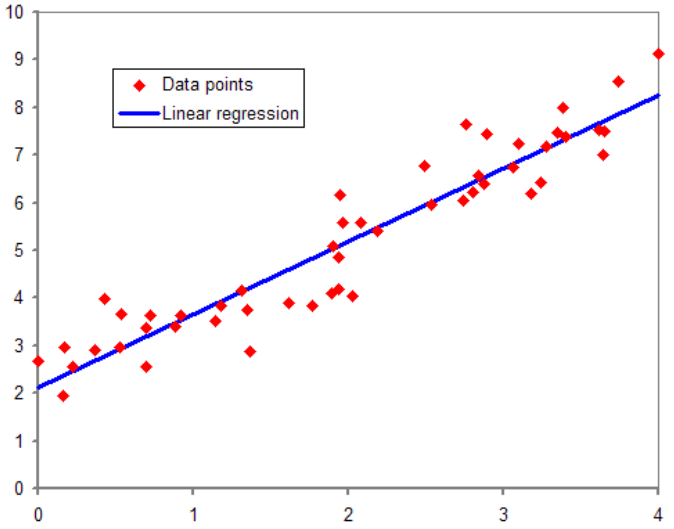
???



- Podemos encontrar uma relação matemática entre a entre a área de uma casa e seu valor?
- Ou da temperatura e a quantidade de sorvetes vendidos?

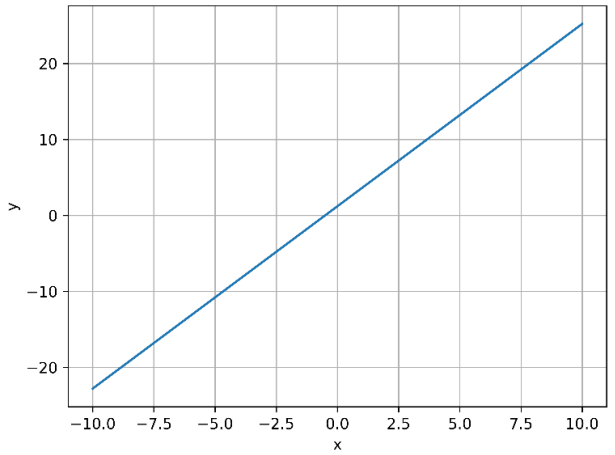
Regressão Linear

- Um dos mais, se não o mais,conhecido algoritmo de aprendizado de máquina.
- Vai nos dar vários ***insights*** (i.e., intuições) importantes para o entendimento de outros algoritmos mais complexos, como, classificadores e redes neurais.
- **Objetivo**: encontrar uma função, h, que mapeie, de forma ótima, os atributos de entrada $\boldsymbol{x}$ em uma variável de saída y: $y = h(\boldsymbol{x})$, de tal forma que $h(\boldsymbol{x})$ seja uma boa aproximação da ***função verdadeira***, mas desconhecida, chamada de ***função objetivo***, $f(\boldsymbol{x})$.
- Regressão também é conhecida como ***aproximação de funções***.
- Como faríamos para encontrar uma função, $h(\boldsymbol{x})$, que ***aproxime*** $f(\boldsymbol{x})$ de forma ótima?



Temos $\boldsymbol{x}$ (atributos) e $\boldsymbol{y}$ (rótulos) e queremos encontrar $\hat{y} = h(\boldsymbol{x})$.

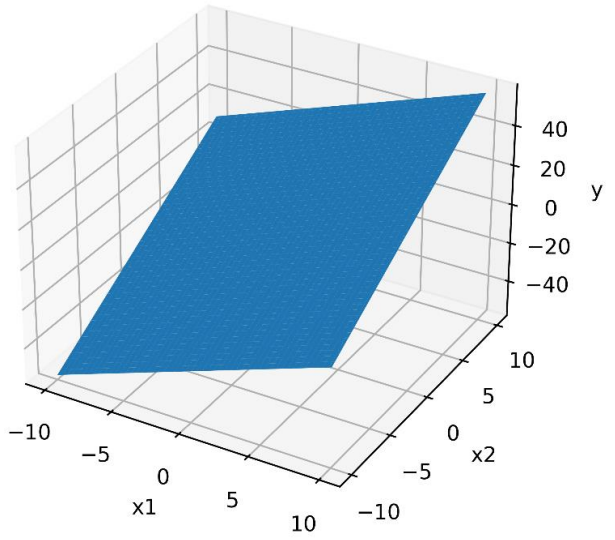
Regressão Linear



- **Qual forma deve ter a função** $h(\boldsymbol{x})$? Os modelos mais simples são:
  - Com apenas um atributo, x_1, $h(\boldsymbol{x})$ é uma reta, $h(\boldsymbol{x}) = a_0 + a_1 x_1$.
  - Com dois atributos, x_1 e x_2, $h(\boldsymbol{x})$ é uma superfície 2D (ou seja, um plano), $h(\boldsymbol{x}) = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2$.
  - E assim por diante.
- **Modelo geral**: Equação de um Hiperplano

$$h(\boldsymbol{x}) = a_0 + a_1 x_1 + \cdots + a_K x_K = a_0 + \sum_{i=1}^{K} a_i \, x_i.$$

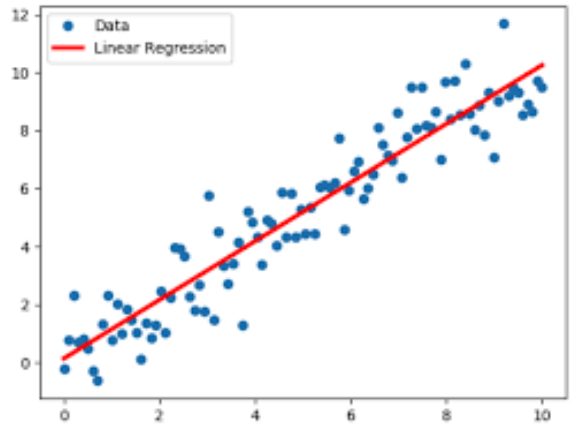
- Existem outros modelos, os quais veremos mais adiante.
- Na literatura, a função $h(\boldsymbol{x})$, é chamada de ***função hipótese***, pois é uma das possíveis soluções encontradas no ***espaço de hipóteses***, $\boldsymbol{H}$.
- **Espaço de hipóteses**: é conjunto de todas as possíveis ***funções hipótese***.
  - Hiperplano formado por todos possíveis valores dos parâmetros, $a_k, \forall k$.



Regressão Linear

- **Objetivo**: Encontrar os ***parâmetros***, também chamados de ***pesos,*** a_0, a_1, …, a_k de tal forma que $h(\boldsymbol{x})$ seja uma ótima aproximação de $f(\boldsymbol{x})$.
- **Aprendizado supervisionado**: atributos/exemplos (i.e., $\boldsymbol{x}$) mais rótulos/objetivos (i.e., y).
- A ***regressão*** é chamada de ***linear*** porque a variável de saída, y, é modelada como uma **combinação linear** dos atributos, $\boldsymbol{x}$.
  - **OBS**.: ***Linear*** significa "*linear com relação aos pesos*" e não com relação aos atributos, i.e., $\boldsymbol{x}$. Desta forma, os seguintes modelos também são lineares com relação aos pesos:
    - $y = a_0 + a_1 \log x_1 + a_2 \cos x_2$
    - $y = a_0 + a_1 e^{x_1}$
    - $y = a_0 + a_1 x_1^2$

Definição do Problema



O problema de ***regressão*** pode ser enunciado da seguinte forma:

- **Dados disponíveis**:
  - Conjunto de N observações (conjunto de pares de treinamento) : $\{\boldsymbol{x}(i), y(i)\}$, $i = 0, \dots, N-1$, onde
    - $\boldsymbol{x}(i) \in \mathbb{R}^K$: *i*-ésimo vetor de entrada com dimensão K, ou sejam K atributos (ou features).
    - $y(i) \in \mathbb{R}$: *i*-ésimo valor esperado de saída referente ao vetor de entrada $\boldsymbol{x}(i)$.
- **Modelo**:

$$h(\boldsymbol{x}(i)) = a_0 + a_1 x_1(i) + \cdots + a_K x_K(i) = \boldsymbol{a}^T \Phi(i),$$

onde $\boldsymbol{a} = [a_0, \dots, a_K]^T$ e $\Phi(i) = [1, x_1(i), \dots, x_K(i)]^T$.

  - $\boldsymbol{a}$ é o vetor $(K+1 \times 1)$ contendo os parâmetros/pesos que definem a ***função hipótese***, ou seja, o mapeamento $h: \boldsymbol{x}(i) \rightarrow \hat{y}(i)$ e $\Phi(i)$ é um vetor $(K+1 \times 1)$ contendo os *i*-ésimos valores dos atributos.
  - a_0 é o ***coeficiente linear***, ou seja, é o valor de $h(\boldsymbol{x})$ para o ponto em que o hiperplano intercepta o eixo y, a_0 é conhecido também como ***intercept***.
  - Como a_0 não tem um atributo relacionado, para facilitar o modelamento matemático, supomos um atributo constante sempre unitário, $x_0 = 1$.
- **Objetivo do modelo**: encontrar o vetor de pesos $\boldsymbol{a}$ que minimize o ***erro***, dado por uma ***função de erro***, $J_e(\boldsymbol{a})$, entre a aproximação $\hat{y}(i)$ e o valor desejado $y(i)$ para todo i.

$$\min_{\boldsymbol{a}} J_e(\boldsymbol{a})$$

Ou seja, **o treinamento do modelo envolve a minimização de uma *função de erro*.**

Função de Erro

- **Função de erro**: existem várias possibilidades para se definir a **função de erro** a ser minimizada, porém, geralmente, utiliza-se a medida do **erro quadrático médio**

$$J_e(\boldsymbol{a}) = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1}(y(i) - \hat{y}(i))^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1}\left(y(i) - h(\boldsymbol{x}(i), \boldsymbol{a})\right)^2,$$

que nada mais é do que a média do somatório dos erros ao quadrado.

- Nós veremos mais adiante a razão pela qual o ***erro quadrático médio*** é utilizado.
- A ***função de erro*** pode ser reescrita em forma matricial como

$$J_e(\boldsymbol{a}) = \frac{1}{N}\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi a}\|^2,$$

onde $\boldsymbol{y} = [y(0), \dots, y(N-1)]^T$ é um vetor $(N \times 1)$, $\boldsymbol{\Phi} = [\Phi(0), \dots, \Phi(N-1)]^T$ é uma matriz $(N \times K + 1)$ e N é o número de amostras, exemplos ou observações.

- Então, para encontrar o vetor de parâmetros $\boldsymbol{a}$ devemos minimizar

$$\min_{\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}} \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi a}\|^2 .$$

Minimizando a Função de Erro

Como encontramos o mínimo da função de erro em relação aos pesos?

- Da disciplina de cálculo, sabemos que derivando $\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi a}\|^2$ com relação a $\boldsymbol{a}$ e igualando a 0 nós encontramos o ponto onde a inclinação da função de erro é nula:

$$\frac{\partial \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi a}\|^2}{\partial \boldsymbol{a}} = 2\boldsymbol{a}^T \boldsymbol{\Phi}^T \boldsymbol{\Phi} - 2\boldsymbol{y}^T \boldsymbol{\Phi} = 0.$$

- Portanto, voltando à equação da derivada primeira igual a 0, temos

$$\boldsymbol{a}^T \boldsymbol{\Phi}^T \boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{\Phi}.$$

- Após aplicarmos o transposto a ambos os lados e isolando $\boldsymbol{a}$ temos

$$\boldsymbol{a} = (\boldsymbol{\Phi}^T \boldsymbol{\Phi})^{-1} \boldsymbol{\Phi}^T \boldsymbol{y}.$$

- Essa equação é conhecida como a ***equação normal*** e nos dá a ***solução ótima*** em relação a minimização o erro quadrático médio para esse sistema de equações.

Minimizando a Função de Erro

Observações:

1. O método encontra uma ***solução única*** se e somente se a matriz quadrada $\boldsymbol{\Phi}^T\boldsymbol{\Phi}$ for ***invertível***.
2. O método só funciona para sistemas ***sobredeterminados***, ou seja, mais equações (i.e., pares de exemplos $\boldsymbol{x}$ e y) do que incógnitas (i.e., pesos), $N \geq K + 1$.
3. Para sistemas ***subdeterminados***, ou seja, que têm menos equações do que incógnitas, a matriz $\boldsymbol{\Phi}^T\boldsymbol{\Phi}$ é ***singular***. Neste caso, não existe solução ou ela não é única.

Regressão Linear em Python

```
# Import all the necessary libraries.
import numpy as np

# Generate input/ouput (features/labels) values.
N = 100; # Number of observations.

x = 2 * np.random.rand(N, 1)
y = 4 + 3 * x
y_noisy = y + np.random.randn(N, 1)

# Solve by applying the least-Squares method.
# We use the inv() function from NumPy's Linear Algebra module (np.linalg) to compute the inverse of a matrix.
# We use dot() method for matrix multiplication.
X_b = np.c_[np.ones((N, 1)), x] # add x0 = 1 to each instance
a_optimum = np.linalg.inv(X_b.T.dot(X_b)).dot(X_b.T).dot(y_noisy)

# Print best solution.
print('a0: %1.4f' % (a_optimum[0][0]))
print('a1: %1.4f' % (a_optimum[1][0]))
```

```
a0: 4.0763
a1: 2.9413
```

```
# The equivalent solution using the Scikit-Learn library is given below
# Import the linear regression module form the library.
from sklearn.linear_model import LinearRegression

lin_reg = LinearRegression() # instantiate it.
lin_reg.fit(x, y_noisy)

print('a0: %1.4f ' % (lin_reg.intercept_[0])) # Value that crosses the y-axis when all features are equal to 0.
print('a1: %1.4f ' % (lin_reg.coef_[0][0])) # parameters associated with the features.
```

```
a0: 4.0763
a1: 2.9413
```

https://scikit-learn.org

Exemplo: normal_equation_example1.ipynb

- Percebam que com apenas 100 exemplos, os valores obtidos são bem próximos dos exatos, porém, o ruído torna impossível recuperar os parâmetros exatos da função original.
- Se aumentarmos o número de exemplos conseguimos melhorar a estimação, porém, o ruído limitará essa melhoria.
- O argumento x passado para o método fit da classe ***LinearRegression*** é uma matriz com N x K. Porém, lembrem-se que se existe um peso a_0, e portanto x deveria ter dimensão N x K+1, entretanto, por padrão, a classe ***LinearRegression*** já faz isso pra vocês automaticamente. Caso sua função hipótese não considere o peso a_0, então, durante a instanciação da classe vocês devem configurar o parâmetro **fit_intercept=False**.

Superfície de Erro

- E se plotarmos a função de erro, $J_e(\boldsymbol{a})$? Que forma vocês acham que ela teria?
- $J_e(\boldsymbol{a})$ faz o mapeamento entre cada possível valor dos parâmetros do modelo e o erro correspondente:
  - $J_e(\boldsymbol{a})$: $\mathbb{R}^{K+1} \rightarrow \mathbb{R}$. Esse mapeamento define a ***superfície de erro***.
- $J_e(\boldsymbol{a})$ assume uma forma ***quadrática*** com respeito ao ***vetor de pesos***, $\boldsymbol{a}$.

$$J_e(\boldsymbol{a}) = \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi a}\|^2 = \boldsymbol{y}^T\,\boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}^T\boldsymbol{\Phi a}^T - \boldsymbol{a}^T\boldsymbol{\Phi}^T\,\boldsymbol{y} + \boldsymbol{a}^T\boldsymbol{\Phi}^T\boldsymbol{\Phi a}.$$

- Consequentemente, a superfície é ***convexa*** (ou seja, tem forma de tigela), e portanto possui um único ***mínimo global***, que pode ser encontrado, por exemplo, pela ***equação normal***.
- Isso é provado mostrando-se que $\frac{\partial^2 \|J_e(\boldsymbol{a})\|^2}{\partial^2 \boldsymbol{a}} = 2\boldsymbol{\Phi}^T\boldsymbol{\Phi}$ é uma ***matriz positiva semi-definida***, e portanto, $J_e(\boldsymbol{a})$ sempre será **convexa** com relação ao vetor de pesos, $\boldsymbol{a}$.

Superfície de Erro: Exemplo #1

- A figura ao lado mostra a ***superfície de erro*** para a seguinte ***função observável***:

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

onde $w(n) \sim N(0,1)$ e $y(n)$ é a ***função objetivo***.

- Neste exemplo, a ***função objetivo*** (ou ***modelo gerador***) é dada por:

$$y(n) = x_1(n),$$

onde $x_1(n) \sim N(0,1)$.

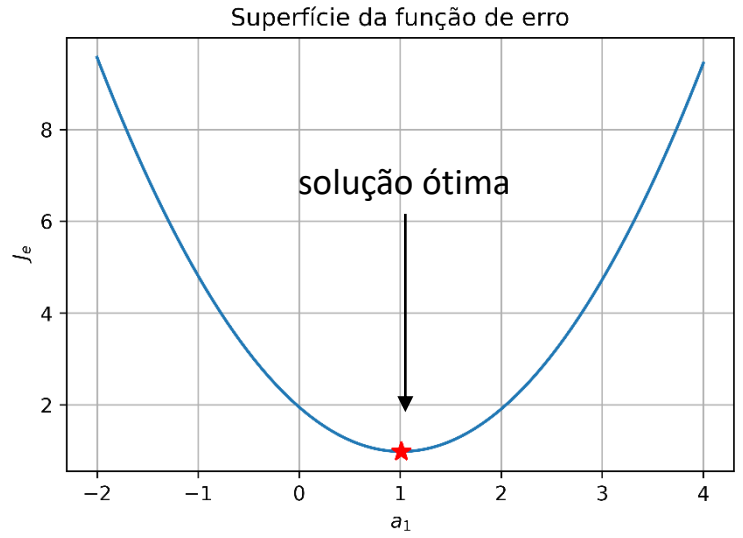
- A ***função hipótese***, $h(\boldsymbol{x})$, é dada por

$$h(\boldsymbol{x}) = \hat{y} = a_1 x_1(n).$$

- O erro ***erro quadrático médio*** é calculado como

$$J_e(a_1) = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\big(y(n) - \hat{y}(n)\big)^2 = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\big(y(n) - a_1 x_1(n)\big)^2 .$$

Exemplo: error_surface_example1.ipynb



O erro é calculado variando-se a_1 na equação do EQM.

Superfície de Erro: Exemplo #2

Exemplo: error_surface_example2.ipynb

- A figura ao lado mostra a ***superfície de erro*** para a seguinte ***função observável***:

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

onde $w(n) \sim N(0,1)$ e $y(n)$ é a ***função objetivo***.

- Neste exemplo, a ***função objetivo*** (ou ***modelo gerador***) é dada por:

$$y(n) = x_1(n) + x_2(n),$$

onde $x_1(n)$ e $x_2(n) \sim N(0,1)$

- A ***função hipótese***, $h(\boldsymbol{x})$, é dada por

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

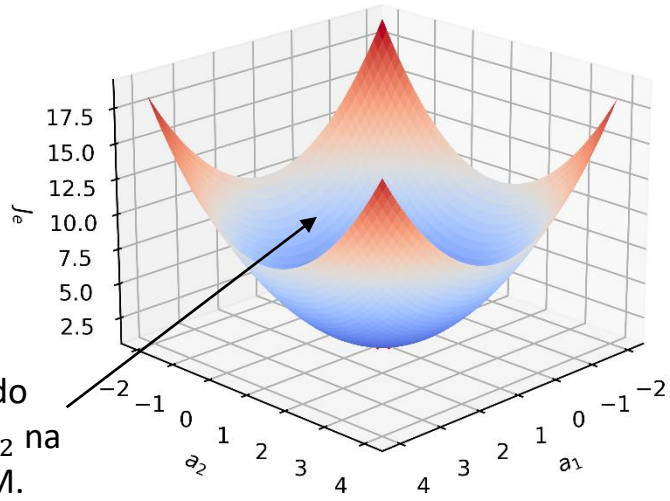
- O erro ***erro quadrático médio*** é calculado como

$$J_e(a_1, a_2) = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\left(y_{\text{noisy}}(n) - \hat{y}(n)\right)^2$$

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

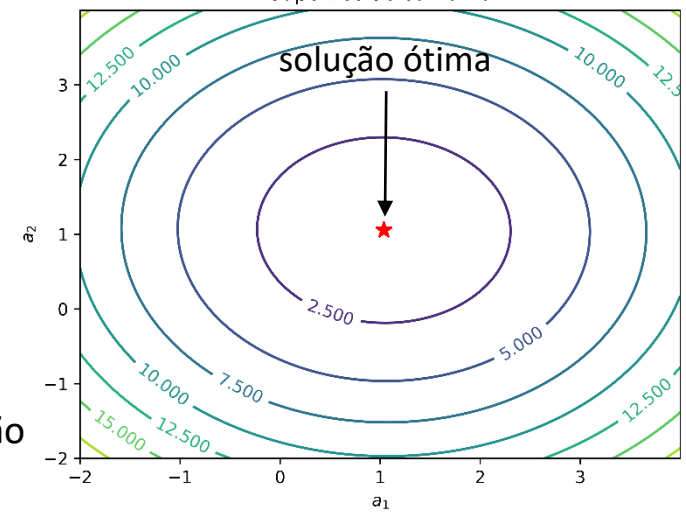
- A segunda figura mostra a **superfície de contorno**.
  - Uma linha de contorno de uma função de duas variáveis é uma curva ao longo da qual a função tem um valor constante. Ou seja, no nosso caso, cada uma das linhas indica curvas que têm o mesmo erro

Superfície da função de erro



O erro é calculado variando-se a_1 e a_2 na equação do EQM.

Superfície de contorno



Formatos diferentes para a superfície de erro

Função objetivo:

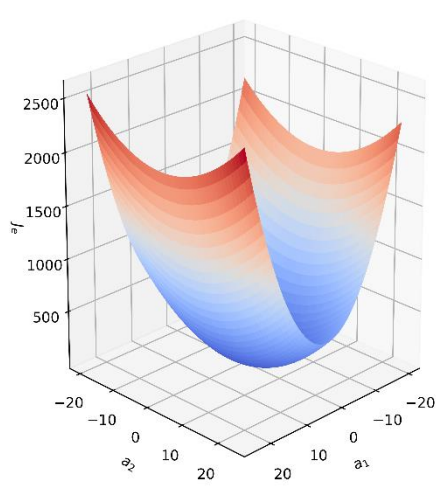
$$y(n) = x_1(n) + x_2(n),$$

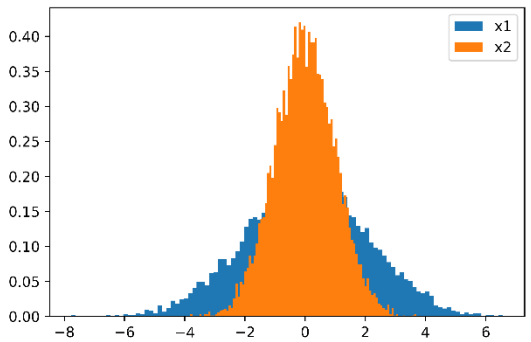
onde $a_1 = 1, a_2 = 1$.

Para plotar a superfície de erro usamos:

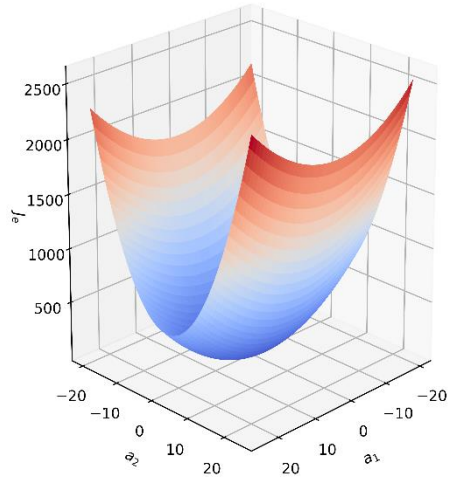
$$J_e(\boldsymbol{a}) = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}[y(n) - (a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n))]^2$$

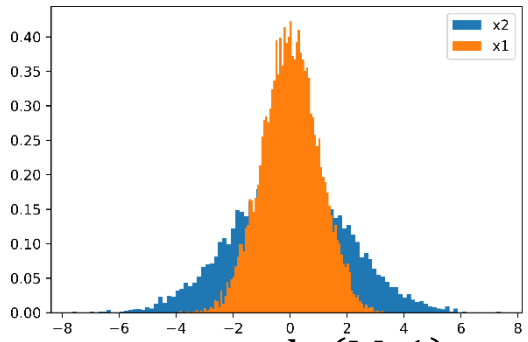
- Se x_1 varia entre um intervalo muito grande de valores, então o ***peso*** da variação de a_1 no erro é maior, ou seja, o erro varia mais rapidamente com variações de a_1 (vale).
- A mesma coisa pode ser dita para x_2 e a_2 (vale).
- Quando x_1 e x_2 variam entre um intervalo semelhante, então a variação tanto de a_1 quanto de a_2 tem ***peso*** semelhante na variação do erro (tigela).



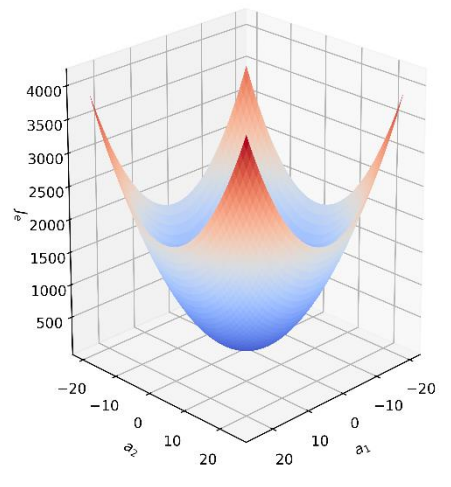


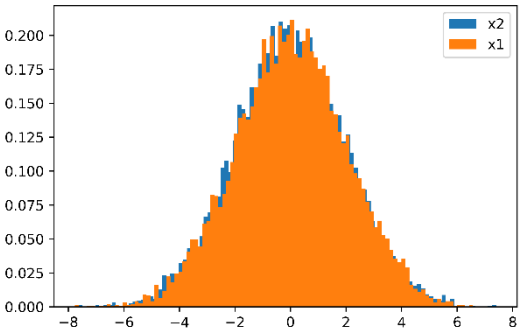
$x_1 = 2 * \text{randn(M, 1)}$
$x_2 = \text{randn(M, 1)}$





$x_1 = \text{randn(M, 1)}$
$x_2 = 2 * \text{randn(M, 1)}$





$x_1 = 2 * \text{randn(M, 1)}$
$x_2 = 2 * \text{randn(M, 1)}$

Exemplo: formatos_diferentes_da_superfície_de_erro.ipynb

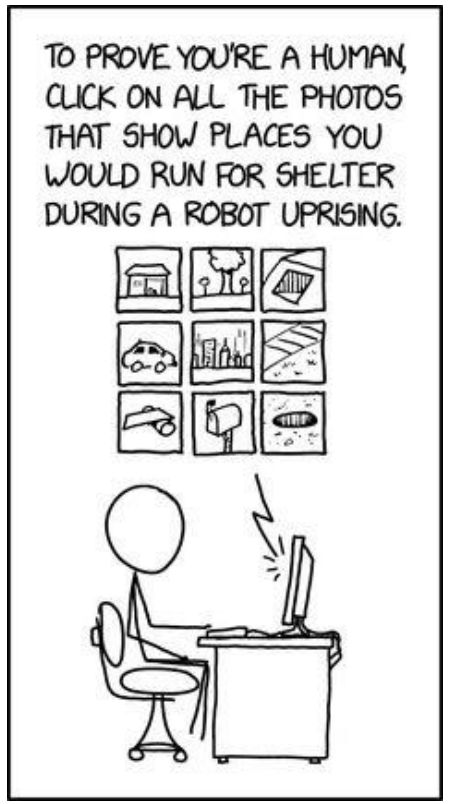
Desvantagens da forma fechada (Eq. Normal)

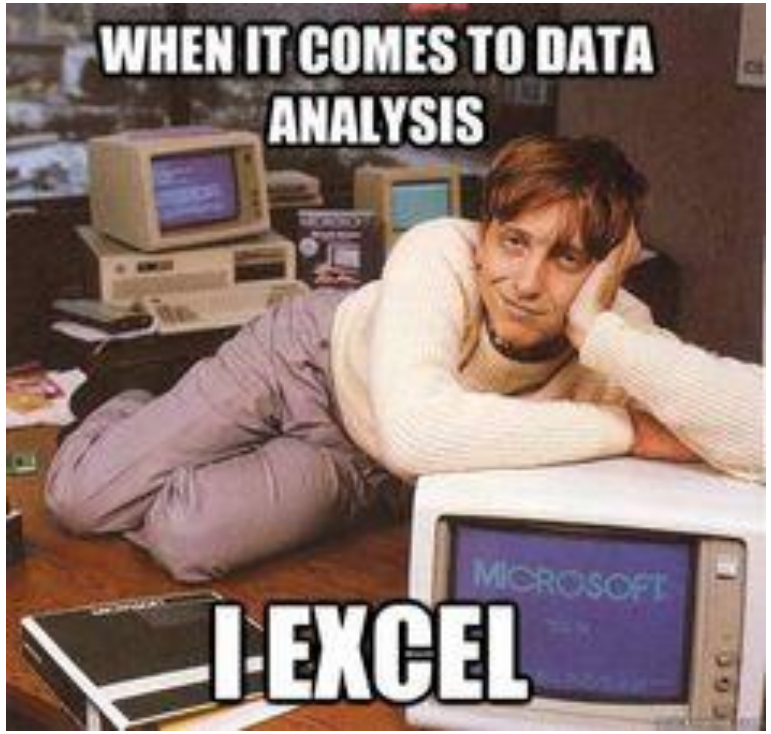
- **Alta complexidade computacional**: a solução da ***equação normal*** envolve o cálculo da inversa de $\boldsymbol{\Phi}^T\boldsymbol{\Phi}$, o qual tem complexidade computacional que varia de $O(n^{2.4})$ a $O(n^3)$.
  - **Ex**.: Se o número de ***atributos*** dobrar, o tempo para cálculo aumenta de $2^{2.4} = 5.3$ a $2^3 = 8$ vezes.
- Dependendo do número de ***exemplos***, N, e ***atributos***, $\boldsymbol{x}$, a matriz $\boldsymbol{\Phi}$ pode consumir muita memória.
- **Portanto, essa abordagem não é escalonável!**
- Adicionalmente, para irmos além dos modelos lineares (i.e., regressão não-linear) precisamos lidar com o fato de que não existem formas fechadas como a **equação normal**.
- **Solução**: abordagens iterativas
  - Métodos iterativos de busca que façam a atualização dos parâmetros, $\boldsymbol{\alpha}$, à medida que os dados forem sendo apresentados ao modelo.
  - Por exemplo, o algoritmo do ***gradiente descendente***, o qual veremos a seguir.

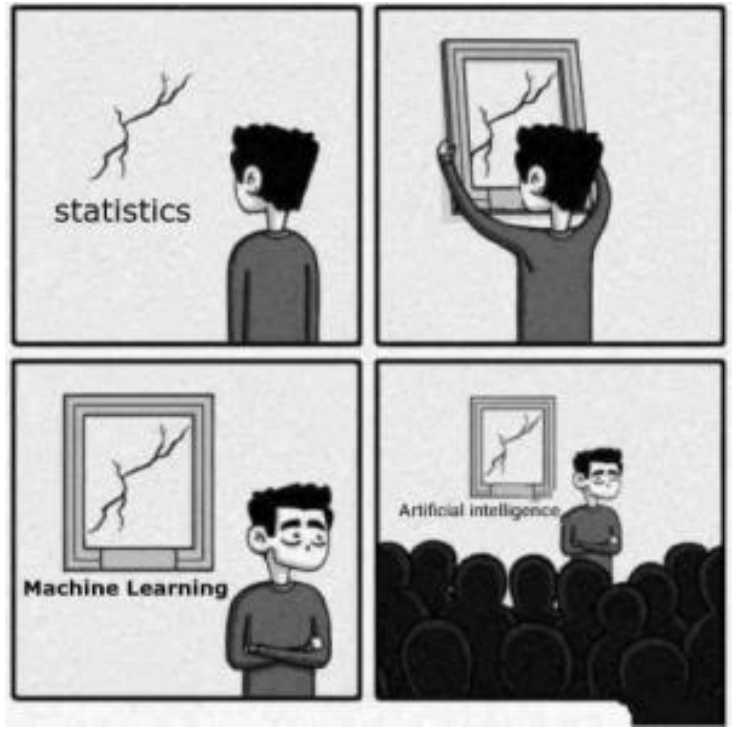
Tarefas

- **Quiz**: *“T319 - Quiz - Regressão: Parte I (1S2021)”* que se encontra no MS Teams.
- **Exercício Prático**: **Laboratório #2**.
  - Pode ser baixado do MS Teams ou do GitHub.
  - Pode ser respondido através do link acima (na nuvem) ou localmente.
  - Instruções para resolução e entrega dos laboratórios.

Obrigado!







Albert Einstein: Insanity Is Doing the Same Thing Over and Over Again and Expecting Different Results

Machine learning: