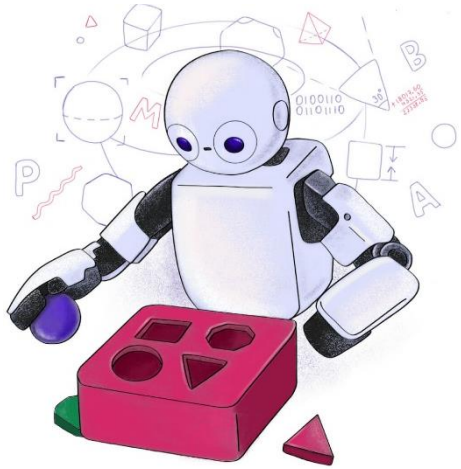
# T319 - Introdução ao Aprendizado de Máquina: *Regressão Linear (Parte V)*



Inatel

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

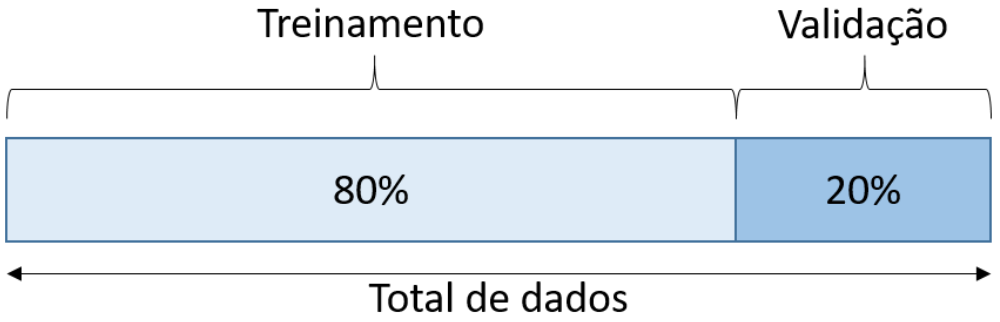
# Recapitulando

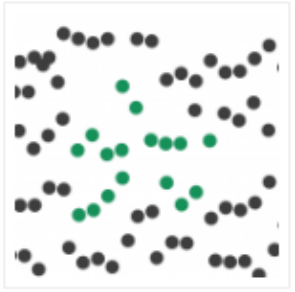
- Vimos que o ***escalonamento de atributos*** ajuda a acelerar o aprendizado do algoritmo do gradiente descendente quandos os atributos têm intervalos de variação muito diferentes.
- Aprendemos que ***funções hipótese polinomiais*** podem ser utilizadas para aproximar dados que não são lineares.
- Porém, precisamos encontrar a ordem ideal para o polinômio aproximador.
  - Polinômios de ordem baixa podem não têm flexibilidade o suficiente para aproximar os dados, o que causa ***subajuste***.
  - Polinômios de ordem alta podem ser tão flexíveis que acabam memorizando os dados de treinamento, o que causa ***sobreajuste***.
- Hoje veremos como escolher a ordem da ***função hipótese polinomial*** quando não conhecemos o ***mapeamento verdadeiro***.

# Validação cruzada

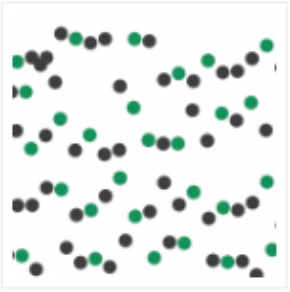
- ***Validação cruzada*** é uma das formas de se avaliar quantitativamente o sobreajuste ou subajuste de um modelo e, com isso, ***encontrar sua ordem ótima***.
- Ou seja, podemos verificar quais ordens fazem o modelo se ajustar demais ou insuficientemente aos exemplos de treinamento.
- Na ***validação cruzada***, nós dividimos o conjunto de exemplos em 2 outros conjuntos, o de treinamento e o de validação (ou teste) do modelo.
- O objetivo é testar a capacidade do modelo em prever as saídas para exemplos que não foram utilizados durante o treinamento (conjunto de validação), ou seja, a capacidade do modelo em ***generalizar***.
- As estratégias para validação cruzada mais utilizadas são:
  - Holdout
  - k-fold
  - Leave-p-out

# Holdout



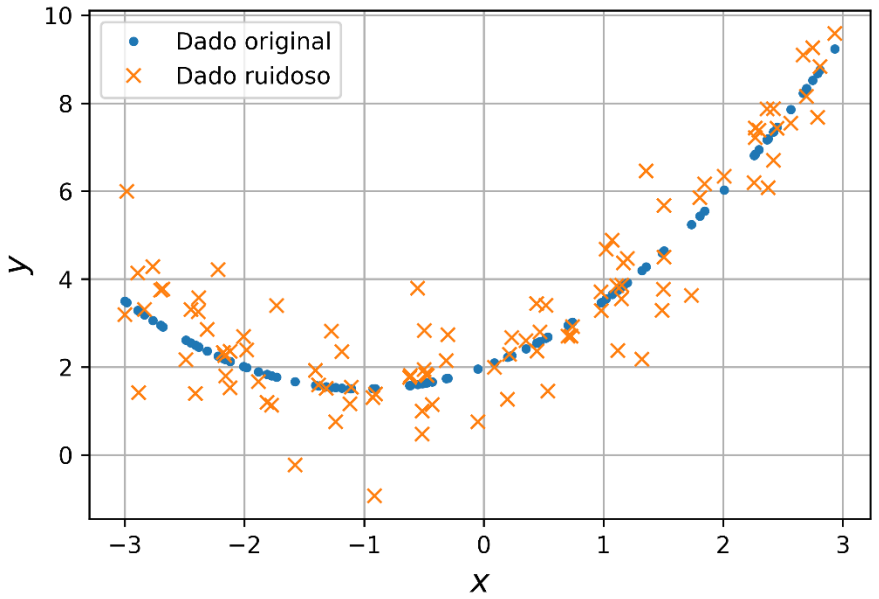
*selection bias*



*proper random sampling*

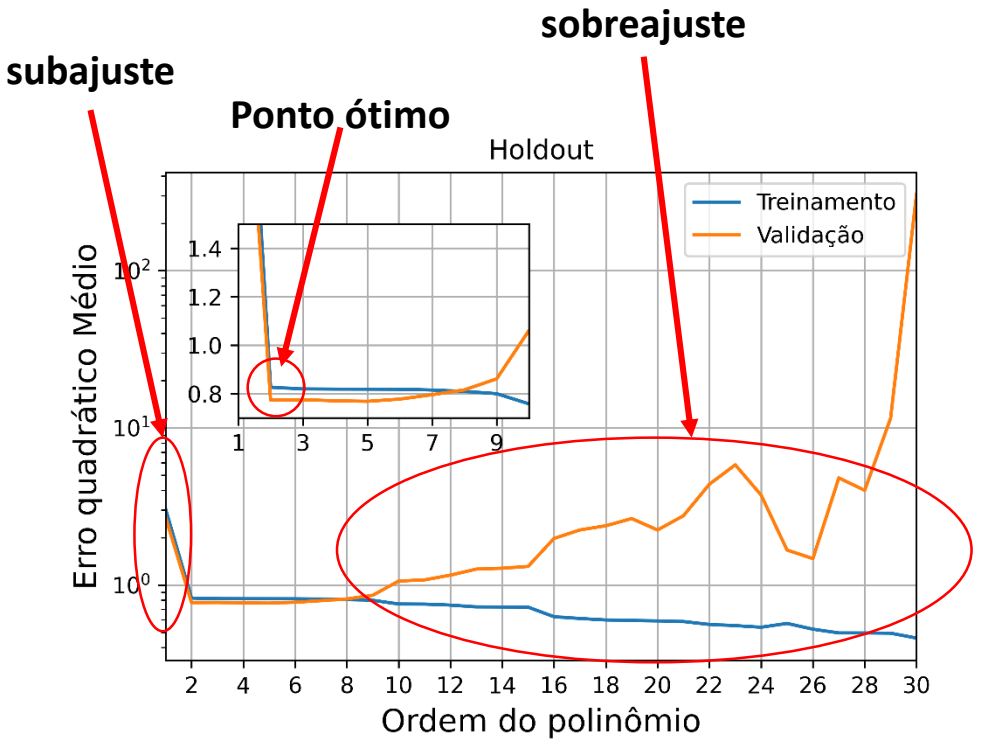
- É a estratégia mais simples das 3 e não acarreta em aumento da complexidade computacional, pois tem-se apenas um único par de conjuntos de treinamento e validação.
- Devemos nos assegurar que os conjuntos de treinamento e validação sejam suficientemente ***representativos*** do mapeamento verdadeiro que se pretende aproximar.
- Divide-se ***aleatoriamente*** o conjunto total de dados em p % para treinamento e (100 - p) % para validação.
- Normalmente divide-se o conjunto total de dados em 70/80% para treinamento e 30/20% para validação.
- **Desvantagem**
  - Pode sofrer com o problema do ***viés de seleção***: a validação pode depender muito de quais exemplos vão para o conjunto de treinamento e quais vão para o conjunto de validação.
  - Portanto, o desempenho do modelo pode ser significativamente diferente dependendo de como a divisão é feita, ou seja, os resultados podem depender de uma escolha aleatória particular dos exemplos dos conjuntos de treinamento e validação.

# Holdout: Exemplo




Função observável é um polinômio de segunda ordem mais ruído Gaussiano branco, $w$.

$$y = 2 + x + 0.5x^2 + w$$

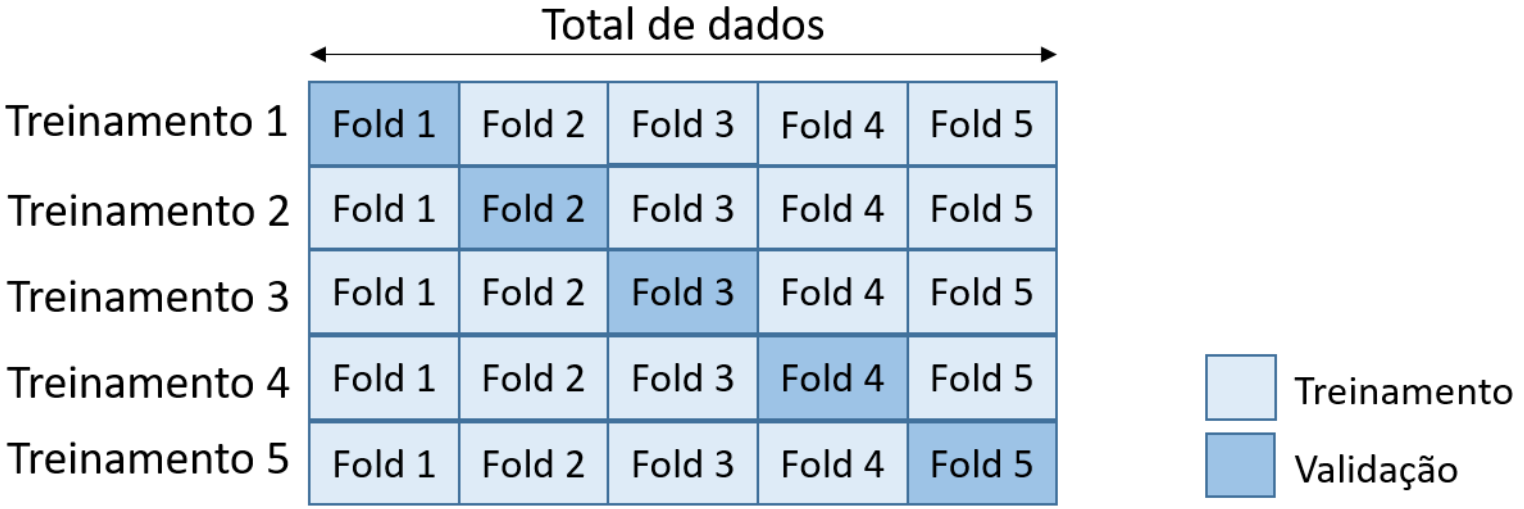



- 70% para conjunto de treinamento e 30% para conjunto de validação.
- Tempo médio para execução com N = 100 é de aproximadamente 160 ms.
- Erro de treinamento ***diminui*** conforme a ordem do polinômio aumenta.
- Erro de validação ***aumenta*** conforme a ordem do polinômio aumenta.
- Qual ordem escolher?
  - O ponto onde ***ambos*** os erros sejam mínimos (balanço entre flexibilidade e grau de generalização).

Exemplo: validacao_cruzada.ipynb

# k-Fold

- Estratégia mais elaborada que a anterior.
- Consiste em dividir o conjunto total de dados em **k** folds (subconjuntos) de tamanhos iguais (se possível) e realizar **k** treinamentos distintos, onde cada um dos **k** treinamentos considera **k-1** folds para treinamento e **1** fold para validação.

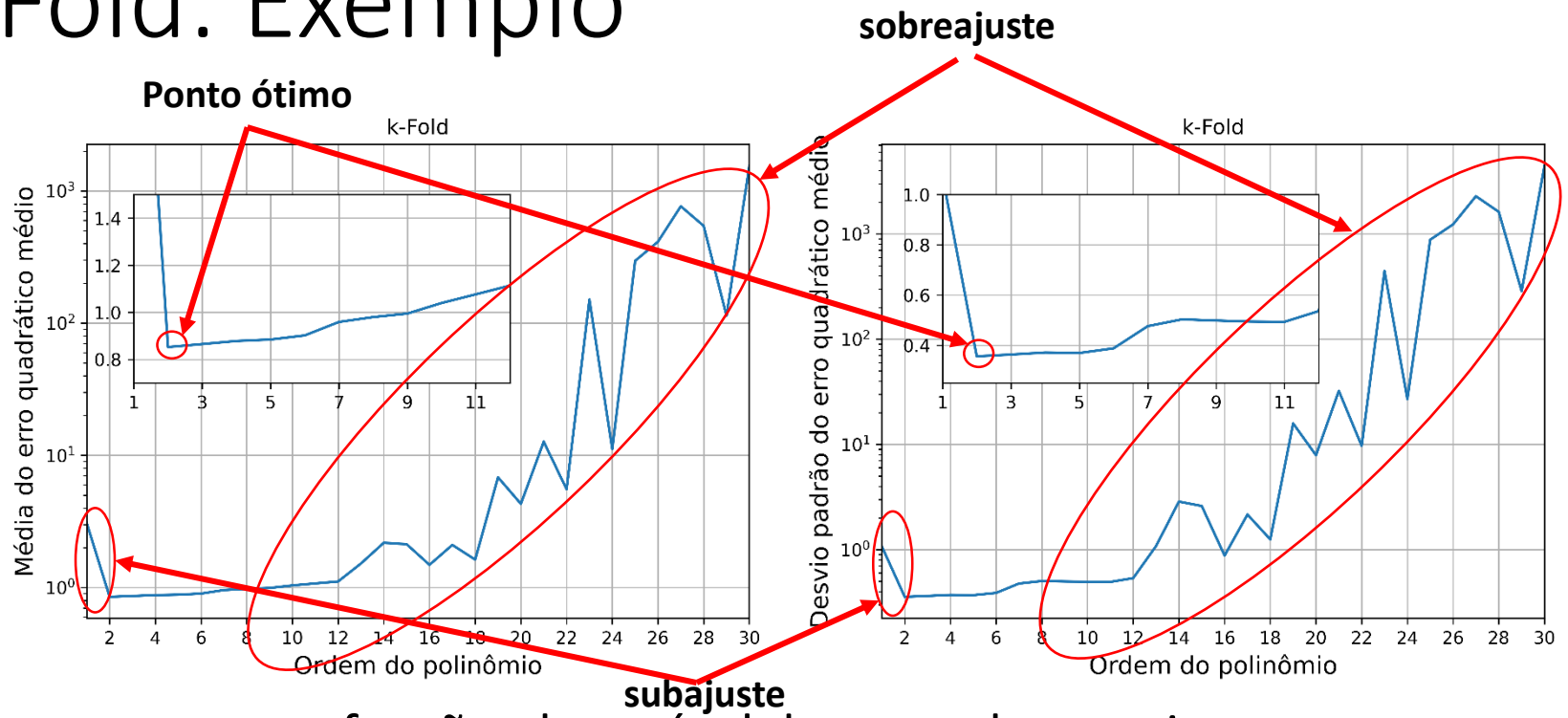



- Cada exemplo entra em um conjunto de validação exatamente **1** vez e em um conjunto de treinamento **k-1** vezes.
- O desempenho do modelo é dado pela ***média dos erros de validação*** calculados para cada um dos **k** folds.

# k-Fold

- Reduz significativamente o problema do ***viés de seleção*** em relação ao ***holdout***: todos os exemplos do conjunto total de dados aparecem nos conjuntos de treinamento e validação.
- Como regra geral e evidência empírica, normalmente, utiliza-se **k** = 5 ou 10.
- Porém, tenham em mente que o valor de ***k*** é escolhido de forma que os conjuntos de treinamento e validação sejam grandes o suficiente para serem ***estatisticamente representativos*** do mapeamento verdadeiro.
- K-Fold é bastante útil quando se tem conjuntos de dados pequenos ou limitados.
- **Desvantagem**
  - O treinamento deve ser executado novamente do zero **k** vezes, o que significa que leva-se **k** vezes mais tempo para se realizar a avaliação do modelo (treinamento + validação).

# k-Fold: Exemplo




Conforme o modelo se ***sobreajusta*** aos dados de treinamento, sua variância aumenta, devido a redução de seu grau de generalização.

Em teoria, a variância deve ser igual a 0 para modelos com alto grau de generalização.

- Usa-se a mesma função observável do exemplo anterior.
- **k** = 10 folds: 10 iterações com 9 grupos para treinamento e 1 para teste.
- Tempo médio para execução com N = 100 exemplos é de aproximadamente 1.9 s.
- Gráficos mostram a média e desvio padrão do MSE para as 10 etapas de treinamento/validação.
- Média e desvio padrão do MSE aumentam com a ordem do polinômio.
- Qual ordem escolher?
  - O ponto onde ***ambos***, média e desvio padrão do MSE, sejam mínimos.

Exemplo: validacao_cruzada.ipynb

# Leave-p-out

- Valida um modelo usando ***todas as combinações possíveis*** de ***p*** exemplos como conjunto de validação e os ***N-p*** exemplos restantes como conjunto de treinamento.
- Para um conjunto de dados com $N$ amostras, essa estratégia produz

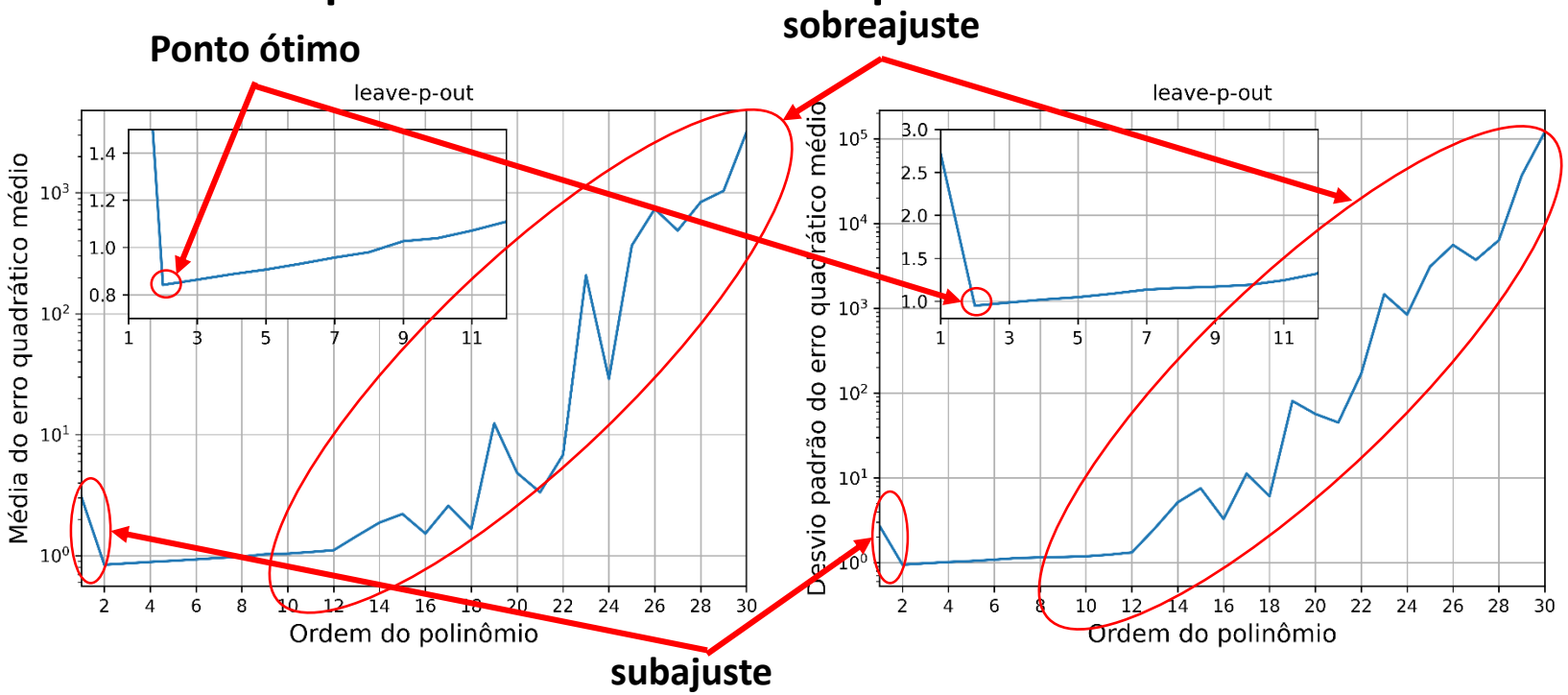
$$\binom{N}{p} = \frac{N!}{p!(N-p)!},$$

Quantos subconjuntos de p exemplos posso crirar a partir de N exemplos?

pares de conjuntos treinamento/teste, portanto, a complexidade computacional desta estratégia aumenta drasticamente com o aumento de ***p***. Exemplos para $N = 100$:

  - p = 1 -> 100 combinações
  - p = 2 -> 4.950 combinações
  - p = 5 -> 75.287.520 combinações
- Fornece estimativas de erro e desvio padrão mais precisas do que as abordagens anteriores, pois tem-se mais etapas de treinamento/validação.
- **Desvantagem**
  - É uma estratégia exaustiva no sentido de que ela treina e valida o modelo para todas as combinações possíveis e, para uma base de dados grande e um valor de **p** moderadamente grande, pode se tornar inviável computacionalmente.
- No caso do k-Fold, quando fazemos **k=N** (número folds igual ao número total de exemplos), então o k-Fold é equivalente à estratégia do leave-one-out, ou seja, ***p*** = 1.

# Leave-p-out: Exemplo




- Para ordem igual a 1, a média e desvio padrão são elevados: **subajuste**.
- Conforme a ordem aumenta, ambos diminuem, atingindo o **ponto ótimo** quando igual a 2.
- Porém, conforme a ordem continua a aumentar, ambos aumentam, indicando **sobreajuste**.

- Usa-se a mesma função observável do exemplo anterior.
- **p** = 2: 4950 combinações possíveis com 98 exemplos para treinamento e 2 para validação.
- Tempo médio para execução com N = 100 é de aproximadamente 810 [s] (+ de 13 [m]).
- Gráficos mostram a média e desvio padrão do MSE para as 4950 etapas de treinamento/validação.
- Média e desvio padrão do MSE aumentam com a ordem do polinômio.
- Qual ordem escolher?
  - O ponto onde ***ambos***, média e desvio padrão do MSE, sejam mínimos.

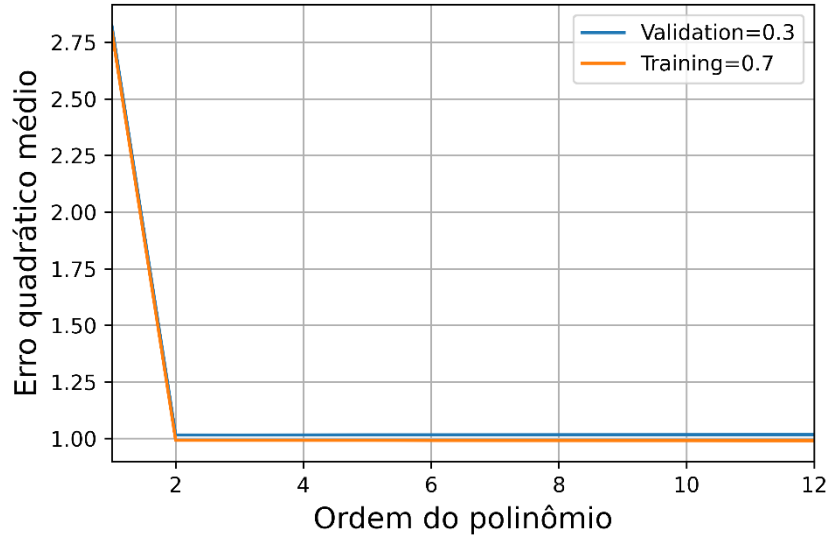
Exemplo: validacao_cruzada.ipynb

# Qual estratégia utilizar?

- O **leave-p-out** dá indicações mais claras de qual ordem usar, pois usa um maior número de pares treinamento/validação, aumentando a confiabilidade da média e do desvio padrão do MSE.
- Porém, ele é bastante custoso em relação ao tempo necessário para se executá-lo, mesmo com uma base de 100 amostras leva-se mais de 13 minutos!
- Portanto, deve-se utilizá-lo com bases relativamente pequenas.
- Para bases maiores, o **k-fold** é uma opção melhor e mais eficiente do que o **holdout**.
- Para bases muito grandes, o **holdout** já daria boas indicações sobre qual ordem utilizar.

# Qual ordem escolher para o modelo?

- E se os erros de treinamento e validação são pequenos e praticamente constantes para várias ordens de polinômio?
- Uma resposta é usar o princípio da ***navalha de Occam***.
- A ***navalha de Occam*** é um princípio lógico que diz que deve-se preferir explicações mais simples às mais complicadas.
- Portanto, escolhemos modelos usando a **navalha de Occam**: escolhemos a ***função hipótese*** menos complexa que se ajusta bem aos dados.



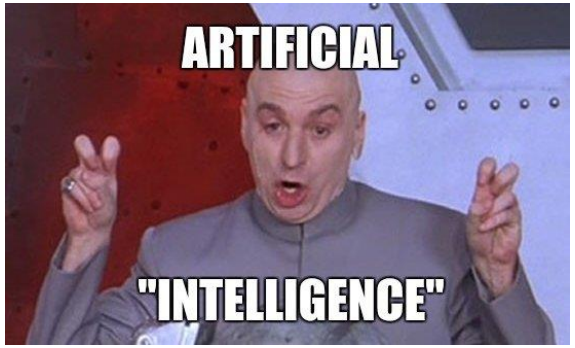

- Mesma função observável dos exemplos anteriores.
- Base de dados com **10000 exemplos**.
- Holdout com 30% para validação.
- Vejam que teoricamente, qualquer ordem maior ou igual a 2 já seria uma boa escolha.
- **Qual ordem escolher?**

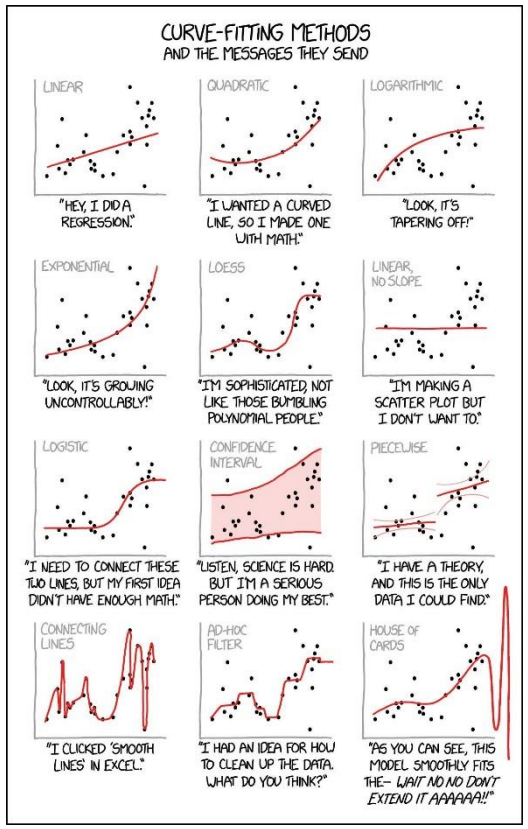
# Tarefas

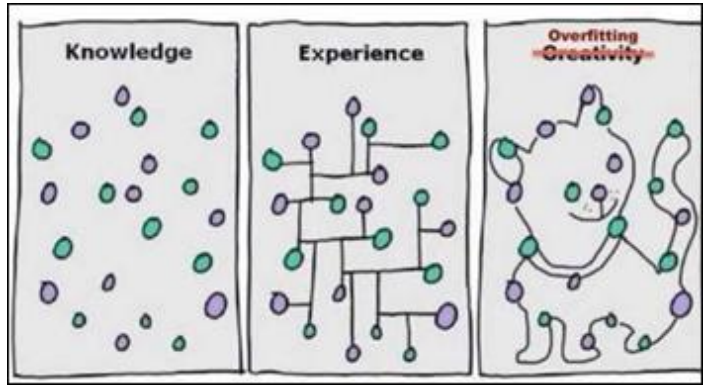
- **Quiz**: “*T319 - Quiz - Regressão: Parte V (1S2021)*” que se encontra no MS Teams.
- **Exercício Prático**: **Laboratório #6**.
  - Pode ser baixado do MS Teams ou do GitHub.
  - Pode ser respondido através do link acima (na nuvem) ou localmente.
  - Instruções para resolução e entrega dos laboratórios.
  - **Laboratórios podem ser feitos em grupo.**

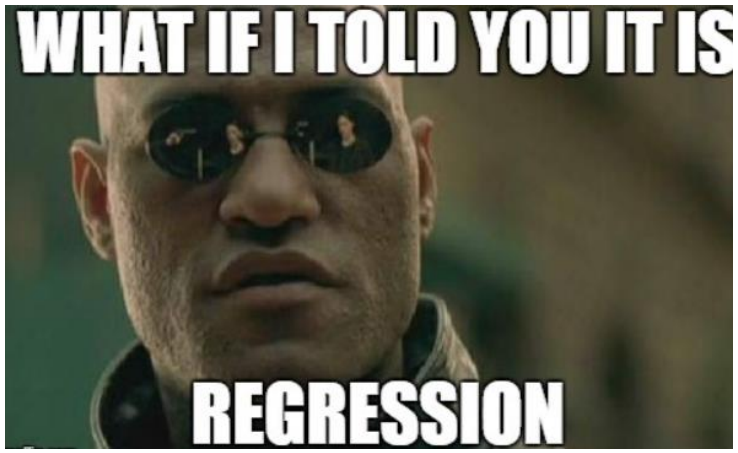
# Obrigado!


THIS IS YOUR MACHINE LEARNING SYSTEM?
YUP! YOU POUR THE DATA INTO THIS BIG PILE OF LINEAR ALGEBRA, THEN COLLECT THE ANSWERS ON THE OTHER SIDE.
WHAT IF THE ANSWERS ARE WRONG?
JUST STIR THE PILE UNTIL THEY START LOOKING RIGHT.
DATA
ANSWERS


ARTIFICIAL
"INTELLIGENCE"


CURVE-FITTING METHODS
AND THE MESSAGES THEY SEND
LINEAR
"HEY, I DID A REGRESSION."
QUADRATIC
"I WANTED A CURVED LINE, SO I MADE ONE WITH MATH."
LOGARITHMIC
"LOOK, IT'S TAPERING OFF!"
EXPONENTIAL
"LOOK, IT'S GROWING UNCONTROLLABLY!"
LOESS
"I'M SOPHISTICATED, NOT LIKE THOSE BUMBLING POLYNOMIAL PEOPLE."
LINEAR, NO SLOPE
"I'M MAKING A SCATTER PLOT BUT I DON'T WANT TO."
LOGISTIC
"I NEED TO CONNECT THESE TWO LINES, BUT MY FIRST IDEA DIDN'T HAVE ENOUGH MATH."
CONFIDENCE INTERVAL
"LISTEN, SCIENCE IS HARD. BUT I'M A SERIOUS PERSON DOING MY BEST."
PIECEWISE
"I HAVE A THEORY, AND THIS IS THE ONLY DATA I COULD FIND."
CONNECTING LINES
"I CLICKED 'SMOOTH LINES' IN EXCEL."
AD-HOC FILTER
"I HAD AN IDEA FOR HOW TO CLEAN UP THE DATA. WHAT DO YOU THINK?"
HOUSE OF CARDS
"AS YOU CAN SEE, THIS MODEL SMOOTHLY FITS THE— WAIT NO NO DON'T EXTEND IT AAAAAA!!"

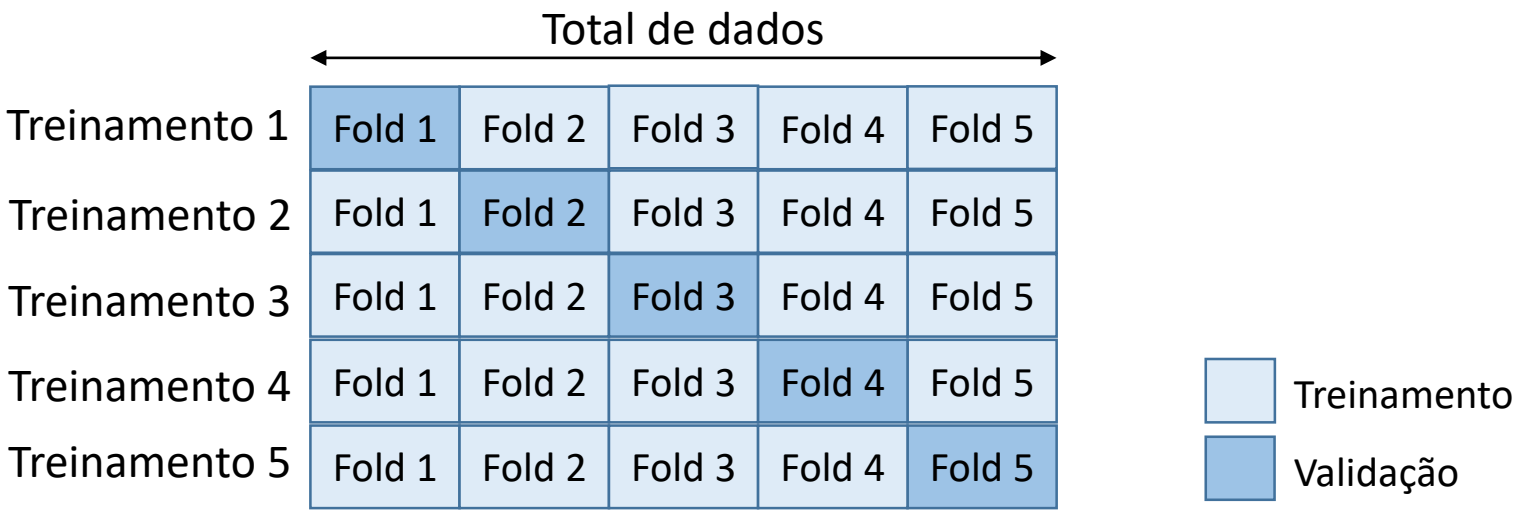

Knowledge
Experience
Overfitting
Creativity

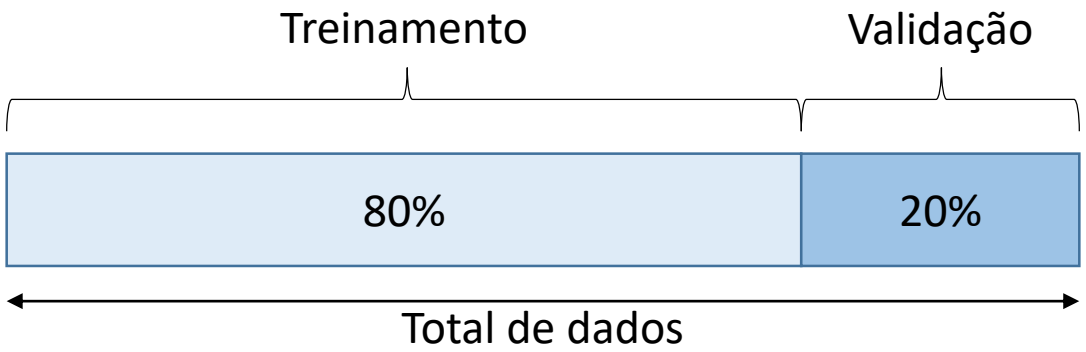

WHAT IF I TOLD YOU IT IS
REGRESSION


WHOA
I KNOW LINEAR REGRESSION


LETS LEARN
REGRESSION
memegenerator.net

# FIGURAS


Total de dados
Treinamento 1
Treinamento 2
Treinamento 3
Treinamento 4
Treinamento 5
Fold 1
Fold 2
Fold 3
Fold 4
Fold 5
Treinamento
Validação


Treinamento
Validação
80%
20%
Total de dados