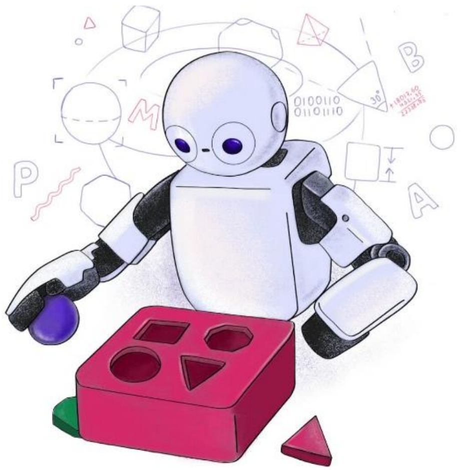
T319 - Introdução ao Aprendizado de Máquina: *Regressão Linear (Parte VI)*



Inatel

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

Recapitulando

- Anteriormente, vimos como selecionar o melhor modelo de regressão utilizando as técnicas de validação cruzada: holdout, k-Fold e leave-P-out.
- Escolhemos sempre o modelo menos complexo e que ainda apresenta valores baixos de erro.
- Uma abordagem alternativa é a procura por ***funções hipótese*** que minimizem o erro e a complexidade da ***função hipótese***.
- Portanto, hoje, veremos outras formas de se selecionar o melhor modelo de regressão de forma que o erro e a complexidade da hipótese sejam minimizadas.
  - **Regularização**: penaliza funções hipótese muito complexas, ou seja, muito flexíveis.
  - **Early-stop**: encerra o treinamento de algoritmos iterativos quando o erro de validação for o menor possível.

Regularização: penalizando a complexidade dos modelos

- A **regularização** é outra forma de se escolher o melhor modelo.
- A ideia por trás da ***regularização*** é penalizar, explicitamente, ***hipóteses*** complexas.
- Técnicas de ***regularização*** podem reduzir o risco de ***sobreajuste*** do modelo ao conjunto de treinamento, aumentando sua capacidade de ***generalização***.
- O ***sobreajuste*** pode ser evitado incorporando ***penalizações*** proporcionais à alguma ***norma*** do vetor de pesos ao processo de treinamento.
- As principais técnicas de ***regularização*** são: *rigde regression*, LASSO e *elastic-net*.

Ridge Regression

- Ao invés de minimizarmos apenas o erro quadrático médio, como fizemos antes, introduzimos um ***termo de penalização*** proporcional à ***norma Euclidiana*** (ou seja, a norma L2) do vetor de pesos:

Início em 1 e não em 0.

$$\min_{\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}} (\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi a}\|^2 + \boxed{\lambda \|\boldsymbol{a}\|_2^2)} \text{ com } \|\boldsymbol{a}\|_2^2 = \sum_{i=1}^{K} {a_i}^2$$

onde $\lambda \geq 0$ é o ***fator de regularização***, $\boldsymbol{\Phi}$ é a matriz de atributos e $\boldsymbol{a}$ é o vetor de pesos.

- Podemos re-escrever o ***problema de regularização*** como um ***problema de otimização*** com restrições da seguinte forma

$$\min_{\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}} \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi a}\|^2$$
$$\text{s.a.} \; \|\boldsymbol{a}\|_2^2 \leq c,$$

- Se c diminui, $\|\boldsymbol{a}\|_2^2$ também diminui até que se $c \rightarrow 0$, então $a_i \rightarrow 0$.
- Se c aumenta, $\|\boldsymbol{a}\|_2^2$ pode assumir valores maiores até que se $c \rightarrow \infty$, então $a_i \rightarrow \infty$.

onde c restringe a magnitude dos pesos e é inversamente proporcional à λ.

- Portanto, λ modifica a complexidade (ou seja, flexibilidade) da função hipótese.
- **OBS.**: o peso a_0 não é considerado no cálculo da ***norma L2***, pois a ***complexidade*** se deve à ordem do modelo e a_0 apenas dita o deslocamento em relação ao eixo y.

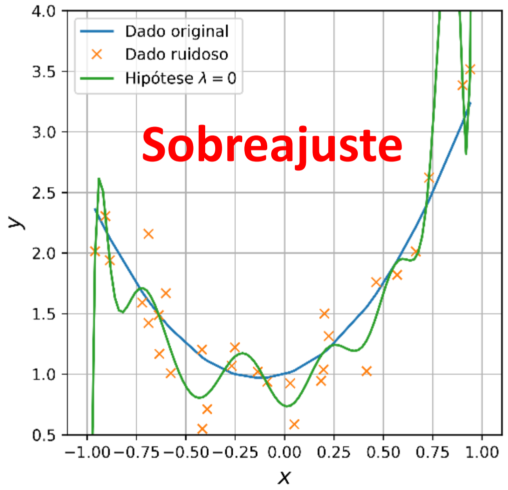
Ridge Regression

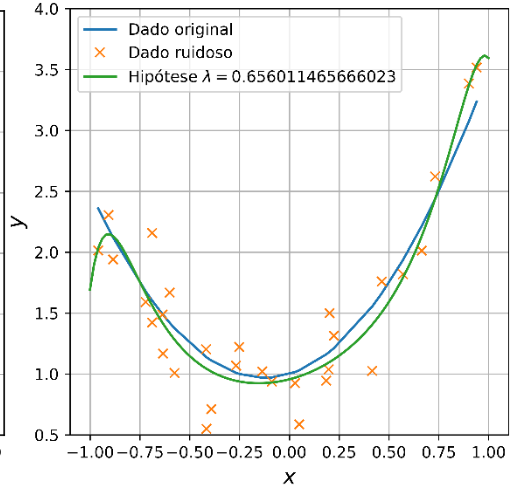
- A equação de erro regularizado, $||\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi a}||^2 + \lambda||\boldsymbol{a}||_2^2$, continua sendo quadrática com relação aos pesos, e portanto, a superfície de erro continua sendo convexa.
- Desta forma, encontramos uma solução de forma fechada seguindo o mesmo procedimento que usamos para encontrar a ***equação normal***:

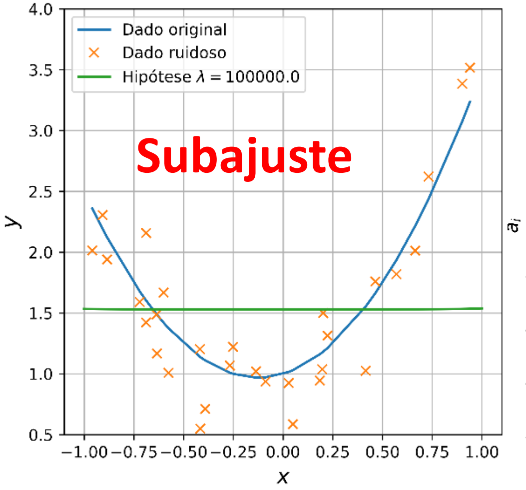
$$\boldsymbol{a} = (\boldsymbol{\Phi}^T\boldsymbol{\Phi} \boxed{+ \lambda \boldsymbol{I}'})^{-1}\,\boldsymbol{\Phi}^T\boldsymbol{y}, \text{ onde } \boldsymbol{I}' = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

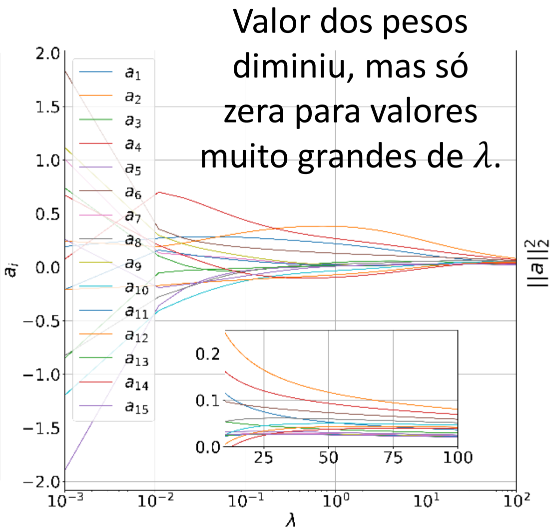
- **OBS.1**: mesmo que a matriz $\boldsymbol{\Phi}$ não possua ***posto completo***, a inversa na equação acima sempre existirá por conta da adição do ***termo de regularização*** à diagonal principal da matriz quadrada $\boldsymbol{\Phi}^T\boldsymbol{\Phi}$.
- **OBS.2**: como a **norma L2** é diferenciável, os problemas de aprendizagem usando a regularização de Ridge podem ser resolvidos iterativamente através do ***algoritmo do gradiente descendente***.
- **OBS.3**: o termo de regularização deve ser adicionado apenas à função de erro durante o treinamento. Depois que o modelo é treinado, a avaliação do desempenho do modelo não utiliza a regularização.

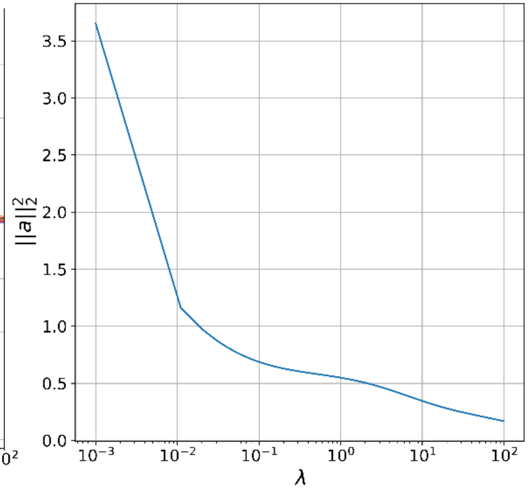
Ridge Regression: Exemplo











- Função hipótese polinomial de grau 15.
- Modelo treinado com 30 amostras geradas a partir de $y_{\text{noisy}} = 1 + 0.5x + 2x^2 + w$, onde $x \sim U(-1,1)$ e $w \sim N(0,1)$.
- Com $\lambda = 0$, regressão de Ridge se torna uma regressão polinomial sem regularização.
- Conforme λ aumenta, o modelo não se "*contorce*" tanto e passa a se ajustar aos dados de treinamento.
- Se λ continuar aumentando, todos os pesos acabarão muito próximos de zero e o resultado será uma linha reta que passa pela ***média dos dados de treinamento***.
- O aumento de λ leva a hipóteses menos complexas. Isso reduz a variância do modelo, mas aumenta seu bias. Ou seja, ele tende a ***subajustar***.
- Conforme λ aumenta, os pesos e a norma L2 do vetor de pesos diminuem.
- Utiliza-se técnicas de validação cruzada para encontrar o valor ideal de λ.

[Exemplo: ridge_regression.ipynb]

LASSO Regression

- A ***regressão LASSO*** (*Least Absolute Shrinkage and Selection Operator*) adiciona à função de erro um ***termo de penalização*** proporcional à **norma L1** do vetor de pesos.

$$\min_{\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}} (\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi a}\|^2 + \boxed{\lambda \|\boldsymbol{a}\|_1}),$$

onde $\|\boldsymbol{a}\|_1 = \sum_{i=1}^{K} |a_i|$ e $\lambda \geq 0$ é o ***fator de regularização***.

- Podemos re-escrever o ***problema de regularização*** acima como um ***problema de otimização*** com restrições da seguinte forma

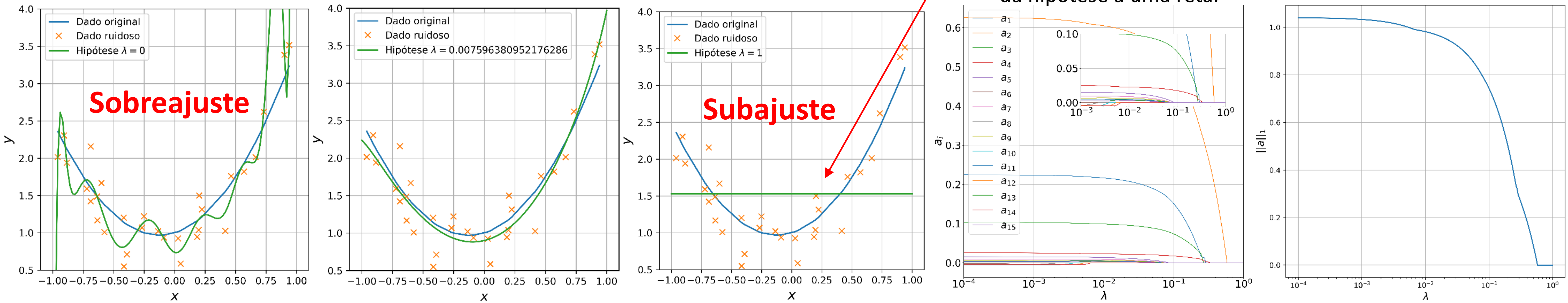
$$\min_{\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}} \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi a}\|^2$$
$$s.a. \|\boldsymbol{a}\|_1 \leq c,$$

onde c restringe a magnitude dos pesos e é inversamente proporcional à λ.

OBS.: a_0 também não faz parte do cálculo da norma.

LASSO Regression

Valor dos pesos se torna igual a zero, restringindo a flexibilidade da hipótese a uma reta.

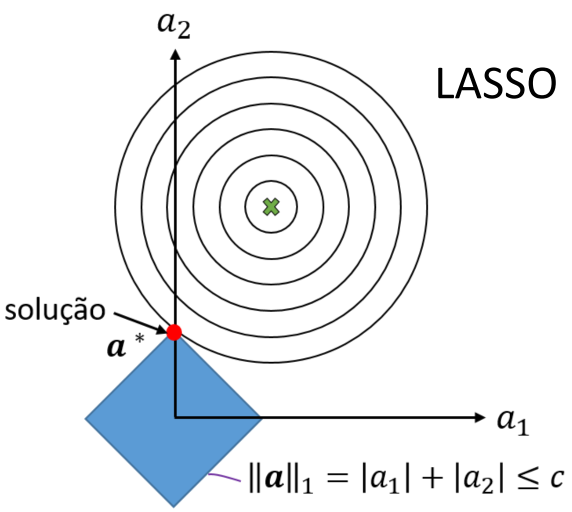


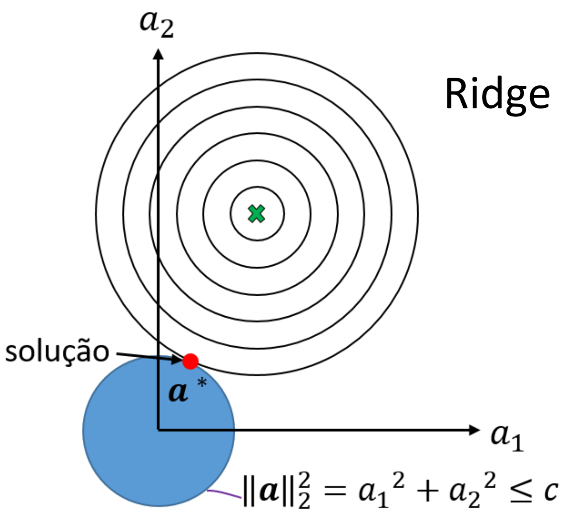
- Mesmas funções geradora e hipótese do exemplo anterior.
- Valores pequenos de λ fazem LASSO se comportar como regressão tradicional e valores muito grandes fazem os pesos serem anulados.
- A regularização com ***norma L1*** tem como vantagem a produção de ***modelos esparsos***.
- Ou seja, vários elementos do vetor de pesos acabam sendo ***anulados***, indicando que os pesos correspondentes são irrelevantes.
- Isso sugere a ocorrência implícita de um processo de ***seleção automática de atributos***, e leva a ***modelos*** mais ***regulares***, ou seja, ***menos complexos***.
- **Desvantagem**: como a ***norma L1*** não possui derivada no ponto $a_i = 0, \forall i$, o problema da minimização não possui solução em forma fechada.
- Utiliza-se técnicas de validação cruzada para encontrar o valor ideal de λ.

[Exemplo: lasso_regression.ipynb]

Vantagem do LASSO sobre Ridge

- O quadrado azul representa o conjunto de pontos $\boldsymbol{a}$ no espaço de pesos bidimensional que tenham norma L1 menor do que c.
- A solução deve estar em algum lugar dentro do quadrado.





- O círculo azul representa o conjunto de pontos $\boldsymbol{a}$ no espaço de pesos bidimensional que tenham norma L2 menor do que c.
- A solução deve estar em algum lugar dentro do círculo.

- **Por que a regressão LASSO tem como vantagem a produção de modelos esparsos**?
  - Figura mostra as curvas de nível da função de erro de um problema de regressão linear, bem como as regiões do ***espaço de hipóteses*** em que as restrições L1 (esquerda) e L2 (direita) são válidas, considerando o caso em que dois pesos estão sujeitos a regularização (a_1 e a_2).
  - A solução para ambos os métodos corresponde ao ponto, dentro da ***região de factibilidade*** (área em azul), mais próximo do ponto de mínimo da função de erro.
  - É fácil ver que para uma posição arbitrária do mínimo, será comum que um ***canto*** (ou ponta) do quadrado seja o ponto mais próximo do ponto de mínimo
  - Os ***cantos*** na ***região de factibilidade*** da restrição L1 aumenta as chances de alguns pesos assumirem o valor zero.
  - E claro, os ***cantos*** são os pontos que possuem um valor igual a 0 em alguma das dimensões (i.e., pesos).

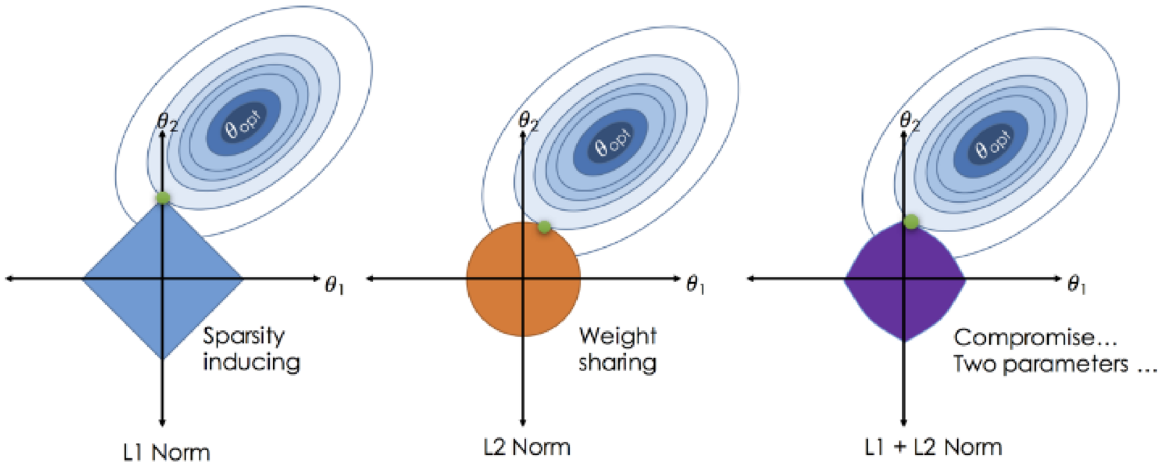
Elastic-net

- Elastic-net é uma solução intermediária entre as regressões Ridge e LASSO.
- Nada mais é do que uma combinação entre as penalizações baseadas nas normas L1 e L2 do vetor de pesos.

$$\min_{\boldsymbol{a}\in\mathbb{R}}(||\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi a}||^2 + \lambda\,[\kappa||\boldsymbol{a}||_1 + (1-\kappa)||\boldsymbol{a}||_2^2]),$$

onde $\kappa \epsilon [0, 1]$.

- Quando κ = 0, a Elastic-net é equivalente a Ridge regression, e quando κ = 1, ela é equivalente a Regressão Lasso.
- Utiliza-se técnicas de validação cruzada para encontrar os valores ideais de κ e λ.



O hiperparâmetro κ dita a relação de compromisso entre as duas regularizações.

Exemplo: elastic_net_regression.ipynb

Quando utilizar regressão LASSO, Ridge ou Elastic-Net?

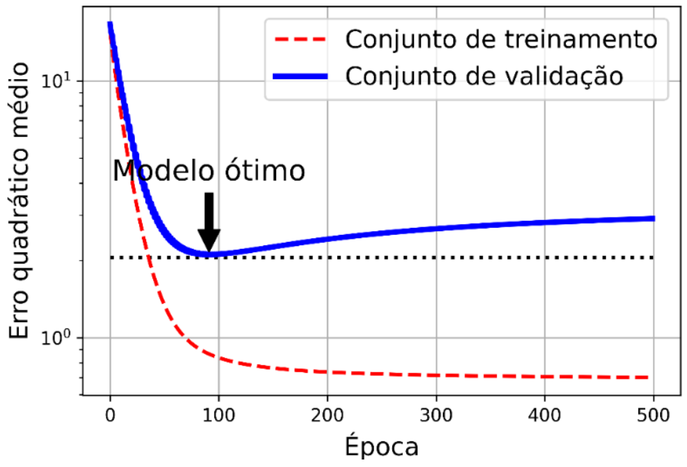
- **Regressão de Ridge**: um bom começo. No entanto, se você suspeitar que apenas alguns atributos são realmente úteis, você deve preferir LASSO ou Elastic-Net.
- **Regressão LASSO**: boa para ***seleção automática de atributos***. No entanto, se o número de atributos for maior que o número de exemplos de treinamento, ou quando houverem atributos fortemente correlacionados, deve-se usar a regressão Elastic-Net.
- **Elastic-Net**: é mais versátil que as anteriores, pois o parâmetro de elasticidade κ é ajustável. Uma proporção de 50% entre as penalizações L1 e L2 é uma boa escolha inicial para esse parâmetro.

Early-stop: Parada antecipada

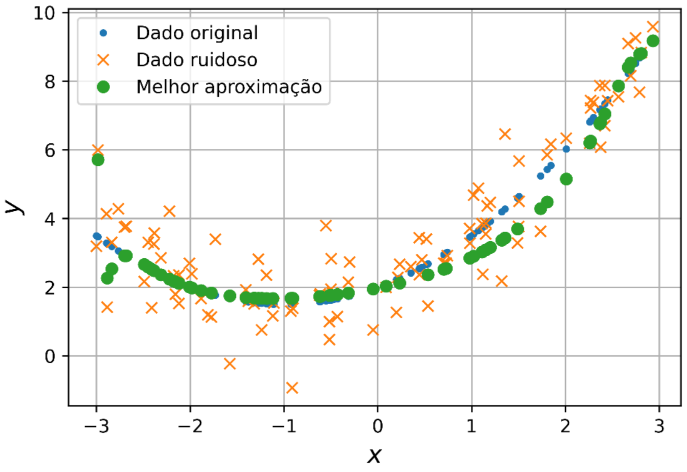
- Uma forma de se ***regularizar*** algoritmos de ***aprendizado iterativo***, como o ***gradiente descendente***, é interromper seu treinamento assim que o ***erro de validação*** comece a crescer sistematicamente.
- Essa abordagem é chamada de ***early-stop*** e pode ser vista como uma ***regularização*** no ***tempo***.
- Assim como as outras abordagens, ela tem o objetivo de evitar o ***sobreajuste*** de um modelo.
- Intuitivamente, o algoritmo do ***gradiente descendente*** tenderá a aprender modelos cada vez mais complexos à medida que o número de épocas aumenta.
- Ao regularizar no ***tempo***, a complexidade do modelo pode ser controlada, melhorando sua ***generalização***.

Early-stop: Exemplo

- Existem duas estratégias para se definir o critério de parada:
  - Interromper o treinamento quando o erro de validação aumenta por ***P*** épocas sucessivas.
    - **Problema**: como o erro de validação pode oscilar bastante (e.g., SGD), nem sempre é fácil desenvolver detectores automáticos de mínimos e encerrar o treinamento.
  - Permitir que o treinamento prossiga, mas sempre armazenando os pesos associados ao ***menor erro de validação***.
- A figura mostra um modelo de regressão polinomial com grau igual a 90 sendo treinado usando o ***gradiente descendente estocástico*** e apenas 100 amostras de treinamento.
- À medida que as épocas passam, o algoritmo aprende e seu erro quadrático médio no conjunto de treinamento diminui, juntamente com o erro de predição no conjunto de validação.
- No entanto, após algumas épocas, o erro de validação para de diminuir e começa a crescer.
- Isso indica que o modelo começou a ***sobreajustar*** aos dados de treinamento.



$$y_{\text{noisy}} = 2 + x + 0.5x^2 + w,$$
onde $x \sim U(-3,3)$ e $w \sim N(0,1)$



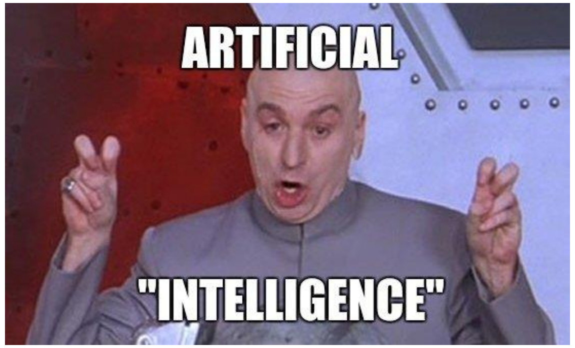
Exemplo: early_stopv2.ipynb

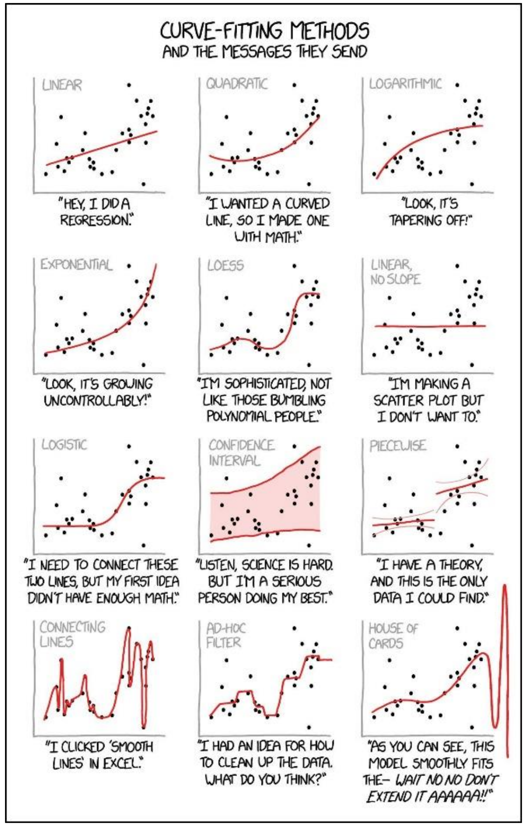
Tarefas

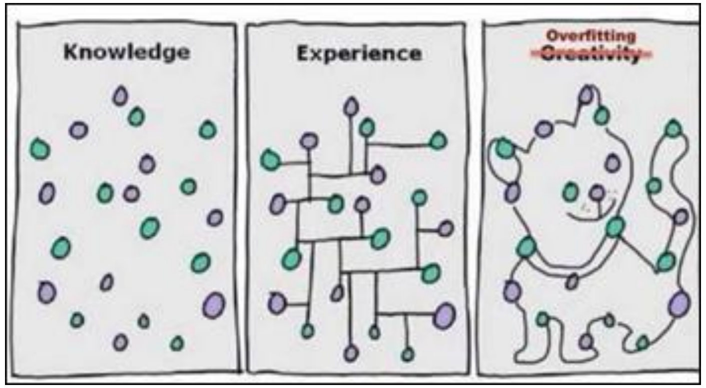
- **Quiz**: *“T319 - Quiz - Regressão: Parte VI (1S2021)”* que se encontra no MS Teams.
- **Exercício Prático**: Projeto Prático.
  - Pode ser baixado do MS Teams ou do GitHub.
  - Pode ser respondido através do link acima (na nuvem) ou localmente.
  - Instruções para resolução e entrega dos laboratórios.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

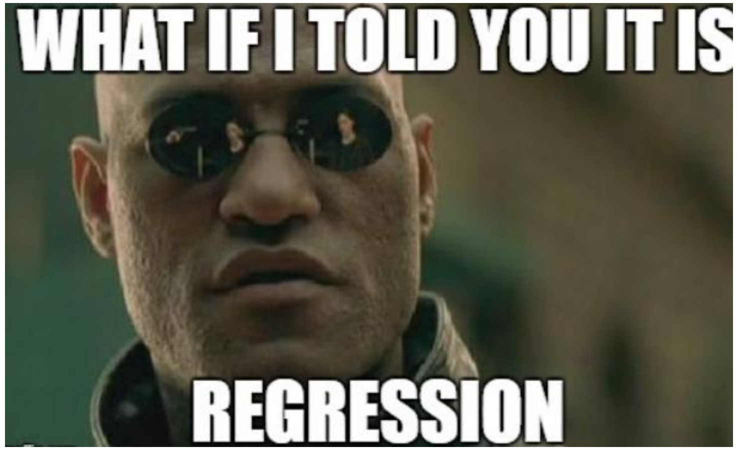
Obrigado!


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