

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



Inatel

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

Recapitulando

- Vimos que o **valor do passo de aprendizagem influencia no processo aprendizagem** do gradiente descendente.
 - Valores pequenos fazem com que o algoritmo tenha convergência muito lenta.
 - Valores grandes fazem com que o algoritmo divirja.
- O gráfico do erro versus iterações nos ajuda a **depurar as versões do GD**.
- Quando usamos as versões estocásticas do GD, podemos **reduzir o valor do passo de aprendizagem ao longo do treinamento** para “**forçar**” a **convergência** do algoritmo.
- Nesse tópico, veremos
 - Técnicas de **pré-processamento** importantes para algoritmos de ML que usam **métricas de distância como função de erro**.
 - Como **polinômios** podem ser usados para se **ajustar a dados que apresentam mapeamento não-linear** entre os atributos e o valor esperado.

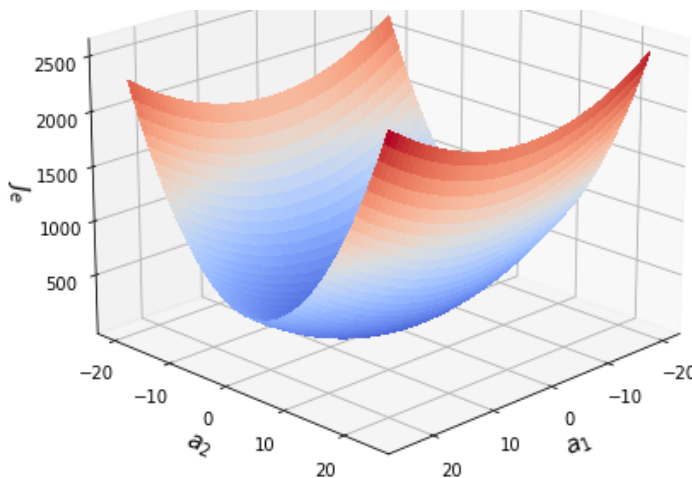
Variações do formato da superfície de erro

- Como vimos no laboratório #3, nem toda superfície de erro criada a partir da função do EQM tem formato de tigela (i.e., com curvas de erro circulares).
- Dependendo dos *intervalos de variação dos atributos*, podemos ter *superfícies com formato de vale*.
- Por exemplo, se $x_1 \gg x_2$, ele *dominará o erro* e fará com que a superfície de erro tenha *formato de vale*.

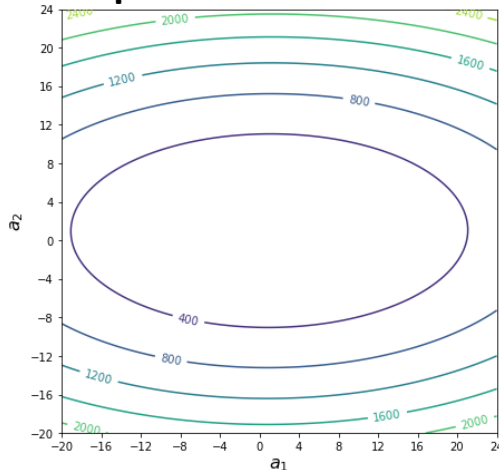
$$J_e(\mathbf{a}) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \left[y_{\text{noisy}}(n) - \underbrace{(\hat{a}_1 x_1(n) + \hat{a}_2 x_2(n))}_{\text{Função hipótese}} \right]^2 \underset{x_1 \gg x_2}{\approx} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} [y_{\text{noisy}}(n) - \hat{a}_1 x_1(n)]^2$$

Superfícies com formato de vale

Superfície de erro



Superfície de contorno



- Superfícies com *formato de vale* fazem com que a *convergência do GD se torne muito lenta*.
- A *convergência* se torna *lenta devido à superfície ser plana ou quase plana* em algumas direções (i.e., inclinação ≈ 0).
- Nessas direções, o *gradiente da função de erro é muito pequeno*, tornando as *atualizações dos pesos*, consequentemente, *muito pequenas*.
- Na figura ao lado, as derivadas parciais do EQM em relação ao peso a_1 serão muito pequenas devido à pequena inclinação da superfície nessa direção.

O que pode ser feito?

Escalonamento de atributos

- Para evitar esse problema, o *intervalo de variação de todos os atributos* pode ser *escalonado*, trazendo-os para uma escala similar.
- Assim, cada *atributo contribuíra com o mesmo peso* para o cálculo do erro.
- As duas formas mais comuns de escalonamento são:
 - Normalização Mín-Max
 - Padronização
- **Observação:**
 - Em geral, aplicamos o escalonamento *apenas aos atributos* e não aos rótulos, pois são os atributos que influenciam o formato da superfície de erro.
 - Além disso, ao escaloná-los, perde-se seu significado. Por exemplo, a predição do preço de casas deixa de ser reais.

Escalonamento de atributos

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

$$x'_k(n) = \frac{x_k(n) - \min(\mathbf{x}_k)}{\max(\mathbf{x}_k) - \min(\mathbf{x}_k)}, 0 \leq x'_k(n) \leq 1,$$

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

- O escalonamento (qualquer tipo) altera os valores dos pesos originais.
 - Se a escala dos atributos é alterada, para que o modelo ainda prediga os mesmos valores de saída (i.e., rótulos), os pesos precisam ter seus valores alterados (ver anexo I).

Escalonamento de atributos

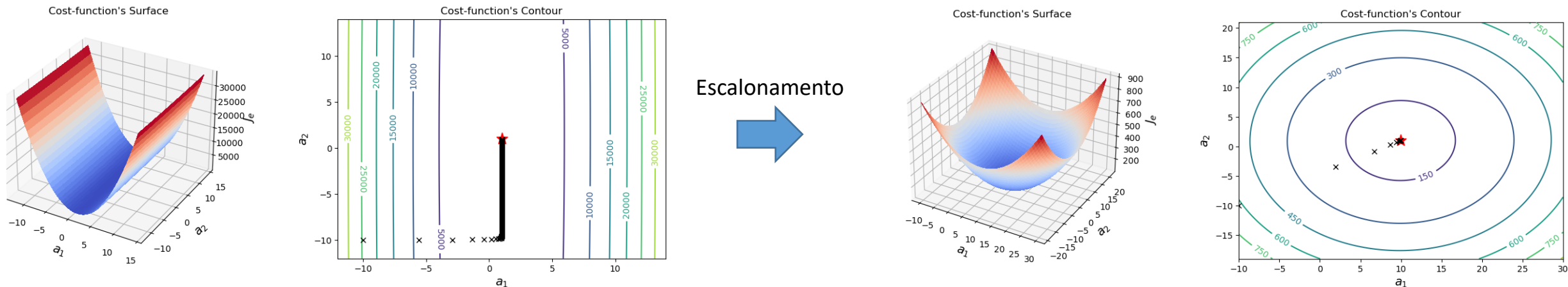
- **Padronização** faz com que os *atributos passem a ter média zero e desvio padrão unitário*.
- Observem que, neste caso, os *valores não ficam restritos a um intervalo específico*.
- A equação usada para padronizar os atributos é apresentada abaixo.

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

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

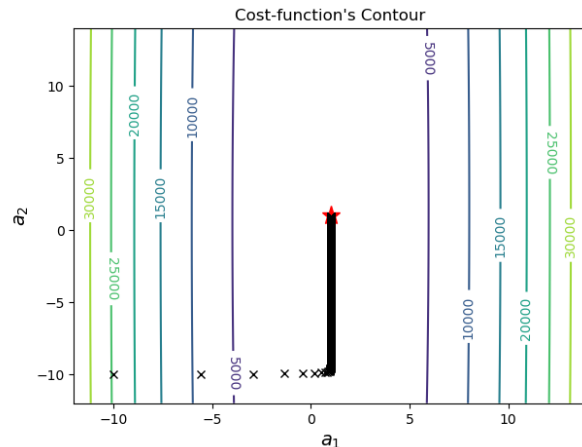
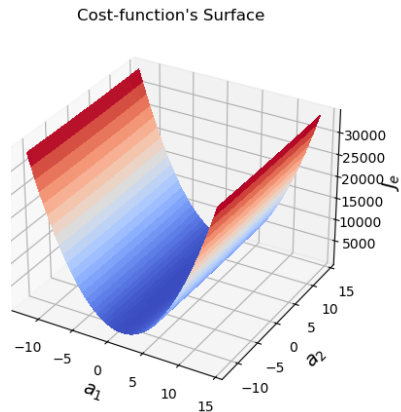
Vantagens do escalonamento de atributos

- 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.

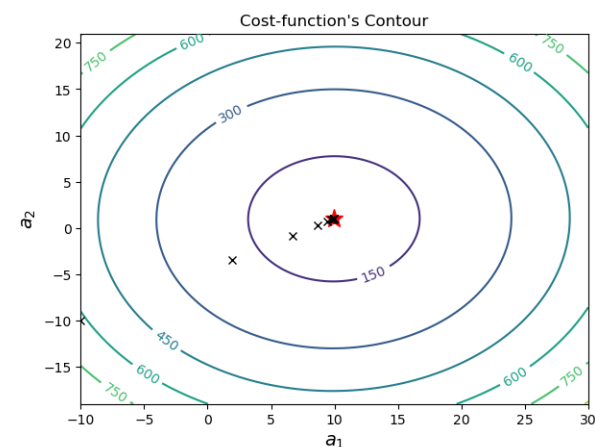
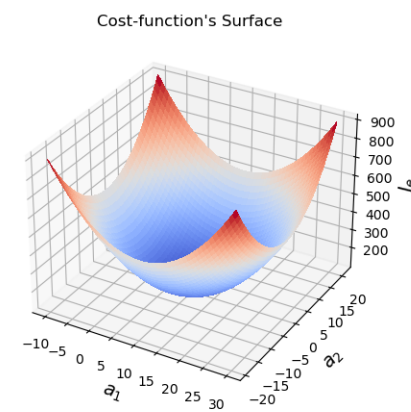
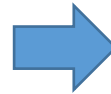


Vantagens do escalonamento de atributos

- Possibilita a **comparação justa do peso/influência** de cada **atributo** no modelo.
 - Pois os pesos representam o impacto relativo dos atributos nas previsões.
- 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.



Escalonamento



Avisos

- **Exercício Prático: Laboratório #5 (Exercício #1 apenas)**
 - Pode ser acessado através do link acima (Google Colab) ou no GitHub.
 - Vídeo explicando o laboratório: Arquivos -> Material de Aula -> Laboratório #5
 - Se atentem aos prazos de entrega.
 - Instruções para resolução e entrega dos laboratórios.
- **Avaliação Presencial: 10/11/2023 – Sala I-16**
 - Avaliação e projeto podem ser feitos em grupos de no máximo 3 alunos.
 - **Presencialmente, faremos apenas o exercício 1 do projeto final.**
 - Projeto final já se encontra no github.
 - Os outros devem ser entregues até **12/12/2023**.
 - Vocês já conseguem fazer os exercícios 1 e 4.

Laboratório 6

Launch on Google Colab

launch binder

Projeto Final

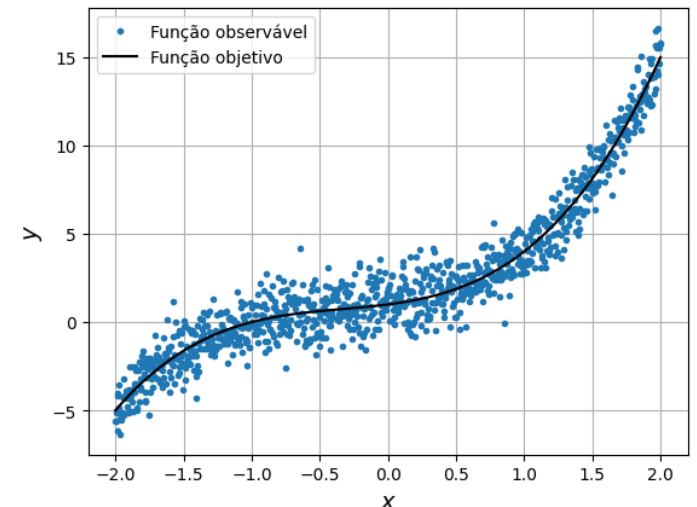
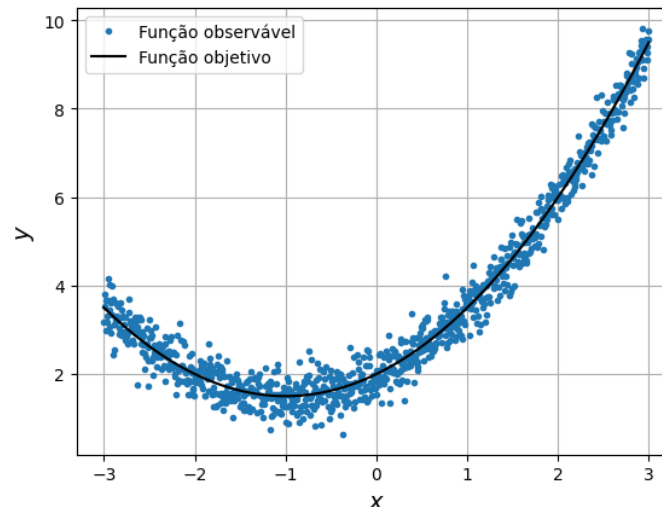
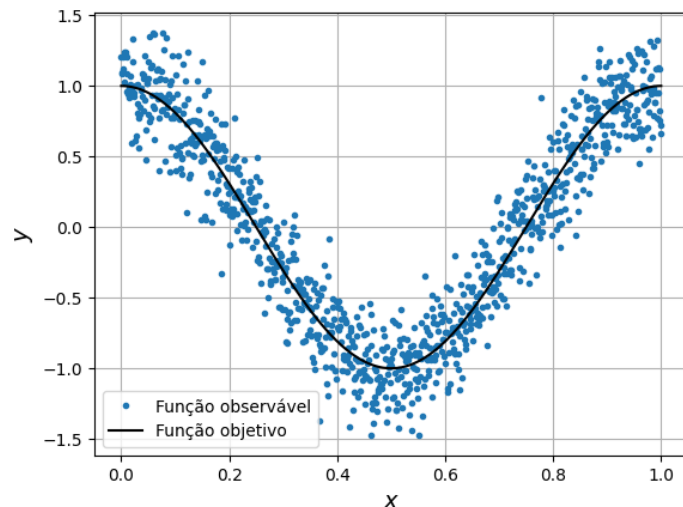
Launch on Google Colab

launch binder

Até agora, usamos *funções hipóteses com formato de hiperplanos*, e.g., retas e planos, mas e se os *dados* aos quais nós queremos *ajustar uma função hipótese* tiverem um *formato mais complexo do que uma simples reta ou plano?*

Mapeamentos não lineares

- Observem as figuras abaixo, uma *reta* claramente *não seria uma boa escolha para aproximar esses mapeamentos não lineares*.
 - *Retas não capturariam o comportamento das funções abaixo*, pois elas não têm complexidade (i.e., graus de liberdade) o suficiente para isso.
- Portanto, qual tipo de função hipótese seria mais apropriada para aproximar esses comportamentos não lineares?



Regressão polinomial

- O teorema da aproximação de **Stone-Weierstrass** diz que mapeamentos deste tipo podem ser aproximados através de **polinômios**:
 - “Qualquer função contínua no intervalo fechado $[a, b]$ pode ser uniformemente aproximada por um polinômio”.
- Portanto, podemos aproximar **qualquer tipo de mapeamento (linear ou não linear)** com **polinômios**, bastando apenas **encontrar o grau (ou ordem) ideal**.
- Exemplo de um polinômio de grau 4* com três atributos, x_1 , x_2 e x_3 :
$$y(x_1, x_2, x_3) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_1x_3 + a_5x_1^3 + a_4x_1x_2x_3^2.$$
- Percebam que em alguns monômios existe a **combinação dos atributos originais**, formando novos atributos.

* O grau é o maior valor resultante da soma dos expoentes dos atributos de um monômio.

Regressão polinomial

- Por simplicidade didática, inicialmente, nós consideraremos **funções hipóteses polinomiais em uma variável** (i.e., com um atributo):

$$h(x_1(n)) = a_0 + a_1 x_1(n) + a_2 x_1^2(n) + \dots + a_M x_1^M(n) = \mathbf{a}^T \mathbf{x}(n),$$

onde n é o número da amostra, M é o grau do polinômio, $\mathbf{a} = [a_0 \ a_1 \ a_2 \ \dots \ a_M]^T \in \mathbb{R}^{M+1 \times 1}$, $\mathbf{x}(n) = [x_0 \ x_1(n) \ x_1^2(n) \ \dots \ x_1^M(n)]^T \in \mathbb{R}^{M+1 \times 1}$ e $x_0 = 1$ é o atributo de *bias*, associado ao peso de *bias*, a_0 .

- **Todos resultados encontrados anteriormente** (equação normal, vetor gradiente para implementação do algoritmo do gradiente descendente, escalonamento) **são diretamente estendidos para funções hipótese polinomiais**.

Regressão polinomial

- Só precisamos nos lembrar que o **vetor de atributos**, \mathbf{x} , e consequentemente, a **matriz de atributos**, \mathbf{X} , são **compostos pelos atributos originais e pelos atributos formados através de suas combinações**.

- Por exemplo, para a seguinte função hipótese polinomial
$$h(x_1(n)) = a_0 + a_1x_1(n) + a_2x_1^2(n) + \dots + a_Mx_1^M(n),$$

a **matriz de atributos polinomial**, \mathbf{X} , fica da seguinte forma

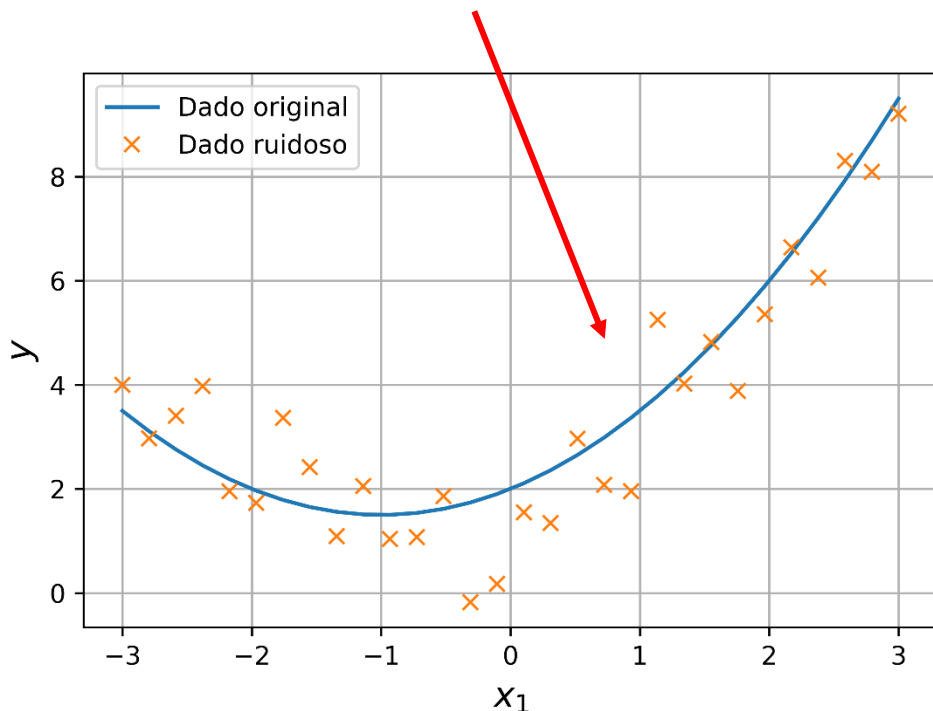
$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_1(0) & x_1^2(0) & \dots & x_1^M(0) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_1(N-1) & x_1^2(N-1) & \dots & x_1^M(N-1) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times M+1},$$

onde cada coluna contém um atributo (original ou combinação).

Porém, o desafio agora é *encontrar o grau do polinômio* que melhor aproxime os dados.

Exemplo de regressão usando polinômio

Função objetivo: polinômio de ordem 2.



A partir do dados ruidosos, queremos encontrar um polinômio (pesos e ordem) que melhor se aproxime da função objetivo.

- Geramos 30 exemplos do seguinte **mapeamento verdadeiro (i.e., função objetivo)**:

$$y(x_1(n)) = 2 + x_1(n) + 0.5x_1^2(n),$$

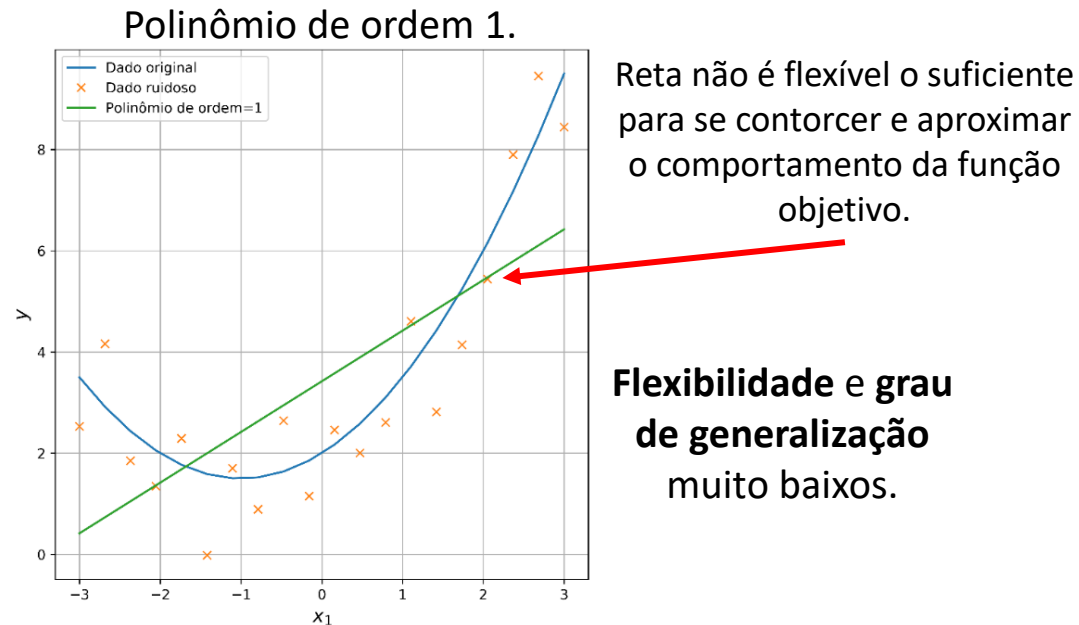
e adicionamos ruído Gaussiano branco, $w(n)$

$$y_{\text{noisy}}(x_1(n)) = y(x_1(n)) + w(n),$$

onde $x_1(n)$ são valores linearmente espaçados entre -3 e 3 e $w(n) \sim N(0, 1)$.

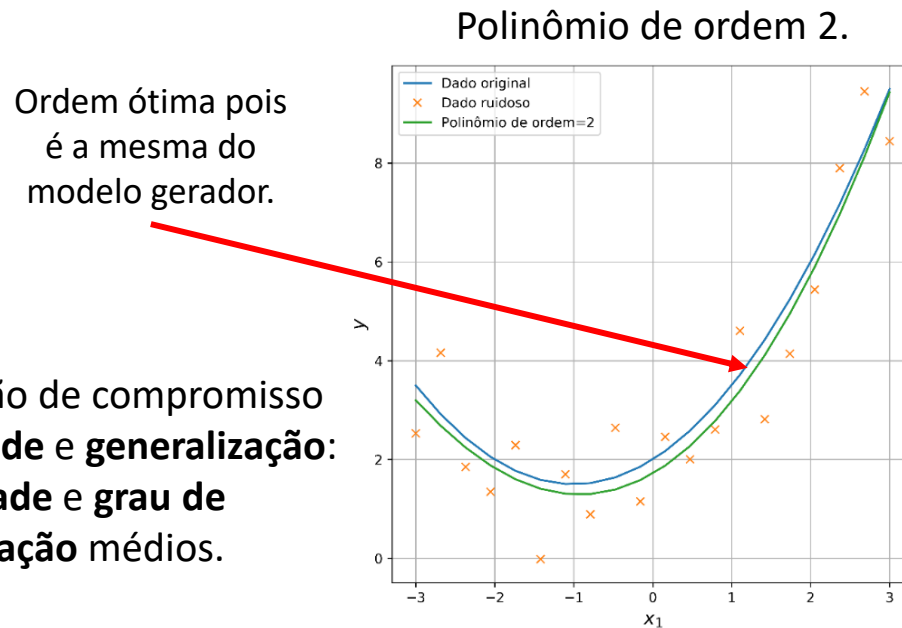
- Vamos usar uma **função hipótese polinomial** para **aproximar a função objetivo a partir dos dados ruidosos**.
- Porém, surge uma dúvida, **e se não soubéssemos a ordem por trás do modelo gerador, qual grau deveríamos utilizar?**

Regressão polinomial: Qual ordem usar?



- Polinômio de ordem 1 (i.e., reta) não tem flexibilidade o suficiente para aproximar o comportamento por trás das amostras ruidosas, ou seja, a função objetivo.
- O erro (MSE) é alto para exemplos dos conjuntos de treinamento e de validação (i.e., exemplos não vistos durante o treinamento).
- Efeito conhecido como ***subajuste*** ou ***underfitting***: ***flexibilidade*** e ***grau de generalização*** muito baixos.

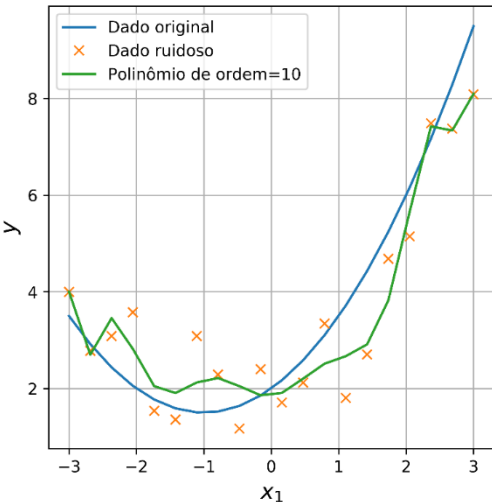
Regressão polinomial: Qual ordem usar?



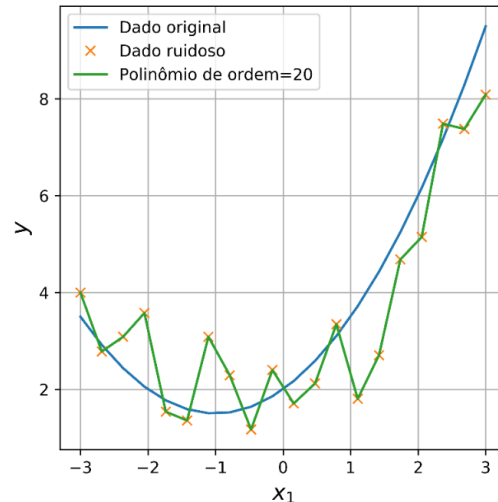
- Porém, como esperado, o polinômio de ordem 2 produz a melhor aproximação da função objetivo, errando pouco para exemplos dos conjuntos de treinamento e validação.
 - Esse modelo encontra uma relação de compromisso entre **flexibilidade** e **grau de generalização**.
 - Essa aproximação será melhor quanto maior for o conjunto de treinamento e/ou menor o ruído.

Regressão polinomial: Qual ordem usar?

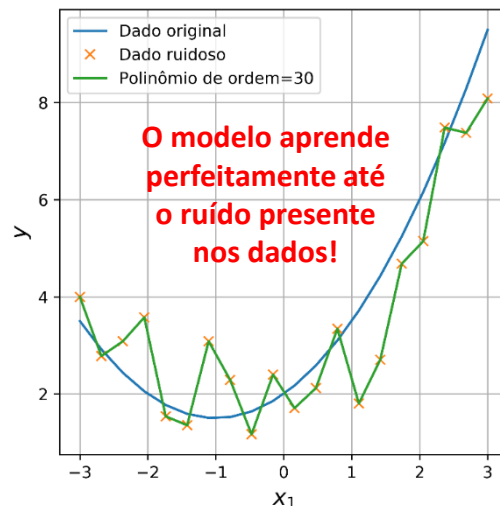
Polinômio de ordem 10.



Polinômio de ordem 20.



Polinômio de ordem 30.



- Polinômios com ordem maior do que 2 tendem a produzir ***aproximações perfeitas*** dos exemplos disponíveis, i.e., o modelo acaba ***memorizando*** os exemplos de treinamento.
- O erro para as amostras do conjunto de treinamento é muito baixo.
- Porém, essa aproximação se distancia bastante do modelo gerador.
- Portanto, esses modelos apresentarão ***erros significativamente maiores*** quando forem apresentados a exemplos de validação.
- Efeito conhecido como ***sobreajuste*** ou ***overfitting***: ***flexibilidade*** muito alta e ***grau de generalização*** muito baixo.

Resumo sobre subajuste e sobreajuste

- **Subajuste**: situação em que o modelo falha em aproximar o ***mapeamento verdadeiro devido a falta de flexibilidade (ou capacidade)***.
 - Ocorre devido ao modelo não ter graus de liberdade suficientes para a aproximação.
 - O modelo produz erros significativos tanto quando apresentado ao próprio conjunto de treinamento quanto a dados inéditos.
 - Se o modelo está subajustando, mesmo que o número de exemplos aumente indefinidamente, esta situação não vai desaparecer, é necessário ***aumentar a flexibilidade do modelo***, ou seja, no caso da regressão polinomial, sua ordem.

Resumo sobre subajuste e sobreajuste


- **Sobreajuste**: situação em que o modelo se ajusta tão bem aos exemplos de treinamento que ele aprende até o ruído presente nos mesmos (baixo *erro de treinamento*).
- Porém, o modelo produz erros significativos quando apresentado a dados inéditos (alto erro de *erro de validação*).
 - Ocorre devido ao alto grau de flexibilidade do modelo.
 - Se o modelo está sobreajustando, então é necessário diminuir sua flexibilidade ou aumentar o conjunto de treinamento até que o erro de validação atinja o erro de treinamento.
- Nosso objetivo será encontrar um modelo que apresente uma relação de compromisso entre *flexibilidade* e *capacidade de generalização*.
 - Flexibilidade suficiente para capturar o comportamento geral e generalizar bem.

Tarefas

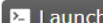
- **Quiz:** “*T319 - Quiz - Regressão: Parte IV*” que se encontra no MS Teams.
- **Exercício Prático:** [Laboratório #5](#).
 - Pode ser acessado através do link acima (Google Colab) ou no GitHub.
 - Vídeo explicando o laboratório: Arquivos -> Material de Aula -> Laboratório #5
 - Se atentem aos prazos de entrega.
 - [Instruções para resolução e entrega dos laboratórios](#).
- **Avaliação Presencial: 10/11/2023 – Sala I-16**
 - Projeto final já se encontra no github.
 - Pode ser feito em grupos de no máximo 3 alunos.
 - Presencialmente, faremos apenas o exercício 1.
 - Os outros devem ser entregues até 12/12/2023.


Laboratório 6

 Launch on Google Colab

 launch binder

Projeto Final

 Launch on Google Colab

 launch binder

Obrigado!

Anexo I: O escalonamento altera o
valor dos pesos originais

Mudança dos pesos originais após a padronização

- Considerando a seguinte função hipótese

$$\hat{y}(n) = \hat{a}_1 x_1(n).$$

- Se padronizarmos o atributo x_1 , teremos

$$x'_1(n) = \frac{x_1(n) - \mu_{x_1}}{\sigma_{x_1}}, \forall n,$$

onde μ e σ são as estimativas da média e do desvio padrão, respectivamente, calculados ao longo de todas as amostras do vetor de atributos, \mathbf{x}_1 .

Mudança dos pesos originais após a padronização

- Isolando-se $x_1(n)$ na equação da padronização, temos

$$x_1(n) = x'_1(n)\sigma_{x_1} + \mu_{x_1}.$$

- Na sequência, substituindo-se $x_1(n)$ na função hipótese, tem-se

$$\hat{y}(n) = \hat{a}_1(x'_1(n)\sigma_{x_1} + \mu_{x_1}) = \hat{a}_1\sigma_{x_1}x'_1(n) + \hat{a}_1\mu_{x_1}.$$

- Perceba que na equação acima há o surgimento de um termo de bias, $\hat{a}_1\mu_{x_1}$, além da alteração do peso original para $\hat{a}_1\sigma_{x_1}$.

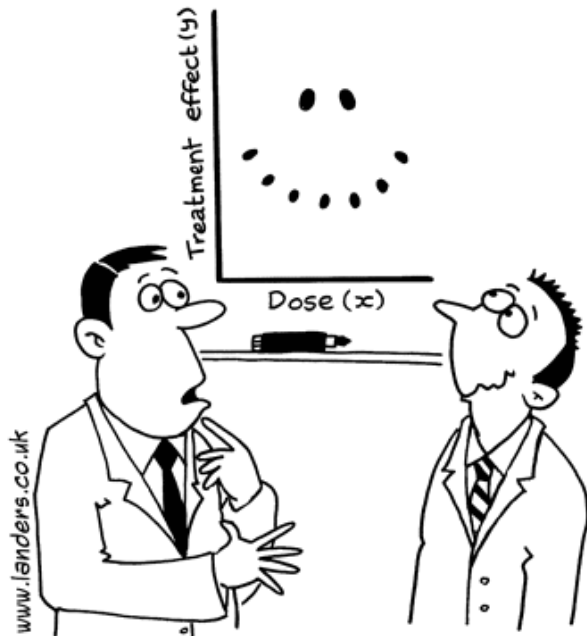
Mudança dos pesos originais após a padronização

- Assim, podemos reescrever a equação acima como

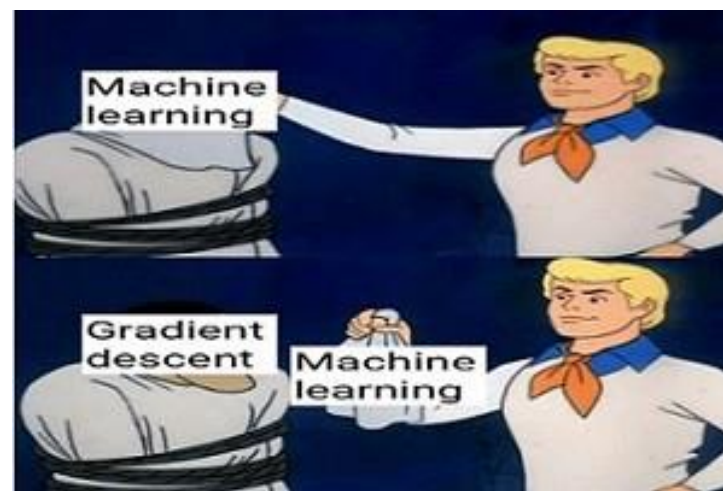
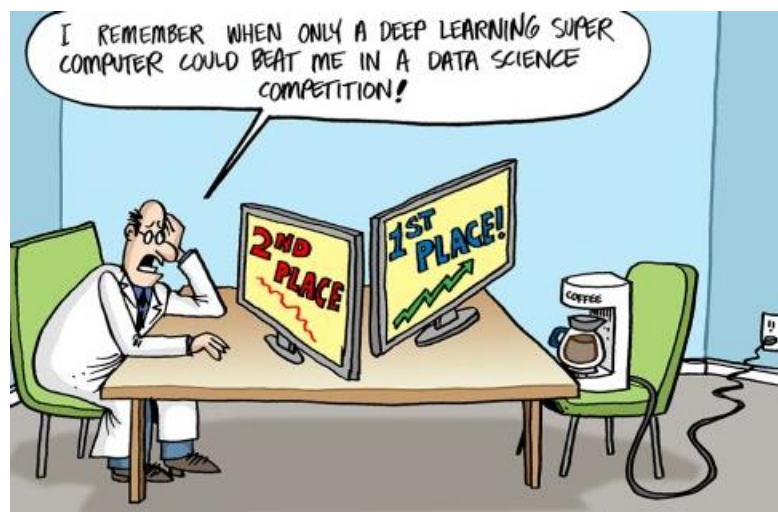
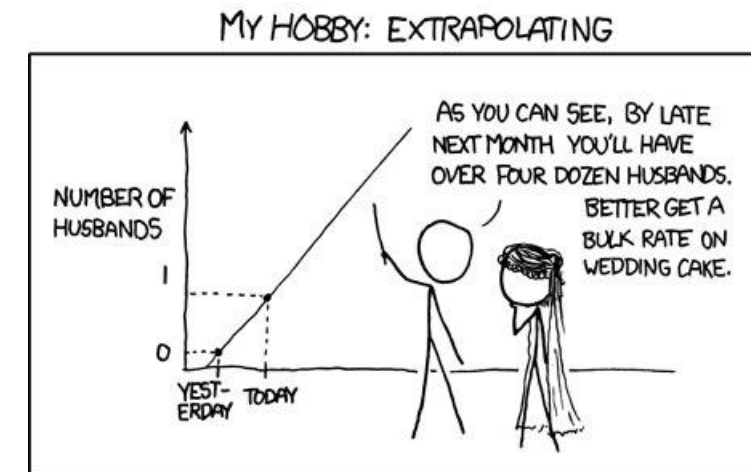
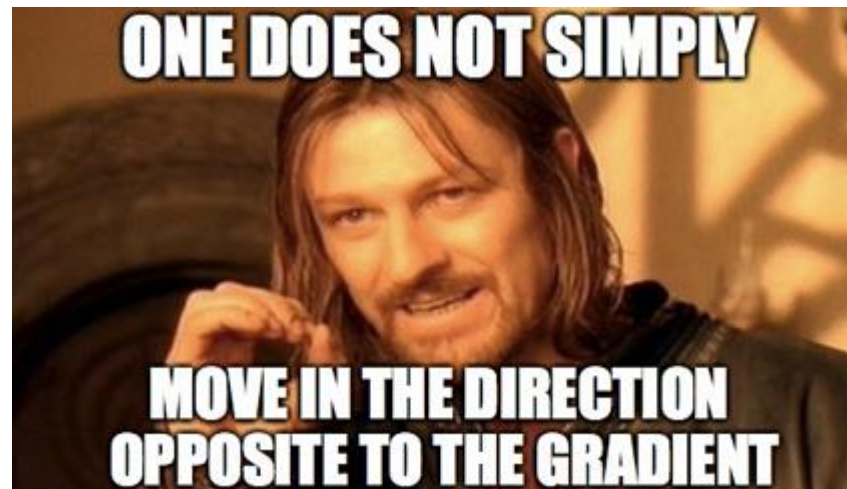
$$\hat{y}(n) = \hat{a}'_0 + \hat{a}'_1 x'_1(n),$$

onde $\hat{a}'_0 = \hat{a}_1 \mu_{x_1}$ e $\hat{a}'_1 = \hat{a}_1 \sigma_{x_1}$.

- Note que a padronização de $x_1(n)$ fez com que \hat{a}_1 fosse modificado de forma que a função hipótese ainda produza em sua saídas previsões condizentes com os valores esperados, $y(n)$.
- Ou seja, mesmo com a padronização dos atributos, a função hipótese ainda fará previsões alinhadas aos valores dos rótulos, $y(n)$.
- O mesmo procedimento pode ser diretamente aplicado à normalização e também resultará em mudança dos pesos originais.



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



Figuras

