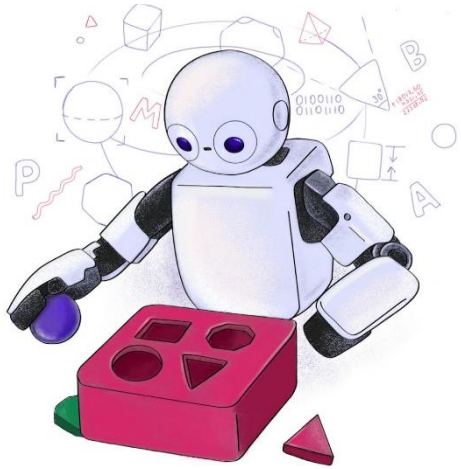
T319 - Introdução ao Aprendizado de Máquina:

Regressão Linear: Escalonamento de Atributos



Inatel

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

Recapitulando

- Vimos que a escolha do passo de aprendizagem influencia muito 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.
- Gráfico do erro em função das iterações nos ajuda a depurar o algoritmo.
- Além do ajuste manual, quando usamos GDE ou GD em mini-batches, precisamos reduzir o valor do passo de aprendizagem ao longo das iterações para garantir a convergência e estabilizaçãod do GD.
- Neste documento, veremos um tipo de ***pré-processamento*** bastante importante para algoritmos de ML que usem métricas de distância como função de erro.
  - **Pré-processamento**: Técnicas aplicadas ao conjunto de dados antes do treinamento.

Escalonamento de atributos

- 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.

Escalonamento de atributos

- Dada a seguinte equação hipótese, $h(\boldsymbol{x})$

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

- A função de erro é dada por

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

- 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

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

- Portanto, o erro entre y e $h\big(\boldsymbol{x}(n)\big)$ será dominado pelo atributo x_1.

Escalonamento de atributos

Função objetivo:

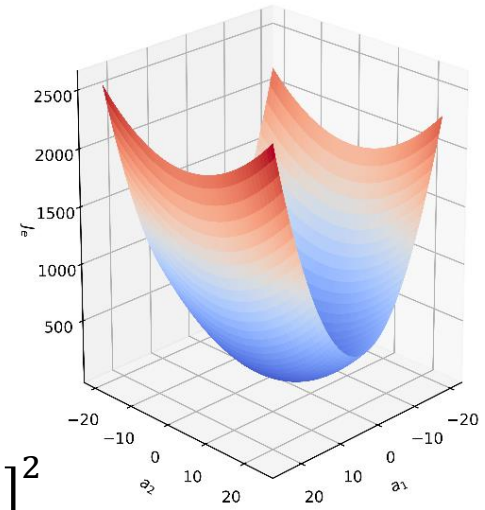
$$y(n) = a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n),$$

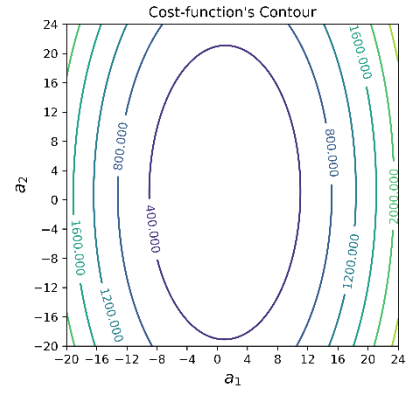
onde $a_1 = 1, a_2 = 1$.

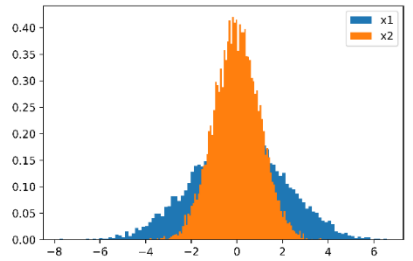
Para plotar a superfície de erro usamos:

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

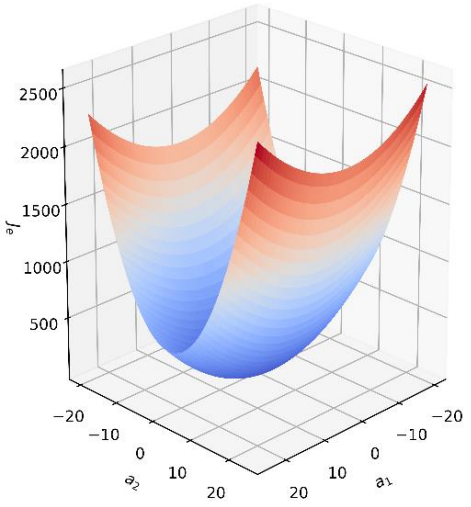
- $x_1 \gg x_2$: erro varia mais rapidamente com variações de $\widehat{a_1}$, resultando num vale.
- A mesma coisa pode ser dita para x_2 e $\widehat{a_2}$ (vale).
- Quando x_1 e x_2 têm intervalo semelhante, então, a variação tanto de $\widehat{a_1}$ quanto de $\widehat{a_2}$ tem ***pesos*** semelhante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

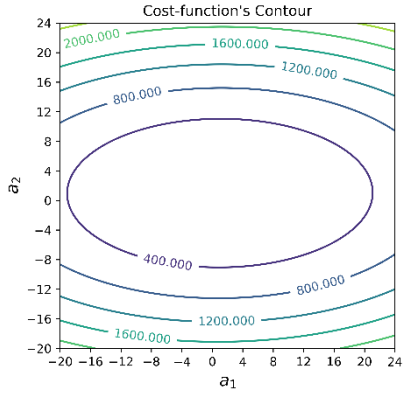


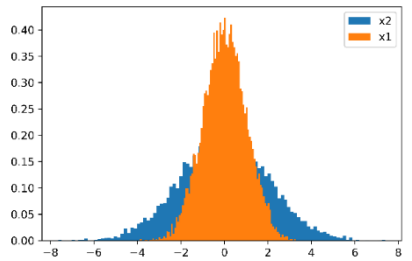




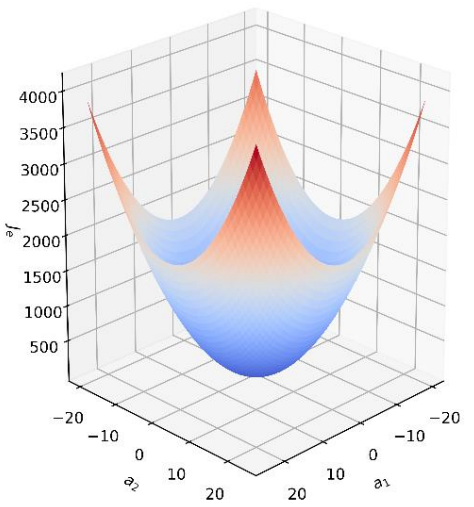
$x_1 = 2 * \text{randn}(\text{M}, 1)$
$x_2 = \text{randn}(\text{M}, 1)$

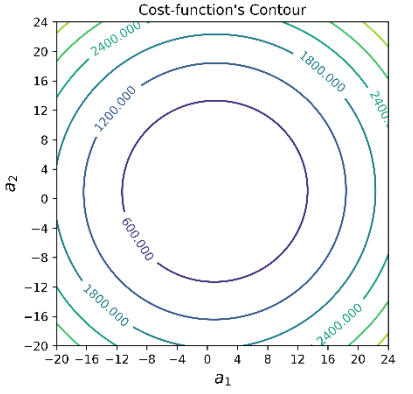


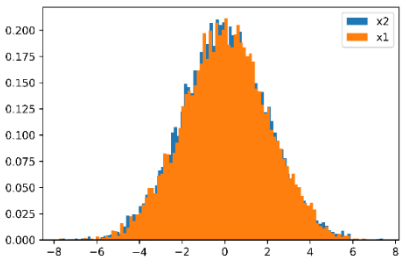




$x_1 = \text{randn}(\text{M}, 1)$
$x_2 = 2 * \text{randn}(\text{M}, 1)$







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

Exemplo: formatos_diferentes_da_superfície_de_erro.ipynb

O que pode ser feito?

Escalonamento de atributos

- 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**

Escalonamento de atributos

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

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

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

- 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.

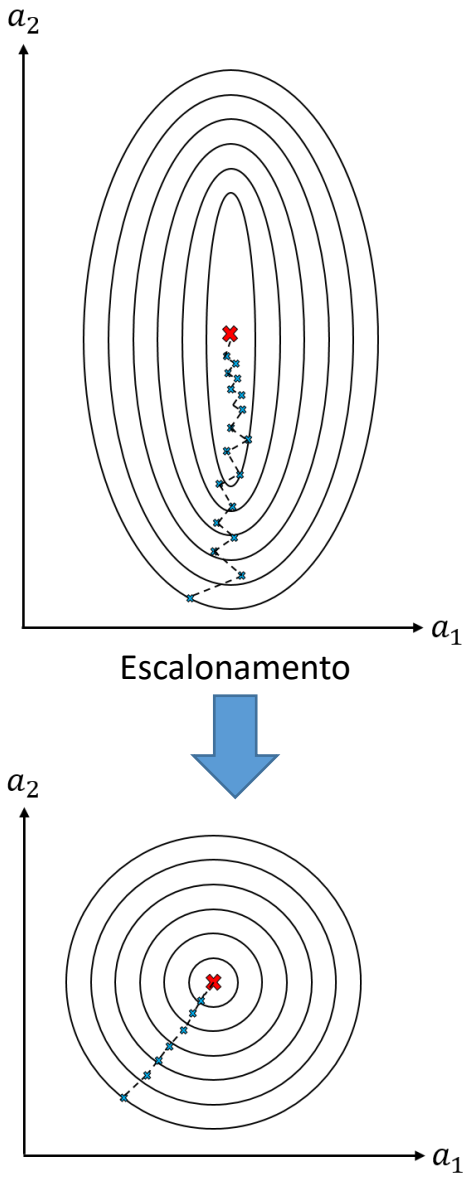
Escalonamento de atributos

- ***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 atributo.

Escalonamento de atributos



- O escalonamento de atributos ajuda a acelerar a convergência do ***gradiente descendente***, pois deixa a superfície de erro mais circular, ou seja, com inclinação similar em todas as direções.
- Ajuda a estabilizar os algoritmos de aprendizado de máquina.
- Possibilita comparar o peso/influência de cada ***atributo*** no modelo.

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.

Exemplo de escalonamento de atributos

- Função geradora:

$$y = x_1 + x_2,$$

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

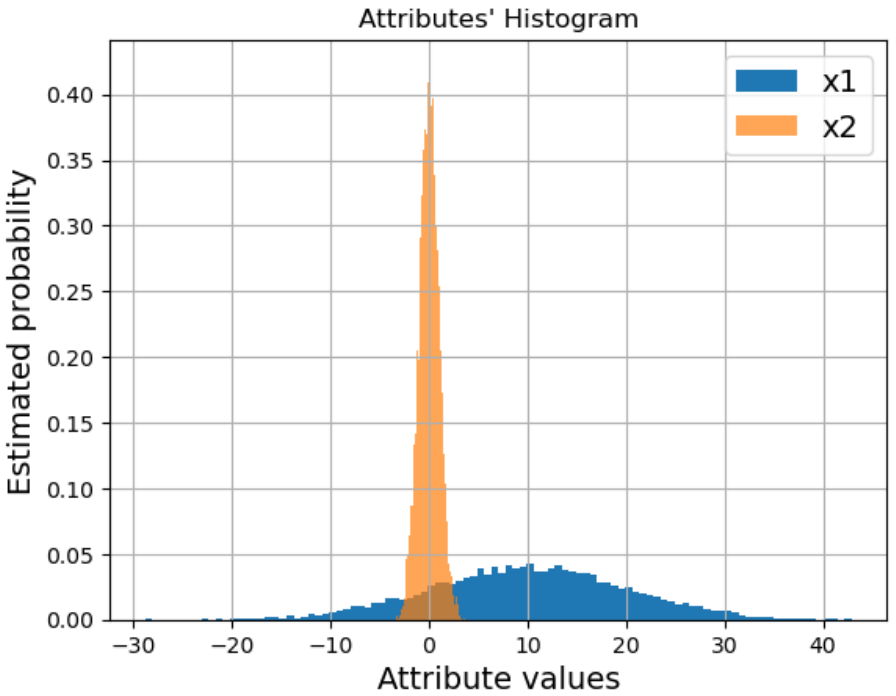
- Função observável ruidosa:

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

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

- Função hipótese:

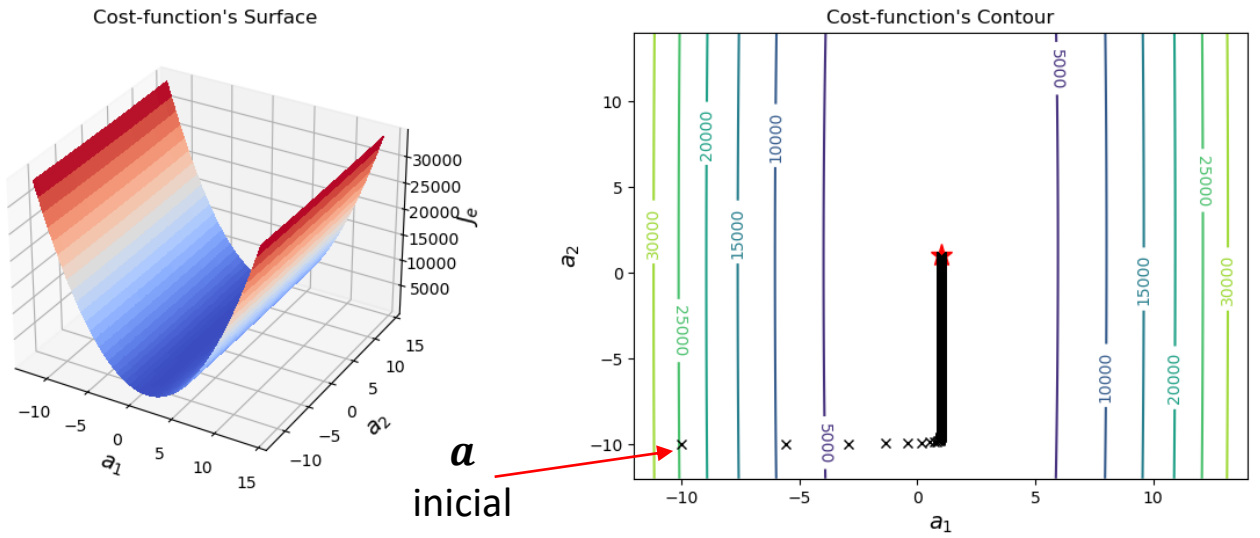
$$\hat{y} = \widehat{a_1} x_1 + \widehat{a_2} x_2.$$



Exemplo: escalonamento_de_atributos_com_scikit_learn.ipynb

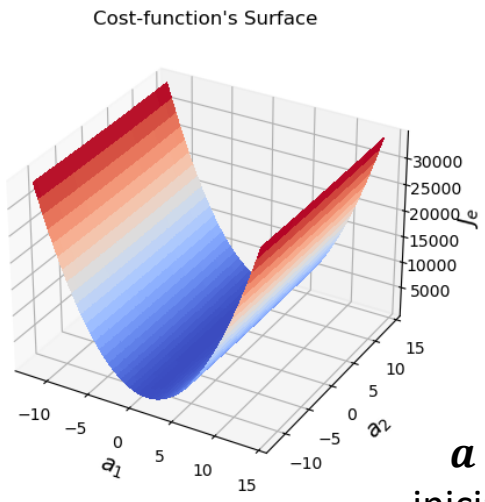
Exemplo de escalonamento de atributos

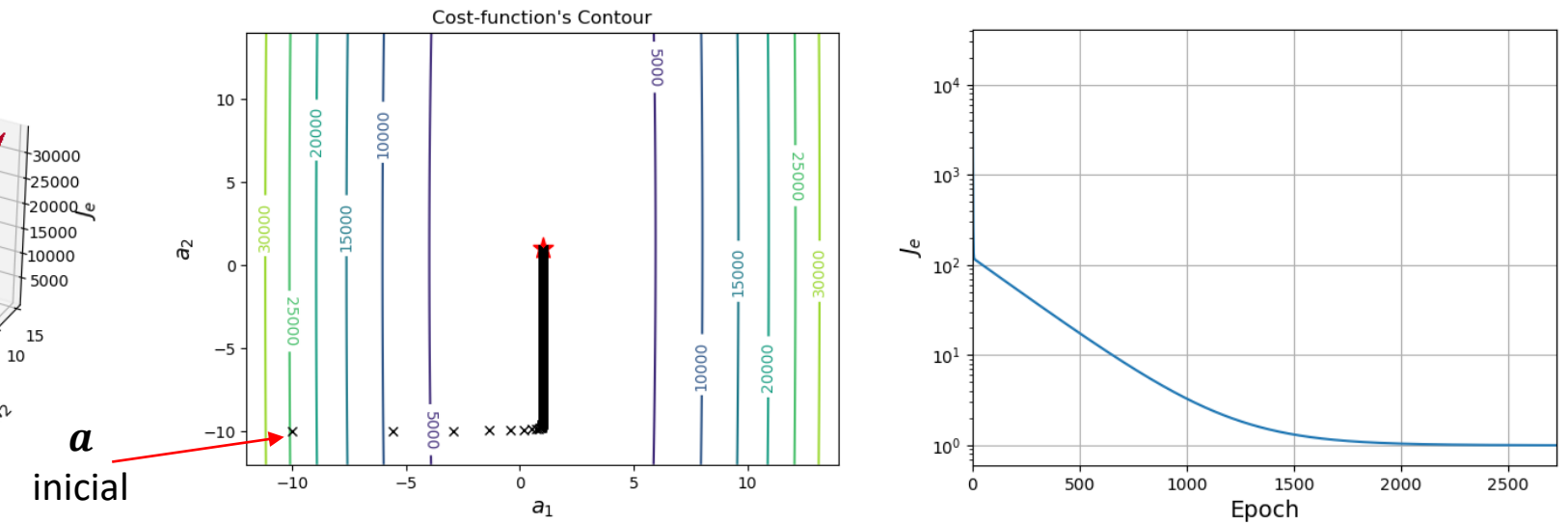
- A superfície de erro tem formato de “V”, com maior taxa de variação do erro, i.e., inclinação, na direção de a_1.
- A taxa de variação do erro é praticamente constante na direção de a_2 (região com inclinação de $\approx 0°$).
- A inclinação praticamente nula na direção de a_2 pode ser vista na superfície de contorno, onde as curvas de erro são praticamente retas paralelas ao eixo de a_2



Exemplo de escalonamento de atributos

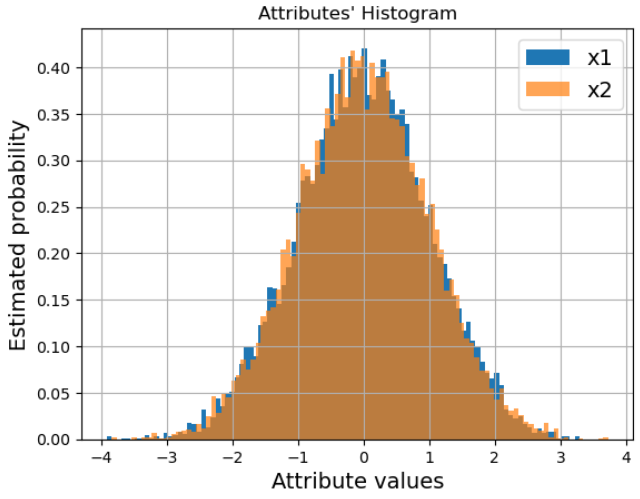
- Como a inclinação da superfície de erro na direção de a_2 é muito pequena, consequentemente, o gradiente naquela direção também é muito pequeno.
- Assim, o treinamento fica lento quando o algoritmo atinge a base do vale, pois as atualizações dos pesos serão muito pequenas.
- O gradiente descendente em batelada converge após mais de 2000 épocas.

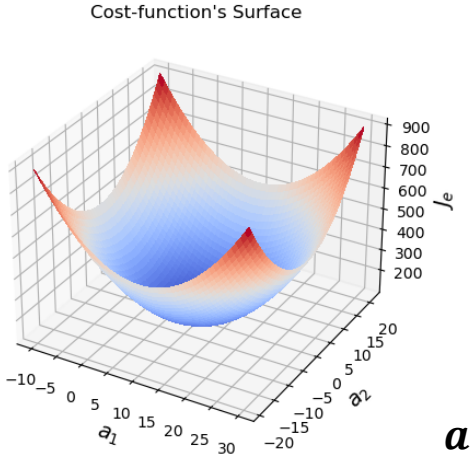


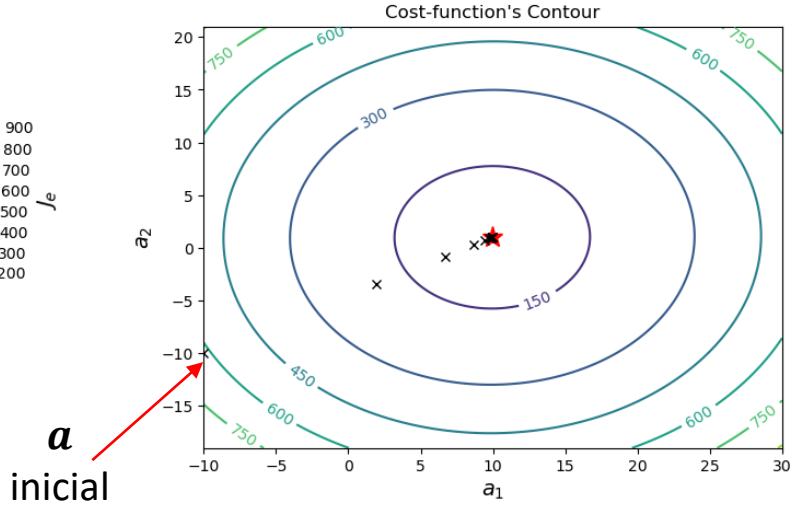


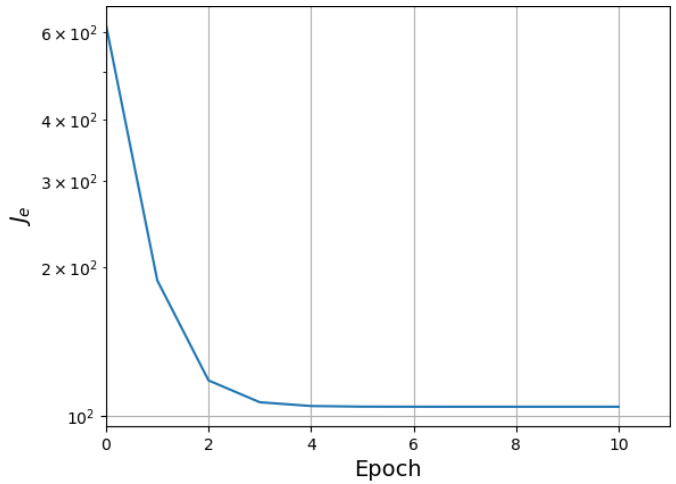
Exemplo de escalonamento de atributos

- 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.





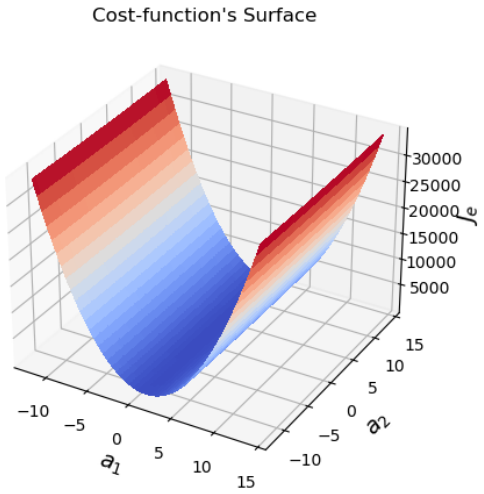


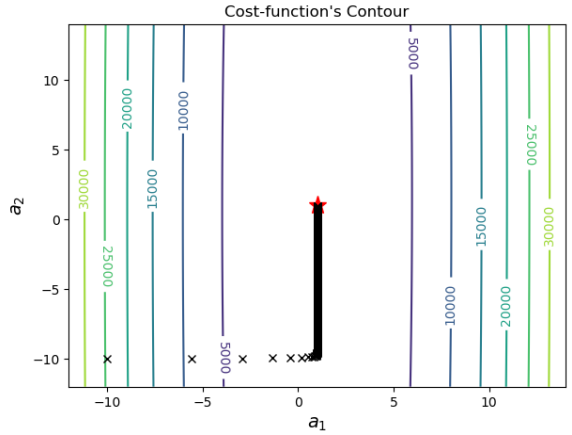


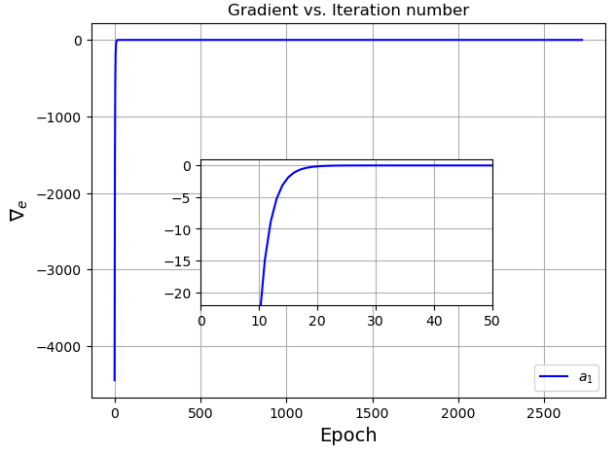
Exemplo de escalonamento de atributos

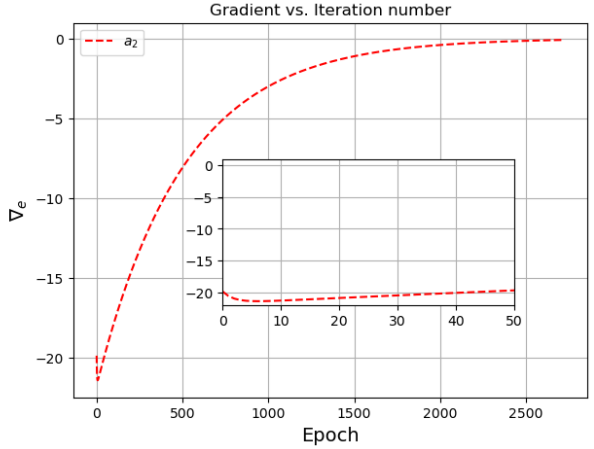
variação do vetor gradiente

Sem escalonamento



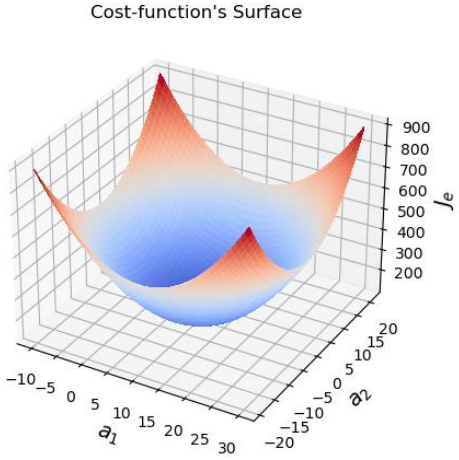


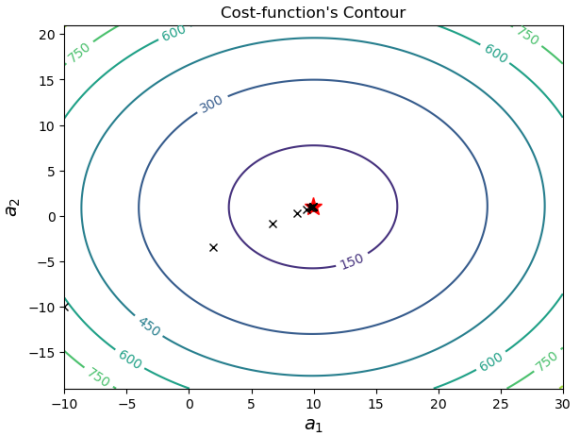


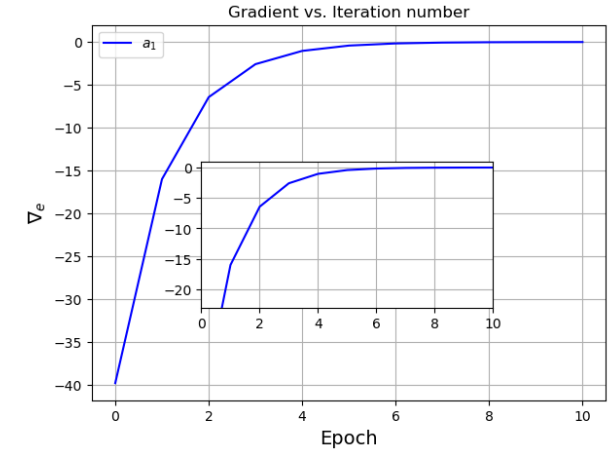


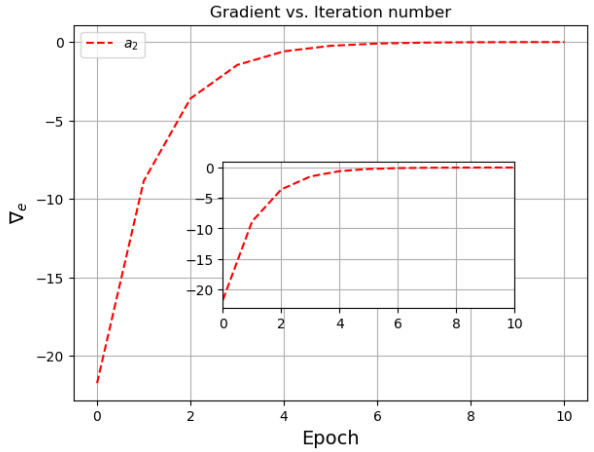
Pesos de atributos com variação muito grande são atualizados mais rapidamente do que pesos de atributos com variação pequena. x_1 contribui muito mais no valor final do erro, fazendo com que a_1 seja rapidamente atualizado, tendendo a seu valor correto mais rapidamente.

Padronização



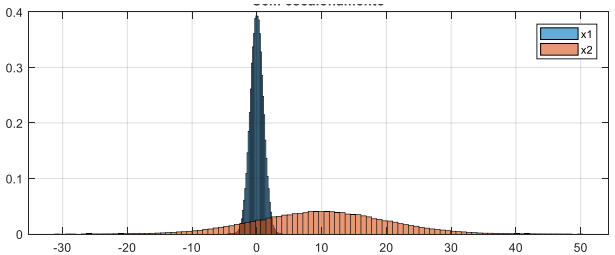


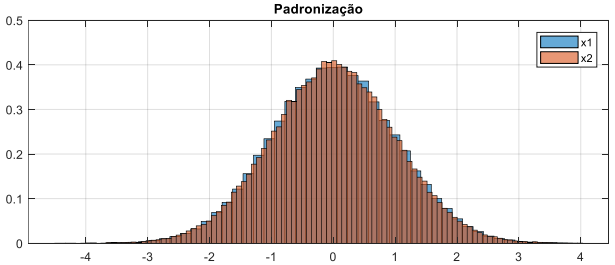




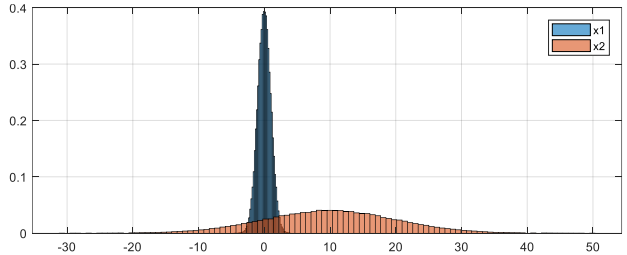
Escalonamento de atributos com a biblioteca SciKit-Learn

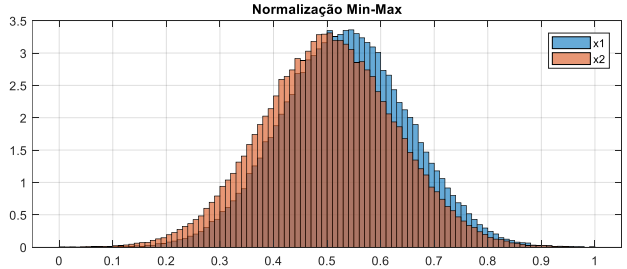
```
# Import Class StandardScaler from module Preprocessing of library sklearn
responsible for standardizing the data.
from sklearn.preprocessing import StandardScaler

# Instantiate a Standard scaler.
stdScaler = StandardScaler()

# Concatenate both column vectors.
X = np.c_[x1, x2]

# Standardize the features.
scaled_X = stdScaler.fit_transform(X)
```



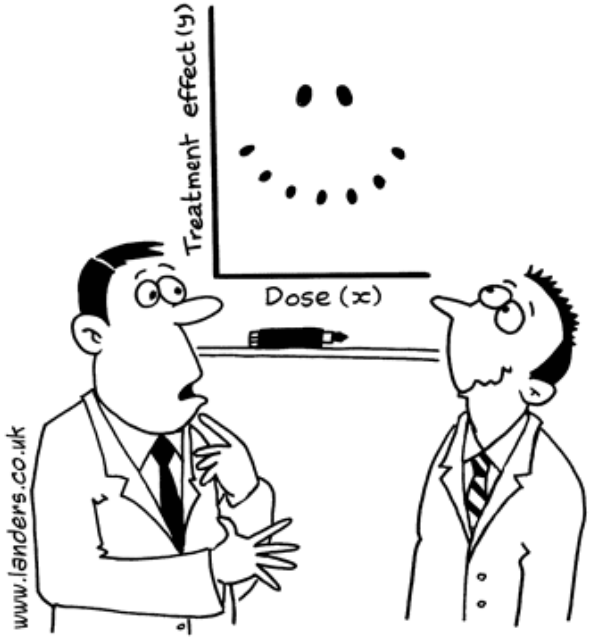



```
# Import Class MinMaxScaler from module Preprocessing of library sklearn
responsible for normalizing the data.
from sklearn.preprocessing import MinMaxScaler

# Instantiate a MinMax scaler.
minMaxScaler = MinMaxScaler()

# Concatenate both column vectors.
X = np.c_[x1, x2]

# Standardize the features.
scaled_X = minMaxScaler.fit_transform(X)
```

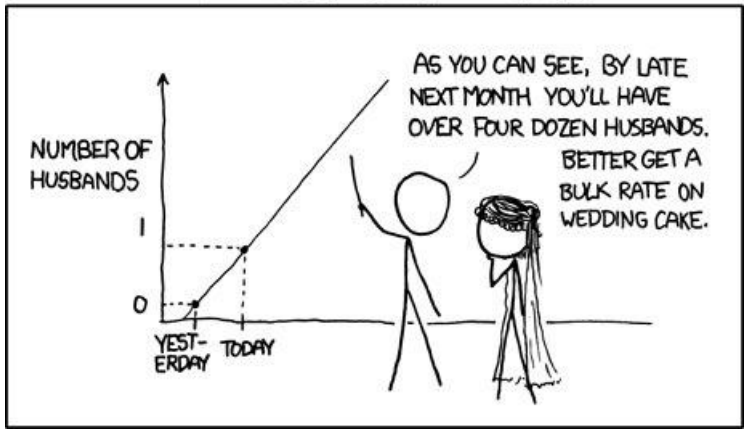


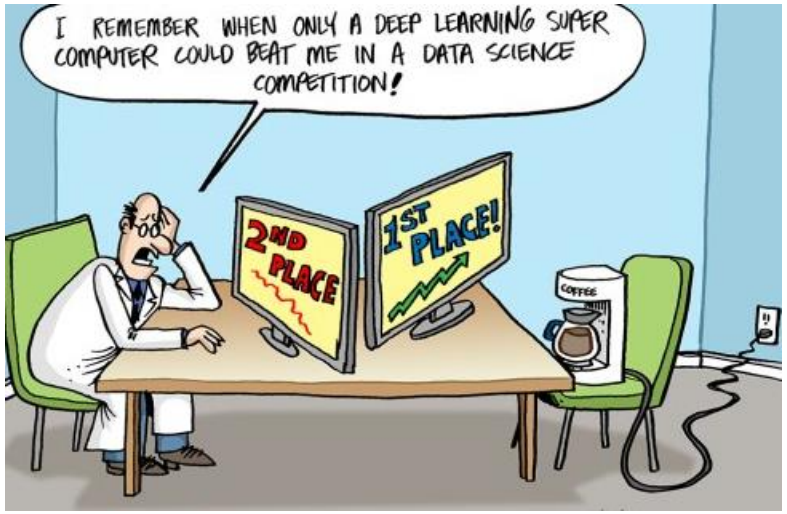


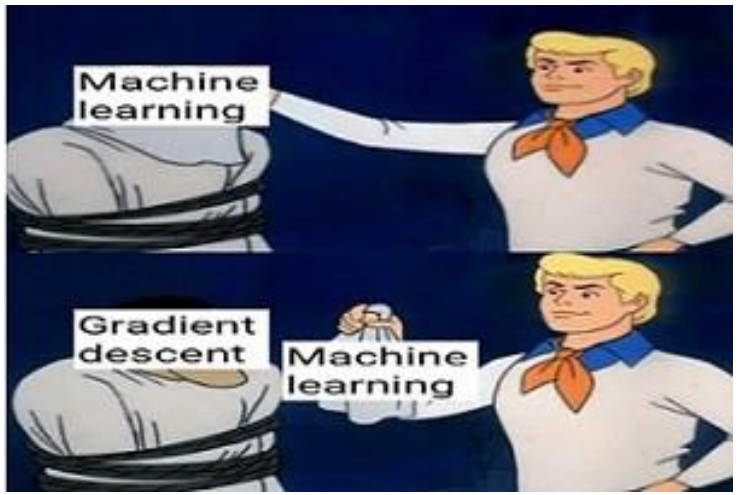
Obrigado!



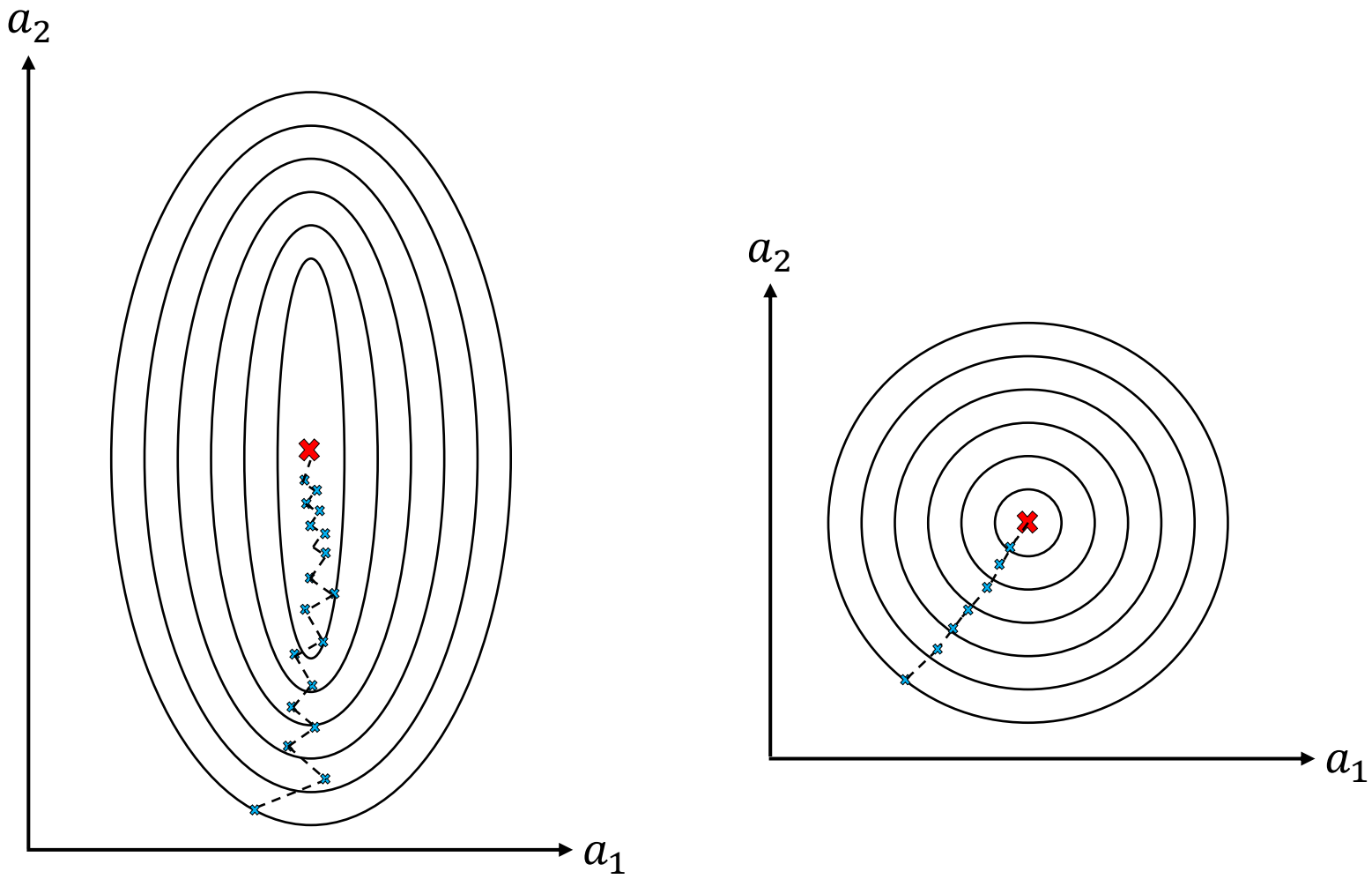
"It's a non-linear pattern with outliers.....but for some reason I'm very happy with the data."

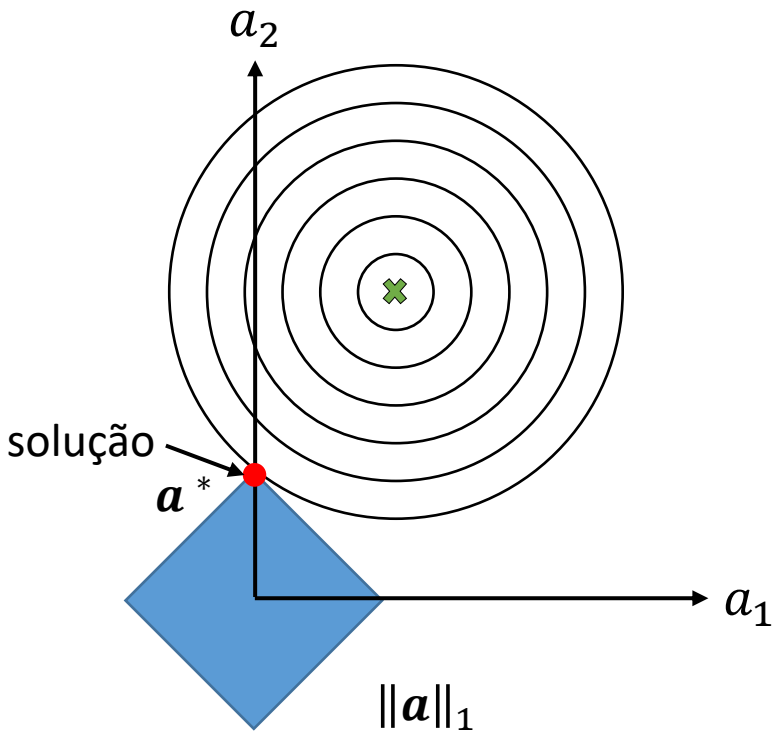


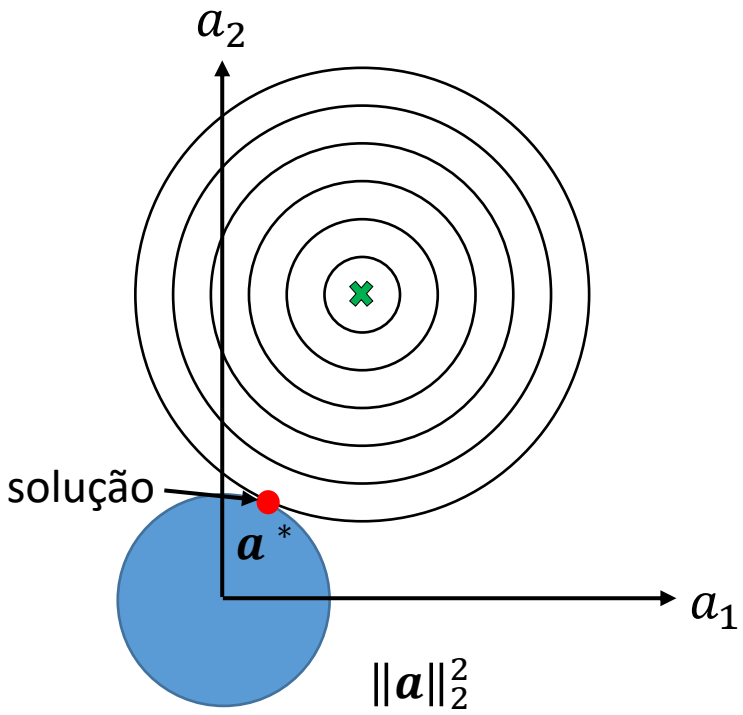


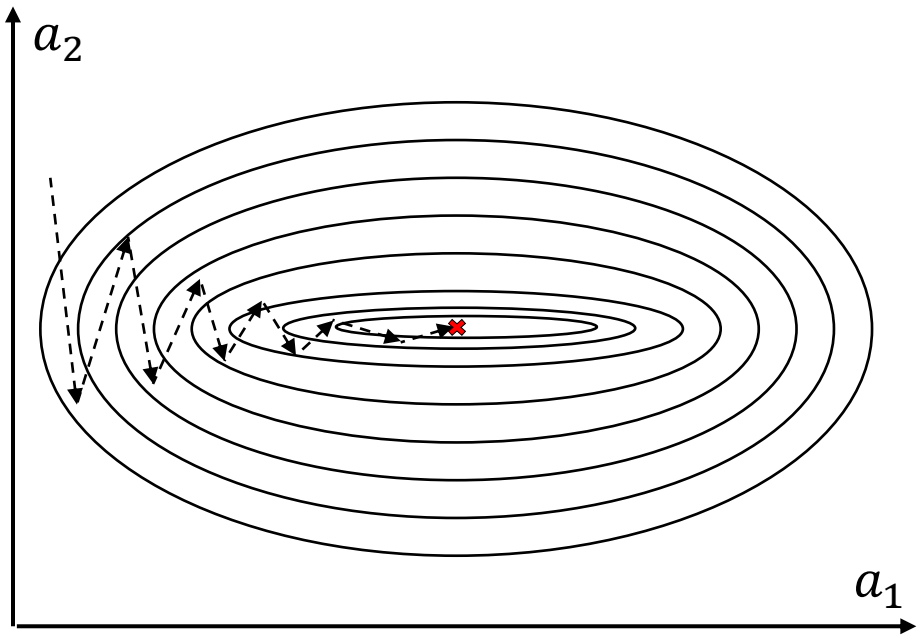


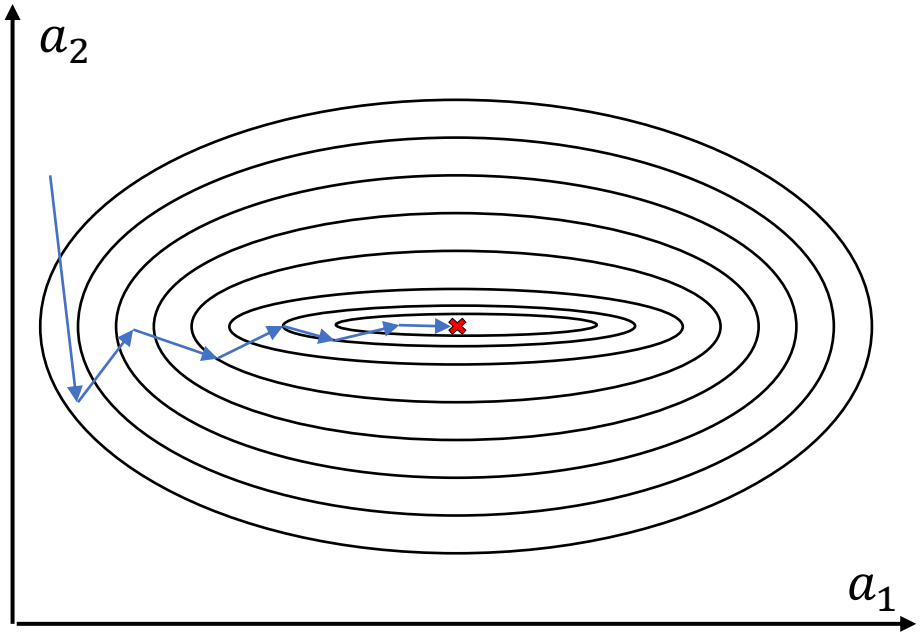
FIGURAS


a_2
a_1
a_2
a_1


a_2
solução
$\boldsymbol{a}^*$
a_1
$\|\boldsymbol{a}\|_1$


a_2
solução
$\boldsymbol{a}^*$
a_1
$\|\boldsymbol{a}\|_2^2$


a_2
a_1


a_2
a_1