

# 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<sup>2</sup>



R\$ 1.000.000,00

70 m<sup>2</sup>



R\$ 200.000,00

200 m<sup>2</sup>



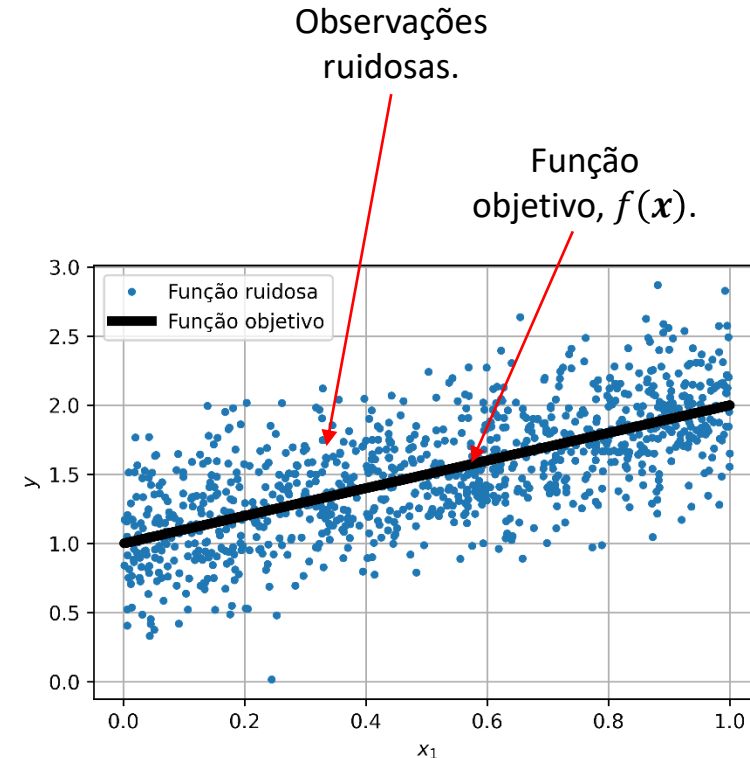
???



- Podemos encontrar uma relação matemática entre a área, localização, n° de quartos de uma casa e seu valor?
- Ou entre a temperatura e a quantidade de sorvetes vendidos?

# Regressão Linear

- É um dos mais, se não o mais, conhecido algoritmo de aprendizado de máquina.
- Vai nos dar várias intuições importantes para o entendimento de outros algoritmos mais complexos, como, por exemplo, classificadores e redes neurais.
- **Objetivo:** encontrar uma função,  $h(\mathbf{x})$ , que mapeie, de forma ótima, os atributos de entrada,  $\mathbf{x}$ , em uma variável de saída  $\hat{y} = h(\mathbf{x})$ , de tal forma que  $h(\mathbf{x})$  seja uma boa aproximação da **função verdadeira** ou **objetivo**,  $f(\mathbf{x})$ .
- $f(\mathbf{x})$  é muitas vezes desconhecida e temos acesso apenas a observações ruidosas.
- Regressão também é conhecida como **aproximação de funções** ou **ajuste de curvas**.
- Como encontramos uma função,  $h(\mathbf{x})$ , que **aproxime**  $f(\mathbf{x})$  de forma ótima a partir de dados ruidosos?

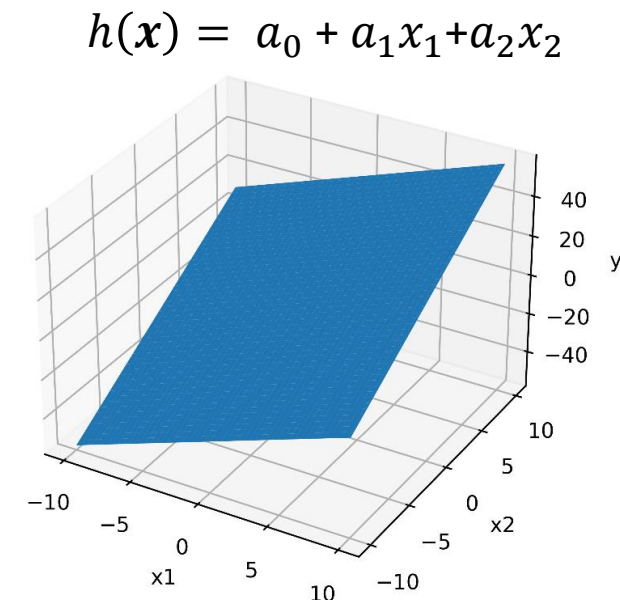
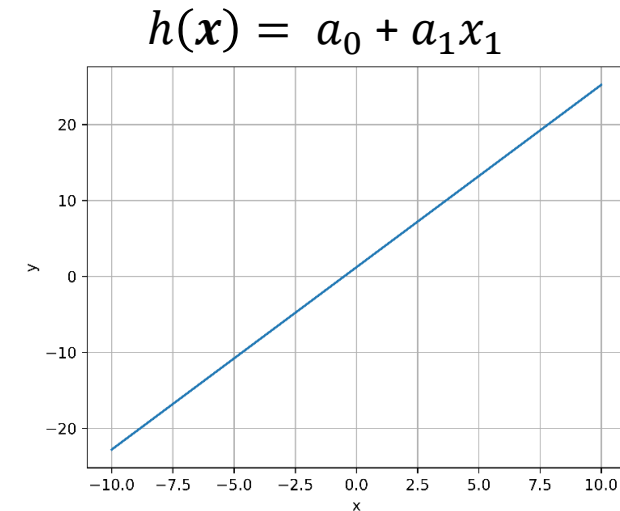


Temos  $\mathbf{x}$  (atributos) e  $\mathbf{y}$  (rótulos) e queremos encontrar  $\hat{y} = h(\mathbf{x})$ .

**Que tipo de aprendizado?**

# Regressão Linear

- **Qual forma deve ter a função  $h(\mathbf{x})$ ?** Os modelos mais simples são:
  - Com apenas um atributo,  $x_1$ ,  $h(\mathbf{x})$  é uma reta,  $h(\mathbf{x}) = a_0 + a_1x_1$ .
  - Com dois atributos,  $x_1$  e  $x_2$ ,  $h(\mathbf{x})$  é uma superfície 2D (ou seja, um plano),  $h(\mathbf{x}) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2$ .
  - E assim por diante.
- **Modelo geral:** Equação de um **hiperplano**
$$h(\mathbf{x}) = a_0 + a_1x_1 + \dots + a_Kx_K = a_0 + \sum_{i=1}^K a_i x_i.$$
- Existem outros modelos, os quais veremos mais adiante.
- Na literatura, a função  $h(\mathbf{x})$ , é chamada de **função hipótese**, pois é uma das possíveis soluções encontradas no **espaço de hipóteses**,  $H$ , para aproximar  $f(\mathbf{x})$ .
- **Espaço de hipóteses:** é conjunto de todas as possíveis **funções hipótese**.
  - Superfície formada por todos os possíveis valores dos parâmetros,  $a_k, \forall k$ .

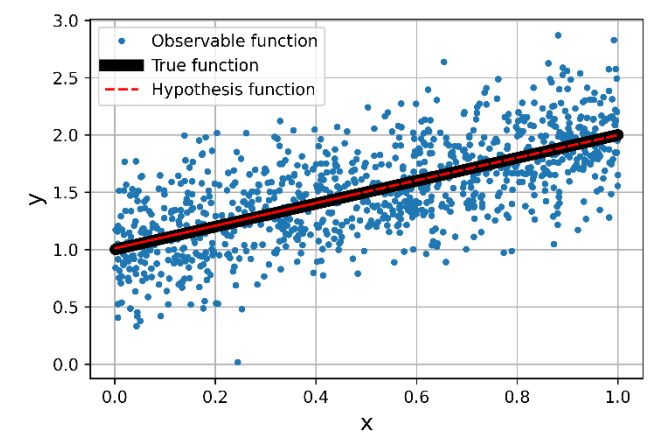


# Regressão Linear

- Agora que temos uma forma para  $h(\mathbf{x})$ , podemos refinar o objetivo da regressão um pouco mais.
- **Objetivo:** Encontrar os **parâmetros**, também chamados de **pesos**,  $a_0, a_1, \dots, a_K$  de tal forma que  $h(\mathbf{x})$  seja uma aproximação ótima de  $f(\mathbf{x})$ .
- **Aprendizado supervisionado:** atributos/exemplos (i.e.,  $\mathbf{x}$ ) 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**,  $\mathbf{x}$ .
  - **OBS.: Linear**, nesse contexto, significa “*linear com relação aos pesos*” e não com relação aos **atributos**, i.e.,  $\mathbf{x}$ . Desta forma, os seguintes modelos também são lineares com relação aos pesos:
    - $y = a_0 + a_1 \log x_1 + a_2 \cos x_2$
    - $y = a_0 + a_1 e^{x_1}$
    - $y = a_0 + a_1 x_1^2$
- Exemplo de um modelo não-linear:  $y = \frac{a_0 x_1}{a_1 + x_2}$ .

Não consigo expressar a equação como uma combinação linear dos atributos.

# Definição Formal do Problema



O problema da **regressão linear** pode ser definido da seguinte forma:

- **Dados disponíveis:**

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

- **Modelo:**

$$\hat{y}(i) = h(x(i)) = a_0 + a_1 x_1(i) + \dots + a_K x_K(i) = \mathbf{a}^T \Phi(i),$$

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

- $\mathbf{a}$  é o vetor  $(K + 1 \times 1)$  contendo os **pesos** que definem a **função hipótese**, ou seja, o mapeamento  $h: x(i) \rightarrow \hat{y}(i)$  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  $h(x)$  que intercepta o eixo  $y$ ,  $a_0$  é conhecido também como **intercept** ou **bias**.
- Como  $a_0$  não tem um **atributo** relacionado a ele, para facilitar o modelamento matemático, criamos um atributo falso,  $x_0$ , com valor constante sempre igual a 1, i.e.,  $x_0 = 1$ .
- **Objetivo do modelo:** encontrar o vetor de pesos  $\mathbf{a}$  que minimize o **erro**, dado por uma **função de erro**,  $J_e(\mathbf{a})$ , entre a aproximação  $\hat{y}(i)$  e o valor desejado  $y(i)$  para todo  $i$ .

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

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

- Portanto, precisamos definir 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**

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

Erro entre a saída da função hipótese e a saída esperada.

que nada mais é do que a **média aritmética do quadrado dos erros**.

- 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

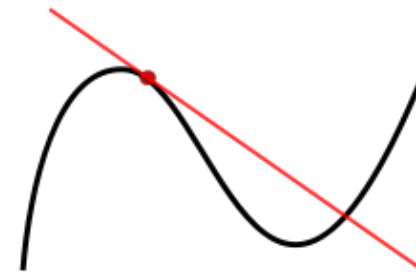
$$J_e(\mathbf{a}) = \frac{1}{N} \|\mathbf{y} - \Phi \mathbf{a}\|^2,$$

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

- Então, para encontrar o vetor de pesos  $\mathbf{a}$  devemos minimizar a equação do erro:

$$\min_{\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{K+1}} \|\mathbf{y} - \Phi \mathbf{a}\|^2.$$

# Minimizando a Função de Erro



A linha vermelha é tangencial à curva no ponto marcado pelo ponto vermelho. Sua inclinação é a derivada naquele ponto.

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

- Da disciplina de cálculo, sabemos que derivando a equação do erro,  $\|\mathbf{y} - \Phi \mathbf{a}\|^2$ , com relação a  $\mathbf{a}$  e igualando a 0 nós encontramos o **ponto** onde a inclinação de uma reta tangente à **função de erro** é nula:

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

porém, esse ponto pode ser tanto um **mínimo** quanto um **máximo** da **função de erro**, pois em ambos os pontos a inclinação da reta tangente é nula.

## Então, como sabemos se o ponto encontrado é um mínimo ou um máximo?

- Se a inclinação da tangente é nula e a **derivada de segunda ordem** for positiva, então o ponto nos dá o mínimo da função,

$$\frac{\partial^2 \|\mathbf{e}\|^2}{\partial^2 \mathbf{a}} = 2\Phi^T \Phi.$$

- Se a matriz  $\Phi$  tiver **posto** igual a  $K + 1$ , então a matriz  $\Phi^T \Phi$  é **positiva semi-definida** e, portanto, o ponto encontrado acima é realmente o ponto de mínimo da **função de erro**.
  - **Posto de uma matriz**: corresponde ao número de linhas ou colunas linearmente independentes da matriz.
  - Uma matriz quadrada  $A$  é **positiva semi-definida** se  $\mathbf{x}^* A \mathbf{x} \geq 0, \forall \mathbf{x} \neq 0$ .



# Minimizando a Função de Erro

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

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

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

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

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

## Observações:

1. O método encontra uma **solução única** se e somente se a matriz quadrada,  $\Phi^T \Phi$ , for **invertível** (se ela for **não-singular**), ou seja, com **posto** igual a  $K + 1$ .
2. O método só funciona para sistemas **determinados** ou **sobredeterminados**, ou seja, quando o número de equações (i.e., pares  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$ ) é igual ou maior do que o número de incógnitas (i.e., pesos), ou seja,  $N \geq K + 1$ .
3. Para sistemas **subdeterminados**, ou seja, que têm menos equações do que incógnitas, a matriz  $\Phi^T \Phi$  tem **posto** menor do que  $K + 1$  e, portanto, é **singular** (ou seja, a matriz  $\Phi^T \Phi$  não tem uma inversa). Neste caso, não existe solução ou ela não é única.

# Superfície de Erro

- E se plotarmos a função de erro,  $J_e(\mathbf{a})$ ?

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

- Que forma vocês acham que ela terá?
- $J_e(\mathbf{a})$  faz o mapeamento entre cada possível valor dos pesos do modelo e o erro correspondente:

▪  $J_e(\mathbf{a}): \mathbb{R}^{K+1} \rightarrow \mathbb{R}$ . Esse mapeamento define o que conhecemos como **superfície de erro**.

- $J_e(\mathbf{a})$  assume uma forma **quadrática** com respeito ao **vetor de pesos,  $\mathbf{a}$** .

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

Termo quadrático.

- 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**.
- Este é o motivo de usarmos o **erro quadrático médio** como função de erro.
- Isso é provado mostrando-se que  $\frac{\partial^2 J_e(\mathbf{a})}{\partial^2 \mathbf{a}'} = 2\Phi^T \Phi$  é uma **matriz positiva semi-definida**, e portanto,  $J_e(\mathbf{a})$  sempre será **convexa** com relação ao vetor de pesos,  $\mathbf{a}$ .

# 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  $w(n) \sim N(0, 0.1)$  e  $y(n)$  é a **função objetivo**.

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

$$y(n) = a_1 x_1(n),$$

onde  $x_1(n) \sim U(0, 1)$  e  $a_1 = 1$ .

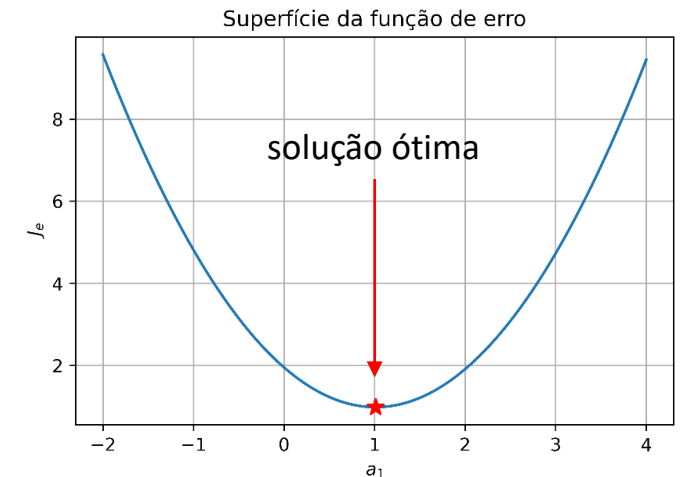
- A **função hipótese**,  $h(x)$ , é dada por

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

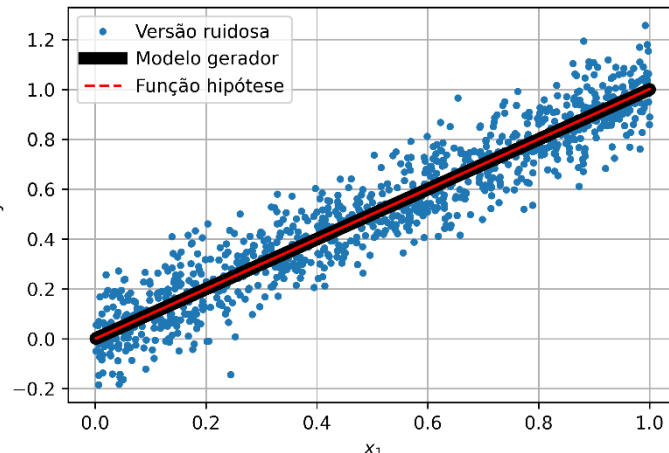
- O erro **erro quadrático médio** é calculado como

$$J_e(a_1) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \left( y_{\text{noisy}}(n) - \hat{y}(n) \right)^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \left( y_{\text{noisy}}(n) - \hat{a}_1 x_1(n) \right)^2.$$

Observem que temos apenas um ponto de mínimo. Isto se deve a superfície ser convexa.



Comparação do modelo gerador com a versão ruidosa e a aproximação obtida com a equação normal.



**IMPORTANTE:** Os valores de erro para plotarmos a superfície de erro são calculados variando-se  $a_1$  na equação do EQM.

[Exemplo: error surface example1.ipynb](#)

# Superfície de Erro: Exemplo #2

- 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:

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

onde  $x_1(n)$  e  $x_2(n) \sim U(-1,1)$  e  $a_1 = a_2 = 1$ .

- A **função hipótese**,  $h(x)$ , é dada por

$$h(x) = \hat{y} = \hat{a}_1 x_1(n) + \hat{a}_2 x_2(n).$$

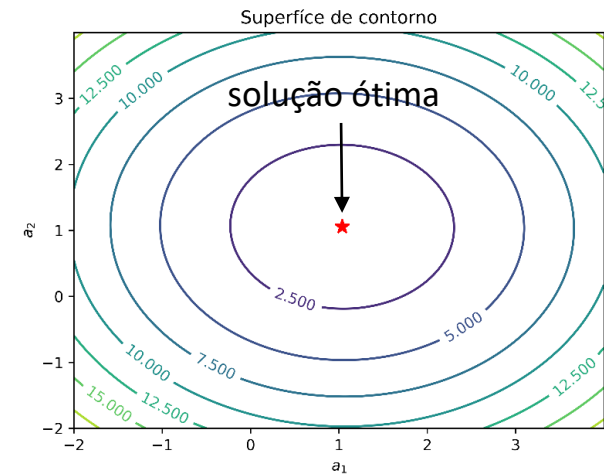
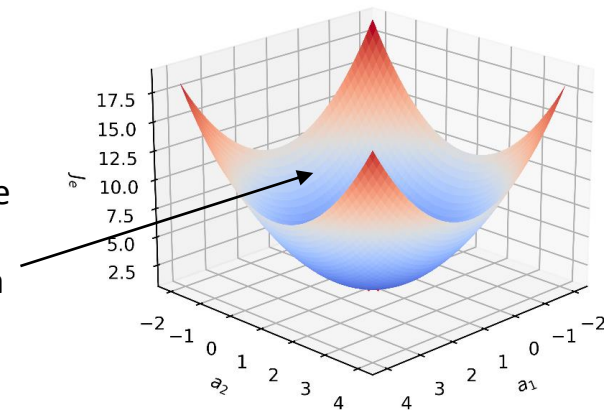
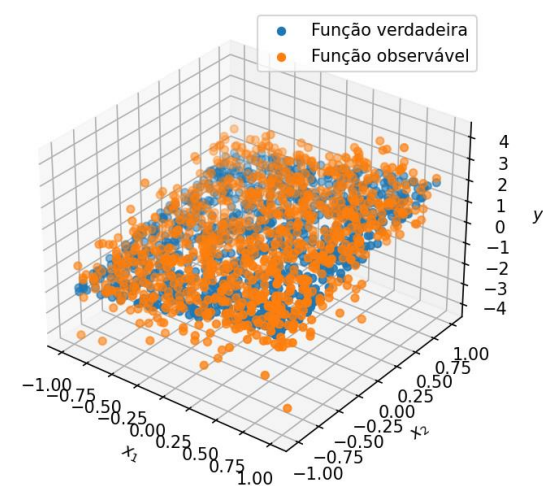
- O erro **erro quadrático médio** é calculado como

$$\begin{aligned} J_e(a_1, a_2) &= \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} (y_{\text{noisy}}(n) - \hat{y}(n))^2 \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} (y_{\text{noisy}}(n) - (\hat{a}_1 x_1(n) + \hat{a}_2 x_2(n)))^2 \end{aligned}$$

- 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 uma curva que têm o mesmo erro.

O erro é calculado variando-se  $a_1$  e  $a_2$  na equação do EQM. Neste caso, a superfície será representada por uma matriz de 3 dimensões. Cada par de valores  $a_1$  e  $a_2$  corresponde a um erro.



# Formatos diferentes para a superfície de erro

Função objetivo:

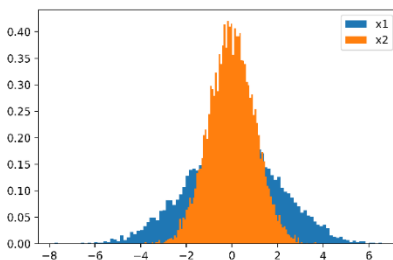
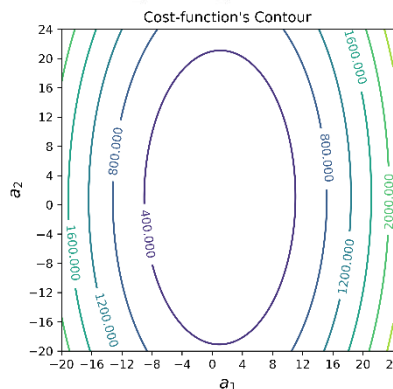
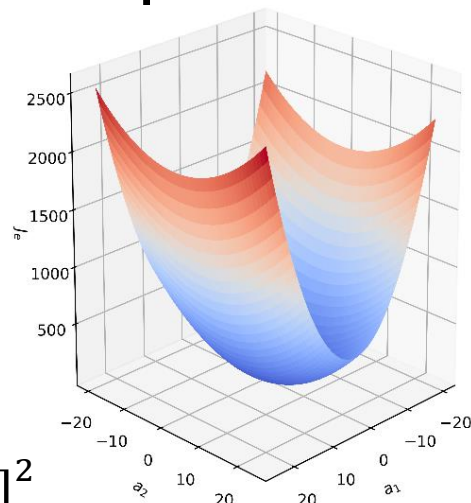
$$y(n) = a_1 x_1(n) + a_2 x_2(n),$$

onde  $a_1 = 1, a_2 = 1$ .

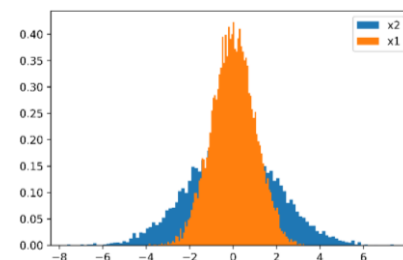
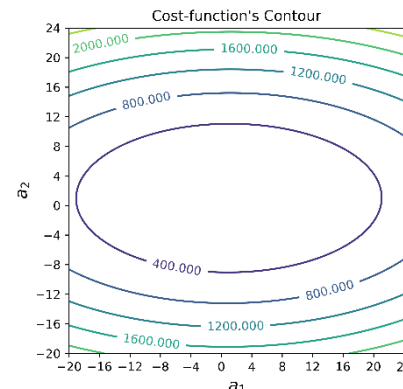
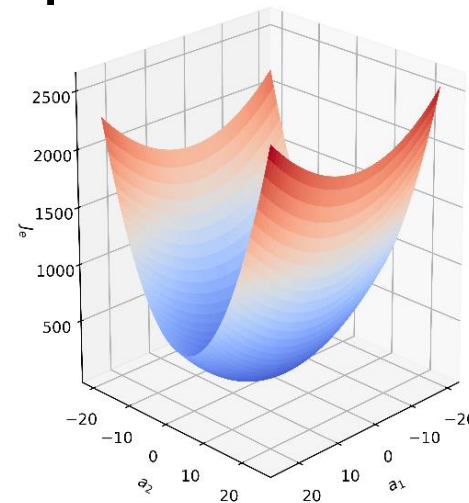
Para plotar a superfície de erro usamos:

$$J_e(\mathbf{a}) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} [y_{\text{noisy}}(n) - (\hat{a}_1 x_1(n) + \hat{a}_2 x_2(n))]^2$$

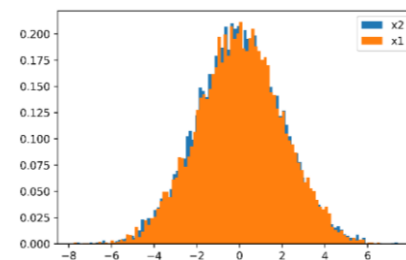
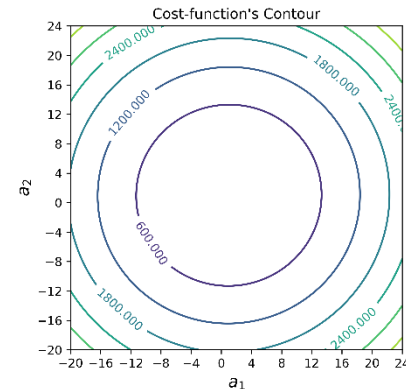
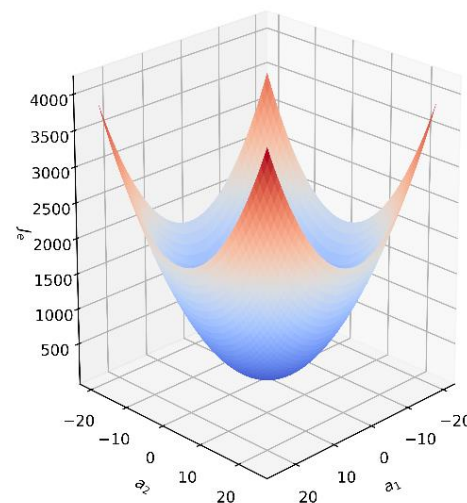
- Se  $x_1$  varia entre um intervalo muito grande de valores, então o **peso** da variação de  $\hat{a}_1$  no erro é maior, ou seja, o erro varia mais rapidamente com variações de  $\hat{a}_1$ , resultando num vale.
- A mesma coisa pode ser dita para  $x_2$  e  $\hat{a}_2$  (vale).
- Quando  $x_1$  e  $x_2$  variam entre um intervalo semelhante, então, a variação tanto de  $\hat{a}_1$  quanto de  $\hat{a}_2$  tem **pesos** semelhantes 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)

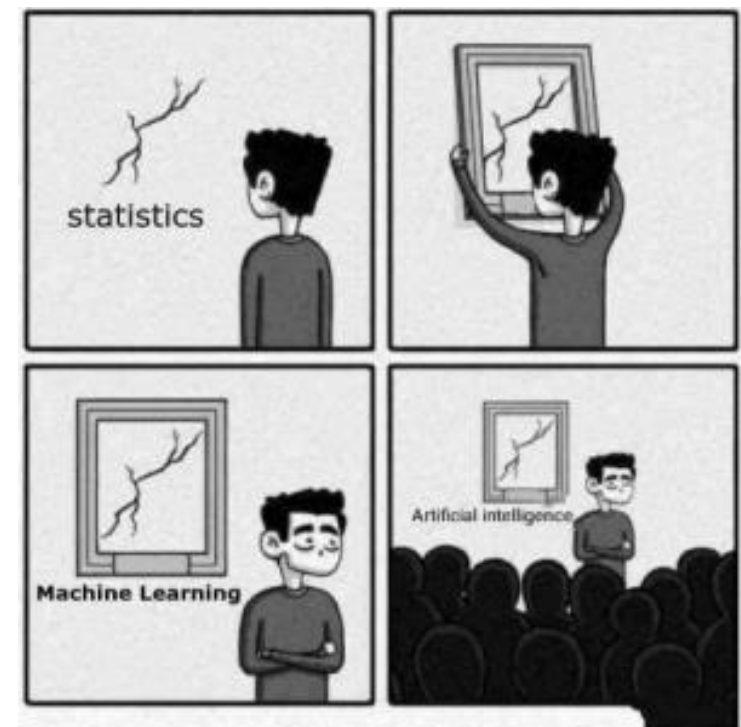
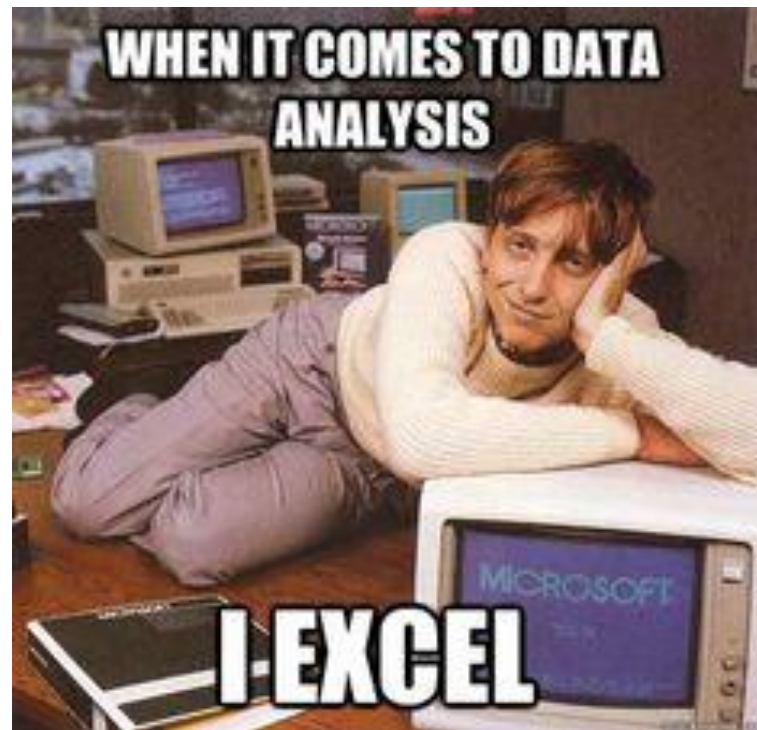
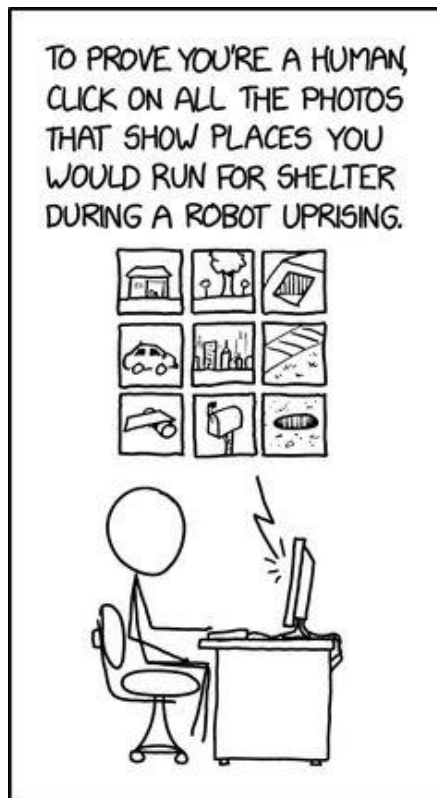
- **Alta complexidade computacional:** a solução da **equação normal** envolve o cálculo da inversa de  $\Phi^T \Phi$ , o qual tem complexidade computacional que varia de  $O(K^{2.4})$  a  $O(K^3)$ .
  - **Exemplo:** Se o número de **atributos**,  $K$ , dobrar, o tempo para cálculo aumenta de  $2^{2.4} = 5.3$  a  $2^3 = 8$  vezes.
- Dependendo do número de **exemplos**,  $N$ , e **atributos**,  $x$ , a matriz  $\Phi$  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,  $\alpha$ , à medida que os dados são apresentados ao modelo.
  - Por exemplo, o algoritmo do **gradiente descendente**, o qual veremos a seguir.

# Tarefas

- **Quiz:** “*T319 - Quiz - Regressão: Parte I*” 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](#).
  - **Laboratórios podem ser feitos em grupo, mas as entregas devem ser individuais.**



Obrigado!



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

Machine learning:

