

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



Inatel

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

Resumindo

- Vimos que o **escalonamento de atributos** **acelerou o aprendizado do GD** quando os atributos têm intervalos de variação muito diferentes.
- Aprendemos que **funções hipótese polinomiais** podem ser utilizadas para **aproximar comportamentos não-lineares, além de lineares**.
- Porém, precisamos **encontrar o grau ideal da função hipótese polinomial**.
 - Polinômios com **grau muito baixo** podem não ter flexibilidade o suficiente para aproximar os dados, causando **subajuste**.
 - Polinômios com **grau muito alto** podem ser tão flexíveis que acabam memorizando os dados de treinamento, causando **sobreajuste**.
- Na sequência, veremos como **escolher o grau ideal da função hipótese polinomial** de **forma quantitativa**, mesmo não conhecendo ou existindo uma função objetivo por trás da geração dos dados coletados.

Validação cruzada

- A validação cruzada é uma técnica utilizada para **avaliar quantitativamente o desempenho** de um **modelo** e **garantir que ele generalize bem para dados inéditos**, evitando assim problemas de subajuste ou sobreajuste.
- O processo de validação cruzada envolve **dividir o conjunto total de dados em subconjuntos** e realizar **várias rodadas de treinamento e validação** do modelo com **diferentes combinações desses subconjuntos**.
- A validação cruzada é uma ferramenta importante para **comparar e selecionar modelos** e para **ajustar hiperparâmetros** como, por exemplo, o **passo de aprendizagem**, o **grau do polinômio** da função hipótese, etc.

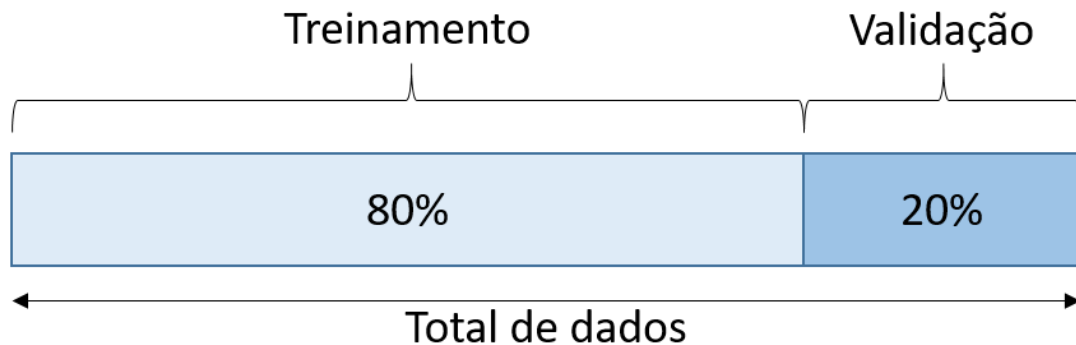
Validação cruzada

- O **objetivo** da **validação cruzada** é encontrar um **ponto de equilíbrio** entre a **flexibilidade** e a **capacidade de generalização** do modelo (e.g., polinômio).
- Um **modelo equilibrado** é
 - Flexível o suficiente para se ajustar ao comportamento geral dos dados.
 - Capaz de prever saídas próximas às esperadas para exemplos não usados durante seu treinamento.
- A **flexibilidade** de um modelo é **estimada** através do **erro de treinamento** e a **capacidade de generalização** é **estimada** através do **erro de validação** ou **teste**.
 - Erro de treinamento é calculado com os dados usados para o treinamento do modelo.
 - Erro de validação ou teste é calculado com dados inéditos.

Validação cruzada

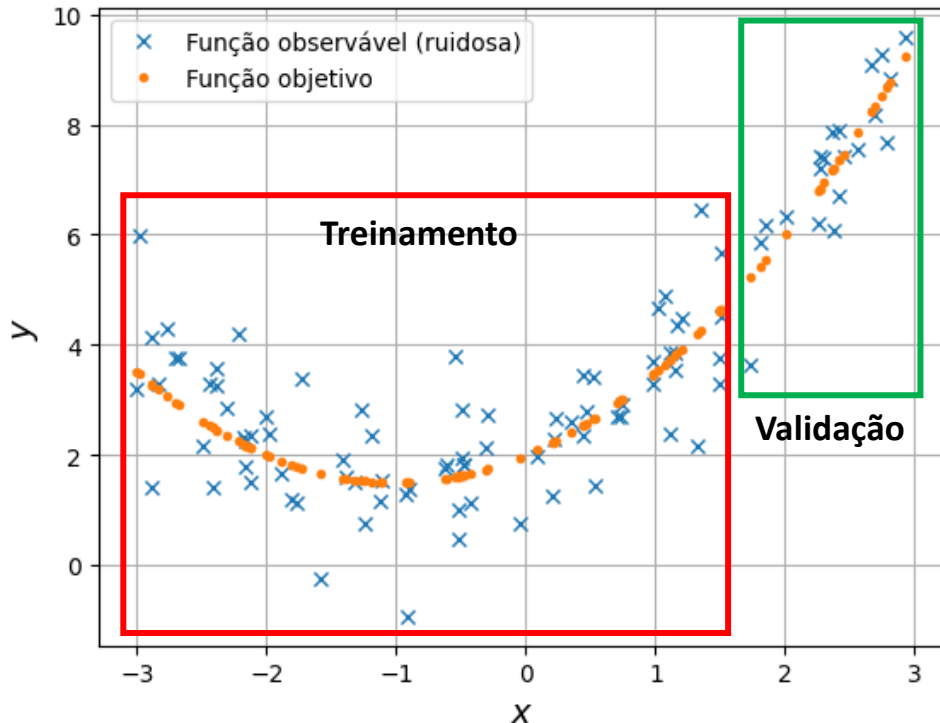
- No caso onde queremos usar a **validação cruzada** para **encontrar o grau ideal da função hipótese polinomial**, o **comportamento destes dois erros** vai nos ajudar a verificar **quais graus fazem o modelo se ajustar demais ou insuficientemente** aos dados de treinamento.
- As estratégias de validação cruzada mais utilizadas e que veremos a seguir são:
 - *Holdout*
 - *k-fold*

Holdout



- É a estratégia de validação cruzada **mais simples e rápida**, pois ela **divide** o conjunto total de dados em **apenas dois subconjuntos**, um para **treinamento** e outro para **validação** (ou teste) do modelo.
- Consequentemente, realiza-se **apenas um treinamento e uma validação do modelo**.
- Em geral, mas é opcional, o conjunto total de dados é **embaralhado de forma aleatória antes da divisão**.
- Normalmente, divide-se o conjunto total de dados em 70 a 80% para treinamento e 30 a 20% para validação.

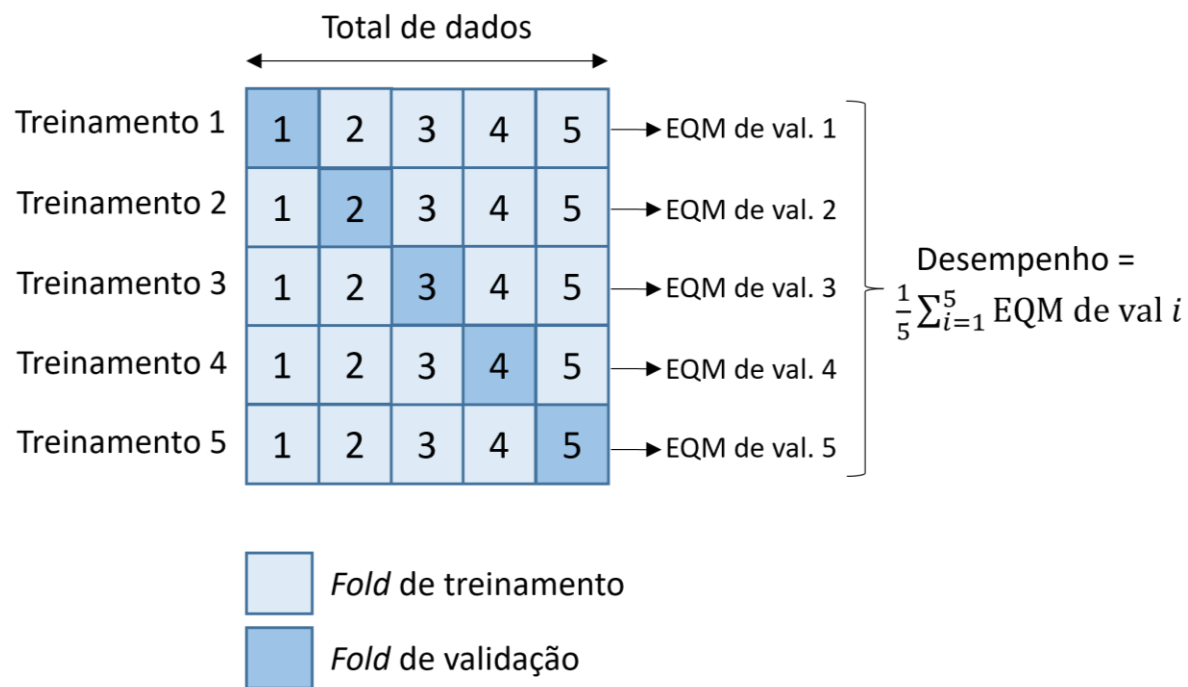
Holdout



- Entretanto, o modelo treinado e validado com esta estratégia pode **apresentar desempenho ruim se a divisão** dos dados **não for representativa do padrão presente nos dados**.
 - Problema conhecido como **viés de seleção**.
- O desempenho do modelo pode ser muito diferente dependendo da divisão dos dados.
- Além disso, a **divisão única** pode **não fornecer** uma **estimativa robusta do desempenho** do modelo.
- Em geral, usa-se o *holdout* quando o **conjunto de dados é muito grande**, o que **minimiza estes problemas**.

k -fold

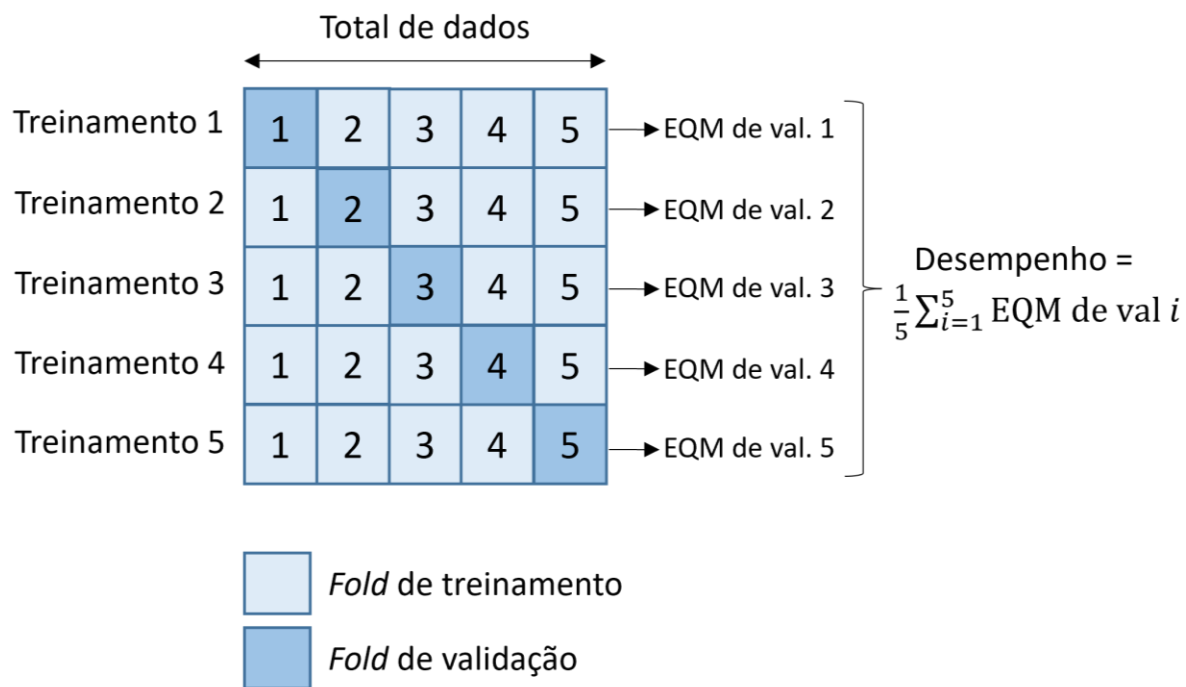
$k = 5$



- É uma estratégia mais elaborada do que a do *holdout*.
- A estratégia consiste em embaralhar (opcional) e **dividir o conjunto total de dados em k partes (ou folds) iguais**.
- O **modelo é treinado k vezes**, cada vez usando $k-1$ partes como conjunto de treinamento e a parte restante como conjunto de validação.
- O **EQM com o conjunto de validação** é calculado **ao final de cada treinamento**.

k -fold

$k = 5$

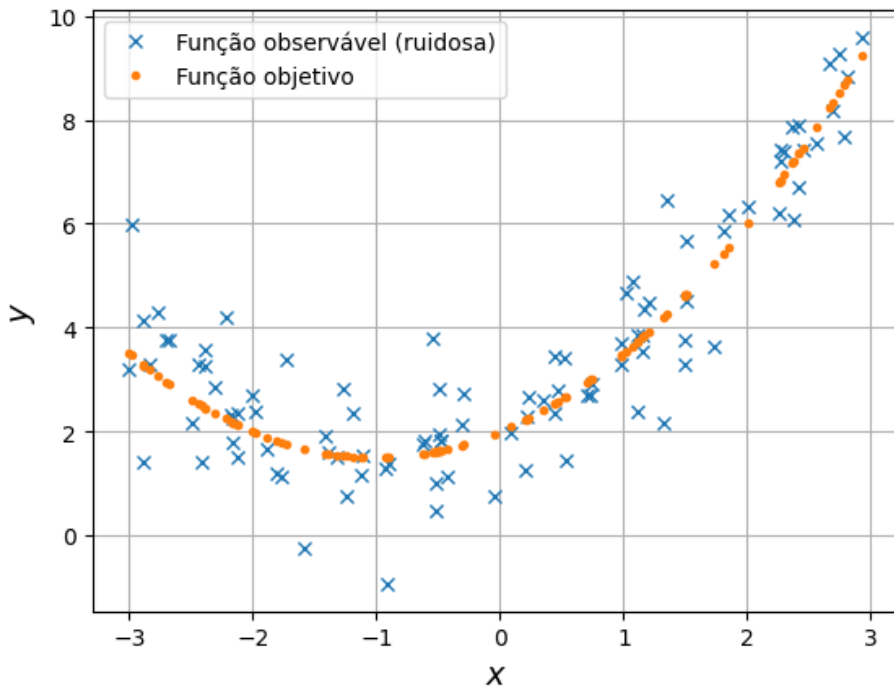


- Ao final dos k treinamentos, calcula-se a **média** e o **desvio padrão** dos k EQM de validação para fornecer uma **avaliação geral do desempenho do modelo**.
- Em geral, utiliza-se $k = 5$ ou 10.
- Porém, k deve ser escolhido de forma que os *folds* sejam **representativos do padrão presente nos dados**.

k -fold

- O k -fold é a estratégia de validação cruzada mais usada por
 - fornecer **indicações mais claras** sobre desempenho do modelo, devido a média tomada.
 - **minimizar os possíveis efeitos provocados pelo viés de seleção**, pois o modelo é treinado e validado k vezes, cada vez com uma divisão diferente dos dados.
 - Isso faz com que a avaliação do modelo se torne menos sensível à divisão dos dados.
- Entretanto, em relação ao *holdout*, o k -fold tem um tempo de validação maior (cerca de k vezes), pois deve-se realizar k treinamentos e validações, enquanto que com o *holdout*, realiza-se apenas um treinamento e validação.

Validação cruzada para encontrar o grau do polinômio aproximador



- Para exemplificar o uso das estratégias de validação cruzada para encontrar o grau ideal do polinômio aproximador, vamos usar a seguinte função observável

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

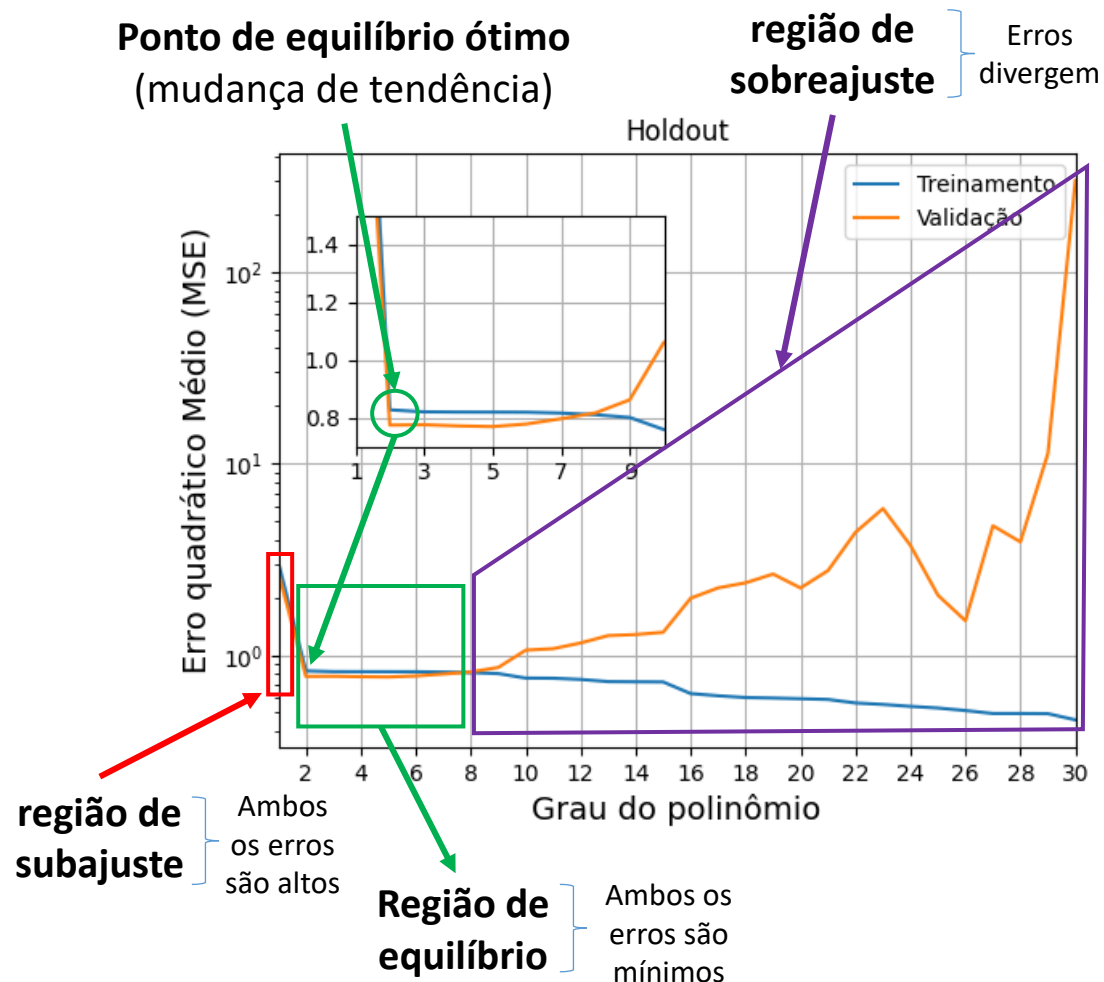
onde y é a função objetivo e w é o ruído, o qual tem amostras retiradas de uma distribuição Gaussiana com média zero e variância unitária.

- A função objetivo é um polinômio de segundo grau definido como

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

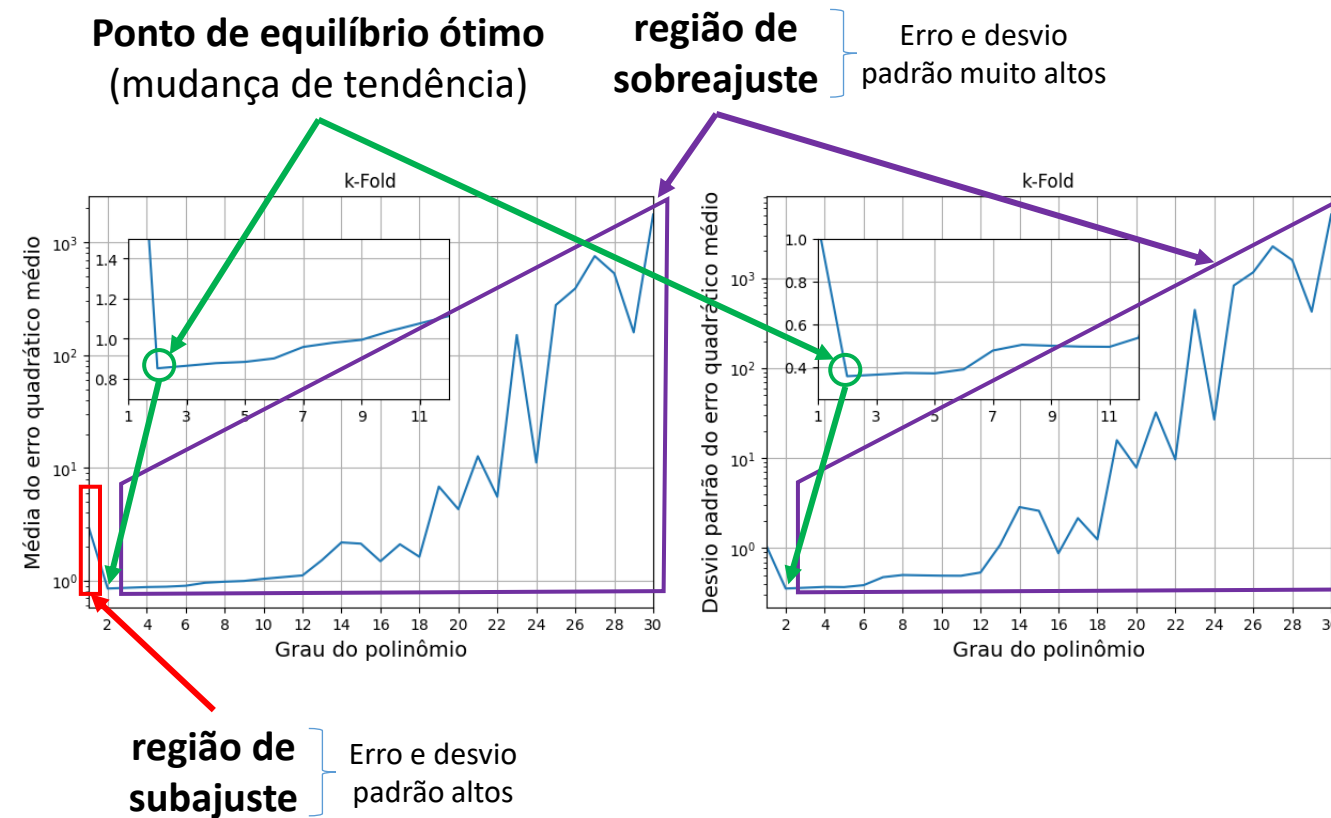
onde x é o atributo, o qual varia entre -3 a 3.

Usando holdout para encontrar o grau do polinômio aproximador



- Divisão: 70% para o conjunto de treinamento e 30% para o conjunto de validação.
- Tempo médio para validação cruzada *holdout* com $N = 100$ é de ≈ 150 [ms].
- Erro de treinamento **diminui** conforme o grau do polinômio aumenta.
- Erro de validação **aumenta** conforme o grau do polinômio aumenta.
- Qual grau escolher?
 - Valor para o qual **ambos os erros sejam mínimos** (balanço entre flexibilidade e capacidade de generalização) e que tenha **menor complexidade computacional**.

Usando k -fold para encontrar o grau do polinômio aproximador



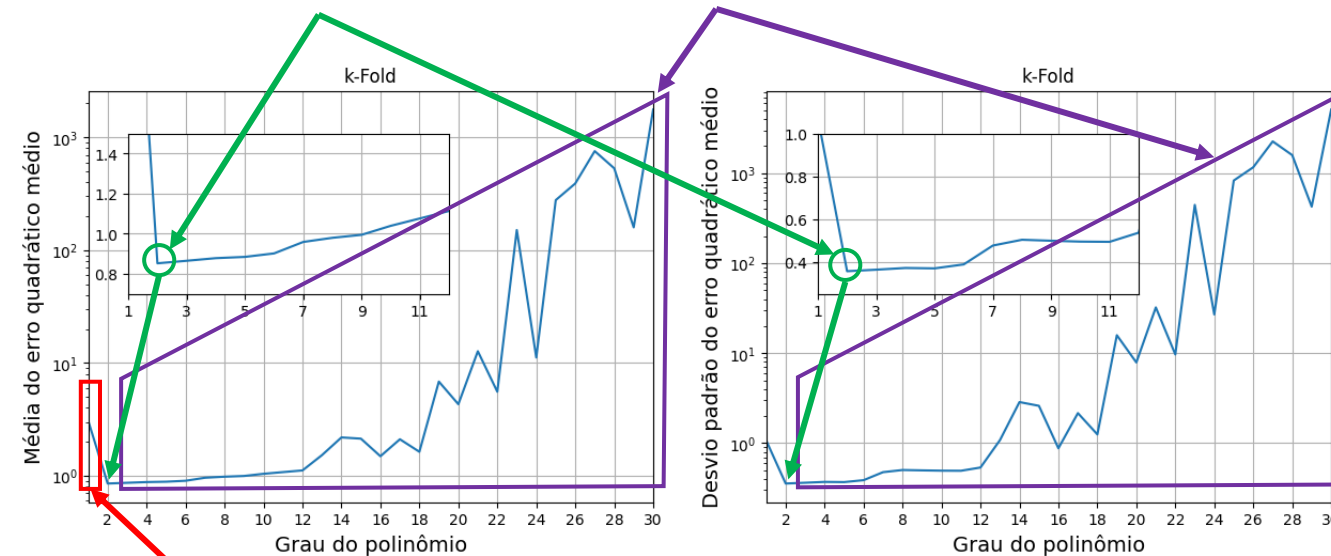
- $k = 10$ folds: 10 treinamentos com 9 folds para treinamento e 1 para validação.
- Os gráficos mostram a média e o desvio padrão do EQM de validação para as 10 etapas de treinamento para cada grau avaliado.
- A média e o desvio padrão do EQM diminuem, passando pelo ponto de equilíbrio, e depois aumentam com o grau do polinômio.
- Qual grau escolher?
 - Valor onde **ambos, média e desvio padrão do EQM, sejam mínimos** e que tenha **menor complexidade computacional**.

* Tempo médio para validação cruzada k -fold com $N = 100$ e $k = 10$ exemplos é de ≈ 1.5 [s].

Usando k -fold para encontrar o grau do polinômio aproximador

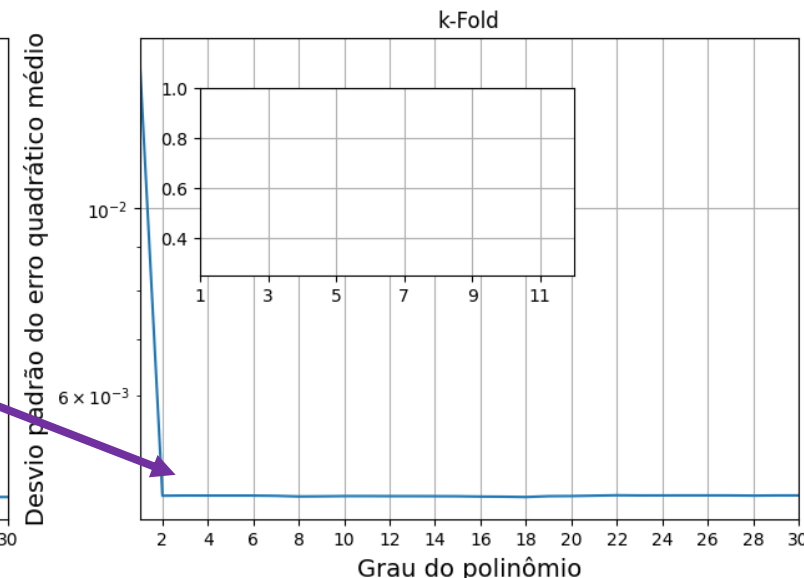
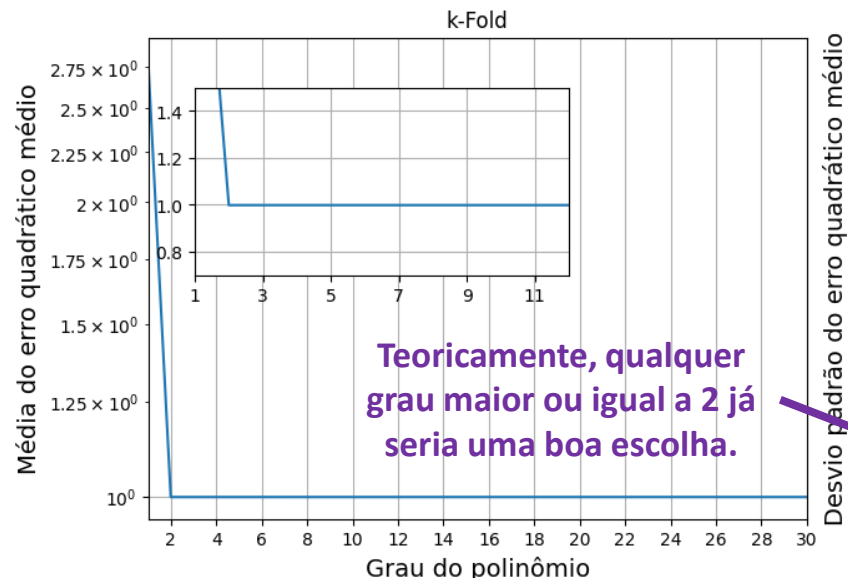
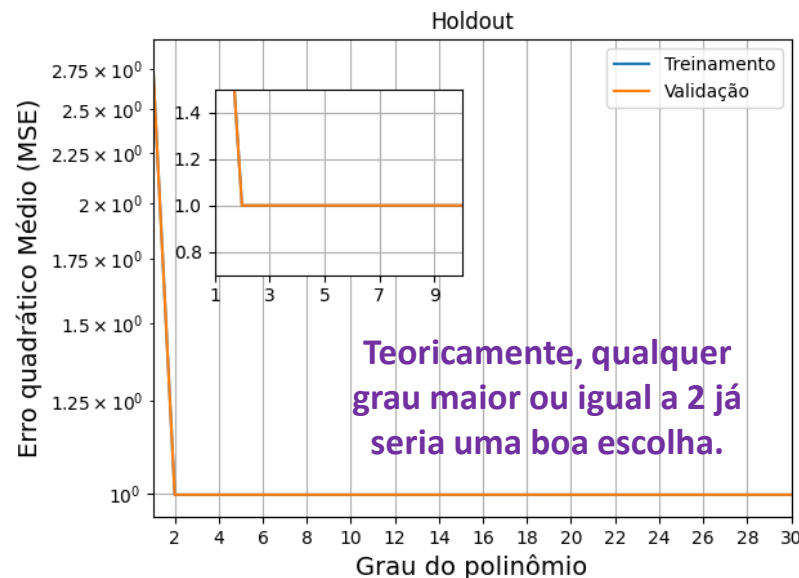
Ponto de equilíbrio ótimo
(mudança de tendência)

região de
sobreajuste



- Conforme o modelo se **sobreajusta** aos dados de treinamento, o **desvio padrão do erro de validação aumenta devido à redução de sua capacidade de generalização**.
 - Ou seja, o modelo aprendido se distancia muito do comportamento geral dos dados.
- Modelos **muito flexíveis** (mais do que o necessário) apresentam desvios padrão do erro de treinamento muito baixo e do erro de validação muito alto, indicando **sobreajuste**.
- Modelos pouco flexíveis (menos do que o necessário) têm ambos os desvios padrão dos erros altos, indicando **subajuste**.

Qual grau escolher quando vários são possíveis?



- Observem as figuras.
- *Qual grau devemos escolher quando os erros (holdout) ou a média e o desvio padrão dos erros (k-fold) são mínimos e praticamente constantes para vários graus de polinômio?*
 - Isso ocorre quando o número de exemplos é muito maior do que a flexibilidade (i.e., grau) do modelo.

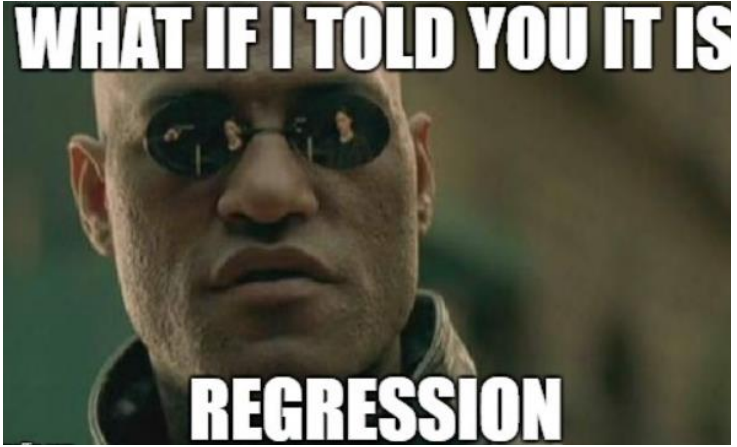
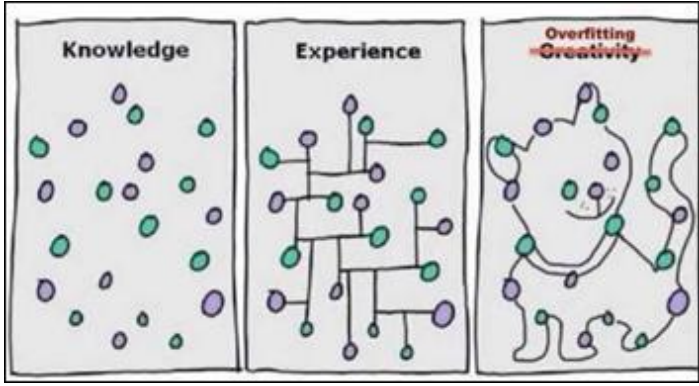
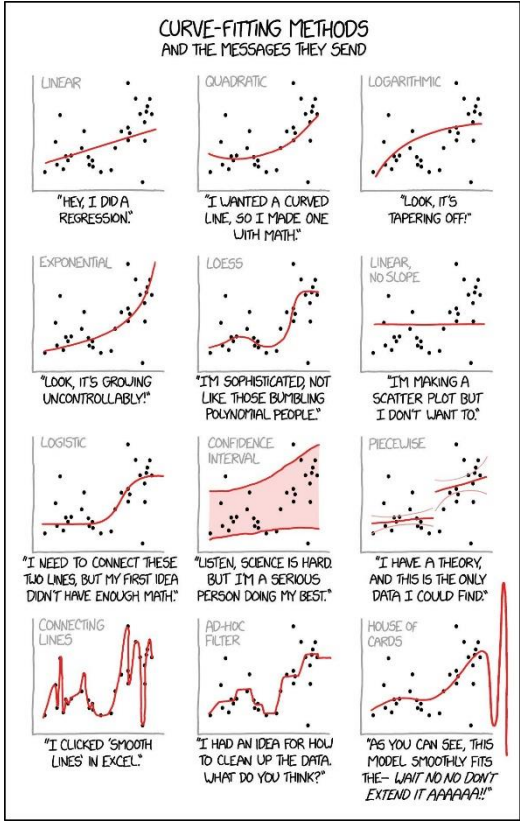
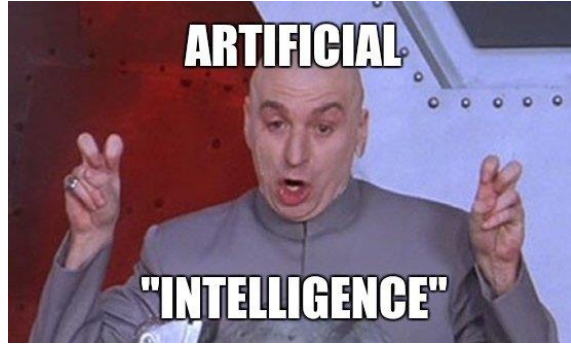
Qual grau escolher quando vários são possíveis?

- A resposta é aplicar a ***navalha de Occam***.
- A ***navalha de Occam*** é um princípio lógico que sugere que, ***entre várias explicações igualmente plausíveis*** para um conjunto de observações, a ***mais simples deve ser preferida***.
 - Ou seja, deve-se ***preferir explicações mais simples às mais complexas***.
- Portanto, usando a ***navalha de Occam*** escolhemos a ***função hipótese polinomial com menor grau*** (i.e., menos complexa), ***mas que se ajusta bem ao comportamento geral dos dados***.
 - Ou seja, escolhemos o modelo mais simples em termos de quantidade de cálculos, mas que possua uma boa capacidade de generalização.

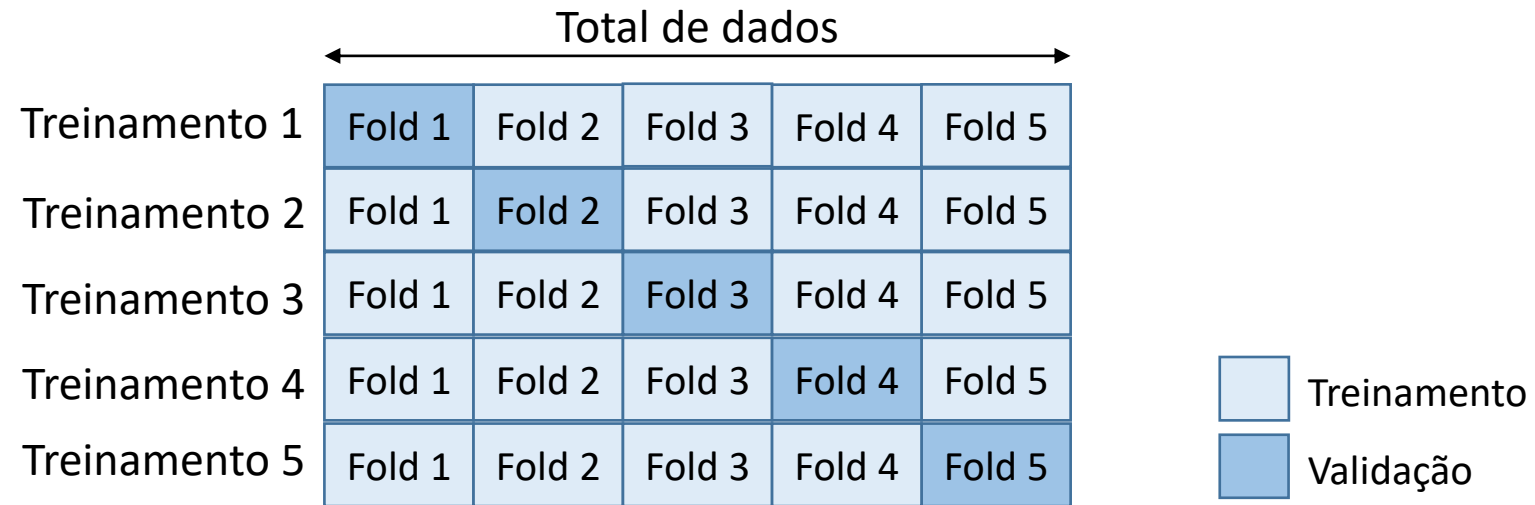
Tarefas

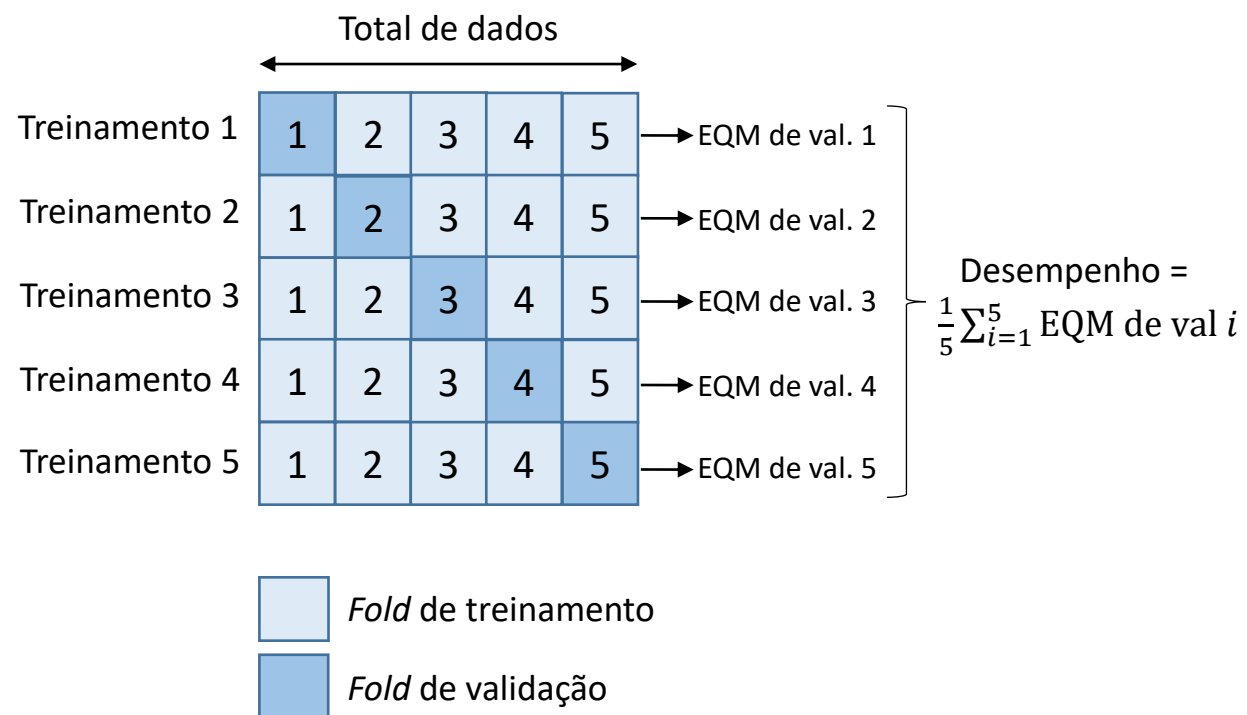
- **Quiz:** “*T319 - Quiz - Regressão: Parte V*” que se encontra no MS Teams.
- **Projeto Final**
 - Projeto pode ser feito em grupos de no máximo 3 alunos.
 - **Entrega: 12/12/2023 até às 23:59.**
 - Leiam os enunciados do trabalho atentamente.

Obrigado!





FIGURAS





	Total de dados									
Treinamento 1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Treinamento 2	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Treinamento 3	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Treinamento 4	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Treinamento 5	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Treinamento 6	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Treinamento 7	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Treinamento 8	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Treinamento 9	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Treinamento 10	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10

 *Fold* de treinamento
 *Fold* de validação

