

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



Inatel

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

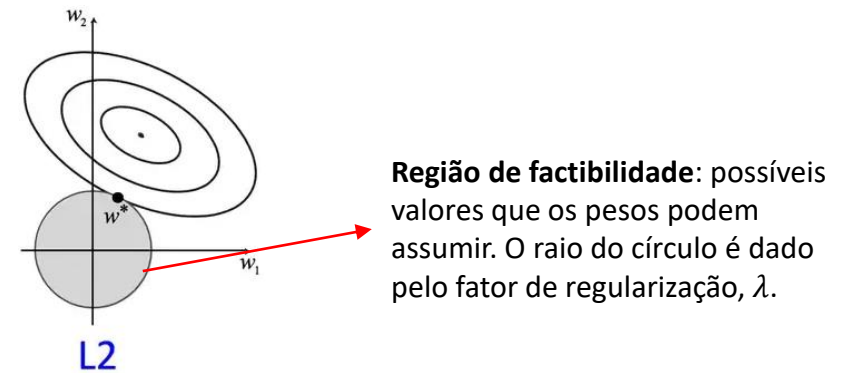
Recapitulando

- Anteriormente, vimos como escolher o melhor modelo de regressão utilizando as técnicas de ***validação cruzada***: holdout, k-Fold e leave-P-out.
- Escolhemos sempre o modelo menos complexo, mas que generaliza bem.
- Ou seja, escolhemos o modelo que apresenta valores baixos para ambos os erros, de treinamento e de validação.
- Uma abordagem alternativa é ***minimizar conjuntamente*** o erro e a complexidade da ***função hipótese***.
- Como veremos, esta abordagem combina erro e complexidade ***em uma única função de erro***, possibilitando que encontremos a melhor ***função hipótese*** de uma só vez.
- Portanto, hoje, veremos as seguintes abordagens para se encontrar o melhor modelo de regressão:
 - **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

- Grandes magnitudes dos pesos de um modelo são um claro sinal de um modelo mais complexo que sobreajustou os dados de treinamento.
- **Regularização**: deixar o modelo menos flexível (ou seja, complexo).
- A ideia por trás da **regularização** é penalizar, explicitamente, **funções hipótese** complexas.
- Técnicas de **regularização** reduzem o risco de **sobreajuste** do modelo ao conjunto de treinamento, aumentando sua capacidade de **generalização**.
 - Quanto menos graus de liberdade o modelo tiver, mais difícil será para ele se **sobreajustar** aos dados de treinamento.
- O risco de **sobreajuste** é reduzido incorporando-se **penalizações** proporcionais a alguma **norma** do **vetor de pesos** ao processo de treinamento.
- As principais técnicas de **regularização** são: *Ridge*, LASSO e *elastic-net*.
- A **regularização** força o algoritmo de aprendizado não apenas a se ajustar aos dados, mas também a manter os pesos do modelo os menores possíveis.

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:

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

Início em 1 e não em 0.

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

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

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{a} \in \mathbb{R}} & \|\mathbf{y} - \Phi \mathbf{a}\|^2 \\ \text{s. a. } & \|\mathbf{a}\|_2^2 \leq c, \end{aligned}$$

- Se c diminui, $\|\mathbf{a}\|_2^2$ também diminui até que se $c \rightarrow 0$, então $a_i \rightarrow 0$.
- Se c aumenta, $\|\mathbf{a}\|_2^2$ pode assumir valores maiores até que se $c \rightarrow \infty$, então a_i pode assumir qualquer valor.
- c define o tamanho da região de factibilidade.

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

- Portanto, λ altera a complexidade (ou seja, a 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 .

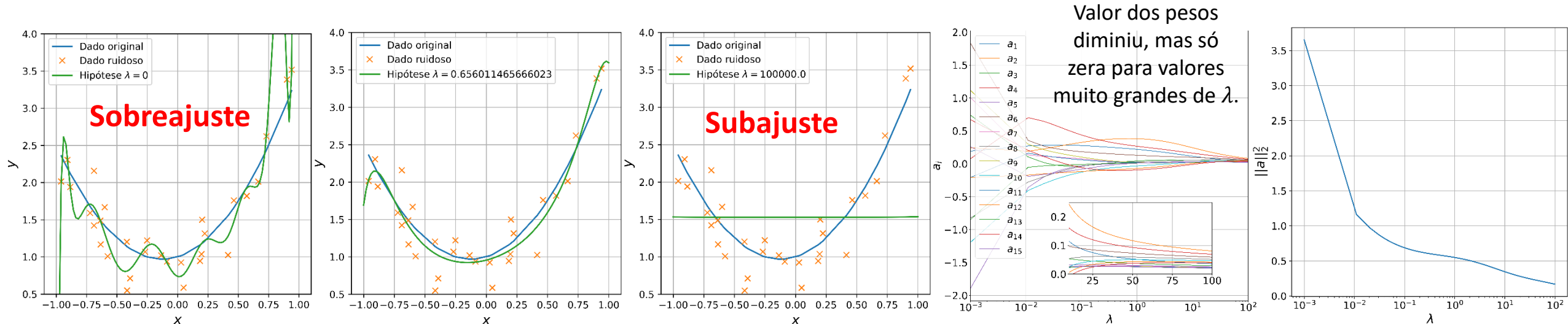
Ridge Regression

- A **equação de erro regularizado**, $\|\mathbf{y} - \Phi\mathbf{a}\|^2 + \lambda\|\mathbf{a}\|_2^2$, 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**:

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

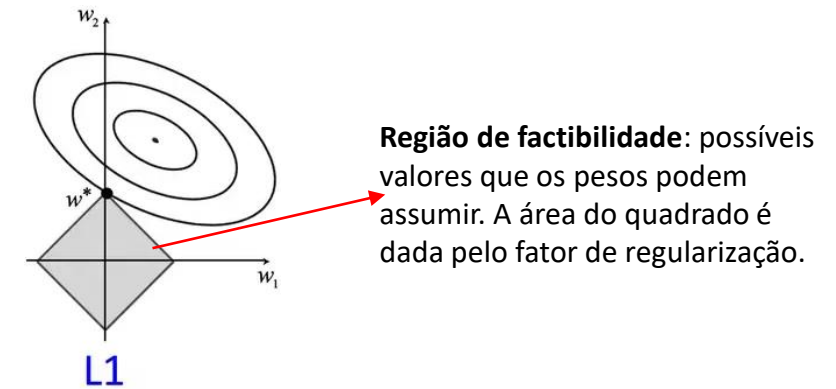
- **OBS.1:** mesmo que a matriz Φ não possua **posto completo** (i.e., matriz singular), a inversa na equação acima sempre existirá por conta da adição do **termo de regularização** à diagonal principal da matriz quadrada $\Phi^T \Phi$.
- **OBS.2:** como a **norma L2** é diferenciável, os problemas de aprendizagem usando a regularização de Ridge também 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 seu desempenho não utiliza a regularização.

Ridge Regression: Exemplo



- Função observável: $y_{\text{noisy}} = 1 + 0.5x + 2x^2 + w$, onde $x \sim U(-1,1)$ e $w \sim N(0, 0.09)$.
- **Função hipótese polinomial** de ordem 15 treinada com 30 amostras geradas a partir de y_{noisy} .
- Com $\lambda = 0$, regressão Ridge se torna uma regressão polinomial sem regularização e sobreajusta.
- Conforme λ aumenta, o modelo se “contorce” menos e passa a se ajustar à função verdadeira.
- Se λ continuar aumentando, todos os pesos acabarão muito próximos de zero e o resultado será uma 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 (figuras 4 e 5).
- Devemos utilizamos técnicas de **validação cruzada** para encontrar o valor ideal de λ .

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.

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

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

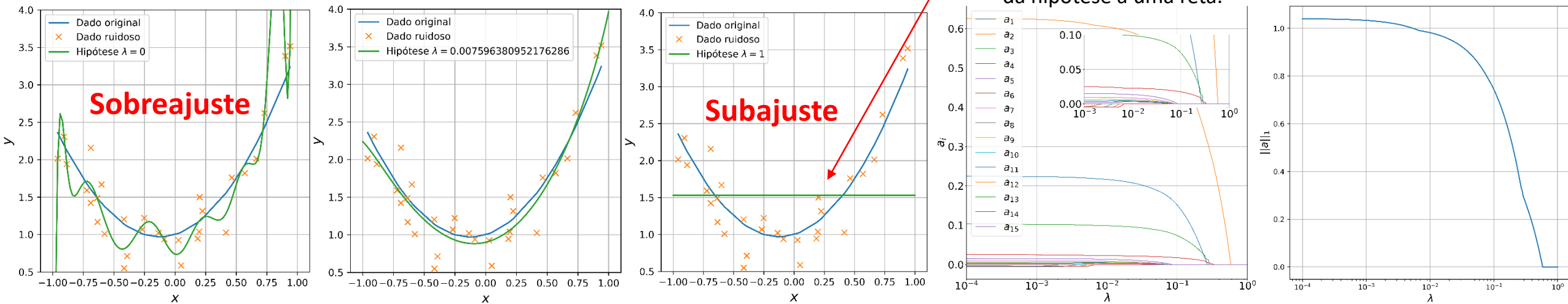
- Podemos re-escrever o **problema de regularização** acima como um **problema de otimização** com restrições da seguinte forma

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{a} \in \mathbb{R}} & \|\mathbf{y} - \Phi \mathbf{a}\|^2 \\ \text{s. a. } & \|\mathbf{a}\|_1 \leq c, \end{aligned}$$

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

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

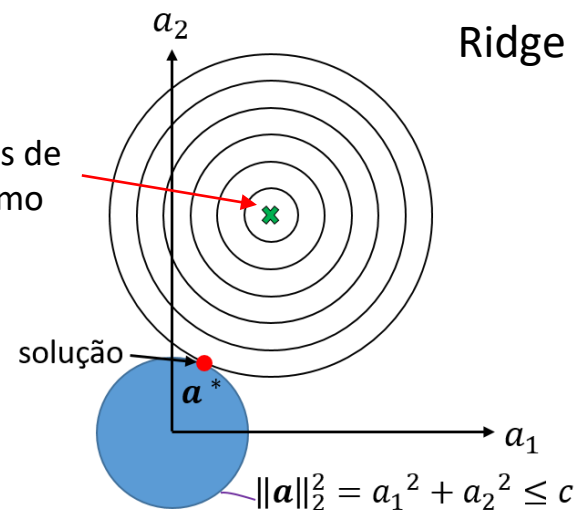
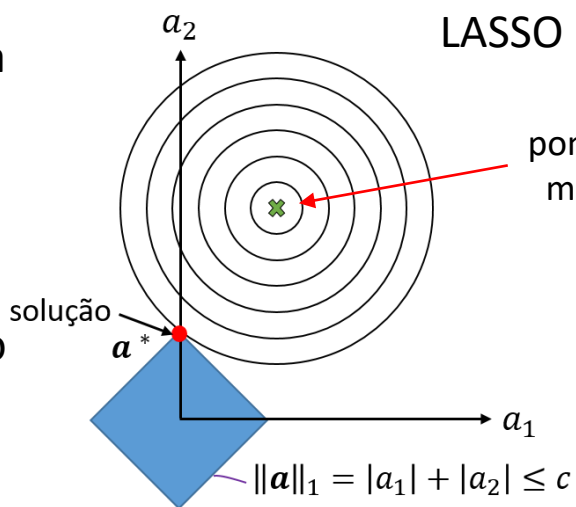
LASSO Regression



- Mesmas funções observável e hipótese do exemplo anterior.
- Valores pequenos de λ fazem o regressor LASSO se comportar com um regressor 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 atributos correspondentes são irrelevantes para o processo de regressão.
- 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, mas pode ser implementada com o GD.
- Utiliza-se técnicas de validação cruzada para encontrar o valor ideal de λ .

Por que LASSO produz modelos esparsos?

- O quadrado azul representa o conjunto de pontos \mathbf{a} no espaço de pesos bidimensional que tenham norma L1 menor do que c .
- A solução deve estar dentro do quadrado, o mais próximo do mínimo.



- O círculo azul representa o conjunto de pontos \mathbf{a} no espaço de pesos bidimensional que tenham norma L2 menor do que c .
- A solução deve estar dentro do círculo, o mais próximo do mínimo.

- A figura mostra as **curvas de nível** da **função de erro** de um problema de regressão linear com dois pesos (a_1 e a_2) e as regiões do **espaço de hipóteses** onde as restrições L1 (esquerda) e L2 (direita) são válidas.
- 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 da função de erro.
- Os **cantos** na **região de factibilidade** da restrição L1 aumentam as chances de alguns pesos assumirem o valor zero.
- E claro, os **cantos** são os pontos que possuem valor igual a 0 em alguma das dimensões (i.e., pesos).

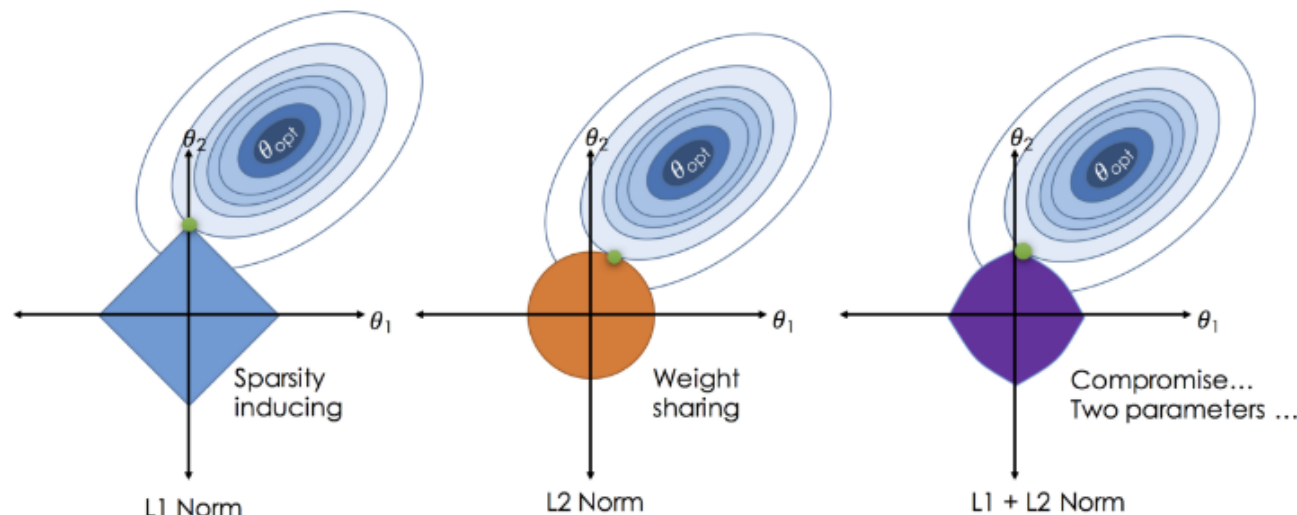
Elastic-net

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

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

onde $\kappa \in [0, 1]$ é o termo de mistura ou parâmetro de elasticidade entre as duas normas.

- Quando $\kappa = 0$, a *Elastic-net* é equivalente a regressão Ridge e quando $\kappa = 1$, ela é equivalente a regressão LASSO.
- A seleção dos hiperparâmetros κ e λ pode ser feita por meio de **validação cruzada**. Isso também se aplica ao dois outros métodos anteriores.



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

Quando utilizar regressão LASSO, Ridge ou Elastic-Net?

- **Regressão 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, K , for maior que o número de exemplos de treinamento, N , 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

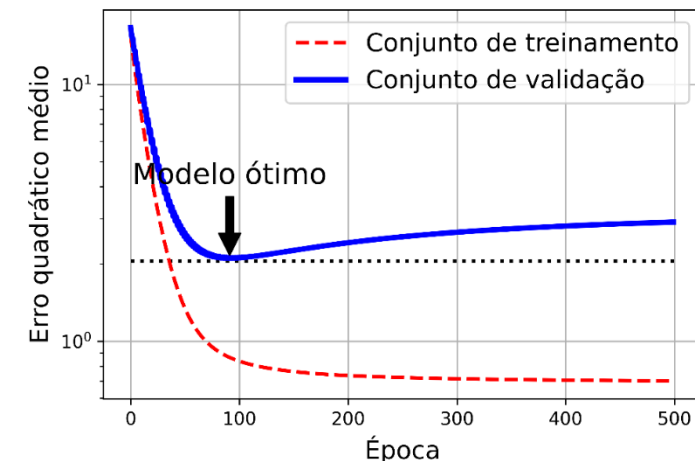
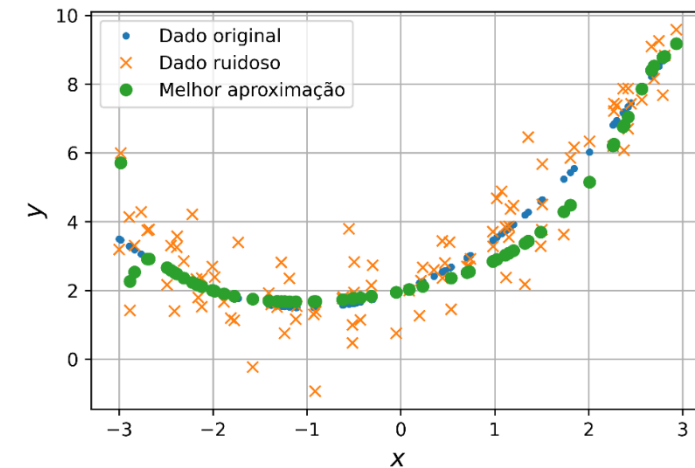
- O algoritmo do ***gradiente descendente*** tende a aprender modelos cada vez mais ***complexos*** à medida que o número de épocas aumenta.
- Ou seja, ele se ***sobreajusta*** ao conjunto de treinamento ao longo do tempo.
- Uma forma de se ***regularizar*** algoritmos de ***aprendizado iterativo***, 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 temporal***.
- Assim como as outras abordagens, ela tem o objetivo de evitar o ***sobreajuste*** de um modelo.
- Ao se regularizar no ***tempo***, a complexidade do modelo pode ser controlada, melhorando sua ***generalização***.
- Mas como saber quando interromper o treinamento? Ou seja, qual é o critério de parada?

Exemplo: Early-stop

- Existem duas estratégias para se definir o critério de parada:
 - Interromper o treinamento quando o erro de validação aumenta por ***P*** (paciência) 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 por um determinado número de épocas, 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 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 $w \sim N(0,1)$



Tarefas

- **Quiz:** “*T319 - Quiz - Regressão: Parte VI*” que se encontra no MS Teams.

Obrigado!

