APRENDIZADO DE MÁQUINA

PROF. RONALDO CRISTIANO PRATI
RONALDO.PRATI@UFABC.EDU.BR

BLOCO A, SALA 513-2

DESEMPENHO

- Quando treinamos um algoritmo de aprendizado, geralmente queremos otimizar o desempenhos (e.g., minimizar o erro)
- Podemos pensar que um erro pequeno é bom, mas isso não necessariamente significa um bom modelo
  - Podemos estar causando um **overfitting** nos dados
  - O modelo se sai bem nos dados de treino, mas não generaliza bem

CONJUNTO DE TESTE

- Uma abordagem comum para avaliar o desempenho é utilizar um conjunto separado de teste
- Uma estratégia comum é dividir o nosso conjunto de dados em duas partes:
  - Uma parte é o **conjunto de treino**
  - Segunda parte é o **conjunto de teste**
- Uma divisão típica é 70%:30% (treino:teste), ou 2/3:1/3

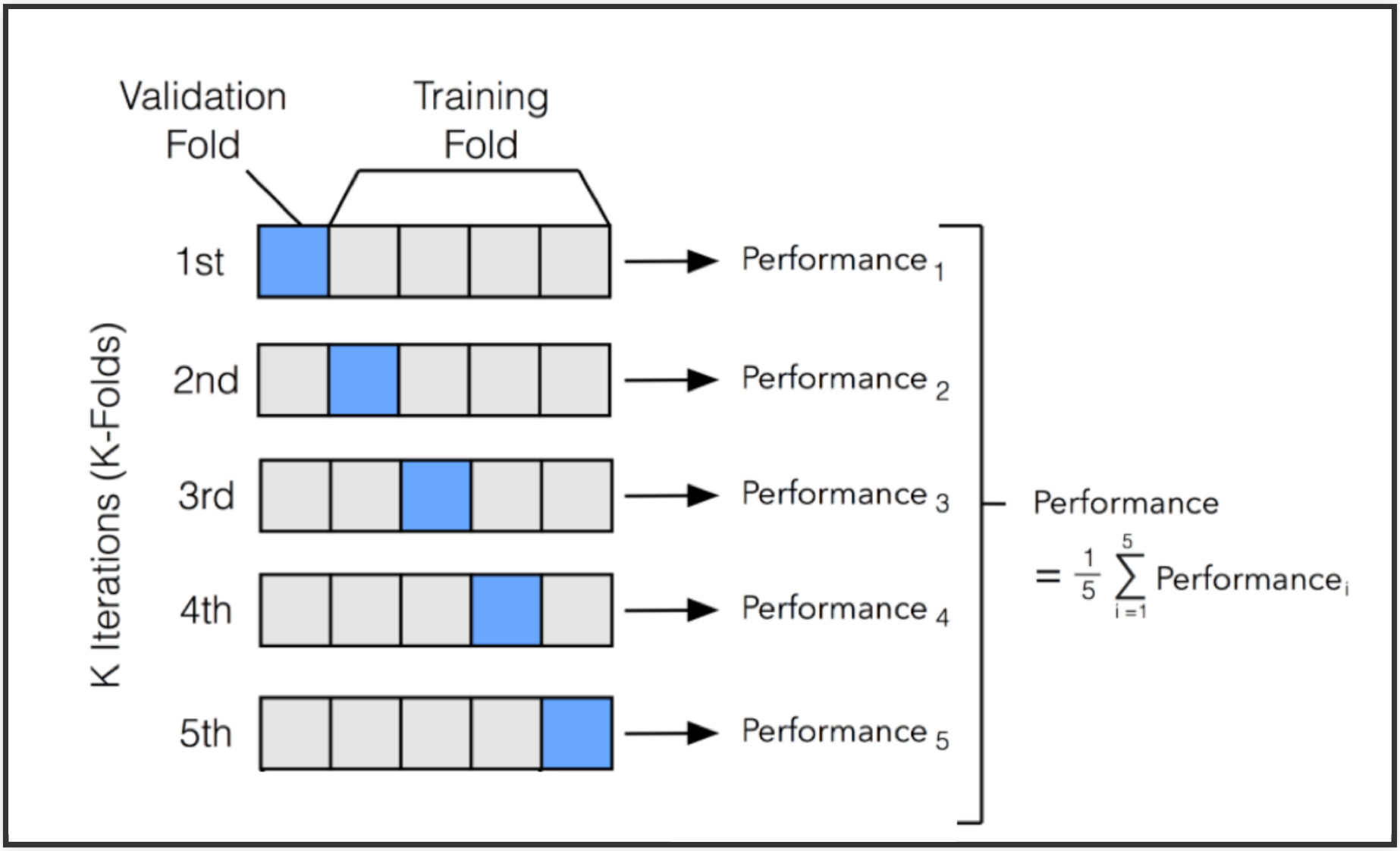
VALIDAÇÃO CRUZADA

- Usar uma única divisão de treino e teste pode ter alguns problemas:
  - O éxemplo só é usado ou para treinar ou para testar
  - E se no conjunto de teste só aparecerem exemplos "fáceis"?
  - Alguns exemplos "importantes" podem não ser vistos pelo algoritmo.
  - O modelo é robusto a variações nos dados?

VALIDAÇÃO CRUZADA

- Validação cruzada visa contornar esses problemas:
- Validação cruzada em k pastas (k-fold cross validation)
  - Dividir o conjunto de dados em k partes
  - Repetir o treinamento/teste k vezes
  - A cada iteração, umsar uma parte diferente para testar, e as outras $k-1$ para treinar
  - O desempenho é calculado como a média das k repetiçoes

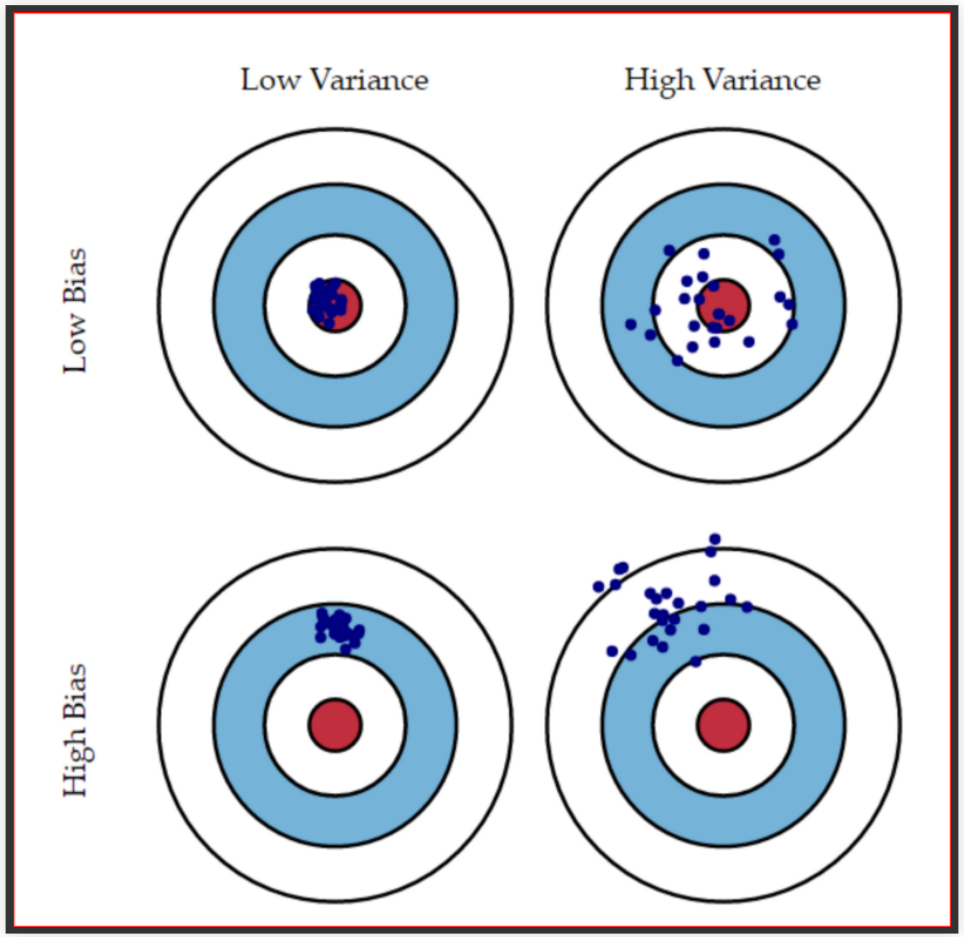
VALIDAÇÃO CRUZADA K-FOLD



BIAS E VARIÂNCIA

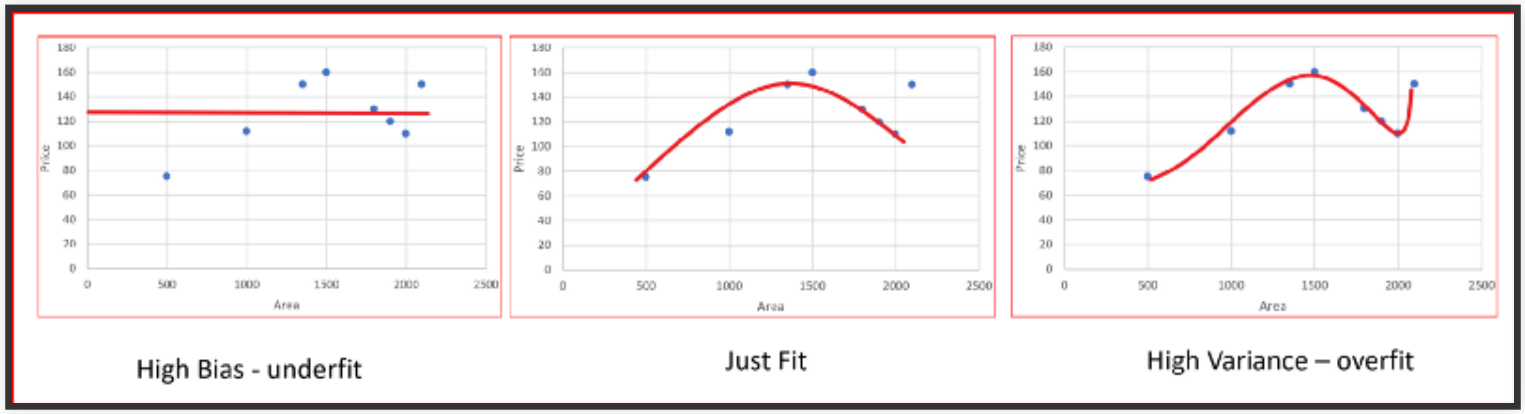
- Quando analizamos o desempenho de um modelo de predição, é importante entender as fontes de erro
- Existe um compromisso entre duas fontes: **bias** e **variância**
  - Bias: erro sistemático devido à suposições feitas pelo algoritmo
  - Variância: erro devido à características particulares dos dados de treinamento
  - Erro irredutível: erros "inerentes" ao problema (por exemplo, devido a falta de informação relevante nos dados)

BIAS E VARIÂNCIA

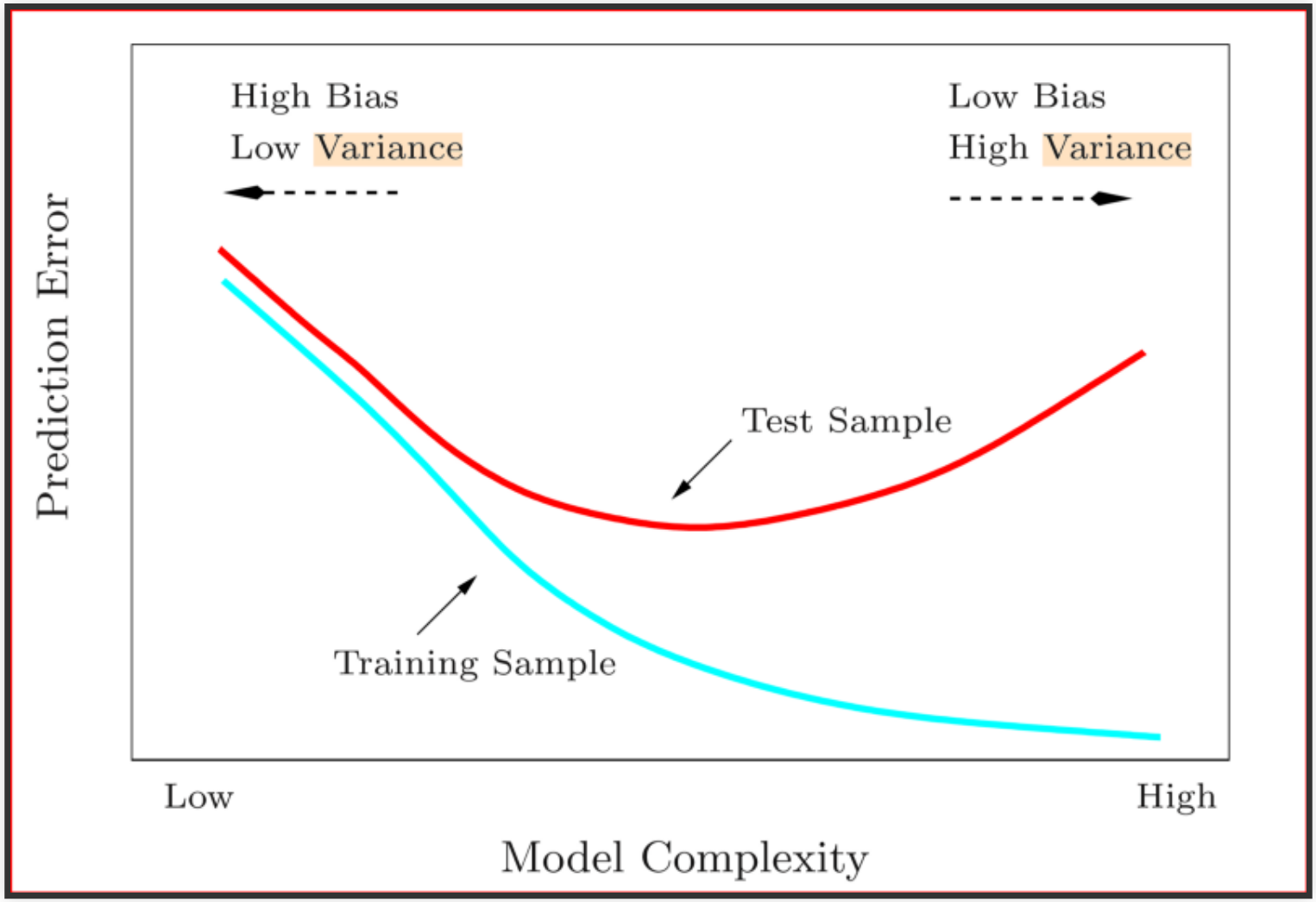


BIAS E VARIÂNCIA

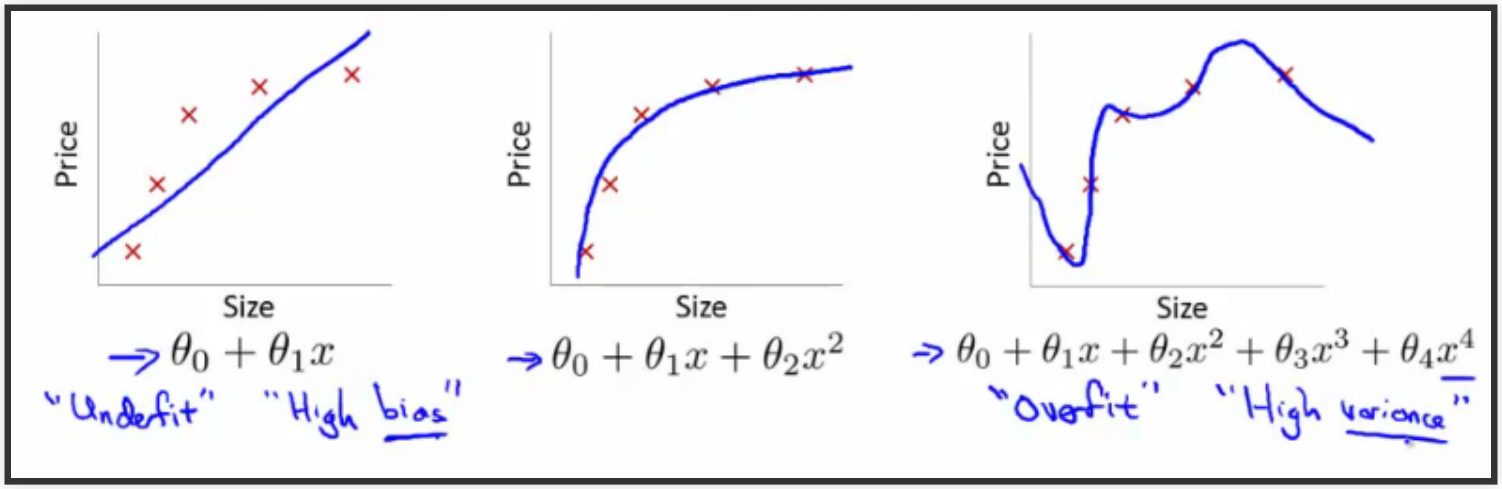
- Um modelo com alto bias pode ser muito simples para o problema
- Um modelo com alta variância tende a super ajustar aos dados de treinamento, e não generalizar o suficiente para novos dados



BIAS E VARIÂNCIA



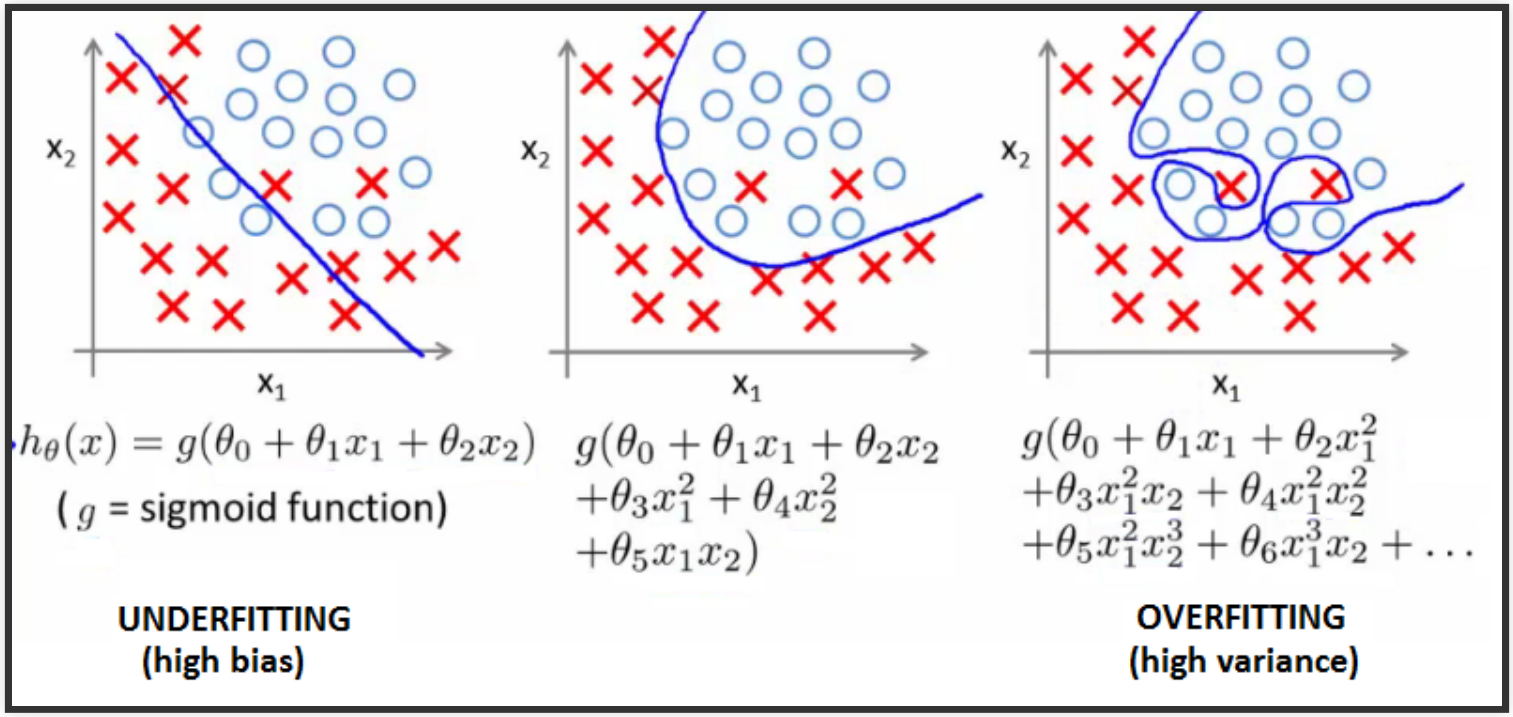
EXEMPLO - REGRESSÃO LINEAR



EXEMPLO - REGRESSÃO LINEAR

- Usar uma função linear temos **underfitting** (alto bias). O modelo não é bom
- Usar um polinômio 2o. grau funciona bem para esse problema em particular
- Polinômio 4o. grau o modelo super-ajusta aos dados de treino **overfitting** (alta variância)

EXEMPLO - REGRESSÃO LOGÍSTICA



EXEMPLO - REGRESSÃO LOGÍSTICA

- A função sigmoide não se ajusta bem aos dados
- Um polinômio de grau 2 funciona bem para esse problema em particular
- Um polinômio de grau maior superajusta aos dados

LIDANDO COM OVERFITTING

- Em problemas reais, nem sempre é possível visualizar os dados para verificar se está ocorrendo overfitting
- Em geral, temos muitos atributos (não é só um problema de ajustar o grau do polinômio)
- Se temos poucos exemplos, o problema pode ser mais difícil de lidar

LIDANDO COM OVERFITTING

1. Reduzir o número de atributos:
    - Manualmente selecionar quais atributos manter
    - Usar algum procedimento de seleção de atributos (voltaremos a esse ponto mais adiante)
    - Eventualmente pode descartar informação relevante
2. Regularização
    - Manter todos os atributos, mas controlar a magnitude dos parâmetros θ
    - Limita a contribuição de cada atributo na predição de y

REGULARIZAÇÃO

- Ideia: alterar a função de custo para que alguns valores θ sejam pequenos
- Por exemplo, se adicionarmos uma penalização a θ_3 e θ_4 ao ajustar um polinômio de 4o. grau, esses coeficientes ficarão perto de zero, e teremos uma função quase quadrática

$$\min_{\theta} \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} (h\theta(x) - y)^2 + 1000(\theta_3^2 + \theta_4^2)$$

REGULARIZAÇÃO

- Valores pequenos para parâmetro correspondem a hipóteses mais simples (eventualmente, alguns termos desaparecem)
- Uma hipótese mais simples é menos sucetível a overfitting

REGULARIZAÇÃO

- Como escolhemos quais parâmetros penalizar?
- Em geral, adicionamos um termo que penaliza todos os parâmetros
- Por convenção, θ_0 geralmente não é penalizado (mas terá pouco impacto se você incluir esse termo na regularização)
- Adicionamos um termo extra ao final da função de custo:

$$J(\theta) = \frac{1}{2m} \sum_{i=i}^{m} (h\theta(x^i) - y^i)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{n} \theta_j$$

REGULARIZAÇÃO

- λ é um parâmetro de regularização
- Ele controla o compromisso entre
  1. Criar um bom modelo para o conjunto de dados
  2. Manter os valores the θ baixos
- Se λ for muito alto, penalizamos todos os parâmetros (todos os θ próximos a zero) e podemos ter underfitting
- Se λ for muito baixo, a regularização tem pouca efitividade e podemos ter overfitting

REGRESSÃO LINEAR REGULARIZADA

- O gradiente da função regularizada é dado por:

$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (h\theta(x^i) - y^i) x_j^i + \frac{\lambda}{m} \theta_j$$

  - O que nos leva a uma atualização de θ:

$$\theta_j := \theta_j (1 - \alpha \frac{\lambda}{m}) - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (h\theta(x^i) - y^i) x_j^i$$

REGRESSÃO LINEAR REGULARIZADA

- Qual é o efeito da regularização?
- O termo $(1 - \alpha \frac{\lambda}{m})$ geralmente é um número ligeiramente menor que 1. m é geralmente grande, e α e λ são geralmente pequenos. Então temos (1 - número pequeno). Então esse termo gira em torno de 0.95 a 0.99, tipicamente.
- Isso faz com que o termo θ_j decresça um pouco de uma iteração para outra.
- O outro termo é exatametne igual ao gradiente descendente original

REGRESSÃO LINEAR REGULARIZADA

- Equação Normal, adiciona um termo extra λ multiplicado pela (n+1) matriz identidade:

$$\theta = \left(x^\intercal x + \lambda \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ & & \dots & & \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right)^{-1} x^\intercal y$$

REGRESSÃO LOGISTICA REGULARIZADA

- É similar ao caso da regressão linear, mas usando a função de custo da regressão logística

$$J(\theta) = \frac{1}{2m} \sum_{i=i}^{m} Cost(h_\theta(x), y) + \lambda \sum_{j=1}^{n} \theta_j$$

  - em que:

$$Cost(h_\theta(x), y) = -ylog(h_\theta(x)) - (1-y)log(1-h_\theta(x))$$

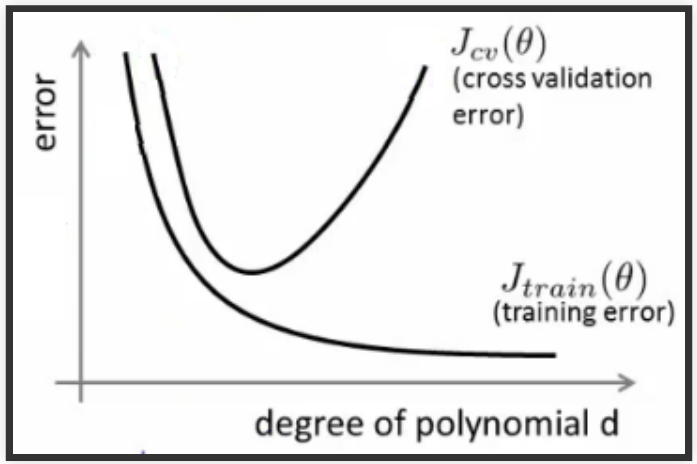
- A derivada tem um formato parecido com a regressão linear (com a devida função de custo)

TENTATIVAS PARA MELHORAR O MODELO

- Aumentar o conjunto de dados
- Tentar selecionar os melhores atributos
- Buscar novos atributos
- Realizar transformações nos dados (e.g., atributos polinomiais)
- Combinar atributos
- Ajustar o valor de λ

CURVA DE APRENDIZADO

- Pode ser útil para identificar a causa dos erros



CURVA DE APRENDIZADO

- Outras opções:
  - Erro x tamanho do conjunto de treino
    Temos um problema de variância?
  - Erro x λ
    Temos um problema de bias?

CURVA DE APRENDIZADO