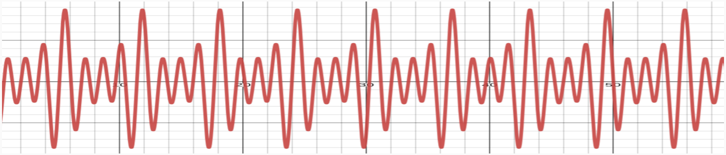
Prior Knowledge



Prof. Fabrício Olivetti de França

Federal University of ABC

05 February, 2024

Incorporando conhecimento prévio

Incorporando conhecimento prévio

Em alguns casos temos alguma informação extra sobre o comportamento esperado ou desejado de nosso modelo.

Quando queremos forçar equidade e que a falta de equidade não seja capturada dos dados, podemos criar certas imposições para a função do modelo.

Incorporando conhecimento prévio

Leis da Física como conservação de energia, leis da mecânica, ou da termodinâmica podem ser utilizadas para melhorar os modelos quando temos dados ruidosos.

Scientific Machine Learning

- Aplicações interdisciplinares da ciência, engenharia e computação.
- Estudo de sistemas dinâmicos ou fenômenos complexos com poucos dados.
- Energia limpa, mudança climática, infraestrutura sustentável
- Poder preditivo + interpretabilidade + conhecimento de domínio de modelos físicos

Restrição de Forma

Restrição de forma restringe a função de predição para que tenha certas propriedades em sua forma:

$$\begin{aligned} f^*(x) = \underset{f(x)\in\mathcal{M}}{\operatorname{argmin}} L(f(x), y), &\qquad x \in \mathcal{D} \subset \Omega \\ \text{subject to shape constraints } \; c_i(\mathcal{X}_i), &\qquad \mathcal{X}_i \subseteq \Omega. \end{aligned} \tag{1}$$

com $L(f(x), y)$ a função de custo, $f(x)$ o modelo, y a variável-alvo, $\mathcal{M}$ o espaço de modelos, $\mathcal{D}$ a base de dados, Ω é o domínio das variáveis, e c_i a i-ésima restrição de forma, e $\mathcal{X}_i$ o domínio da restrição.

Restrição de Forma

Table 1: Mathematical formulation of shape constraints considered in this work. All constraints assume a box domain $l_i \leq x_i \leq u_i$ for each variable x_i.

Property	**Mathematical formulation**
Non-negativity	$f(x) \geq 0$
Non-positivity	$f(x) \leq 0$
Bounded image	$l \leq f(x) \leq u$
Monotonically non-decreasing	$\frac{\partial}{\partial x_i} f(x) \geq 0$
Monotonically non-increasing	$\frac{\partial}{\partial x_i} f(x) \leq 0$
Convexity	$\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} f(x) \geq 0$
Concavity	$\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} f(x) \leq 0$
Commutativity	$f(x, y) = f(y, x)$
Symmetry	$f(x) = f(-x)$

Desafios

- Nem sempre é possível formalizar matematicamente a restrição de forma
- Quando temos uma formulação desambígua, a avaliação exata é impraticável (muitas vezes NP-difícil)

Desafios

Considere a restrição de forma monótona não-decrescente de um modelo $f(x)$.

Para verificar tal restrição precisamos calcular a derivada parcial em função da variável de interesse.

Em seguida, precisamos encontrar o mínimo dessa função no domínio desejado.

Estratégias de avaliação

- **Pessimista:** *se o resultado do intervalo está dentro do domínio da restrição, então sabemos com certeza que a solução é factível, se está fora, não sabemos se é factível ou não.*
- **Otimista:** *se o resultado do intervalo está fora do domínio da restrição, temos certeza que é infactível, caso contrário, não sabemos se é factível ou infactível.*

Aritmética Intervalar - Pessimista

A **aritmética intervalar** é utilizada para efetuar operações matemáticas na presença de incertezas e imprecisões.

Uma variável x passa a conter um intervalor de valores ao invés de um único valor:

$$x = [a, b]$$

significa que $a \leq x \leq b$. Geralmente $|a - b|$ é um valor pequeno representando a incerteza.

Aritmética Intervalar - Pessimista

Boa parte das operações e funções matemáticas são definidas dentro da aritmética intervalar. Por exemplo, a adição é definida como:

$$x + y = [a_x, b_x] + [a_y, b_y] = [a_x + a_y, b_x + b_y]$$

Isso é válido pois a adição de quaisquer outros valores x, y dentro de seus respectivos intervalos necessariamente serão maiores que o intervalo inferior resultante e menores que o intervalo superior.

Aritmética Intervalar - Pessimista

Um outro exemplo é a multiplicação:

$$x * y = [a_x, b_x] * [a_y, b_y] =$$

$$[min(a_x \cdot a_y, a_x \cdot b_y, b_x \cdot a_y, b_x \cdot b_y), max(a_x \cdot a_y, a_x \cdot b_y, b_x \cdot a_y, b_x \cdot b_y)]$$

Pois, por exemplo, $[-3, -1] * [2, 4]$ tem um mínimo em -12 e um máximo em -2.

Aritmética Intervalar - Pessimista

Essa aritmética tem alguns problemas chamado de *problema de resolução* em que uma operação do tipo:

$$x - x$$

não apresenta o valor correto. Isso porque

$$[-1, 1] - [-1, 1] = [-1 - 1, 1 - (-1)] = [-2, 2]$$

Quando deveria resultar em zero.

Aritmética Intervalar - Pessimista

Para funções multivariadas, a avaliação de variáveis intervalares retorna um resultado correto se:

- Existe apenas uma única ocorrência de cada variável ou
- As variáveis com múltiplas ocorrências são monótonas

Aritmética Intervalar - Pessimista

No contexto de restrição de forma, podemos avaliar a função de predição e suas derivadas parciais substituindo as variáveis pelos intervalos correspondentes ao seu domínio.

Essa é uma estratégia pessimista pois, como tende a superestimar o intervalo real.

Amostragem - Otimista

Uma forma comum de avaliar uma restrição de forma é avaliando uma amostra de valores das variáveis dentro do domínio.

```
amostras(dominios, passo) = cartesian(
       [amostraVar(dominio, passo)
           for dominio <- dominios])
amostraVar((lo, hi), passo) =
       [x for x <- [lo, lo+passo .. hi]]
```

Amostragem - Otimista

- Se a quantidade de amostras for grande o suficiente, encontraremos uma boa aproximação dos pontos de mínimo e máximo.
- O mínimo e máximo amostrado representa um intervalo interno ao mínimo e máximo real.
- Conforme a dimensionalidade do problema aumenta, aumenta também a necessidade por amostras.

Outras restrições de forma

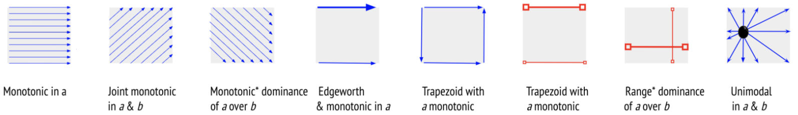
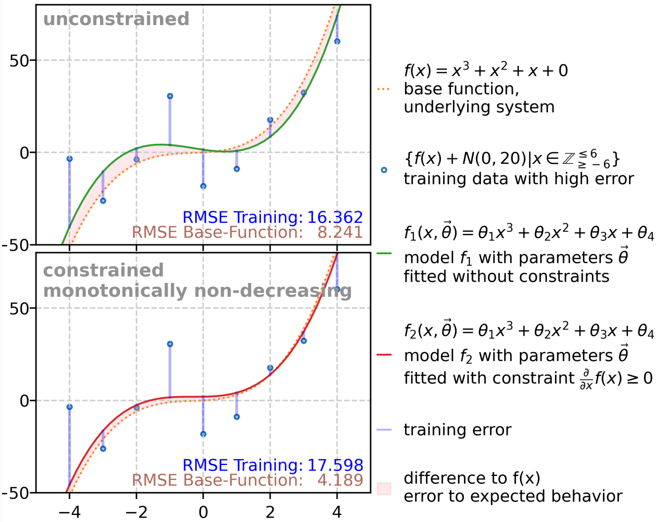


Figure 1. Illustration of prior and proposed shape constraints that hold for each a-b slice of the feature space, where a is the horizontal feature and b is the vertical feature. Arrows (in blue) denote the function can only increase in that direction. The $*$ on monotonic dominance and range dominance is to remind readers there are additionally monotonicity constraints in a and b that are not shown; for example, $f(a, b) = 5a + 3b$ is monotonically dominant in a over b, but also increasing in a and b. A bigger arrow denotes a steeper increase than a smaller arrow. The red lines with open-box-ends denote the range of the outputs over the line, with bigger open-boxes denoting a larger output range. As shown, the trapezoid constraint imposes a *twist* shape that can equivalently be expressed in terms of arrows or ranges, where for trapezoid the larger output range must also be a superset of the smaller output ranges.

- Gupta, Maya, et al. “Multidimensional shape constraints.” International Conference on Machine Learning. PMLR, 2020.

Por que restringir a forma?



Outros nomes normalmente utilizados na literatura da área de regressão são **modelos isotônicos** e **modelos que preservam a ordem**.

Os métodos mais comuns para gerar tais modelos são:

- Regressão com função degrau ou stepwise regression
- Resolver um problema de otimização convexa
- Splines isotônicas

Tibshirani, Ryan J., Holger Hoefling, and Robert Tibshirani. "Nearly-isotonic regression." Technometrics 53.1 (2011): 54-61.

Wright, Ian W., and Edward J. Wegman. "Isotonic, convex and related splines." The Annals of Statistics (1980): 1023-1035.

Os modelos isotônicos estão comumente associados ao algoritmo *Pool of Adjacent Violators* que, para uma base de dados unidimensional, ordena os dados por ordem crescente da entrada e os agrupa de tal forma que a mediana de cada grupo é menor ou igual a mediana do próximo grupo, reescrevendo alguns valores da variável-alvo para atender essa restrição.

Chakravarti, Nilotpal. "Isotonic median regression: a linear programming approach." Mathematics of operations research 14.2 (1989): 303-308.

Uma outra abordagem para forçar restrição de função monótona, é restringir os parâmetros ajustáveis do modelo.

No caso de resitrções monótonas crescentes, podemos restringir os parâmetros de uma cada da rede neural como sendo sempre positiva e, em seguida, calcular a faixa de valores da camada seguinte que torna a rede monótona.

Essa estratégia é pessimista pois, embora garanta a factibilidade, remove diversos possíveis modelos do espaço de busca.

Sill, Joseph. "Monotonic networks." Advances in neural information processing systems 10 (1997).

No XGBoost podemos restringir para modelos monótonos fazendo com que a cada divisão os limitantes inferiores e superiores são propagados para os nós filhos.

Bartley, Christopher, Wei Liu, and Mark Reynolds. "Enhanced random forest algorithms for partially monotone ordinal classification." Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. Vol. 33. No. 01. 2019.

Monotonic hint

Monotonic hint otimiza um modelo de regressão com um termo de penalização proporcional ao quanto foi violado das restrições.

Os autores utilizam a própria base de treino para avaliar as violações, portanto sendo um método otimista.

A maior vantagem da penalização é que é fácil introduzir diferentes restrições e utilizar diferentes modelos de regressão sem precisar de muitas alterações no algoritmo.

Sill, Joseph, and Yaser Abu-Mostafa. “Monotonicity hints.” Advances in neural information processing systems 9 (1996).

Ajusta os coeficientes de uma Piecewise Linear Neural Network com uma formulação de Mixed-Integer Linear Programming (MILP) para determinar a monotonicidade.

Os coeficientes são ajustados através de uma função de perda com regularização e então o MILP é utilizado para verificar as restrições, caso a rede não seja monótona, o fator de regularização é aumentado e a rede treinada novamente.

Liu, Xingchao, et al. “Certified monotonic neural networks.” Advances in Neural Information Processing Systems 33 (2020): 15427-15438.

Polynomial Regression

A teoria de soma-dos-quadrados (*sum-of-squares* - SOS) permite incorporar restrições de forma em Regressão Polinomial.

A ideia é que um polinômio é não-negativo se puder ser representado como uma soma de polinômios ao quadrado.

Parrilo, Pablo A. Structured semidefinite programs and semialgebraic geometry methods in robustness and optimization. California Institute of Technology, 2000.

Alguns autores utilizam Programação semidefinida para encontrar representações SOS.

Essa abordagem permite encontrar uma solução de forma eficiente. Porém a complexidade aumenta rapidamente com a dimensão do problema e o grau do polinômio.

Papp, Dávid, and Sercan Yildiz. "Sum-of-squares optimization without semidefinite programming." SIAM Journal on Optimization 29.1 (2019): 822-851.

Splines

Cubic smoothing splines é um modelo de regressão com restrições de continuidade nos nós. Vimos esse modelo quando falamos de GAM!

Duas formas de introduzir restrições de forma:

- Proibir coeficientes negativos
- Formular como um problema de Programação Cônica de Segunda-ordem

Porém, só funciona para problemas unidimensionais.

Ramsay, James O. "Monotone regression splines in action." Statistical science (1988): 425-441.
Papp, Dávid, and Farid Alizadeh. "Shape-constrained estimation using nonnegative splines." Journal of Computational and graphical Statistics 23.1 (2014): 211-231.

Em *Lattice Regression* criamos uma grade de dimensão $M_1 \times M_2 \times \ldots M_D$ (geralmente $D = 2$) projetando o espaço de entrada.

Cada dimensão da grade é composta de M_i pontos armazenados em uma tabela hash.

O valor de predição de um certo ponto é estimado interpolando os valores armazenados nessa tabela nos pontos que envolvem essa amostra.

A restrição de monotonicidade é garantida forçando que a interpolação de pontos adjacentes respeitem a restrição desejada.

Foi formulado como um problema de otimização convexa com restrições de desigualdade linear.

É pessimista pois restringe os modelos porém garante a restrição.

Gupta, Maya, et al. "Monotonic calibrated interpolated look-up tables." The Journal of Machine Learning Research 17.1 (2016): 3790-3836.

Kernel Regression

Os autores propuseram uma forma de determinar pontos de dados sintéticos para determinados kernels que são suficientes para avaliar a monotonicidade.

Com isso, eles aplicaram um Second-order Cone Programming para encontrar um modelo que respeita as restrições.

Embora não tenham comentado, é esperado que a quantidade de pontos sintéticos aumentem exponencialmente com a dimensão do problema.

Aubin-Frankowski, Pierre-Cyril, and Zoltán Szabó. "Hard shape-constrained kernel machines." Advances in Neural Information Processing Systems 33 (2020): 384-395.

Counterexample-driven GP usa um SAT-solver para verificar se cada modelo candidato é factível em relação a restrições de simetria procurando por contra-exemplos da restrição desejada.

Błądek, Iwo, and Krzysztof Krawiec. "Solving symbolic regression problems with formal constraints." Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference. 2019.

Outra forma de adaptação da programação genética é o uso de aritmética intervalar para avaliar as restrições. Essas restrições podem ser incorporadas no algoritmo através de:

- Descarte de soluções infactíveis
- Penalização
- Feasible-Infeasible Two Population
- Otimização Multi-objetiva

Kronberger, Gabriel, et al. "Shape-Constrained Symbolic Regression—Improving Extrapolation with Prior Knowledge." Evolutionary computation 30.1 (2022): 75-98.

Next lecture

- Interpretability and Explanation

Acknowledgments