T3.3 Regresión lineal

Índice

1 Modelo

Regresión lineal por mínimos cuadrados: normal condicional para regresión, $y \in \mathbb{R}$,

$$p(y \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) = \mathcal{N}(y \mid w_0 + \boldsymbol{w}^t \boldsymbol{x}, \sigma^2)$$

Notación homogénea o compacta: $\boldsymbol{w}$ absorbe el sesgo w_0

Regresión simple o múltiple: **simple** si la entrada es unidimensional; si no, **múltiple**

1.1 Regresión polinómica simple

Regresión polinómica: $\boldsymbol{x}$ se procesa mediante un **extractor de características polinómico** ϕ

Extractor polinómico simple de grado D: $\boldsymbol{\phi}(x) = [1, x, x^2, \dots, x^D]$

Regresión polinómica simple: para varianza σ^2 fija (regresión homocedástica)

$$p(y \mid x, \boldsymbol{\theta}) = \mathcal{N}(y \mid f(x; \boldsymbol{w}), \sigma^2) \quad \text{con} \quad f(x; \boldsymbol{w}) = \boldsymbol{w}^t \boldsymbol{\phi}(x) = \sum_{d=0}^{D} w_d \, x^d$$

Estimador de Bayes: con pérdida cuadrática, $\ell_2(y - \pi(\boldsymbol{x})) = (y - \pi(\boldsymbol{x}))^2$, es la media a posteriori

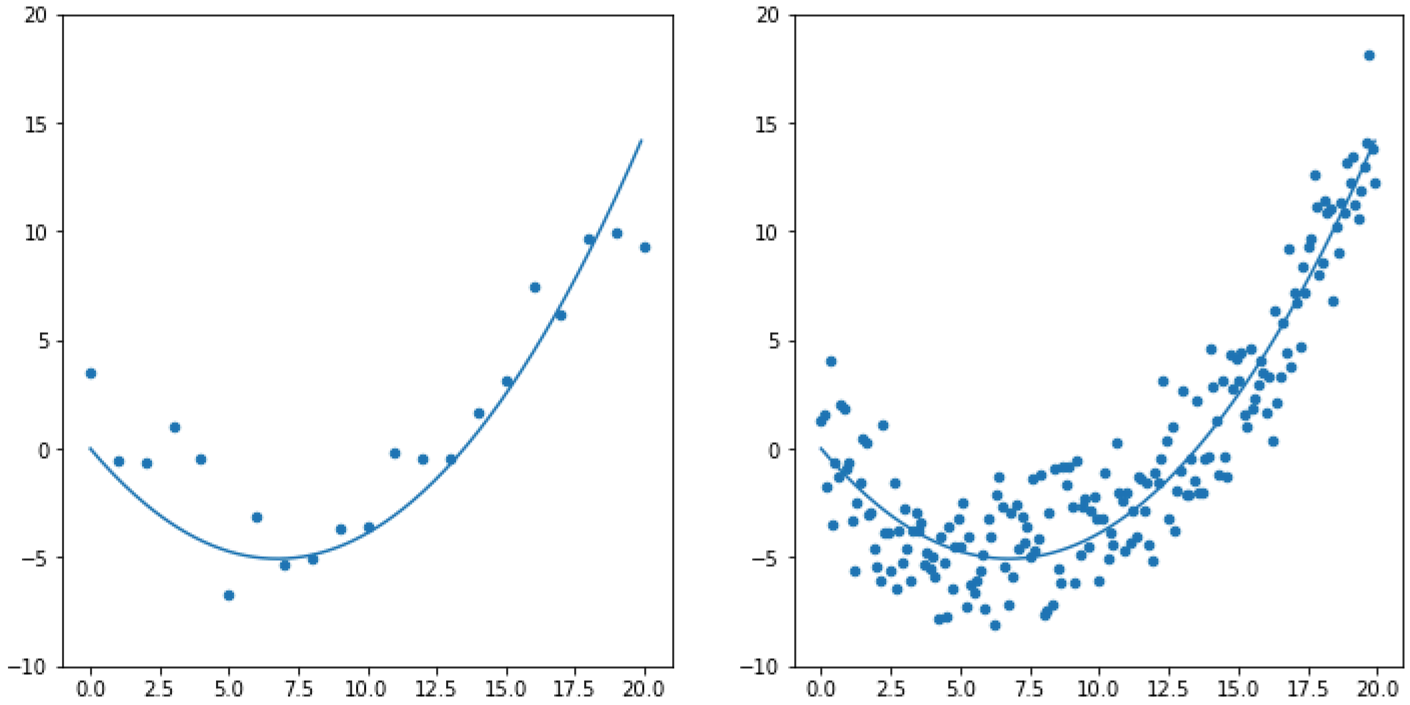
$$\pi^*(\boldsymbol{x}) = \operatorname*{argmin}_{\pi(\boldsymbol{x})} R(y \mid \boldsymbol{x}) = \operatorname*{argmin}_{\pi(\boldsymbol{x})} \mathbb{E}_{p(y \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta})}[(y - \pi(\boldsymbol{x}))^2] = \mathbb{E}[y \mid \boldsymbol{x}] = f(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{w})$$

Riesgo de Bayes teórico ($\boldsymbol{w}$ conocido): es la varianza

$$R^*(y \mid \boldsymbol{x}) = \mathbb{E}_{p(y \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta})}[(y - \pi^*(\boldsymbol{x}))^2] = \mathbb{E}_{p(y \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta})}[(y - f(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{w}))^2] = \sigma^2$$

Ejemplo: $f(x;\boldsymbol{w}) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2$ con $w_0 = 0,\ w_1 = -1.5$ y $w_2 = 1/9;\quad \sigma^2 = 4\,;$ para $x \in [0, 20]$

In [1]:
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
w0 = 0; w1 = -1.5; w2 = 1/9; sigma = 2; N = 21; np.random.seed(0)
X_train = np.linspace(0.0, 20, N); X_test = np.arange(0.0, 20, 0.1)
y_train = w0 + w1 * X_train + w2 * X_train * X_train + np.random.normal(0, sigma, X_train.shape)
y_test = w0 + w1 * X_test + w2 * X_test * X_test + np.random.normal(0, sigma, X_test.shape)
fig, axes = plt.subplots(1, 2, figsize=(12, 6))
axes[0].set_ylim([-10, 20]); axes[0].scatter(X_train, y_train, s=20)
axes[0].plot(X_test, w0 + w1 * X_test + w2 * X_test * X_test)
axes[1].set_ylim([-10, 20]); axes[1].scatter(X_test, y_test, s=20)
axes[1].plot(X_test, w0 + w1 * X_test + w2 * X_test * X_test);
```



2 Estimación máximo-verosímil

Modelo: $p(y \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) = \mathcal{N}(y \mid \mu, \sigma^2)$ con $\mu = \boldsymbol{w}^t\boldsymbol{x}$ y $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{w}, \sigma^2)$

Datos de entrenamiento: N datos $\mathcal{D} = \{(\boldsymbol{x}_n, y_n)\}$

2.1 Estimación por mínimos cuadrados

2.1.1 Objetivo

Neg-log-verosimilitud: de $\boldsymbol{\theta}$ respecto a $\mathcal{D}$

$$\begin{aligned}
\operatorname{NLL}(\boldsymbol{\theta}) &= -\log p(\mathcal{D} \mid \boldsymbol{\theta}) \\
&= -\log \prod_{n=1}^N \mathcal{N}(y_n \mid \hat{y}_n, \sigma^2) && (\hat{y}_n = \boldsymbol{w}^t\boldsymbol{x}_n) \\
&= -\sum_{n=1}^N -\frac{1}{2}\log(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2}(y_n - \hat{y}_n)^2 \\
&= \frac{N}{2}\log(2\pi\sigma^2) + \frac{1}{2\sigma^2}\sum_n (y_n - \hat{y}_n)^2
\end{aligned}$$

Condición necesaria: el MLE de $\boldsymbol{\theta}$, $\hat{\boldsymbol{\theta}}$, debe satisfacer $\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{\theta}} \operatorname{NLL}(\boldsymbol{\theta})|_{\hat{\boldsymbol{\theta}}} = \mathbf{0}$

Minimización en dos pasos: primero $\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{w}} \operatorname{NLL}(\boldsymbol{\theta})|_{\hat{\boldsymbol{\theta}}} = \mathbf{0}$ y luego $\left.\frac{\partial \operatorname{NLL}(\boldsymbol{\theta})}{\partial\sigma^2}\right|_{\hat{\boldsymbol{\theta}}} = 0$

2.1.2 MLE de los pesos de regresión

Suma residual de cuadrados (RSS, residual sum of squares): equivalente a la NLL con respecto a $\boldsymbol{w}$

$$\operatorname{RSS}(\boldsymbol{w})=\frac{1}{2}\sum_n(y_n-\boldsymbol{w}^t\boldsymbol{x}_n)^2=\frac{1}{2}\|\mathbf{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}\|_2^2=\frac{1}{2}(\mathbf{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y})^t(\mathbf{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y})$$

Gradiente de la RSS: $\nabla_{\boldsymbol{w}}\operatorname{RSS}(\boldsymbol{w})=\mathbf{X}^t\mathbf{X}\boldsymbol{w}-\mathbf{X}^t\boldsymbol{y}$

Ecuaciones normales: $\mathbf{X}^t\mathbf{X}\boldsymbol{w}=\mathbf{X}^t\boldsymbol{y}\quad\Leftrightarrow\quad\mathbf{X}^t(\boldsymbol{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{w})=\mathbf{0}$

Ordinary least squares (OLS): $\hat{\boldsymbol{w}}=\mathbf{X}^\dagger\boldsymbol{y}$ donde $\mathbf{X}^\dagger=(\mathbf{X}^t\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^t$ es la pseudoinversa izquierda de $\mathbf{X}$

Calidad de OLS: mínimo global si $\mathbf{X}$ es de rango completo

2.1.3 MLE de la varianza

Error cuadrático medio de los residuos: $\hat{\sigma}^2=\operatorname{argmin}_{\sigma^2}\ \operatorname{NLL}(\hat{\boldsymbol{w}},\sigma^2)=\frac{1}{N}\sum_n(y_n-\hat{\boldsymbol{w}}^t\boldsymbol{x}_n)^2$

2.1.4 Ejemplo

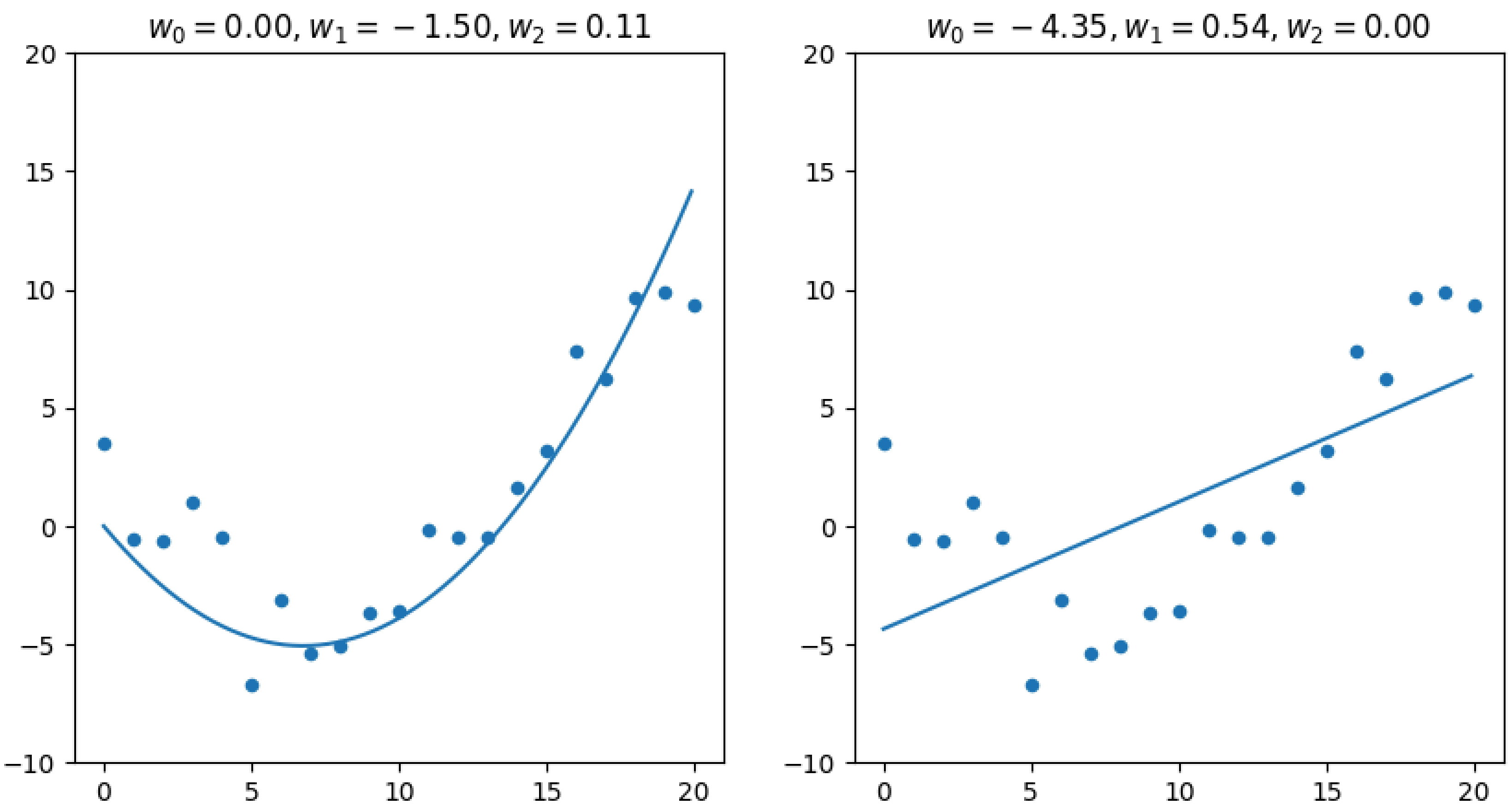
Modelo con $\mu = f(x; \boldsymbol{w}) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2,\ w_0 = 0,\ w_1 = -1.5\ ,\ w_2 = 1/9$ y $\sigma^2 = 4\,;\ x \in [0, 20]$. Generamos N muestras de entrenamiento y 200 de test uniformemente distribuidas.

In [1]:
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
w0 = 0; w1 = -1.5; w2 = 1/9; sigma = 2; N = 21; np.random.seed(0)
X_train = np.linspace(0.0, 20, N); X_test = np.arange(0.0, 20, 0.1)
y_train = w0 + w1 * X_train + w2 * X_train * X_train + np.random.normal(0, sigma, X_train.shape)
y_test = w0 + w1 * X_test + w2 * X_test * X_test + np.random.normal(0, sigma, X_test.shape)
print(X_train.shape, X_test.shape)
```

```
(21,) (200,)
```

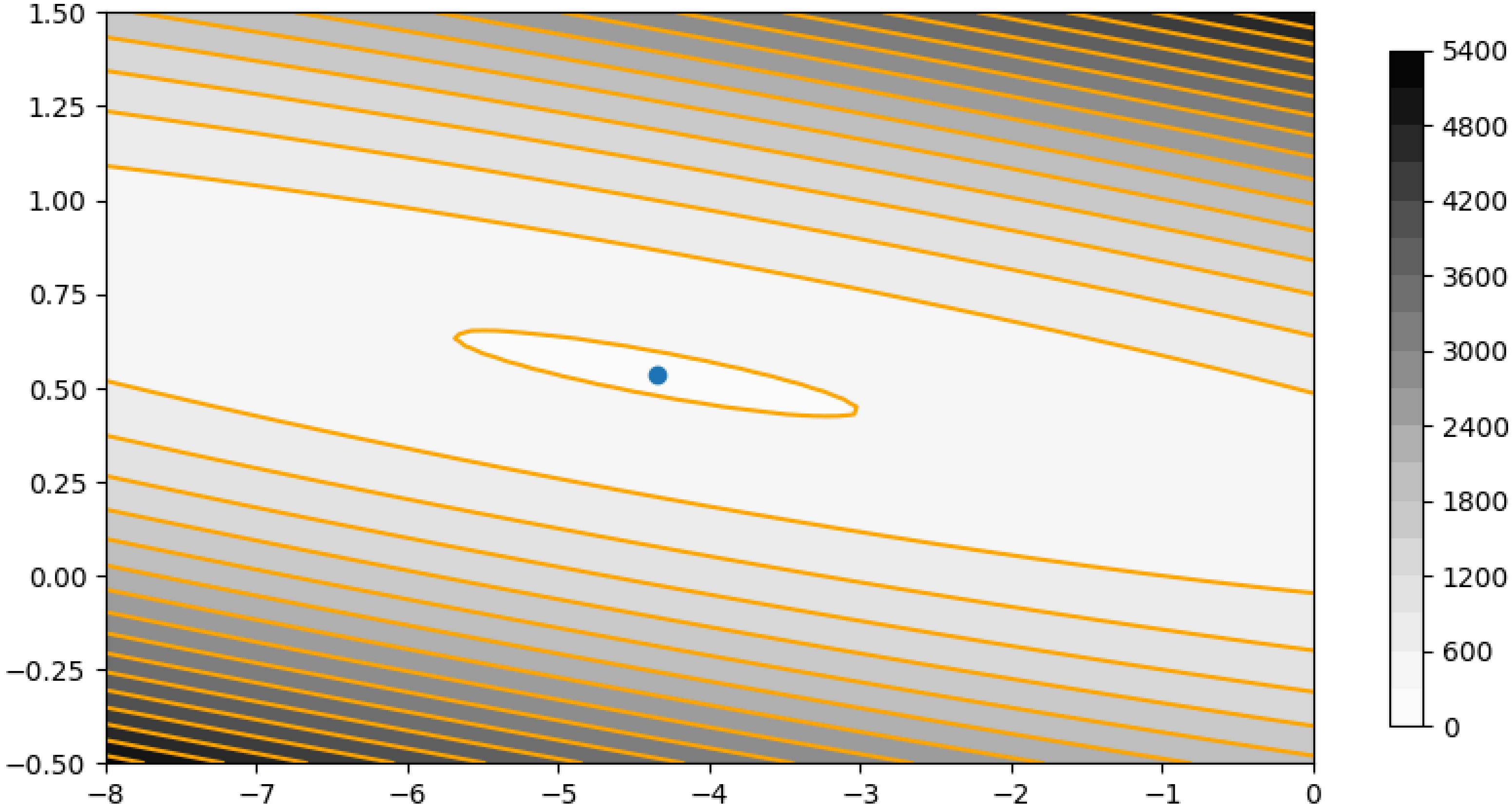
Ajustamos un modelo lineal ($w_2 = 0$) y lo comparamos visualmente con el modelo verdadero (cuadrático).

In [2]:
```
w = np.linalg.lstsq(np.c_[np.ones((N,1)), X_train], y_train, rcond=None)[0]
fig, axes = plt.subplots(1, 2, figsize=(10, 5))
axes[0].set_ylim([-10, 20]); axes[0].scatter(X_train, y_train, s=20)
axes[0].set_title('$w_0={:.2f}, w_1={:.2f}, w_2={:.2f}$'.format(w0, w1, w2))
axes[0].plot(X_test, w0 + w1 * X_test + w2 * X_test * X_test)
axes[1].set_ylim([-10, 20]); axes[1].scatter(X_train, y_train, s=20)
axes[1].set_title('$w_0={:.2f}, w_1={:.2f}, w_2={:.2f}$'.format(w[0], w[1], 0))
axes[1].plot(X_test, w[0] + w[1] * X_test);
```



Veamos que el modelo lineal ajustado minimiza la suma residual de cuadrados:

In [3]:
```
W0, W1 = np.meshgrid(np.linspace(-8, 0, 100), np.linspace(-0.5, 1.5, 100))
WW = np.c_[np.ravel(W0), np.ravel(W1)]
RSS = lambda ww: sum( (ww[0] + ww[1] * X_train - y_train)**2 )
RSSmap = np.apply_along_axis(RSS, 1, WW)
fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(10, 5))
ax.contour(W0, W1, RSSmap.reshape(W0.shape), 16, colors='orange', linestyles='solid')
cp = ax.contourf(W0, W1, RSSmap.reshape(W0.shape), 16, cmap='Greys')
plt.colorbar(cp, ax=ax, shrink=0.9)
plt.scatter(w[0], w[1]);
```



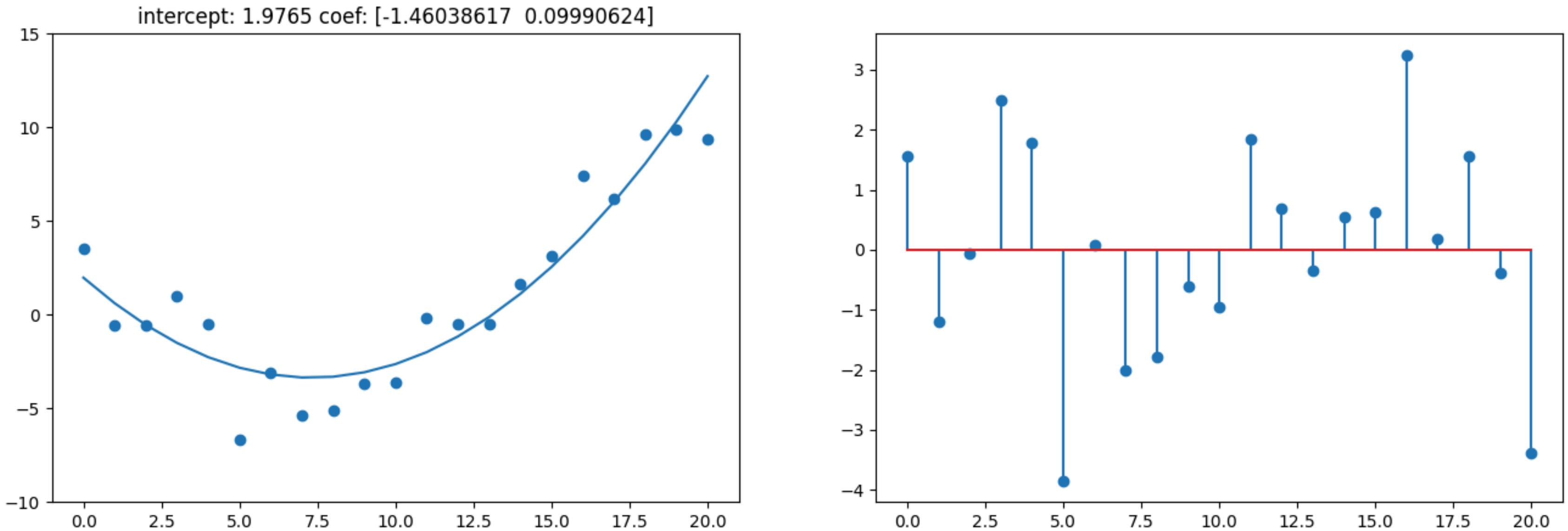
2.2 Evaluación de la bondad del ajuste

In [4]:
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
from sklearn.linear_model import LinearRegression
from sklearn.metrics import r2_score
w0 = 0; w1 = -1.5; w2 = 1/9; sigma = 2; N = 21; np.random.seed(0)
X_train = np.linspace(0.0, 20, N)
y_train = w0 + w1 * X_train + w2 * X_train * X_train + np.random.normal(0, sigma, X_train.shape)
```

2.2.1 Gráfica de residuos

Gráfica de residuos: si la entrada es unidimensional, evaluamos el modelo con $r_n = y_n - \hat{y}_n$ en función de x_n

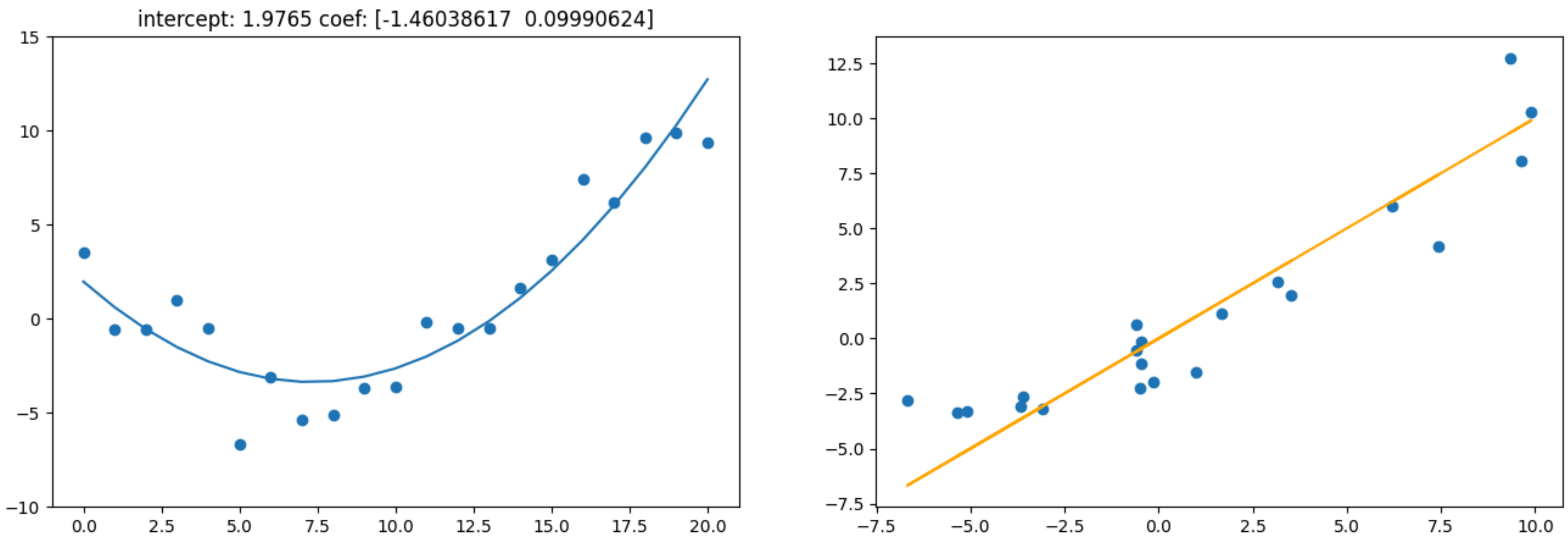
In [5]:
```
degree = 2 # prueba otros valores
poly_features = PolynomialFeatures(degree=degree, include_bias=False)
X_train_poly = poly_features.fit_transform(X_train.reshape(-1, 1))
regr = LinearRegression().fit(X_train_poly, y_train)
y_train_pred = regr.predict(X_train_poly)
fig, axes = plt.subplots(1, 2, figsize=(16, 5))
axes[0].set_ylim([-10, 15]); axes[0].scatter(X_train, y_train)
axes[0].set_title('intercept: {:.4f} coef: {!s:.35s}'.format(regr.intercept_, regr.coef_))
axes[0].plot(X_train, regr.intercept_ + X_train_poly @ regr.coef_)
axes[1].stem(X_train, y_train - y_train_pred);
```



2.2.2 Gráfica $\hat{y}_n$ vs y_n

Gráfica $\hat{y}_n$ vs y_n: si la entrada es multidimensional, evaluamos con $\hat{y}_n$ en función de y_n; mejor cuanto más próxima a la diagonal

In [6]:
```
fig, axes = plt.subplots(1, 2, figsize=(16, 5))
axes[0].set_ylim([-10, 15]); axes[0].scatter(X_train, y_train)
axes[0].set_title('intercept: {:.4f} coef: {!s:.35s}'.format(regr.intercept_, regr.coef_))
axes[0].plot(X_train, regr.intercept_ + X_train_poly @ regr.coef_)
axes[1].plot(y_train, y_train, color='orange')
axes[1].scatter(y_train, y_train_pred);
```



2.2.3 Precisión de la predicción y R^2

Residual sum of squares: medida de calidad obvia

$$\mathrm{RSS}(\boldsymbol{w}) = \sum_n (y_n - \boldsymbol{w}^t \boldsymbol{x}_n)^2$$

Raíz del error cuadrático medio (RMSE): equivalente a RSS

$$\mathrm{RMSE}(\boldsymbol{w}) = \sqrt{\frac{1}{N}\mathrm{RSS}(\boldsymbol{w})}$$

Suma de cuadrados total: suma de errores cuadráticos si siempre se predice la media empírica

$$\mathrm{TSS}(\boldsymbol{w}) = \sum_n (y_n - \bar{y})^2 \quad \text{con} \quad \bar{y} = \frac{1}{N}\sum_n y_n$$

Coeficiente de determinación: varianza de las predicciones en relación con predecir siempre la media empírica

$$R^2 = 1 - \frac{\mathrm{RSS}}{\mathrm{TSS}}$$

Interpretación de R^2: cuanto más próximo a 1 sea, mayor será la reducción de la varianza y mejor el ajuste

In [7]:
```
r2 = r2_score(y_train, y_train_pred)
print('R2 en entrenamiento: {:.4f}'.format(r2))
```

```
R2 en entrenamiento: 0.8713
```