Regresión

Matias Vera - Juan Zuloaga

Centro de Simulación Computacional para Aplicaciones Tecnológicas

Agenda

1. Introducción al problema de regresión
2. Regresión Lineal
3. Gradiente Descendente

Teoría de Regresión

Bases

Objetivo: Predecir el valor de Y a partir del valor de X $\rightarrow \quad \hat{Y} = \varphi(X)$
Función costo: Error cuadrático $\rightarrow \quad \ell(x, y) = (y - \varphi(x))^2$
Riesgo Esperado: MSE $\rightarrow \quad \mathbb{E}[\ell(X, Y)] = \mathbb{E}\left[(Y - \varphi(X))^2\right]$

Teoría de Regresión

Bases

Objetivo: Predecir el valor de Y a partir del valor de X $\rightarrow \quad \hat{Y} = \varphi(X)$
Función costo: Error cuadrático $\rightarrow \quad \ell(x, y) = (y - \varphi(x))^2$
Riesgo Esperado: MSE $\rightarrow \quad \mathbb{E}[\ell(X, Y)] = \mathbb{E}\left[(Y - \varphi(X))^2\right]$

Optimalidad

$$\mathbb{E}\left[(Y - \varphi(X))^2\right] \geq \mathbb{E}\left[\mathrm{var}(Y|X)\right]$$

con igualdad si y solo si $\varphi(x) = \mathbb{E}[Y|X = x]$.
Regresor óptimo: $\varphi(x) = \mathbb{E}[Y|X = x]$
Error Bayesiano: $\mathbb{E}\left[\mathrm{var}(Y|X)\right]$

Reconocimiento de patrones

Objetivo

Quiero buscar $\varphi(\cdot)$ que minimice $\mathbb{E}[\ell(X, Y)]$. Es decir aprender la "esperanza condicional".

Reconocimiento de patrones

Objetivo

Quiero buscar $\varphi(\cdot)$ que minimice $\mathbb{E}[\ell(X, Y)]$. Es decir aprender la "esperanza condicional".

Empirical Risk Minimization (ERM)

Propongo buscar $\varphi(\cdot)$ que minimice el riesgo empírico: $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ell(X_i, Y_i)$

Reconocimiento de patrones

Objetivo

Quiero buscar $\varphi(\cdot)$ que minimice $\mathbb{E}[\ell(X, Y)]$. Es decir aprender la “esperanza condicional”.

Empirical Risk Minimization (ERM)

Propongo buscar $\varphi(\cdot)$ que minimice el riesgo empírico: $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ell(X_i, Y_i)$

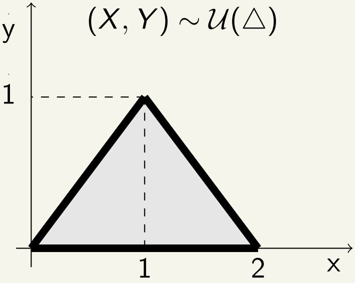
Tradeoff: Sesgo/Varianza

$$\underbrace{\mathbb{E}[\ell(X, Y)]}_{\text{Riesgo esperado}} = \underbrace{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ell(X_i, Y_i)}_{\text{Riesgo empírico}} + \left(\underbrace{\mathbb{E}[\ell(X, Y)] - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ell(X_i, Y_i)}_{\text{Gap de generalización}}\right)$$

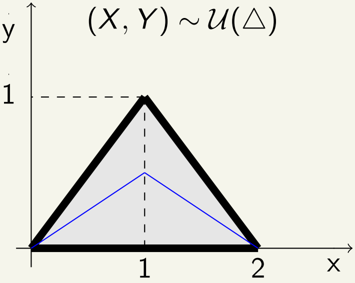
Nota: El riesgo empírico se considera grande o pequeño comparándolo con el error bayesiano.

Overfitting y Underfitting

$(X, Y) \sim \mathcal{U}(\triangle)$



Overfitting y Underfitting

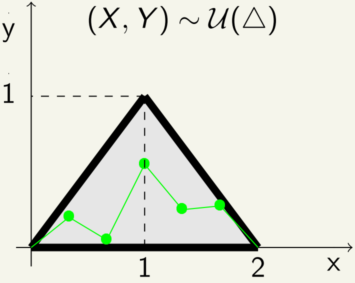


Solución Óptima

- El regresor elegido es efectivamente la esperanza condicional.
- El riesgo esperado alcanza el límite bayesiano

$$\mathbb{E}\left[\mathrm{var}(Y|X)\right] = \frac{1}{24}$$

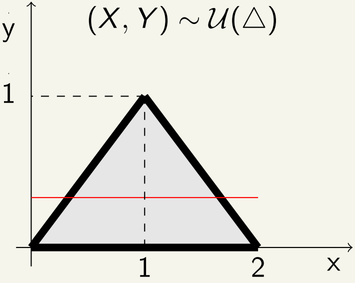
Overfitting y Underfitting



Problema de overfitting

- Riesgo empírico muy bajo (puede ser menor incluso que el bayesiano)
- Se detecta por el alto gap de generalización.
- Exceso de complejidad en el modelado.
- Se dice que el algoritmo tiene un problema de varianza.

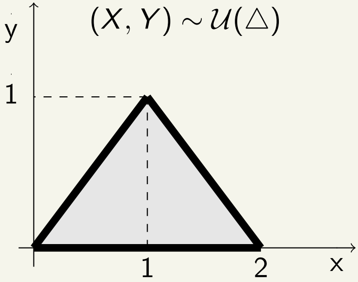
Overfitting y Underfitting

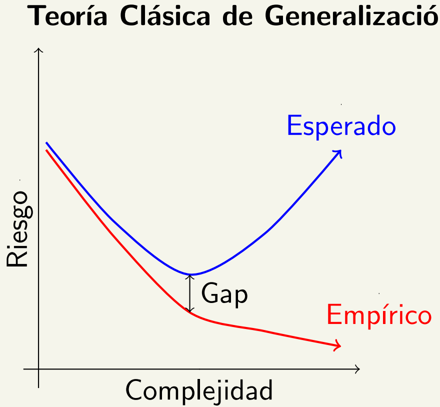


Problema de underfitting

- Suele tener bajo gap de generalización.
- Riesgo empírico muy superior al error bayesiano.
- Escasez de complejidad en el modelado.
- Se dice que el algoritmo tiene un problema de sesgo.

Overfitting y Underfitting





Tarea

Para

$$p_{XY}(x,y) = \frac{3}{4}\mathbb{1}\left\{0 < y < 1 + x^2, 0 < x < 1\right\}$$

1. Calcular y graficar en una misma figura el soporte, la esperanza condicional $\mathbb{E}[Y|X = x]$ y la recta de regresión.
2. Calcular el error bayesiano.

Conjuntos de datos

- Conjunto de entrenamiento (*train set*): Datos utilizados para minimizar el costo. Sobre estos se produce el "aprendizaje". Las variables definidas a partir de este conjunto se llaman parámetros.
- Conjunto de validación (*validation or development set*): Datos utilizados para comparar modelos. Las variables definidas a partir de este conjunto se llaman hiperparámetros.
- Conjunto de testeo (*test set*): Datos utilizados para evaluar la performance final del algoritmo. Su única función es presentar estimadores insesgados de las métricas de error y no es imprescindible.

Si la base de datos esta dividida, respetar la división!

Conjuntos de datos

- Conjunto de entrenamiento (*train set*): Datos utilizados para minimizar el costo. Sobre estos se produce el "aprendizaje". Las variables definidas a partir de este conjunto se llaman parámetros.
- Conjunto de validación (*validation or development set*): Datos utilizados para comparar modelos. Las variables definidas a partir de este conjunto se llaman hiperparámetros.
- Conjunto de testeo (*test set*): Datos utilizados para evaluar la performance final del algoritmo. Su única función es presentar estimadores insesgados de las métricas de error y no es imprescindible.

Si la base de datos esta dividida, respetar la división!

Enfoque clásico: 60%/20%/20% - Típico para $100, 1K, 10K$ muestras.

Conjuntos de datos

- Conjunto de entrenamiento (*train set*): Datos utilizados para minimizar el costo. Sobre estos se produce el "aprendizaje". Las variables definidas a partir de este conjunto se llaman parámetros.
- Conjunto de validación (*validation or development set*): Datos utilizados para comparar modelos. Las variables definidas a partir de este conjunto se llaman hiperparámetros.
- Conjunto de testeo (*test set*): Datos utilizados para evaluar la performance final del algoritmo. Su única función es presentar estimadores insesgados de las métricas de error y no es imprescindible.

Si la base de datos esta dividida, respetar la división!

Enfoque clásico: 60%/20%/20% - Típico para $100, 1K, 10K$ muestras.

Big Data: Para $1M$ muestras, quizás alcanza con 98%/1%/1% (por eso cross-validation o k-flods no es tan frecuente acá).

Regresión Lineal: $\hat{Y} = w^T \cdot X + b$

Idea

Me aseguro mantener acotado el problema de overfitting proponiendo una solución de extremandamente baja complejidad. Si se alcanza bajo error empírico, entonces tengo ciertas garantías de que el algoritmo alcanza un buen desempeño.

Regresión Lineal: $\hat{Y} = w^T \cdot X + b$

Idea

Me aseguro mantener acotado el problema de overfitting proponiendo una solución de extremandamente baja complejidad. Si se alcanza bajo error empírico, entonces tengo ciertas garantías de que el algoritmo alcanza un buen desempeño.

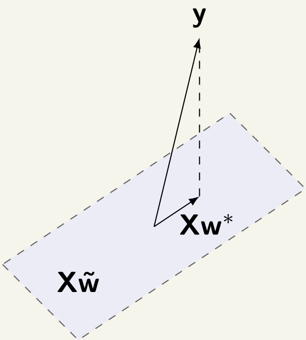
Empirical Risk Minimization

$$(w, b) \in \arg\min_{(w,b)} \sum_{i=1}^{n} (w^T \cdot X_i + b - Y_i)^2$$

$$= \arg\min_{\mathbf{w}} \|\mathbf{X} \cdot \mathbf{w} - \mathbf{y}\|^2,$$

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & X_1^T \\ 1 & X_2^T \\ \vdots & \vdots \\ 1 & X_n^T \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} b \\ w \end{pmatrix}$$

Regresión Lineal

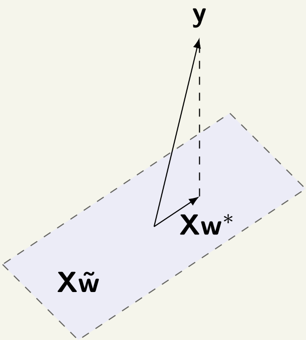


$$(\mathbf{X}\tilde{\mathbf{w}})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}^*) = \mathbf{0} \qquad \forall\ \tilde{\mathbf{w}}$$

$$\Downarrow$$

$$\mathbf{w}^* = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$$

Regresión Lineal



$$(\mathbf{X}\tilde{\mathbf{w}})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}^*) = \mathbf{0} \qquad \forall\ \tilde{\mathbf{w}}$$

$$\Downarrow$$

$$\mathbf{w}^* = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$$

Solución matricial óptima: Recta de Regresión

$$\mathbf{w} = (\underbrace{\mathbf{X}^T\mathbf{X}}_{\text{varianza}})^{-1} \underbrace{\mathbf{X}^T\mathbf{y}}_{\text{covarianza}}$$

Tarea

Derivar respecto a una matriz

Utilizar propiedades sobre las derivadas matriciales para demostrar que $\nabla_{\mathbf{w}} \left(\|\mathbf{X} \cdot \mathbf{w} - \mathbf{y}\|^2 \right) = \mathbf{0}$ tiene como única solución la pseudo inversa $\mathbf{w} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$.

Propiedades

$$\frac{\partial}{\partial x}(x^T a) = a, \qquad \frac{\partial}{\partial x}(x^T B x) = (B + B^T)x$$

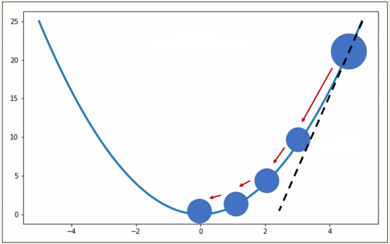
Petersen and Pedersen - "Matrix Cookbook".

Gradiente Descendente

Problema a resolver: $\min_{\theta \in \Theta} J(\theta)$.

Solución:

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \alpha \nabla J(\theta_t)$$



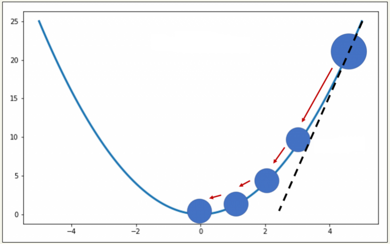
Cauchy 1847: "Méthode générale pour la résolution de systèmes d'équations simultanées".

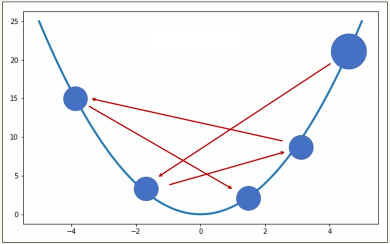
Gradiente Descendente

Problema a resolver: $\min_{\theta \in \Theta} J(\theta)$.

Solución:

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \alpha \nabla J(\theta_t)$$





- Si α es chico la convergencia es lenta.
- Si α es grande puede no converger.

Cauchy 1847: "Méthode générale pour la résolution de systèmes d'équations simultanées".

Convergencia del modelo lineal

Modelo

- $J(\mathbf{w}) = \frac{1}{n}\|\mathbf{X} \cdot \mathbf{w} - \mathbf{y}\|^2$.
- $\nabla J(\mathbf{w}) = \frac{2}{n}\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{w} - \frac{2}{n}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$.
- $\mathbf{w}^* = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$.
- $\mathbf{w}_{t+1} = \mathbf{w}_t - \alpha\nabla J(\mathbf{w}_t)$.

Convergencia del modelo lineal

Modelo

- $J(\mathbf{w}) = \frac{1}{n}\|\mathbf{X}\cdot\mathbf{w} - \mathbf{y}\|^2$.
- $\nabla J(\mathbf{w}) = \frac{2}{n}\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{w} - \frac{2}{n}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$.
- $\mathbf{w}^* = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$.
- $\mathbf{w}_{t+1} = \mathbf{w}_t - \alpha\nabla J(\mathbf{w}_t)$.

$$\begin{aligned}
\mathbf{w}_{t+1} - \mathbf{w}^* &= \mathbf{w}_t - \mathbf{w}^* - \frac{2\alpha}{n}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{X}^T\mathbf{y}\right) \\
&= \left(I - \frac{2\alpha}{n}\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)(\mathbf{w}_t - \mathbf{w}^*)
\end{aligned}$$

Convergencia del modelo lineal

Modelo

- $J(\mathbf{w}) = \frac{1}{n}\|\mathbf{X}\cdot\mathbf{w} - \mathbf{y}\|^2$.
- $\nabla J(\mathbf{w}) = \frac{2}{n}\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{w} - \frac{2}{n}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$.
- $\mathbf{w}^* = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$.
- $\mathbf{w}_{t+1} = \mathbf{w}_t - \alpha\nabla J(\mathbf{w}_t)$.

$$\begin{aligned}
\mathbf{w}_{t+1} - \mathbf{w}^* &= \mathbf{w}_t - \mathbf{w}^* - \frac{2\alpha}{n}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{X}^T\mathbf{y}\right) \\
&= \left(I - \frac{2\alpha}{n}\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)(\mathbf{w}_t - \mathbf{w}^*)
\end{aligned}$$

Diagonalización ortogonal

Toda matriz real, cuadrada y simétrica puede escribirse como $A = Q^T\Lambda Q$ con Λ diagonal y $Q^TQ = QQ^T = I$.

Convergencia del modelo lineal

Sean Q y Λ las matrices correspondientes a la diagonalización ortogonal de $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$:

$$\begin{aligned}
\mathbf{w}_{t+1} - \mathbf{w}^* &= \left(I - \frac{2\alpha}{n} Q^T \Lambda Q\right) (\mathbf{w}_t - \mathbf{w}^*) \\
&= Q^T \left(I - \frac{2\alpha}{n} \Lambda\right) Q \left(\mathbf{w}_t - \mathbf{w}^*\right)
\end{aligned}$$

Convergencia del modelo lineal

Sean Q y Λ las matrices correspondientes a la diagonalización ortogonal de $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$:

$$\begin{aligned}\mathbf{w}_{t+1} - \mathbf{w}^* &= \left(I - \frac{2\alpha}{n} Q^T \Lambda Q\right)(\mathbf{w}_t - \mathbf{w}^*) \\ &= Q^T \left(I - \frac{2\alpha}{n}\Lambda\right) Q\,(\mathbf{w}_t - \mathbf{w}^*)\end{aligned}$$

Defino $v_t = Q\,(\mathbf{w}_t - \mathbf{w}^*)$, luego:

$$v_{t+1} = \left(I - \frac{2\alpha}{n}\Lambda\right) v_t,$$

Convergencia del modelo lineal

Sean Q y Λ las matrices correspondientes a la diagonalización ortogonal de $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$:

$$\begin{aligned}\mathbf{w}_{t+1} - \mathbf{w}^* &= \left(I - \frac{2\alpha}{n} Q^T \Lambda Q\right)(\mathbf{w}_t - \mathbf{w}^*) \\ &= Q^T \left(I - \frac{2\alpha}{n}\Lambda\right) Q\,(\mathbf{w}_t - \mathbf{w}^*)\end{aligned}$$

Defino $v_t = Q\,(\mathbf{w}_t - \mathbf{w}^*)$, luego:

$$v_{t+1} = \left(I - \frac{2\alpha}{n}\Lambda\right) v_t, \qquad v_t = \left(I - \frac{2\alpha}{n}\Lambda\right)^t v_0$$

Convergencia del modelo lineal

Sean Q y Λ las matrices correspondientes a la diagonalización ortogonal de $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$:

$$\begin{aligned}\mathbf{w}_{t+1} - \mathbf{w}^* &= \left(I - \frac{2\alpha}{n} Q^T \Lambda Q\right)(\mathbf{w}_t - \mathbf{w}^*) \\ &= Q^T \left(I - \frac{2\alpha}{n}\Lambda\right) Q\,(\mathbf{w}_t - \mathbf{w}^*)\end{aligned}$$

Defino $v_t = Q\,(\mathbf{w}_t - \mathbf{w}^*)$, luego:

$$v_{t+1} = \left(I - \frac{2\alpha}{n}\Lambda\right) v_t, \qquad v_t = \left(I - \frac{2\alpha}{n}\Lambda\right)^t v_0$$

Condición y velocidad de convergencia

El GD convergerá si $|1 - \frac{2\alpha}{n}\lambda_j| < 1$ para todo $j = \{1, \cdots, d_x + 1\}$ y el learning rate óptimo estará asociado al criterio de peor caso:

$$\min_{\alpha} \max_{j} \left|1 - \frac{2\alpha}{n}\lambda_j\right| \quad \text{s.t.} \quad \left|1 - \frac{2\alpha}{n}\lambda_j\right| < 1 \quad \forall\, j$$

Convergencia del modelo lineal

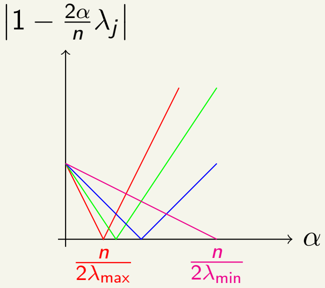
Condición de convergencia

$\left|1 - \frac{2\alpha}{n}\lambda_j\right| < 1$ para todo $j = \{1, \cdots, d_x + 1\}$ equivale a pedir $\alpha < \frac{n}{\lambda_{\mathrm{max}}}$.

Convergencia del modelo lineal

Condición de convergencia

$\left|1 - \frac{2\alpha}{n}\lambda_j\right| < 1$ para todo $j = \{1, \cdots, d_x + 1\}$ equivale a pedir $\alpha < \frac{n}{\lambda_{\max}}$.



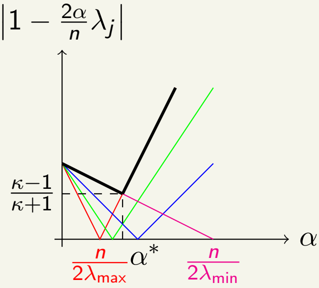
Velocidad de convergencia

El óptimo learning rate en este caso es $\alpha^* = \frac{n}{\lambda_{\max}+\lambda_{\min}}$ y su velocidad asociada $\left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right)^t$ depende del número de condición $\kappa = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$.

Convergencia del modelo lineal

Condición de convergencia

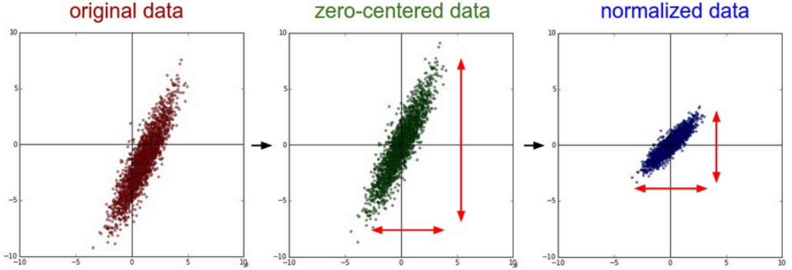
$\left|1 - \frac{2\alpha}{n}\lambda_j\right| < 1$ para todo $j = \{1, \cdots, d_x + 1\}$ equivale a pedir $\alpha < \frac{n}{\lambda_{\max}}$.



Velocidad de convergencia

El óptimo learning rate en este caso es $\alpha^* = \frac{n}{\lambda_{\max}+\lambda_{\min}}$ y su velocidad asociada $\left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right)^t$ depende del número de condición $\kappa = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$.

Normalización de la entrada



Normalizar *cada componente* de la entrada tiene sus beneficios:

$$(\mathbf{x})_k \leftarrow \frac{(\mathbf{x})_k - \mu_k}{\sigma_k}$$

donde las μ_k y σ_k son calculadas previo al entrenamiento (para validación y testeo se usan las mismas) como:

$$\mu_k = \frac{1}{n_{\text{tr}}} \sum_{i=1}^{n_{\text{tr}}} (\mathbf{x}_i)_k, \qquad \sigma_k = \sqrt{\frac{1}{n_{\text{tr}}} \sum_{i=1}^{n_{\text{tr}}} [(\mathbf{x}_i)_k - \mu_k]^2}$$

Normalización de la entrada

Me permite usar learning rates más grandes!