# Regresión

**Taller de Procesamiento de Señales**

# Agenda

1. Introducción al problema de regresión
2. Regresión Lineal
3. Regresión Polinómica

# Teoría de Regresión

## Bases

**Objetivo:** Predecir el valor de $Y$ a partir 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 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)

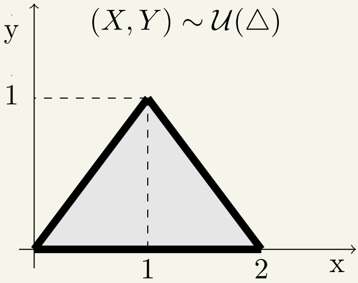
Propongo buscar $\varphi(\cdot)$ que minimice el riesgo empírico: $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ell(X_i,Y_i)$

## Tradeoff: Sesgo/Varianza

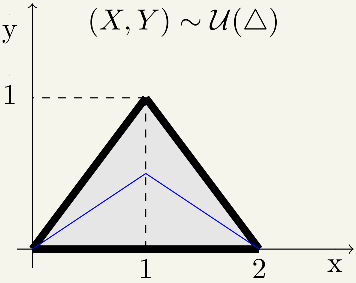
$$\underbrace{\mathbb{E}[\ell(X,Y)]}_{\text{Riesgo esperado}} = \underbrace{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ell(X_i,Y_i)}_{\text{Riesgo empírico}} + \left(\underbrace{\mathbb{E}[\ell(X,Y)] - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ell(X_i,Y_i)}_{\text{Gap de generalización}}\right)$$

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

# Overfitting y Underfitting



# Overfitting y Underfitting

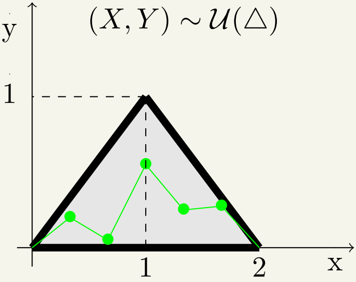



**Solución Óptima**

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

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

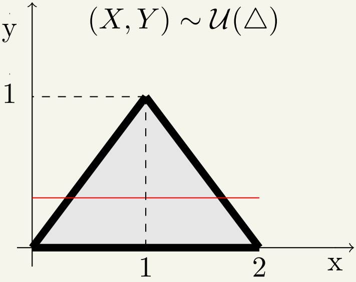
# Overfitting y Underfitting




**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.

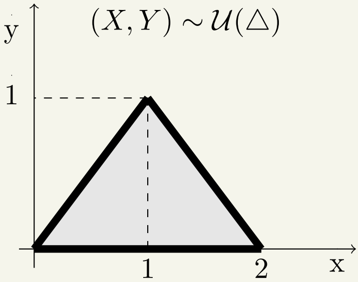
# Overfitting y Underfitting



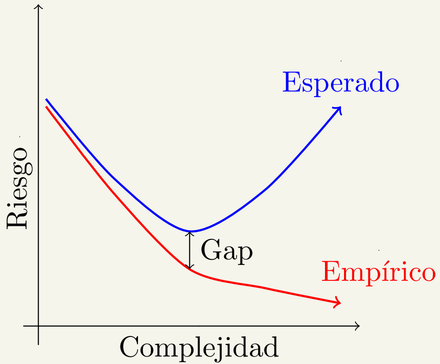

**Problema de underfitting**

- 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




**Teoría Clásica de Generalización**



# 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

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

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

## Empirical Risk Minimization

$$(w, b) \in \arg\min_{\mathbf{w}} \|\mathbf{X} \cdot \mathbf{w} - \mathbf{y}\|^2,$$

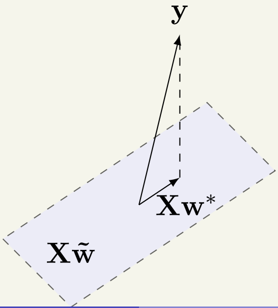
$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & X_1^T \\ 1 & X_2^T \\ \vdots & \vdots \\ 1 & X_n^T \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} b \\ w \end{pmatrix}$$

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

## Empirical Risk Minimization

$$(w, b) \in \arg\min_{\mathbf{w}} \|\mathbf{X} \cdot \mathbf{w} - \mathbf{y}\|^2,$$

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



# Regresión Lineal

## Solución matricial óptima: Recta de Regresión

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

*Petersen and Pedersen* - “Matrix Cookbook”.

# Regresión Lineal

## Solución matricial óptima: Recta de Regresión

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

## Derivadas Matriciales

$$\nabla(\mathbf{x}^T\mathbf{a}) = \nabla(\mathbf{a}^T\mathbf{x}) = \mathbf{a}$$
$$\nabla(\mathbf{x}^T\mathbf{B}\mathbf{x}) = (\mathbf{B} + \mathbf{B}^T)\mathbf{x}$$
$$\mathcal{H}(\mathbf{x}^T\mathbf{B}\mathbf{x}) = \mathbf{B} + \mathbf{B}^T$$

**¿Cual es el gradiente de $J(\mathbf{w}) = \frac{1}{n}\|\mathbf{X}\cdot\mathbf{w} - \mathbf{y}\|^2$?**

---

*Petersen and Pedersen* - “Matrix Cookbook”.

# Regresión Lineal

## Solución matricial óptima: Recta de Regresión

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

## Derivadas Matriciales

$$\nabla(\mathbf{x}^T\mathbf{a}) = \nabla(\mathbf{a}^T\mathbf{x}) = \mathbf{a}$$
$$\nabla(\mathbf{x}^T\mathbf{B}\mathbf{x}) = (\mathbf{B} + \mathbf{B}^T)\mathbf{x}$$
$$\mathcal{H}(\mathbf{x}^T\mathbf{B}\mathbf{x}) = \mathbf{B} + \mathbf{B}^T$$

**¿Cual es el gradiente de $J(\mathbf{w}) = \frac{1}{n}\|\mathbf{X}\cdot\mathbf{w} - \mathbf{y}\|^2$?**

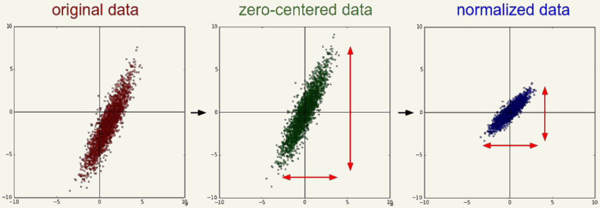
## Optimización convexa

El problema de regresión lineal es un problema convexo.

---

*Petersen and Pedersen* - "Matrix Cookbook".

# Normalización de la entrada




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

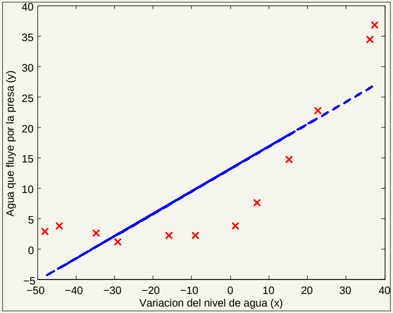
$$(\mathbf{x})_k \leftarrow \frac{(\mathbf{x})_k - \mu_k}{\sigma_k}$$

donde las $\mu_k$ y $\sigma_k$ son calculadas previo al entrenamiento como:

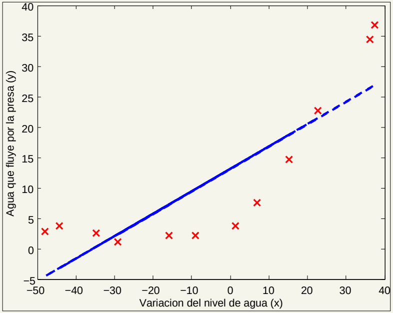
$$\mu_k = \frac{1}{n_{\text{tr}}} \sum_{i=1}^{n_{\text{tr}}} (\mathbf{x}_i)_k, \qquad \sigma_k = \sqrt{\frac{1}{n_{\text{tr}}} \sum_{i=1}^{n_{\text{tr}}} \left[(\mathbf{x}_i)_k - \mu_k\right]^2}$$

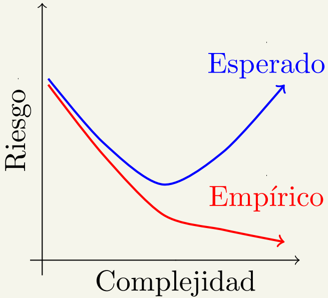
# Outline

# ¿Y si la complejidad lineal no alcanza?



# ¿Y si la complejidad lineal no alcanza?

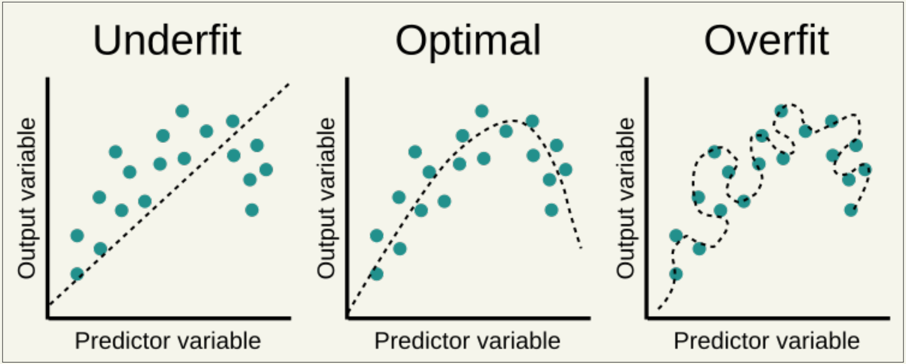



## Regresión Polinómica

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & X_{1,1} & X_{1,2} & X_{1,1}^2 & X_{1,2}^2 & X_{1,1}X_{1,2} \\ 1 & X_{2,1} & X_{2,2} & X_{2,1}^2 & X_{2,2}^2 & X_{2,1}X_{2,2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & X_{n,1} & X_{n,2} & X_{n,1}^2 & X_{n,2}^2 & X_{n,1}X_{n,2} \end{pmatrix}$$

# Compromiso Sesgo/Varianza




**Si no puedo confiar en los datos de entrenamiento ¿Como procedo?**

# 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 (o definidas previas al entrenamiento) 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 $1K, 10K$ muestras.

**Big Data:** Para $1M$ muestras, quizás alcanza con 98%/1%/1%.

# Atacar el punto débil

¿Que conviene corregir? ¿Sesgo o varianza?

- **Avoidable bias**: Error de train - Error bayesiano
- **Generalization Gap**: Error de validación - Error de train

# Atacar el punto débil

¿Que conviene corregir? ¿Sesgo o varianza?

- **Avoidable bias**: Error de train - Error bayesiano
- **Generalization Gap**: Error de validación - Error de train

## Técnica Clásica de Regularización

Se agrega un término de penalización que perturba la optimización de la función costo:

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_i(\theta) + \lambda R(\theta)$$

# Atacar el punto débil

¿Que conviene corregir? ¿Sesgo o varianza?

- **Avoidable bias**: Error de train - Error bayesiano
- **Generalization Gap**: Error de validación - Error de train

## Técnica Clásica de Regularización

Se agrega un término de penalización que perturba la optimización de la función costo:

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_i(\theta) + \lambda R(\theta)$$

## Motivación: Error de generalización

El regularizador trata ser representativo del error de generalización:

$$\mathbb{E}[L(\theta)] = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_i(\theta) + \left(\mathbb{E}[L(\theta)] - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_i(\theta)\right)$$

# Regresión Lineal Regularizada

## Weight decay or L2 regularization

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_i(\theta) + \frac{\lambda}{2n}\|\mathbf{w}\|^2 \rightarrow \frac{1}{2}\frac{\partial\|\mathbf{w}\|^2}{\partial\mathbf{w}} = \mathbf{w}$$

# Regresión Lineal Regularizada

## Weight decay or L2 regularization

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_i(\theta) + \frac{\lambda}{2n}\|\mathbf{w}\|^2 \to \frac{1}{2}\frac{\partial\|\mathbf{w}\|^2}{\partial\mathbf{w}} = \mathbf{w}$$

## Interpretación 1: Apagar parámetros

$w_j \approx 0$ simplifica la complejidad del modelo.

# Regresión Lineal Regularizada

## Weight decay or L2 regularization

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_i(\theta) + \frac{\lambda}{2n}\|\mathbf{w}\|^2 \to \frac{1}{2}\frac{\partial\|\mathbf{w}\|^2}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{w}$$

## Interpretación 1: Apagar parámetros

$w_j \approx 0$ simplifica la complejidad del modelo.

## Interpretación 2: Disminuir el máximo valor de la función costo

$$\mathbb{E}[L(\theta)] - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_i(\theta) \leq \max_{\phi\in\Theta} L(\phi)$$

# Validación: ¿Como elijo el $\lambda$?

## Set de Validación

Si tengo una buena cantidad de datos de validación, elijo el $\lambda$ con menor error de validación.

# Validación: ¿Como elijo el $\lambda$?

### Set de Validación

Si tengo una buena cantidad de datos de validación, elijo el $\lambda$ con menor error de validación.

### Leave-one-out cross-validation (LOOCV)

Si tengo pocos datos no puedo tener un conjunto de datos de validación suficientemente rico. Entonces entreno con todas las muestras menos una y valido con la última. Luego repito esto con cada muestra y promedio.

# Validación: ¿Como elijo el $\lambda$?

## Set de Validación

Si tengo una buena cantidad de datos de validación, elijo el $\lambda$ con menor error de validación.

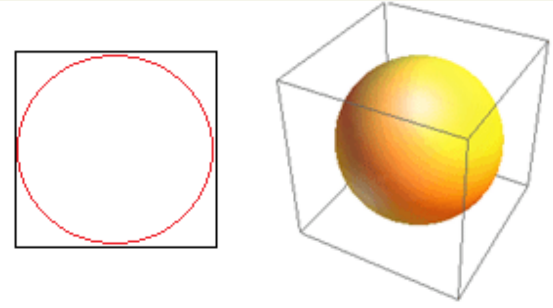
## Leave-one-out cross-validation (LOOCV)

Si tengo pocos datos no puedo tener un conjunto de datos de validación suficientemente rico. Entonces entreno con todas las muestras menos una y valido con la última. Luego repito esto con cada muestra y promedio.

## K-Fold

Separo en $K$ subgrupos de $\frac{n}{k}$ muestras cada uno. Entreno con $K-1$ grupos y testeo con el último. Luego repito esto con cada grupo y promedio.

# La maldición de la dimensionalidad



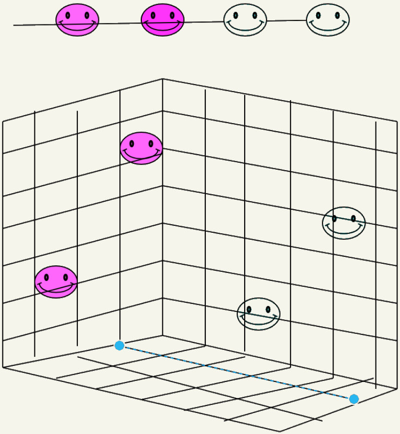
- 2d: $\frac{\pi r^2}{(2r)^2} \approx 78.5\%$
- 3d: $\frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{(2r)^3} \approx 52.3\%$
- 10d: $\frac{\frac{r^{10}}{5!}\pi^5}{(2r)^{10}} \approx 0.25\%$

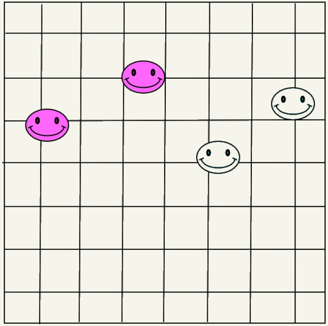
En grandes dimensiones:

- Los puntos están muy lejos.
- Las estructuras son muy sparce.
- La distancia euclidea no es buena métrica.
- La "necesidad" de muestras crece exponencialmente con la dimensión.

# La maldición de la dimensionalidad

La maldición aplica a los hiperparámetros

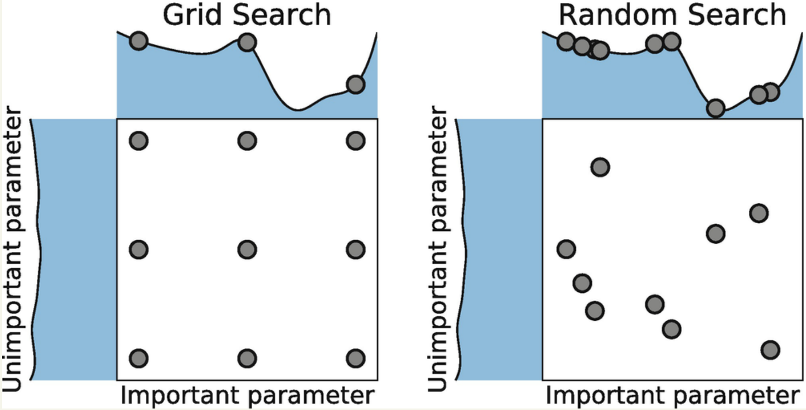




**La necesidad de pruebas crece exponencialmente con la cantidad de hiperparámetros!**

# Búsqueda aleatoria

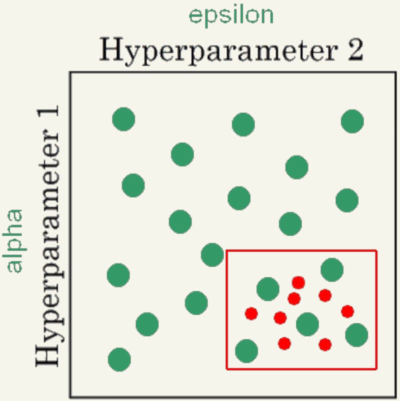
No todos los hiperparámetros son igual de importantes (ej. $\alpha$ y $\epsilon$)




Random search nos permite variar muchas veces todos los parámetros.

# Búsqueda aleatoria

Hacerlo por etapas permite aprovechar más las simulaciones.




Simulo unos pocos puntos, veo donde está andando mejor y vuelvo a simular dentro de ese entorno.