

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 $X \rightarrow \hat{Y} = \varphi(X)$

Función costo: Error cuadrático $\rightarrow \ell(x, y) = (y - \varphi(x))^2$

Riesgo Esperado: MSE $\rightarrow \mathbb{E}[\ell(X, Y)] = \mathbb{E}[(Y - \varphi(X))^2]$

Teoría de Regresión

Bases

Objetivo: Predecir el valor de Y a partir de $X \rightarrow \hat{Y} = \varphi(X)$

Función costo: Error cuadrático $\rightarrow \ell(x, y) = (y - \varphi(x))^2$

Riesgo Esperado: MSE $\rightarrow \mathbb{E}[\ell(X, Y)] = \mathbb{E}[(Y - \varphi(X))^2]$

Optimalidad

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

con igualdad si y solo si $\varphi(x) = \mathbb{E}[Y|X = x]$.

Regresor óptimo: $\varphi(x) = \mathbb{E}[Y|X = x]$

Error Bayesiano: $\mathbb{E}[\text{var}(Y|X)]$

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)

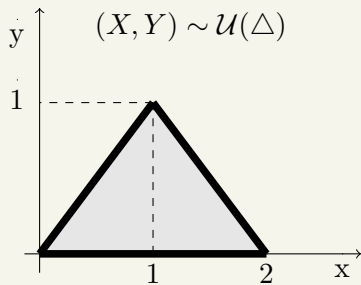
Propongo buscar $\varphi(\cdot)$ que minimice el riesgo empírico: $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell(X_i, Y_i)$

Tradeoff: Sesgo/Varianza

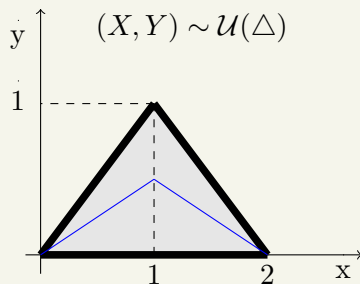
$$\underbrace{\mathbb{E}[\ell(X, Y)]}_{\text{Riesgo esperado}} = \underbrace{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell(X_i, Y_i)}_{\text{Riesgo empírico}} + \underbrace{\left(\mathbb{E}[\ell(X, Y)] - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell(X_i, Y_i) \right)}_{\text{Gap de generalización}}$$

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

Overfitting y Underfitting



Overfitting y Underfitting

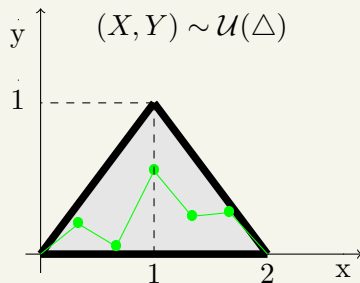


Solución Óptima

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

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

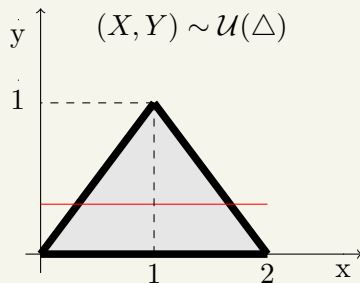
Overfitting y Underfitting



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.

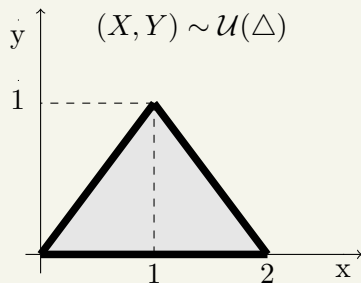
Overfitting y Underfitting



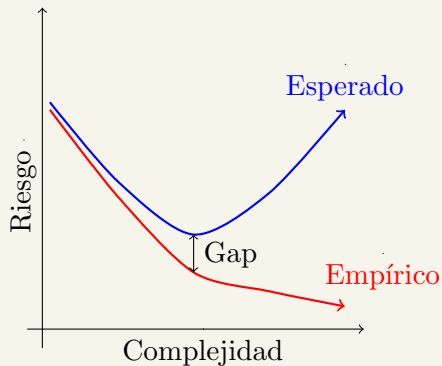
Problema de underfitting

- 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 extremadamente 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 extremadamente 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

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

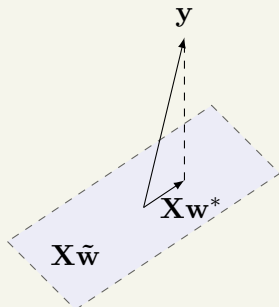
$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & X_1^T \\ 1 & X_2^T \\ \vdots & \vdots \\ 1 & X_n^T \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} b \\ w \end{pmatrix}$$

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

Empirical Risk Minimization

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

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



$$\mathbf{w}^* = \mathbf{X}^\dagger \mathbf{y}$$

Regresión Lineal

Solución matricial óptima: Recta de Regresión

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

Regresión Lineal

Solución matricial óptima: Recta de Regresión

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

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 $J(\mathbf{w}) = \frac{1}{n} \|\mathbf{X} \cdot \mathbf{w} - \mathbf{y}\|^2$?

Regresión Lineal

Solución matricial óptima: Recta de Regresión

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

Derivadas Matriciales

$$\nabla(\mathbf{x}^T \mathbf{a}) = \nabla(\mathbf{a}^T \mathbf{x}) = \mathbf{a}$$

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

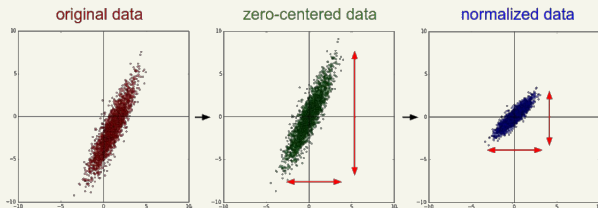
$$\mathcal{H}(\mathbf{x}^T \mathbf{B} \mathbf{x}) = \mathbf{B} + \mathbf{B}^T$$

¿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.

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 como:

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

¿Cuándo y por qué normalizar?

Normalizar sí!

- Cuando quiero comparar magnitudes que por sí solas no lo son.
- Cuando quiero corregir problemas de convergencia de los algoritmos.
- Cuando el algoritmo a utilizar, necesita la hipótesis de entradas normalizadas en su génesis.

Normalizar no!

Normalizar por las dudas o por costumbre es una mala práctica.

¿Cuándo y por qué normalizar?

Normalizar si!

- Cuando quiero comparar magnitudes que por sí solas no lo son.
- Cuando quiero corregir problemas de convergencia de los algoritmos.
- Cuando el algoritmo a utilizar, necesita la hipótesis de entradas normalizadas en su génesis.

Normalizar no!

Normalizar por las dudas o por costumbre es una mala práctica.

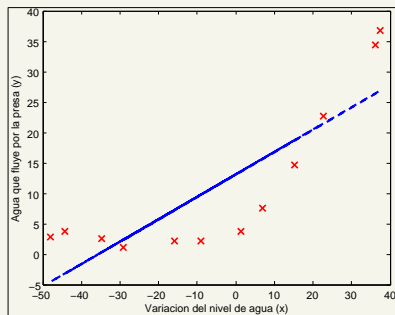
¿Y si alguna varianza da cero?

Si algún $\sigma_k = 0$, significa que esa componente de la entrada es constante a lo largo de todo el conjunto de datos, y por lo tanto puede excluirse del análisis.

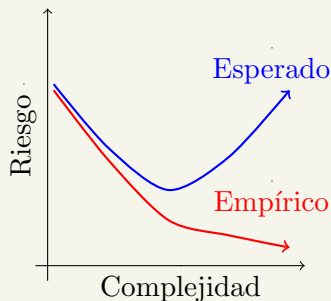
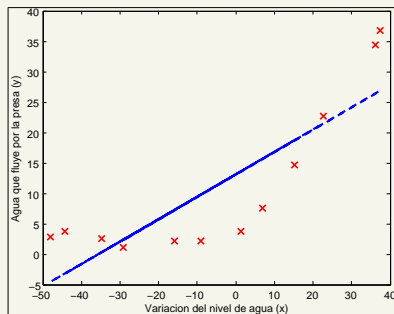
Outline

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

¿Y si la complejidad lineal no alcanza?



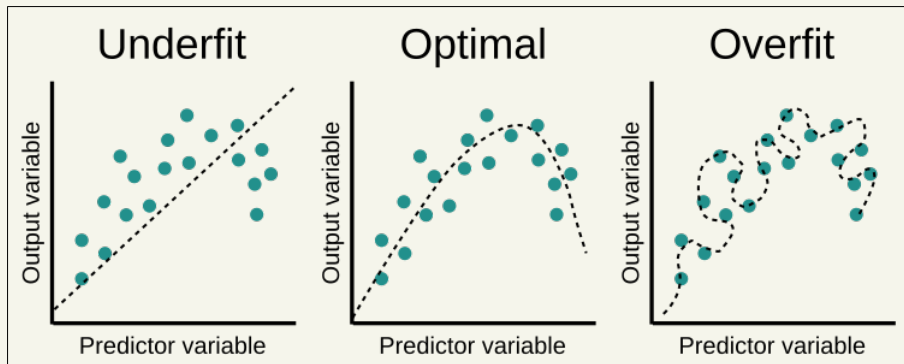
¿Y si la complejidad lineal no alcanza?



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 riesgo empírico. 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 del riesgo empírico:

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

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 del riesgo empírico:

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

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

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

Regresión Lineal Regularizada

Weight decay or L2 regularization

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

Interpretación 1: Apagar parámetros

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

Regresión Lineal Regularizada

Weight decay or L2 regularization

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

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 λ ?

Set de Validación

Si tengo una buena cantidad de datos de validación, elijo el λ con menor error de validación.

Validación: ¿Como elijo el λ ?

Set de Validación

Si tengo una buena cantidad de datos de validación, elijo el λ 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 λ ?

Set de Validación

Si tengo una buena cantidad de datos de validación, elijo el λ con menor error de validación.

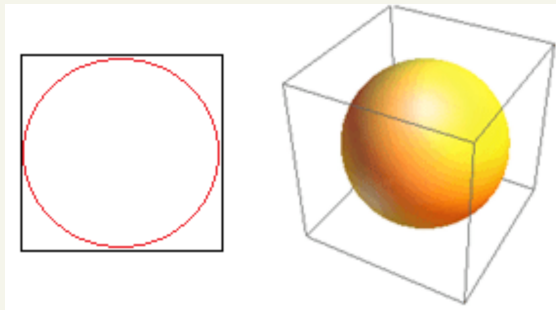
Leave-one-out cross-validation (LOOCV)

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



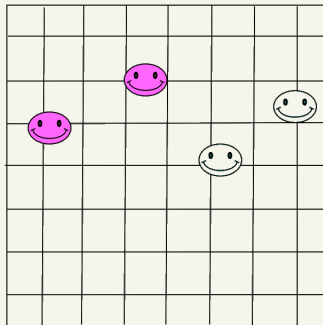
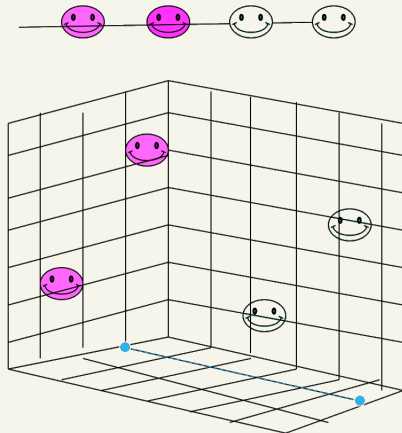
- 2d: $\frac{\pi r^2}{(2r)^2} \approx 78.5\%$
- 3d: $\frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{(2r)^3} \approx 52.3\%$
- 10d: $\frac{\frac{r^{10}}{5!}\pi^5}{(2r)^{10}} \approx 0.25\%$

En grandes dimensiones:

- Los puntos están muy lejos.
- Las estructuras son muy sparse.
- La distancia euclídea no es buena métrica.
- La “necesidad” de muestras crece exponencialmente con la dimensión.

La maldición de la dimensionalidad

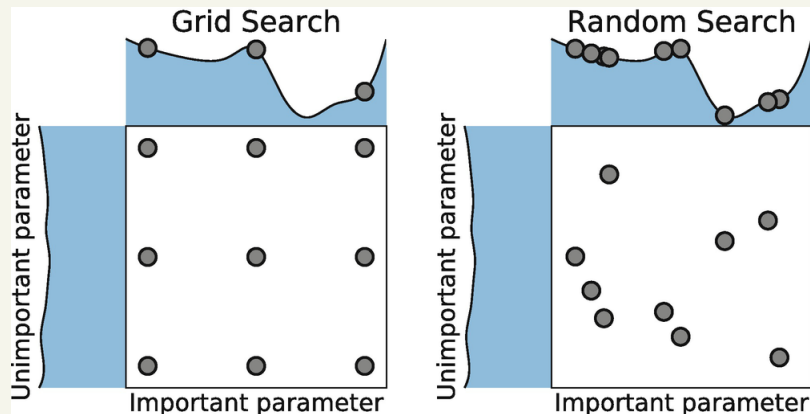
La maldición aplica a los hiperparámetros



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

Búsqueda aleatoria

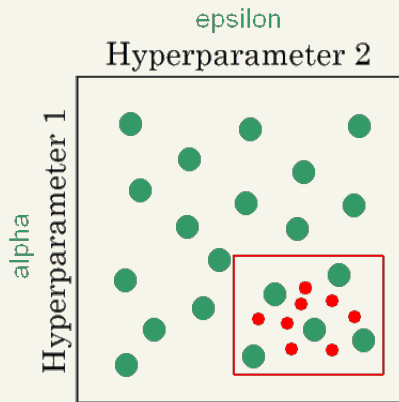
No todos los hiperparámetros son igual de importantes



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.