Clase 7: Predicciones y regresión no lineal

MDS7104 Aprendizaje de Máquinas

Felipe Tobar

Iniciativa de Datos e Inteligencia Artificial
Universidad de Chile

8 de abril de 2022

UNIVERSIDAD
DE CHILE

Predicciones

En las clases anteriores se estudió cómo estimar los parámetros de un modelo. Ahora se verá cómo utilizar estas estimaciones para hacer predicciones. Para esto:

- Se considerará un modelo $p(y|x)$, con parámetro θ, del cual se han obtenido datos denotados mediante $\mathcal{D} = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{N}$.
- Se considerará un modelo de **variable latente**: las observaciones consisten en una variable *no observable* que es perturbada por un ruido.
  Por ejemplo, en el modelo lineal y gaussiano, las observaciones son de la forma:

$$y = \underbrace{\theta^\top x}_{\text{variable latente}} + \underbrace{\epsilon}_{\text{perturbación}}$$

- De esta forma, al momento de hacer predicción, el objetivo será calcular la variable latente $f = \theta^\top x$ y no la observación y (imposible de calcular). Note que esta variable latente es el valor esperado de la observación.

Predicción *plug in*

Se denotará mediante $\hat{f}_\star$ e $\hat{y}_\star$ las predicciones de la variable latente f y la observación y para una nueva entrada $x_\star$, condicional a los datos observados $\mathcal{D}$.

Para un modelo lineal gaussiano con estimador (puntual) $\hat{\theta}$, el modelo estimado corresponde a $y = \hat{\theta}^\top x + \epsilon$. Se tiene que:

- Predicción de la variable latente: $\hat{f}_\star = \hat{\theta}^\top x_\star$ (determinista).
- Predicción de la observación: $y = \hat{\theta}^\top x_\star + \epsilon$ (aleatoria).

Además, la aleatoriedad de ϵ permite representar esta predicción en términos de su esperanza y *barras de error*. Para el caso de ϵ gaussiano son explícitas, donde con un 95 % de probabilidad, $\hat{y}_\star \in [\theta_{\text{MV}}^\top \tilde{x}_\star - 2\sigma, \theta_{\text{MV}}^\top \tilde{x}_\star + 2\sigma]$.

Predicción bayesiana

Por otro lado, cuando el parámetro θ es estimado de forma bayesiana, la posterior de θ es una distribución por lo que el modelo en sí es aleatorio. De esta forma, se identifican dos fuentes de incertidumbre:

- Epistemológica: dada por la distribución posterior de θ.
- Aleatoria: dada por la distribución de ϵ.

Por lo tanto, para obtener una estimación de la variable latente, se debe integrar sobre las fuentes de incertidumbre (*integrate-out*):

$$\begin{aligned}
\hat{f}_\star &\sim p(f_\star|x_\star, \mathcal{D}) \\
&= \int p(f_\star, \theta|x_\star, \mathcal{D})\mathrm{d}\theta \\
&= \int p(f_\star|x_\star, \mathcal{D}, \theta)p(\theta|\mathcal{D}, x_\star)\mathrm{d}\theta \\
&= \int p(f_\star|x_\star, \theta)p(\theta|\mathcal{D})\mathrm{d}\theta \\
&= \mathbb{E}_{p(\theta|\mathcal{D})}\left[p(f_\star|x_\star, \theta)\right].
\end{aligned}$$

Predicción bayesiana

Si bien el cálculo de la integral anterior puede ser complejo, se tienen dos casos particulares:

- **Caso gaussiano:** $p(f_\star|x_\star,\theta)p(\theta|\mathcal{D})$ corresponde al producto de dos gaussianas por lo que, de acuerdo al teorema de convolución, su integral es nuevamente una gaussiana.
- **Caso lineal:** basta notar que $f = \theta^\top \tilde{x}_\star$ y que $\theta \sim \mathcal{N}(\theta_N, \sigma^2\Lambda_n^{-1})$. De esta forma, por linealidad:

$$\hat{f}_\star \sim p(f_\star|x_\star,\mathcal{D}) = \mathcal{N}(\theta_N^\top \tilde{x}_\star, \tilde{x}_\star^\top \sigma^2 \Lambda_n^{-1} \tilde{x}_\star).$$

  Además, para determinar la predicción de la observación ruidosa $y = f + \epsilon$, solo se debe incorporar el estadístico del ruido:

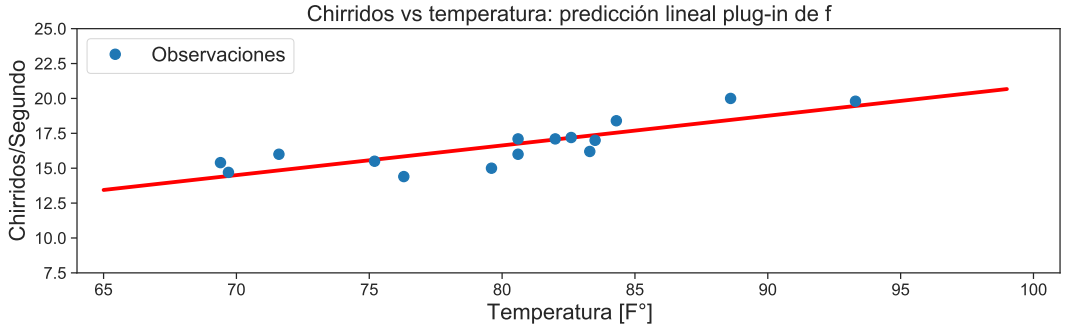
$$\hat{y}_\star \sim \mathcal{N}(\theta_N^\top \tilde{x}_\star, \tilde{x}_\star^\top \sigma^2 \Lambda_n^{-1} \tilde{x}_\star + \sigma^2).$$

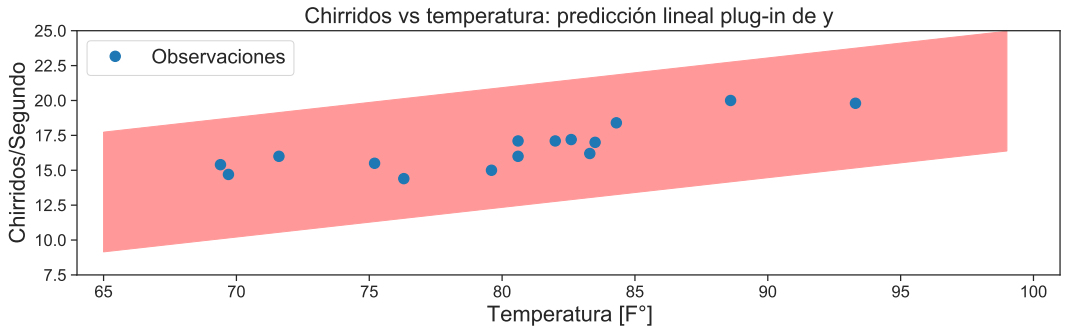
Por último, a partir de la predicción bayesiana es posible obtener una predicción puntual dada por la media, donde para el caso lineal se tiene que:

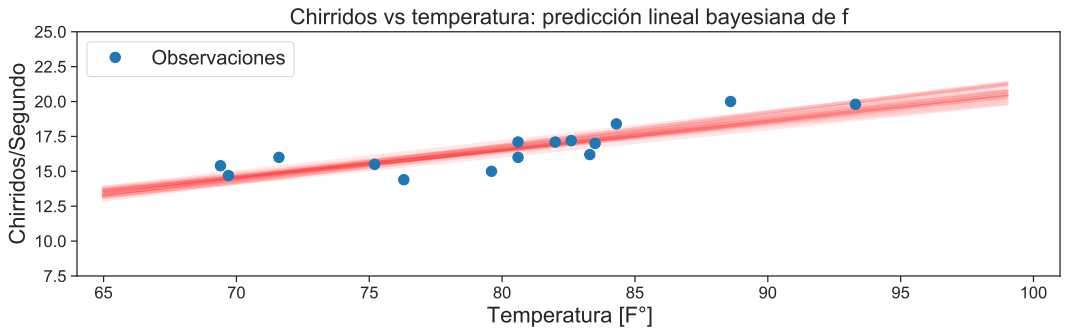
$$\mathbb{E}[f_\star|x_\star,\mathcal{D}] = \mathbb{E}[\theta|\mathcal{D}]^\top \tilde{x}_\star = \bar{\theta}^\top \tilde{x}_\star$$

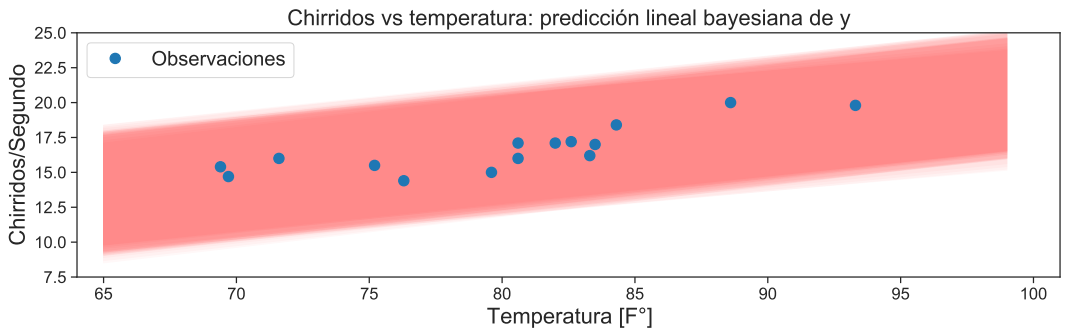
donde $\bar{\theta}$ corresponde a la media posterior de θ.

Ejemplo: cuatro predicciones









Regresión no lineal

El concepto de regresión lineal puede ser extendido mediante la aplicación de una transformación ϕ sobre la variable independiente x, construyendo un modelo lineal en la variable transformada $\phi = \phi(x)$ en lugar de en la variable original x.

Se considerarán transformaciones de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \phi \colon \mathbb{R}^M &\to \mathbb{R}^D \\ x &\mapsto \phi(x) = [\phi_1(x), \ldots, \phi_D(x)]^\top \end{aligned}$$

donde $\phi_i : x \in \mathbb{R}^M \mapsto \phi_i(x) \in \mathbb{R}$ son funciones escalares $\forall i = 1, \ldots, D$.

De esta forma, $\phi(x_i)$ puede representar las *características* de la observación cruda x_i.

En la práctica, la función $\phi : x \mapsto \phi(x)$ es elegida en base al conocimiento *experto* que se tenga del problema. Nos referiremos a la construcción *manual* de la función ϕ como *ingeniería de características*.

Modelo lineal en los parámetros

Usando la nueva variable de características $\phi = \phi(x)$ se puede proponer un modelo lineal

$$y = \theta^\top \phi(x).$$

Para un conjunto de observaciones $\mathcal{D} = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N \subset \mathbb{R}^M \times \mathbb{R}$, este modelo puede ser entrenado con un funcional de costo cuadrático:

$$J = \sum_{i=1}^{N} (y_i - \theta^\top \phi(x_i))^2.$$

Además, se puede compactar el funcional utilizando la matriz de diseño:

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi(x_1)^\top \\ \vdots \\ \phi(x_N)^\top \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_1(x_1) & \dots & \phi_D(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(x_N) & \dots & \phi_D(x_N) \end{pmatrix} \qquad Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}$$

Por lo que el funcional se reescribe como $J = \|Y - \Phi\theta\|_2^2$, cuyo mínimo es alcanzado en

$$\theta\star = (\Phi^\top \Phi)^{-1} \Phi^\top Y.$$

Modelo lineal en los parámetros

Por último, es posible realizar una regularización sobre este modelo al igual que en MCR. Por ejemplo, para la regularización de *ridge*:

$$J_\rho = \|Y - \Phi\theta\|_2^2 + \rho \|\theta\|^2, \quad \rho \in \mathbb{R}^+.$$

En cuyo caso, es sabido que el funcional es minimizado en

$$\theta = (\Phi^\top \Phi + \rho\mathbb{I})^{-1} \Phi^\top Y.$$

Observación: la transformación afín-lineal $\tilde{x}_i = (x_i, 1)^\top$ usada al comienzo del curso, puede ser interpretada como un modelo de regresión no lineal bajo el mapa de características

$$x \in \mathbb{R}^M \mapsto \phi(x) = \begin{pmatrix} x \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{M+1}.$$

Ejemplos de transformaciones

Función Polinomial: $\phi = \{\phi_i\}_{i=0}^{D}$, donde $\phi_i(x) = x^i$, de tal forma que

$$\Phi = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^D \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_N & x_N^2 & \dots & x_N^D \end{bmatrix}.$$

- De acuerdo al teorema de Stone-Weierstrass, los polinomios son densos en $\mathcal{C}([a, b])$ (funciones continuas sobre compactos), por lo que es posible aproximar cualquier función continua mediante un polinomio.
- Una desventaja de esta base es que puede ser inestable: para obtener una buena aproximación polinomial, generalmente se requiere un grado D alto, por lo que los valores de $\phi(x)$ crecen, obviamente, de forma *polinomial*.
- Por otra parte, la interpolación polinomial sufre del fenómeno de Runge, por lo que al utilizar un grado elevado, es posible que el error de predicción en los bordes crezca indefinidamente.

Ejemplos de transformaciones

Función Sinusoidal: $\phi = \{\phi_i\}_{i=0}^{D}$, donde $\phi_i(x) = \cos\left(i\frac{2\pi}{2T}(x - b_i)\right)$, es decir:

$$\Phi = \begin{bmatrix} 1 & \cos\left(1\frac{2\pi}{2T}(x_1 - b_1)\right) & \dots & \cos\left(D\frac{2\pi}{2T}(x_1 - b_D)\right) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cos\left(1\frac{2\pi}{2T}(x_N - b_1)\right) & \dots & \cos\left(D\frac{2\pi}{2T}(x_N - b_D)\right) \end{bmatrix}.$$

Una forma de evitar definir una fase, es considerar dos transformaciones por cada ϕ_i de la forma

$$\phi_i'(x) = \left(\sin\left(i\frac{2\pi}{2T}x\right),\ \cos\left(i\frac{2\pi}{2T}x\right)\right)$$

- Al igual que los polinomios, la base de senos y cosenos es también *universal* (más aún, forman una base de Hilbert de L^2 en el círculo).
- Una desventaja de la base senoidal es que solo puede replicar funciones periódicas, con un período máximo en este caso de T.

Ejemplo de regresión no lineal

Consideremos el problema de predecir la cantidad de pasajeros en una aerolínea. De forma incremental, se considerarán los siguientes mapas de características:

- polinomial.
- polinomial + senoidal (oscilatorio).
- polinomial + senoidal (oscilatorio) + amplitud creciente.

por lo tanto, denotando por x el tiempo e y la cantidad de pasajero, se considerará el siguiente modelo final:

$$y = \underbrace{\sum_{i=0}^{3} \theta_i x^i}_{\text{parte polinomial}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{2} \alpha_i \exp(-\tau_i x^2) \cos(\omega_i (x - \psi_i))}_{\text{parte oscilatoria}} .$$

La motivación de este modelo es representar la tendencia de los datos mediante la componente polinomial y la oscilación anual mediante las componentes oscilatorias.

Ejemplo de regresión no lineal

Se cuenta con 12 años de datos con frecuencia mensual (144 datos), de los cuales solo 9 años (108 datos) han sido usado para encontrar los parámetros del modelo y los 3 años restantes (36 datos) para validar nuestras predicciones.
Los regresores obtenidos son los siguientes: