Modelos lineales: regresión

Curso de aprendizaje automático para el INE

Alberto Torres Barrán

2020-02-02

Modelos lineales

Variables provienen de múltiples fuentes:

- variables quantitativas
- transformaciones (logaritmo, raiz cuadrada, etc.)
- expansiones de base, $x_2 = x_2^2$
- variables *dummy*
- interacciones entre variables, $x_3 = x_1 \times x_2$

Pero siempre: modelo lineal en los parámetros

Regresión lineal y logística

La salida y es continua, $y \in \mathbb{R}$

- Regresión lineal (*MSE* o *RSS*)

$$\min_w \ ||y - \mathbf{X}w||_2^2$$

La salida y es discreta, $y \in \{0, 1\}$

- Regresión logística (*log-loss*)

$$\min_w \ -(y^T \log[\sigma(\mathbf{X}w)] + (1-y)^T \log[1 - \sigma(\mathbf{X}w)])$$

Generalized linear models (GLM)

- Generalización de la regresión lineal que permite distribuciones de errores distintas de la distribución normal.
- Componentes:
  - Distribución de Y_i con media μ_i
  - Predictor lineal,

$$g(\mu_i) = w^T x_i$$

    donde $g(\cdot)$ es la función de media
- La función de media proporciona la relación entre la media de la distribución y el predictor lineal
- El inverso de la función de media, $g^{-1}(\cdot)$ se conoce con el nombre de **función de enlace**

Ejemplo: distribución binomial

- La regresión logística es un caso particular de GLM donde la distribución de Y es la binomial
- La función de media es la logística,

$$\mu = g^{-1}(w^T x_i) = \frac{1}{1 + \exp(-w^T x_i)}$$

- La función de enlace es la inversa de la anterior,

$$w^T x_i = g(\mu) = \ln\left(\frac{\mu}{1-\mu}\right)$$

- Para cada distribución, hay una función de enlace "canónica" que es la que se usa habitualmente

Ejemplo: distribución de Poisson

- Esta distribución está indicada cuando queremos modelizar una variable de salida entera y no real (por ej. conteos)
- Función de media

$$\mu = \exp(w^T x_i)$$

- Función de enlace

$$w^T x_i = \ln(\mu)$$

- Otras distribuciones posibles son la Gamma, Exponencial, Multinomial, etc.

GLMs en R

- La función para ajustar modelos lineales generalizados es `glm()`
- Tiene los mismos argumentos principales que `lm()`, pero además tenemos que especificar la distribución de la variables dependiente con el parámetro `family`
- Por defecto se usa la función de enlace "canónica", pero esto se puede modificar (ver ayuda)
- Implementa el algoritmo IRLS (Newton-Raphson), que se puede generalizar para cualquier GLM donde la distribución pertenece a la familia exponencial

Ejemplo: regresión logística

```
library(MASS)
fit <- glm(type ~ ., data=Pima.tr, family=binomial)
```

Problemas de mínimos cuadrados

1. Calidad de predicción:
    - poco sesgo pero potencialmente mucha varianza
    - podemos mejorar las predicciones reduciendo el valor de algunos coeficientes
    - aumenta ligeramente el sesgo pero disminuye mucho la varianza
2. Interpretación:
    - el valor de los coeficientes nos da una idea de las variables mas relevantes
    - nos gustaria encontrar un subconjunto de los mejores

Regularización

- Regresión *ridge* (*MSE* + regularización l_2):

$$\min_w \ ||y - \mathbf{X}w||_2^2 + ||w||_2^2$$

- ¿Regresión logística ridge?
- ¿Otras funciones de regularización?

Métodos de seleccion

Regresión *best subset*

- Mantenemos solo un subconjunto de las variables y eliminamos el resto del modelo
- Para $k \in \{0, 1, 2, \ldots, d\}$ se resuelve

$$\min_{w} \; ||y - \mathbf{X}w||_2^2 \quad \text{s.t. } ||w||_0 \leq k$$

  donde $||w||_0 = \sum_{i=1}^{d} \mathbb{I}(w_i \neq 0)$
- $\mathbb{I}(\cdot)$ es la función indicatriz (cuenta el número de elementos distintos de 0)
- La restricción hace que el problema sea NP-completo,

$$C_{d,k} = \binom{d}{k} = \frac{d!}{k!(d-k)!}$$

- Algoritmos clásicos pueden resolver $d \approx 30$
- Avances recientes, (Bertsimas et al., 2015): $d \in [100, 1000]$

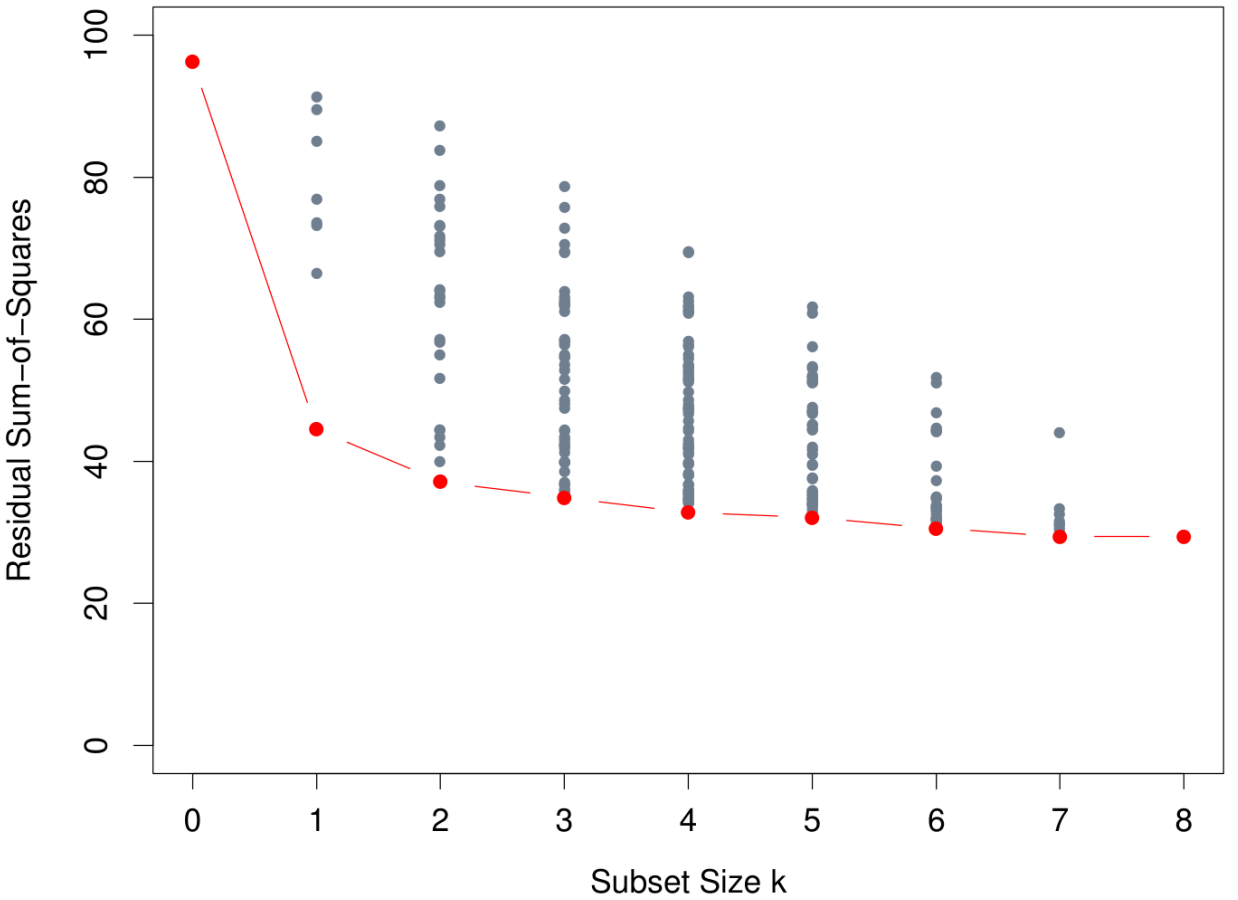


FIGURE 3.5. *All possible subset models for the prostate cancer example. At each subset size is shown the residual sum-of-squares for each model of that size.*

Regresión *stepwise*

- *Forward-Stepwise*:

    1. Añadir al modelo la variable que proporciona mejor ajuste
    2. Repetir hasta añadir k variables

- *Backward-Stepwise*

    1. Empezar con las d variables
    2. Eliminar iterativamente la menos relevante para el ajuste

- Algoritmos avariciosos
- No buscan entre todas las posibles combinaciones de subconjuntos de tamaño k
- En cada paso solo se ajustan $d - k$ modelos

Best subset y *stepwise* en R

Best subsets:

- Paquete `leaps`, función `regsubsets()`
- También regresión forward y backward stepwise

Stepwise:

- Función `step()`
- Procedimiento hibrido: se procede como *forward* pero en cada paso está la opción de eliminar alguna variable añadida previamente
- Añade o elimina variables en grupos (por ej. si son variables *dummy*)
- Selecciona automáticamente el valor óptimo de k

Selección de k

- Secuencia de modelos indexada por k (igual que *best subset*)
- Elegir k como el que minimiza el error de validación cruzada
- Validación cruzada: estimación del error de generalización o error *extra-sample*
- Error de entrenamiento es demasiado optimista (error *in-sample*)
- Alternativa: cuantificar el "optimismo" y minimizarlo (AIC, BIC y derivados)
- Más detalles: ESL secciones 7.4 en adelante

Métodos de reducción

Lasso: motivación

- Métodos de selección:
  - modelos interpretables
  - proceso discreto, las variables están incluidas o no
- Regresión *ridge*:
  - proceso continuo, todos los coeficientes se reducen
  - rara vez son exactanente 0, modelos no interpretables
- Lasso es una técnica intermedia:
  - reduce algunos coeficientes
  - pone el resto a 0

Lasso: formulación

- Problema optimización:

$$\min_w \ ||y - \mathbf{X}w||_2^2 \quad \text{s.t.} \ \ ||w||_1 \leq t$$

- Equivalente:

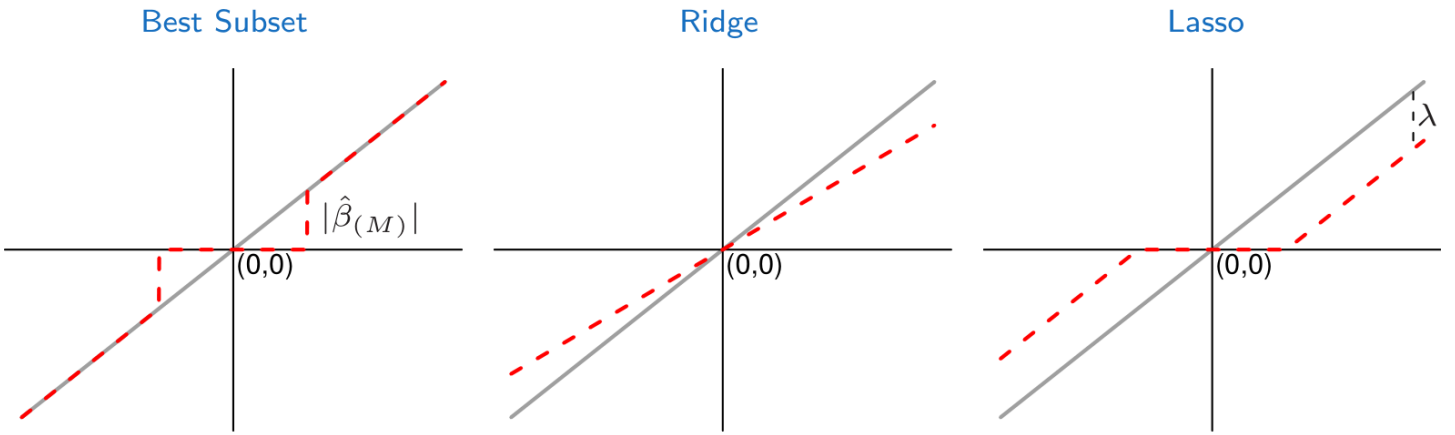
$$\min_w \ ||y - \mathbf{X}w||_2^2 + \lambda ||w||_1$$

- λ o t son hiper-parámetros
  - $\uparrow \lambda$ o $\downarrow t$, se reducen los coeficientes (más regularización)
  - $\downarrow \lambda$ o $\uparrow t$, aumentan los coeficientes (menos regularización)
- t suficientemente pequeño (o λ suficientemente grande), algunos coeficientes = 0

Pierre Ablin, Twitter

TABLE 3.4. *Estimators of β_j in the case of orthonormal columns of $\mathbf{X}$. M and λ are constants chosen by the corresponding techniques;* sign *denotes the sign of its argument (± 1), and x_+ denotes "positive part" of x. Below the table, estimators are shown by broken red lines. The 45° line in gray shows the unrestricted estimate for reference.*

Estimator	Formula
Best subset (size M)	$\hat{\beta}_j \cdot I(\lvert\hat{\beta}_j\rvert \geq \lvert\hat{\beta}_{(M)}\rvert)$
Ridge	$\hat{\beta}_j/(1+\lambda)$
Lasso	$\text{sign}(\hat{\beta}_j)(\lvert\hat{\beta}_j\rvert - \lambda)_+$



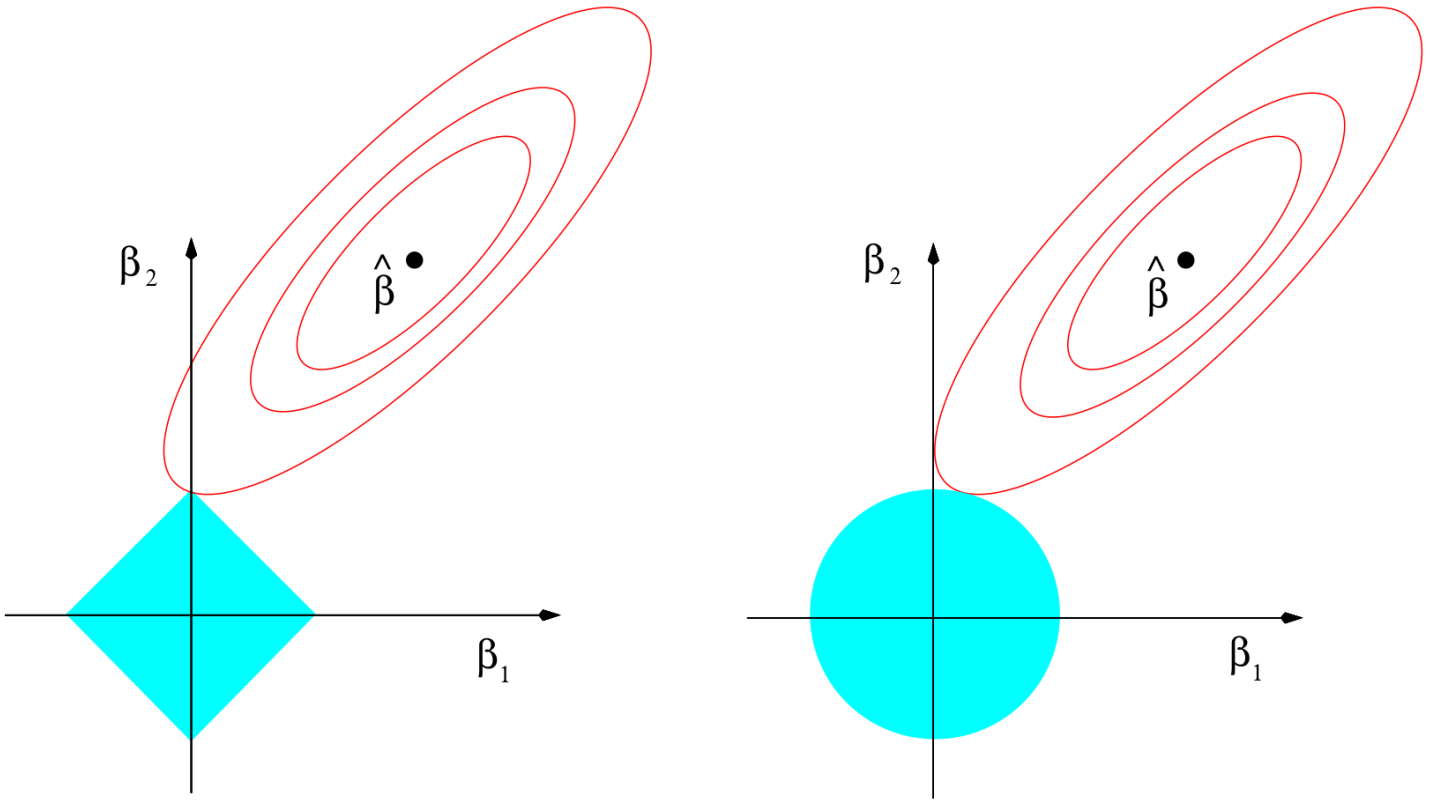


FIGURE 3.11. *Estimation picture for the lasso (left) and ridge regression (right). Shown are contours of the error and constraint functions. The solid blue areas are the constraint regions* $|\beta_1| + |\beta_2| \leq t$ *and* $\beta_1^2 + \beta_2^2 \leq t^2$*, respectively, while the red ellipses are the contours of the least squares error function.*

Lasso, best subset y fordward stepwise

- Comparación Lasso, *best subset* y *forward stepwise* (Hastie et al., 2017)
- Experimentos en Github, best-subset
- *Relaxed* Lasso: ajustar otro modelo sobre las variables que selecciona el Lasso

Lasso: limitaciones

1. Si $d > n$, como mucho n coeficientes son $\neq 0$
    - Limitación desde el punto de vista de selección de variables
2. Variables con correlación alta $\Longrightarrow$ Lasso selecciona una "aleatoriamente"
3. Si $n > d$ y hay variables con correlación alta $\Longrightarrow$ error de Ridge < error de Lasso

Otras penalizaciones

- Podemos generalizar Lasso, Ridge y Best subset como

$$\min_w ||y - \mathbf{X}w||_2^2 + \lambda ||w||_p^p$$

donde,

$$||w||_p^p = \sum_{i=1}^{d} |x_i|^p$$

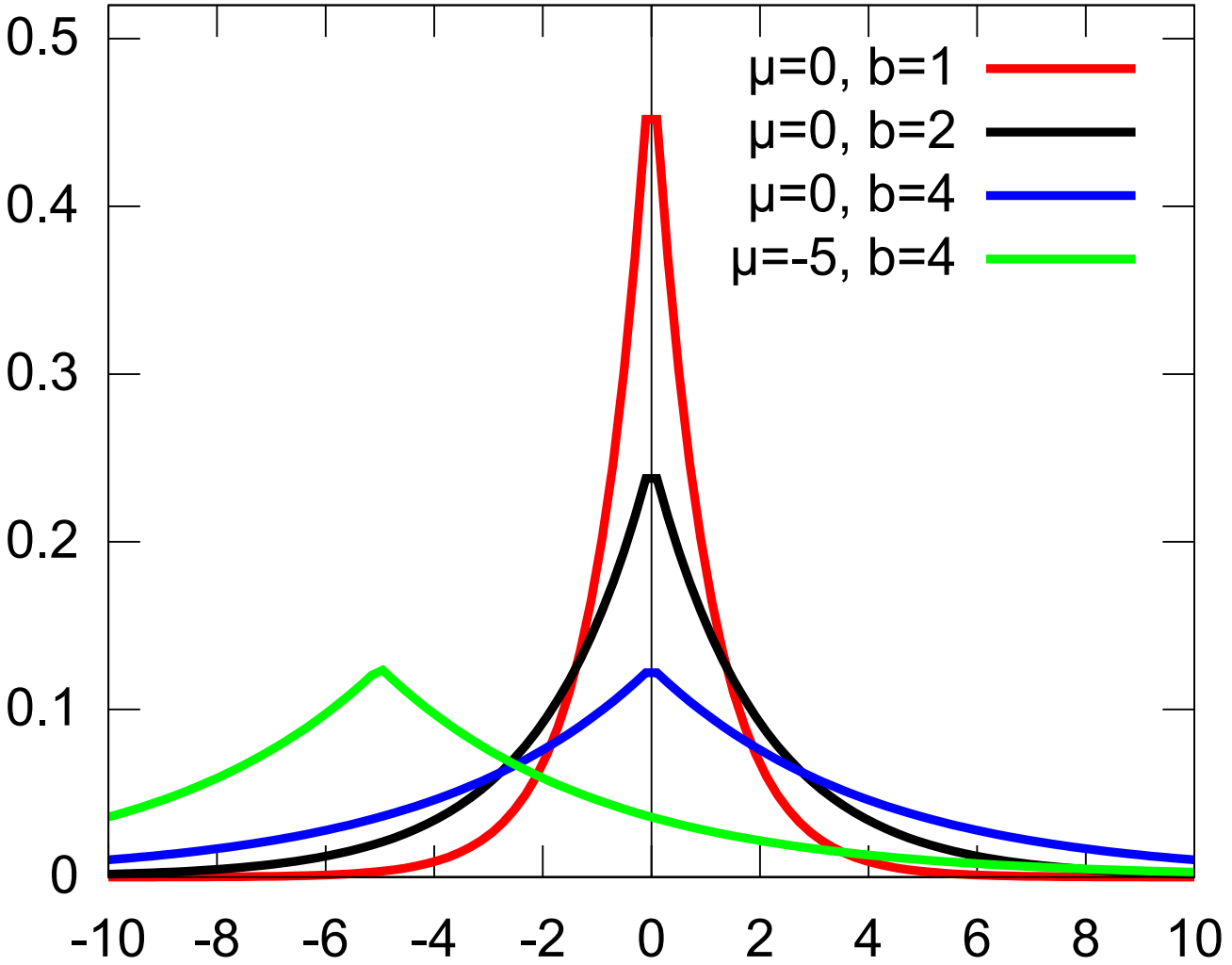
- $0 \leq p < 1$, no convexas (NP-completo!)
- $p = 1$, convexa y no diferenciable
- $p > 1$, convexas y diferenciables

Interpretación Bayesiana

- Regularización = distribución a priori de los parámetros w
- Ridge regressión: distribución Normal
- Lasso: distribución de Laplace, $\tau = 1/\lambda$

$$f(w) = \frac{1}{2\tau} \exp\left(- \frac{|w|}{\tau} \right)$$

- Estimadores: máximo de la distribución a posteriori (MAP)
  - Ridge: coincide con la media
  - Lasso y Best subset: moda



Wikipedia, "Laplace distribution"

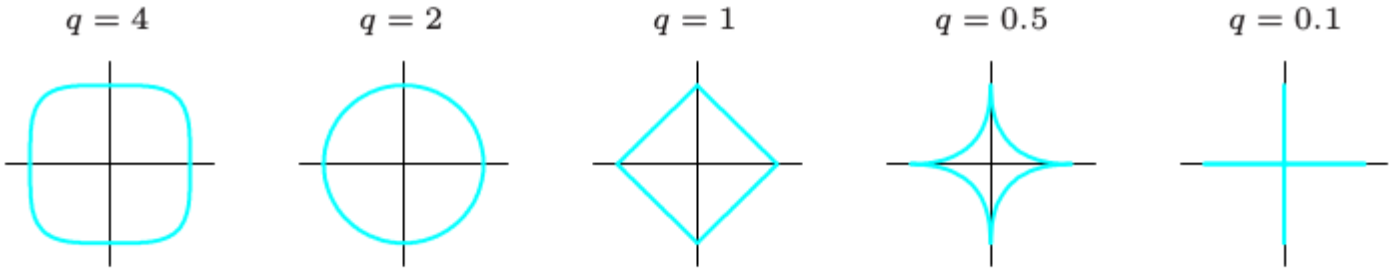


FIGURE 3.12. *Contours of constant value of* $\sum_j |\beta_j|^q$ *for given values of* q.

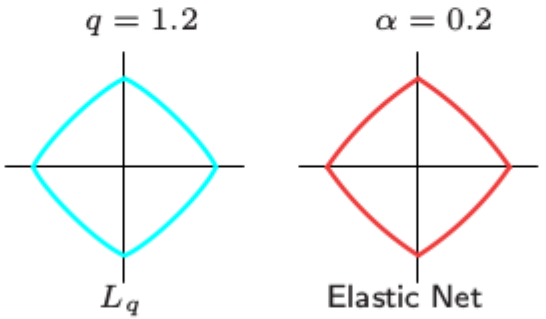


FIGURE 3.13. *Contours of constant value of* $\sum_j |\beta_j|^q$ *for* $q = 1.2$ *(left plot), and the elastic-net penalty* $\sum_j (\alpha\beta_j^2 + (1-\alpha)|\beta_j|)$ *for* $\alpha = 0.2$ *(right plot). Although visually very similar, the elastic-net has sharp (non-differentiable) corners, while the* $q = 1.2$ *penalty does not.*

Elastic Net

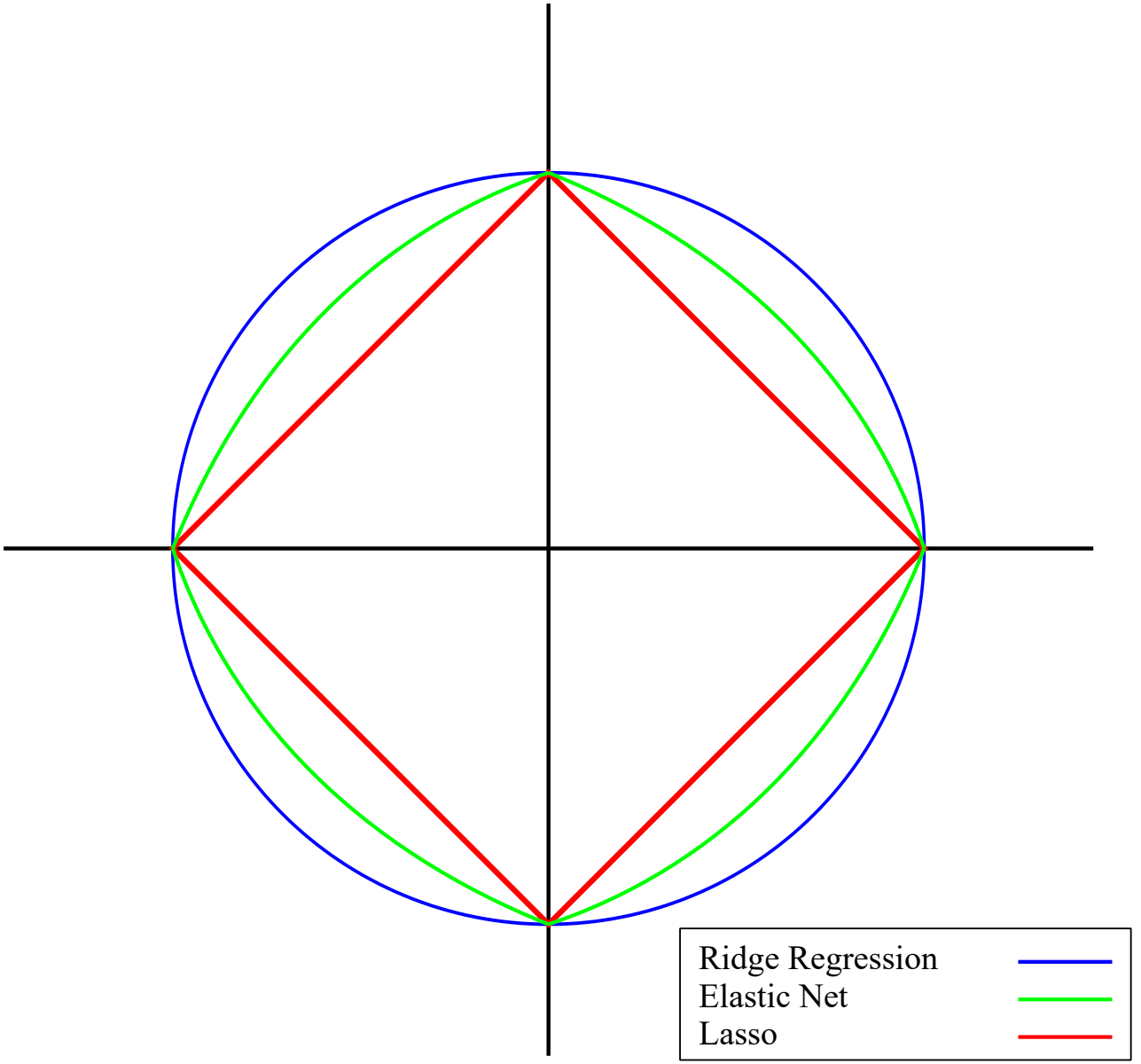
- Combina regularización Lasso y Ridge:

$$\min_w \ ||y - \mathbf{X}w||_2^2 + \lambda_1 ||w||_1 + \lambda_2 ||w||_2^2$$

- Otra parametrización con $\alpha \in (0, 1)$:

$$\min_w \ ||y - \mathbf{X}w||_2^2 + \lambda(\alpha ||w||_1 + (1 - \alpha)||w||_2^2)$$

- Equivalentes con
  - $\alpha = \lambda_1 / (\lambda_1 + \lambda_2)$
  - $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2$
- Selecciona variables y reduce el resto de coeficientes


Ridge Regression
Elastic Net
Lasso

Notación

- Lasso (Elastic Net) suelen hacer referencia a: minimizar MSE + norma l_1 (+ norma l_2)
- MSE puede reemplazarse por otras funciones de pérdida
- Por ej. cualquier GLM
- En esos casos hablamos de regresión logística, Poisson, Gamma + regularización Ridge/Lasso/Elastic Net

Elastic Net en R

- Paquete `glmnet`
- Implementa descenso coordenado cíclico (detalles más adelante)
- Resuelve GLMs con regularización l_1 (Lasso), l_2 (Ridge) o ambas (ElasticNet)
- Sin interfaz de fórmulas
  - Hay que crear la matriz $\mathbf{X}$ "a mano"
- Elige automáticamente el valor óptimo de λ (pero no α!)
- Puede ser interesante la extensión `glmnetUtils`

Métodos de reducción

Principal Component Regression

- Calcular las m componentes principales, $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{d \times m}$
- Crear combinaciones lineales de las variables originales: $\mathbf{Z} = \mathbf{X}\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times m}$
- Ajustar una regresión lineal, $y = \mathbf{Z}\theta$,

$$\theta^* = (\mathbf{Z}^T\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}^T y$$

- $\mathbf{Z}$ es ortogonal, por lo que los θ_m son independientes

$$\theta_m = \frac{z_m^T y}{z_m^T z_m}$$

- Coeficientes sobre los datos originales $\mathbf{X}$:

$$y = \mathbf{Z}\theta = \mathbf{X}\mathbf{V}\theta = \mathbf{X}w \;\Rightarrow\; w = \mathbf{V}\theta$$

PCR, OLS y Ridge Regression

- Componentes principales dependientes de la escala $\Rightarrow$ estandarizar
- Si $m = d$, se obtienen el estimador de mínimos cuadrados (OLS)
- Si $m < d$, se obtiene una versión reducida de la regresión
- Ridge Regression:
  - reduce los coeficientes de las componentes principales
  - reduce más cuanto más grande sea el autovalor
- PCR descarta las $d - m$ componentes principales con menor autovalor
- m se puede elegir por validación cruzada

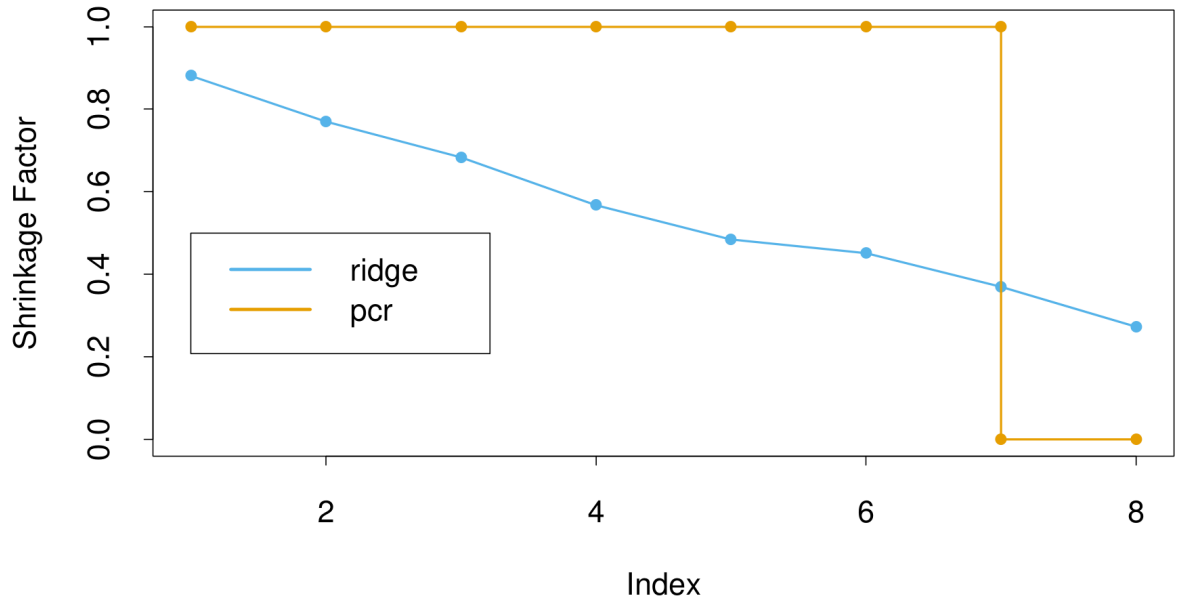


FIGURE 3.17. *Ridge regression shrinks the regression coefficients of the principal components, using shrinkage factors $d_j^2/(d_j^2 + \lambda)$ as in (3.47). Principal component regression truncates them. Shown are the shrinkage and truncation patterns corresponding to Figure 3.7, as a function of the principal component index.*

PCR, Lasso y Best subset

- Lasso y Best subset obtienen modelos interpretables
- PCR reduce las variables, pero son combinaciones lineales de las originales
- Computacionalmente:
  - Best subset es factible para $d \approx 100$
  - Lasso y PCR tienen aprox. el mismo coste
- PCR puede ser útil para situaciones con muchas variables altamente correladas

Partial Least Squares

- Igual que con PCR, es importante estandarizar las x_j
- Algoritmo (simplificado):
  1. Calcular $\phi_m = x_j^T y$ para cada $j = 1, \dots d$
  2. Calcular $z_m = \sum_j \phi_m x_j$
  3. Resolver regresión lineal $y = z_m \theta_m$
  4. Actualizar salida, $y^{(m)} = y^{(m-1)} + \theta_m^* z_m$
  5. Ortogonalizar x_j con respecto a z_m
  6. Repetir hasta un $m < d$

PLS vs PCR

- PCR:
  - no supervisado (solo usa $\mathbf{X}$ para calcular las componentes principales)
  - elige direcciones z_m que maximizan la varianza
- PLS:
  - crea combinaciones lineales de las variables originales, pero de manera supervisada (usando el valor de y)
  - si $m = d$ obtenemos el estimador de mínimos cuadrados
  - produce una series de direcciones ortogonales $z_1, z_2, \ldots, z_m$
  - elige direcciones que maximizan la varianza **y** tienen mucha correlación con la salida y

PLS y PCR en R

- Paquete `pls`
- Funciones `pcr()` y `plsr()`
- Ambas eligen el valor óptimo de k usando validación cruzada

Descenso coordinado

Motivación

- Lasso es un problema
    1. cuadrático
    2. convexo
    3. sin restricciones
- Pero
    1. No diferenciable en 0
    2. No es fuertemente convexo $\Longrightarrow$ peor tasa de convergencia algoritmos estándar

Descenso coordinado

- Resuelve el de forma eficiente el problema de optimización de los GLM con:
  - regularización l_1
  - regularización $l_1 + l_2$
- Esquema básico:
  1. Seleccionar una coordenada $j \in \{1, \ldots, d\}$
  2. Fijar el valor del resto
  3. Optimizar con respecto respecto a la coordenada j
     - solución analítica!
  4. Repetir para el resto de las coordenadas varias veces

Descenso coordinado: Lasso

- Función que minimiza Lasso, $f(w) = ||y - \mathbf{X}w||_2^2 + \lambda||w||_1$
- Fijamos $w_k = \tilde{w}_k$ para $k \neq j$
- Aislamos w_j,

$$f(\tilde{w}, w_j) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \sum_{k\neq j} x_{ik}\tilde{w}_k - x_{ij}w_j\right)^2 + \lambda\sum_{k\neq j}|\tilde{w}_k| + \lambda|w_j|$$

- Derivada, si $w_j \neq 0$:

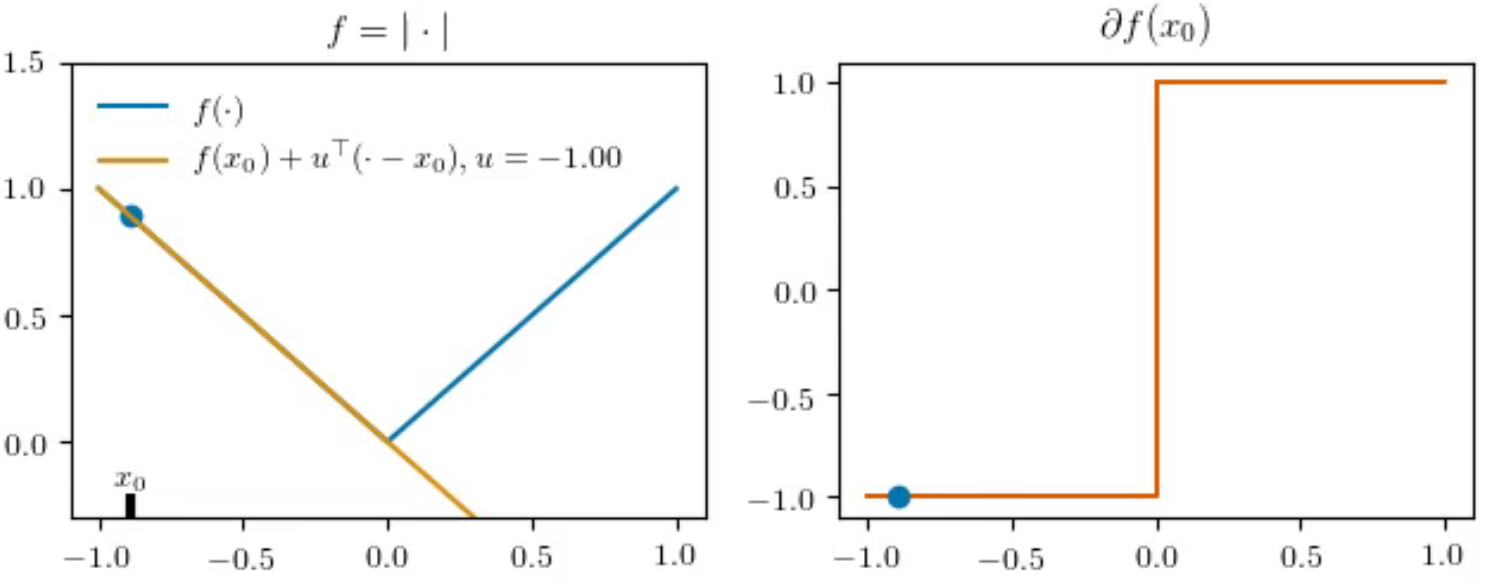
$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{w_j} &= -\sum_{i=1}^{n} x_{ij}\left(y_i - \sum_{k\neq j} x_{ik}w_k - x_{ij}w_j\right) + \lambda\,\text{sign}(w_j) = \\ &= \underbrace{-\sum_{i=1}^{n} x_{ij}\left(y_i - \sum_{k\neq j} x_{ik}\tilde{w}_k\right)}_{a_j} + \underbrace{\sum_{i=1}^{n} x_{ij}^2 w_j}_{b_j} + \lambda\,\text{sign}(w_j)\end{aligned}$$

- Si estandarizamos las variables, $b_j = 1$

$$\partial f(x) = \{u \,:\, \forall y,\, f(y) \geq f(x) + u^\top (y - x)\}$$

Fermat's rule: $x^* = \min f(x) \Leftrightarrow 0 \in \partial f(x^*)$

f cvx differentiable: $\partial f(x) = \{\nabla f(x)\}$, Fermat: $x^* = \min f(x) \Leftrightarrow \nabla f(x^*) = 0$



Mathurin Massias, Twitter

Solución: operador *soft-thresholding*

1. Si $w_j < 0$, $\quad -a_j + w_j + \lambda = 0 \quad \Rightarrow \quad w_j = a_j + \lambda \quad \text{para} \quad a_j < \lambda$
2. Si $w_j > 0$, $\quad -a_j + w_j - \lambda = 0 \quad \Rightarrow \quad w_j = a_j - \lambda \quad \text{para} \quad a_j > \lambda$
3. Si $w_j = 0$, $\quad 0 \in [-a_j - \lambda,\, -a_j + \lambda] \quad \Rightarrow \quad -\lambda \leq a_j \leq \lambda$

- Operador *soft-thresholding*,

$$S_\gamma(z) = \text{sign}(z)\max(|z| - \gamma,\, 0)$$

- Actualización:

$$\tilde{w}_j = S_\lambda(a_j) = \left(\sum_{i=1}^{n} x_{ij}\big(y_i - \sum_{k \neq j} x_{ik}\tilde{w}_k\big) \right)$$

Pierre Ablin, Twitter

Descenso coordinado: implementación

- *Regularization path*: resolver el problema para valores decrecientes de λ
    1. Empezamos por el valor más pequeño de λ para el cual $w^* = 0$, $\lambda_{\max}$
    2. Terminamos con $\lambda_{\min}$ tal que $\lambda_{\min}/\lambda_{\max} = \epsilon$
    3. Creamos una rejilla de M valores en escala logarítmica
- *Warm-starts*: valor inicial de los pesos w es el valor anterior de $w^*(\lambda)$
- Reducir el coste computacional:
    1. Calcular y almacenar $x_j^T y$ (cache)
    2. Aprovechar dispersión: multiplicar solo elementos distintos de 0
    3. Descartar coeficientes 0 antes de tiempo

Variantes del Lasso

Variantes del Lasso

Múltiples variantes:

- Group Lasso
- Fused Lasso
- Generalized Lasso
- Relaxed Lasso
- ...

Ejemplo: Group Lasso

- Variables tienen J grupos predefinidos
- Regularización: norma $l_{2,1}$, $||w||_{2,1} = \sum_{j=1}^{J} \sqrt{||w_j||_2}$
- Coeficientes de grupo j son o bien todos 0 o todos $\neq 0$

FISTA

- Descenso por gradiente proyectado:
    1. Paso de descenso por gradiente
    2. Proyectamos a la región de las restricciones usando operador proximal
- En general, el operador proximal es otro problema de optimización:

$$\text{prox}_g(v) = \arg\min_z \left(g(z) + \frac{1}{2}||z - v||_2^2 \right)$$

- En ocasiones tiene solución analítica:
    - Lasso: $\text{prox}_{\lambda||\cdot||_1}(v) = S_\lambda(v)$
- Existen "trucos" para acelerar la convergencia (Nesterov)

Referencias

1. Tibshirani (1996). Regression Shrinkage and Selection via the Lasso
2. Zou, Hastie (2004). Regularization and variable selection via the elastic net
3. Beck, Teboulle (2008). A Fast Iterative Shrinkage-Thresholding Algorithm for Linear Inverse Problems
4. Friedman, Hastie, Tibshirani (2009). https://web.stanford.edu/~hastie/Papers/glmnet.pdf