



Machine Learning 101

Regularización

Felipe Alonso Atienza

Data Scientist @BBVA

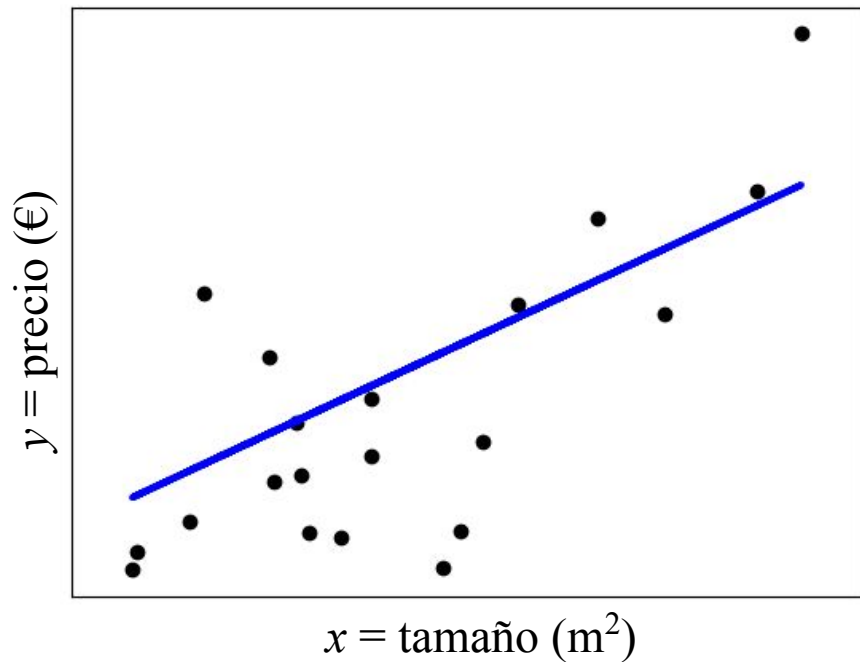


Índice

1. **Regresión lineal (revisited)**
2. El problema de overfitting
3. Regularización: ridge regression
4. Least Absolute Shrinkage and Selection Operator (LASSO)



■ Regresión lineal (una variable)



$$f_{\omega}(x) = \omega_0 + \omega_1 x$$

$$J(\omega_0, \omega_1) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(y^{(i)} - f_{\omega}(x^{(i)}) \right)^2$$

$$\min_{\omega_0, \omega_1} J(\omega_0, \omega_1) \quad \text{Descenso por gradiente}$$



■ Regresión lineal (varias variables)

	sqm_living	bedrooms	floors	years	price
0	109.625587	3	1.0	62	221900.0
1	238.760813	3	2.0	66	538000.0
2	71.535341	2	1.0	84	180000.0
3	182.089958	4	1.0	52	604000.0
4	156.077107	3	1.0	30	510000.0

$$\hat{y} = f_{\omega}(x) = \omega_0 + \omega_1 x_1 + \omega_2 x_2 + \omega_3 x_3 + \omega_4 x_4$$

$$\hat{y} = f_{\omega}(x) = 80 + 0.1x_1 + 0.01x_2 + 3x_3 - 2x_4$$

¡cuidado con la interpretación de estos coeficientes!



■ Regresión lineal (varias variables)

	sqm_living	bedrooms	floors	years	price
0	109.625587	3	1.0	62	221900.0
1	238.760813	3	2.0	66	538000.0
2	71.535341	2	1.0	84	180000.0
3	182.089958	4	1.0	52	604000.0
4	156.077107	3	1.0	30	510000.0

$$\hat{y}^{(0)} = \omega_0 + \omega_1 x_1^{(0)} + \omega_2 x_2^{(0)} + \omega_3 x_3^{(0)} + \omega_4 x_4^{(0)}$$

$$\hat{y}^{(1)} = \omega_0 + \omega_1 x_1^{(1)} + \omega_2 x_2^{(1)} + \omega_3 x_3^{(1)} + \omega_4 x_4^{(1)}$$

$$\hat{y}^{(4)} = \omega_0 + \omega_1 x_1^{(4)} + \omega_2 x_2^{(4)} + \omega_3 x_3^{(4)} + \omega_4 x_4^{(4)}$$

$$\begin{bmatrix} \hat{y}^{(0)} \\ \hat{y}^{(1)} \\ \vdots \\ \hat{y}^{(4)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1^{(0)} & x_2^{(0)} & x_3^{(0)} & x_4^{(0)} \\ 1 & x_1^{(1)} & x_2^{(1)} & x_3^{(1)} & x_4^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_1^{(4)} & x_2^{(4)} & x_3^{(4)} & x_4^{(4)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_0 \\ \omega_1 \\ \vdots \\ \omega_4 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\omega$$



■ Regresión lineal (varias variables)

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\boldsymbol{\omega}$$

$$J(\boldsymbol{\omega}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(y^{(i)} - \hat{y}^{(i)} \right)^2 \equiv ||\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\omega}||_2^2$$

1.1.1. Ordinary Least Squares

`LinearRegression` fits a linear model with coefficients $w = (w_1, \dots, w_p)$ to minimize the residual sum of squares between the observed responses in the dataset, and the responses predicted by the linear approximation. Mathematically it solves a problem of the form:

$$\min_w ||Xw - y||_2^2$$



■ Regresión lineal (varias variables)

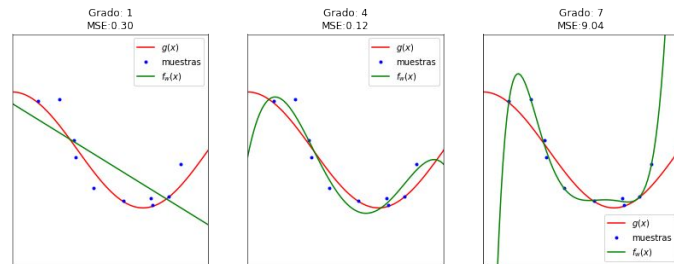
- La solución al problema de optimización anterior tiene una expresión analítica cerrada:

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

- ¿Qué pasa si $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ no es invertible? La solución no es única, debido a:
 - Variables redundantes (linealmente dependientes)
 - Más variables/características que muestras

- Consecuencias

- Inestabilidad de la solución (overfitting)
- Coeficientes del modelo contraintuitivos

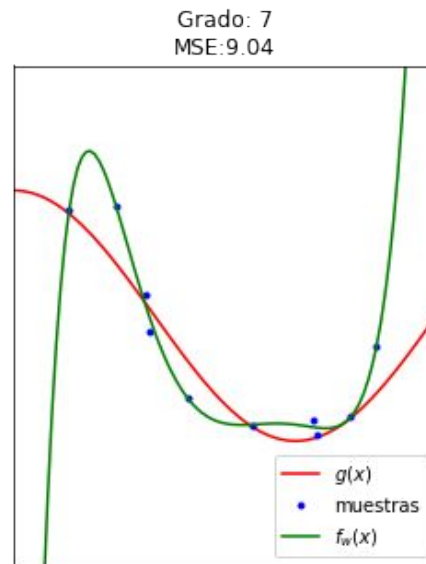
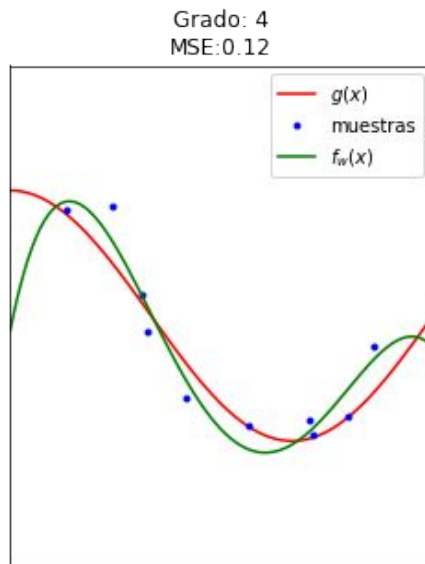
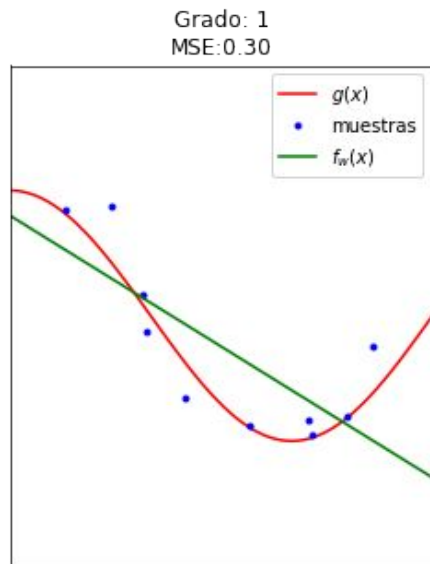


Índice

1. Regresión lineal (revisited)
- 2. El problema de overfitting**
3. Regularización: ridge regression
4. Least Absolute Shrinkage and Selection Operator (LASSO)



El problema de overfitting



$$\omega = [0, -2.1]$$

$$\omega = [0, -16.8, -82.7, 118.2, -52.3]$$

$$\omega = [0, 243.9, -1553.3, 4943.9, -9040.2, 9816.6, -5974.5, 1585.7]$$



■ El problema de *overfitting*

¿Cómo abordar el sobreajuste? Dos estrategias

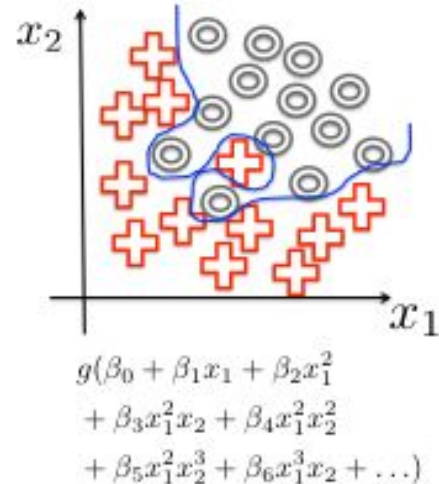
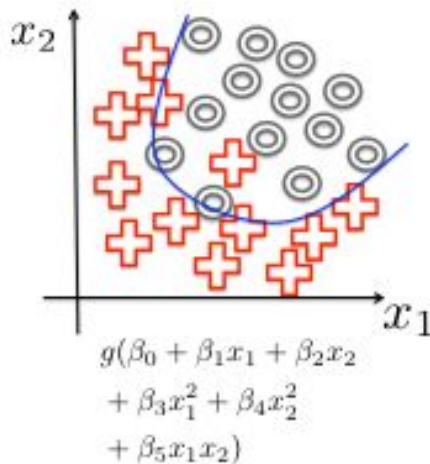
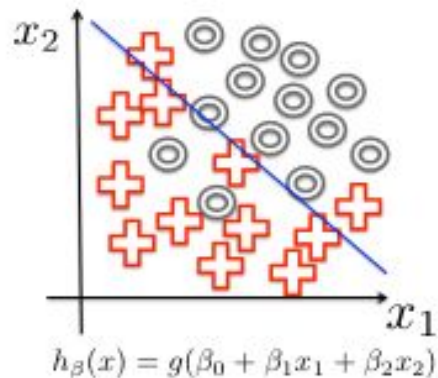
- **Regularización:** penalizar coeficientes grandes
- **Selección de características:** reducir la dimensionalidad del problema

En ambos casos, se busca reducir la complejidad del modelo (a costa de aumentar el sesgo).



■ El problema de *overfitting*

También aplica en clasificación: regresión logística



Índice

1. Regresión lineal (revisited)
2. El problema de overfitting
- 3. Regularización: *ridge regression***
4. Least Absolute Shrinkage and Selection Operator (LASSO)



Motivación

- La solución de mínimos cuadrados es inestable (coeficientes de alto valor)
- Solución: penalizar los coeficientes de alto valor
- ¿Cómo? Modificando la función de coste

$$\min_{\omega} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(y^{(i)} - f_{\omega}(\mathbf{x}^{(i)}) \right)^2 + \alpha \sum_{k=1}^D (\omega_k)^2$$

α : parámetro de regularización (hay que fijarlo a priori)

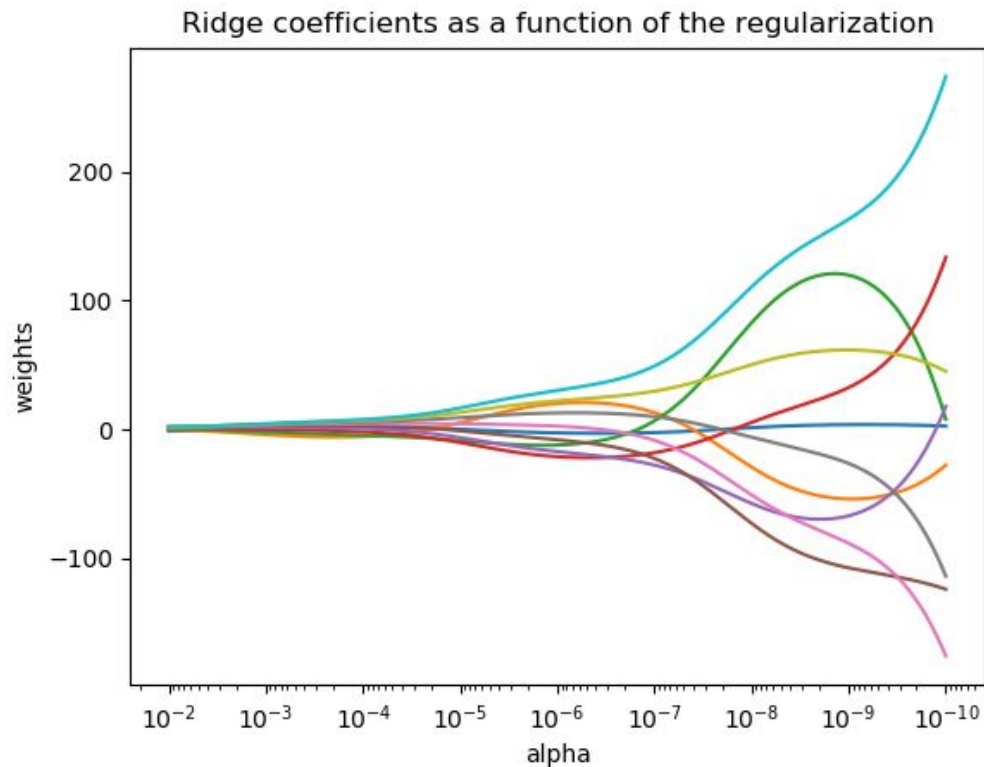


■ Parámetro de regularización

- Compromiso entre magnitud de los coeficientes y ajuste de la solución
 - Si α es muy grande \rightarrow todos los coeficientes nulos (*underfitting*)
 - Si α es nulo \rightarrow no hay regularización (posibilidad de sobreajuste)
- Ha de fijarse a priori (k-fold CV)
- Se cumple que $\alpha \geq 0$



■ Parámetro de regularización



Fuente: http://scikit-learn.org/stable/auto_examples/linear_model/plot_ridge_path.html#sphx-glr-auto-examples-linear-model-plot-ridge-path-py



Ridge regression

- En forma matricial
$$\min_{\omega} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(y^{(i)} - f_{\omega}(\mathbf{x}^{(i)}) \right)^2 + \alpha \sum_{k=1}^D (\omega_k)^2$$

$$\min_{\omega} ||\mathbf{y} - \mathbf{X}\omega||_2^2 + \alpha ||\omega||_2^2$$

1.1.2. Ridge Regression

Ridge regression addresses some of the problems of **Ordinary Least Squares** by imposing a penalty on the size of coefficients. The ridge coefficients minimize a penalized residual sum of squares,

$$\min_w ||Xw - y||_2^2 + \alpha ||w||_2^2$$

Here, $\alpha \geq 0$ is a complexity parameter that controls the amount of shrinkage: the larger the value of α , the greater the amount of shrinkage and thus the coefficients become more robust to collinearity.



Índice

1. Regresión lineal (revisited)
2. El problema de overfitting
3. Regularización: *ridge regression*
4. **Least Absolute Shrinkage and Selection Operator (LASSO)**



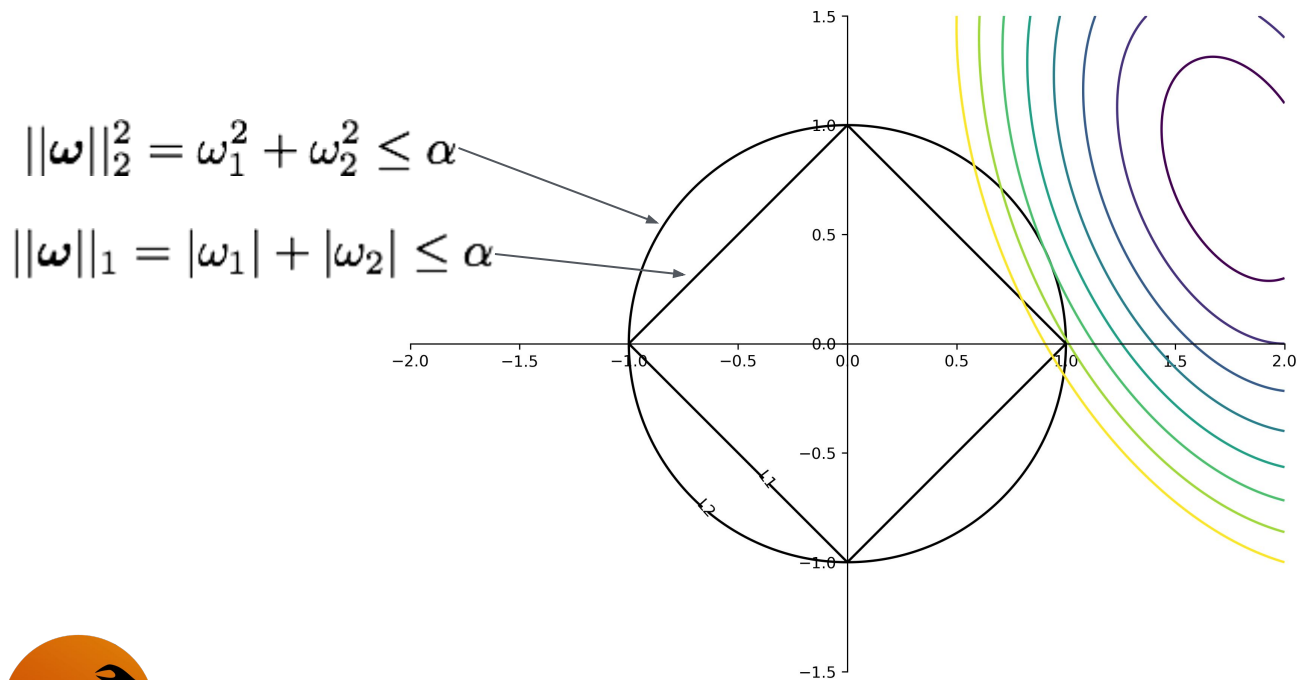
$$\min_{\omega} \underbrace{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(y^{(i)} - f_{\omega}(\mathbf{x}^{(i)}) \right)^2}_{\text{Regresión lineal}} + \underbrace{\alpha \sum_{k=1}^D |\omega_k|}_{\text{Regularización}}$$

$$\min_{\omega} ||\mathbf{y} - \mathbf{X}\omega||_2^2 + \alpha ||\omega||_1$$

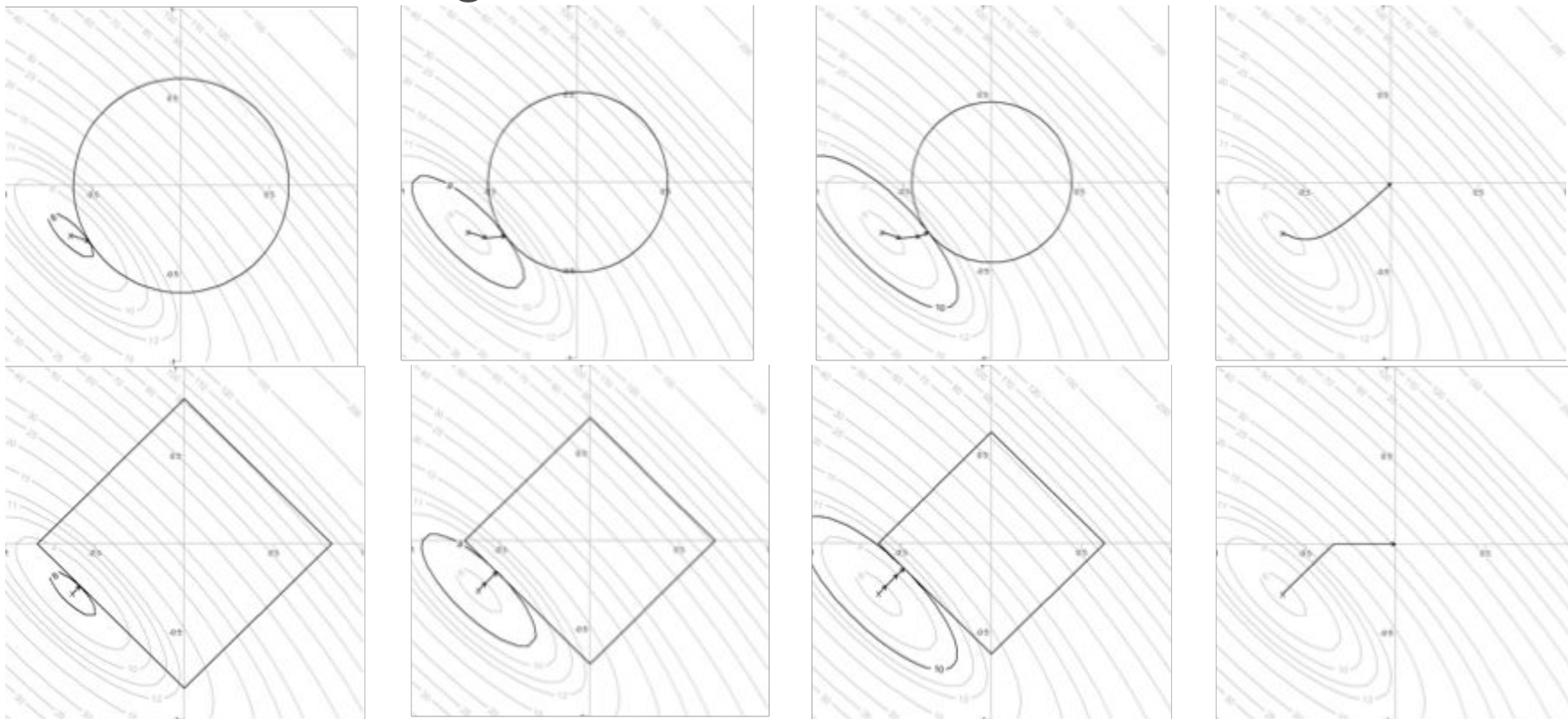


Norma L1 vs Norma L2

$$\min_{\omega} ||\mathbf{y} - \mathbf{X}\omega||_2^2 + \alpha ||\omega||_2^2 \Rightarrow \min_{\omega} ||\mathbf{y} - \mathbf{X}\omega||_2^2 \text{ sujeto a } ||\omega||_2^2 \leq \alpha$$



Lasso vs Ridge



Fuente: <http://www.pmean.com/16/images/lasso.pdf>



■ The Lasso path

Ridge

$$\min_{\omega} ||\mathbf{y} - \mathbf{X}\omega||_2^2 + \alpha ||\omega||_2^2$$

- Afecta a todos los coeficientes (incluye todos o ninguno)
- Computacionalmente eficiente y previene *overfitting*
- Buen punto de partida para analizar un problema

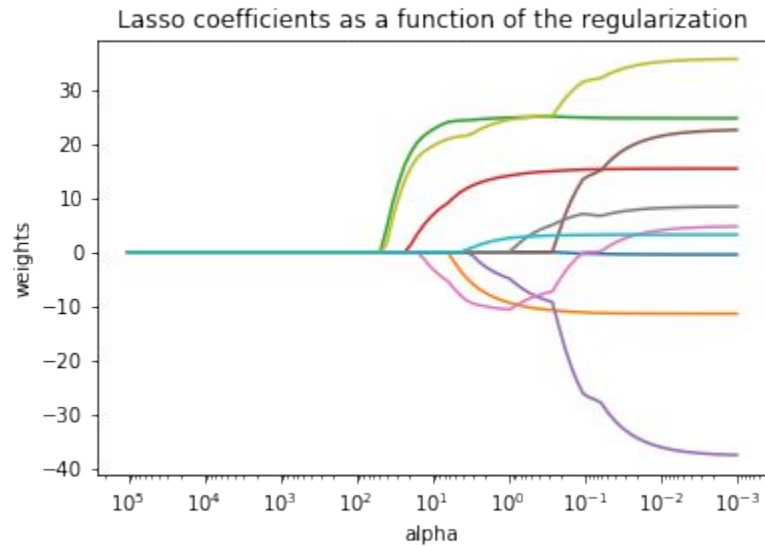
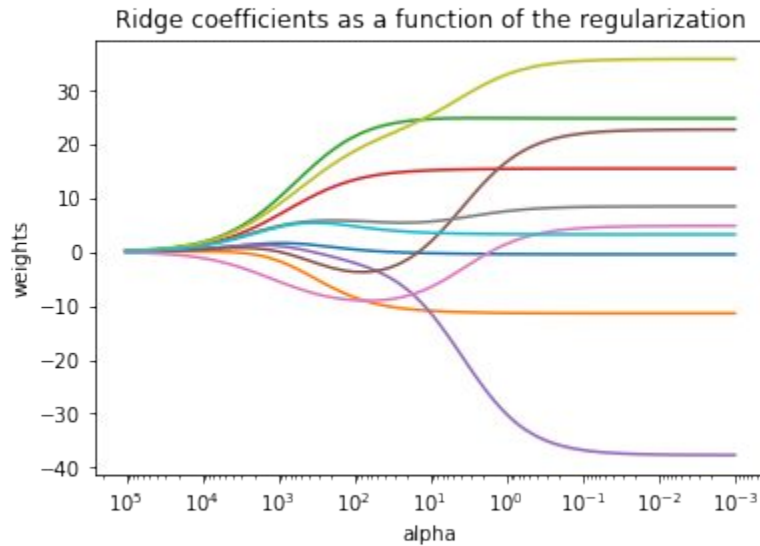
Lasso

$$\min_{\omega} ||\mathbf{y} - \mathbf{X}\omega||_2^2 + \alpha ||\omega||_1$$

- Capaz de anular algunos coeficientes (solución dispersa)
- Selección de características e interpretabilidad del modelo (también previene *overfitting*)



Lasso vs Ridge



```
from sklearn import datasets
diabetes = datasets.load_diabetes()
X = diabetes.data
y = diabetes.target
```



■ Lo que puedes hacer ahora ...

- Implementar algoritmos de regresión lineal (+regularización) y Lasso
- Entender cómo afecta el parámetro de regularización a los coeficientes del modelo
- Entender las diferencias entre Ridge y Lasso
- Entender cómo afecta el parámetro de regularización en regresión logística a la frontera de separación



■ Referencias

- An Introduction to Statistical Learning.
 - Capítulo 3.



Hora de practicar

