Regularización para regresión y clasificación

Mathieu Kessler

Departamento de Matemática Aplicada y Estadística
Universidad Politécnica de Cartagena

Cartagena

El problema del sobreajuste

- Si añadimos características adicionales (por ejemplo potencias de las características) podemos a veces mejorar el ajuste a nuestro conjunto de entrenamiento, o mejorar nuestra capacidad de clasificar sus observaciones.

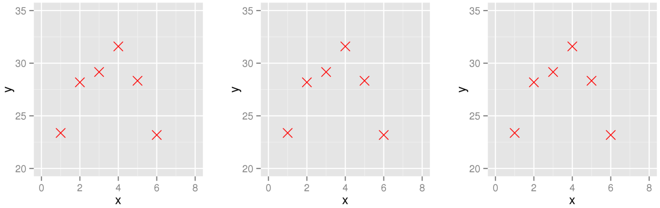
El problema del sobreajuste

- Si añadimos características adicionales (por ejemplo potencias de las características) podemos a veces mejorar el ajuste a nuestro conjunto de entrenamiento, o mejorar nuestra capacidad de clasificar sus observaciones.
- Pero, puede ser que la mejora de este ajuste sea artificial

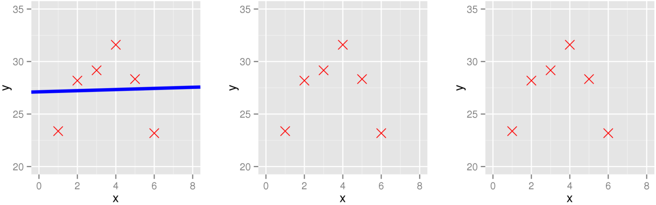
El problema del sobreajuste

- Si añadimos características adicionales (por ejemplo potencias de las características) podemos a veces mejorar el ajuste a nuestro conjunto de entrenamiento, o mejorar nuestra capacidad de clasificar sus observaciones.
- Pero, puede ser que la mejora de este ajuste sea artificial
- Hemos mejorado aparentemente el ajuste para el conjunto de entrenamiento pero puede empeorar en el conjunto de test.

Ejemplo: Ajuste con una característica x

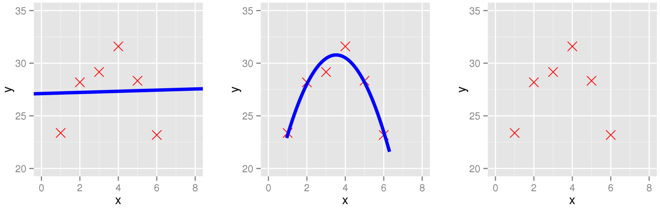


Ejemplo: Ajuste con una característica x



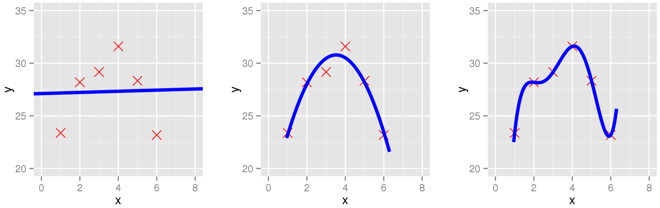
- Ajuste con una recta: $y = \theta_0 + \theta_1 x$, mal ajuste "high bias"

Ejemplo: Ajuste con una característica x



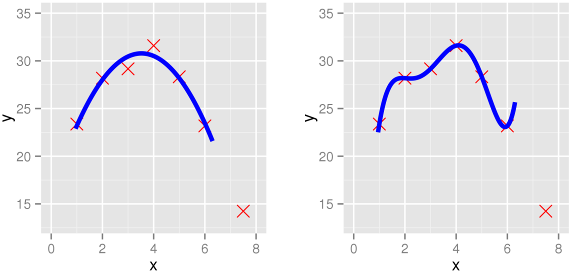
- Ajuste con una recta: $y = \theta_0 + \theta_1 x$, mal ajuste "high bias"
- Parábola $y = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$, ajuste adecuado.

Ejemplo: Ajuste con una característica x

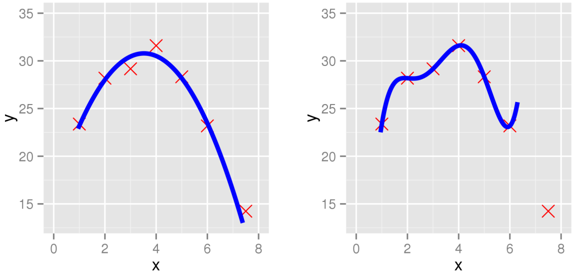


- Ajuste con una recta: $y = \theta_0 + \theta_1 x$, mal ajuste. "High bias."
- Parábola $y = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$, ajuste adecuado.
- Polinomio orden 5: $y = \theta_0 + \theta_1 x + \ldots + \theta_5 x^5$, ajuste artificialmente bueno... "High variance."

Si usamos los modelos para predecir

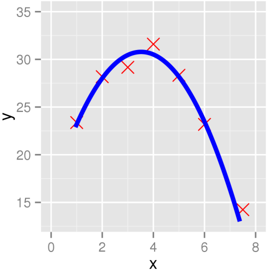


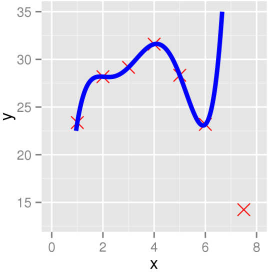
Si usamos los modelos para predecir



- Parábola $y = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$, predicción correcta.

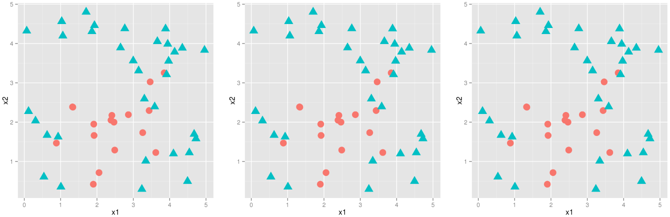
Si usamos los modelos para predecir



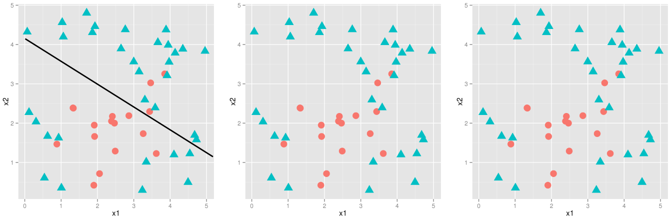


- Parábola $y = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$, predicción correcta.
- Polinomio orden 5: $y = \theta_0 + \theta_1 x + \ldots + \theta_5 x^5$, predicción muy mala.

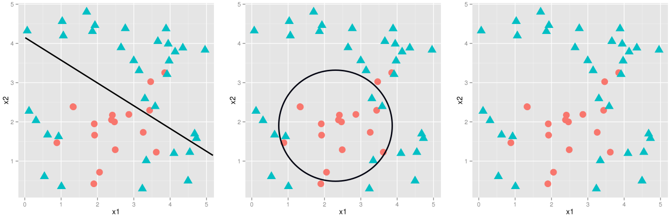
Ejemplo: Clasificación con dos características x_1 y x_2.



Ejemplo: Clasificación con dos características x_1 y x_2.

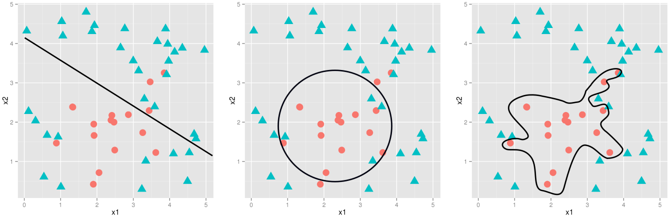


- Clasificación, frontera es una recta: $y = g(\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2)$.



- Clasificación, frontera es una recta: $y = g(\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2)$.
- Clasificación, frontera es un círculo:
  $y = g(\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_1 x_1^2 + \ldots)$.

Ejemplo: Clasificación con dos características x_1 y x_2.



- Clasificación, frontera es una recta: $y = g(\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2)$.
- Clasificación, frontera es un círculo:
  $y = g(\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_1 x_1^2 + \ldots)$.
- Clasificación, frontera con polinomios orden superior
  $y = g(\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_1 x_1^2 + \ldots + \theta_1 x_1^6 + \ldots)$.

Para evitar el sobre ajuste (overfitting)

Para evitar el sobre ajuste (overfitting)

- Podríamos seleccionar manualmente las características que pensamos que pueden servir, sin pasarnos...

Para evitar el sobre ajuste (overfitting)

- Podríamos seleccionar manualmente las características que pensamos que pueden servir, sin pasarnos...
- Podemos usar técnicas de selección de modelos: criterios estadísticos de elección de las características más informativas.

Para evitar el sobre ajuste (overfitting)

- Podríamos seleccionar manualmente las características que pensamos que pueden servir, sin pasarnos...
- Podemos usar técnicas de selección de modelos: criterios estadísticos de elección de las características más informativas.
- Podemos introducir un término en la función coste que penaliza los ajustes con demasiadas variables...

Para evitar el sobre ajuste (overfitting)

- Podríamos seleccionar manualmente las características que pensamos que pueden servir, sin pasarnos...
- Podemos usar técnicas de selección de modelos: criterios estadísticos de elección de las características más informativas.
- Podemos introducir un término en la función coste que penaliza los ajustes con demasiadas variables...
  Es lo que llamamos la regularización.

Modificación de la función coste: regresión lineal

Consideramos la regresión lineal múltiple, la función coste es:

$$J(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(\theta, x_{i\bullet}))^2 ,$$

donde $\theta = (\theta_0, \ldots, \theta_k)$ y $x_{i\bullet}$ denota el vector de características para el individuo i.

Modificación de la función coste: regresión lineal

Consideramos la regresión lineal múltiple, la función coste es:

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(\theta, x_{i\bullet}))^2\,,$$

donde $\theta = (\theta_0, \ldots, \theta_k)$ y $x_{i\bullet}$ denota el vector de características para el individuo i.

Regularización: primera opción, l_2.

Añadimos un término:

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(\theta, x_{i\bullet}))^2 + \frac{\lambda}{2n}\sum_{j=1}^{k}\theta_i^2,$$

donde λ es un número positivo que tendremos que fijar.

Regularización para regresión lineal

La nueva función coste:

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(\theta, x_{i\bullet}))^2 + \frac{\lambda}{2n}\sum_{j=1}^{k}\theta_i^2,$$

Regularización para regresión lineal

La nueva función coste:

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(\theta, x_{i\bullet}))^2 + \frac{\lambda}{2n}\sum_{j=1}^{k}\theta_i^2,$$

- Ojo: el sumatorio $\sum_{j=1}^{k}\theta_i^2$ empieza en $j = 1$, no incluye θ_0 (porque corresponde al término constante).

Regularización para regresión lineal

La nueva función coste:

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(\theta, x_{i\bullet}))^2 + \frac{\lambda}{2n}\sum_{j=1}^{k}\theta_i^2,$$

- Ojo: el sumatorio $\sum_{j=1}^{k}\theta_i^2$ empieza en $j=1$, no incluye θ_0 (porque corresponde al término constante).
- Si λ es grande, para minimizar la función coste, se tenderá hacia una solución donde $\theta_1^2 + \cdots + \theta_k^2$ será pequeño, por ejemplo si varios son casi nulos.

Regularización para regresión lineal

La nueva función coste:

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(\theta, x_{i\bullet}))^2 + \frac{\lambda}{2n}\sum_{j=1}^{k}\theta_i^2,$$

- Ojo: el sumatorio $\sum_{j=1}^{k}\theta_i^2$ empieza en $j = 1$, no incluye θ_0 (porque corresponde al término constante).
- Si λ es grande, para minimizar la función coste, se tenderá hacia una solución donde $\theta_1^2 + \cdots + \theta_k^2$ será pequeño, por ejemplo si varios son casi nulos.
- Ajustaremos el valor de λ, según si queremos penalizar mucho las soluciones con muchos términos significativos o no...

Regularización para regresión lineal

La nueva función coste:

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(\theta, x_{i\bullet}))^2 + \frac{\lambda}{2n}\sum_{j=1}^{k}\theta_i^2,$$

- Hablamos de regularización l_2, porque el término que se añade es proporcional a la norma l_2 del vector de parámetros $\theta[-1] = (0, \theta_1, \ldots, \theta_k).$,

$$||\theta[-1]||^2 = \sum_{j=1}^{k}\theta_i^2.$$

Regularización para regresión lineal

La nueva función coste:

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(\theta, x_{i\bullet}))^2 + \frac{\lambda}{2n}\sum_{j=1}^{k}\theta_i^2,$$

- Hablamos de regularización l_2, porque el término que se añade es proporcional a la norma l_2 del vector de parámetros $\theta[-1] = (0, \theta_1, \ldots, \theta_k)$.,

$$||\theta[-1]||^2 = \sum_{j=1}^{k}\theta_i^2.$$

Esta versión de la regresión regularizada se llama "Ridge regression".

Función de coste regularizada para la regresión múltiple.

Recordemos las notaciones para la regresión lineal múltiple.
Para nuestro conjunto de entrenamiento que consta de n filas, habíamos introducido:

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \quad \text{y la matriz} \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_{10} & x_{11} & \cdots & x_{1k} \\ x_{20} & x_{21} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n0} & x_{n1} & \cdots & x_{nk} \end{pmatrix}$$

Función de coste regularizada para la regresión lineal

La función de coste regularizada para la regresión lineal

$$\boxed{J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - x_{i\bullet}^T\theta\right)^2 + \frac{\lambda}{2n}\sum_{j=1}^{k}\theta_j^2 = \frac{1}{n}||\mathbf{y} - \mathbf{X}\theta||^2 + \frac{\lambda}{2n}||\theta[-1]||^2,}$$

donde $\theta[-1] = (0, \theta_1, \ldots, \theta_k)$.

Función de coste regularizada para la regresión lineal

La función de coste regularizada para la regresión lineal

$$\boxed{J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - x_{i\bullet}^T\theta\right)^2 + \frac{\lambda}{2n}\sum_{j=1}^{k}\theta_j^2 = \frac{1}{n}||\mathbf{y} - \mathbf{X}\theta||^2 + \frac{\lambda}{2n}||\theta[-1]||^2,}$$

donde $\theta[-1] = (0, \theta_1, \ldots, \theta_k)$.
El gradiente es por lo tanto:

$$\boxed{\nabla J(\theta) = \tfrac{2}{n}\mathbf{X}^T \cdot (\mathbf{X}\theta - y) + \tfrac{\lambda}{n}\theta[-1].}$$

Ridge regression en scikit-learn

Para implementar Ridge regression en scikit-learn, se puede usar la clase Ridge del súbmodulo linear_model.

```
from sklearn.linear_model import Ridge
```

Ridge regression en scikit-learn

Para implementar Ridge regression en scikit-learn, se puede usar la clase Lasso del súbmodulo linear_model.

```
from sklearn.linear_model import Lasso
```

A la hora de instanciar nuestro estimador, podemos fijar el valor de λ que multiplica la norma l_2, especificando el parámetro alpha.

```
lasso_reg = Lasso(alpha=0.1)
```

Regularización: segunda opción, l_1.

Añadimos un término:

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(\theta, x_{i\bullet}))^2 + \frac{\lambda}{n}\sum_{j=1}^{k}|\theta_i|,$$

donde λ es un número positivo que tendremos que fijar.

Regularización: segunda opción, l_1.

Añadimos un término:

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(\theta, x_{i\bullet}))^2 + \frac{\lambda}{n}\sum_{j=1}^{k}|\theta_i|,$$

donde λ es un número positivo que tendremos que fijar.

Esta versión de la regresión regularizada se llama *Least Absolute Shrinkage and Selection Operator Regression*, i.e. "Lasso regression".

Regularización: segunda opción, l_1.

Añadimos un término:

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(\theta, x_{i\bullet}))^2 + \frac{\lambda}{n}\sum_{j=1}^{k}|\theta_i|,$$

donde λ es un número positivo que tendremos que fijar.

Esta versión de la regresión regularizada se llama *Least Absolute Shrinkage and Selection Operator Regression*, i.e. "Lasso regression".

Una característica importante de la regresión Lasso es que descarta completamente las características menos importantes (sus coeficientes son 0).

Lasso regression en scikit-learn

Para implementar Lasso regression en scikit-learn, se puede usar la clase ElasticNet del súbmodulo linear_model.

```
from sklearn.linear_model import ElasticNet
```

Lasso regression en scikit-learn

Para implementar Lasso regression en scikit-learn, se puede usar la clase LogisticRegression del súbmodulo linear_model.

```
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
```

A la hora de instanciar nuestro estimador, podemos fijar el valor de λ que multiplica la norma l_1, especificando el parámetro alpha.

```
LogisticRegression
```

Regularización: tercera opción, Elastic net.

Se trata de una combinación de Lasso y de Ridge:

Añadimos dos términos:

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(\theta, x_{i\bullet}))^2 + r\frac{\lambda}{n}\sum_{j=1}^{k}|\theta_i| + (1-r)\frac{\lambda}{2n}\sum_{j=1}^{k}(\theta_i)^2,$$

donde λ es un número positivo y r es un número entre 0 y 1 que tendremos que fijar.

Regularización: tercera opción, Elastic net.

Se trata de una combinación de Lasso y de Ridge:

Añadimos dos términos:

$$J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(\theta, x_{i\bullet}))^2 + r\frac{\lambda}{n}\sum_{j=1}^{k}|\theta_i| + (1-r)\frac{\lambda}{2n}\sum_{j=1}^{k}(\theta_i)^2,$$

donde λ es un número positivo y r es un número entre 0 y 1 que tendremos que fijar.

Recomendación

- Cuando tenemos bastantes características, es buena idea usar una regresión regularizada.
- Si sospechamos que hay varias características que no son relevantes, entonces se recomienda usar Lasso o Elastic Net.
- Elastic Net is preferible cuando hay más características que individuos en el conjunto de aprendizaje o cuando están las características muy correlacionadas.

Elastic net regression en `scikit-learn`

Para implementar Elastic Net `scikit-learn`, se puede usar la clase `'l2'`, `'l1'`, `'elasticnet'` del súbmodulo `'none'`.

`alpha`

Elastic net regression en `scikit-learn`

Para implementar Elastic Net `scikit-learn`, se puede usar la clase `alpha` del súbmodulo `LogisticRegression`.

`'l2'`

A la hora de instanciar nuestro estimador, podemos fijar el valor de λ que multiplica las normas l_1 y l_2, especificando el parámetro `alpha`, y el valor de r que indica el peso de la norma l_1 frente a la norma l_2, especificando el parámetro `l1_ratio`

`C=1`

Función de coste regularizada para la regresión logística

Vimos en las transparencias de la clase anterior que, para la regresión logística, la función de coste sin regularizar era:

$$J(\theta) = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left\{y_i \log(h_\theta(x_{i\bullet})) + (1-y_i)\log(1-h_\theta(x_{i\bullet}))\right\},$$

donde $h_\theta(x_{i\bullet}) = g(x_{i\bullet}\theta) = 1/(1+exp(-x_{i\bullet}\theta))$.

Función de coste regularizada para la regresión logística

Además el gradiente es.

$$\nabla_\theta J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{x_{i\bullet}\cdot(h_\theta(x_{i\bullet}) - y_i)\}.$$

Si usamos la matriz de diseño $\mathbf{X}$, obtuvimos en forma compacta:

$$\nabla_\theta J(\theta) = \frac{1}{n}\mathbf{X}^T\cdot(\mathbf{H}_\theta - y).$$

donde $\mathbf{H}$ denota el vector columna:

$$\mathbf{H}_\theta = \begin{pmatrix} h_\theta(x_{1\bullet}) \\ h_\theta(x_{2\bullet}) \\ \vdots \\ h_\theta(x_{n\bullet}) \end{pmatrix}$$

Función de coste regularizada para la regresión logística

Podemos regularizar la función de coste para la regresión lógistica igual que lo hicimos para la regresión lineal.

Función de coste regularizada para la regresión logística

Podemos regularizar la función de coste para la regresión lógistica igual que lo hicimos para la regresión lineal.

- Podemos usar la regularización l_2:

$$\boxed{J(\theta) = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{y_i \log(h_\theta(x_{i\bullet})) + (1-y_i)\log(1-h_\theta(x_{i\bullet}))\} + \frac{\lambda}{2n}\sum_{j=1}^{k}\theta_j^2}$$

Función de coste regularizada para la regresión logística

Podemos regularizar la función de coste para la regresión lógistica igual que lo hicimos para la regresión lineal.

- Podemos usar la regularización l_2:

$$\boxed{J(\theta) = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{y_i \log(h_\theta(x_{i\bullet})) + (1-y_i)\log(1-h_\theta(x_{i\bullet}))\} + \frac{\lambda}{2n}\sum_{j=1}^{k}\theta_j^2}$$

- o la regularización l_1

$$\boxed{J(\theta) = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{y_i \log(h_\theta(x_{i\bullet})) + (1-y_i)\log(1-h_\theta(x_{i\bullet}))\} + \frac{\lambda}{n}\sum_{j=1}^{k}|\theta_j|}$$

Función de coste regularizada para la regresión logística

Podemos regularizar la función de coste para la regresión lógistica igual que lo hicimos para la regresión lineal.

- Podemos usar la regularización l_2:

$$\boxed{J(\theta) = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{y_i \log(h_\theta(x_{i\bullet})) + (1-y_i)\log(1-h_\theta(x_{i\bullet}))\} + \frac{\lambda}{2n}\sum_{j=1}^{k}\theta_j^2}$$

- o la regularización l_1

$$\boxed{J(\theta) = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{y_i \log(h_\theta(x_{i\bullet})) + (1-y_i)\log(1-h_\theta(x_{i\bullet}))\} + \frac{\lambda}{n}\sum_{j=1}^{k}|\theta_j|}$$

- o su combinación en Elastic net.

Regresión logística en scikit-learn

Ya vimos que para implementar la regresión logística en `scikit-learn`, se puede usar la clase `l1_ratio` del súbmodulo `penalty='elasticnet'`. **?? PythonTeX ??**

Regresión logística en `scikit-learn`

Ya vimos que para implementar la regresión logística en `scikit-learn`, se puede usar la clase **??** del súbmodulo **??**.

?? PythonTeX ??

- **??** admite el parametro `penalty` que puede tomar el valor **??** o **??**.

Regresión logística en `scikit-learn`

Ya vimos que para implementar la regresión logística en `scikit-learn`, se puede usar la clase **??** del súbmodulo **??**.

?? PythonTeX ??

- **??** admite el parametro `penalty` que puede tomar el valor **??** o **??**.
- En lugar de implementar el parámetro **??**, usa el parámetro **??** que es la inversa de λ (**??**).

Regresión logística en `scikit-learn`

Ya vimos que para implementar la regresión logística en `scikit-learn`, se puede usar la clase **??** del súbmodulo **??**.
?? PythonTeX ??

- **??** admite el parametro `penalty` que puede tomar el valor **??** o **??**.
- En lugar de implementar el parámetro **??**, usa el parámetro **??** que es la inversa de λ (**??**).
- Por defecto, **??** usa la regularización **??** con **??**!

Regresión logística en `scikit-learn`

Ya vimos que para implementar la regresión logística en `scikit-learn`, se puede usar la clase **??** del súbmodulo **??**.
?? PythonTeX ??

- **??** admite el parametro `penalty` que puede tomar el valor **??** o **??**.
- En lugar de implementar el parámetro **??**, usa el parámetro **??** que es la inversa de λ (**??**).
- Por defecto, **??** usa la regularización **??** con **??**!
- También admite el parámetro **??** si **??**.