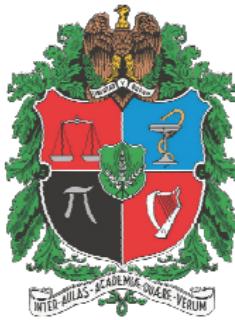


Modelo lineal y mínimos cuadrados

A. M. Alvarez-Meza, Ph.D.
amalvarezme@unal.edu.co

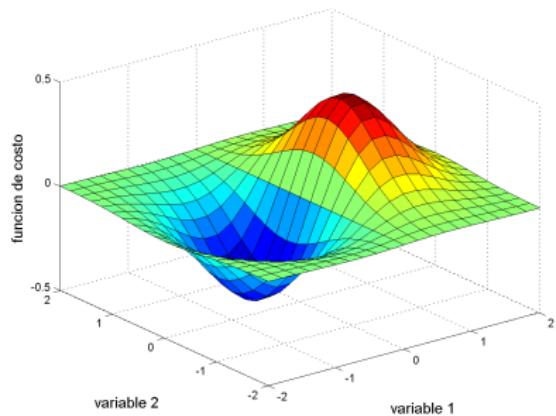
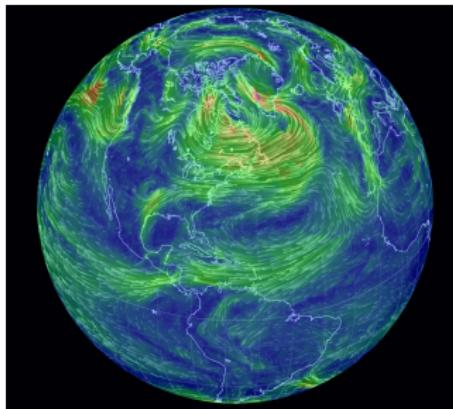
Departamento de ingeniería eléctrica, electrónica y computación
Universidad Nacional de Colombia-sede Manizales



Contenido

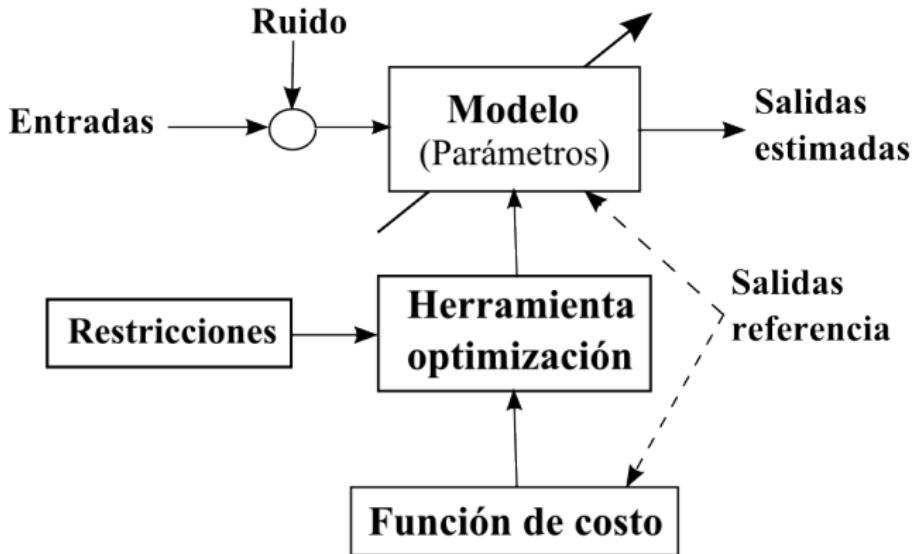
- 1 Nociones básicas de optimización
- 2 Modelo lineal y mínimos cuadrados
- 3 Modelo lineal regularizado
- 4 Extensión a representaciones no lineales

Por qué debemos resolver problemas de optimización?



Ciencia de datos, aprendizaje de máquina, minería de datos...
todos tienen que optimizar algo!

Aprendizaje de máquina y optimización



Buscamos información relevante en nuestros datos
a partir de la optimización de un modelo matemático

Optimización con y sin restricciones

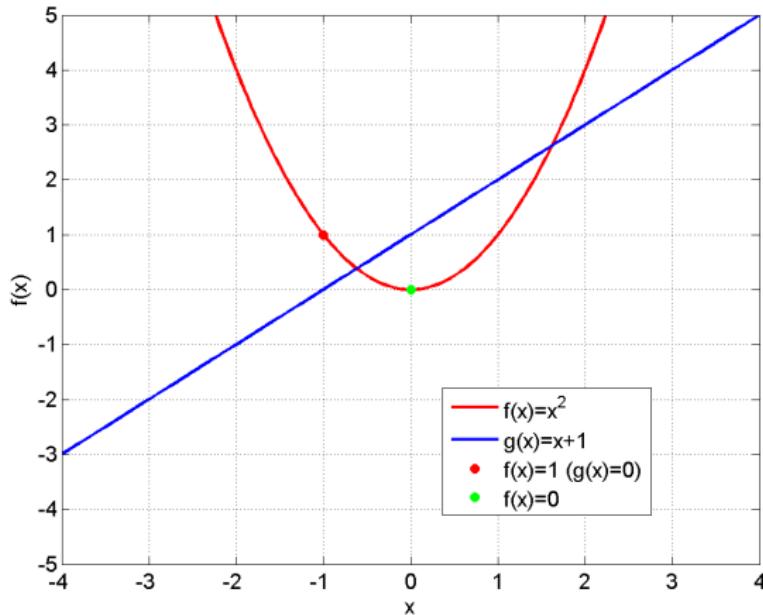
$$x^* = \arg \min_x f(x)$$

$$\text{s.t. } g_i(x) = c_i$$

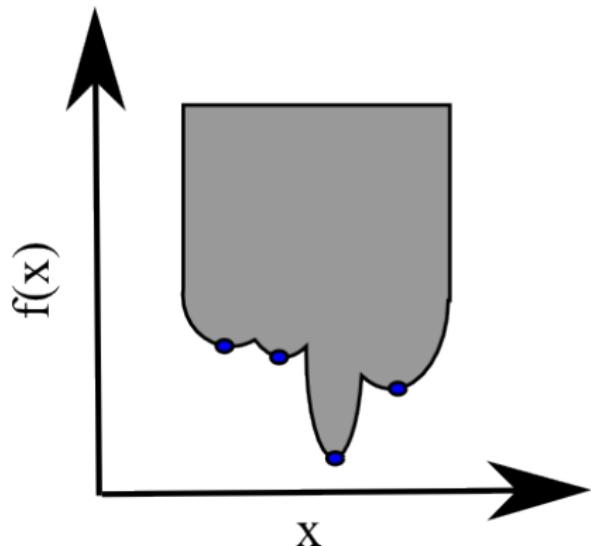
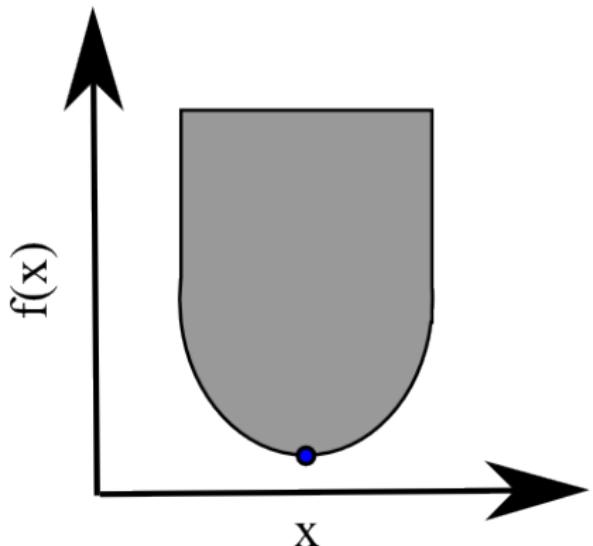
$$h_j(x) > d_j$$

- x^* : solución "óptima".
- $f(x)$: función de costo.
- $g_i(x)$: restricciones de igualdad ($i \in [1, D]$).
- $h_j(x)$: restricciones de desigualdad ($j \in [1, Q]$).
- x puede ser un escalar, un vector o una matriz.

Optimización con y sin restricciones



Convexa o no convexa?



- Función convexa: único mínimo.
- Función no convexa: mínimos locales.
- La convexidad del problema de optimización depende de la función de costo y de las restricciones.

La función Lagrangiano

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^D \lambda_i g_i(\mathbf{x})$$

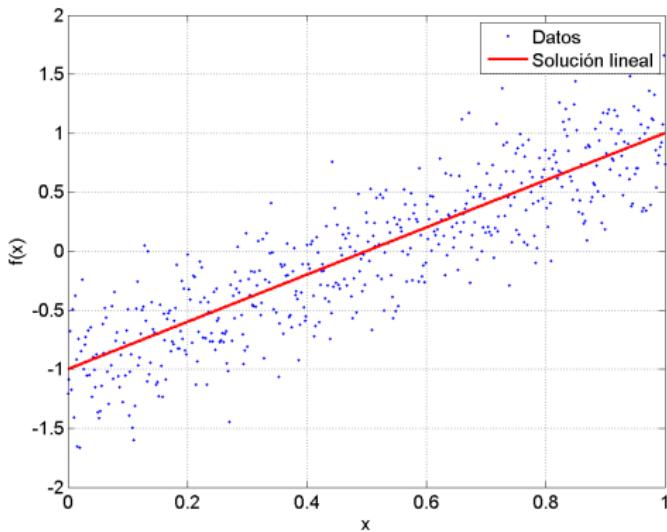
- Relaciona el gradiente de la función de costo y el gradiente de las restricciones.
- Solución de interés: minimizar la función de costo/maximizar las restricciones.

$$\frac{dL(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})}{d\mathbf{x}} = 0$$
$$\frac{dL(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})}{d\boldsymbol{\lambda}} = 0$$

Aprendizaje de máquina y optimización: resumiendo

- Ciencia de los datos: extraer información relevante desde datos (ejemplo: ajuste de datos).
- Optimización: herramienta matemática para ajustar algún modelo de "extracción de información" desde datos.
- Hipótesis \Rightarrow función de costo, restricciones.
- Función de costo: calidad de la solución.
- Restricciones: viabilidad de la solución.

Modelo lineal



- $y = f(x) = mx + b \Rightarrow$ noción lineal desde álgebra básica.
- $\mathbf{y} = f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \mathbf{x} + \mathbf{b} \Rightarrow$ extensión álgebra vectorial.
- Los datos no siempre llegan limpios y no siempre comparten relaciones lineales!

Modelo lineal: extensión matricial

$$\hat{\mathbf{y}} = f(\mathbf{X}) = \mathbf{X}\mathbf{w} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1P} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2P} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N1} & x_{N2} & \dots & x_{NP} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_P \end{bmatrix}$$

- $\hat{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^N$, $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times P}$, $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^P$
- N : # muestras.
- P : # características.

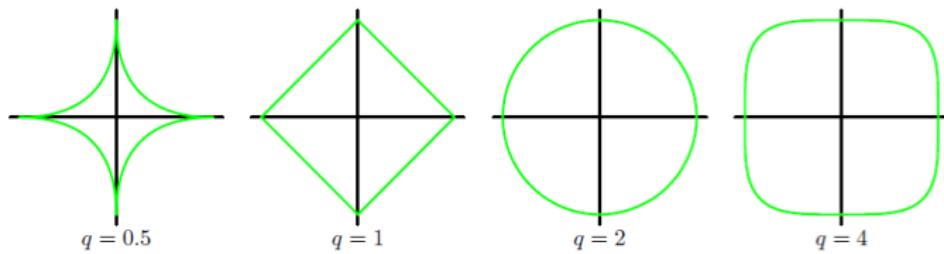
Cómo encontrar los parámetros del modelo lineal (\mathbf{w})?

Mínimos cuadrados como función de costo

$$\epsilon(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^N (y_i - \mathbf{x}_i \mathbf{w})^2$$

- La función de costo de mínimos cuadrados se entiende como el cálculo de la norma-2 del error de aproximación.
- $\mathbf{e} \in \mathbb{R}^N$: vector de error, donde $e_i = y_i - f(\mathbf{x}_i) = y_i - \mathbf{x}_i \mathbf{w}$.
- $\epsilon(\mathbf{w}) = \|\mathbf{e}\|_q = \left(\sum_{i=1}^N |e_i|^q \right)^{\frac{1}{q}}$.

Mínimos cuadrados como función de costo



- Mínimos cuadrados: $\|\mathbf{e}\|_q = \left(\sum_{i=1}^N |e_i|^q \right)^{\frac{1}{q}}$; para $q = 2$.
- Por facilidad matemática se trabaja con $\epsilon(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{e}\|_2^2$.

Solución modelo lineal y mínimos cuadrados

$$\mathbf{w}^* = \arg \min_{\mathbf{w}} \epsilon(\mathbf{w})$$

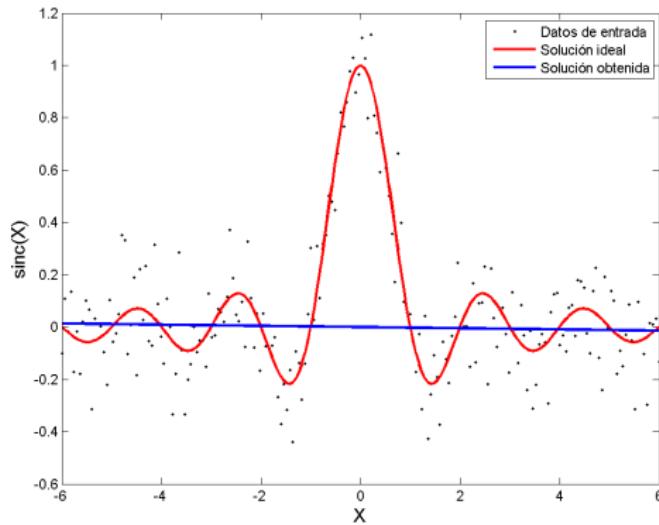
$$\mathbf{w}^* = \arg \min_{\mathbf{w}} \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|_2^2$$

$$\frac{d\epsilon(\mathbf{w})}{d\mathbf{w}} = \mathbf{y}^\top \mathbf{y} - 2\mathbf{y}^\top \mathbf{X}\mathbf{w} + \mathbf{w}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{X}\mathbf{w} = 0$$

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

- $(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top$: pseudoinversa de \mathbf{X} .
- $\mathbf{X}^\top \mathbf{X} \in \mathbb{R}^{P \times P}$: matriz que codifica las relaciones lineales entre las P características de \mathbf{X} .

Ejemplo modelo lineal



- Cómo tratamos con el ruido y relaciones no lineales?

La regularización del modelo lineal

- Se busca tratar con el mal condicionamiento de la matriz a invertir $(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1}$.
- El mal condicionamiento se relaciona con el rango de la matriz - valores propios.
- Nociones básicas de factorización matricial - SVD y EIG.
- Se busca la solución más simple que se ajuste mejor a los datos.

La regularización y la solución de un sistema de ecuaciones

- $\mathbf{A}\mathbf{w} = \mathbf{b} \Rightarrow \mathbf{w} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$: problema lineal clásico.
- En nuestro caso: $\mathbf{X}\mathbf{w} = \mathbf{y} \Rightarrow \mathbf{w} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}$.
- $(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top$ es la pseudoinversa de \mathbf{X} .
- Problema: la pseudoinversa no siempre es calculable/ no siempre es la mejor solución.
- Nuestros datos contienen ruido, falta información (rango de la matriz).
- Muchas variables - pocas ecuaciones linealmente independientes!

Repaso factorización en bases ortonormales

- La svd(\mathbf{X}) :

$$\mathbf{X} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^\top,$$

$\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{N \times P}$, $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{P \times P}$.

- La eig(\mathbf{C}) :

$$\mathbf{C} = \mathbf{X}^\top \mathbf{X} = \mathbf{V}\Delta\mathbf{V}^\top,$$

$\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{P \times P}$, $\Delta \in \mathbb{R}^{P \times P}$.

- La eig(\mathbf{K}) :

$$\mathbf{K} = \mathbf{X}\mathbf{X}^\top = \mathbf{U}\hat{\Delta}\mathbf{U}^\top,$$

$\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, $\hat{\Delta} \in \mathbb{R}^{N \times N}$.

- \mathbf{C} codifica relaciones entre características, \mathbf{K} codifica las relaciones entre las muestras.
- $\Delta = \hat{\Delta} = \mathbf{S}^2$, teniendo en cuenta el rango de la matriz.

El rango deficiente y el mal condicionamiento

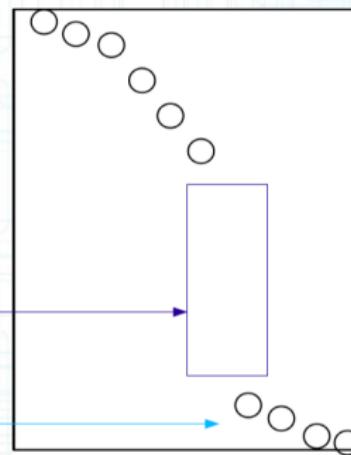
Rank Deficient

- Gap in the Singular Values



- Approx. Zero

- Noise!



Alistair Boyle, Feb 2009, SYS5906: Directed Studies -- Inverse Problems

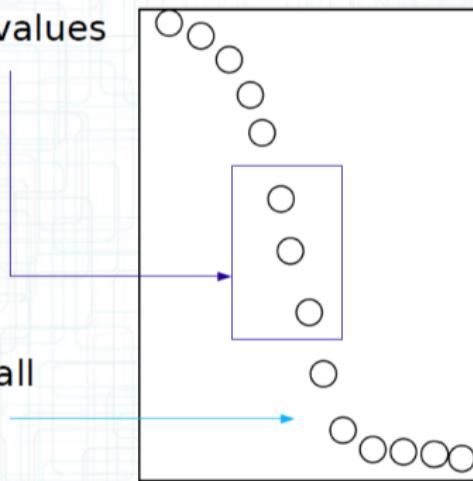
6

Los valores singulares (valores propios) me dan idea de que tanto ruido o que tanta información tengo en mis datos

El rango deficiente y el mal condicionamiento

Ill-Posed

- No gap in values



- Lots of small values

Alistair Boyle, Feb 2009, SYS5906: Directed Studies -- Inverse Problems

7

Los valores singulares (valores propios) me dan idea de que tanto ruido o que tanta información tengo en mis datos

Modelo lineal regularizado

$$\epsilon(\mathbf{w}, \lambda) = \frac{1}{2} \|\mathbf{e}\|_2^2 + \frac{1}{2} \lambda \|\mathbf{w}\|_2^2$$

- $\|\mathbf{e}\|_2^2$: cuantifica el desajuste entre los datos y el modelo lineal de aproximación.
- $\|\mathbf{w}\|_2^2$: cuantifica el sobreajuste (complejidad) de la solución.
- $\lambda \in \mathbb{R}^+$: parámetro de balance ("trade-off").
- Se necesita un λ que garantice una solución simple pero "exacta".

Solución del modelo lineal regularizado

$$\mathbf{w}^* = \arg \min_{\mathbf{w}} \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|_2^2 + \frac{1}{2} \lambda \|\mathbf{w}\|_2^2$$

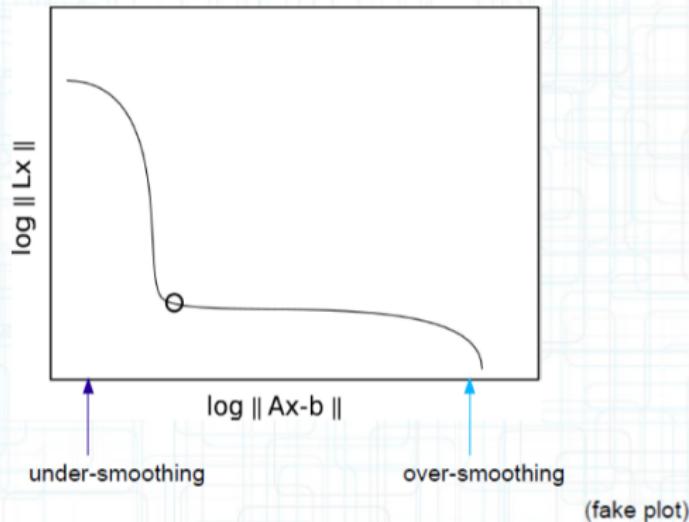
$$\frac{d\epsilon(\mathbf{w})}{d\mathbf{w}} = -\mathbf{X}^\top \mathbf{y} + \mathbf{X}^\top \mathbf{X}\mathbf{w} + \lambda \mathbf{w} = 0$$

$$\mathbf{w}^* = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}$$

- El término $\lambda \mathbf{I}$ ataca el mal condicionamiento de la matriz a invertir.
- Una solución alternativa es truncar la pseudoinversa (consultar que es TSVD).
- Sumarle un valor por la identica a la matriz "sube" los valores propios que están cercanos a cero.
- La "complejidad" de la solución se puede cuantificar con otras normas:
 - $\|\mathbf{w}\|_2, q = 2$: regularizador cuadrático.
 - $\|\mathbf{w}\|_1, q = 1$: lasso.

Selección de λ - L-curva

L-curve



Alistair Boyle, Feb 2009, SYS5906: Directed Studies -- Inverse Problems

Se busca el λ correspondiente al codo de la curva! ($L = \lambda I$)

Extensión a representaciones no lineales

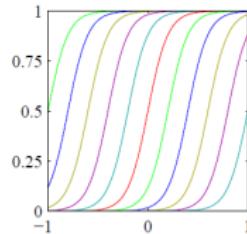
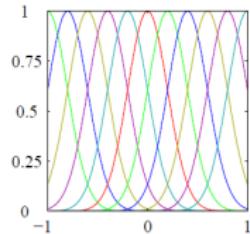
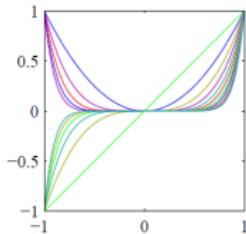
- La regularización nos ayuda a tratar con el ruido pero nuestro modelo sigue siendo lineal ("rectas").
- Una alternativa es extender las combinaciones lineales sobre funciones no lineales fijas de los datos de entrada:

$$\mathbf{y} = \Phi \mathbf{w},$$

donde $\Phi = [\phi^\top(\mathbf{x}_1), \phi^\top(\mathbf{x}_2), \dots, \phi^\top(\mathbf{x}_N)]^\top$, $\phi : \mathbb{R}^P \rightarrow \mathbb{R}^M$, $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^Q$.

- El vector \mathbf{w} se estima sobre \mathbb{R}^Q utilizando mínimos cuadrados (regularizado) como función de costo.
- El modelo sigue siendo lineal pero aplicado sobre un nuevo espacio de representación Φ que puede codificar relaciones no lineales.

Ejemplos funciones base



- Polinomial: $\phi(\mathbf{x}) = [\mathbf{x}^j]_{j=1}^D$, D : grado del polinomio.
- Exponencial: $\phi\left(\mathbf{x} | \{\boldsymbol{\mu}_j\}_{j=1}^Q, \sigma\right) = \left[\exp\left(\frac{-\|\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_j\|_2^2}{2\sigma^2}\right)\right]_{j=1}^Q$.
- Sigmoidal:
$$\phi\left(\mathbf{x} | \{\boldsymbol{\mu}_j\}_{j=1}^Q, \sigma\right) = [1 / (1 + \exp(\|\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_j\|_2^2 / (2\sigma^2)))]_{j=1}^Q$$
.

Solución del modelo lineal sobre representaciones no lineales

- Solución sobre \mathbf{X} :

$$\mathbf{w}^* = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}$$

$$y_i = \mathbf{x}_i \mathbf{w}$$

- Solución sobre Φ :

$$\mathbf{w}^* = (\Phi^\top \Phi + \lambda \mathbf{I})^{-1} \Phi^\top \mathbf{y}$$

$$\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times P}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^P, \mathbf{X}^\top \mathbf{X} \in \mathbb{R}^{P \times P}.$$

$$y_i = \phi(\mathbf{x}_i) \mathbf{w}$$

$$\Phi \in \mathbb{R}^{N \times Q}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^Q, \Phi^\top \Phi \in \mathbb{R}^{Q \times Q}.$$

Ejercicios Laboratorio

En un cuaderno (notebook) de responda a las siguientes preguntas con ejemplos concretos de implementación sobre Python. Envie/comparta su notebook al correo amalvarezme@unal.edu.co.

- Consultar el funcionamiento (modelo matemático, función de costo y optimización) de los siguientes algoritmos según su implementación en el paquete Scikit-Learn de Python:
 - `sklearn.linear_model.LinearRegression`
 - `sklearn.linear_model.Ridge`
 - `sklearn.linear_model.Lasso`
 - `sklearn.linear_model.ElasticNet`
 - `sklearn.kernel_ridge.KernelRidge` (describa los modelos no lineales disponibles).
- Realice un análisis comparitivo de los métodos de regression mediante validación cruzada sobre la base de datos de Covid-19 utilizando ventana deslizante de 5 y 7 días sobre EEUU, China y Colombia. Recuerde sintonizar los parámetros libres de cada algoritmo utilizando búsqueda por grilla y búsqueda aleatoria.

Referencias I



Hansen, P. C. (1998).

Rank-deficient and discrete ill-posed problems: numerical aspects of linear inversion.
(Vol. 4). Siam.



Bishop, C. (2006).

Pattern recognition.
Machine Learning, 128.