

## Regularización Paramétrica

Alcance:

- Conocer la terminología y conceptos básicos ocupados en machine learning.
- Tener un primer acercamiento a los problemas canónicos en máquinas de aprendizaje.
- Conocer las normas L1 y L2.
- Conocer la mecánica de regularización en los métodos Ridge, Lasso y Elastic-net.
- Utilizar los métodos de regularización para resolver problemas de dimensionalidad y mejora de desempeño predictivo.
- Implementar los métodos con la librería sklearn.
- Visualizar el comportamiento de las variables en ambos métodos.
- Analizar el comportamiento de las variables en ambos métodos.

## Précis: Conceptos básicos de Machine Learning (Aprendizaje de Máquinas)

Antes de comenzar a ver modelos y funciones matemáticas, es bueno dedicar tiempo a asimilar los conceptos básicos que serán utilizados en este módulo y que encontrarán en las referencias y artículos sobre Machine Learning en general.

En Machine Learning hay dos problemas canónicos dentro de los cuales se pueden clasificar casi la totalidad de los modelos actuales: El problema de la regresión y el de la clasificación.

### Regresión

Hace referencia a la habilidad de un modelo de ser capaz de entregarnos un output en forma numérica. Por ejemplo, predecir el valor de la temperatura para el día siguiente, predecir el valor de una acción en la bolsa o incluso la probabilidad de algún suceso. Todo método que entregue un output numérico se considera en general que está resolviendo un problema de regresión.

## Clasificación

Son problemas donde se quiere encontrar o predecir la clase a la que pertenece un cierto registro. Por ejemplo, dada la descripción física de una persona (peso, estatura, medidas corporales) determinar si es hombre o mujer, o determinar la acción más conveniente a ser realizada frente a ciertas condiciones. En todos estos casos, el output no es un número, sino una clase.

Con lo anterior en mente, podemos definir una máquina de aprendizaje (o un learner) como un modelo matemático con los siguientes componentes:

- **Una Función Objetivo:** Es la función matemática que el modelo tratará de optimizar, al optimizar esta función el modelo se entrena y aprende los parámetros correspondientes.
- **Entrenamiento:** Es el proceso mediante el cual la máquina optimiza su función objetivo y, al hacerlo, encuentra los valores de sus parámetros. Cada máquina distinta tiene parámetros distintos, por lo tanto para un mismo problema, resolverlo con dos o más máquinas distintas significa entrenar ambas máquinas por separado.
- **Espacio de parámetros:** Es el espacio en el cual se encuentran todos los posibles parámetros para la máquina que estamos implementando. El espacio de atributos no es lo mismo que el espacio de parámetros.
- **Atributos y variable objetivo:** Un atributo es una dimensión de medición, una columna en nuestro dataset. Por ejemplo, la estatura de una persona es un atributo, la edad es otro atributo dentro de una base de datos. La variable objetivo (o target) es la variable que queremos predecir, ésta puede ser numérica (regresión) o categórica (clasificación), por ejemplo, el sexo de una persona (categórica) o la edad de la misma (numérica).

## El proceso de entrenamiento

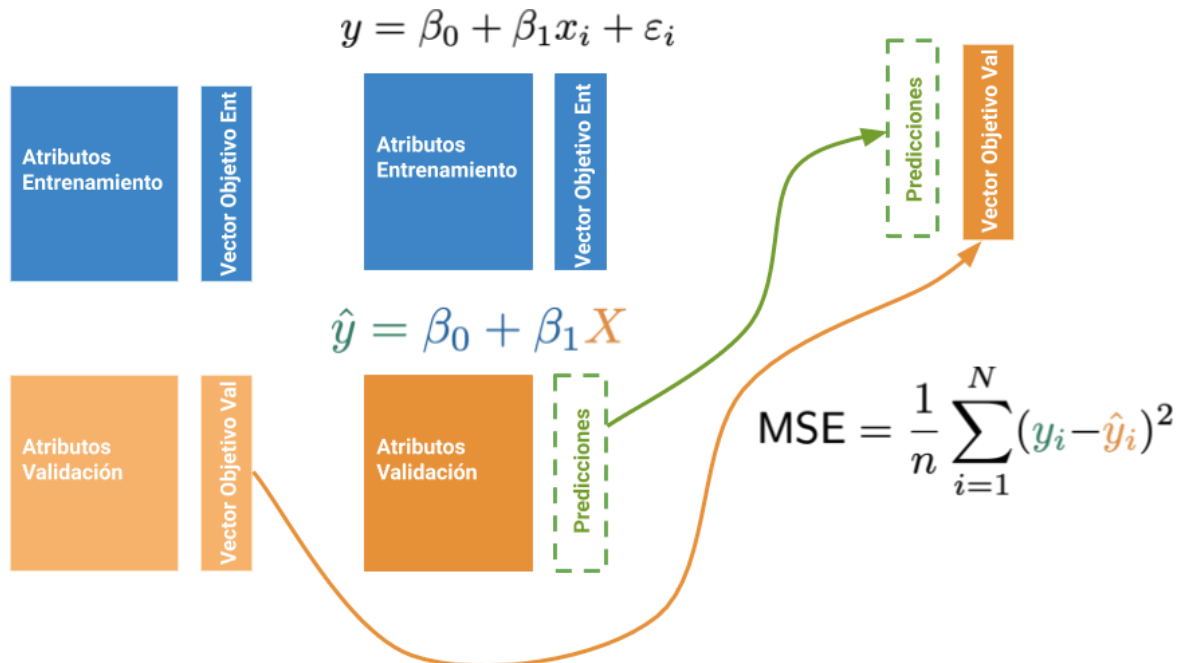


Imagen 1. Proceso de entrenamiento.

Una vez definido los elementos básicos para implementar una máquina de aprendizaje, definiremos los pasos estándares para obtener un learner efectivo.

Se puede resumir en los siguientes pasos:

- División de la muestra: Mediante la división de la muestra en conjuntos de entrenamiento y validación nos aseguramos de poder "replicar" el comportamiento de nuestro modelo en un nuevo conjunto de datos.
- Entrenamiento del modelo: De esta manera, generaremos el entrenamiento de un modelo candidato que tendrá una combinación de parámetros que permitan generar predicciones.
- Evaluación del modelo: Para evitar vicios en el entrenamiento, parcelamos un conjunto de datos para el comportamiento del modelo en un nuevo conjunto de datos.

## Subajuste y sobreajuste

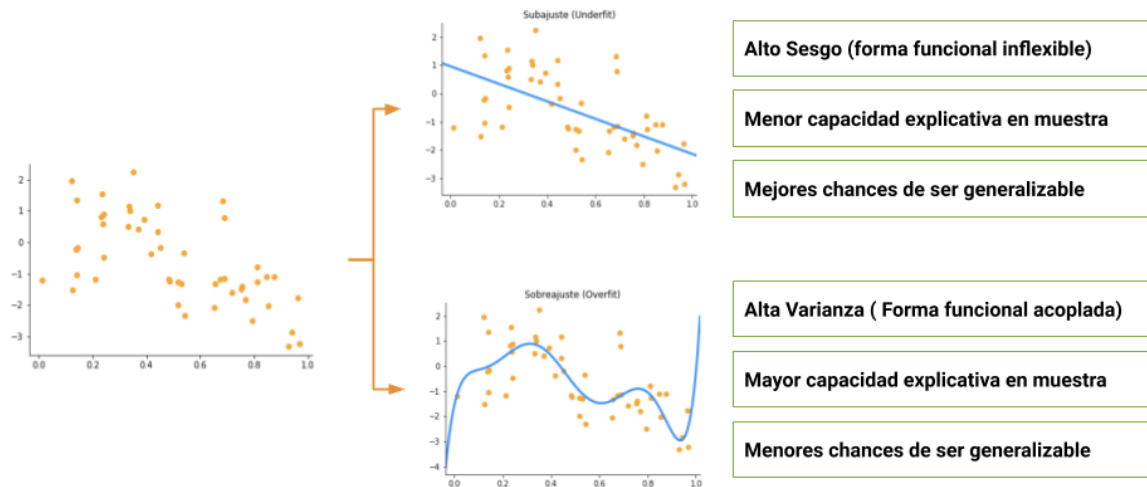


Imagen 2. Subajuste y sobreajuste.

- **Overfitting (sobre-ajuste):** Fenómeno en el cual nuestro modelo aprendió demasiado bien el conjunto de datos de entrenamiento. Como consecuencia de esto, el modelo generó reglas internas que se apegan demasiado a estos datos y al evaluarlo en datos que nunca antes ha visto (datos nuevos), se comporta mal. Un ejemplo simple para recordar esta definición es pensar en un mal estudiante que aprende de memoria como hacer los ejercicios de la guía, sin entender en realidad el fenómeno que ocurre por detrás, como es de esperarse, cuando llega el momento de la prueba/certamen, no es capaz de generalizar lo poco que sabe y le va mal. Usualmente evitamos el overfitting implementando técnicas de regularización.
- **Underfitting (sub-ajuste):** Fenómeno en el cual nuestro modelo aprendió muy poco sobre el fenómeno subyacente en los datos y no es capaz de generalizar lo que aprendió durante el entrenamiento a datos nuevos. Usualmente evitamos el underfitting implementando técnicas de data augmentation o simplemente recolectando más data.

## Regularización Paramétrica y métodos de contracción (shrinkage methods)

Recordando nuestras bases estadísticas, cuando queremos estimar ciertos parámetros de alguna distribución o modelo utilizando ciertos datos disponibles, lo haremos mediante el Método de Máxima Verosimilitud, pues este nos entrega estimadores casi insesgados con varianza casi mínima. Sin embargo, para muchas aplicaciones y modelos modernos esta aproximación es ineficiente o inadecuada debido a la alta cantidad de atributos. Tener estimadores insesgados se ha convertido en un lujo que, por lo general, no podremos permitirnos.

La regresión lineal clásica ya vista se apoya en una versión del estimador MLE (Maximum Likelihood Method) para encontrar los parámetros del modelo. Recordemos la notación y forma de una regresión lineal multivariada, de forma matricial:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X} \cdot \vec{\beta}$$

O escrito de otra forma:

$$y_i = \sum_{j=1}^p x_{i,j} \beta_j + \beta_0$$

Donde:

$$\beta_j$$

j-ésimo coeficiente asociado al atributo/columna j.

$$x_{i,j}$$

i-ésimo registro de la columna j del dataset.

$$\beta_0$$

Intercepto de la regresión.

$$p$$

Es la dimensión del dataset, o dicho de otra forma, la cantidad de columnas/atributos que tenemos.

En nuestro modelo lineal, los parámetros que se deben encontrar al entrenar son los coeficientes

$$\beta_j$$

que definen la recta.

En este modelo usamos una función objetivo que minimiza la suma de los cuadrados de los errores (SSE):

$$\beta_{\text{OLS}} = \underset{\beta}{\operatorname{argmin}} \sum_i^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

## Digresión: Complejidad computacional y la regresión lineal

Un aspecto importante a considerar a lo largo de todo este módulo es la complejidad computacional de entrenar nuestros modelos. No es lo mismo entrenar un modelo con 1 parámetro (como una regresión lineal simple univariada), que entrenar una red neuronal con una cantidad de parámetros del orden de los millones. No entraremos en detalles sobre cómo calcular la complejidad computacional de un algoritmo, pero si es bueno tener una buena intuición sobre este tema.

En general, un algoritmo (o modelo de entrenamiento en nuestro caso) es más complejo computacionalmente si realiza más operaciones elementales (como multiplicar dos números o sumarlos). Por lo tanto para un cierto modelo, la complejidad la podremos intuir considerando cuantas operaciones va a tener que realizar para antes de poder minimizar la función objetivo a un cierto valor aceptable (o mínimo).

En el caso de la regresión lineal, la complejidad lamentablemente no la podremos intuir sin incluir notación matricial engorrosa y tener que analizar casos de singularidades, sin embargo, de la regresión lineal podemos quedarnos con dos cosas:

1. Mientras más grande sea la matriz de atributos (filas y columnas del dataset) más operaciones tendrá que realizar, aumentando su tiempo de ejecución.
2. La regresión lineal, a diferencia de los métodos que veremos luego en el módulo, no es un método iterativo, es decir, encuentra el mínimo de la función objetivo sin necesidad de ir acercándose poco a poco a la solución. Esto es clave para analizar la complejidad del modelo pues en los modelos iterativos tendremos que decidir cuántas iteraciones hacer, considerando que cada iteración añade un costo correspondiente en complejidad.



## Intuición base sobre los métodos de regularización

Cuando nos enfrentamos a datos donde la cantidad de atributos es sustancialmente mayor a la cantidad de observaciones, podemos sufrir de sobre-ajuste en nuestra función candidata que explique de muy buena forma las observaciones en la muestra de entrenamiento y fallar en generalizar la función en la muestra.

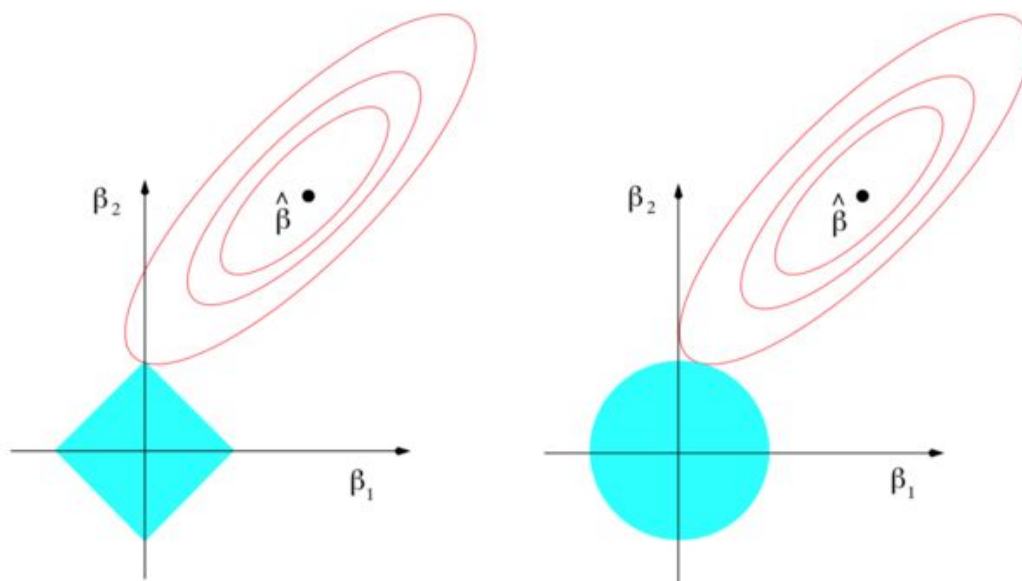
La estrategia que aprenderemos a lo largo de esta lectura es implementar técnicas que impidan que el modelo sufra de sobre ajuste, conocidas como regularización en norma L1 y L2.

A grandes rasgos los métodos de regularización buscan penalizar parámetros  $\beta$  estimados con valores muy grandes. El objetivo es agregar un penalizador que sea proporcional a la magnitud de  $\beta$ .

Hay dos modos (también conocidas como normas) de generar regularización de parámetros:

- **Norma L1:** Llamada norma euclídea, sintetiza la distancia entre dos vectores mediante  $\sqrt{x^2 + y^2}$
- **Norma L2:** Llamada norma taxicab, sintetiza la distancia entre dos vectores mediante  $|\beta|$  lo que genera ángulos rectos entre los vectores.

Ambas normas tienen sus virtudes y defectos. Una imagen clásica que proviene de Hastie, Tibshirani y Friedman (2009) visualiza las normas (como las áreas celestes) y el efecto que tienen en los parámetros estimados (contornos rojos). El objetivo es encontrar un punto donde el contorno se junto con el área regularizada. Mientras que con la normalización L2 no hay soluciones únicas (dado que el área celeste es un círculo y hay un solo borde continuo), en la normalización L1 existe la posibilidad que el contorno del parámetro estimado se junto con una de las esquinas del área, dando paso a situaciones donde algún parámetro sea igual a cero.



**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.

Imagen 3. Estimación de regresión.

## ¿Por qué debo regularizar?

Antes de estudiar las principales normas de regularización, es bueno definir una serie de justificaciones sobre el uso de regularizadores en los modelos:

- En ciertas situaciones, puede darse que existan parámetros que tengan un peso exagerado en el proceso de entrenamiento.
- Este peso exagerado de parámetros conlleva a mayores chances de overfit en el conjunto de entrenamiento, dado que el modelo asignará una importancia desmedida a un atributo en específico.
- También hay razones computacionales: En la medida que agregamos más parámetros, hacemos más costosa de estimar nuestra ecuación. Cabe destacar que la regularización puede solucionar el problema de la dimensionalidad mediante la eliminación de atributos, pero no en la reducción de éstos. De esta manera, también es un buen proxy para evaluar la estabilidad e idoneidad de éstos en el proceso de predicción.
- Regularizar permite realizar una evaluación diagnóstica de los parámetros inferidos, dependiendo de elementos estrictamente ajenos a los producidos por el modelo.

## Ridge: Norma L2

La primera forma de crear modelos de regresión sesgados es agregando una penalización a la suma de los cuadrados, Ridge penaliza esta suma agregando el término

$$\lambda \sum_{j=1}^p \beta_j^2$$

Luego, nuestra función de minimización queda de la siguiente forma:

$$\beta_{\text{Ridge}} = \underset{\beta}{\operatorname{argmin}} \sum_i^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + \lambda \sum_{j=1}^p \beta_j^2$$

Cuando nuestro modelo lineal sobre-ajusta los datos de entrenamiento algunos de los coeficientes de la regresión se inflan, provocando que tengan valores altos en comparación con los demás. Al penalizar la función objetivo de la forma anterior, el aumentar el valor de alguno de los coeficientes se traduce en una penalización a la función objetivo, luego, solo se permitirá el incremento de un coeficiente cuando se produce una reducción proporcional en la suma de los cuadrados.

- Ridge también se conoce como **regularización en norma L2** porque el término que se agrega en la función objetivo en realidad es la norma L2 (o norma euclídea) de un vector cuyo largo es la magnitud del coeficiente correspondiente.

¿Y de dónde sacamos ese  $\lambda$  que aparece multiplicando a la suma?

Para entender cómo encontrar este valor debemos entender primero cuál es su rol en el término penalizador. Si nos fijamos,  $\lambda$  multiplica cada coeficiente por igual, por lo tanto, dice cuánto se está penalizando el modelo frente a un determinado cambio en un coeficiente. Mientras más alto sea  $\lambda$  el modelo recibirá un mayor "castigo" cuando intente aumentar un coeficiente. Este es un valor que tendremos que escoger nosotros al momento de definir el modelo con regularización.

## Digresión: Cotas asintóticas en funciones objetivo:

Una observación interesante que debemos tener en cuenta es que si  $\lambda = 0$  en la función objetivo de Ridge, lo que obtenemos como resultado es una regresión lineal ordinaria, pues el término completo se hace igual a **0**. De esta observación se infiere que la función objetivo de Ridge es una cota superior a la función objetivo de la regresión mediante mínimos cuadrados. Lo que buscamos mediante Ridge es la minimización de una cota de la función de OLS. Este comportamiento se repite en varios modelos de máquinas de aprendizaje, donde la minimización/maximización de una cota de la función objetivo resulta mejor que buscar la solución para la función completa.

Un comportamiento interesante de la regularización en norma L2 es que luego de cierta cantidad de penalización añadida en  $\lambda$  los valores de algunos parámetros se acercan a 0, suprimiéndolos del modelo final. De esta forma, la elección de  $\lambda$  es un elemento a considerar.

## Ejemplo: Prediciendo valores de inmuebles en Boston

Veamos en la práctica en que se traduce esta regularización analizando los valores de los coeficientes. Para esto, utilizaremos un dataset que contiene distintos atributos de casas en Boston. Nuestro objetivo será predecir el valor de la casa de acuerdo a aspectos como el número de baños que posee, la cantidad de pisos, etc. Nuestro vector objetivo es la variable price.

Comencemos por la inclusión de las librerías clásicas (numpy, pandas y matplotlib.pyplot) en nuestro ambiente de trabajo. Importaremos el archivo kc\_house\_archive. Posteriormente eliminaremos columnas que hacen referencia a información referencial como el zipcode, el identificador de la observación (id) y la fecha (date).

```
import warnings
warnings.filterwarnings('ignore')
import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
sns.set_style("darkgrid")
plt.rcParams['figure.figsize'] = (10, 6)
import cv_error as gfx
```

La base de datos se compone de 21.613 observaciones con 18 atributos. Mediante `df.info()` podemos extraer información sobre la naturaleza del dato, así como la existencia de valores perdidos. Observamos que los datos no presentan cadenas, lo que facilita el preprocesamiento en `sklearn`.

```
df = pd.read_csv('kc_house_data.csv')
# Vamos a eliminar ciertas columnas que son irrelevantes para nuestro analisis
df.drop(['zipcode', 'id', 'date'], axis = 1, inplace = True)

print('Numero de filas: {}'.format(df.shape[0]))
print('Numero de columnas: {}'.format(df.shape[1]))
```

```
Numero de filas: 21613
Numero de columnas: 18
```

```
# solicitamos información sobre los atributos
df.info()
```

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 21613 entries, 0 to 21612
Data columns (total 18 columns):
price                21613 non-null float64
bedrooms             21613 non-null int64
bathrooms            21613 non-null float64
sqft_living          21613 non-null int64
sqft_lot             21613 non-null int64
floors               21613 non-null float64
waterfront           21613 non-null int64
view                 21613 non-null int64
condition            21613 non-null int64
grade                21613 non-null int64
sqft_above           21613 non-null int64
sqft_basement        21613 non-null int64
yr_built             21613 non-null int64
yr_renovated         21613 non-null int64
lat                  21613 non-null float64
long                 21613 non-null float64
sqft_living15        21613 non-null int64
sqft_lot15           21613 non-null int64
dtypes: float64(5), int64(13)
memory usage: 3.0 MB
```

No hay datos nulos, por lo que podemos comenzar a pensar en aplicar nuestro modelo con un poco más de tranquilidad. Partamos por inspeccionar nuestro vector objetivo price. Para ello generaremos un histograma con `seaborn`. En el lado izquierdo se presenta el histograma de la variable sin modificar, se observa un fuerte sesgo hacia valores bajos que puede afectar el desempeño del modelo.

Para ello vamos a generar el siguiente flujo de preprocesamiento:

1. Dado que los métodos de regularización son sensibles a la escalas de las variables, generaremos una versión estandarizada de la base de datos con `StandardScaler`.
2. Dado que nuestro vector objetivo tiene un fuerte sesgo, lo transformaremos mediante el logaritmo. El gráfico de la derecha muestra que el comportamiento empírico de la variable se asemeja más a una distribución normal.

```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler

# Normalizamos la variable precio
scaler = StandardScaler()
df_scaled = pd.DataFrame(scaler.fit_transform(df), columns = df.columns)
df_scaled['price'] = np.log(df['price'])
```

```
fig , ax = plt.subplots(1,2)
sns.distplot(df['price'], bins='fd',ax = ax[0])\
    .set_title('Histograma Precio', size = 14)
sns.distplot(df_scaled['price'], bins = 'fd', ax = ax[1])\
    .set_title('Histograma logaritmo del Precio', size = 14);
```



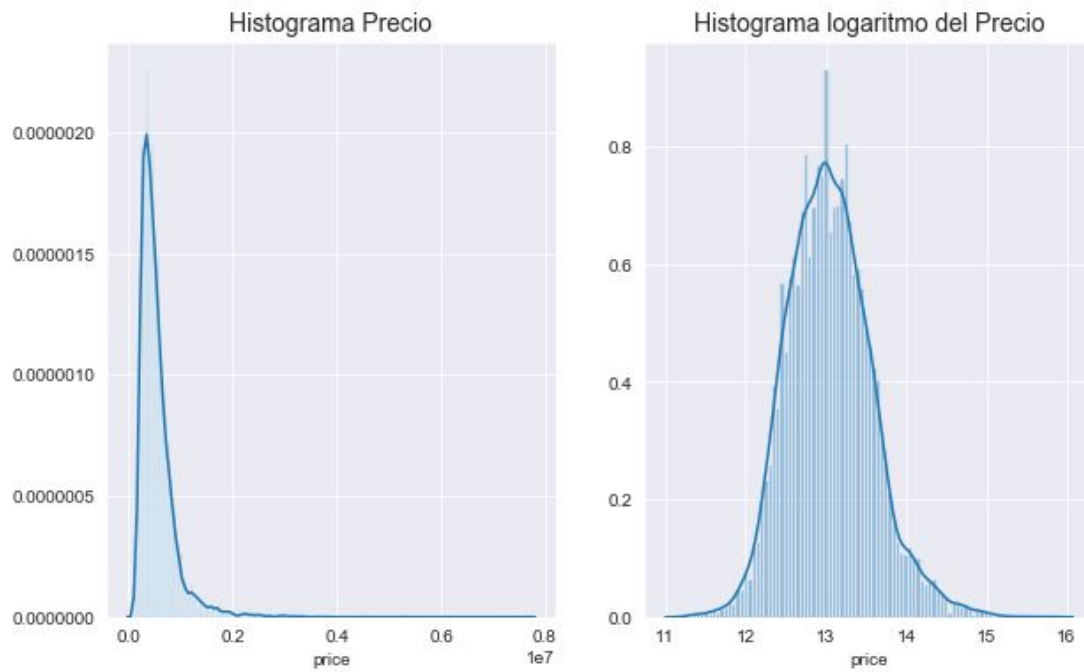


Imagen 4. Histogramas Precio y Log(Precio)..

## Normalización de datos

Escalar una variable permite ajustar su rango de valores a un rango acotado predefinido, este tipo de preprocesamiento se utiliza cuando el modelo que se tiene es sensible a magnitudes, en nuestro caso, la variable objetivo para la regresión es price, la cual presenta rangos de valores en magnitudes demasiado distintas en comparación a los atributos con los que alimentaremos el modelo, como el número de baños (rango 0-8), el número de habitaciones (rango 0-33), etc. Si no se escala la variable, se generará un modelo en el cual, al aumentar en un pequeño diferencial el atributo (feature), la variable objetivo de la predicción experimentará un aumento considerable.

Es interesante notar que algunos algoritmos pueden mejorar considerablemente su rapidez de convergencia con datos normalizados (máquinas de soporte vectorial, por ejemplo). En nuestro caso, puesto que se realizará una regresión lineal de mínimos cuadrados, la normalización no tiene este tipo de efecto pues no varía la correlación de los coeficientes al ser términos lineales. Podemos ver como la dispersión de los valores de la variable se reduce notablemente.

```
plt.subplot(1, 2, 1)
sns.boxplot(df['price'], orient='v').set_title('Boxplot Precios', size=14);
plt.subplot(1, 2, 2)
sns.boxplot(df_scaled['price'], orient='v').set_title('Boxplot log-Precios',
size=14)
```

```
Text(0.5, 1.0, 'Boxplot log-Precios')
```

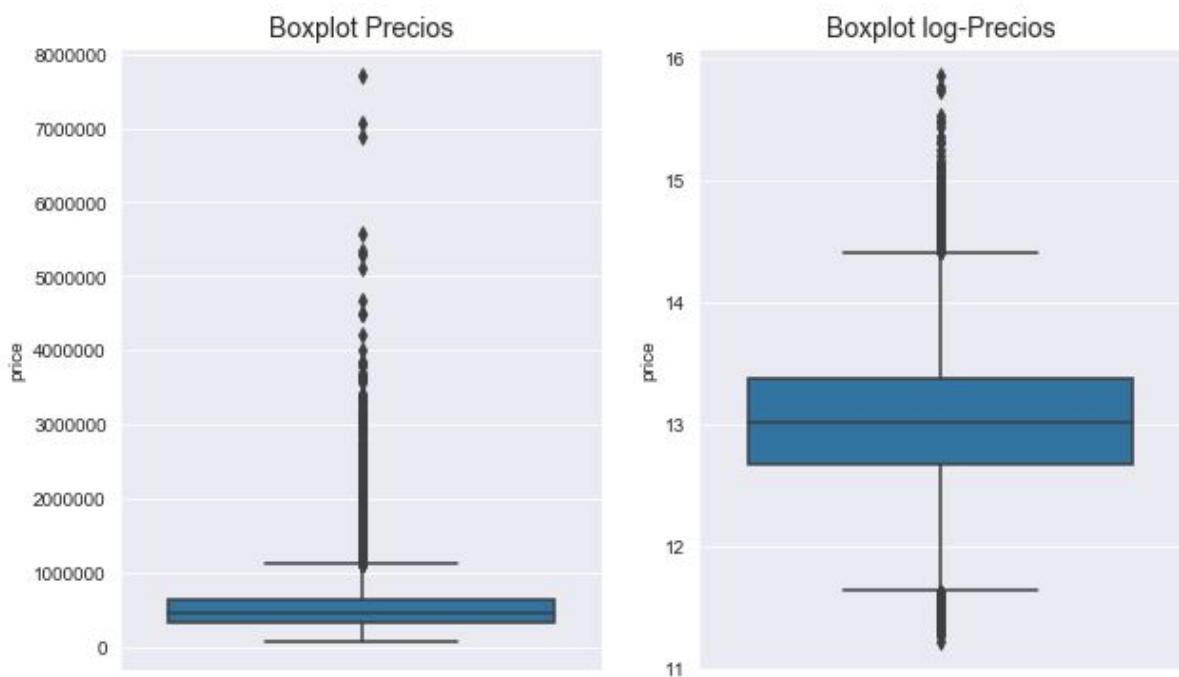


Imagen 5. Boxplot Precios y Log(Precios).

La normalización de variables en un dataset se utiliza, por lo general, cuando necesitamos aplicar un proceso que asume normalidad en la variable, o un escalamiento para acotar los valores de ciertas variables a un cierto rango tratable y comparable con los de otras variables, en nuestro caso, el modelo asume que el error al de cada estimador de los coeficientes con respecto a su valor paramétrico es normal. Podemos observar los histogramas de la variable precio antes y después de normalizarla:

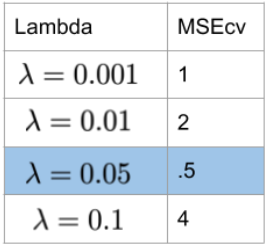
Antes de entrenar cualquier modelo, necesitamos dividir el dataset en al menos dos conjuntos: **Entrenamiento** y **Validación**, esto lo podemos realizar fácilmente con la función `train_test_split()` de la librería `sklearn`, utilizaremos un `test-size` de 30% de la data, el resto será dedicada a entrenamiento:

```
from sklearn.model_selection import train_test_split

# X será nuestro conjunto de atributos. y será nuestra variable objetivo
X = df_scaled.iloc[:, 1:] # Tomamos todas las columnas menos la primera (price)
N = X.shape[0] # guardamos el número de filas (datos de entrenamiento)
y = df_scaled['price'] # asignamos como target la variable 'price'
#Separamos los subsets de test y train
X_train, X_test, y_train, y_test, = train_test_split(X, y, test_size = 0.3,
random_state = 63)
```

Como mencionamos, la elección de  $\lambda$  es definida por el investigador. Este tipo de valores los cuales nosotros debemos escoger se llaman Hiperparámetros. Cada modelo/agenda de entrenamiento tiene sus propios hiperparámetros los cuales deberemos saber interpretar si queremos sacar el mayor provecho a nuestro modelo.

- El primer paso es definir una serie de hiperparámetros candidatos a evaluar.
- Para cada uno de estos hiperparámetros candidatos, estimaremos un modelo mediante validación cruzada.
- Para cada paso dentro de la validación cruzada, evaluamos el hiperparámetro y estimamos su métrica. En este caso, estamos implementando una métrica de error cuadrático promedio.
- Al finalizar la validación cruzada, preservamos la métrica promediada.
- El mejor hiperparámetro será aquél que presente un mejor desempeño. En este diagrama, cuando  $\lambda = 0.05$  el MSE de validación cruzada será el mejor.


$$\text{MSE}_{\text{cv}} = \frac{1}{\#_{\text{cv}}} \sum_{i=1}^{CV} \text{MSE}$$

Si bien no existe una regla clara para escoger hiperparámetros (es un problema complejo por lo mismo), una técnica usual para explorar este tipo de problemas consiste en detener el entrenamiento/búsqueda de hiperparámetros óptimos cuando veamos algún tipo de convergencia o mínimo local. A esta idea de detener el entrenamiento antes de tiempo, se le conoce más formalmente como Early Stopping.

Puesto que entrenar un modelo de regresión lineal con una matriz de datos como la que tenemos es barato computacionalmente, nos daremos el lujo de evaluar varios valores para  $\lambda$  y elegiremos el que entrega menor error de validación, exploraremos el rango de valores de

$$\lambda \in [10^7, 10^3]$$

Para implementar un modelo con regularización Ridge, importamos las clases Ridge y RidgeCV dentro de sklearn.linear\_model. Un punto de confusión que surge en la implementación de los métodos de regularización en sklearn es que el parámetro de penalización  $\lambda$  está implementado con el nombre de alpha.

```
from sklearn.linear_model import Ridge, RidgeCV
from sklearn.metrics import r2_score, mean_squared_error

names_regressors = X_train.columns # guardamos los nombres de los atributos
alphas = np.logspace(0, 7, base = 10) # generamos un vector con los valores de
la norma
coefs_ridge = [] #lista para guardar parámetros
cv_err_ridge = [] #lista para guardar parámetros
model_ridge = Ridge(fit_intercept = True) # instanciamos el modelo
tol = 0.1 # determinamos el umbral de tolerancia

# para cada valor en el vector
for a in alphas:
    # estimamos el modelo con éste
    model_ridge.set_params(alpha = a)
    model_ridge.fit(X_train, y_train)
    # guardamos el coeficiente estimado
    coefs_ridge.append(model_ridge.coef_)
    # generamos su estimado de validación cruzada
    dummy, cv_err_estimates = gfb.cv_error(X_train, y_train, k = 10, method =
'ridge', alpha = a)
    cv_err_ridge.append(np.mean(cv_err_estimates)) # OJO: estamos guardando la
media del error de cv para cada alpha

for y_arr, label in zip(np.squeeze(coefs_ridge).T, names_regressors):
    plt.plot(alphas, y_arr, label = label)

plt.legend()
plt.xscale("log")
```

```
plt.title("Ridge Regression: coeficientes vs par. de regularización", size = 14)
plt.xlabel('Lambda')
plt.ylabel('Coef. de la regresión')
plt.axis("tight")
plt.legend(loc="center left", bbox_to_anchor=(1, .5));
```

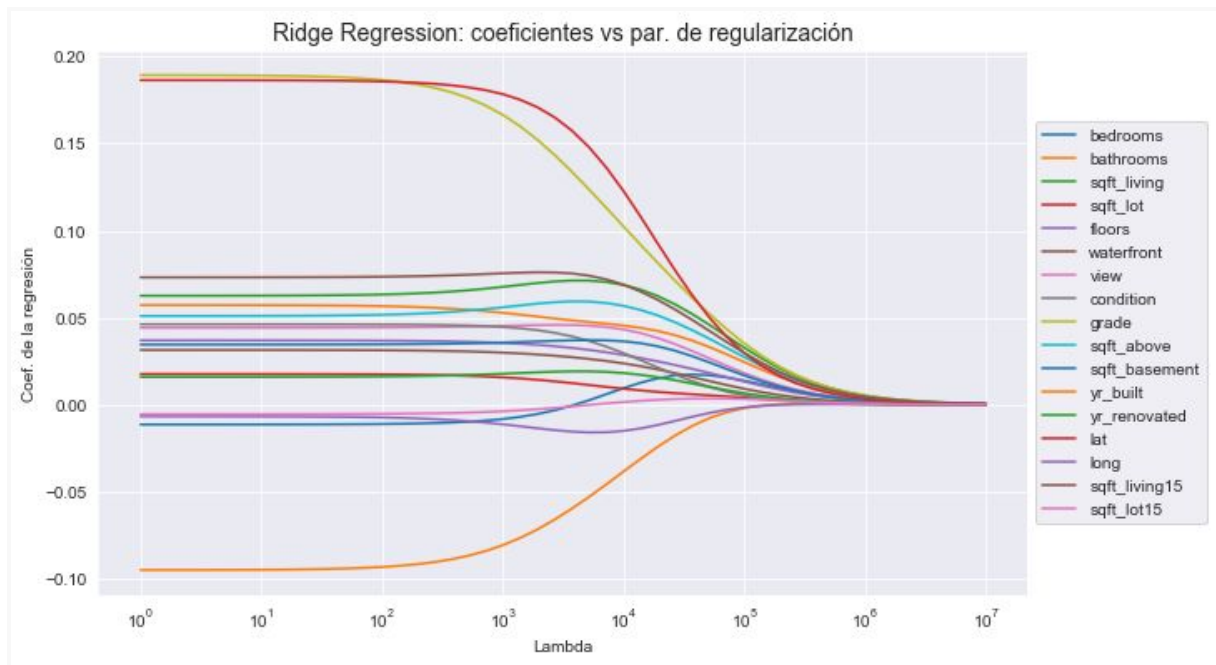


Imagen 7. Regresión Ridge.

A partir de este gráfico podemos ver algunas cosas interesantes:

- Tener un parámetro de regularización de  $10^0$  produce el mismo resultado en los coeficientes que un parámetro de  $10^1$  el último es muy débil y es casi inofensivo.
- En efecto, al tener un parámetro de regularización lo suficientemente grande, los coeficientes de algunos atributos se hacen cada vez más pequeños (cada vez se les penaliza más) hasta hacerse casi iguales a 0.
- Para un parámetro de regularización lo suficientemente grande, todos los coeficientes se hacen casi iguales a 0, por lo que no podemos excedernos mucho con el valor del mismo.
- Ridge se dice que es un método de contracción (shrinkage method) porque "contrae" los valores de los coeficientes de la regresión.

Veamos cómo se comporta el error de validación para cada  $\lambda$ .

```
plt.plot(alphas, np.sqrt(cv_err_ridge), "*-", color='dodgerblue')  
plt.xscale("log")  
plt.title("Ridge Regression: RMSE de Cross-Validation para cada  
$\lambda$", fontsize = 14);
```

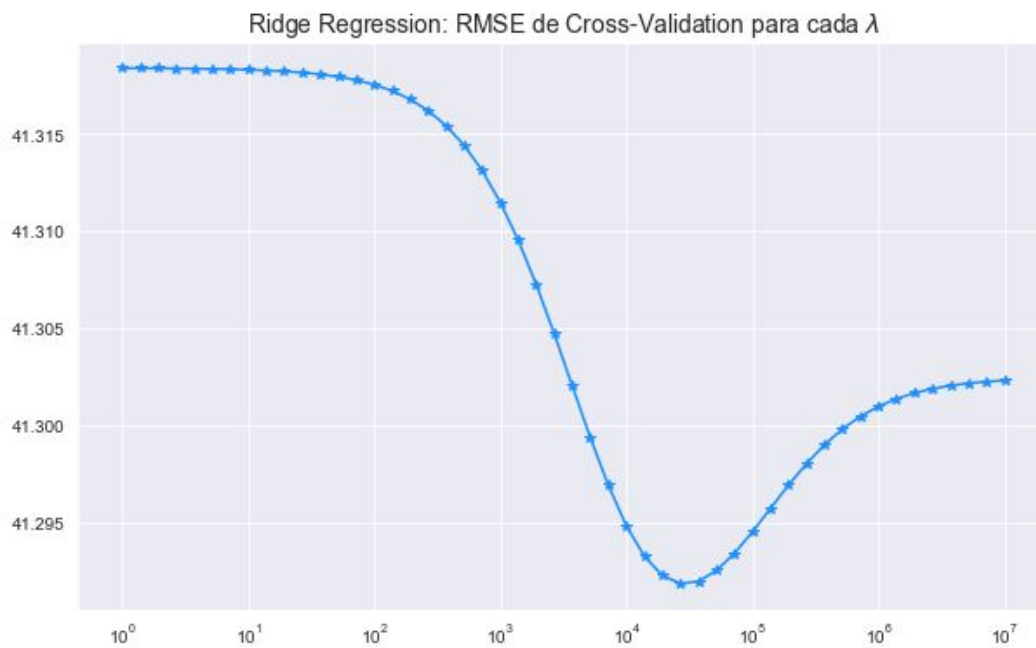


Imagen 8. Error de Validación.



Como mencionamos anteriormente, nuestro objetivo es encontrar el valor de  $\lambda$  mínimo, sin embargo, parecen haber varios valores que se ajustan a nuestro criterio. Aprovecharemos de introducir una función conveniente que implementa la librería `sklearn` llamada `RidgeCV`:

```
alphas_ = np.logspace(0, 7, base = 10)
ridge_cv = RidgeCV(cv = 10)
model_ridge = ridge_cv.fit(X_train, y_train)
```

El modelo elige automáticamente el valor de  $\lambda$  que minimiza el error de validación:

```
def report_regularization(model, X_test, y_test):
    print('Valor del parámetro de regularización: {}'.format(model.alpha_))
    print('Coeficientes finales: \n{}'.format(model.coef_))
    y_hat = model.predict(X_test)
    print('R-squared: {}'.format(r2_score(y_test, y_hat)))
    print('Mean Squared Error: {}'.format(mean_squared_error(y_test, y_hat)))

report_regularization(ridge_cv, X_test, y_test)
```

```
Valor del parámetro de regularización: 10.0
Coeficientes finales:
[-0.01130049  0.05717332  0.06264874  0.01764058  0.03692392  0.03143451
 0.04422176  0.04616988  0.18895082  0.05101663  0.03455404 -0.09467497
 0.01602423  0.18624593 -0.0067097   0.07316506 -0.00536286]
R-squared: 0.7685417941024782
Mean Squared Error: 0.06231291960423319
```

Para finalizar nuestra aventura por Ridge, se debe mencionar que **Ridge no puede ocuparse como un método de selección de atributos, es decir, la cantidad de atributos** de una regresión lineal ordinaria es la misma que la cantidad de atributos que tenemos al hacer una regresión vía Ridge.

## Digresión: Métricas de desempeño para problemas de regresión

Para medir el desempeño predictivo de un algoritmo que busque solucionar un problema de regresión, implementaremos alguna medida que cuantifique la distancia entre lo predicho y lo observado. Partamos por la métrica más conocida:

- **Error Cuadrático Promedio** (Mean Squared Error): Sintetiza la distancia entre lo predicho y lo observado. Es el criterio a optimizar cuando nuestro buscamos minimizar la suma de cuadrados residuales:

$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^N (y_j - \hat{y})^2$$

- El error cuadrático promedio permite diagnosticar si las predicciones realizadas por el modelo subestiman o sobreestiman el comportamiento, dado el signo. La magnitud de la métrica dependerá del rango de valores en el vector objetivo y se interpreta como el fallo promedio en la predicción de una observación cualquiera. Nos permite reportar la subestimación/sobreestimación del modelo respecto a la esperanza matemática del vector objetivo.

$$\mathbb{E}[y]$$

- **Raíz Cuadrada del Error Cuadrático Promedio** (Root Mean Squared Error): Regla que evalúa la función de pérdida a optimizar en un plano de coordenadas. Se obtiene a partir de la siguiente expresión:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\text{MSE}} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^N (y_j - \hat{y})^2}$$

- **Mediana del Error Absoluto** (Median Absolute Error): Cuantifica el grado medio de la magnitud de errores, agnóstico a la dirección del error. Se obtiene a partir de la siguiente expresión:

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^N |y_j - \hat{y}_j|$$

Tanto MAE como RMSE expresan el error promedio en términos del vector objetivo, con un rango del error

$$\varepsilon \rightarrow [0, \infty^+)$$

Ambas métricas son agnósticas a la dirección de los errores:

- RMSE preserva cardinalidad y evita la suma cero mediante la raíz cuadrada.
- MAE preserva cardinalidad mediante el valor absoluto.

Algunas reglas a considerar:

$$\text{MAE} > (\text{R})\text{MSE}$$

Significa que el punto equidistante de los errores es superior a la métrica del error cuadrático promedio. En esta situación, esperamos tener observaciones atípicas con sobreestimaciones. Esta situación puede ocurrir cuando nuestro modelo falla en identificar valores atípicos. Esperamos tener una mayor concentración en valores bajos de la distribución de errores.

$$\text{MAE} < (\text{R})\text{MSE}$$

Significa que el punto equidistante de los errores es inferior a la métrica del error cuadrático promedio. En esta situación, esperamos tener observaciones atípicas con subestimaciones. Esta situación puede ocurrir cuando nuestro modelo falla en identificar valores atípicos. Esperamos tener una mayor concentración en valores altos de la distribución del error.

## Lasso: Norma L1

Otro método de contracción para la regresión lineal que estudiaremos es el llamado Lasso (acrónimo de Least Absolute Shrinkage and Selection Operator), este método opera de una forma muy similar a Ridge. Sin embargo, sí permite hacer selección de atributos (descartar atributos poco relevantes para el modelo) a diferencia de Ridge, que simplemente los encogía cada vez más. Lasso opera penalizando la función objetivo de la siguiente forma:

$$\beta_{\text{Lasso}} = \underset{\beta}{\operatorname{argmin}} \sum_i^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + \lambda \sum_{j=1}^p |\beta_j|$$

A diferencia de Ridge, Lasso penaliza por la norma

$$\ell_1 = |\beta|$$

Esto se traduce en que finalmente el modelo será capaz de eliminar ciertos atributos de la regresión, los cuales considerará que no son suficientemente relevantes.

Veamos cómo caen los pesos de los coeficientes al aplicar Lasso a los mismos datos anteriores:

```
from sklearn.linear_model import Lasso, LassoCV

names_regressors = X.columns
alphas_ = np.logspace(0, -3, base = 10)
coefs_lasso = []
cv_err_lasso = []
model_lasso = Lasso(fit_intercept = True)

for a in alphas_:
    model_lasso.set_params(alpha = a)
    model_lasso.fit(X_train, y_train)
    coefs_lasso.append(model_lasso.coef_)
    dummy, cv_err_estimates = gfx.cv_error(X_train, y_train, k = 10, method =
'lasso', alpha = a)
    cv_err_lasso.append(np.mean(cv_err_estimates))

for y_arr, label in zip(np.squeeze(coefs_lasso).T, names_regressors):
    plt.plot(alphas_, y_arr, label = label)

plt.legend()
plt.xscale('log')

plt.title("Lasso Regression: coeficientes vs par. de regularización", fontsize =
14)
plt.axis("tight")
plt.legend(loc = "center left", bbox_to_anchor=(1, .5));
```

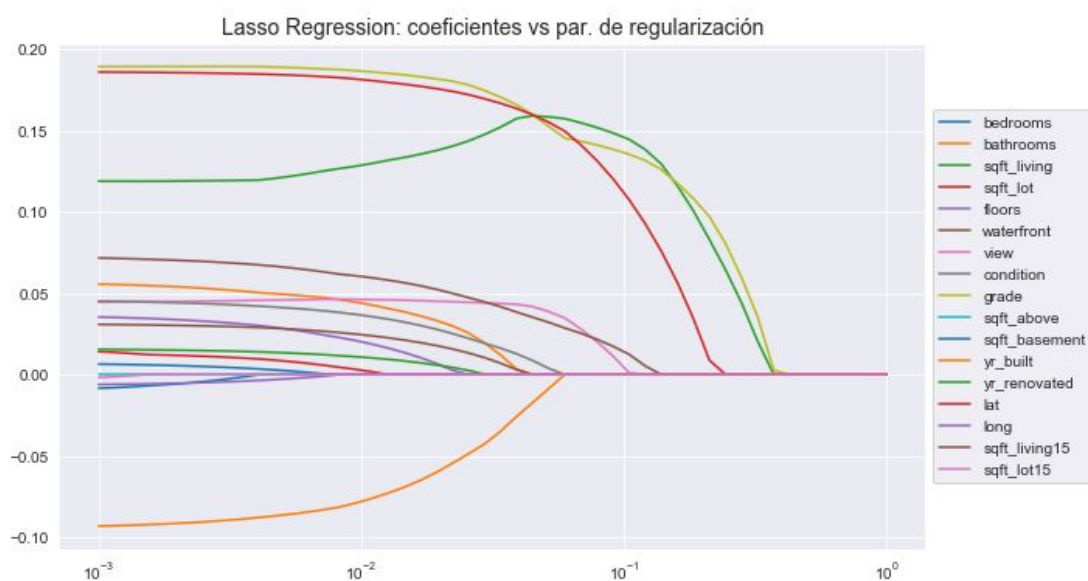


Imagen 9. Gráfica de Lasso.

```
plt.plot(alphas_, np.sqrt(cv_err_lasso), 'o-', color='dodgerblue')
plt.xscale("log")
plt.title("Lasso Regression: RMSE Cross-Validation para cada  $\lambda$ ",
         fontsize = 14);
```

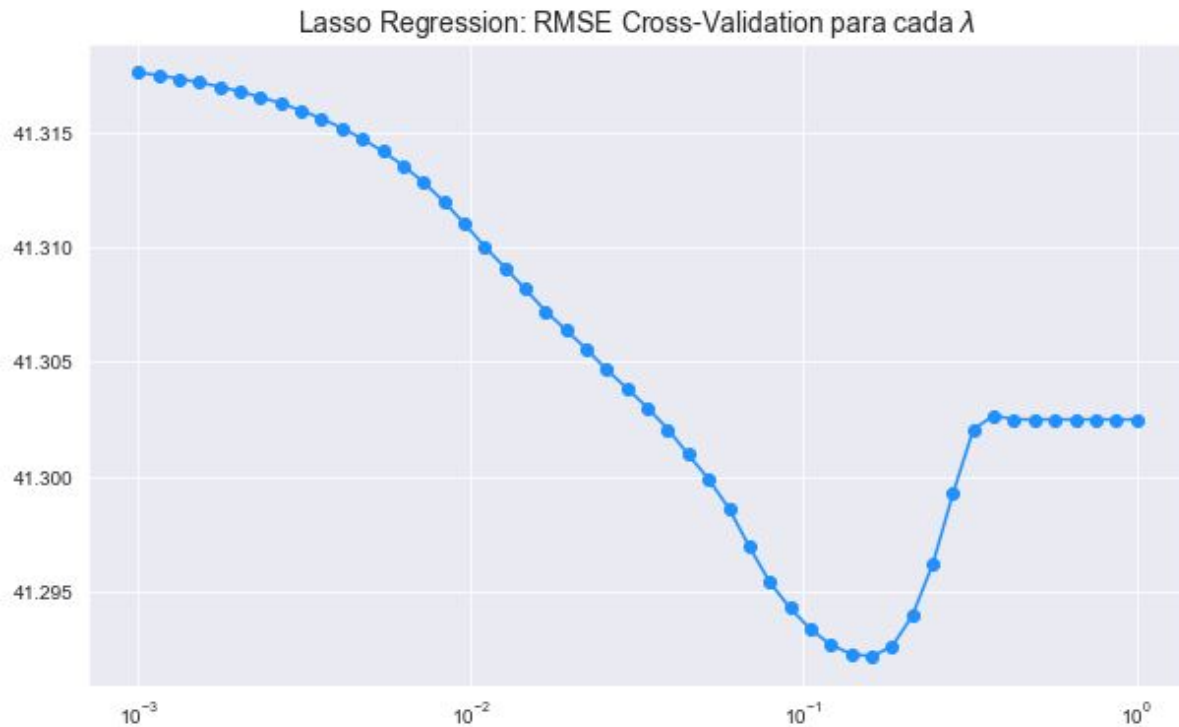


Imagen 10. Validación de error para Lasso.

- Los pesos caen de forma mucho más abrupta que en Ridge, producto de la naturaleza de Lasso.
- Ciertos atributos son restados del modelo de forma mucho más temprana que otros, reduciendo rápidamente el número de atributos del modelo, o dicho de otra forma, seleccionando atributos más relevantes para explicar los datos.

Nuevamente veremos el error de validación cruzada para Lasso, nuestro objetivo será encontrar ya sea un punto en el que observemos convergencia, o uno en el que el error sea un mínimo local:

```
alphas_ = np.logspace(0, -3, base = 10)
lasso_cv = LassoCV()
model_lasso = lasso_cv.fit(X_train, y_train)
report_regularization(model_lasso, X_test, y_test)
```

```
Valor del parámetro de regularización: 0.0003753797351375845
Coeficientes finales:
[-0.01024032  0.05663014  0.11897972  0.01634357  0.03634553  0.03122292
 0.04432799  0.04579056  0.18927954  0.          0.00698097 -0.09423091
 0.01580353  0.18619272 -0.00642786  0.07259197 -0.0040628 ]
R-squared: 0.768539353019913
Mean Squared Error: 0.06231357678975419
```

Ahora que ya hemos visto el efecto que produce Lasso sobre los coeficientes, al igual que en Ridge, nos interesa buscar el valor de  $\alpha$  relativamente previo al valor en el que se dispara el error de validación:

El problema de Ridge es que no es capaz de hacer una selección de atributos afectiva debido a que nunca hace exactamente 0 los coeficientes, el problema de Lasso es que muchas veces es muy agresivo en la reducción de atributos, el modelo que veremos a continuación es una mezcla de ambos y trata de quedarse con lo mejor de ambos modelos de regularización.

## Elastic Net

Elastic Net es el último modelo de regularización que veremos, este modelo combina ambas penalizaciones vistas, Lasso y Ridge bajo el argumento de formar una regularización que sea capaz de penalizar efectivamente los coeficientes de los atributos, como lo hace Ridge, y además sea capaz de realizar selección de atributos como lo hace Lasso. La función objetivo de Elastic Net se conforma de la siguiente manera:

$$\beta_{\text{ElasticNet}} = \underset{\beta}{\operatorname{argmin}} \sum_i^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + \lambda_1 \sum_{j=1}^p |\beta_j| + \lambda_2 \sum_{j=1}^p \beta_j^2$$

Algo importante que debe tenerse en cuenta sobre este modelo es que, a diferencia de Lasso y Ridge, ahora tenemos que encontrar los valores para dos parámetros de regularización en lugar de uno.



Veamos Elastic Net en la práctica, el objeto `ElasticNet` de `sklearn` define el juego entre los parámetros de ambas penalizaciones de forma no tan intuitiva, por lo que trabajaremos con los valores predefinidos de penalización para cada modelo que define el objeto por defecto. Si se quiere modificar estos valores se puede consultar la documentación de `ElasticNet`:

```
from sklearn.linear_model import ElasticNet, ElasticNetCV

names_regressors = X.columns
alphas_ = np.logspace(0, -3, base = 10)
coefs_elastic_net = []
cv_err_elastic_net = []
model_elastic_net = ElasticNet(fit_intercept = True)

for a in alphas_:
    model_elastic_net.set_params(alpha = a)
    model_elastic_net.fit(X_train, y_train)
    coefs_elastic_net.append(model_elastic_net.coef_)
    dummy, cv_err_estimates = gfx.cv_error(X_train, y_train, k = 10, method =
'enet', alpha = a)
    cv_err_elastic_net.append(np.mean(cv_err_estimates))

for y_arr, label in zip(np.squeeze(coefs_elastic_net).T, names_regressors):
    plt.plot(alphas_, y_arr, label = label)

plt.legend()
plt.xscale("log")

plt.title("Elastic Net Regression: coeficientes vs par. de regularización",
fontsize = 14)
plt.axis("tight")
plt.legend(loc = "center left",
bbox_to_anchor=(1, .5));
```

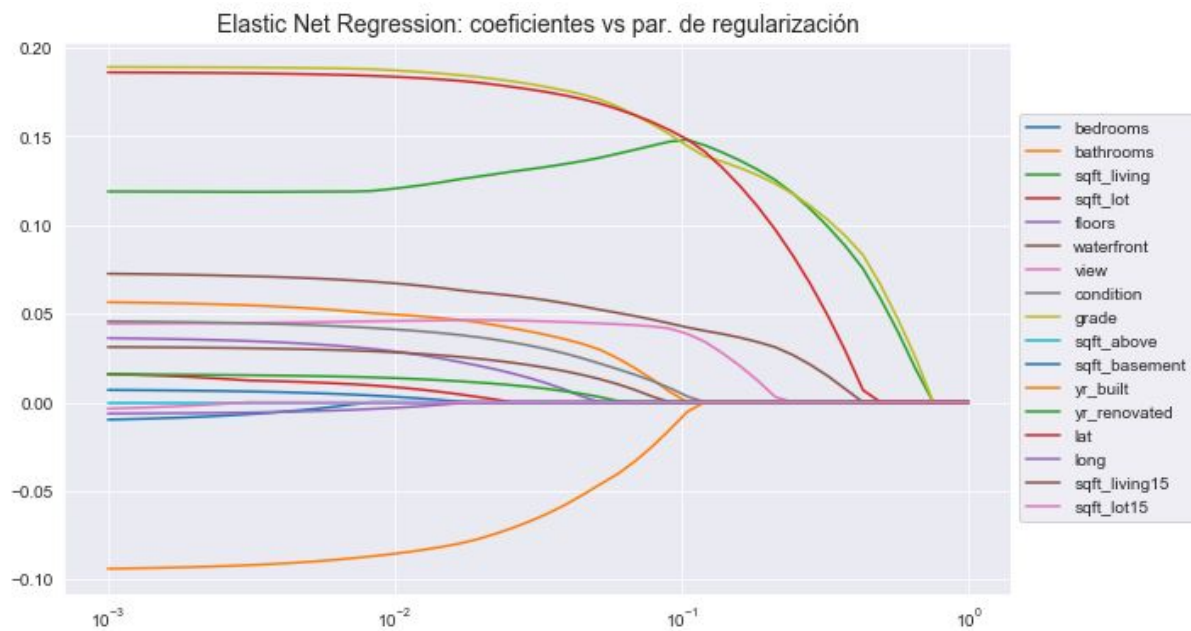


Imagen 11. Gráfico Elastic Net.

```
plt.plot(alphas_, np.sqrt(cv_err_elastic_net),"o-", color='dodgerblue')
plt.xscale("log")
plt.title("Elastic Net Regression: RMSE Cross-Validation para cada  
$\lambda$", fontsize = 14);
```

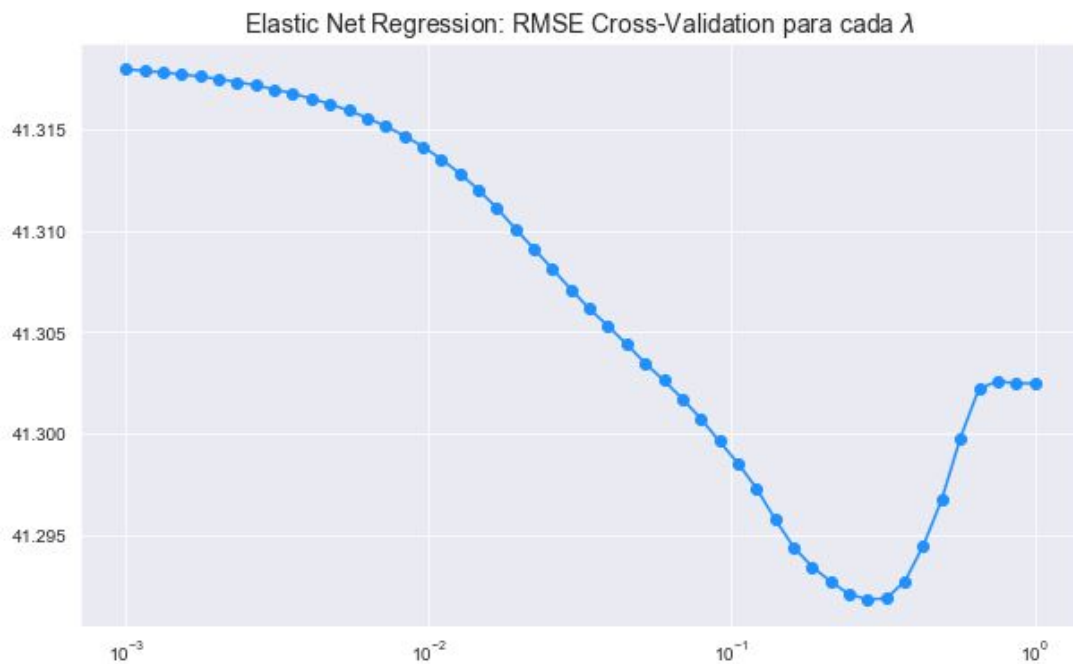


Imagen 12. Validación error de Elastic Net.

Podemos ver como Elastic Net hace en efecto decaer los pesos de los coeficientes de la misma forma en que lo hace Ridge, también podemos observar como ciertos atributos son restados del modelo al hacer sus coeficientes igual a cero.

Como mencionamos anteriormente la forma en la que la librería sklearn implementa el regularizador de `ElasticNet` es un poco más complicada de lo que desearíamos, de alguna forma trata de simplificar el uso del método, para configurar los parámetros de regularización por separado hay que modificar los parámetros `l1_ratio` y `alpha`, sin embargo, nosotros experimentaremos sólo con `alpha` y buscaremos el valor que nos sea conveniente:

```
alphas_ = np.logspace(0, -3, base = 10)
elastic_cv = ElasticNetCV(cv = 10)
model_elastic = elastic_cv.fit(X_train, y_train)

report_regularization(model_elastic, X_test, y_test)
```

```
Valor del parámetro de regularización: 0.0007507594702751691
Coeficientes finales:
[-0.01020259  0.05662165  0.11892443  0.01633775  0.03635761  0.03121637
 0.04433303  0.04578218  0.18915541  0.          0.0070188 -0.09414242
 0.01581814  0.18614231 -0.00645338  0.07265358 -0.00404842]
R-squared: 0.768536429557952
Mean Squared Error: 0.06231436384091725
```

## Referencias

- Los ejemplos de la lectura se basan en James, G; Witten, D; Hastie, T; Tibshirani, R. 2013. An Introduction to Statistical Learning. Ch6: Linear Model Selection and Regularization.
- Aquellos que deseen profundizar en los aspectos teóricos de los métodos de regularización pueden consultar Efron, B; Hastie, T. 2016. Computer Age Statistical Inference. Algorithms, Evidence and Data Science. Ch 7. James-Stein Estimation and Ridge Regression. Ch 16. Sparse Modeling and the Lasso.