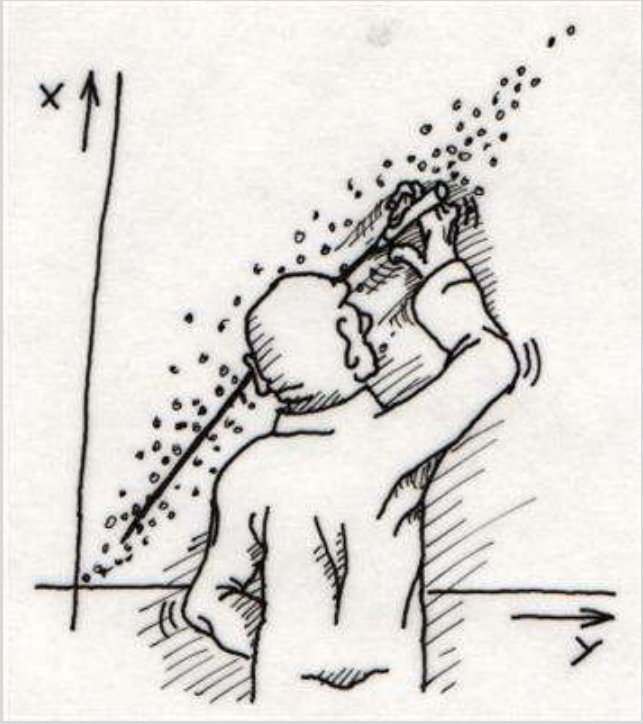


DigitalHouse > Coding School

DATA SCIENCE

MÓDULO 3

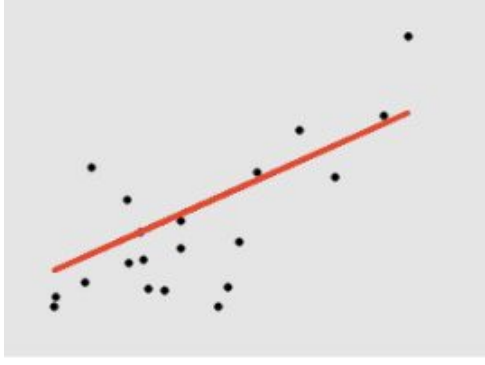
Regularización

OBJETIVOS DE LA CLASE

1. **Entender la regularización como técnica para evitar el sobreajuste**

2. **Aplicar regularización usando scikit-learn**

3. **Aprender a hacer validación cruzada para ajustar los hiper-parámetros de regularización**



Sesgo - Varianza

Dado el modelo:

$$Y = f(X) + \epsilon.$$

Donde epsilon es un término aleatorio con distribución:

$$\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma_\epsilon)$$

Podemos obtener una estimación de *f* para hacer predicciones sobre *Y*:

$$\hat{Y} = \hat{f}(X),$$

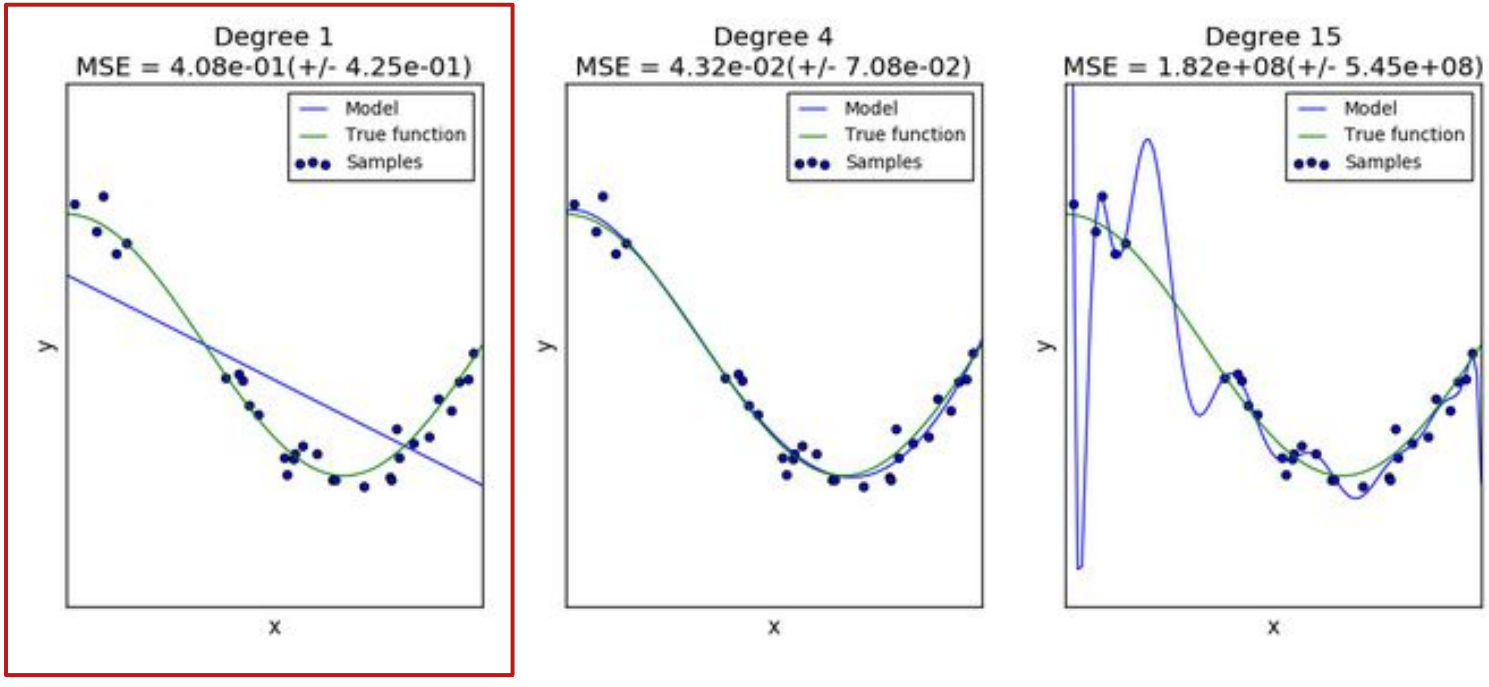
La esperanza del error de predicción al cuadrado será la siguiente::

$$Err(x) = E\left[(Y - \hat{f}(x))^2\right]$$

Podemos descomponer la esperanza del error al cuadrado de la siguente manera:

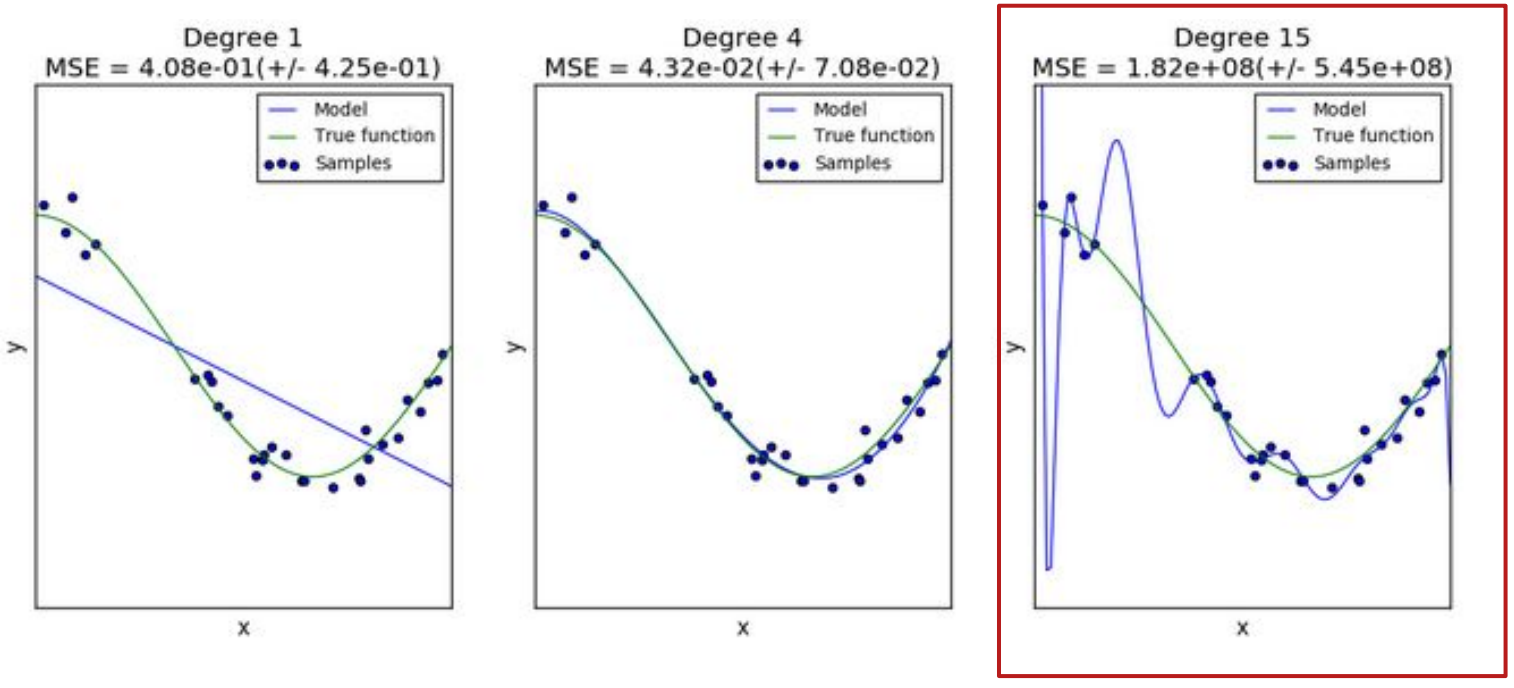
$$Err(x) = \left(E[\hat{f}(x)] - f(x)\right)^2 + E\left[\left(\hat{f}(x) - E[\hat{f}(x)]\right)^2\right] + \sigma_e^2$$

$$Err(x) = \text{Bias}^2 + \text{Variance} + \text{Irreducible Error}$$

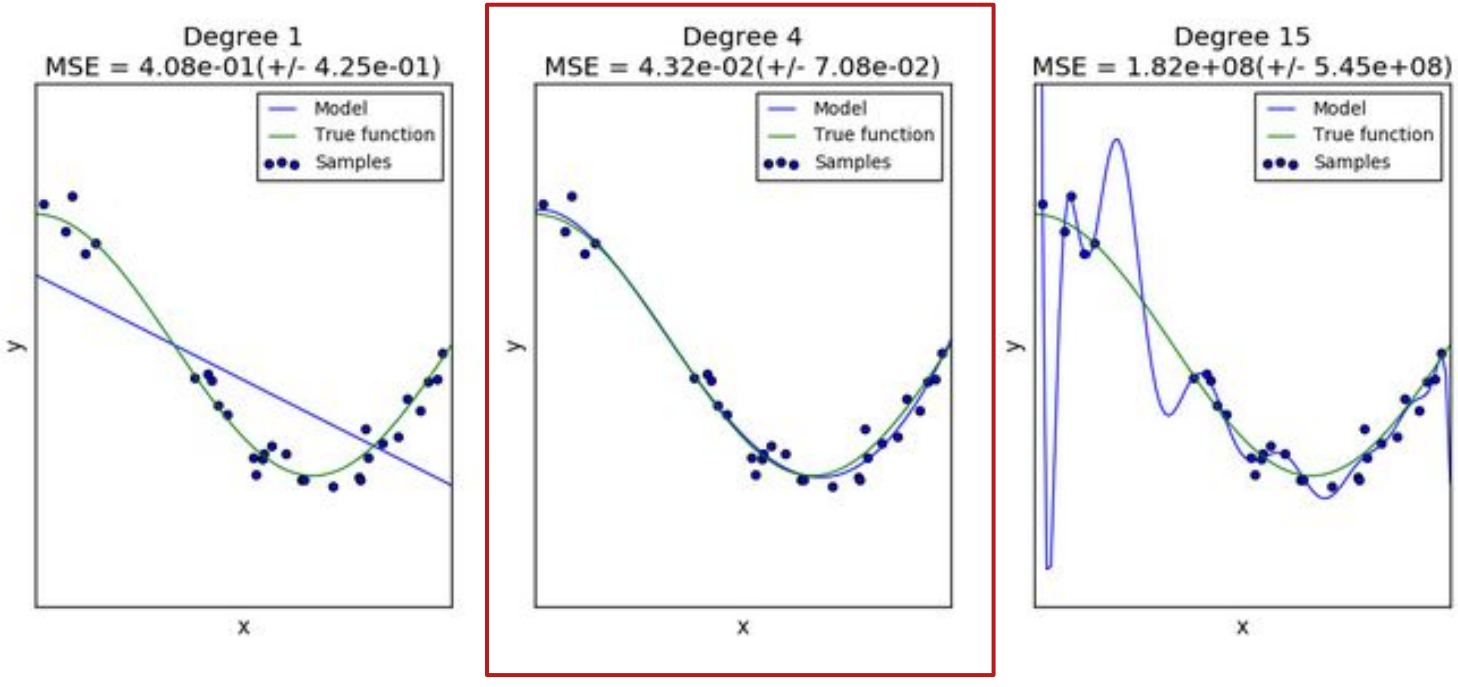


Si el modelo es **demasiado simple** (tiene pocos grados de libertad), entonces no importa cuán grande sea la muestra: tenemos **sesgo o error sistemático**:

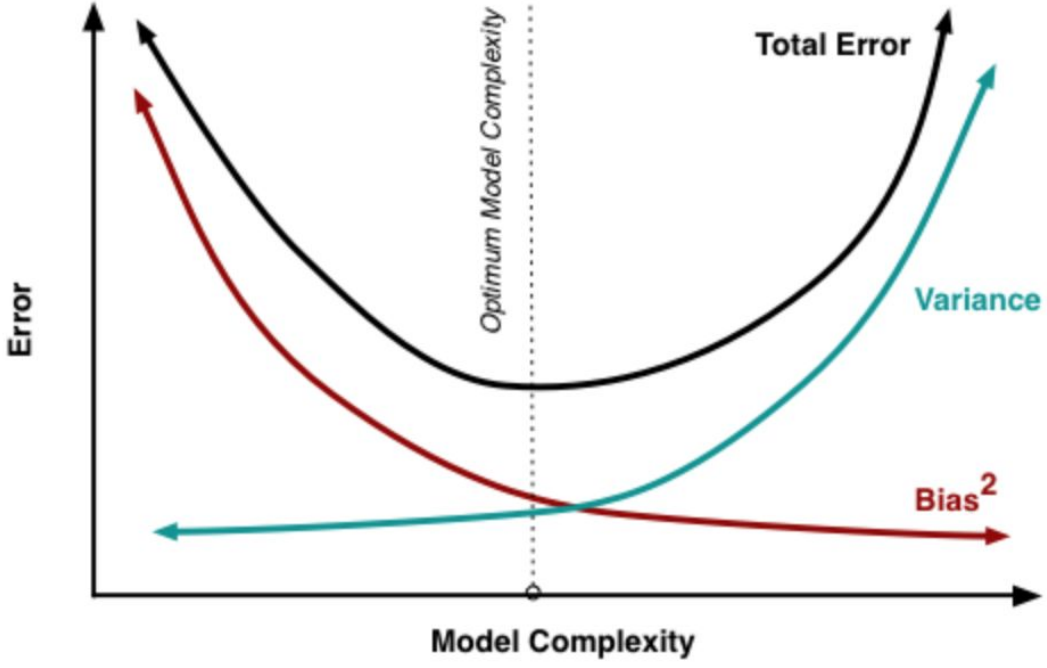
$$E(\hat{f}(x)) \neq E(f(x))$$



Si el modelo es **demasiado complejo** (ie. tiene demasiados grados de libertad), entonces el estimador puede ajustarse regularidades espurias de la muestra generando un **sobre-ajuste**.



Por lo tanto, el modelo no debe ser ni muy simple ni muy complejo



Por lo tanto, el modelo no debe ser ni muy simple ni muy complejo

Regularización

Función de pérdida de una regresión lineal:

$$CF = \sum_{i}^{N} (\hat{y}_i - y_i)^2$$

Las técnicas de regularización agregan una “penalidad” a esa función de costo:

$$CF = \sum_{i}^{N} (\hat{y}_i - y_i)^2 + \alpha\theta_i$$

Las técnicas de regularización agregan una “penalidad” a esa función de costo:

$$CF = \sum_{i}^{N} (\hat{y}_i - y_i)^2 + \alpha\theta_i$$

Theta es el vector que corresponde a los parámetros del modelo (en una regresión lineal, los betas) y alpha es un parámetro que “regula” la fuerza de la penalización: cuanto más grande es, mayor es la penalización.

Vamos a ver a continuación dos técnicas de regularización:

- **Regresión Ridge**
- **Regresión Lasso**.

Vamos a ver a continuación dos técnicas de regularización:

- **Regresión Ridge**
- **Regresión Lasso**.

Estas técnicas proponen cambiar ligeramente el problema de optimización de mínimos cuadrados, para intentar **"achicar" (*shrink*) el valor absoluto de los estimadores de los Betas**.

Vamos a ver a continuación dos técnicas de regularización:

- **Regresión Ridge**
- **Regresión Lasso**.

Estas técnicas proponen cambiar ligeramente el problema de optimización de mínimos cuadrados, para intentar **"achicar" (*shrink*) el valor absoluto de los estimadores de los Betas**.

¿Por qué esto mejoraría la estimación? Vamos a ver de qué forma este método introduce un sesgo pero reduce la varianza.

- Recordemos la función que se minimiza en la estimación de mínimos cuadrados:

$$\mathrm{RSS} = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2 .$$

- La función que se minimiza en Regresión Ridge es:

$$\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2 = \mathrm{RSS} + \lambda \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2 .$$

La diferencia es que agregamos un término nuevo. En este término, un **hiperparámetro lambda** penaliza el valor de los coeficientes al cuadrado.
Entonces, tengo que minimizar el cuadrado de los errores, intentando que ningún β_j^2 sea demasiado grande

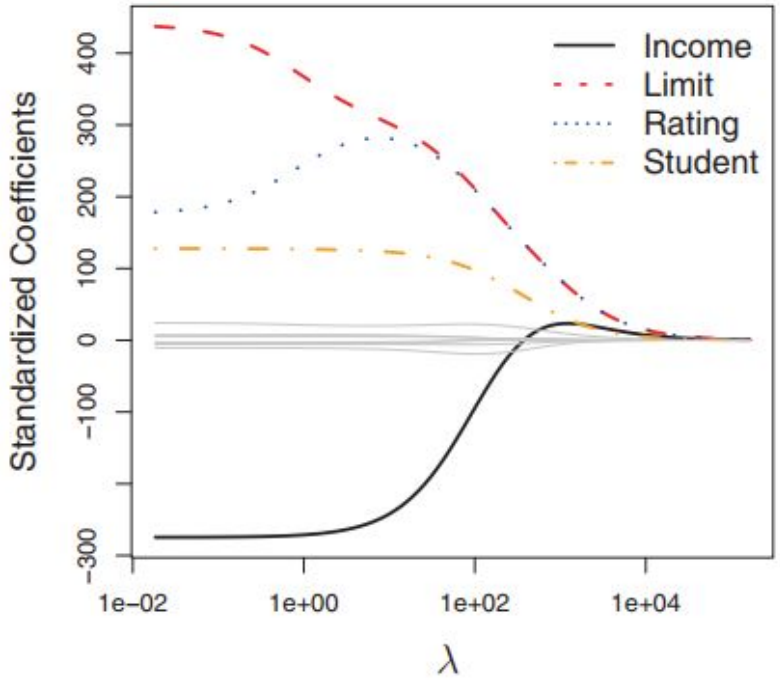
$$\sum_{i=1}^{n}\left(y_i-\beta_0-\sum_{j=1}^{p}\beta_j x_{ij}\right)^2+\lambda\sum_{j=1}^{p}\beta_j^2=\mathrm{RSS}+\lambda\sum_{j=1}^{p}\beta_j^2$$

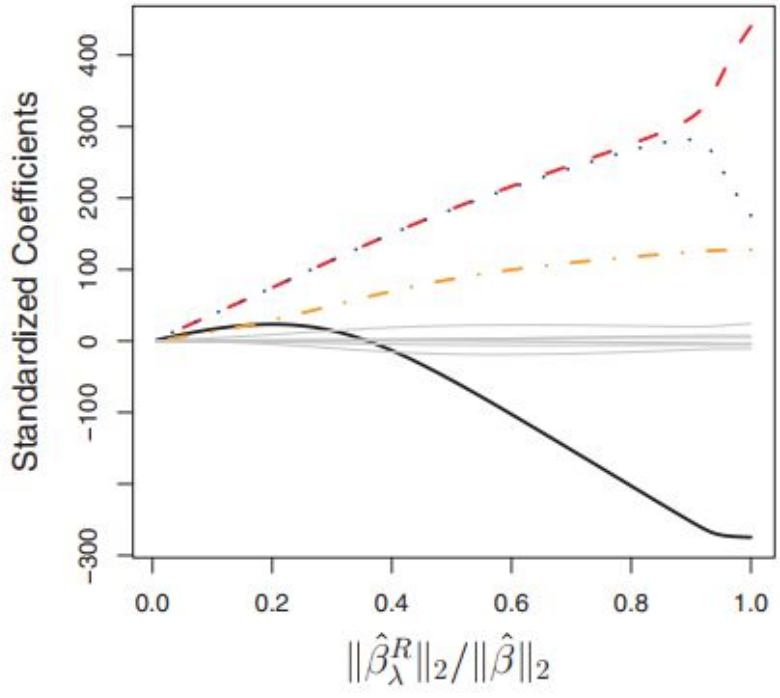
- Al igual que MCO, buscamos achicar el RSS.

- Sin embargo, existe un **término de penalización**, que es menor cuando los Betas se acercan a cero, por lo tanto tiene el efecto de achicar los mismos hacia cero (tanto si son negativos como positivos)

- El **hiperparámetro lambda**, maneja la ponderación de cada término.

- ¿Cuál es el mejor valor para lambda? ¿Cómo elegíamos el valor óptimo de un hiperparámetro?
  Como siempre, lo hacemos a través de **CROSS VALIDATION**





$$\|\beta\|_2 = \sqrt{\sum_{j=1}^{p} \beta_j{}^2}.$$

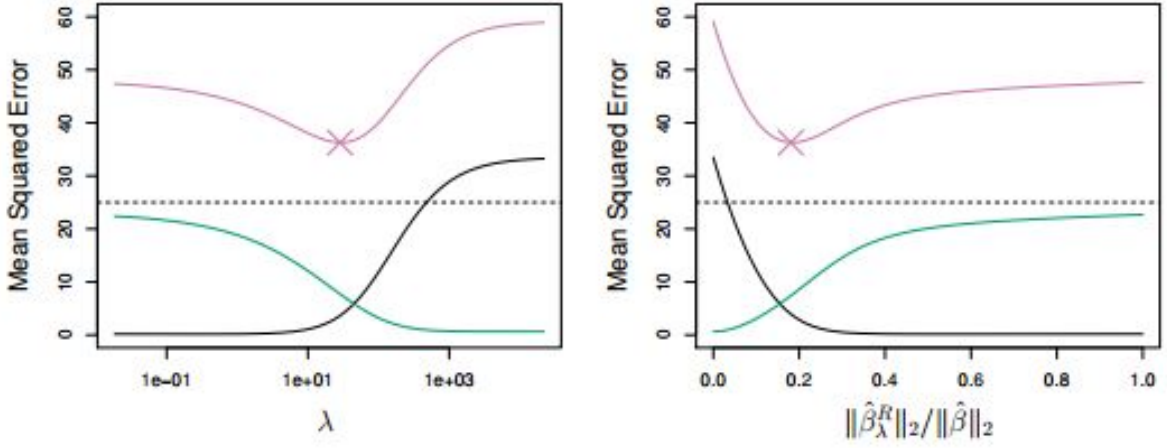
- En Regresión **Ridge** tanto la estimación de los coeficientes como la predicción son **sensibles a la escala**.
- Recordemos el problema de optimización que resuelve Ridge:

$$\sum_{i=1}^{n}\left(y_i-\beta_0-\sum_{j=1}^{p}\beta_j x_{ij}\right)^2+\lambda\sum_{j=1}^{p}\beta_j^2=\mathrm{RSS}+\lambda\sum_{j=1}^{p}\beta_j^2.$$

- Si una variable se encuentra en una escala que le da un valor absoluto mayor, esto **va a afectar el cálculo de la suma de cuadrados** del vector de coeficientes.
- Por esta razón **es importante estandarizar (dividir por el desvío estándar)** todos los regresores antes de ejecutar una regresión Ridge. Así ya no están en unidades físicas sino en unidades de su propio desvío estándar.

$$\tilde{x}_{ij}=\frac{x_{ij}}{\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_{ij}-\overline{x}_j)^2}}$$

El tradeoff entre Bias-Variance



Aquí se pueden ver n=50 simulaciones, p=45 predictores, todos con coeficientes no nulos.

El gráfico expresa el sesgo cuadrado (negro), varianza (verde) y el MSE del test (violeta), para una regresión ridge en los datos simulados, como una función d $\|\hat{\beta}^R_\lambda\|_2/\|\hat{\beta}\|_2$

.

- La regresión Ridge tiene una clara desventaja: incluye todos los predictores p en el modelo final, a diferencia de aquellos modelos que eligen un conjunto de variables.
- La regresión Lasso es un alternativa relativamente nueva a Ridge, que corrige esta desventaja. Los coeficientes $\hat{\beta}_\lambda^L$, minimizan el número de variables

$$\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p}\beta_j x_{ij}\right)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{p}|\beta_j| = \text{RSS} + \lambda\sum_{j=1}^{p}|\beta_j|.$$

- Lasso utiliza penaliza con l1, y no con l2. La norma de l1 de un un vector de coeficientes β está dada por $\|\beta\|_1 = \sum|\beta_j|$.

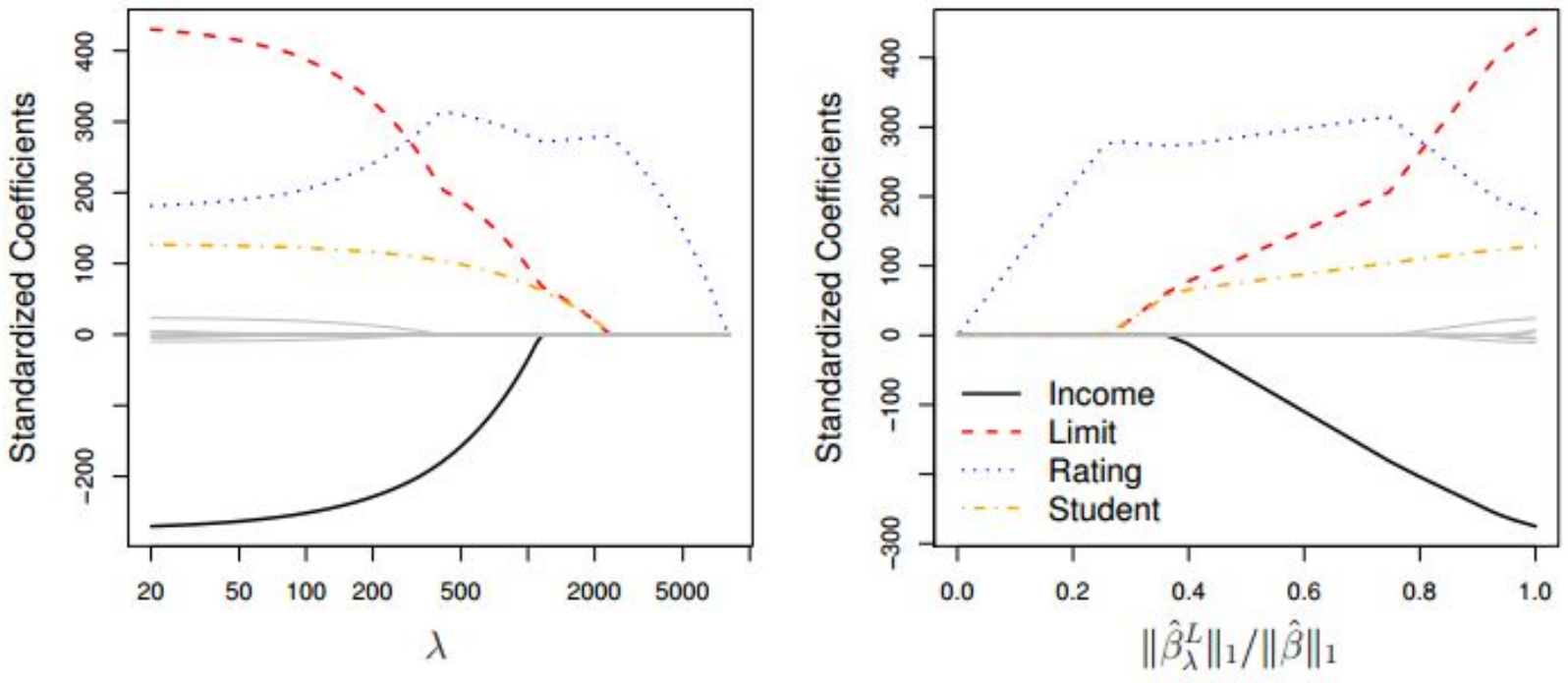
- Como en la regresión ridge, **Lasso "achica" los coeficiente** estimados hacia el zero.

- Sin embargo, en el caso de Lasso, el **l1 fuerza los coeficientes a valer exactamente cero**, en el caso de que λ sea lo suficientemente grande.

- Por lo tanto, el **Lasso hace selección de variables**

- Entonces, decimos que Lasso **genera modelos dispersos**, es decir, modelos con una selección de variables

- Al igual que en Ridge, la elección de un buen valor λ es crítico en Lasso; nuevamente, **cross-validation** es el método para su elección

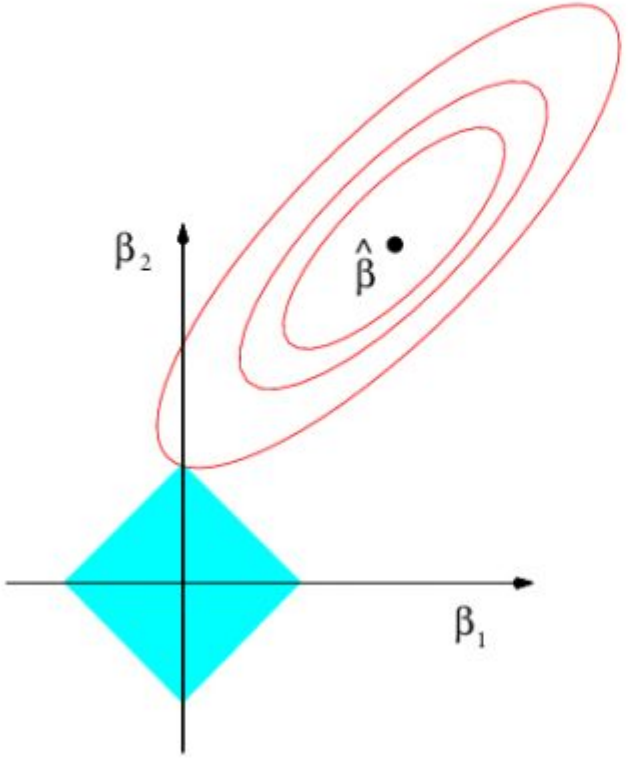

Standardized Coefficients
400
300
200
100
0
−200
20
50
100
200
500
2000
5000
λ
Standardized Coefficients
400
300
200
100
0
−100
−300
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
$\|\hat{\beta}_\lambda^L\|_1/\|\hat{\beta}\|_1$
Income
Limit
Rating
Student

- ¿Por qué Lasso, a diferencia de Ridge, resulta en coeficientes estimados exactamente igual a cero?
- Uno puede mostrar que la estimación de coeficientes de las regresión Lasso y Ridge resuelve estos problemas, respectivamente.

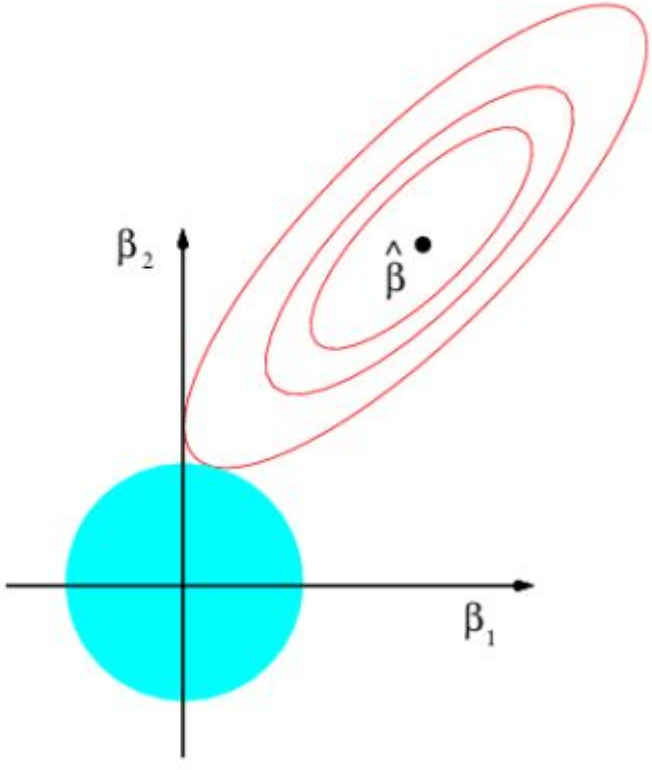
$$\underset{\beta}{\text{minimize}} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2 \quad \text{subject to} \quad \sum_{j=1}^{p} |\beta_j| \leq s$$

$$\underset{\beta}{\text{minimize}} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2 \quad \text{subject to} \quad \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2 \leq s,$$

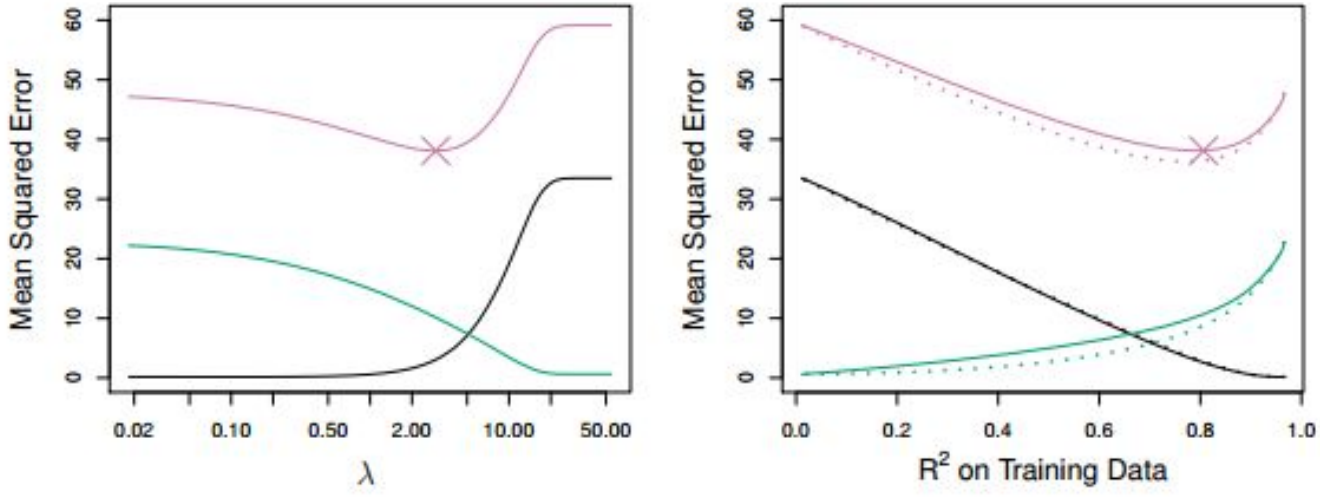
Lasso



Ridge



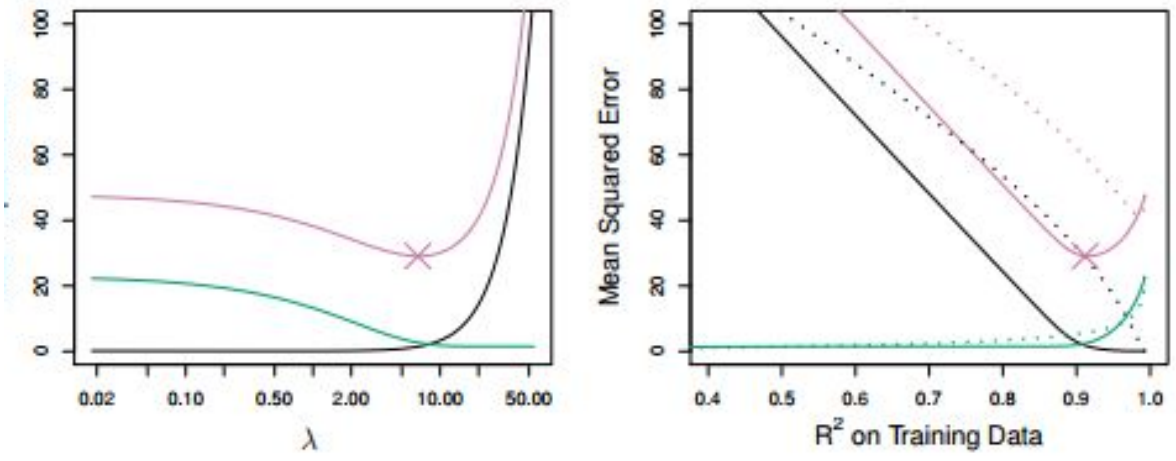
Ejemplo simulado, haciendo que todos los coeficientes fueran diferentes a cero. En este caso, los dos modelos tienden a performar prácticamente igual. Ridge tiene una menor varianza y por eso parece mejorar respecto a Lasso



Izquierda: Sesgo cuadrado (negro), la varianza (verde) y el MSE del test (violeta) para Lasso en set simulado.

Derecha: Comparación del Sesgo cuadrado, la varianza y el MSE del test, entre Lasso (llena) y Ridge (punteada).

Estos datos se generaron haciendo que solamente dos coeficientes fueran diferentes a cero. De esta forma, vemos cómo Lasso mejora claramente la performance con respecto a Ridge, tanto en lo referido a variancia como a MSE.



Izquierda: Sesgo cuadrado (negro), la varianza (verde) y el MSE del test (violeta)para Lasso en set simulado.

Derecha: Comparación del Sesgo cuadrado, la varianza y el MSE del test, entre Lasso (llena) y Ridge (punteada).

- Se necesita un método para poder **ajustar el hiperparámetro** λ

- **Cross-validation** es una manera simple de atacar este problema. Se elige un rango de valores que puede tomar el hiperparámetro, y luego se computan los errores que devuelve cross-validation, para cada caso.

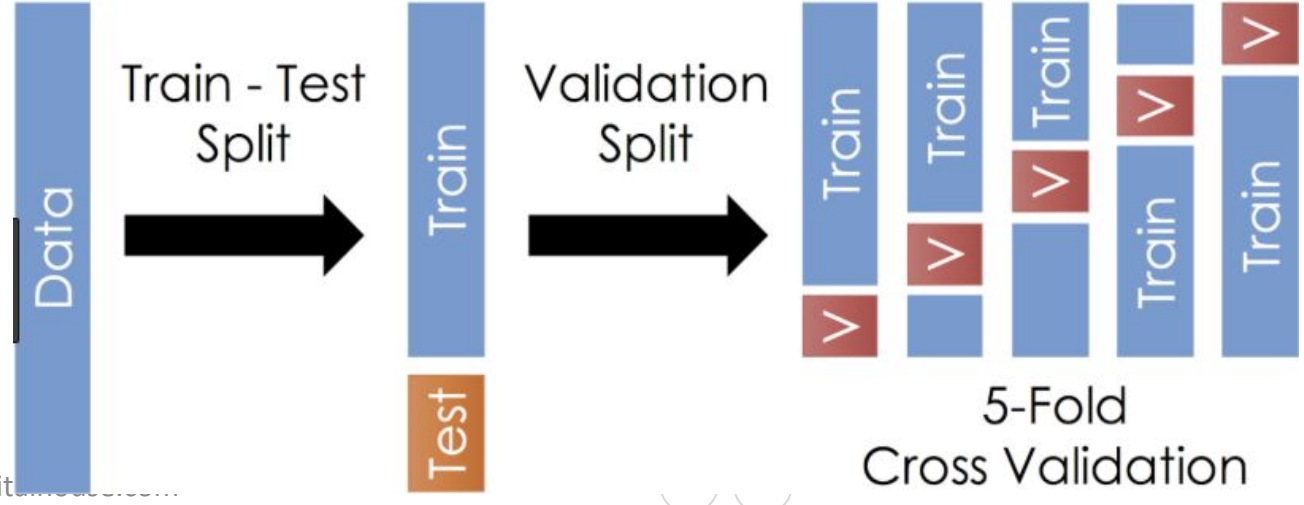
- Se elige el hiperparámetro asociado al menor error computado.

- Finalmente, “re-fiteamos” el modelo con el hiperparámetro elegido.

$$\lambda_1||\beta||_1 + \lambda_2||\beta||_2^2 = \lambda(||\beta||_1 + \alpha||\beta||_2^2)$$

- ElasticNet combina (linealmente) lo mejor de ambos mundos.
- El parámetro **λ** regula la complejidad del modelo. El parámetro **α** regula la importancia relativa de Lasso vs. Ridge.
- Es posible obtener soluciones parsimoniosas y bien condicionadas.
- No free lunch!: ahora hay que calibrar dos hiperparámetros.

- ¿Cómo funciona?
  - Hacemos el split train/validación y test
  - Empezamos dividiendo el dataset de train/validación en k grupos (generalmente, 5 o 10 suele ser la medida convencional) del mismo tamaño.
  - En la primera iteración, el primer grupo generado pasa a ser un test test; el resto, pasa a ser el training set
    - Entrenamos un modelo sobre el training data
    - Hacemos las predicciones sobre el test set y calculamos el error sobre este test-set
  - Repetimos k veces, variando el test set en cada iteración.
  - Al final, promediamos los errores en cada una de las iteraciones



Conclusión

- La **regularización nos ayuda a evitar el sobreajuste** limitando la complejidad del modelo
- Matemáticamente lo logra **penalizando la complejidad** dentro de la función de costo
- Modelos con regularización suelen tener **mayor poder de generalización**
- Para determinar el valor de los **hiper-parámetros** usados para regularizar, usamos **validación cruzada**