Tema 2: Aprendizaje Supervisado

Regresión Lineal Regularizada I

Prof. Wladimir Rodríguez

wladimir@ula.ve

Departamento de Computación

Demostración de sobreajuste sobre datos sintéticos

Crear un conjunto de datos basado en una función sinusoidal

Veamos un conjunto de datos sintéticos que consta de 30 puntos extraídos de la sinusoide $y = \sin(4x)$:

In [1]:
```
import math
import random
import numpy as np
import pandas as pd
from sklearn.linear_model import LinearRegression
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.utils import shuffle
from sklearn.metrics import mean_squared_error
from matplotlib import pyplot as plt
%matplotlib inline
```

Crear valores aleatorios para x en el intervalo [0,1]

In [2]:
```
np.random.seed(98103)
n = 30
x = np.random.uniform(0, 1, size=n)
x = np.sort(x)
```

Calcular y. Y agregar ruido gaussiano aleatorio a y

In [3]:
```
def f(x):
    return np.sin(4 * x)
y = f(x) + np.random.normal(scale=0.3, size=n)
```

Crear un dataframe de pandas.

In [4]:
```
data = pd.DataFrame({'x':x, 'y':y})
data.head()
```

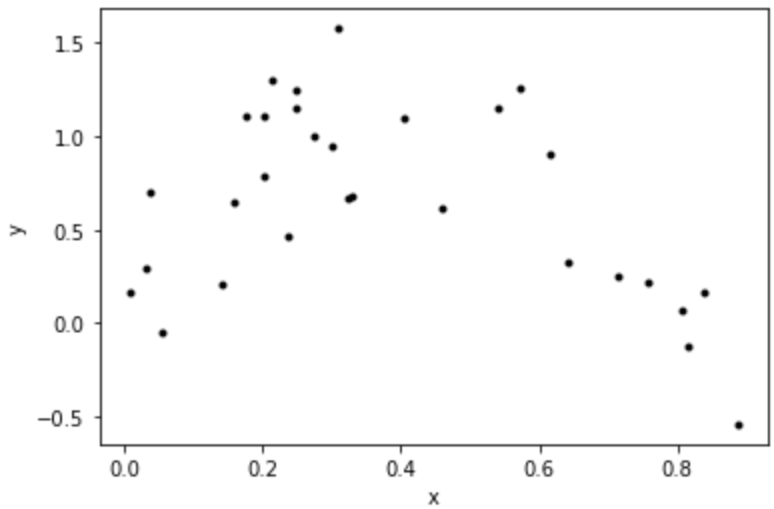
Out[4]:

	x	y
0	0.007306	0.168648
1	0.031659	0.291408
2	0.036159	0.700509
3	0.052886	-0.049021
4	[illegible]	[illegible]

Crea una función para graficar los datos, ya que lo haremos muchas veces

In [5]:
```
def graficar_data(data):
    plt.plot(data['x'],data['y'],'k.')
    plt.xlabel('x')
    plt.ylabel('y')

graficar_data(data)
```



Definir algunas funciones útiles de regresión polinomial

Función para generar los dataframe polinomiales

In [6]:
```
def polinomial_dataframe(atributo, grado):
    # asumir que grado es >= 1
    # inicializar el DataFrame:
    poli_dataframe = pd.DataFrame()
    # fijar poli_dataframe['potencia_1'] igual al atributo pasado
    poli_dataframe['potencia_1'] = atributo
    # chequear si grado > 1
    if grado > 1:
        # realizar un lazo con los grados restantes:
        for potencia in range(2, grado+1):
            # primero le damos el nombre a la columna:
            nombre = 'potencia_' + str(potencia)
            # luego asignamos a poli_dataframe[nombre] la potencia del atributo apropiada
            poli_dataframe[nombre] = atributo**potencia
    return poli_dataframe
```

Definir una función para ajustar un modelo de regresión lineal polinomial de grado "grado" a los datos en "data":

In [7]:
```python
def regresion_polinomial(data, grado):
    poli_data_X = polinomial_dataframe(data.x, grado)
    modelo = LinearRegression()
    modelo.fit(poli_data_X, y)
    return modelo
```

Definir la función para graficar los datos y las predicciones hechas, ya que vamos a usarlo muchas veces.

In [8]:
```python
def graficar_predicciones_poly(data, modelo):
    graficar_data(data)

    # Graficar la verdadera relación entre X e y
    x_v = np.random.uniform(0, 1, size=200)
    x_v = np.sort(x_v)
    y_v = f(x_v)
    plt.plot(x_v, y_v, 'r-')

    # Obtener el grado del polinomio
    grado = len(modelo.coef_)

    # Crear 200 puntos en el eje x axis y calcular la predicción para cada punto
    x = np.random.uniform(0, 1, size=200)
    x = np.sort(x)
    x_pred = pd.DataFrame({'x': x})
    y_pred = modelo.predict(polinomial_dataframe(x_pred.x,grado))

    # graficar predicciones
    plt.plot(x_pred.x, y_pred, 'g-', label='ajuste de grado ' + str(grado))
    plt.legend(loc='upper left')
    plt.axis([0,1,-1.5,2])
```

Cree una función que imprima los coeficientes polinomiales de una manera bonita :)

In [9]:
```python
def imprimir_coefficientes(modelo):
    # Obtener el grado del polinomio
    grado = len(modelo.coef_)

    # Obtener los parámetros aprendidos como una lista
    w = [modelo.intercept_]
    w += (modelo.coef_).tolist()
    # Numpy tiene un a función para imprimir polinomios de manera elegante
    # (La usaremos, pero necesita los parámetros en orden inverso)
    print ('Polinomio de grado ' + str(grado) + ':')
    w.reverse()
    print (np.poly1d(w))
```

Ajustar un polinomio de grado 2

In [16]:
```python
modelo = regresion_polinomial(data, grado=2)
```

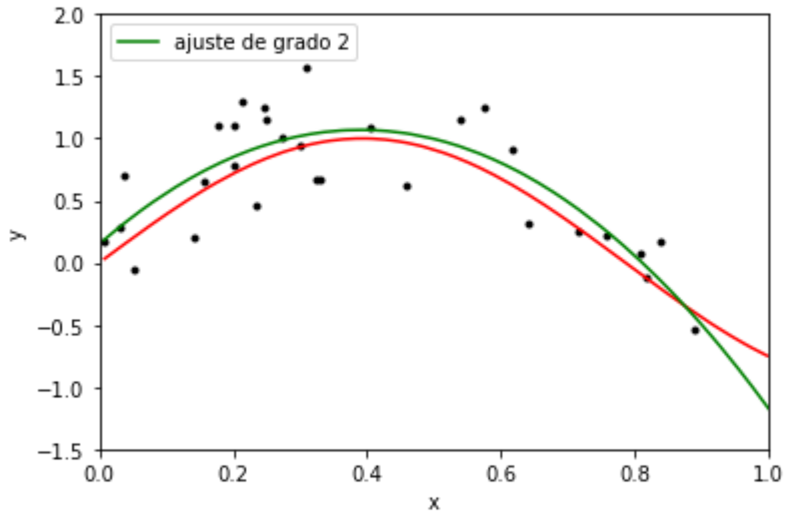
Inspeccionar los parámetros aprendidos

In [17]:
```python
imprimir_coefficientes(modelo)
```

Polinomio de grado 2:

Formar y graficar nuestras predicciones a lo largo de una cuadrícula de valores x:

In [18]:
```
graficar_predicciones_poly(data, modelo)
```



Calcular la media del error al cuadrado (MSE = mean squared error)

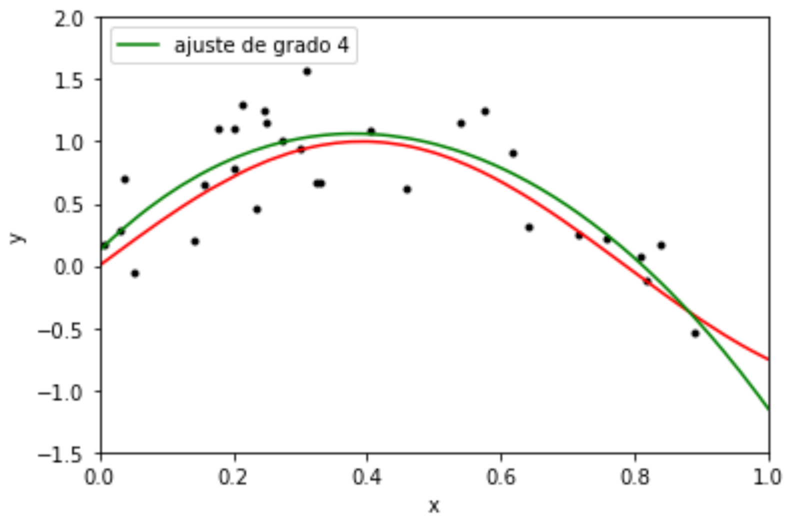
In [19]:
```
print('MSE = ', mean_squared_error(data.y, modelo.predict(polinomial_dataframe(data.x,2))))
```

```
MSE =  0.084715734984617
```

Ajustar un polinomio de grado 4

In [20]:
```
modelo = regresion_polinomial(data, grado=4)
imprimir_coefficientes(modelo)
graficar_predicciones_poly(data, modelo)
print('MSE = ', mean_squared_error(data.y, modelo.predict(polinomial_dataframe(data.x,4))))
```

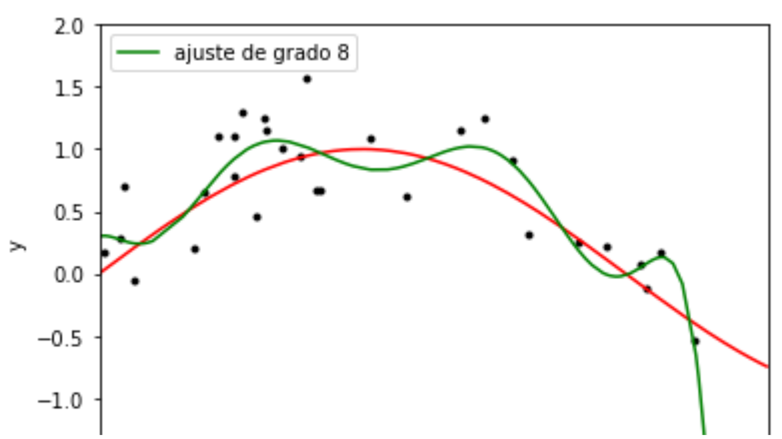
```
Polinomio de grado 4:
        4         3         2
-1.366 x + 3.125 x - 8.299 x + 5.259 x + 0.1204
MSE =  0.0845842722706234
```



Ajustar un polinomio de grado 8

In [21]:
```
modelo = regresion_polinomial(data, grado=8)
imprimir_coefficientes(modelo)
graficar_predicciones_poly(data, modelo)
print('MSE = ', mean_squared_error(data.y, modelo.predict(polinomial_dataframe(data.x,8))))
```

```
Polinomio de grado 8:
            8             7             6             5             4
-1.192e+04 x + 3.974e+04 x - 5.286e+04 x + 3.558e+04 x - 1.261e+04 x
        3         2
 + 2176 x - 135.5 x + 1.609 x + 0.2985
MSE =  0.06820283083276239
```

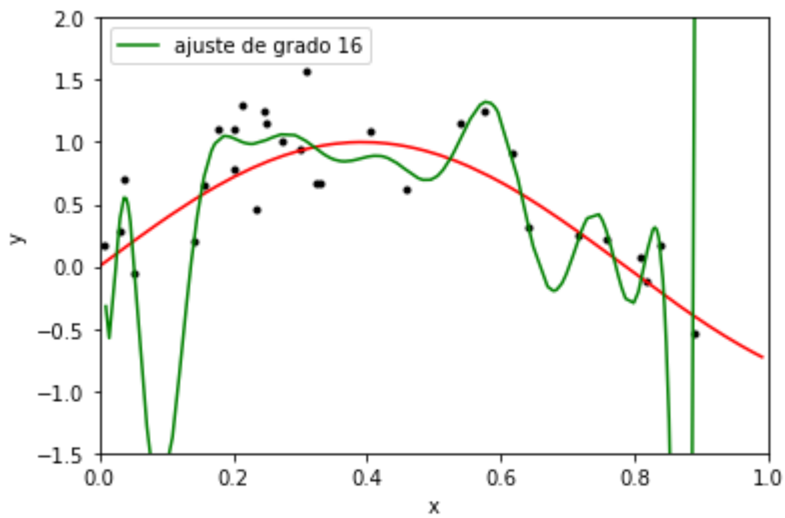


Ajustar un polinomio de grado 16

In [24]:
```
modelo = regresion_polinomial(data, grado=16)
imprimir_coefficientes(modelo)
```

```
graficar_predicciones_poly(data, modelo)
print('MSE = ', mean_squared_error(data.y, modelo.predict(polinomial_dataframe(data.x,16))))
```

```
Polinomio de grado 16:
           16             15            14             13             12
7.098e+09 x   - 4.998e+10 x  + 1.6e+11 x  - 3.079e+11 x  + 3.977e+11 x
             11             10             9             8
 - 3.64e+11 x  + 2.431e+11 x  - 1.201e+11 x + 4.404e+10 x
             7             6             5             4             3
 - 1.191e+10 x + 2.339e+09 x - 3.237e+08 x + 3.017e+07 x - 1.756e+06 x
             2
 + 5.663e+04 x - 837.4 x + 3.866
MSE =  0.04056444128518675
```



Los coeficientes para el polinomio de grado 16 son de una magnitud altisima!!!!

Demostración de sobreajuste sobre datos reales

En primer lugar, dividir los datos de ventas en cuatro subconjuntos de aproximadamente el mismo tamaño y llamarlos ventas_1, ventas_2, ventas_3 y ventas_4

In [26]:
```
ventas = pd.read_csv('../datos/kc_house_data.csv')
ventas = shuffle(ventas)
```

In [28]:
```
ventas_1 = ventas[:5403]
ventas_2 = ventas[5403:10806]
ventas_3 = ventas[10806:16209]
ventas_4 = ventas[16209:]
```

Ajustar un modelo polinomial de grado 15 al conjunto ventas_1

In [35]:
```
X_1 = ventas_1.sort_values(['sqft_living', 'price'])
poli_data_X = polinomial_dataframe(X_1.sqft_living, 15)
y_1 = X_1.price
```

In [36]:
```
modelo = LinearRegression()
modelo.fit(poli_data_X, y_1)
imprimir_coefficientes(modelo)
print()
mse = mean_squared_error(y_1, modelo.predict(poli_data_X))
print('MSE = ', mse)
```

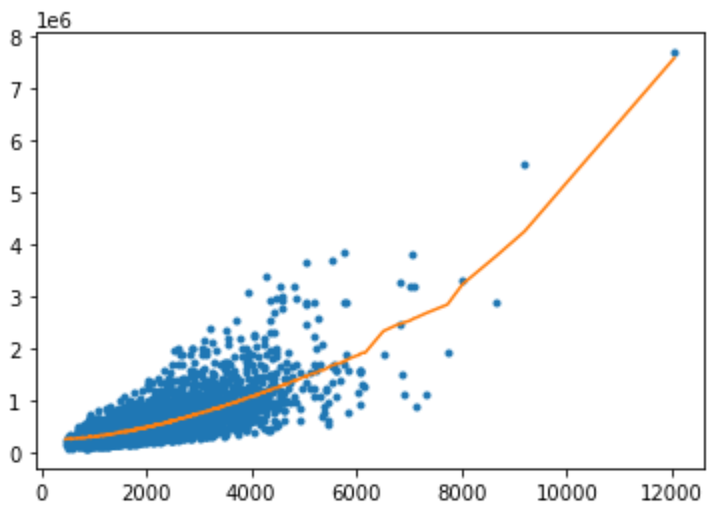
```python
print('RMSE = ', math.sqrt(mse))
plt.plot(poli_data_X['potencia_1'],y_1,'.',
        poli_data_X['potencia_1'], modelo.predict(poli_data_X),'-')
```

```
Polinomio de grado 15:
            15             14             13             12
-4.857e-17 x  - 8.153e-16 x  - 3.011e-16 x  + 8.674e-16 x
             11             10             9             8
 - 3.53e-16 x  - 4.632e-16 x  - 1.214e-16 x - 1.856e-16 x
              7             6             5             4             3
 - 1.735e-16 x - 7.147e-16 x - 1.473e-14 x + 3.582e-10 x - 6.104e-06 x
           2
 + 0.07172 x + 2.953e-05 x + 2.442e+05

MSE =  64864198859.398575
RMSE =  254684.50847940982
```

Out[36]:

```
[<matplotlib.lines.Line2D at 0x26d6061d6a0>,
 <matplotlib.lines.Line2D at 0x26d6061d790>]
```



Ajustar un modelo polinomial de grado 15 al conjunto ventas_2

In [37]:

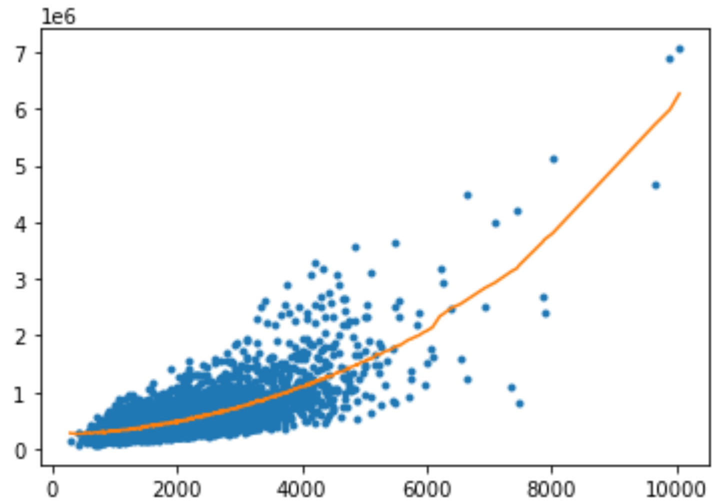
```python
X_2 = ventas_2.sort_values(['sqft_living', 'price'])
poli_data_X_2 = polinomial_dataframe(X_2.sqft_living, 15)
y_2 = X_2.price
```

In [38]:

```python
modelo = LinearRegression()
modelo.fit(poli_data_X_2, y_2)
imprimir_coefficientes(modelo)
print()
mse = mean_squared_error(y_2, modelo.predict(poli_data_X_2))
print('MSE = ', mse)
print('RMSE = ', math.sqrt(mse))
plt.plot(poli_data_X_2['potencia_1'],y_2,'.',
        poli_data_X_2['potencia_1'], modelo.predict(poli_data_X_2),'-')
```

```
Polinomio de grado 15:
          15             14             13             12            11
1.18e-16 x - 4.961e-16 x + 8.899e-16 x + 6.765e-16 x - 3.27e-16 x
```

Out[38]:
```
[<matplotlib.lines.Line2D at 0x26d6068daf0>,
 <matplotlib.lines.Line2D at 0x26d6068dbe0>]
```



Ajustar un modelo polinomial de grado 15 al conjunto ventas_3

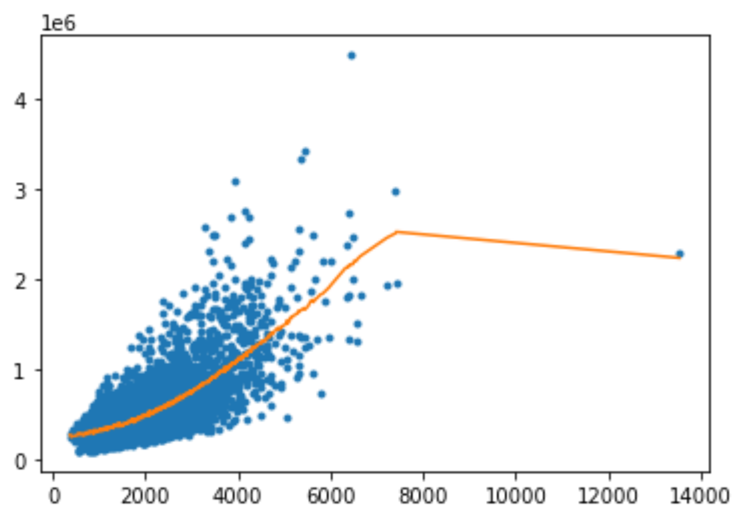
In [39]:
```python
X_3 = ventas_3.sort_values(['sqft_living', 'price'])
poli_data_X_3 = polinomial_dataframe(X_3.sqft_living, 15)
y_3 = X_3.price
```

In [40]:
```
modelo = LinearRegression()
modelo.fit(poli_data_X_3, y_3)
imprimir_coefficientes(modelo)
print()
mse = mean_squared_error(y_3, modelo.predict(poli_data_X_3))
print('MSE = ', mse)
print('RMSE = ', math.sqrt(mse))
plt.plot(poli_data_X_3['potencia_1'],y_3,'.',
        poli_data_X_3['potencia_1'], modelo.predict(poli_data_X_3),'-')
```

```
Polinomio de grado 15:
            15             14             13             12
-3.469e-17 x  + 9.541e-17 x  + 1.143e-15 x  + 7.667e-16 x
              11             10            9             8
 + 8.752e-16 x  - 3.608e-16 x  - 1.041e-16 x + 7.546e-17 x
             7             6             5             4             3
 - 1.188e-16 x + 1.228e-15 x - 3.345e-15 x - 1.875e-10 x - 1.152e-06 x
            2
 + 0.06064 x + 2.555e-05 x + 2.535e+05

MSE =  52739844261.61342
RMSE =  229651.5714329284
```

Out[40]:
```
[<matplotlib.lines.Line2D at 0x26d60706460>,
 <matplotlib.lines.Line2D at 0x26d60706550>]
```



Ajustar un modelo polinomial de grado 15 al conjunto ventas_4

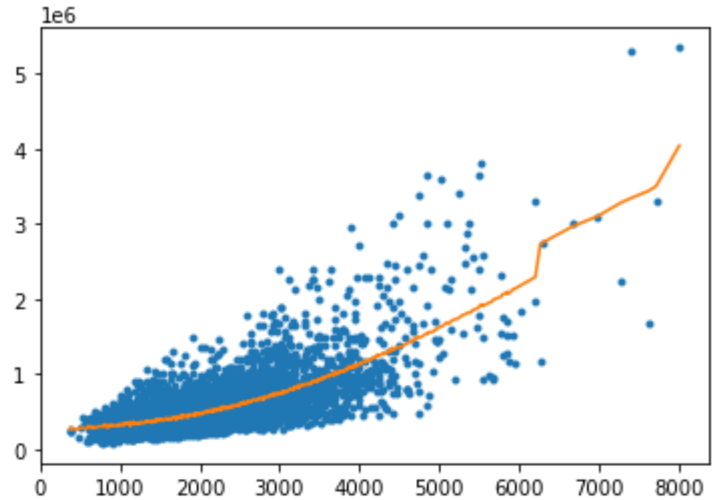
In [41]:
```
X_4 = ventas_4.sort_values(['sqft_living', 'price'])
poli_data_X_4 = polinomial_dataframe(X_4.sqft_living, 15)
y_4 = X_4.price
```

In [42]:
```
modelo = LinearRegression()
modelo.fit(poli_data_X_4, y_4)
imprimir_coefficientes(modelo)
print()
mse = mean_squared_error(y_4, modelo.predict(poli_data_X_4))
print('MSE = ', mse)
print('RMSE = ', math.sqrt(mse))
plt.plot(poli_data_X_4['potencia_1'],y_4,'.',
        poli_data_X_4['potencia_1'], modelo.predict(poli_data_X_4),'-')
```

```
Polinomio de grado 15:
           15             14             13             12
7.529e-16 x  - 2.862e-16 x  + 4.059e-16 x  + 1.557e-16 x
              11             10             9             8
 + 7.026e-16 x  + 2.715e-16 x  - 1.232e-15 x + 6.332e-16 x
              7             6             5             4             3
 - 9.202e-16 x - 1.422e-16 x - 2.259e-14 x - 3.241e-10 x + 4.422e-06 x
            2
 + 0.04271 x + 2.245e-05 x + 2.75e+05
```

Out[42]:

```
[<matplotlib.lines.Line2D at 0x26d6173b7f0>,
 <matplotlib.lines.Line2D at 0x26d6173b8e0>]
```



Regresión Ridge

La Regresión Ridge tiene como objetivo evitar el sobreajuste añadiendo un coste al término RSS de mínimos cuadrados estándar que depende de la norma 2 de los coeficientes $||w||$. El resultado es penalizar ajustes con grandes coeficientes. La fuerza de esta penalización, y por lo tanto el balance de complejidad vs. complejidad del modelo, se controla mediante un parámetro α (aquí llamado "Penalidad_L2").

$J(\boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n} (y_i - \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{x}'_i)^2 + \alpha ||\boldsymbol{\beta}||_2$

- α = 0:

```
  El objetivo se vuelve igual que la simple regresión lineal.
  Obtendremos los mismos coeficientes que la regresión lineal simple.
```

- $\alpha = \infty$:

```
  Los coeficientes serán cero. ¿Por qué? Debido a una ponderación infinita del
cuadrado de coeficientes, cualquier cosa menos de cero hará que el objetivo se
a infinito.
```

- $0 < \alpha < \infty$:

```
  La magnitud de $\alpha$ determinará la ponderación dada a diferentes partes
del objetivo.
  Los coeficientes estarán entre 0 y unos para la regresión lineal simple.
```

In [43]:
```
from sklearn.linear_model import Ridge
```

Definir nuestra función para resolver el objetivo de la Regresión Ridge para un modelo de regresión polinomial de cualquier grado:

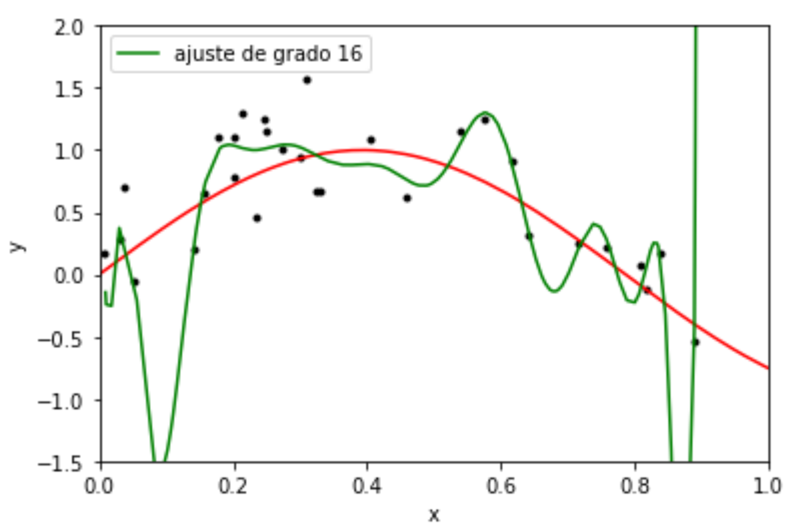
In [44]:
```
def regresion_ridge_polinomial(data, grado, penalidad_l2):
    poli_data_X = polinomial_dataframe(data.x, grado)
    modelo = Ridge(alpha=penalidad_l2)
    modelo.fit(poli_data_X, y)
    return modelo
```

Realizar un ajuste de Regresion Ridge de un polinomio de grado 16 usando una penalidad muy pequeña

In [45]:
```
modelo = regresion_ridge_polinomial(data, grado=16, penalidad_l2=1e-25)
imprimir_coefficientes(modelo)
```

```
Polinomio de grado 16:
           16              15              14              13
5.741e+09 x   - 4.039e+10 x   + 1.292e+11 x   - 2.485e+11 x
              12              11              10              9
 + 3.207e+11 x   - 2.933e+11 x   + 1.958e+11 x   - 9.668e+10 x
             8             7             6             5             4
 + 3.545e+10 x - 9.587e+09 x + 1.882e+09 x - 2.603e+08 x + 2.422e+07 x
             3            2
 - 1.403e+06 x + 4.48e+04 x - 651.6 x + 3.016
```

In [46]:
```
graficar_predicciones_poly(data, modelo)
```

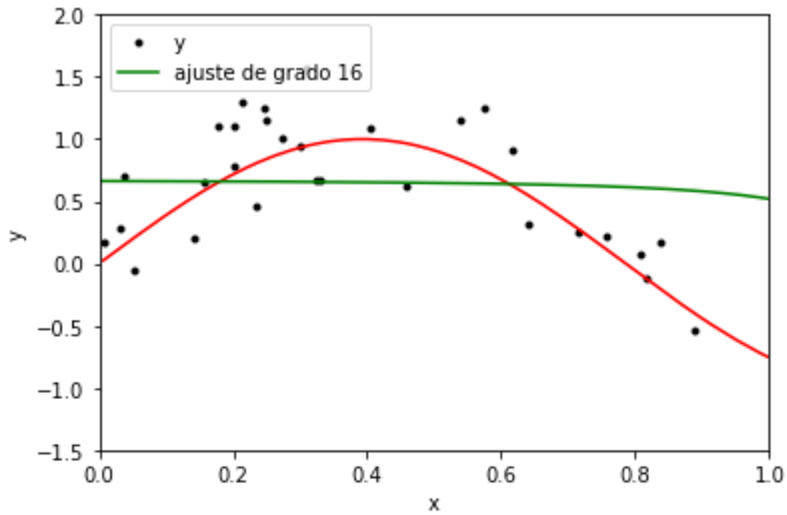


Realizar un ajuste de Regresion Ridge de un polinomio de grado 16 usando una penalidad alta

In [47]:
```
modelo = regresion_ridge_polinomial(data, grado=16, penalidad_l2=100)
imprimir_coefficientes(modelo)
```

```
Polinomio de grado 16:
           16             15             14             13            12
-0.002467 x  - 0.002856 x  - 0.003314 x  - 0.003853 x  - 0.00449 x
```

In [31]:
```python
graficar_predicciones_poly(data, modelo)
```



Veamos los ajustes para una secuencia de valores alfa en aumento

In [48]:
```python
for alfa in [1e-25, 1e-10, 1e-6, 1e-3, 1e1, 1e2]:
    modelo = regresion_ridge_polinomial(data, grado=16, penalidad_l2=alfa)
    print ('alpha = %.2e' % alfa)
    imprimir_coefficientes(modelo)
    print ('\n')
    plt.figure()
    graficar_predicciones_poly(data, modelo)
    plt.title('Ridge, alfa = %.2e' % alfa)
```

```
alpha = 1.00e-25
Polinomio de grado 16:
           16             15             14             13
5.741e+09 x  - 4.039e+10 x  + 1.292e+11 x  - 2.485e+11 x
              12             11             10             9
 + 3.207e+11 x  - 2.933e+11 x  + 1.958e+11 x  - 9.668e+10 x
              8             7             6             5             4
 + 3.545e+10 x - 9.587e+09 x + 1.882e+09 x - 2.603e+08 x + 2.422e+07 x
              3            2
 - 1.403e+06 x + 4.48e+04 x - 651.6 x + 3.016


alpha = 1.00e-10
Polinomio de grado 16:
       16         15          14         13         12          11         10
509.6 x  + 2322 x  - 9.445 x  - 3071 x  - 3804 x  - 932.9 x  + 3782 x
         9        8        7        6             5        4        3
 + 5767 x + 1044 x - 7020 x - 4838 x + 1.063e+04 x - 5191 x + 887.6 x
         2
 - 11.8 x - 3.863 x + 0.3649
```

Regresión Lasso

La Regresión Lasso reduce conjuntamente los coeficientes para evitar el ajuste excesivo, e implica implícitamente la selección de los atributos estableciendo algunos coeficientes exactamente a 0 para una fuerza de penalidad suficientemente grande alfa (aquí llamada "penalidad_L1"). En particular, Lasso toma el término RSS de los mínimos cuadrados estándar y añade un coste de norma 1 de los coeficientes $\|w\|$.

In [49]:
```
from sklearn.linear_model import Lasso
```

Definir nuestra función para resolver el objetivo de la Regresión Lasso para un modelo de regresión polinomial de cualquier grado:

In [50]:
```
def regresion_lasso_polinomial(data, grado, penalidad_l1):
    poli_data_X = polinomial_dataframe(data.x, grado)
    modelo = Lasso(alpha=penalidad_l1)
    modelo.fit(poli_data_X, y)
    return modelo
```

Explore la solución de la Regresión Lasso en función de diferentes valores de alfa

In [51]:
```
for alfa in [0.0001, 0.001, 0.01, 0.1, 10]:
    modelo = regresion_lasso_polinomial(data, grado=16, penalidad_l1=alfa)
    print ('alpha = %.2e' % alfa)
    imprimir_coefficientes(modelo)
    print ('\n')
    plt.figure()
    graficar_predicciones_poly(data, modelo)
    plt.title('Lasso, alfa = %.2e' % alfa)
```

```
C:\ProgramData\Anaconda3\lib\site-packages\sklearn\linear_model\_coordinate_descent.py:64
8: ConvergenceWarning: Objective did not converge. You might want to increase the number
of iterations, check the scale of the features or consider increasing regularisation. Dua
lity gap: 1.949e-03, tolerance: 7.537e-04
  model = cd_fast.enet_coordinate_descent(

alpha = 1.00e-04
Polinomio de grado 16:
         6     3         2
0.02452 x - 0 x - 6.019 x + 4.681 x + 0.1556



C:\ProgramData\Anaconda3\lib\site-packages\sklearn\linear_model\_coordinate_descent.py:64
8: ConvergenceWarning: Objective did not converge. You might want to increase the number
of iterations, check the scale of the features or consider increasing regularisation. Dua
lity gap: 9.789e-04, tolerance: 7.537e-04
  model = cd_fast.enet_coordinate_descent(

alpha = 1.00e-03
```

In [ ]: