Model Linear

Ali Akbar Septiandri

Universitas Al-Azhar Indonesia

aliakbars@live.com

April 22, 2019

Selayang Pandang

Bahan Bacaan

1. VanderPlas, J. (2016). Python Data Science Handbook. (In Depth: Linear Regression) `http://nbviewer.jupyter.org/github/jakevdp/PythonDataScienceHandbook/blob/master/notebooks/05.06-Linear-Regression.ipynb`
2. Murray, I. (2016). MLPR class notes. (Linear Regression; Regression and Gradients; Logistic Regression) `http://www.inf.ed.ac.uk/teaching/courses/mlpr/2016/notes/` (graduate level)

Ulasan

Minggu lalu...

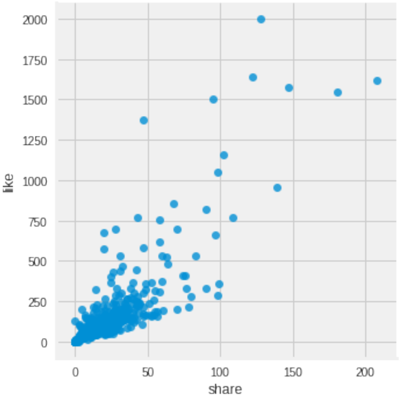
- Dimensionality Reduction
- Eigenvector & Eigenvalue
- Principal Component Analysis

Apa interpretasi dari determinan?
Apa hubungannya dengan nilai eigen?

Video dari Victor Lavrenko untuk PCA

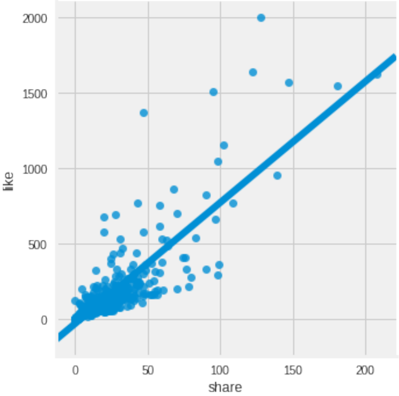
Regresi Linear

Prediksi hubungan antara dua variabel



Gambar: Data hubungan antara 'share' dengan 'like' pada Facebook

Prediksi hubungan antara dua variabel



Gambar: Data hubungan antara 'share' dengan 'like' pada Facebook

Simple Linear Regression

Fungsi linear

Kasus paling sederhana adalah mencocokkan garis lurus ke sekumpulan data

$$y = ax + b$$

dengan a adalah *slope*, sedangkan b dikenal dengan nama *intercept*.

Notasi lain

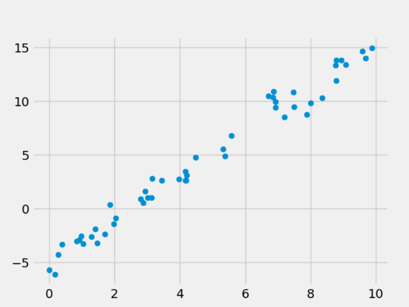
$$y = w_0 + w_1 x_1$$

dengan w adalah bobot atau koefisien.

Simple Linear Regression

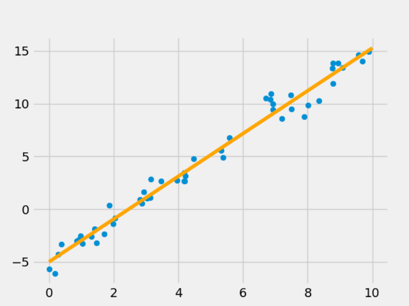
Example

```
rng = np.random.RandomState(1)
x = 10 * rng.rand(50)
y = 2 * x - 5 + rng.randn(50)
plt.scatter(x, y);
```



Gambar: Data yang dimunculkan secara acak [VanderPlas, 2016]

Mencocokkan Garis



Gambar: Hasil pencocokan garis [VanderPlas, 2016]

```
Model slope:  2.02720881036
Model intercept:  -4.99857708555
```

Bagaimana kalau ada lebih dari dua variabel yang ingin kita lihat hubungannya?

Multidimensional Linear Regression

Model

$$y = w_0x_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + \ldots + w_Dx_D = \sum_{j=0}^{D} w_jx_j$$

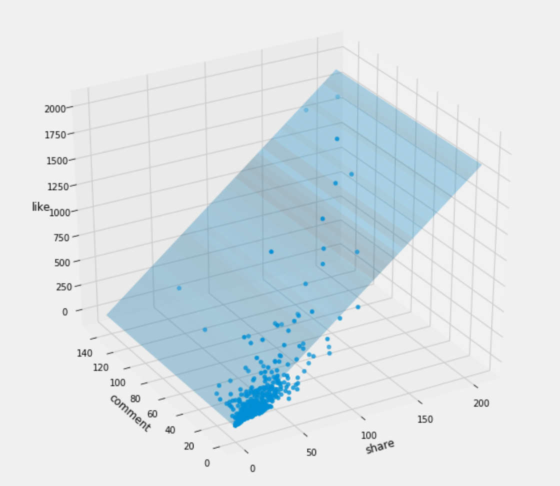
dengan $x_0 = 1$

Notasi matriks-vektor

$$y = \phi\mathbf{w}$$

dengan $\phi = (1, \mathbf{x}^T)$

Regresi linear untuk dua variabel



Gambar: Hubungan antara ‘share’, ‘comment’, dan ‘like’ pada foto di Facebook

Prediktor linear (contoh)

Vektor bobot $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^D$
bias: -20.24
share: 6.65
comment: 3.53

Vektor fitur $\phi(x) \in \mathbb{R}^D$
bias: 1
share: 147
comment: 58

$$\begin{aligned}\hat{y} &= \mathbf{w} \cdot \phi(x) \\ &= \sum_{j=1}^{D} w_j \phi_j(x) \\ &= -20.24(1) + 6.65(147) + 3.53(58) = 1162.05\end{aligned}$$

Jadi, *diprediksi* bahwa untuk foto dengan *share* $= 147$ dan *comment* $= 58$, foto tersebut akan mendapatkan ≈ 1162.05 *likes*.

Kita sudah tahu nilai y dan ϕ,
tapi berapa nilai $\mathbf{w}$?

Nyatanya, kita tidak bisa mencari nilai ϕ^{-1}

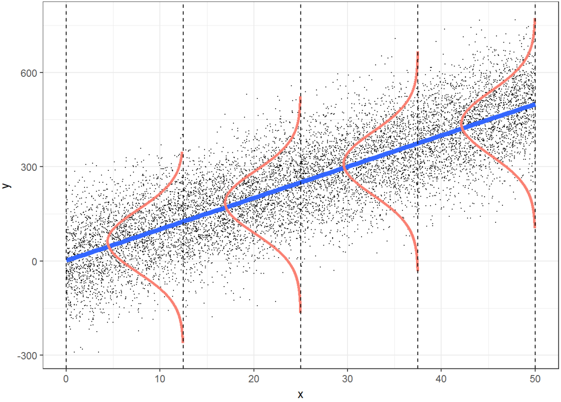
ϕ bukan matriks bujur sangkar dan datanya mengandung *noise*

Asumsi Gaussian Noise

- Asumsikan $y = \mathbf{w}^T\phi + \epsilon$ dengan $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma_\epsilon^2)$
- Berdasarkan asumsi distribusi Gaussian, implikasinya $p(y|\phi, \mathbf{w}) = \mathcal{N}(y; \mathbf{w}^T\phi, \sigma_\epsilon^2)$
- Dengan asumsi i.i.d., nilai log likelihood menjadi

$$
\begin{aligned}
L(\mathbf{w}) &= \sum_{i=1}^{N} \log p(y|\phi, \mathbf{w}) \\
&= -\frac{N}{2}\log(2\pi\sigma_\epsilon^2) - \frac{1}{2\sigma_\epsilon^2}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \mathbf{w}^T\phi_i)^2
\end{aligned}
$$

Fungsi Linear dengan Gaussian Noise



Gambar: Fungsi linear dengan Gaussian *noise* dalam asumsi *ordinary least squares*

Meminimalkan Error

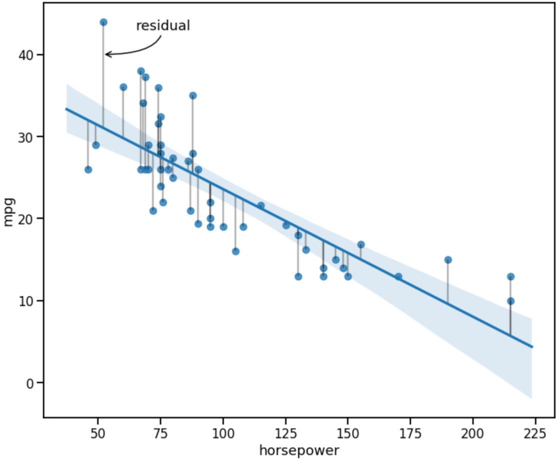
$$
\begin{aligned}
L(\mathbf{w}) &= -\frac{N}{2}\log(2\pi\sigma_\epsilon^2) - \frac{1}{2\sigma_\epsilon^2}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \mathbf{w}^T\phi_i)^2 \\
&= -C_2 - C_1\sum_{i=1}^{N}(y_i - \mathbf{w}^T\phi_i)^2
\end{aligned}
$$

dengan $C_1 > 0$ dan C_2 tidak terpengaruh oleh $\mathbf{w}$. Beberapa hal yang perlu diketahui:

- Mengalikan dengan konstanta positif tidak akan mengubah titik maksimum
- Menambahkan konstanta tidak mengubah titik maksimum
- $\sum_{i=1}^{N}(y_i - \mathbf{w}^T\phi_i)^2$ adalah *sum of squared errors*

Jadi, memaksimalkan *likelihood* akan sama dengan meminimalkan *sum of squared error*.

Residual



Gambar: Meminimalkan *sum of squared errors*

Loss Function

- Harus menggunakan *loss function* $E(\mathbf{w})$ yang dapat diminimalkan
- Pilihan umum: *squared error*

$$
\begin{aligned}
E(\mathbf{w}) &= \sum_{i=1}^{n} (y_i - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)^2 \\
&= (\mathbf{y} - \phi \mathbf{w})^T (\mathbf{y} - \phi \mathbf{w})
\end{aligned}
$$

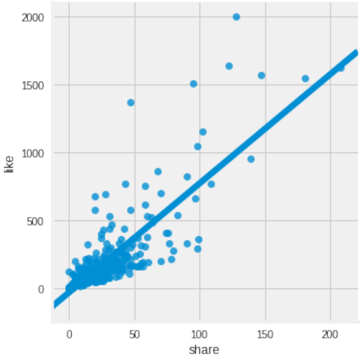
Solusi

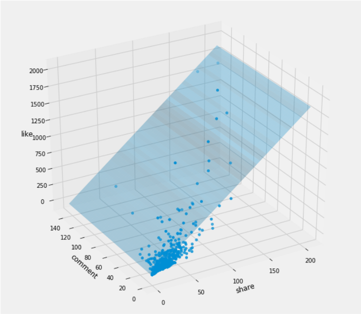
- Jawaban: Minimalkan $E(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)^2$ dengan mencari turunan parsial yang diatur sama dengan 0
- Solusi analitis:

$$\hat{\mathbf{w}} = (\phi^T\phi)^{-1}\phi^T\mathbf{y}$$

- Bagian $(\phi^T\phi)^{-1}\phi^T$ dikenal sebagai *pseudo-inverse*

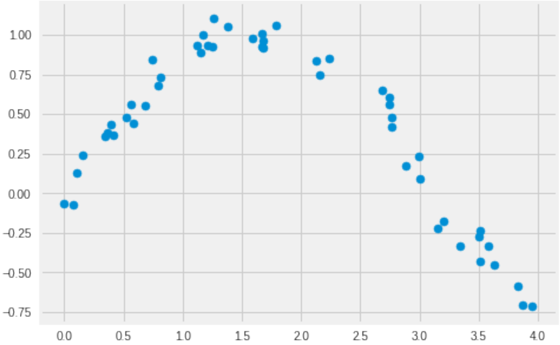
Perhatikan kembali





Apa kekurangan dari regresi linear sederhana seperti ini?

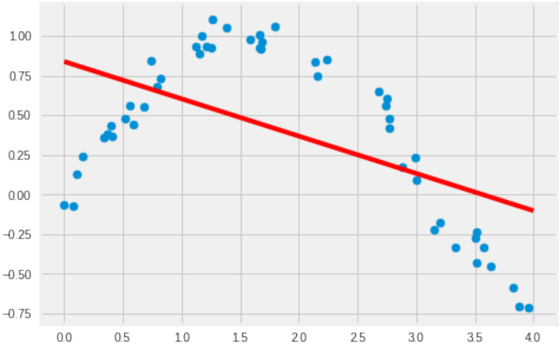
Non-linearity



Gambar: Data yang dihasilkan dari fungsi sin dengan *noise*

Bagaimana kalau datanya seperti ini?

Underfitting



Gambar: Hasil *fitting* regresi linear sederhana

Jika model yang dihasilkan lebih sederhana dibandingkan data yang seharusnya dicocokkan, maka model tersebut disebut mengalami underfitting.

Polynomial Basis Functions

Regresi linear dengan fungsi basis polinomial

Jika kita mengubah $x_p = f_p(x)$, dengan $f_p()$ adalah fungsi transformasi, maka untuk $f_p() = x^p$ dan x adalah input berdimensi satu, modelnya menjadi

$$y = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + \ldots$$

Polynomial Basis Functions

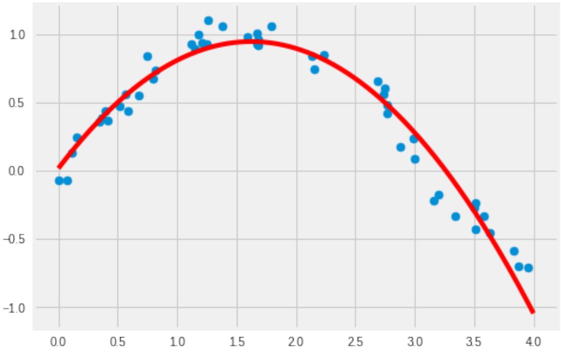
In

```
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
x = np.array([2, 3, 4])
poly = PolynomialFeatures(3, include_bias=False)
poly.fit_transform(x[:, None])
```

Out

```
array([[  2.,   4.,   8.],
       [  3.,   9.,  27.],
       [  4.,  16.,  64.]])
```

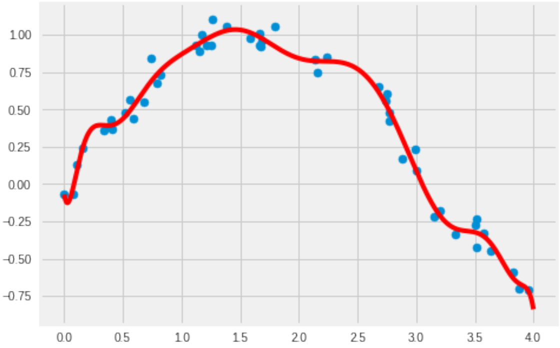
Best-fit



Gambar: Hasil *fitting* fungsi basis polinomial $p = 2$

Apa yang terjadi jika p dibuat lebih besar?

Overfitting



Gambar: Hasil *fitting* fungsi basis polinomial $p = 15$

Jika model yang dihasilkan lebih kompleks ($\sim$ parameternya banyak) dibandingkan data yang seharusnya dicocokkan, maka model tersebut disebut mengalami overfitting.

Kita dapat menggunkan fungsi basis Gaussian sebagai alternatif (*non-examinable*)

Bagaimana cara menghindari *overfitting*?

Ridge Regression

- Digunakan untuk menghindari *overfitting*
- Dikenal juga sebagai L_2 *regularisation* atau *Tikhonov regularisation*
- Pemberian penalti untuk koefisien model

$$P = \alpha \sum_{j=1}^{p} w_j^2 = \alpha \|\mathbf{w}\|_2^2$$

Loss Function pada Ridge Regression

- *Loss function* yang harus diminimalkan menjadi

$$E(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)^2 - \alpha \|\mathbf{w}\|_2^2$$

dengan $\|\mathbf{w}\|_d = (\sum_{j=1}^{p} |w_j|^d)^{\frac{1}{d}}$

Loss Function pada Ridge Regression

- *Loss function* yang harus diminimalkan menjadi

$$E(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)^2 - \alpha \|\mathbf{w}\|_2^2$$

  dengan $\|\mathbf{w}\|_d = (\sum_{j=1}^{p} |w_j|^d)^{\frac{1}{d}}$
- Parameter α (terkadang juga ditulis sebagai λ) bernilai bebas (ditentukan oleh pengguna)

Loss Function pada Ridge Regression

- *Loss function* yang harus diminimalkan menjadi

$$E(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)^2 - \alpha\|\mathbf{w}\|_2^2$$

  dengan $\|\mathbf{w}\|_d = (\sum_{j=1}^{p} |w_j|^d)^{\frac{1}{d}}$
- Parameter α (terkadang juga ditulis sebagai λ) bernilai bebas (ditentukan oleh pengguna)
- Solusi analitis:

$$\hat{\mathbf{w}} = (\phi^T\phi + \alpha I_p)^{-1}\phi^T\mathbf{y}$$

Lasso Regression

- Secara konsep mirip seperti *ridge regression*
- Penalti dengan jumlah nilai absolut dari koefisien (1-norms; L_1 *regularisation*)

$$P = \alpha \sum_{j=1}^{p} |w_j|$$

- Bekerja dengan membuat banyak koefisien bernilai nol

Break

Regresi Logistik

Mengubah Keluaran

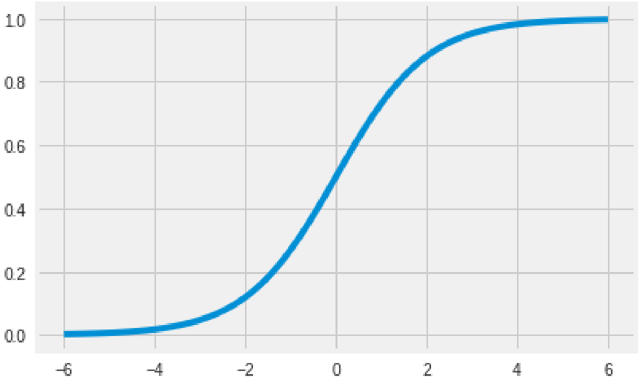
- Berdasarkan keluaran regresi linear, kita bisa memaksanya menjadi [0, 1]
- Gunakan fungsi sigmoid:

$$P(y = 1|\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}; \mathbf{w}) = \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + e^{-\mathbf{w}^T\mathbf{x}}}$$

- Nilai [0, 1] dapat diartikan sebagai probabilitas dari kelas
- Karena probabilitas harus memiliki total 1, maka

$$P(y = 0|\mathbf{x}) = 1 - P(y = 1|\mathbf{x})$$

Fungsi Sigmoid

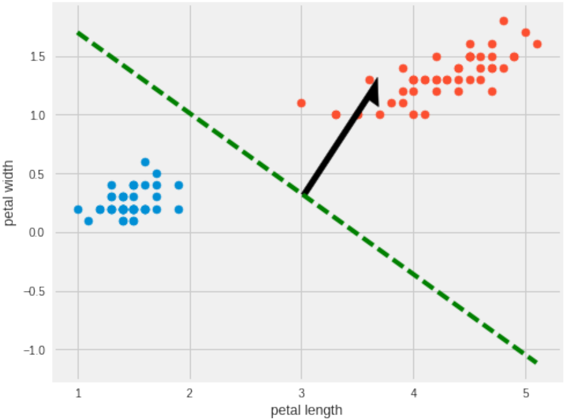


Gambar: Fungsi sigmoid/logistik $\sigma(z) = \frac{1}{1+exp(-z)}$

Decision Boundary

- $\sigma(z) = 0.5$ saat $z = 0$ sehingga batas keputusannya diberikan oleh $\mathbf{w}^T\mathbf{x} = 0$
- Batas keputusannya merupakan $M - 1$ *hyperplane* untuk masalah M dimensi
- Kita perlu mencari nilai $\mathbf{w}$

Decision Boundary



Gambar: Batas keputusan dan vektor bobot untuk klasifikasi dua kelas

Likelihood

- Asumsi i.i.d.
- Dataset $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), ..., (\mathbf{x}_n, y_n)\}$
- *Likelihood*-nya menjadi

$$
\begin{aligned}
p(\mathcal{D}|\mathbf{w}) &= \prod_{i=1}^{N} p(y = y_i|\mathbf{x}_i, \mathbf{w}) \\
&= \prod_{i=1}^{N} p(y = 1|\mathbf{x}_i, \mathbf{w})^{y_i} (1 - p(y = 1|\mathbf{x}_i, \mathbf{w}))^{1-y_i}
\end{aligned}
$$

- *Log likelihood* $L(\mathbf{w}) = log\ p(\mathcal{D}|\mathbf{w})$

$$
L(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{N} y_i log\ \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i) + (1 - y_i) log(1 - \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i))
$$

Solusi

- Nilai optimum untuk kasus ini unik, i.e. *convex*
- Untuk memaksimalkan nilainya, gunakan gradien

$$\frac{\partial L}{\partial w_j} = \sum_{i=1}^{N} (y_i - \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)) x_{ij}$$

- Tidak ada solusi tertutup sehingga harus menggunakan *optimasi numerik*, e.g. dengan *gradient descent*

Optimasi

Mengapa dinamakan *machine learning*?

Alasan Melakukan Optimasi

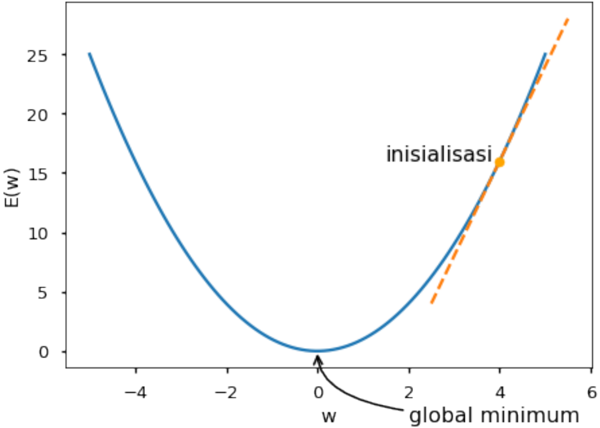
- Belajar $\rightarrow$ masalah optimasi kontinu
- Contoh: regresi linear, regresi logistik, jaringan saraf tiruan, SVM
- Salah satu caranya adalah dengan *maximum likelihood*

“Berapa peluangnya kita melihat data ini jika diketahui parameternya?”

Cara Melakukan Optimasi

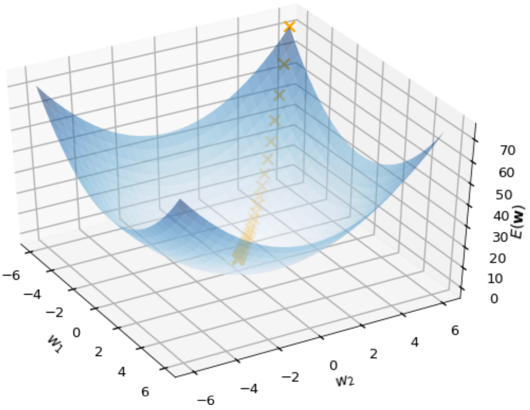
- Menggunakan fungsi galat/error $E(\mathbf{w})$ yang akan diminimalkan
- e.g. dapat berupa $-L(\mathbf{w})$
- Beda nilai $\mathbf{w}$, beda besar error
- Belajar $\equiv$ menuruni permukaan error

Menuruni Permukaan Fungsi Error



Gambar: Menuruni lembah fungsi error E(w)

Menuruni Permukaan Fungsi Error



Gambar: Menuruni lembah fungsi error

Gradient Descent

begin
  Inisialisasi **w**
  while $E(\mathbf{w})$ *masih terlalu besar* **do**
    Hitung $\mathbf{g} \leftarrow \frac{\partial E}{\partial \mathbf{w}}$
    $\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} - \eta \mathbf{g}$
  end
  return **w**
end

Algorithm 1: Melatih dengan gradient descent

Learning Rate

- η (baca: "eta") dikenal sebagai *step size* atau *learning rate* dengan nilai $\eta > 0$
- η terlalu kecil $\rightarrow$ lambat
- η terlalu besar $\rightarrow$ tidak stabil

Batch vs Online

- Untuk data yang sedikit, kita bisa menjumlahkan semua error sebelum memperbarui nilai $\mathbf{w}$ (*batch*)

Batch vs Online

- Untuk data yang sedikit, kita bisa menjumlahkan semua error sebelum memperbarui nilai $\mathbf{w}$ (*batch*)
- Bagaimana untuk 10 juta data?

Batch vs Online

- Untuk data yang sedikit, kita bisa menjumlahkan semua error sebelum memperbarui nilai **w** (*batch*)
- Bagaimana untuk 10 juta data?
- Ternyata, kita bisa memperbarui nilai **w** untuk setiap satu data (*online*)

Gradient Descent (Batch)

begin
  Inisialisasi $\mathbf{w}$
  while $E(\mathbf{w})$ *masih terlalu besar* **do**
    Hitung $\mathbf{g} \leftarrow \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial E_i}{\partial \mathbf{w}}$
    $\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} - \eta \mathbf{g}$
  end
  return $\mathbf{w}$
end

Algorithm 2: Melatih dengan batch gradient descent

Stochastic Gradient Descent

begin
  Inisialisasi $\mathbf{w}$
  while $E(\mathbf{w})$ *masih terlalu besar* **do**
    Pilih j sebagai integer acak antara 1..N
    Hitung $\mathbf{g} \leftarrow \frac{\partial E_j}{\partial \mathbf{w}}$
    $\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} - \eta \mathbf{g}$
  end
  return $\mathbf{w}$
end

Algorithm 3: Stochastic gradient descent (SGD)

Kelebihan dan Kekurangan

- **Batch** lebih *powerful*
- **Batch** lebih mudah dianalisis
- **Online** lebih praktikal untuk data yang besar

Pengembangan Gradient Descent (non-examinable)

- "Why **Momentum** Really Works" [Goh, 2017]
- **Performance-dependent** η, e.g. "NewBOB": η berubah menjadi setengahnya saat validation set tidak menjadi lebih baik
- **Time-dependent schedules**, e.g. eksponensial: $\eta(t) = \eta(0) exp(-t/r)$ ($r \sim$ ukuran data latih)

Tentang Metode Optimasi

- Masih banyak metode optimasi yang tidak dibahas, e.g. linear programming, Newton's method, dll.
- Optimasi merupakan bidang matematika yang kompleks
- Masalah convex: optimum global. Non-convex: optimum lokal.
- Pahami mengapa *gradient descent* bisa mengalami masalah

Klasifikasi

Model Generatif dan Diskriminatif

- Naïve Bayes memodelkan bagaimana kelas "menghasilkan" vektor fitur $p(\mathbf{x}|y)$ untuk kemudian diklasifikasikan dengan

$$p(y|\mathbf{x}) \propto p(\mathbf{x}|y)p(y)$$

Model Generatif dan Diskriminatif

- Naïve Bayes memodelkan bagaimana kelas “menghasilkan” vektor fitur $p(\mathbf{x}|y)$ untuk kemudian diklasifikasikan dengan

$$p(y|\mathbf{x}) \propto p(\mathbf{x}|y)p(y)$$

- Regresi logistik langsung memodelkan $p(y|\mathbf{x})$, i.e. diskriminatif

Model Generatif dan Diskriminatif

- Naïve Bayes memodelkan bagaimana kelas "menghasilkan" vektor fitur $p(\mathbf{x}|y)$ untuk kemudian diklasifikasikan dengan

$$p(y|\mathbf{x}) \propto p(\mathbf{x}|y)p(y)$$

- Regresi logistik langsung memodelkan $p(y|\mathbf{x})$, i.e. diskriminatif
- Keuntungan metode diskriminatif: Buat apa memodelkan $p(\mathbf{x})$? Kita selalu punya input.

Model Generatif dan Diskriminatif

- Naïve Bayes memodelkan bagaimana kelas "menghasilkan" vektor fitur $p(\mathbf{x}|y)$ untuk kemudian diklasifikasikan dengan

$$p(y|\mathbf{x}) \propto p(\mathbf{x}|y)p(y)$$

- Regresi logistik langsung memodelkan $p(y|\mathbf{x})$, i.e. diskriminatif
- Keuntungan metode diskriminatif: Buat apa memodelkan $p(\mathbf{x})$? Kita selalu punya input.
- Keuntungan metode generatif: Bisa menangani kasus data yang hilang, mendeteksi pencilan, atau mungkin *memang* perlu menghasilkan input

Klasifikasi Multikelas

- Buat vektor bobot $\mathbf{w}_k$ untuk setiap kelas, untuk mengklasifikasikan k dan bukan-k
- Gunakan fungsi *softmax*

$$p(y = k|\mathbf{x}) = \frac{exp(\mathbf{w}_k^T \mathbf{x})}{\sum_{j=1}^{C} exp(\mathbf{w}_j^T \mathbf{x})}$$

- Perhatikan bahwa $0 \leq p(y = k|\mathbf{x}) \leq 1$ dan $\sum_{j=1}^{C} p(y = j|\mathbf{x}) = 1$

Ikhtisar

- Regresi linear sebagai fungsi dengan Gaussian *noise*
- Asumsi Gaussian noise $\rightarrow$ *sum of squared error*
- *Ordinary least squares* (OLS) didapatkan dengan solusi analitis dari fungsi error
- Transformasi fitur dan regularisasi
- Klasifikasi dengan regresi logistik dan *gradient descent*
- Model generatif vs diskriminatif

Referensi

Jake VanderPlas (2016)
In Depth: Linear Regression
Python Data Science Handbook

Gabriel Goh (2017)
"Why Momentum Really Works"
Distill http://distill.pub/2017/momentum/

Terima kasih