Основы машинного обучения

Лекция 5

Линейная регрессия

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2023

Линейная регрессия в векторном виде

Модель линейной регрессии

$$a(x) = \langle w, x \rangle$$

- Среднеквадратичная ошибка и задача обучения:

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\langle w, x_i \rangle - y_i)^2 \to \min_w$$

Матрицы

- Матрица — таблица с числами (для простоты)
- Матрица «объекты-признаки»:

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{\ell \times d}$$

Матрицы

- Матрица — таблица с числами (для простоты)
- Матрица «объекты-признаки»:

объект и его признаки

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix}$$

Матрицы

- Матрица — таблица с числами (для простоты)
- Матрица «объекты-признаки»:

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix}$$

значения признака на всех объектах

Векторы

- Вектор размера d — тоже матрица
- Вектор-строка: $w = (w_1, \dots, w_d) \in \mathbb{R}^{1 \times d}$
- Вектор-столбец: $w = \begin{pmatrix} w_1 \\ \dots \\ w_d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{d \times 1}$

Матричное умножение

- Только для матриц $A \in \mathbb{R}^{m \times k}$ и $B \in \mathbb{R}^{k \times n}$
- Результат: $AB = C \in \mathbb{R}^{m \times n}$
- Правило:

$$c_{ij} = \sum_{p=1}^{k} a_{ip} b_{pj}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ & \end{pmatrix}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 4 \\ 0 & & \end{pmatrix}$$

Применение линейной модели

- $a(x) = \langle w, x \rangle = w_1 x_1 + \cdots + w_d x_d$
- Как применить модель к обучающей выборке?

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_d \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{d} w_i x_{1i} \\ \sum_{i=1}^{d} w_i x_{2i} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{d} w_i x_{\ell i} \end{pmatrix}$$

Модель линейной регрессии

- Среднеквадратичная ошибка и задача обучения:

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}(\langle w, x_i\rangle - y_i)^2 \to \min_w$$

Вычисление ошибки

- Отклонения прогнозов от ответов:

$$Xw - y = \begin{pmatrix} \langle w, x_1 \rangle - y_1 \\ \vdots \\ \langle w, x_\ell \rangle - y_\ell \end{pmatrix}$$

Вычисление ошибки

- Евклидова норма:

$$\|z\| = \sqrt{\sum_{j=1}^{n} z_j^2}$$

$$\|z\|^2 = \sum_{j=1}^{n} z_j^2$$

Вычисление ошибки

- Отклонения прогнозов от ответов:

$$Xw - y = \begin{pmatrix} \langle w, x_1 \rangle - y_1 \\ \vdots \\ \langle w, x_\ell \rangle - y_\ell \end{pmatrix}$$

- Среднеквадратичная ошибка:

$$\frac{1}{\ell} \|Xw - y\|^2 = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\langle w, x_i \rangle - y_i)^2$$

Обучение линейной регрессии

$$\frac{1}{\ell}\|Xw - y\|^2 \to \min_w$$

- Вычисление MSE в NumPy:

```
np.square(X.dot(w) - y).mean()
```

Обучение линейной регрессии

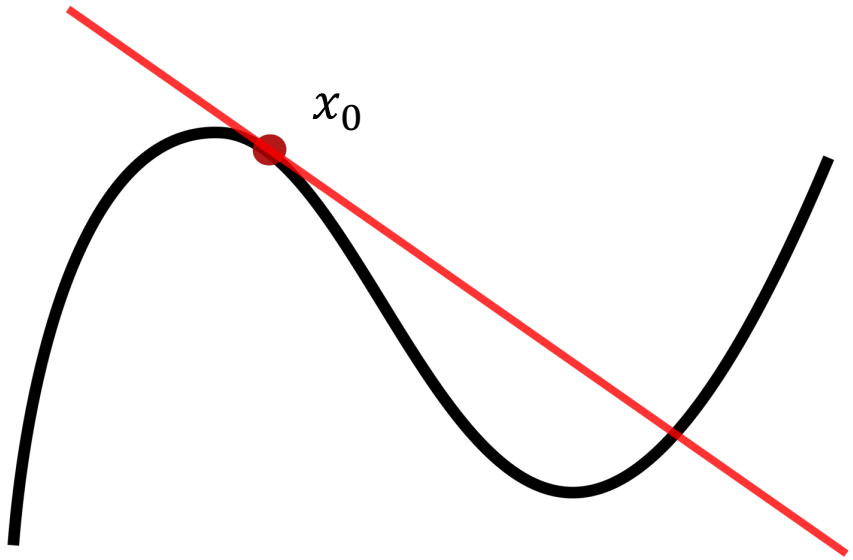
Среднеквадратичная ошибка

- MSE для линейной регрессии:

$$Q(w_1, \dots, w_d) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (w_1 x_1 + \cdots + w_d x_d - y_i)^2$$

Производная

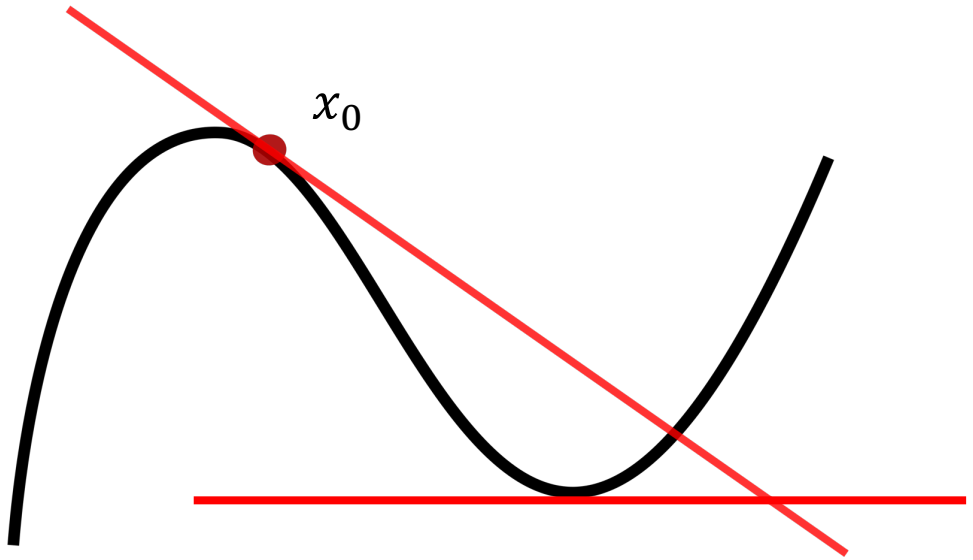
$$\lim_{x \to x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} = f'(x_0)$$



Производная

- Если точка x_0 — экстремум и в ней существует производная, то

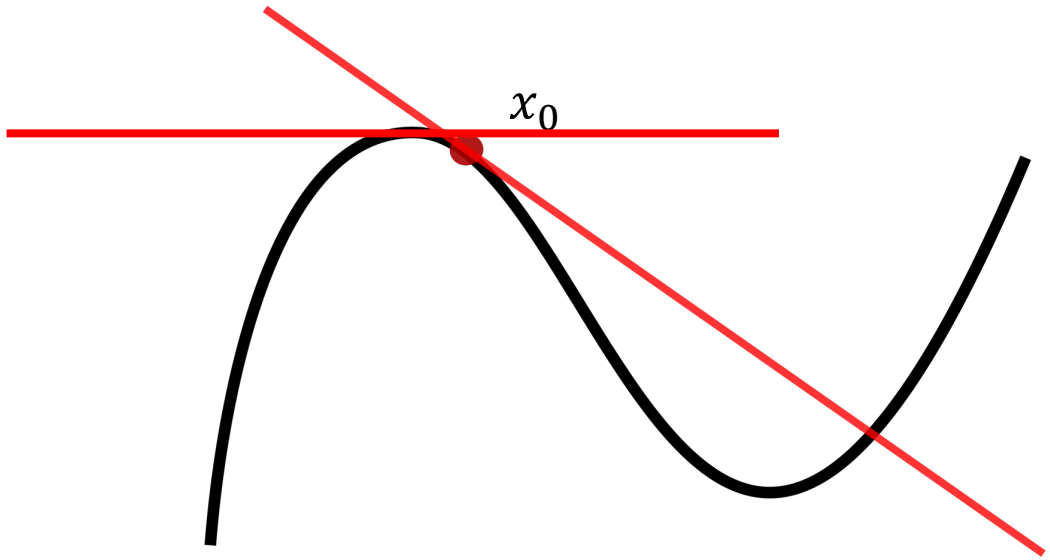
$$f'(x_0) = 0$$



Производная

- Если точка x_0 — экстремум и в ней существует производная, то

$$f'(x_0) = 0$$



Градиент

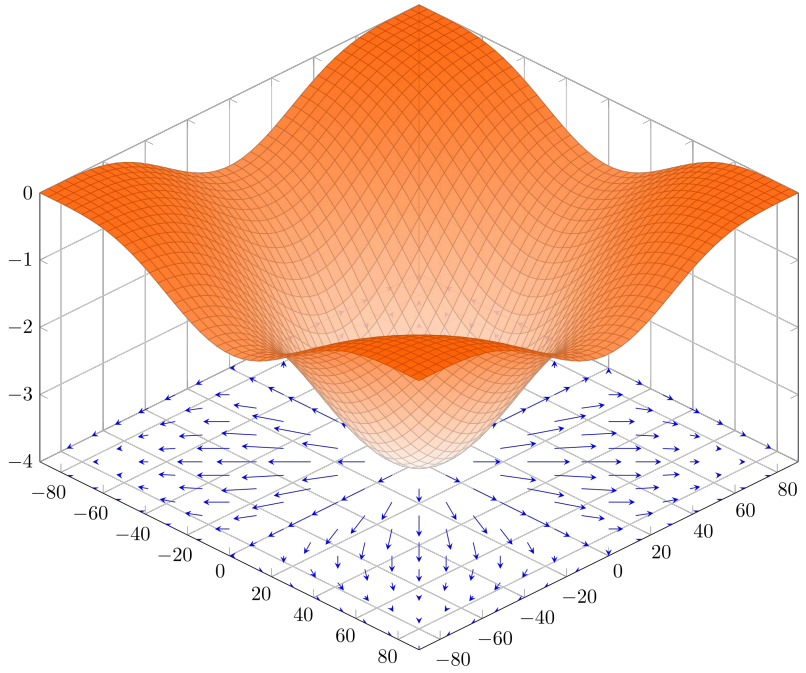
- Градиент — вектор частных производных

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_d}\right)$$

- У градиента есть важное свойство!

Важное свойство

- Зафиксируем точку x_0
- В какую сторону функция быстрее всего растёт?



Важное свойство

- Зафиксируем точку x_0
- В какую сторону функция быстрее всего растёт?
- В направлении градиента!
- Если градиент равен нулю, то это экстремум

Условие экстремума

- Если точка x_0 — экстремум и в ней существует производная, то

$$\nabla f(x_0) = 0$$

Условие экстремума

- Если точка x_0 — экстремум и в ней существует производная, то

$$\nabla f(x_0) = 0$$

- Если функция выпуклая, то экстремум один
- MSE для линейной регрессии — выпуклая!
  - (при некоторых условиях)

Обучение линейной регрессии

- Можно посчитать градиент MSE:

$$\nabla \frac{1}{\ell} \|Xw - y\|^2 = \frac{2}{\ell} X^T (Xw - y)$$

- Приравниваем нулю и решаем систему линейных уравнений:

$$w = (X^T X)^{-1} X^T y$$

Аналитическое решение

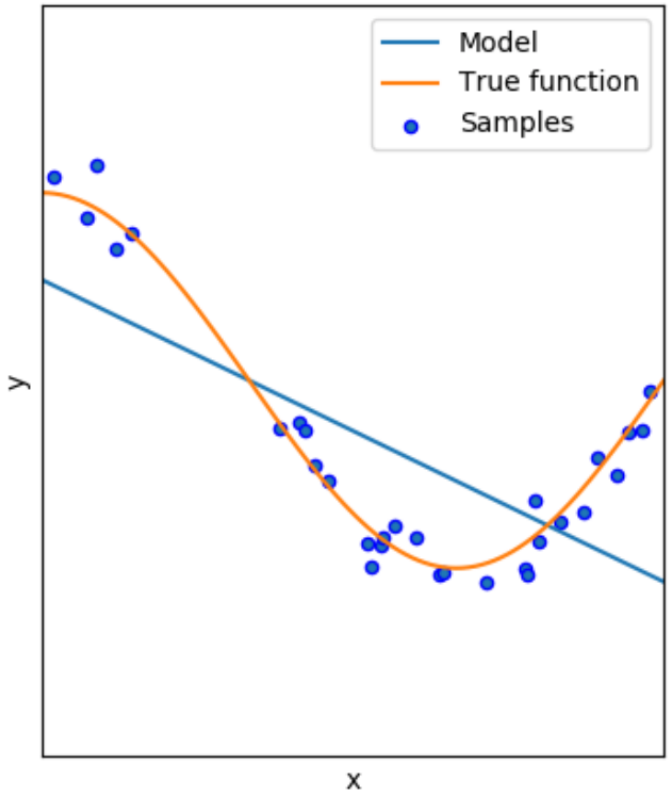
$$w = (X^T X)^{-1} X^T y$$

- Если матрица $X^T X$ вырожденная, то будут проблемы
- Даже если она почти вырожденная, всё равно будут проблемы
- Если признаков много, то придётся долго ждать

Переобучение и регуляризация линейных моделей

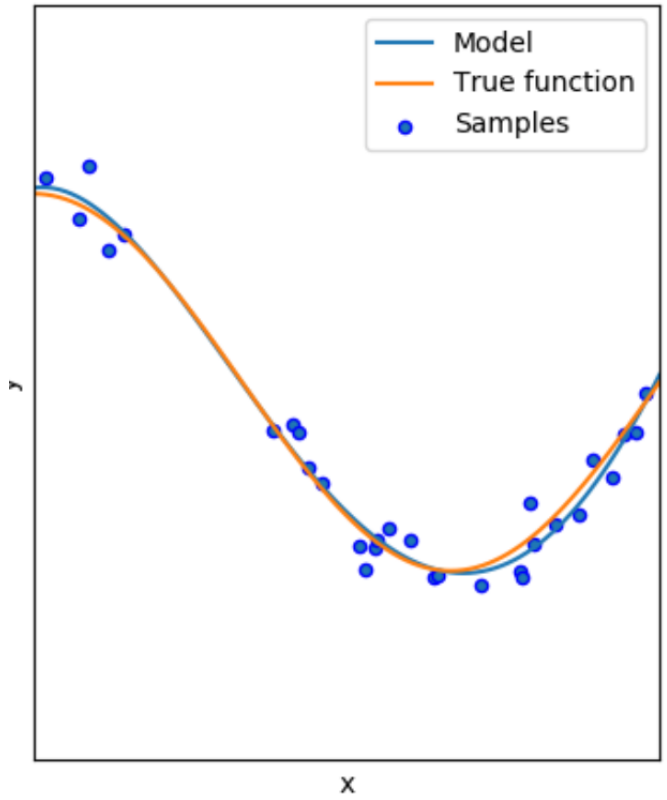
Нелинейная задача

$$a(x) = w_0 + w_1 x$$



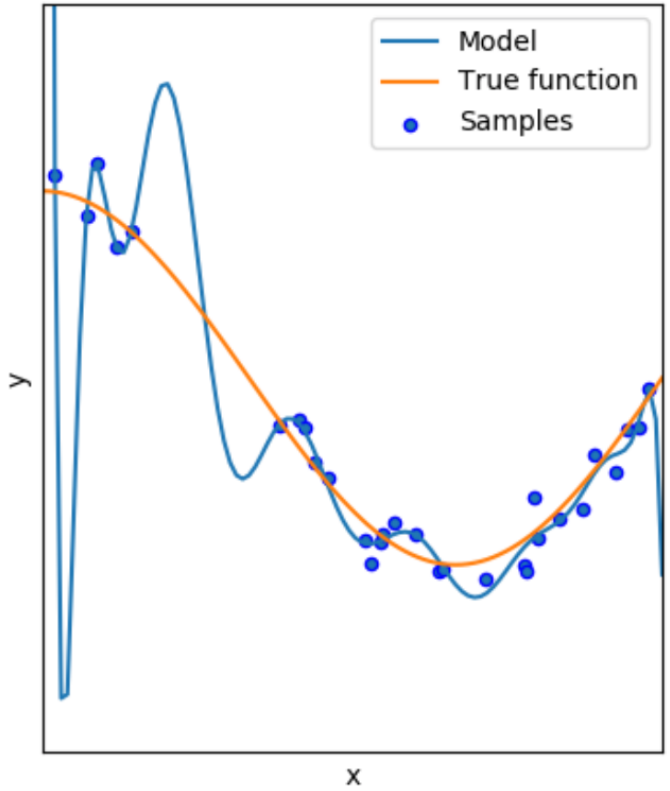
Нелинейная задача

$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4$$



Нелинейная задача

$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + \cdots + w_{15} x^{15}$$



Симптом переобучения

$$a(x) = 0.5 + 13458922x - 43983740x^2 + \cdots$$

- Большие коэффициенты — симптом переобучения
- Эмпирическое наблюдение

Симптом переобучения

- Большие коэффициенты в линейной модели — это плохо
- Пример: предсказание роста по весу

$$a(x) = 698x - 41714$$

- Изменение веса на 0.01 кг приведет к изменению роста на 7 см
- Не похоже не правильную зависимость

Регуляризация

- Будем штрафовать за большие веса!
- Пример функционала:

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\langle w, x_i \rangle - y_i)^2$$

- Регуляризатор:

$$\|w\|^2 = \sum_{j=1}^{d} w_j^2$$

Регуляризация

- Регуляризованный функционал

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}(\langle w, x_i\rangle - y_i)^2 + \lambda\|w\|^2 \to \min_w$$

- λ — коэффициент регуляризации

Регуляризация

- Регуляризованный функционал

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}(\langle w, x_i\rangle - y_i)^2 + \lambda\|w\|^2 \to \min_w$$

- Аналитическое решение:

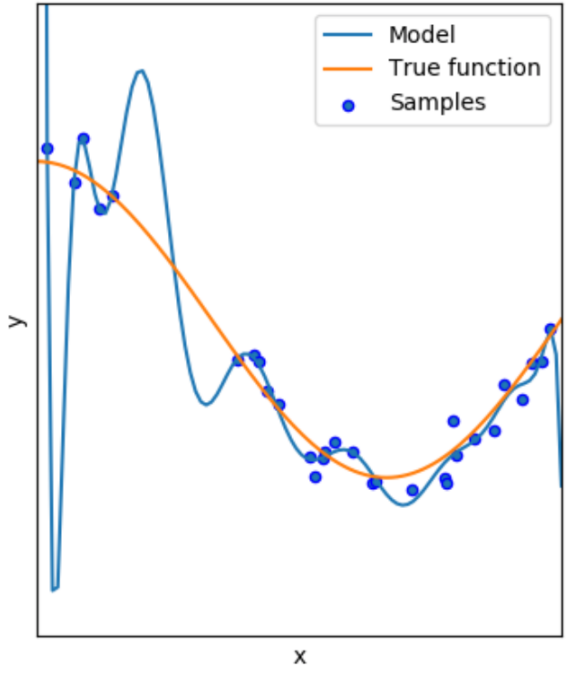
$$w = (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T y$$

- Гребневая регрессия (Ridge regression)

Эффект регуляризации

$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + \cdots + w_{15} x^{15}$$

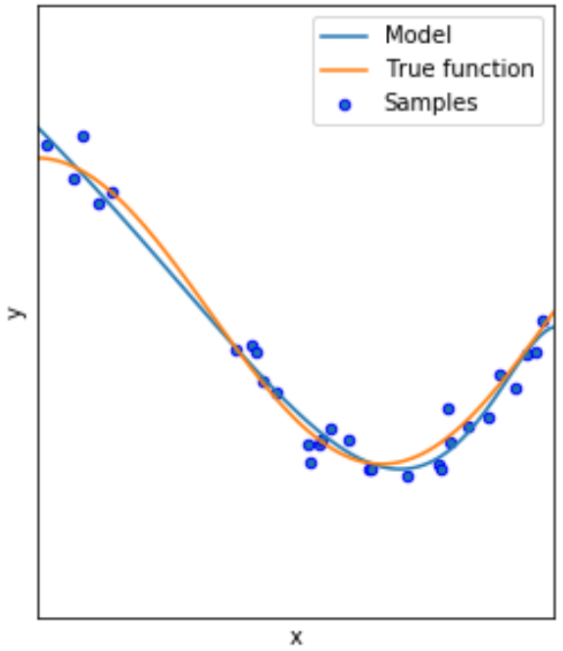
$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 \to \min_w$$



Эффект регуляризации

$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + \cdots + w_{15} x^{15}$$

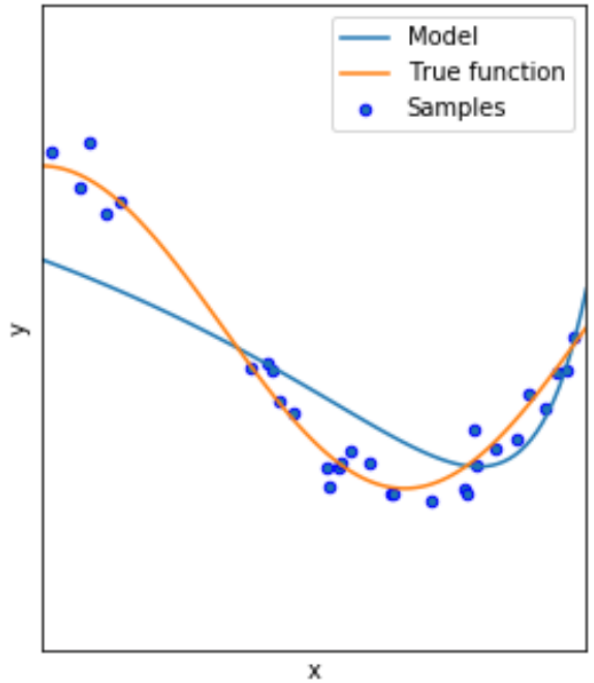
$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 + 0.01 \, \|w\|^2 \to \min_w$$



Эффект регуляризации

$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + \cdots + w_{15} x^{15}$$

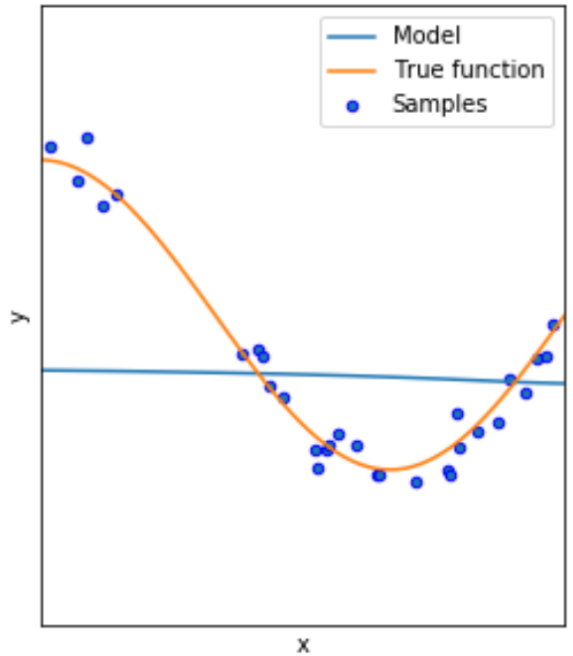
$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 + 1 \, \|w\|^2 \to \min_w$$



Эффект регуляризации

$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + \cdots + w_{15} x^{15}$$

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 + 100 \, \|w\|^2 \to \min_w$$



Лассо

- Регуляризованный функционал

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}(\langle w, x_i\rangle - y_i)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{d}|w_j| \to \min_w$$

- LASSO (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator)
- Некоторые веса зануляются
- Приводит к отбору признаков

Регуляризаторы

- $\|z\|_2 = \sqrt{\sum_{j=1}^{d} z_j^2}$ — L_2-норма
- $\|z\|_1 = \sum_{j=1}^{d} |z_j|$ — L_1-норма

Интерпретация линейных моделей

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = 100.000 * (\text{площадь})$$
$$+ 500.000 * (\text{число магазинов рядом})$$
$$+ 100 * (\text{средний доход жильцов дома})$$

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = 100.000 * (\text{площадь})$$
$$+ 500.000 * (\text{число магазинов рядом})$$
$$+ 100 * (\text{средний доход жильцов дома})$$

- Чем больше вес, тем важнее признак?

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = 100.000 * (\text{площадь в кв. м.})$$
$$+ 500.000 * (\text{число магазинов рядом})$$
$$+ 100 * (\text{средний доход жильцов дома})$$

- Чем больше вес, тем важнее признак?

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = 10 * (\text{площадь в кв. см.})$$
$$+ 500.000 * (\text{число магазинов рядом})$$
$$+ 100 * (\text{средний доход жильцов дома})$$

- Чем больше вес, тем важнее признак?

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = 100.000 * (\text{площадь в кв. м.})$$
$$+ 500.000 * (\text{число магазинов рядом})$$
$$+ 100 * (\text{средний доход жильцов дома})$$

- Чем больше вес, тем важнее признак?

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = 100.000 * (\text{площадь в кв. м.})$$
$$+ 500.000 * (\text{число магазинов рядом})$$
$$+ 100 * (\text{средний доход жильцов дома})$$

- Чем больше вес, тем важнее признак?
- Только если признаки масштабированы!

Масштабирование признаков

- Отмасштабируем j-й признак
- Вычисляем среднее и стандартное отклонение признака на обучающей выборке:

$$\mu_j = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell} x_i^j$$

$$\sigma_j = \sqrt{\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}\left(x_i^j - \mu_j\right)^2}$$

Масштабирование признаков

- Вычтем из каждого значения признака среднее и поделим на стандартное отклонение:

$$x_i^j := \frac{x_i^j - \mu_j}{\sigma_j}$$

Регуляризация

- Если модель переобучается, то веса используются для запоминания обучающей выборки
- Правильнее масштабировать признаки и регуляризовать модель перед изучением весов