ТЕХНОСФЕРА

Лекция 3
Линейная регрессия

Всеволод Викулин

Содержание

1. Знакомимся с параметрическими алгоритмами и линейной регрессией
2. Улучшаем алгоритм
3. Разбираем задачу рекомендаций (семинар)

Часть 1
Линейная регрессия

Напоминание

Решаем задачу обучения с учителем

Функционал качества

$$Q(a, X, Y) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} L(a, x_i, y_i), x_i \in X, y_i \in Y$$

Принцип минимизации эмпирического риска:

$$a^* = \underset{A}{\operatorname{argmin}}\, Q(a, X_{train}, Y_{train}), A$$ — семейство алгоритмов.

Формула обучения:

Learning = Representation + Evaluation + Optimization

Источник: homes.cs.washington.edu/~pedrod/papers/cacm12.pdf

Параметризация

Функций $a(x)$ которые идеально описывают обучающую выборку бесконечно много. Нужно сузить функциональное пространство перебора. **Параметризуем** искомую функцию модель $a(x, w)$ описывается вектором весов w.

Тогда задача превращается в поиск весов:

$$w^* = \underset{w}{\operatorname{argmin}}\, Q(w, X_{train}, y_{train})$$

Примеры:

$$a(x, w) = x_1 w_1 + x_2 w_2$$

$$a(x, w) = x_1 x_2 x_3 w_1$$

$$a(x, w) = 1[x_1 < w_1]$$

Representation

Пусть объект описывается D признаками $f_1, f_2, \ldots f_D$.
Тогда модель:

$a(x, w) = w_0 + \sum_{j=1}^{D} f_j w_j$ называется **линейной моделью**,

где w — D-мерный вектор признаков $w_1, w_2, \ldots w_D$

Далее будем считать, что в векторе признаков есть тождественно равный единице признак f_0, тогда формула упростится до:

Representation: $a(x, w) = \sum_{j=0}^{D} f_j w_j = \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{w}$

Параметры модели интерпретируемы. w_i — значение, на которое изменится предсказание, если признак f_i увеличить на единицу.

?

Какая гипотеза лежит в основе линейной модели?

Evaluation

Если целевая переменная вещественное число, то такую модель называют **линейной регрессией**.

$$Q(a, X, Y) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} L(a, x_i, y_i), x_i \in X, y_i \in Y$$

Функции потерь:

1. **Квадратичная**(Q — MSE)

$$L(a, x, y) = (a(x) - y)^2$$

2. **Абсолютная**(Q — MAE)

$$L(a, x, y) = |a(x) - y|$$

3. **Логарифмическая** (Q — MSLE)

$$L(a, x, y) = (\log(a(x) + 1) - \log(y + 1))^2$$

4. **Абсолютная-процентная** (Q —MAPE) $L(a, x, y) = \frac{|a(x) - y|}{y}$

Optimization

$$w^* = \underset{w}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} L(a(x_i, w), y_i) = \underset{w}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} L(\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w}, y_i), x_i \in X, y_i \in Y$$

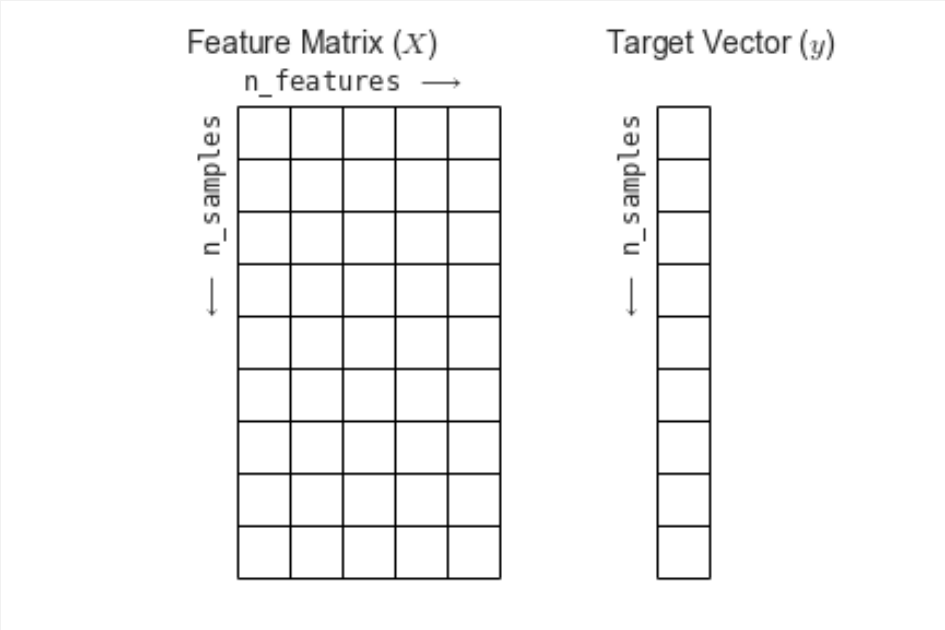
? Как найти минимум?

Optimization

$$Q(X, \boldsymbol{w}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(\boldsymbol{x_i}\cdot\boldsymbol{w} - y_i)^2 = \frac{1}{N}||X\cdot\boldsymbol{w} - \boldsymbol{y}||^2$$

X — матрица (N, D), w — вектор весов $(D,1)$, y — вектор ответов $(N,1)$

$X\cdot\boldsymbol{w}$ — вектор предсказаний $(N,1)$



Источник: jakevdp.github.io/PythonDataScienceHandbook

Точное решение

$\nabla_w Q(w)$ — градиент, вектор частных производных. Необходимое условие минимума — градиент равен нулю.

$$Q(w) = \frac{1}{N}||X \cdot w - y||^2 = \frac{1}{N}(X \cdot w - y)^T (X \cdot w - y)$$

Два правила векторного дифференцирования:

$$\nabla_w w^T c = \nabla_w c^T w = c; 2)\, \nabla_w (w^T C w) = (C + C^T) w$$

$$\nabla_w Q(w) = \nabla_w (w^T X^T X w - w^T X^T y - y^T X w + y^T y) =$$

$$(X^T X + X^T X) w - 2 X^T y = 0$$

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

Дома покажите, что это действительно минимум!

Точное решение

Недостатки точного решения:

- Можно написать только для очень редких функций потерь
- Обращение матрицы — кубическая сложность
- Матрица $X^T X$ может быть плохо обусловленной, если есть ЛЗ признаки

$$rank(X) = rank(X^T X)$$

Итеративные методы оптимизации

$$w^* = \underset{w}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} L(a(x_i, w), y_i)$$

- Нулевого порядка: жадные алгоритмы, динамическое программирование, золотое сечение, метод парабол, имитация отжига, генетические алгоритмы и т.д.
- Первого порядка: градиентный спуск, метод сопряженных градиентов, квазиньютоновские методы и т.д.
- Второго порядка: ньютоновские методы.

В курсе разбираем градиентный спуск.

Градиентный спуск

Антиградиент функции показывает направления наискорейшего убывания функции.

Ищем минимум $Q(w)$

1. Выбрать начальную длину шага α_0, начальное приближение $\boldsymbol{w_0}$
2. $\boldsymbol{w_{new}} = \boldsymbol{w_{old}} - \alpha \nabla_{\boldsymbol{w}} Q(\boldsymbol{w_{old}})$
3. $\alpha = f(k), k = k + 1$
4. Повторять (2), (3) до сходимости $Q(w)$ или w

$$f(k) = \alpha_0, f(k) = \frac{\alpha_0}{k}, f(k) = \frac{\alpha_0}{k^p}, \ldots$$

Можно качество на валидации использовать как критерий останова

Стохастическая оптимизация

В задачах машинного обучения, оптимизируемая функция имеет специальный вид:

$$Q(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} L(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{x_i}, y_i)$$

$$\nabla_w Q(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \nabla_{\boldsymbol{w}} L(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{x_i}, y_i)$$

Стохастическая оптимизация

1. Выбрать начальный шаг α_0, начальное приближение $\boldsymbol{w_0}$, размер батча n
2. Выбрать случайно $\{j_1, i_2, \ldots j_n\}$
3. Оценить градиент $\nabla_{\boldsymbol{w}} Q^*(w_{old}) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \nabla_{\boldsymbol{w}} L(\boldsymbol{w_{old}}, \boldsymbol{x_j}, y_j)$
4. $\boldsymbol{w_{new}} = \boldsymbol{w_{old}} - \alpha \nabla_{\boldsymbol{w}} Q^*(\boldsymbol{w_{old}})$
5. $\alpha = f(k), k = k + 1$
6. Повторять (2 - 5) до сходимости

Обычно перемешивают всю выборку случайно.

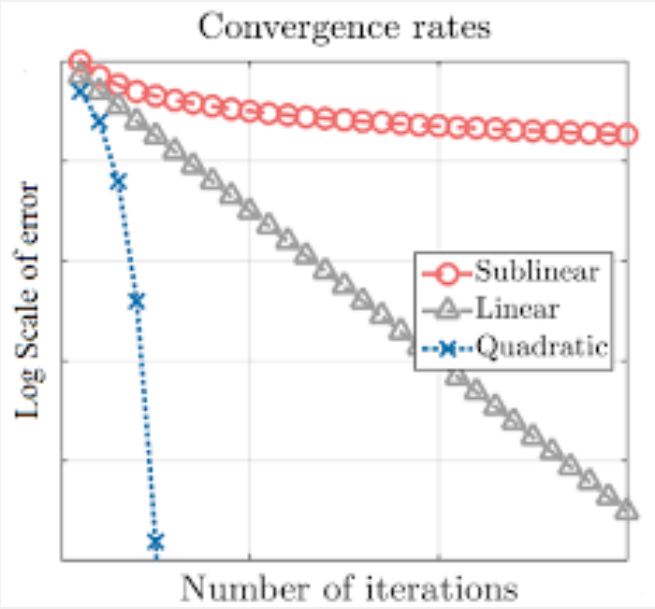
Когда прошли все выборку, то говорят, что прошла **одна эпоха**

- $n = N$ — градиентный спуск (Gradient Descent, GD)
- $n = 1$ — стохастический градиентный спуск (Stochastic Gradient Descent, SGD)
- $n > 1, n < N$ — мини-батч градиентный спуск (Mini-Batch Gradient Descent, MBGD)

Сходимость

Градиентный спуск имеет линейную скорость сходимости.

Стохастический градиентный спуск — сублинейную.



Источник: niaohe.ise.illinois.edu/IE598_2016/pdf/IE598-lecture8-gradient%20descent.pdf

Пример

$$Q(X, \boldsymbol{w}) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w} - y_i)^2$$

$$L(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{x_i}, y_i) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w} - y_i)^2$$

$$\nabla_{\boldsymbol{w}} L(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{x_i}, y_i) = (\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w} - y_i)\boldsymbol{x_i}$$

Делаем SGD:

$\boldsymbol{w_{new}} = \boldsymbol{w_{old}} - \alpha(\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w_{old}} - y_i)\boldsymbol{x_i}$, где i случайно от 1 до N

Сложность предсказания $O(D)$

Сложность обучения одного шага $O(D)$

Делаем GD:

$\boldsymbol{w_{new}} = \boldsymbol{w_{old}} - \alpha \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w_{old}} - y_i)\boldsymbol{x_i}$

Сложность предсказания $O(D)$

Сложность обучения одного шага $O(ND)$

Стохастическая оптимизация

Почему это вообще работает?

Для SGD

$$j \sim U(1,N), \nabla_{\boldsymbol{w}} Q^*(w_{old}) = \nabla_{\boldsymbol{w}} L(\boldsymbol{w_{old}}, \boldsymbol{x_j}, y_j)$$

$\nabla_{\boldsymbol{w}} L(\boldsymbol{w_{old}}, \boldsymbol{x_j}, y_j)$ равновероятно принимает N значений

Матожидание величины $\nabla_{\boldsymbol{w}} L(\boldsymbol{w_{old}}, \boldsymbol{x_j}, y_j)$ по определению мат. ожидания

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \nabla_{\boldsymbol{w}} L(\boldsymbol{w_{old}}, \boldsymbol{x_j}, y_j)$$

То есть в среднем мы как раз идем в сторону антиградиента!

Резюме

Линейная регрессия невероятно популярный алгоритм машинного обучения. Плюсы алгоритма:

- Быстро учится
- Быстро предсказывает
- Легко интерпретируется
- Легко хранить в памяти
- Легко применять с дифференцируемой функцией потерь

Весомый минус - не способен учитывать нелинейные зависимости в данных.

Часть 2
Улучшаем модель

Правильные признаки

$$a(x, w) = \sum_{j=0}^{D} f_j w_j = \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{w}$$

Параметры модели интерпретируемы. w_i — значение, на которое изменится предсказание, если признак f_i увеличить на единицу.

Категориальные признаки кодируем:

- One-hot кодирование - категориальный признак с k значениями превращаем в k бинарных признаков!
- Кодирование через целевую переменную (нельзя включать переменную самого объекта)
- Кодирование через вещественные признаки

Правильные признаки

$$a(x, w) = \sum_{j=0}^{D} f_j w_j = \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{w}$$

Для вещественных признаков применяем нелинейные функции - возводим в степень, берем синус и т.д

Учитываем взаимодействия:

- Пару вещественных перемножаем, делим и т.д.
- Для пары бинарных используем логические операции

Невозможно сделать правильное признаковое пространство без понимания самой задачи!

Нормализация данных

Масштаб признаков важен для скорости сходимости

$$f(x, y, z) = (x - 1)^2 + (y - 1)^2 + (z - 1)^2$$

Стартуем из $(0,0,0)$ с шагом 0.5

$$(x, y, z) = (0,0,0) - 0.5(-2, -2, -2) = (1,1,1)$$

А если так:

$$f(x, y, z) = 1000(x - 1)^2 + 200(y - 1)^2 + (z - 1)^2$$

- Стандартизация $f_j = \frac{f_j - mean(f_j)}{std(f_j)}$
- Min-max нормализация $f_j = \frac{f_j - min(f_j)}{max(f_j) - min(f_j)}$

Регуляризация

Хотим еще сузить функциональное пространство $a(x)$, чтобы улучшить обобщающую способность. Наложим доп. штраф, если решение удаляется от нашего представления о правильном решении.

$$Q_r(w) = Q(w) + \alpha R(w)$$

$R(w)$ - регуляризатор, α - параметр регуляризации.

? Как подобрать параметр α?

Регуляризация

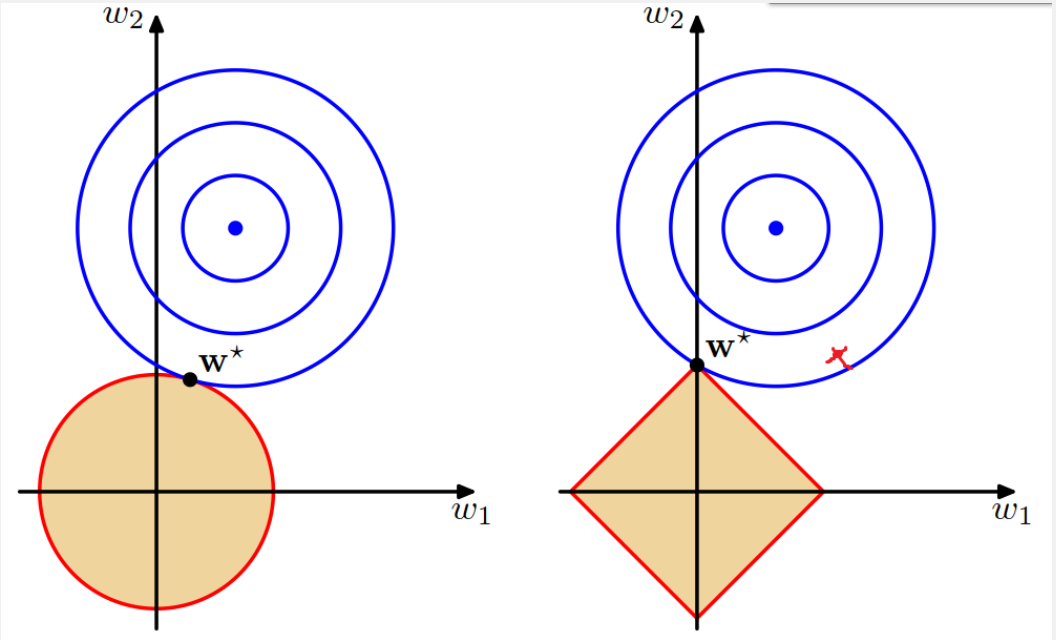
Базовые регуляризаторы, штрафующие большие значения весов:

- L_1 регуляризация (Lasso регрессия).
  $R(\boldsymbol{w}) = \sum_{j=1}^{D} |w_j|$; С ней Q_r не будет гладким!
- L_2 регуляризация (Ridge регрессия).
  $R(\boldsymbol{w}) = \sum_{j=1}^{D} w_j^2$.

Дома вывести формулу точного решения и обновления весов для L_2 регуляризации

Lasso

Можно показать, что L_1 приводит к занулению весов, то есть автоматически отбирает важные признаки!



Источник: Bishop

Big data и линейная регрессия

Стохастическая оптимизация позволяет не хранить данные в оперативной памяти! Взяли батч, обновили веса и сразу же его забыли. Позволяет легко обучаться на терабайтах данных. Рекомендую ознакомиться с библиотекой

Vowpal Wabbit

Online learning — обучение, когда прецеденты поступают потоком.

Разреженные данные

$$Q(X, \boldsymbol{w}) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w} - y_i)^2$$

$$L(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{x_i}, y_i) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w} - y_i)^2$$

$$\nabla_{\boldsymbol{w}} L(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{x_i}, y_i) = (\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w} - y_i)\boldsymbol{x_i}$$

Чему равен градиент по j компоненте $\nabla_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w} - y_i)^2$ в точках $x_{i,j} = 0$?

Разреженный формат данных - для каждого объекта храним словарь вида

{номер ненулевого признака : значение}

Приведите пример задачи с разреженными данными

Разреженные данные

Самый частый пример разреженных данных — тексты. Объект — текст, признак — наличие слова в тексте.

Делаем one hot кодирование, получаем пространство размера словарь слов.

Вместо бинарных признаков часто делают TF-IDF преобразование

TF(t) = (сколько раз t встречался в тексте) / (длина текста).

IDF(t) =log_e(число текстов/ число текстов с t).

ТЕХНОСФЕРА

Спасибо за внимание!