Model Linear

Ali Akbar Septiandri

Universitas Al-Azhar Indonesia

aliakbars@live.com

April 24, 2017

Selayang Pandang

Bahan Bacaan

1. Witten, I. H., Frank, E., Hall, M. A., & Pal, C. J. (2016). Data Mining: Practical machine learning tools and techniques. Morgan Kaufmann. (Section 4.6 Linear Models)
2. 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
3. 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)

Regresi Linear

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

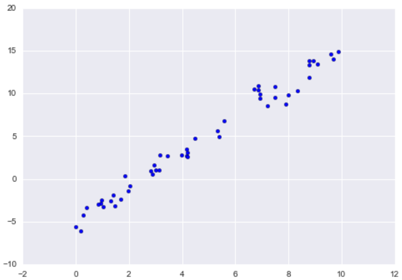
$$y = w_0 + w_1 x_1$$

dengan w adalah bobot atau koefisien.

Simple Linear Regression

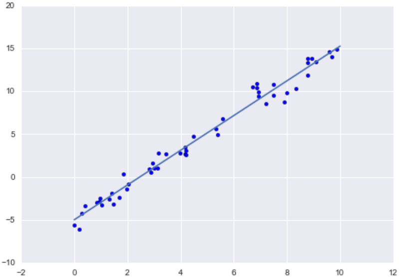
Example

```
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
```

Multidimensional Linear Regression

Model

$$y = w_0 x_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_D x_D = \sum_{i=0}^{D} w_i x_i$$

dengan $x_0 = 1$

Notasi matriks-vektor

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

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

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

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

Loss Function

- ϕ bukan matriks bujur sangkar dan datanya mengandung *noise*
- Harus menggunakan *loss function* $O(\mathbf{w})$ yang dapat diminimalkan
- Pilihan umum: *squared error*

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

Solusi

- Jawaban: Minimalkan $O(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)^2$ 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*

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.]])
```

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

Ridge Regression

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

$$P = \alpha \sum_{j=1}^{p} w_j^2$$

Loss Function pada Ridge Regression

- *Loss function* yang harus diminimalkan menjadi

$$O(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \sum_{j=1}^{p} w_j x_{ij})^2 - \alpha \sum_{j=1}^{p} w_j^2$$

Loss Function pada Ridge Regression

- *Loss function* yang harus diminimalkan menjadi

$$O(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \sum_{j=1}^{p} w_j x_{ij})^2 - \alpha \sum_{j=1}^{p} w_j^2$$

- Parameter α (terkadang juga ditulis sebagai λ) bernilai bebas (ditentukan oleh pengguna)

Loss Function pada Ridge Regression

- *Loss function* yang harus diminimalkan menjadi

$$O(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \sum_{j=1}^{p} w_j x_{ij})^2 - \alpha \sum_{j=1}^{p} w_j^2$$

- 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

Regresi Logistik

Mengubah Keluaran

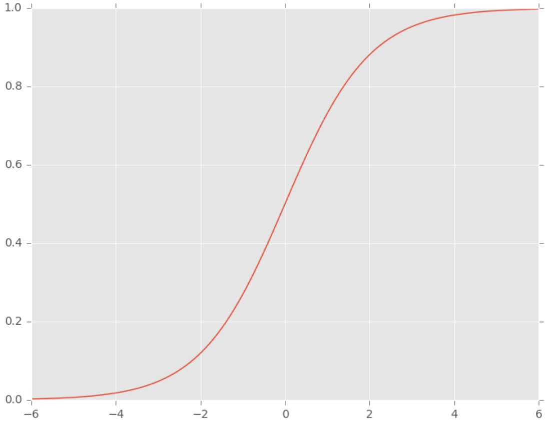
- Berdasarkan keluaran regresi linear, kita bisa memaksanya menjadi [0, 1]
- Gunakan fungsi sigmoid:

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

- 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 $\mathbf{w}$

Likelihood (non-examinable)

- 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*

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 $\sum_{j=1}^{C} p(y = j|\mathbf{x}) = 1$

Optimasi

Mengapa dinamakan *machine learning*?

Alasan Melakukan Optimasi

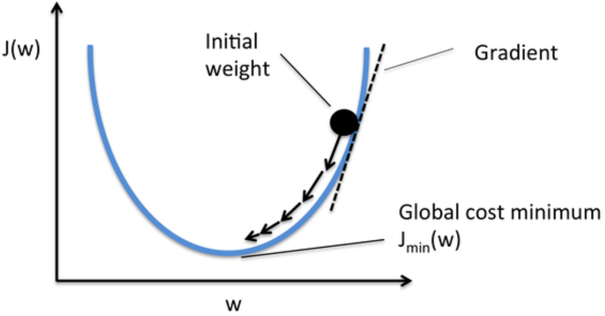
- Belajar $\rightarrow$ masalah optimasi kontinu
- Contoh: regresi linear, regresi logistik, jaringan saraf tiruan, SVM
- Salah satu caranya adalah dengan *maximum likelihood*

“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 J(w) [Raschka, 2015]

Gradient Descent

begin

  Inisialisasi $\mathbf{w}$

  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 $\mathbf{w}$

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 $\mathbf{w}$ (*batch*)
- Bagaimana untuk 10 juta data?
- Ternyata, kita bisa memperbarui nilai $\mathbf{w}$ 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
- **Online** dapat melompati optimum lokal

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

Referensi

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

Sebastian Raschka (2015)
Single-Layer Neural Networks and Gradient Descent
http://sebastianraschka.com/Articles/2015_singlelayer_neurons.html

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

Terima kasih