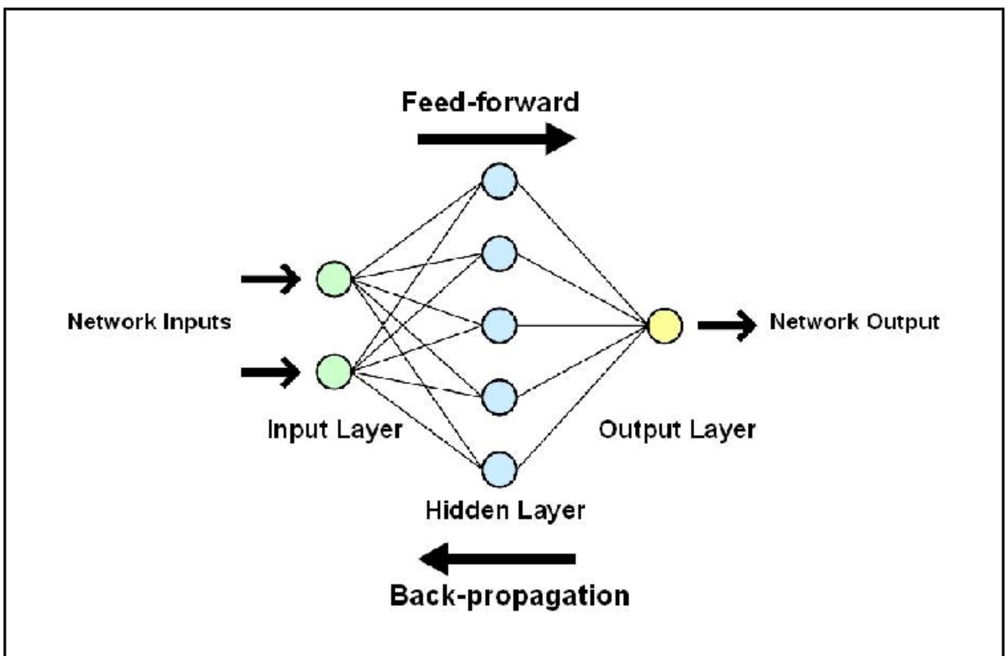
Факультет
математики
и компьютерных
наук
СПбГУ

Машинное обучение

Семинар 2. Матрично-векторное дифференцирование, линейная регрессия

9 сентября 2021

- на лекции мы осознаем важность градиентного спуска
- ещё умение считать производные (градиенты) пригодится для понимания и написания нейронных сетей (обратное распространение ошибки)



Определения

- При отображении вектора в число $f(x)$: $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

  $\nabla_x f(x) =

  ```
  \bigg[
      \frac{\partial f}{\partial x_1},
      \dots,
      \frac{\partial f}{\partial x_n}
  \bigg]^T
  ```

  $
- При отображении матрицы в число $f(A)$: $\mathbb{R}^{n \times m} \to \mathbb{R}$

$$\nabla_A f(A) = \left(\frac{\partial f}{\partial a_{ij}} \right)_{i,j=1}^{n,m}$$

Задача 1

Пусть $a \in \mathbb{R}^n$ — вектор параметров, а $x \in \mathbb{R}^n$ — вектор переменных. Найдите производную их скалярного произведения по вектору переменных $\nabla_x a^T x$.

Решение

$\frac{\partial}{\partial x_i} a^T x = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum\limits_j a_j x_j = a_i$, поэтому $\nabla_x a^T x = a$

Заметим, что $a^T x$ — это число, поэтому $a^T x = x^T a$, следовательно, $\nabla_x x^T a = a$

Задача 2

Пусть теперь $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Необходимо найти $\nabla_x x^T A x$.

Решение

$$\frac{\partial}{\partial x_i} x^T A x = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_j x_j (Ax)_j = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_j x_j \left(\sum_k a_{jk} x_k \right) =$$

$$= \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{j,k} a_{jk} x_j x_k =$$

$$= \sum_{j \neq i} a_{ji} x_j + \sum_{k \neq i} a_{ik} x_k + 2a_{ii} x_i = \sum_j a_{ji} x_j + \sum_k a_{ik} x_k = \sum_j (a_{ji} + a_{ij}) x_j$$

Поэтому $\nabla_x x^T A x = (A + A^T) x$

Задача 3

Пусть $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Необходимо найти $\nabla_A \det A$.

Решение

Воспользуемся следствием теоремы Лапласа о разложении определителя по строке:

$\frac{\partial}{\partial a_{ij}} \det A = \frac{\partial}{\partial a_{ij}} \left[\sum_k (-1)^{i+k} a_{ik} M_{ik} \right] = (-1)^{i+j} M_{ij},$ где M_{ik} — дополнительный минор матрицы A.

Также вспомним формулу для элементов обратной матрицы $(A^{-1})_{ij} = \frac{1}{\det A}(-1)^{i+j} M_{ji}$.

Подставляя выражение для дополнительного минора, получаем ответ $\nabla_A \det A = (\det A) A^{-T}$.

Задача 4

Пусть $A \in \mathbb{R}^{n \times n},\ B \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Необходимо найти $\nabla_A \mathrm{tr}(AB)$.

Решение

$\frac{\partial}{\partial a_{ij}} \mathrm{tr}(AB) = \frac{\partial}{\partial a_{ij}} \sum_k (AB)_{kk} = \frac{\partial}{\partial a_{ij}} \sum_{k,l} a_{kl} b_{lk} = b_{ji}.$

То есть $\nabla_A \mathrm{tr}(AB) = B^T$.

Задача 5

Пусть $x \in \mathbb{R}^n,\ A \in \mathbb{R}^{n \times m},\ y \in \mathbb{R}^m.$ Необходимо найти $\nabla_A x^T A y$.

Решение

Воспользовавшись выполняющимся для скаляра равенством $a = tr(a)$, циклическим свойством следа матрицы (для матриц подходящего размера):

$\mathrm{tr}(ABC) = \mathrm{tr}(BCA) = \mathrm{tr}(CAB)$

и результатом предыдущей задачи, получаем

$\nabla_A x^T A y = \nabla_A \mathrm{tr}(x^T A y) = \nabla_A \mathrm{tr}(A y x^T) = x y^T$

Наконец, научимся считать градиенты для сложных функций.

Допустим, даны функции $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ и $g : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$. Тогда градиент их композиции можно вычислить как

$$\nabla_x g\left(f(x)\right) = J_f^T(x) \nabla_z g(z)|_{z=f(x)},$$

где $J_f(x) = \left(\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j}\right)_{i,j=1}^{m,n}$ — матрица Якоби для функции f.

Если $m = 1$ и функция $g(z)$ имеет всего один аргумент, то формула упрощается:
$\nabla_x g\left(f(x)\right) = g'(f(x)) \nabla_x f(x)$.

Задача 6

Вычислите градиент логистической функции потерь для линейной модели по параметрам этой модели:
$\nabla_w \log(1 + \exp(-y\langle w, x\rangle))$

Решение

$ \nabla_w \log \left(1 + \exp(-y \langle w, x \rangle) \right)

```
= \\
=
\frac{
    1
}{
    1
    +
    \exp(-y \langle w, x \rangle)
}
\nabla_w \left(
    1
    +
    \exp(-y \langle w, x \rangle)
\right)
=\\
=
\frac{
    1
}{
    1
    +
    \exp(-y \langle w, x \rangle)
}
\exp(-y \langle w, x \rangle)
\nabla_w \left(
    -y \langle w, x \rangle
\right)
=\\
=
-
\frac{
    1
}{
    1
    +
    \exp(-y \langle w, x \rangle)
}
\exp(-y \langle w, x \rangle)
y
x
```

Многомерная линейная регрессия

Задача найти $\hat{w} = \arg\min_{w \in R^n} \frac{1}{l}\sum\limits_{i=1}^{l}(w^T x_i - y_i)^2$

Для решения два подхода:

1. Численно (градиентный спуск)
2. Аналитически

Перепишем минимизируемую функцию в матричном виде:

$$\sum_{i=1}^{l}(w^T x_i - y_i)^2 = (Xw - y)^T(Xw - y) =$$

$$w^T X^T Xw - y^T Xw - w^T X^T y + y^T y = w^T X^T Xw - 2y^T Xw + y^2$$

$(y^T Xw = w^T X^T y)$, т.к. транспонированный скаляр равен себе

Замечание (что нам нужно знать про градиент):

$\frac{\partial}{\partial w} w^T a = a$ (проверятеся покоординатно)

$\frac{\partial}{\partial w} a^T w = a$ (проверятеся покоординатно)

$\frac{\partial}{\partial w} w^T w = 2$ (проверяется покоординатно)

$\frac{\partial}{\partial w} f(\vec{g}(w)) = \frac{\partial(\vec{g})}{\partial(w)}(\frac{\partial}{\partial w} f)(\vec{g}(w))$, где $\frac{\partial(\vec{g})}{\partial(w)} g(w)$ — матрица производных $\vec{g}(w)$,

т.е. $\begin{pmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial w_1}(w) & \frac{\partial g_1}{\partial w_2}(w) & \cdots & \frac{\partial g_1}{\partial w_n}(w) \\ \frac{\partial g_2}{\partial w_1}(w) & \frac{\partial g_2}{\partial w_2}(w) & \cdots & \frac{\partial g_2}{\partial w_n}(w) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial g_n}{\partial w_1}(w) & \frac{\partial g_n}{\partial w_2}(w) & \cdots & \frac{\partial g_n}{\partial w_n}(w) \end{pmatrix}$ (проверяется покоординатно)

Посчитаем градиент:

$\frac{\partial}{\partial w} w^T X^T Xw - 2y^T Xw + y^2 = \frac{\partial}{\partial w}(Xw)^T Xw - \frac{\partial}{\partial w} 2y^T Xw = 2X^T Xw - 2X^T y$ (см. задачи 2 и 1)

Условие минимумма:

$$(2X^T Xw - 2X^T y) = 0,$$

значит:

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

Замечание.

Найденная точка — минимум, если матрица $X^T X$ обратима. Из курса математического анализа известно, что если матрица Гессе функции положительно определёна в точке, градиент которой равен нулю, то эта точка является локальным минимумом.

$$\nabla^2 Q(w) = 2X^T X.$$

Необходимо понять, является ли матрица $X^T X$ положительно определённой. Запишем определение положительной определённости матрицы $X^T X$:

$$z^T X^T Xz > 0,\ \forall z \in \mathbb{R}^d, z \neq 0.$$

Видим, что тут записан квадрат нормы вектора Xz, то есть это выражение будет не меньше нуля. В случае, если матрица X имеет «книжную» ориентацию (строк не меньше, чем столбцов) и имеет полный ранг (нет линейно зависимых столбцов), то вектор Xz не может быть нулевым, а значит выполняется

$$z^T X^T Xz = ||Xz||^2 > 0,\ \forall z \in \mathbb{R}^d, z \neq 0.$$

То есть $X^T X$ является положительно определённой матрицей. Также, по критерию Сильвестра, все главные миноры (в том числе и определитель) положительно определённой матрицы положительны, а, следовательно, матрица $X^T X$ обратима, и решение существует. Если же строк оказывается меньше, чем столбцов, или X не является полноранговой, то $X^T X$ необратима и решение w определено неоднозначно.

А если есть байес?

Задача: найти $\hat{w} = \arg\min\limits_{w \in R^n} \frac{1}{l} \sum\limits_{i=1}^{l} (w^T x_i + w_0 - y_i)^2$

А гребневая регрессия (ridge regression)?

Задача: найти $\hat{w} = \arg\min\limits_{w \in R^n} \frac{1}{l} \sum\limits_{i=1}^{l} (w^T x_i + w_0 - y_i)^2 + \alpha(w^T w + w_0^2)$

Задача 7

Посчитайте градиенты

$\frac{\partial}{\partial w}(Xw - y)^T(Xw - y) + \gamma w^T 1$

$\frac{\partial}{\partial w}||(Xw - y)||_1 + \gamma(w^T w)^4$

Решение

$2X^T Xw + \gamma 1,$

Градиент $||x||_1 = sgn(x)$ (покоординатно), градиент $w^T w = 2w$, сложная функция: $Xsgn(Xw - y) + 4(w^T w)2w$

In [5]:
```
from sklearn.linear_model import LinearRegression
```

https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.linear_model.LinearRegression.html (https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.linear_model.LinearRegression.html)

Сгенерируем данные:

In [6]:
```
import numpy as np
np.random.seed(0)
l = 40

x = np.linspace(0, 30, num=l)
Y = x + 4*np.sin(x) + 3*np.random.randn(l)

X = np.vstack([np.ones_like(x), x, np.sin(x)]).T
```

In [7]:
```
X[:5]
```

Out[7]:
```
array([[1.        , 0.        , 0.        ],
       [1.        , 0.76923077, 0.69558279],
       [1.        , 1.53846154, 0.99947728],
       [1.        , 2.30769231, 0.740558  ],
       [1.        , 3.07692308, 0.06462451]])
```

In [8]:
```
Y[:5]
```

Out[8]:
```
array([ 5.29215704,  4.75203357,  8.4725846 , 11.99260391,  8.93809509])
```

Создадим линейный регрессор (без регуляризации)

In [9]:
```
reg = LinearRegression(fit_intercept=False)
```

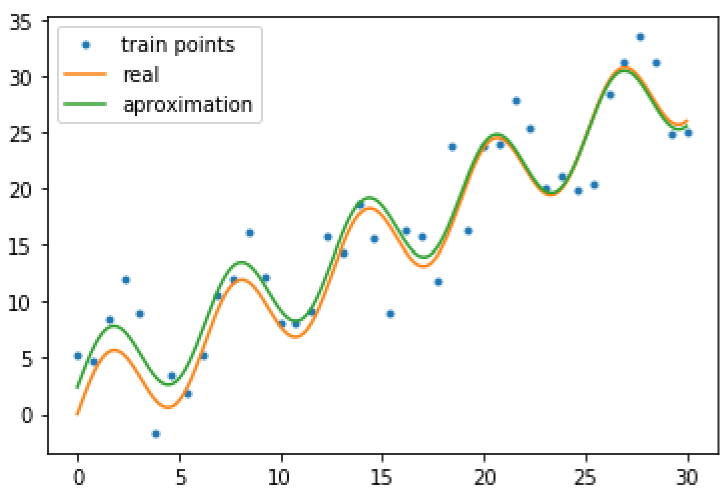
Обучим его на тестовой выборке

In [10]:
```
reg.fit(X, Y)
```

Out[10]:
```
LinearRegression(copy_X=True, fit_intercept=False, n_jobs=None, normalize=Fal
se)
```

Отобразим результаты.

In [11]:
```
import matplotlib.pyplot as plt

plt.plot(x, Y, '.', label='train points')

x_plot = np.linspace(0, 30, num=10000)
plt.plot(x_plot, 4*np.sin(x_plot) + x_plot, label='real')

X_plot = np.vstack([np.ones_like(x_plot), x_plot, np.sin(x_plot)]).T
plt.plot(x_plot, reg.predict(X_plot), label='aproximation')

plt.legend(loc='best')
plt.show()
```

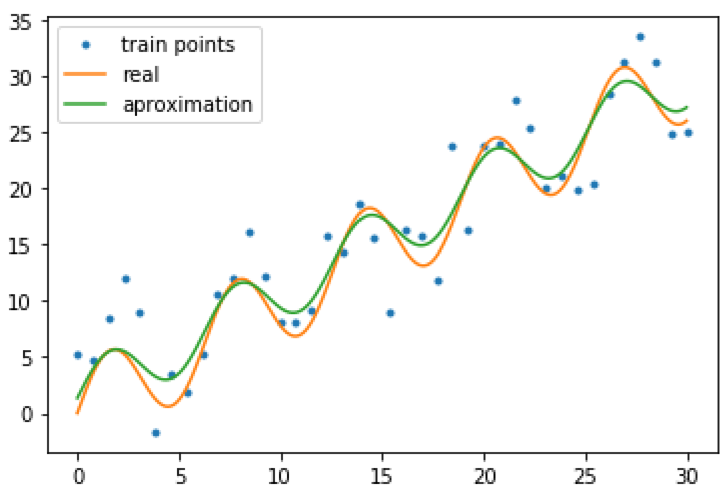


In [12]:
```
X_plot
```

Out[12]:
```
array([[ 1.00000000e+00,  0.00000000e+00,  0.00000000e+00],
       [ 1.00000000e+00,  3.00030003e-03,  3.00029553e-03],
       [ 1.00000000e+00,  6.00060006e-03,  6.00056405e-03],
       ...,
       [ 1.00000000e+00,  2.99939994e+01, -9.88939432e-01],
       [ 1.00000000e+00,  2.99969997e+01, -9.88489977e-01],
       [ 1.00000000e+00,  3.00000000e+01, -9.88031624e-01]])
```

In [13]:
```
reg.coef_
```
Out[13]:
```
array([2.40304643, 0.90236995, 3.92967158])
```

Если нужна регуляризация, в sklearn еть регрессоры Ridge (L_2) и Lasso (L_1) (и многое другое: https://scikit-learn.org/stable/modules/classes.html#module-sklearn.linear_model (https://scikit-learn.org/stable/modules/classes.html#module-sklearn.linear_model))

In [14]:
```
from sklearn.linear_model import Ridge, Lasso
```
In [15]:
```
reg = Ridge(alpha=10.0,fit_intercept=False)
```
In [16]:
```
reg.fit(X, Y)
plt.plot(x, Y, '.', label='train points')

x_plot = np.linspace(0, 30, num=10000)
plt.plot(x_plot, 4*np.sin(x_plot) + x_plot, label='real')

X_plot = np.vstack([np.ones_like(x_plot), x_plot, np.sin(x_plot)]).T
plt.plot(x_plot, reg.predict(X_plot), label='aproximation')

plt.legend(loc='best')
plt.show()
```


In [17]:
```
reg.coef_
```
Out[17]:
```
array([1.34716055, 0.95145871, 2.67776413])
```

Задача 8

Убедитесь, что аналитическое решение Ridge регрессии совпадает с решением, полученным sklearn.

Решение

In [18]:
```
w = np.dot(np.dot(np.linalg.inv(np.dot(X.T, X) + np.eye(X.shape[1]) * 10), X.T
), Y)
```

In [19]:
```
w
```

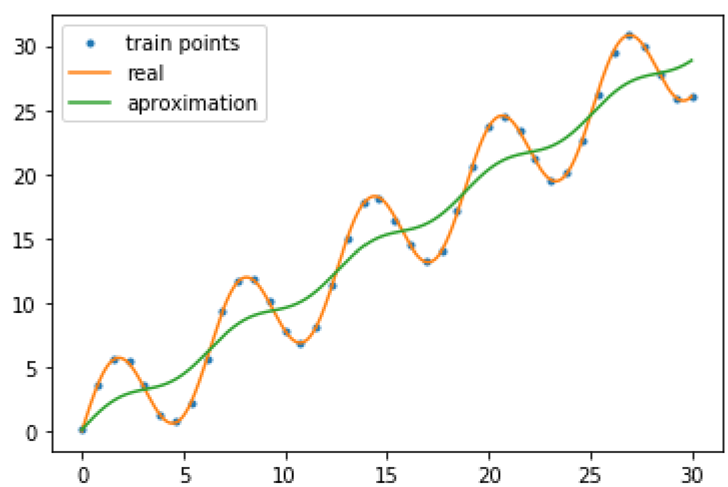
Out[19]:
```
array([1.34716055, 0.95145871, 2.67776413])
```

Зачем нужно Lasso?

In [20]:
```
np.random.seed(0)
l = 40

x = np.linspace(0, 30, num=l)
Y = x + 4*np.sin(x) + 0.1*np.random.randn(l)

X = np.vstack([np.ones_like(x), x, np.sin(x)]).T
```

Добавим признаков!

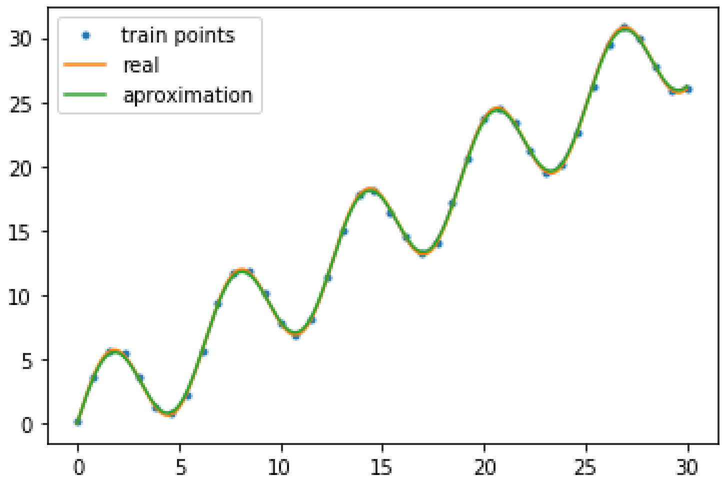
In [21]:
```
reg = Ridge(alpha=100.0, fit_intercept=False)
X = np.vstack([np.ones_like(x), x, np.sin(x), np.cos(x), np.tanh(x)]).T
reg.fit(X, Y)
plt.plot(x, Y, '.', label='train points')

x_plot = np.linspace(0, 30, num=10000)
plt.plot(x_plot, 4*np.sin(x_plot) + x_plot, label='real')

X_plot = np.vstack([np.ones_like(x_plot), x_plot, np.sin(x_plot), np.cos(x_plo
t), np.tanh(x_plot)]).T
plt.plot(x_plot, reg.predict(X_plot), label='aproximation')

plt.legend(loc='best')
plt.show()
```



```
In [22]: reg.coef_
```

```
Out[22]: array([0.09388389, 0.97798728, 0.66450105, 0.0022208 , 0.0818083 ])
```

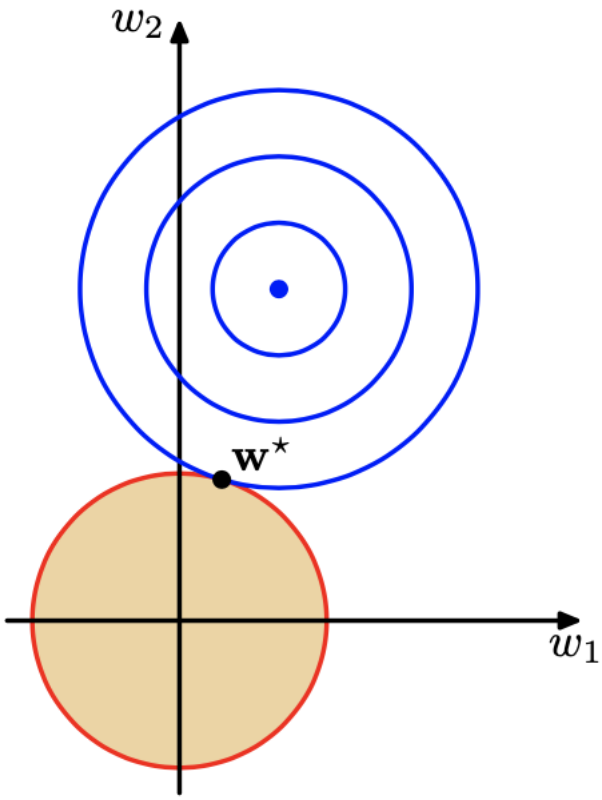
```
In [23]: reg = Lasso(alpha=0.1, fit_intercept=False)
         X = np.vstack([np.ones_like(x), x, np.sin(x), np.cos(x), np.tanh(x)]).T
         reg.fit(X, Y)
         plt.plot(x, Y, '.', label='train points')

         x_plot = np.linspace(0, 30, num=10000)
         plt.plot(x_plot, 4*np.sin(x_plot) + x_plot, label='real')

         X_plot = np.vstack([np.ones_like(x_plot), x_plot, np.sin(x_plot), np.cos(x_plo
         t), np.tanh(x_plot)]).T
         plt.plot(x_plot, reg.predict(X_plot), label='aproximation')

         plt.legend(loc='best')
         plt.show()
```




```
In [24]: reg.coef_
```

```
Out[24]: array([ 0.        ,  1.00002238,  3.80409368, -0.        ,  0.        ])
```

Lasso регрессия позволяет избавиться от "лишних" признаков:



К сожалению, аналитически решить Лассо регрессию не получится. Значит решаем градиентным спуском (точнее субградиентным, т.к. она местами не диффириенцируема).

$$(Xw - y)^T(Xw - y) + \gamma||w||_1$$

Градиентный спуск

Задача 9

Покажите, что для любого α существует такая выпуклая функция $f(x)$, что градиентный спуск в котором каждый раз делается шаг на $\alpha \frac{\partial f}{\partial x}$ разойдется.

Ответ

В параболе x^2 можно перескакивать с ветку на ветку (если встать в точку 0.5)

Решение

Делать шаг на α_k, где каждый следующий шаг меньше предыдущего.

Задача 10

Пусть $\alpha_k = \frac{1}{k^2}$. Покажите, что такой метод может сойтись не к оптимуму.

Ответ

$\sum \frac{1}{k^2}$ — сходится, если встанем далеко от ноля. Просто «физически» до ноля не дойдем.

Достаточно распространенные варианты:

$\alpha_k = \frac{1}{k}$,

$\alpha_k = \frac{1}{\sqrt{k}}$,

$\alpha_k = \gamma^{\lfloor \frac{k}{step} \rfloor}$

Задача 11

Пусть $\alpha_k = \frac{1}{k}$. Может ли такой метод может сойтись не к оптимуму?

Ответ

Нет. Единственное — может сойтесь к локальному минимуму в случае невыпуклой функции.

Один из способова выбрать шаги, которые гарантировано сойдутся: метод Хачияна (элипсоидов): https://ru.wikipedia.org/wiki/Метод_эллипсоидов (https://ru.wikipedia.org/wiki/Метод_эллипсоидов).

Выбрать эллипс, в котором изначально решение есть и двигаться из его центра по градиенту в центр нового эллипса — тогда область поиска гарантированно уменьшается в константу раз.