Введение в анализ данных

Лекция 4

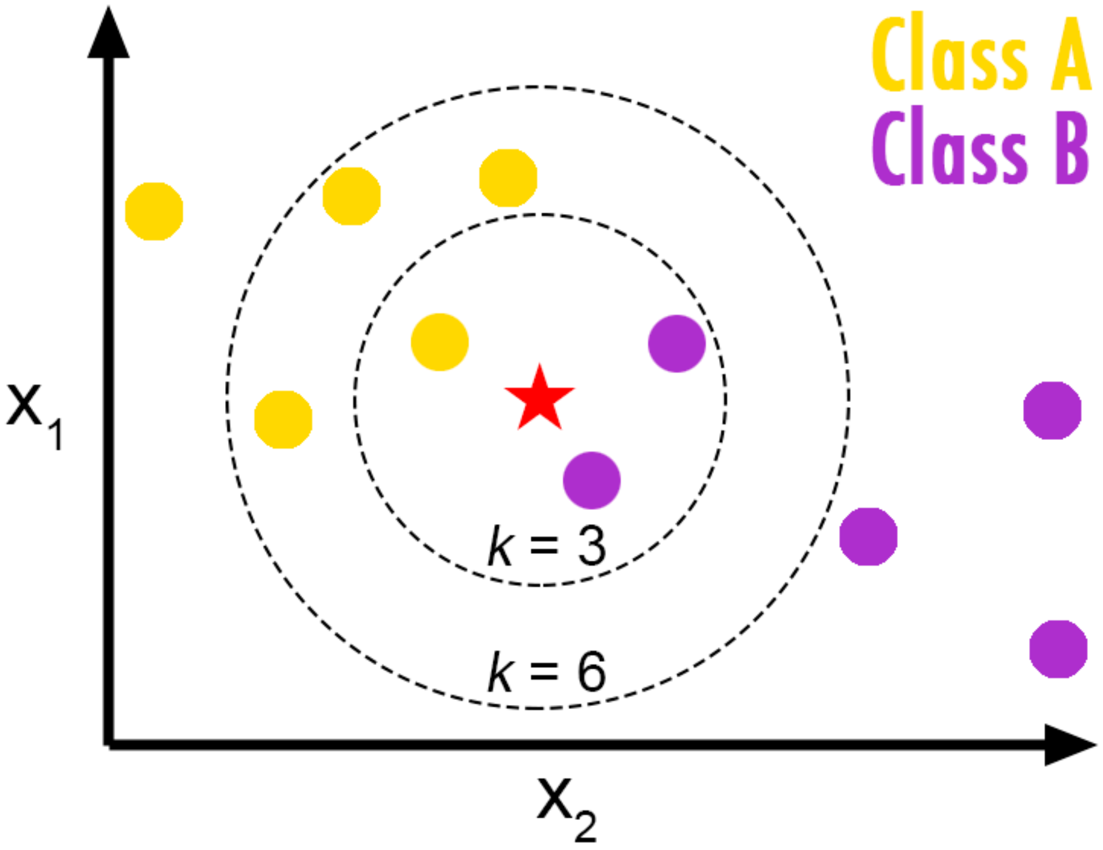
Метрические и линейные методы регрессии

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

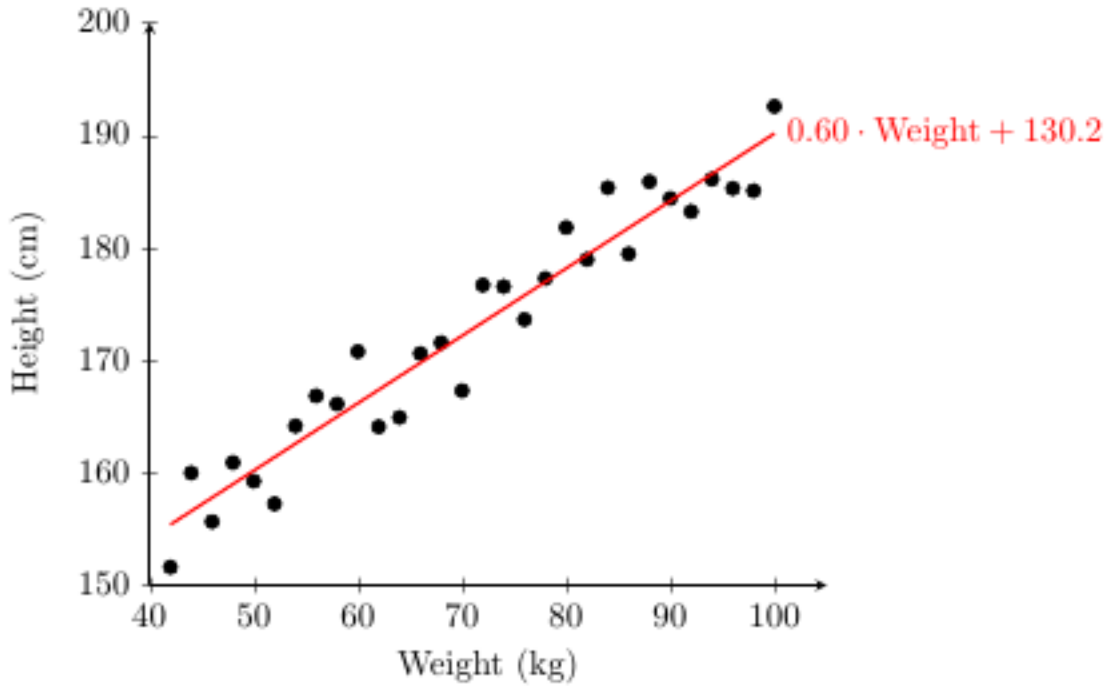
НИУ ВШЭ, 2018

Метод k ближайших соседей



Регрессия

- Вещественные ответы: $\mathbb{Y} = \mathbb{R}$
- (вещественные числа — числа с любой дробной частью)
- Пример: предсказание роста по весу



Среднеквадратичная ошибка

Функционал ошибки

$a(x)$	y	**отклонение**
11	10	1
9	10	-1
20	10	10
1	10	-9

Функционал ошибки

- Ошибку надо минимизировать
- Минимизация отклонения $(a(x) - y)$ приведёт к провалу

$\boldsymbol{a(x)}$	$\boldsymbol{y}$	**отклонение**
11	10	1
9	10	-1
20	10	10
1	10	-9

Функционал ошибки

- Возьмём модуль: $|a(x) - y|$
- Не имеет производной

$\boldsymbol{a(x)}$	$\boldsymbol{y}$	$\boldsymbol{\lvert a(x) - y \rvert}$
11	10	1
9	10	1
20	10	10
1	10	9

Функционал ошибки

- Возведём в квадрат: $(a(x) - y)^2$

$\boldsymbol{a(x)}$	$\boldsymbol{y}$	$\boldsymbol{(a(x) - y)^2}$
11	10	1
9	10	1
20	10	100
1	10	81

Среднеквадратичная ошибка

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

- MSE (Mean Squared Error)

Среднеквадратичная ошибка

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

- RMSE (Root Mean Squared Error)
- В тех же единицах измерения, что и ответы
- Сложные производные из-за корня

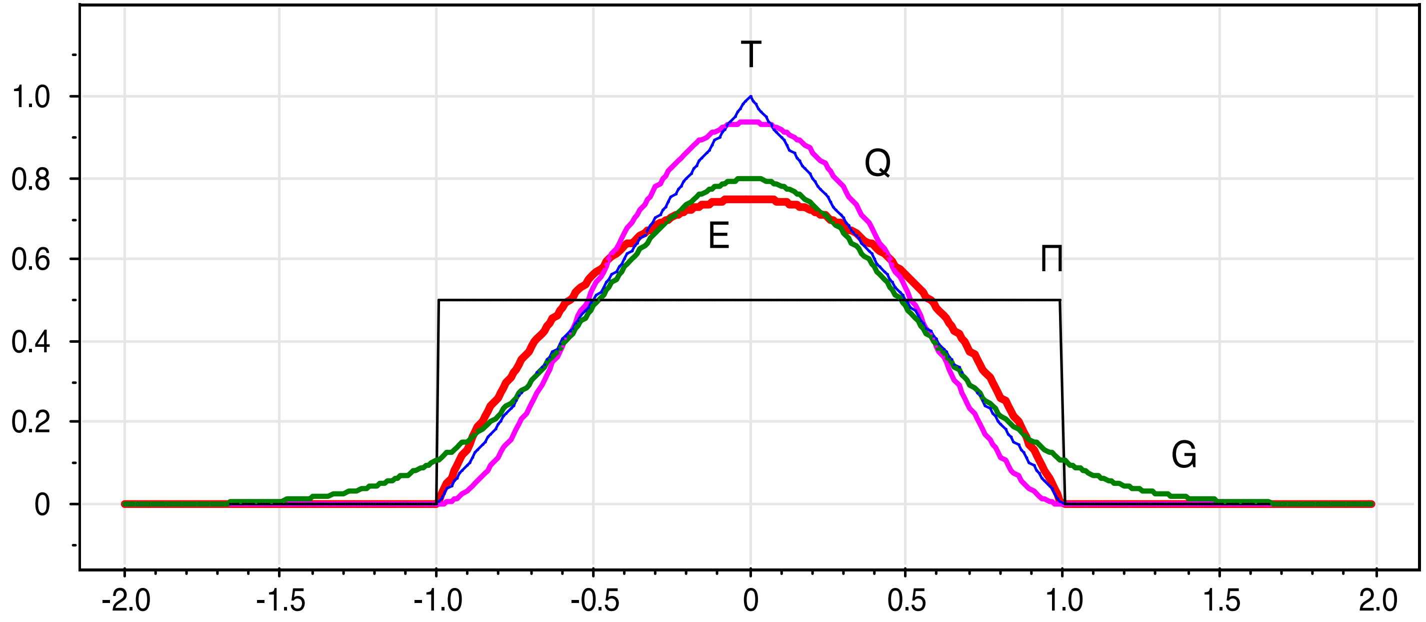
Метрические методы регрессии

kNN с весами

$$a(x) = \arg\max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^{k} w_i [y_{(i)} = y]$$

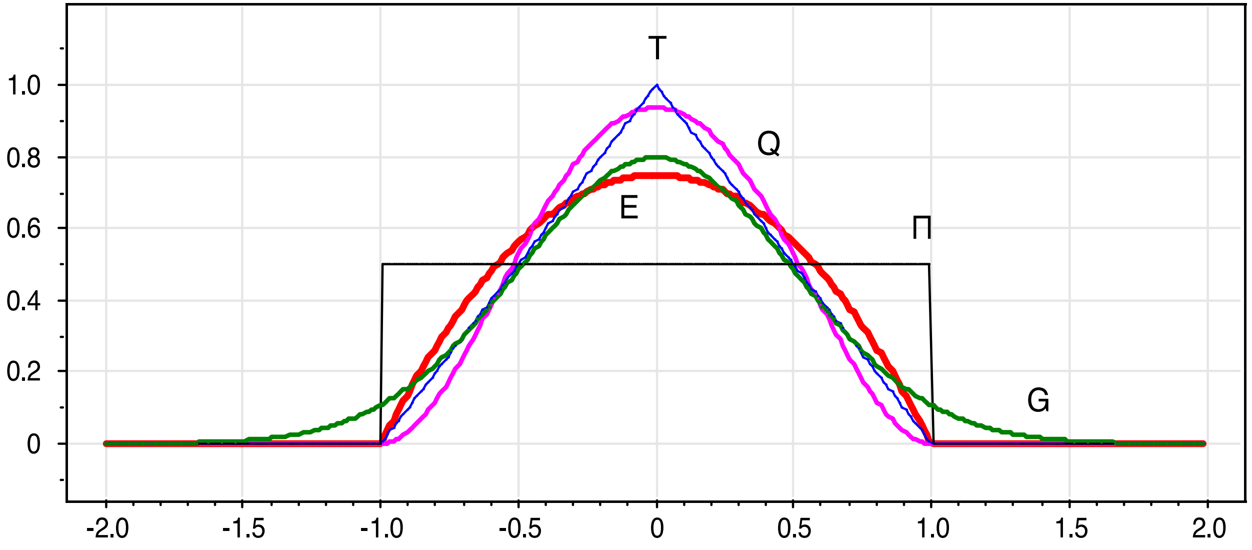
Парзеновское окно:

- $w_i = K\left(\frac{\rho(x, x_{(i)})}{h}\right)$
- K — ядро
- h — ширина окна



Ядра

- Гауссовское ядро: $K(z) = (2\pi)^{-0.5} \exp\left(-\frac{1}{2} z^2\right)$
- И много других



kNN для регрессии

- Классификация:

$$a(x) = \arg\max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^{k} w_i [y_{(i)} = y]$$

- Регрессия:

kNN для регрессии

- Классификация:

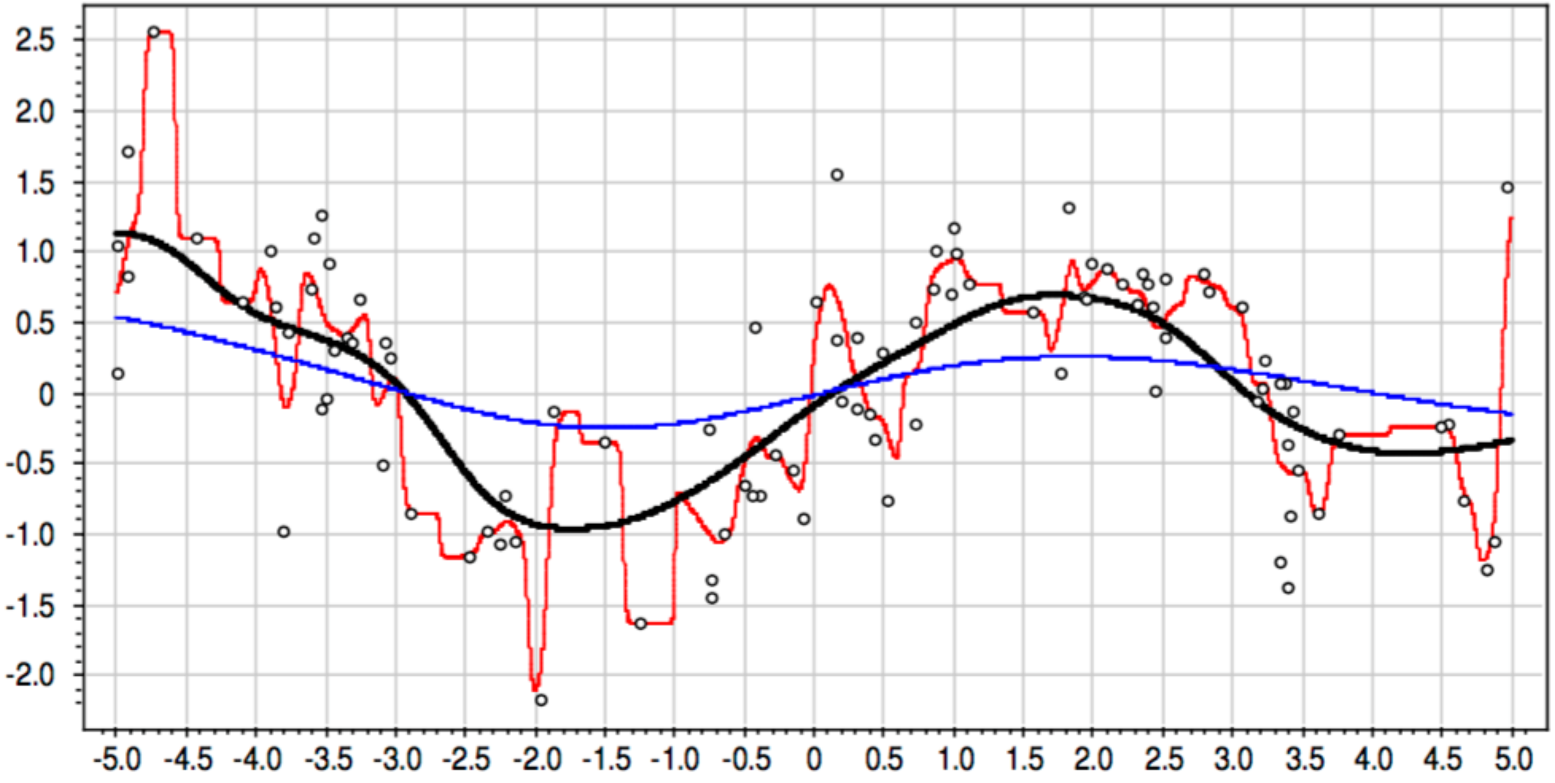
$$a(x) = \arg\max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^{k} w_i [y_{(i)} = y]$$

- Регрессия:

$$a(x) = \frac{\sum_{i=1}^{k} w_i y_{(i)}}{\sum_{i=1}^{k} w_i}$$

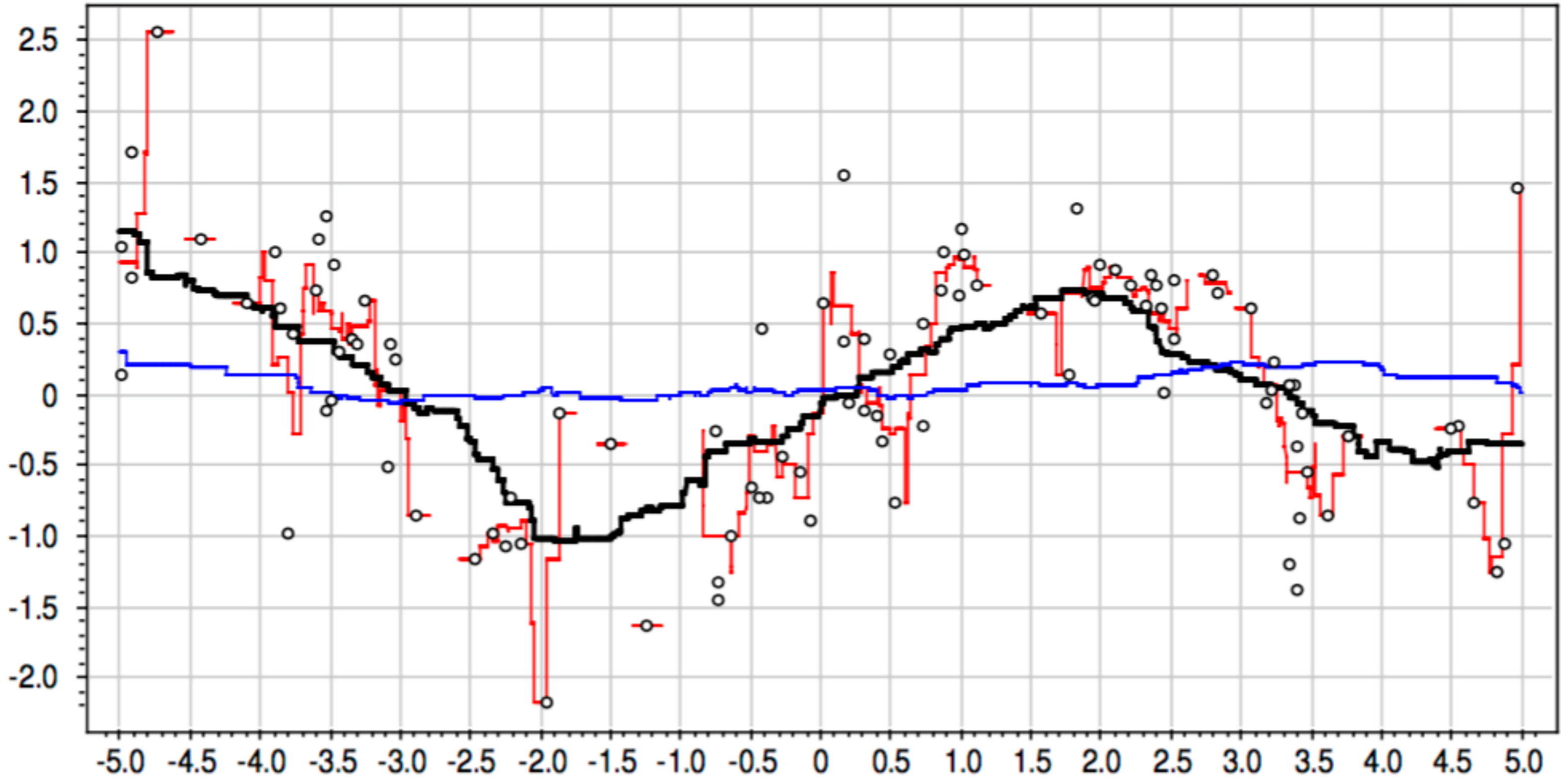
kNN для регрессии

- Гауссовское ядро
- $h \in \{0.1, 1.0, 3.0\}$



kNN для регрессии

- Прямоугольное ядро $K(z) = [|z| \leq 1]$
- $h \in \{0.1, 1.0, 3.0\}$



Функции расстояния

Евклидова метрика

$$\rho(x,z) = \sqrt{\sum_{j=1}^{d} \left(x_j - z_j\right)^2}$$

- Более общий вариант — метрика Минковского:

$$\rho(x,z) = \left(\sum_{j=1}^{d} \left(x_j - z_j\right)^p\right)^{1/p}$$

Чувствительность к масштабу

- Задача: определение пола
- Признаки:
  - Рост
  - Экспрессия гена SRY (от 0 до 1) — у женщин ближе к нулю
- Обучающая выборка:
  - $x_1 = (180, 0.2)$
  - $x_2 = (172, 0.9)$
- Новый объект: $x = (178, 0.85)$

Чувствительность к масштабу

- Задача: определение пола
- Признаки:
  - Рост
  - Экспрессия гена SRY (от 0 до 1) — у женщин ближе к нулю
- Обучающая выборка:
  - $x_1 = (180, 0.2)$
  - $x_2 = (172, 0.9)$
- Новый объект: $x = (178, 0.85)$
- $\rho(x, x_1) = 2.1, \rho(x, x_2) = 5$

Чувствительность к масштабу

- Если признаки имеют разные масштабы, то будут учитываться лишь самые крупные
- Перед применением kNN выборку необходимо масштабировать!

Расстояние Джаккарда

- Измеряет расстояния между множествами
- Пример: каждый объект — набор слов или тэгов
- Метрика:

$$\rho(A, B) = 1 - \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|}$$

Расстояние Джаккарда

- Пример 1:
  - $A = \{\text{комедия}, \text{триллер}, \text{США}\}$
  - $B = \{\text{триллер}, \text{ужасы}, \text{Великобритания}\}$
- $\rho(A, B) = 1 - \frac{1}{5} = 0.8$

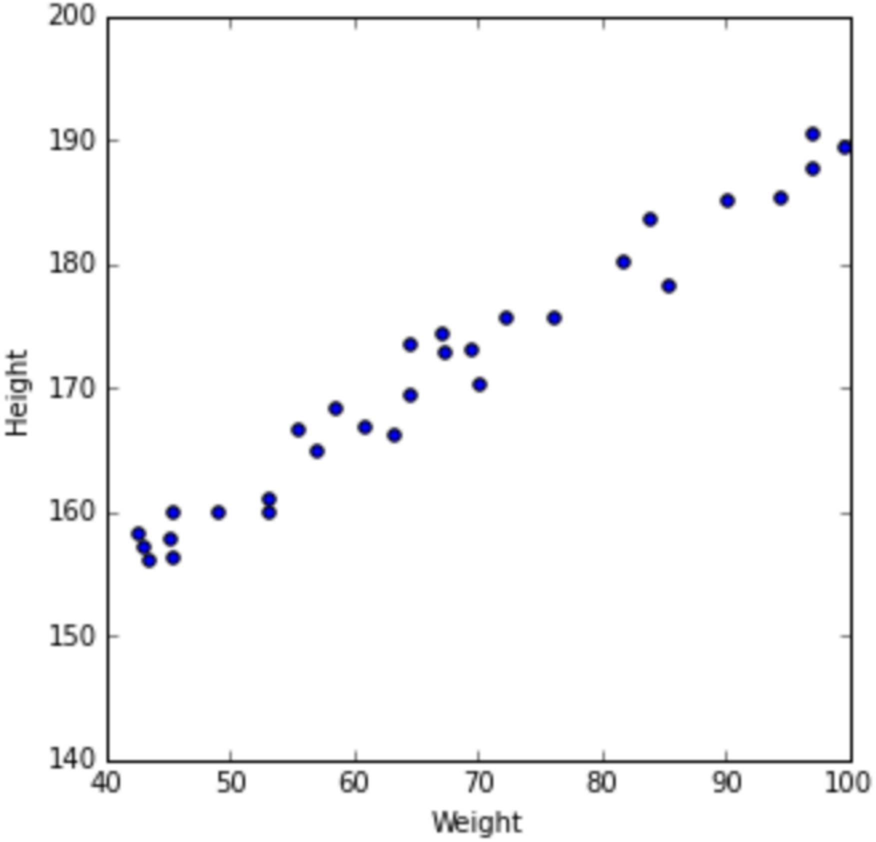
- Пример 2:
  - $A = \{\text{комедия}, \text{США}\}$
  - $B = \{\text{комедия}, \text{США}\}$
- $\rho(A, B) = 1 - \frac{2}{2} = 0$

Резюме по kNN

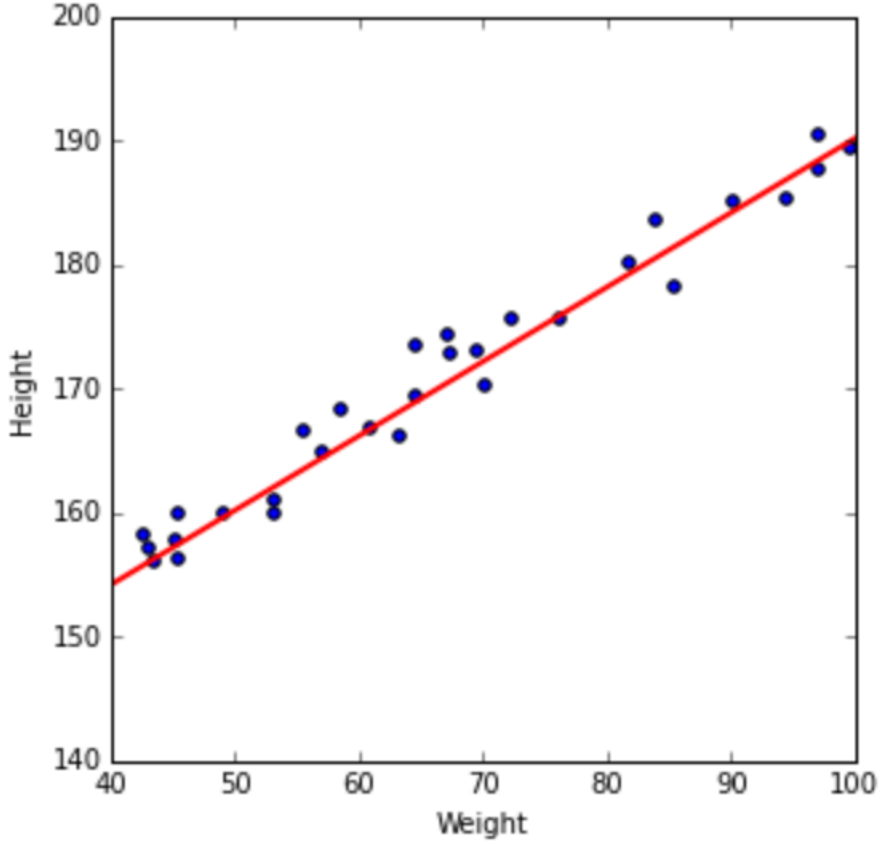
- Метрические методы — одни из самых интуитивных в машинном обучении
- Простая процедура обучения
- Гиперпараметры:
    - функция расстояния
    - число соседей
    - ядро
    - ширина окна

Линейная регрессия

Одномерная выборка



Одномерная выборка



Парная регрессия

- Простейший случай: один признак
- Модель: $a(x) = w_1 x + w_0$
- Два параметра: w_1 и w_0
- Одна из простейших моделей

Линейная регрессия

- Взвешенная сумма признаков:

$$a(x) = w_0 + w_1 x^1 + \cdots + w_d x^d$$

- $x^1, x^2, \dots, x^d$ — значений признаков
- $w_0, w_1, w_2, \dots, w_d$ — параметры
- w_0 — смещение

Линейная регрессия

- Взвешенная сумма признаков:

$$a(x) = w_0 + w_1 x^1 + \cdots + w_d x^d$$

- $x^1, x^2, \dots, x^d$ — значений признаков
- $w_0, w_1, w_2, \dots, w_d$ — параметры
- w_0 — смещение

Единичный признак

$$a(x) = w_0 * 1 + w_1 x^1 + \cdots + w_d x^d$$

- w_0 — как бы коэффициент при единичном признаке
- Добавим его!

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

Линейная регрессия

- Везде далее считаем, что среди признаков есть единичный

$$a(x) = w_1 x^1 + \dots + w_d x^d = \langle w, x \rangle$$

Скалярное произведение

Линейная регрессия

- Линейная модель: $a(x) = w_1 x^1 + \dots + w_d x^d = \langle w, x \rangle$
- Обучение:

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

Функция с d аргументами

Умножение матриц и MSE

Векторы и матрицы

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

Линейная модель

- $a(x) = w_1 x^1 + \cdots + w_d x^d$
- Как применить модель к целой выборке?

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

Умножение

- Мы еще не вводили умножение матрицы на вектор
- Определим его именно так
- Только для матрицы $\ell \times d$ и вектора $d \times 1$

$$Xw = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{d} w_i x_{1i} \\ \sum_{i=1}^{d} w_i x_{2i} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{d} w_i x_{\ell i} \end{pmatrix}$$

Линейные преобразования

- Умножая матрицу $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ на вектор $x \in \mathbb{R}^{n\times 1}$, получаем вектор $z \in \mathbb{R}^{m\times 1}$
- Матрица задает функцию из $\mathbb{R}^{n\times 1}$ в $\mathbb{R}^{m\times 1}$
- Эта функция — линейная:
  - $A(x_1 + x_2) = Ax_1 + Ax_2$
  - $A(\alpha x) = \alpha Ax$
- Любая линейная функция описывается некоторой матрицей

Линейные преобразования

- Функции можно применять последовательно: $g(f(x))$
- В том числе линейные: $A(Bx)$
- Композиция линейных функций — тоже линейная функция:
  - $A\big(B(x_1 + x_2)\big) = A(Bx_1) + A(Bx_2)$
  - $A\big(B(\alpha x)\big) = \alpha A(Bx)$
- А какая у нее матрица?
- Зададим матричное умножение так, чтобы оно соответствовало композиции линейных преобразований

Матричное умножение

- Только для матриц $A \in \mathbb{R}^{m\times k}$ и $A \in \mathbb{R}^{k\times n}$
- 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

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

Пример

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

Пример

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

Пример

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

Векторный вид MSE

$$Q(w, X) = \frac{1}{\ell} \|Xw - y\|^2$$

- X — матрица объекты-признаки
- y — вектор ответов на обучающей выборке

Производная и градиент

Скорость роста

- Численность населения:

1950	1960	1970	1980	1990	2000
2,525,778,669	3,026,002,942	3,691,172,616	4,449,048,798	5,320,816,667	6,127,700,428

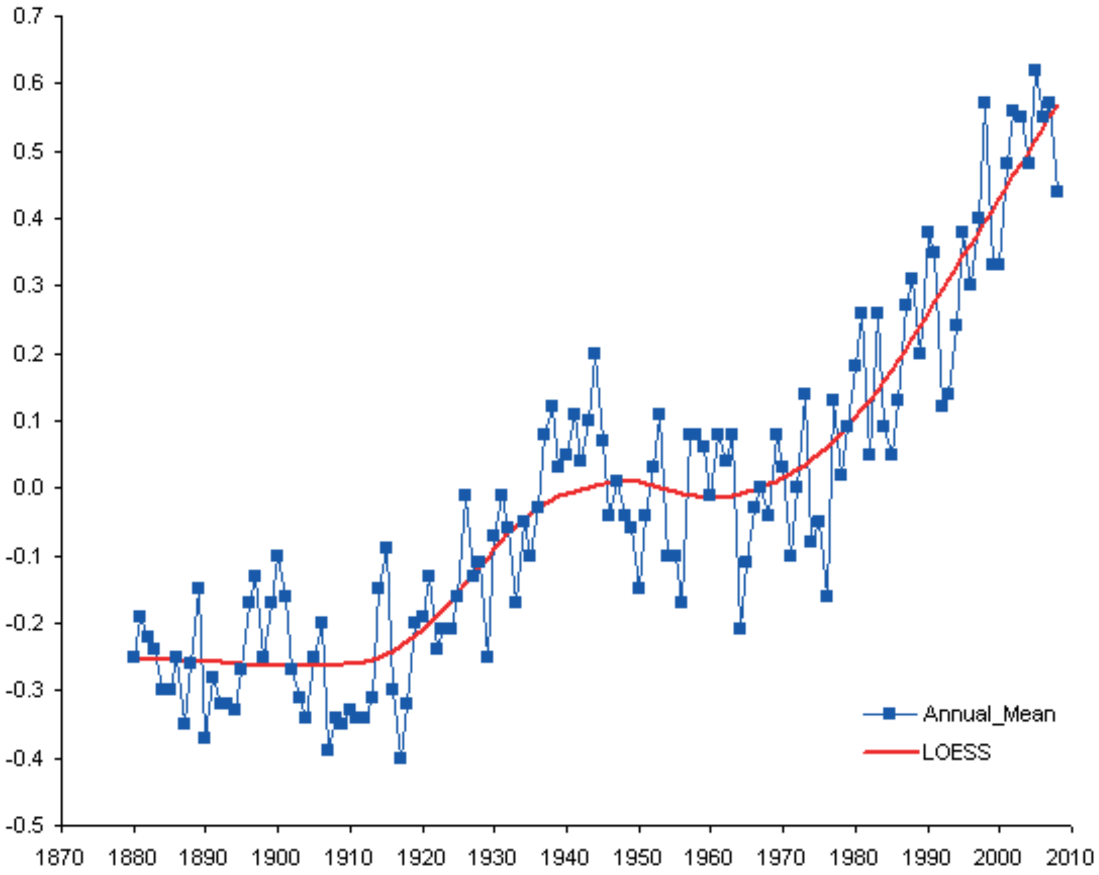
- Скорость роста между 1990 и 2000:

$$\frac{6127700428-5320816667}{10} = 80{,}688{,}376$$

- Дискретная величина

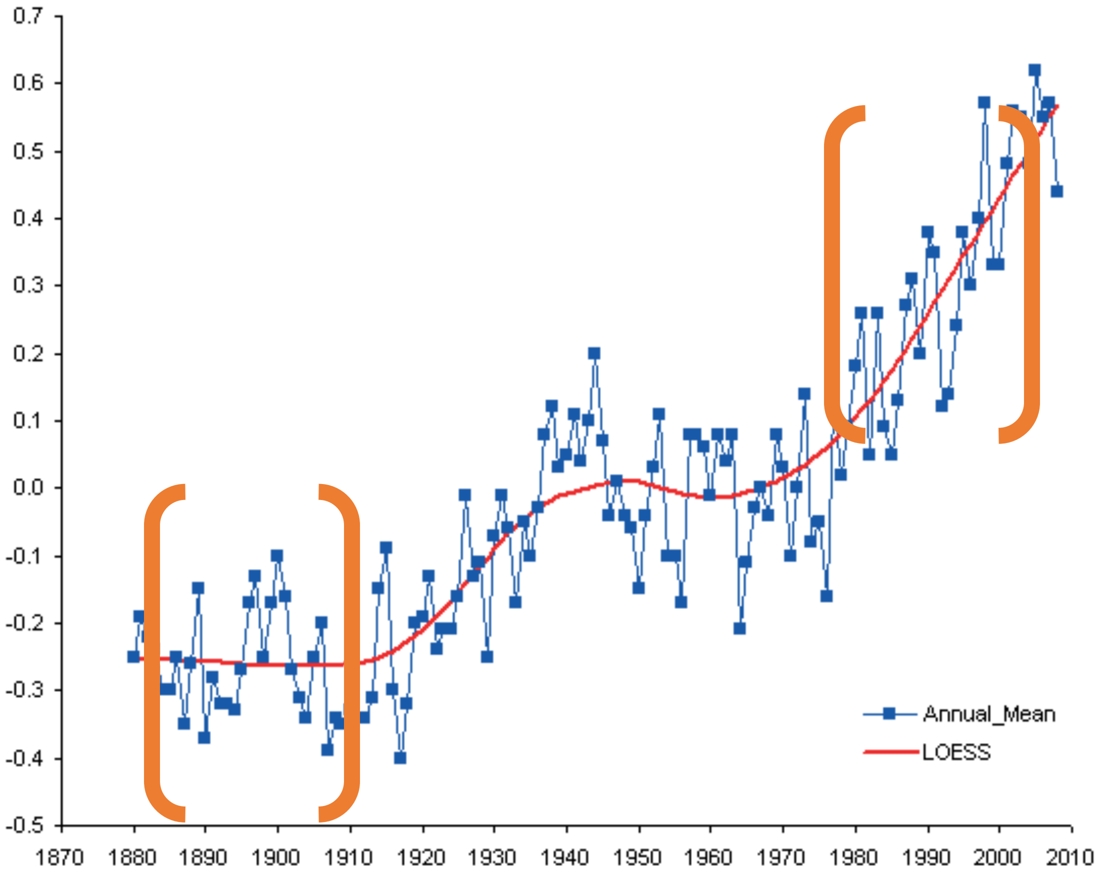
Скорость роста

- Отклонение температуры от нормы (непрерывная величина):



Скорость роста

- Отклонение температуры от нормы:



Высокая скорость

Низкая скорость

Скорость роста

- Можем измерить скорость на интервале $[x_0, x]$:
$$\frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$
- Как измерить мгновенную скорость в конкретный момент x_0?
- Устремим x к x_0!
$$\lim_{x \to x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} = f'(x_0)$$

Скорость роста

- Можем измерить скорость на интервале $[x_0, x]$:

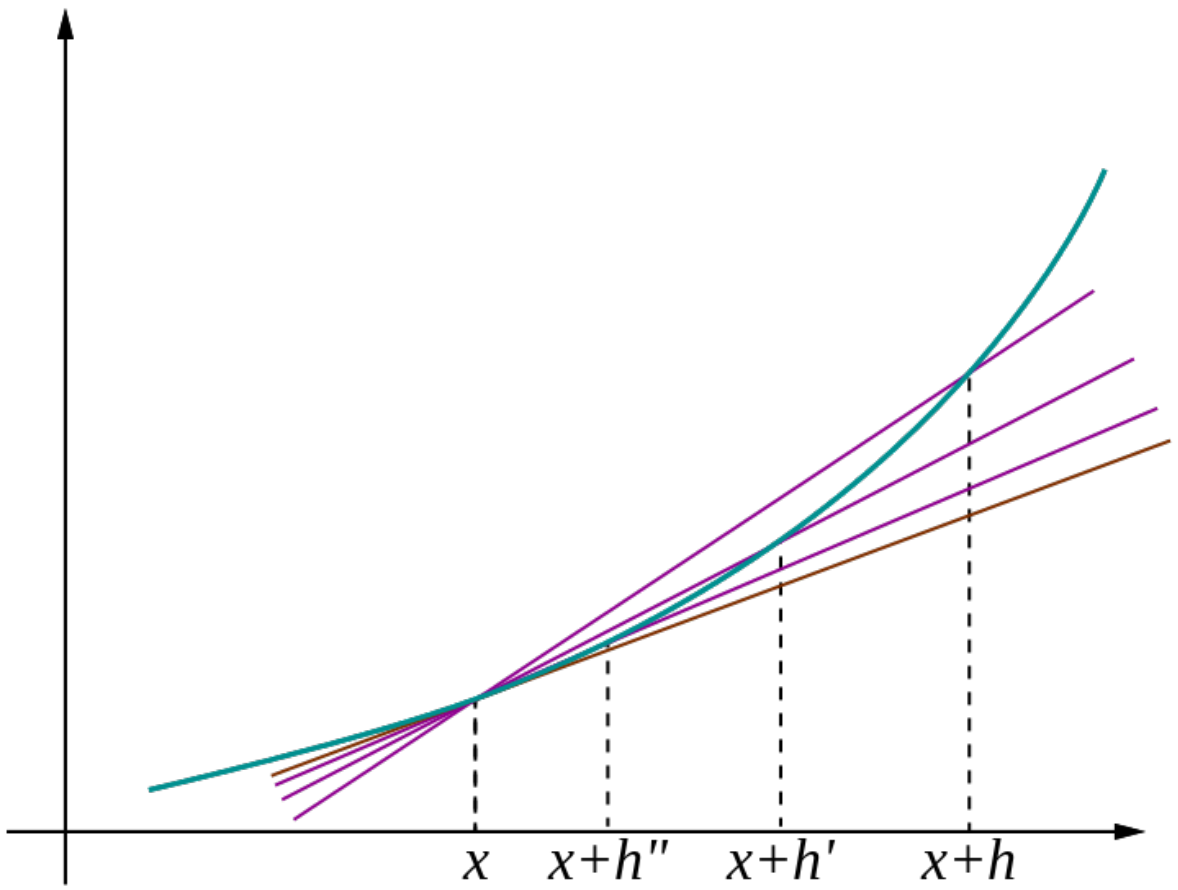
$$\frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

- Как измерить мгновенную скорость в конкретный момент x_0?
- Устремим x к x_0!

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

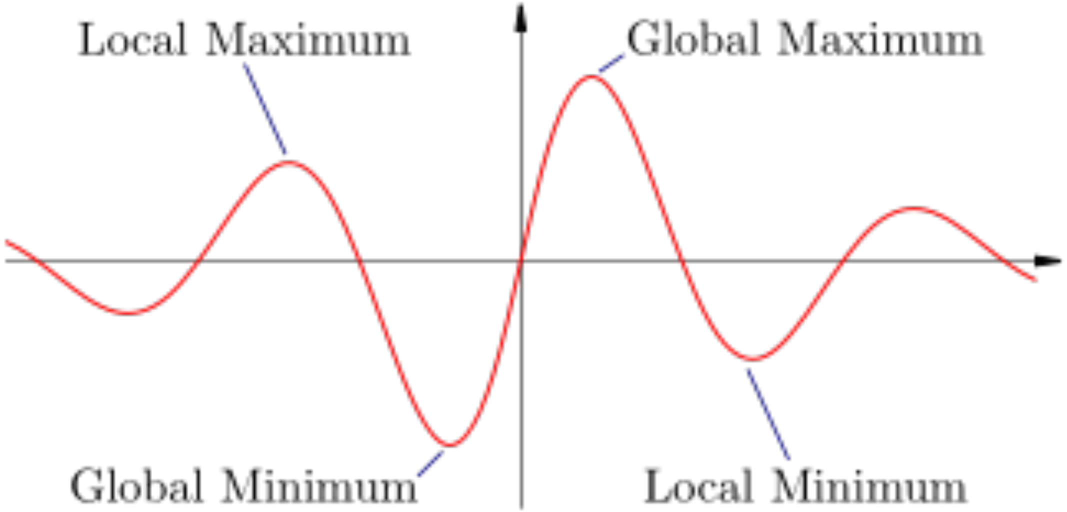
Производная

Производная



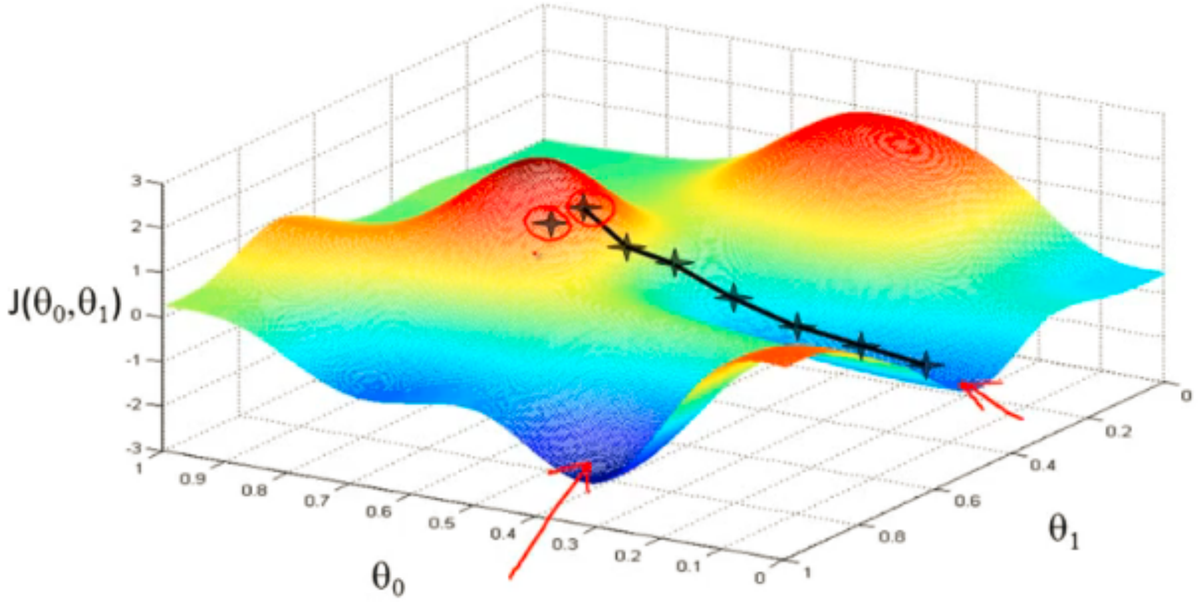
Экстремумы

- Экстремум — минимум или максимум
- Локальный минимум — меньше всех значений в некоторой окрестности
- Глобальный минимум — меньше всех значений



Экстремумы

- Локальные минимумы — одна из главных проблем в машинном обучении



Andrew Ng

Условие оптимальности

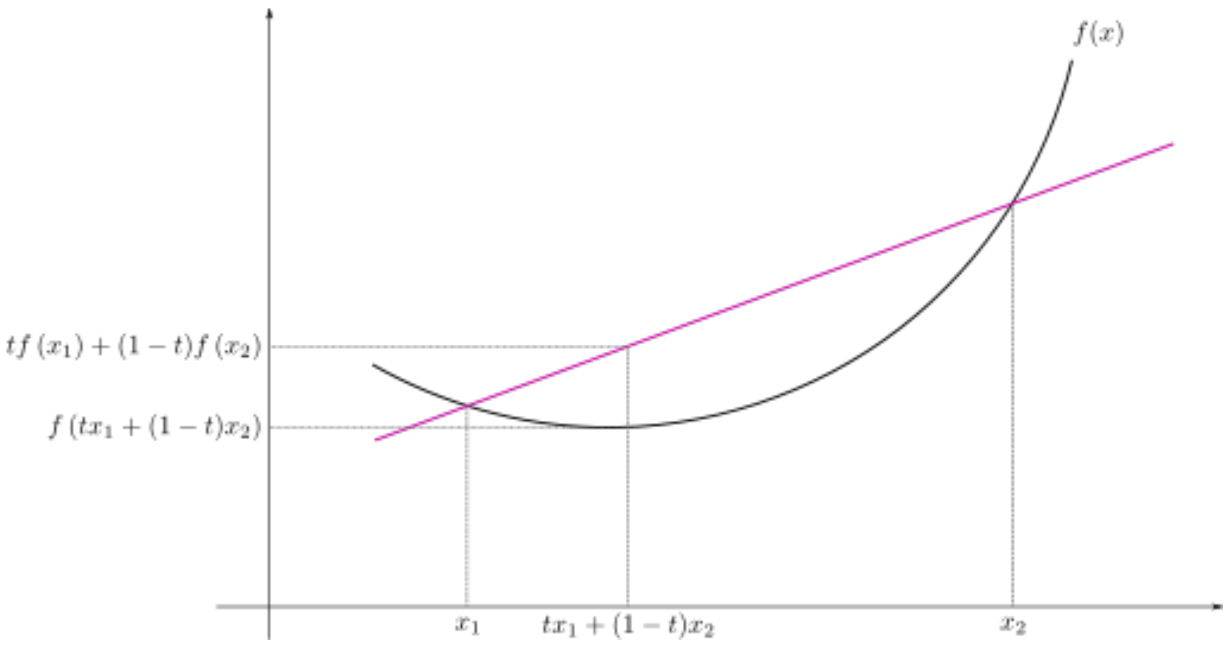
- Как понять, является ли точка x_0 экстремумом?
- Теорема Ферма: если точка x_0 — экстремум, и в ней существует производная, то $f'(x_0) = 0$

- Если функция везде имеет производную: решаем $f'(x) = 0$
- Если с производной проблемы: не повезло

- Даже если производная есть, то что делать с локальными экстремумами?

Выпуклые функции

- Функция выпуклая, если ее график лежит ниже любого отрезка, соединяющего две точки



Выпуклые функции

- Функция выпуклая, если во всех точках $f''(x) \geq 0$

- Важное свойство: любой локальный экстремум выпуклой функции является глобальным
- Решая уравнение $f'(x) = 0$, получим глобальные экстремумы
- Вывод: будем стараться выбирать выпуклые функционалы!

Пример

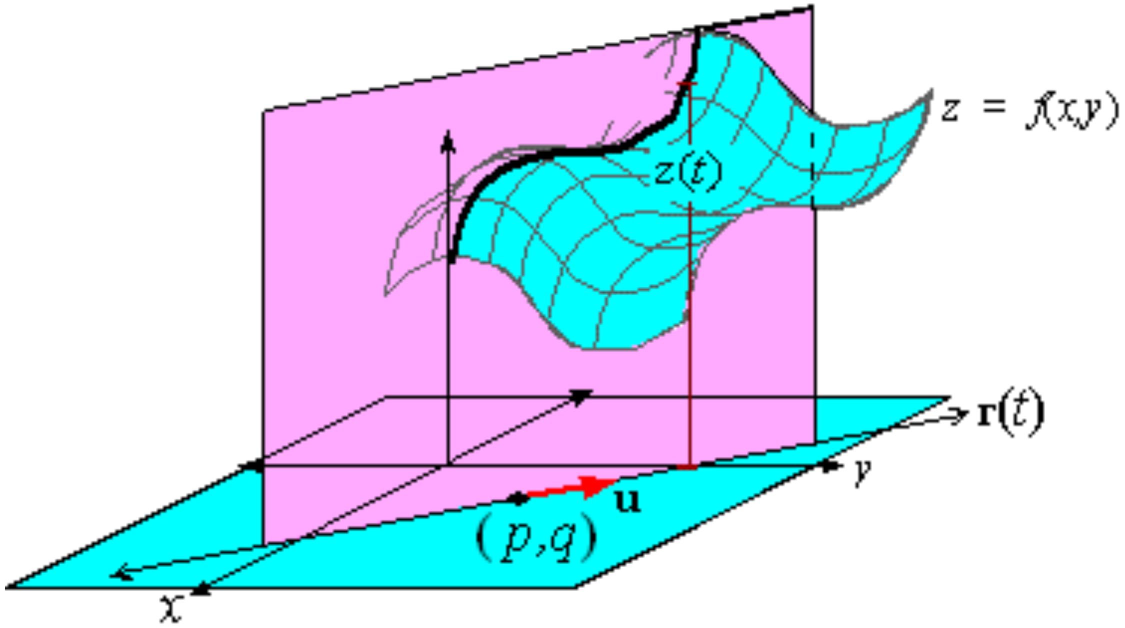
- Функционал качества линейной регрессии:

$$Q(w_1, \dots, w_d) = \sum_{i=1}^{\ell} \left(w_1 x^1 + \dots + w_d x^d - y_i\right)^2$$

- Многомерная функция (т.е. от нескольких аргументов)
- Как искать ее минимум?

Производная по направлению

- С какой скоростью растет функция в конкретном направлении?



Производная по направлению

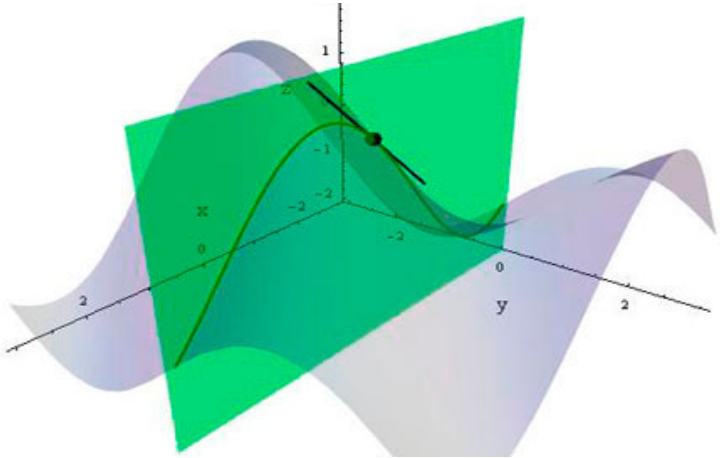
- Направление: v, причем $\|v\| = 1$
- Производная:

$$f'_v(x_0) = \lim_{t \to 0} \frac{f(x_0 + tv) - f(x_0)}{t}$$

Частные производные

- С какой скоростью функция меняется вдоль переменной x_i?
- Частная производная по x_i:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \lim_{t \to 0} \frac{f(x_1, \dots, x_i + t, \dots, x_d) - f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_d)}{t}$$



Градиент

- Градиент — вектор из частных производных:

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

- У градиента есть очень важное свойство!

Градиент

- Зафиксируем точку x_0
- В каком направлении функция быстрее всего растет?

$$f'_v(x_0) \to \max_v$$

Угол между градиентом и направлением

- Связь производной по направлению и градиента:

$$f'_v(x_0) = \langle \nabla f(x_0), v \rangle = \|\nabla f(x_0)\| * \|v\| * \cos \boxed{\varphi}$$

Градиент

- Произвольная по направлению максимальна, если направление совпадает с градиентом!
- **Градиент — направление наискорейшего роста функции**
- Антиградиент — направление наискорейшего убывания

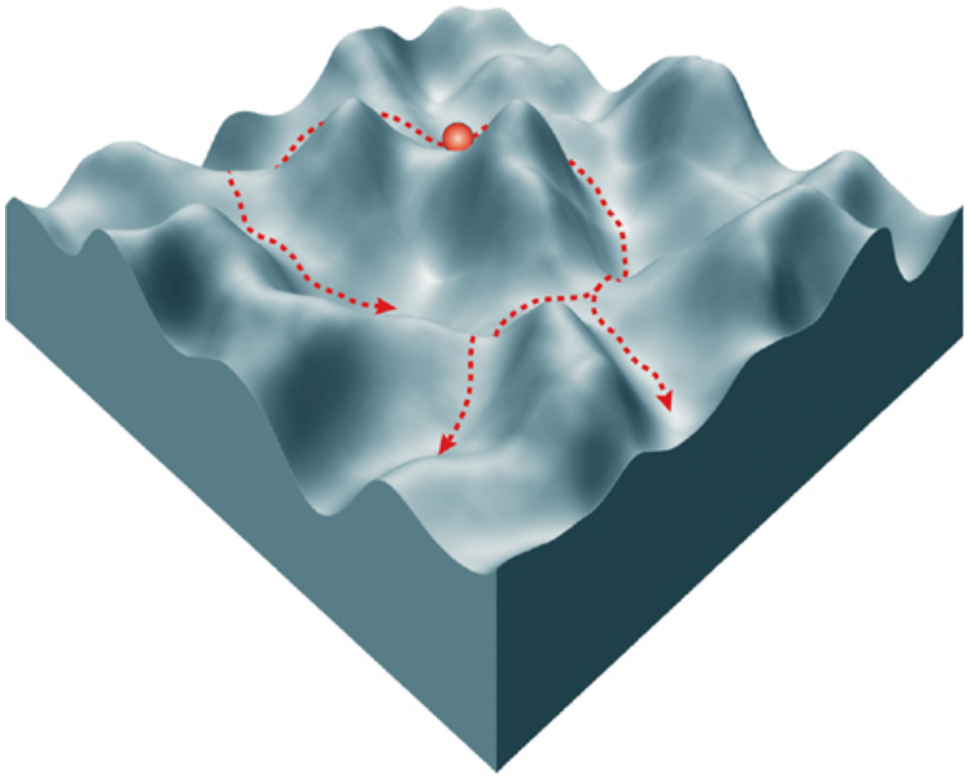
Условие оптимальности

- Как понять, является ли точка x_0 экстремумом?
- Обобщение теоремы Ферма: если точка x_0 — экстремум, и в ней существует градиент, то $\nabla f(x_0) = 0$

- Если функция везде имеет градиент: решаем $\nabla f(x) = 0$
- Если с градиентом проблемы: не повезло

Экстремумы

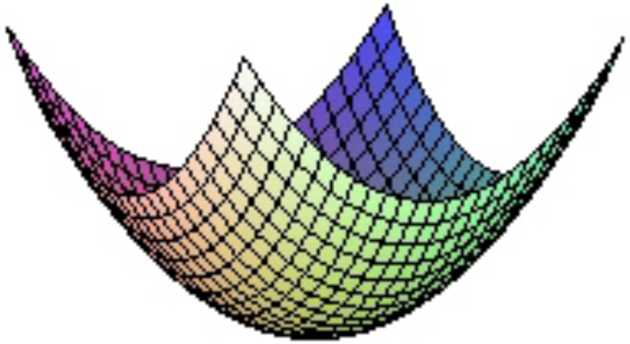
- Проблема с локальными экстремумами все еще актуальна

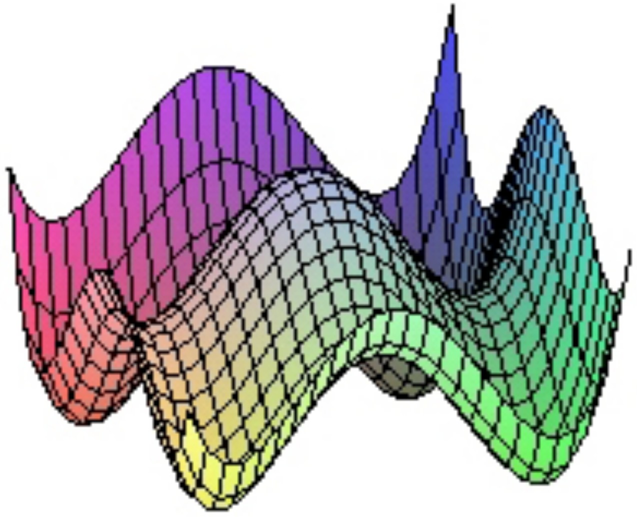


Nature Reviews | Molecular Cell Biology

Выпуклые функции

- Функция выпуклая, если ее график лежит ниже отрезка, соединяющего любые две точки

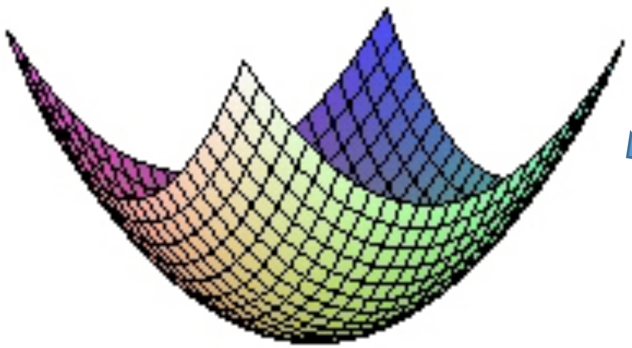


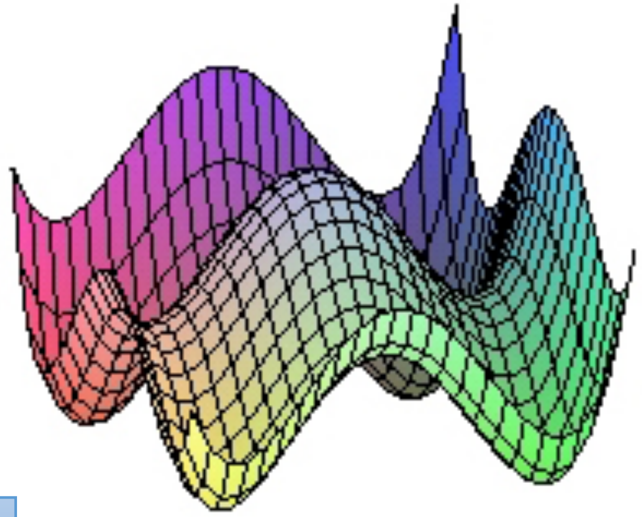


Выпуклые функции

- Функция выпуклая, если ее график лежит ниже отрезка, соединяющего любые две точки

Выпуклая функция





Невыпуклая функция

Обучение линейной регрессии

Задача оптимизации

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

- Градиент существует в любой точке
- Выпуклая функция
- Единственный минимум (не всегда)

Градиент

$$\nabla Q(w, X) = \left(\frac{\partial Q}{\partial w_1}, \dots, \frac{\partial Q}{\partial w_d}\right)$$

Производные:

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

Обучение линейной регрессии

- Векторная запись MSE:

$$Q(w, X) = \frac{1}{\ell}\|Xw - y\|^2$$

- Условие минимума:

$$\nabla Q = \frac{2}{\ell} X^T (Xw - y) = 0$$

- Что, если попробуем решить эту систему уравнений?

Обратная матрица

- A^{-1}— обратная к A
- $AA^{-1} = A^{-1}A = I$
- I — единичная матрица
- Только для квадратных матриц

- Существует тогда и только тогда, когда $\det A \neq 0$
- Можно найти с помощью SciPy

Обучение линейной регрессии

- Условие минимума решается аналитически!

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

- Но обращение матрицы — очень сложная операция
- Градиентный спуск гораздо быстрее

Резюме

- Линейная регрессия — одна из самых простых моделей в машинном обучении
- Функционал качества: среднеквадратичная ошибка
- Обучение: аналитическая формула или градиентный спуск