Введение в анализ данных

Лекция 5

Линейная регрессия и методы оптимизации

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2017

Градиент

- Градиент — вектор из частных производных:
$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_d}\right)$$
- И зачем нам этот вектор?
- 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

Методы оптимизации

Поиск минимума

- Функционал качества линейной регрессии:

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

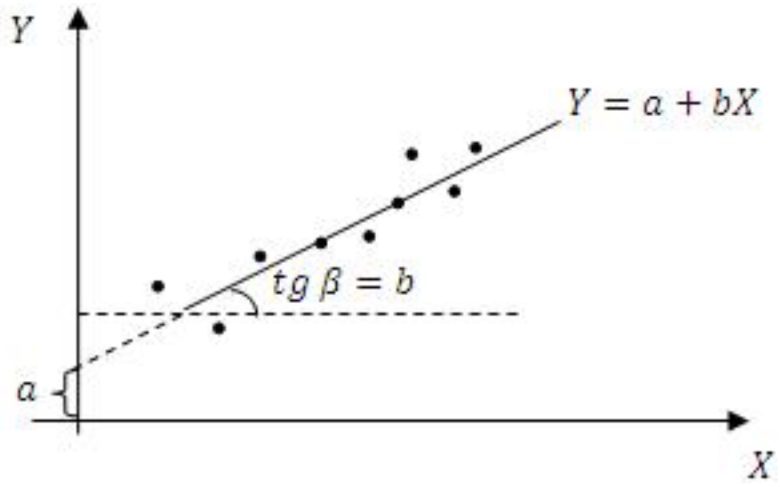
- Как искать минимум?

Поиск минимума

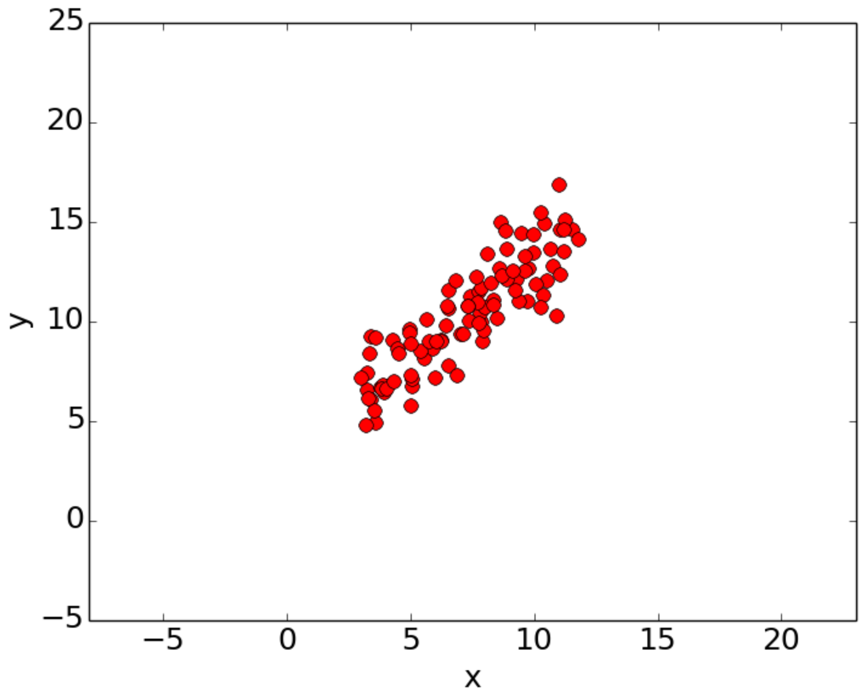
- Можно решать уравнение: $\nabla Q(w) = 0$
- А если уравнение сложное, и аналитически решить нельзя?
- Нужна численная оптимизация

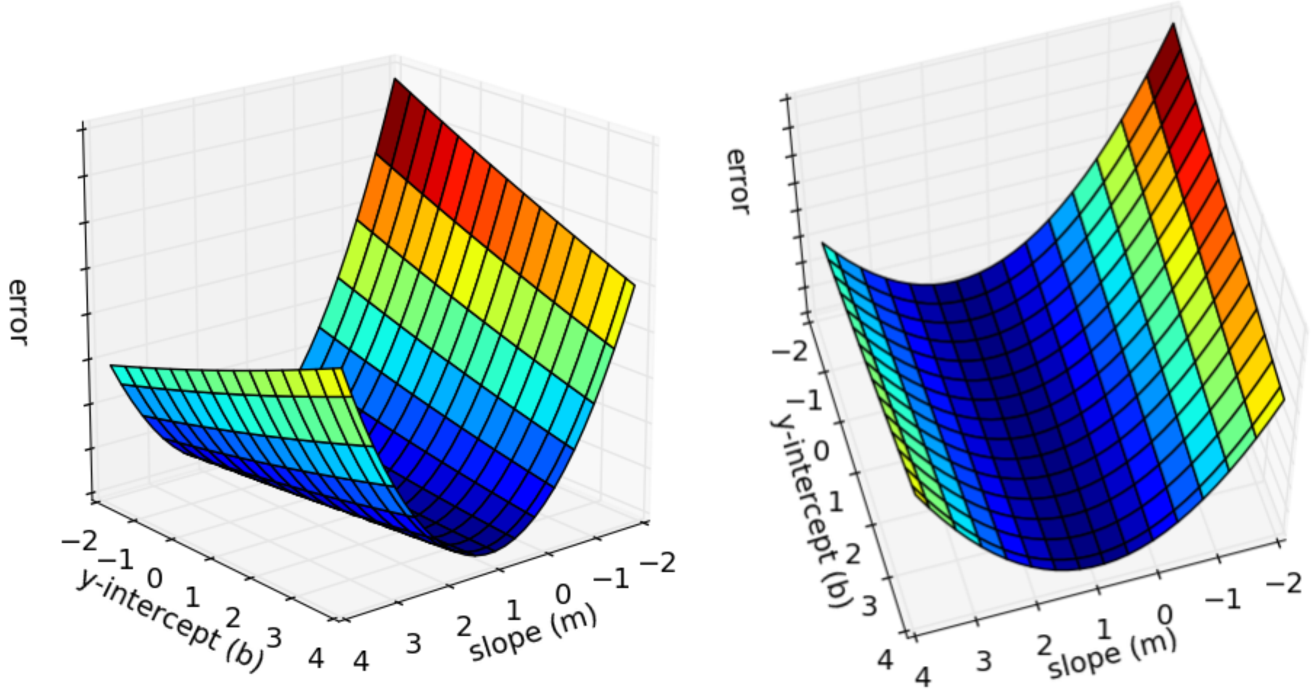
Парная регрессия

- Простейший случай: один признак
- Модель: $a(x) = w_1 x + w_0$
- Два параметра: w_1 и w_0
- Функционал: $Q(w_0, w_1) = \sum_{i=1}^{\ell} (w_1 x_i + w_0 - y_i)^2$



Парная регрессия



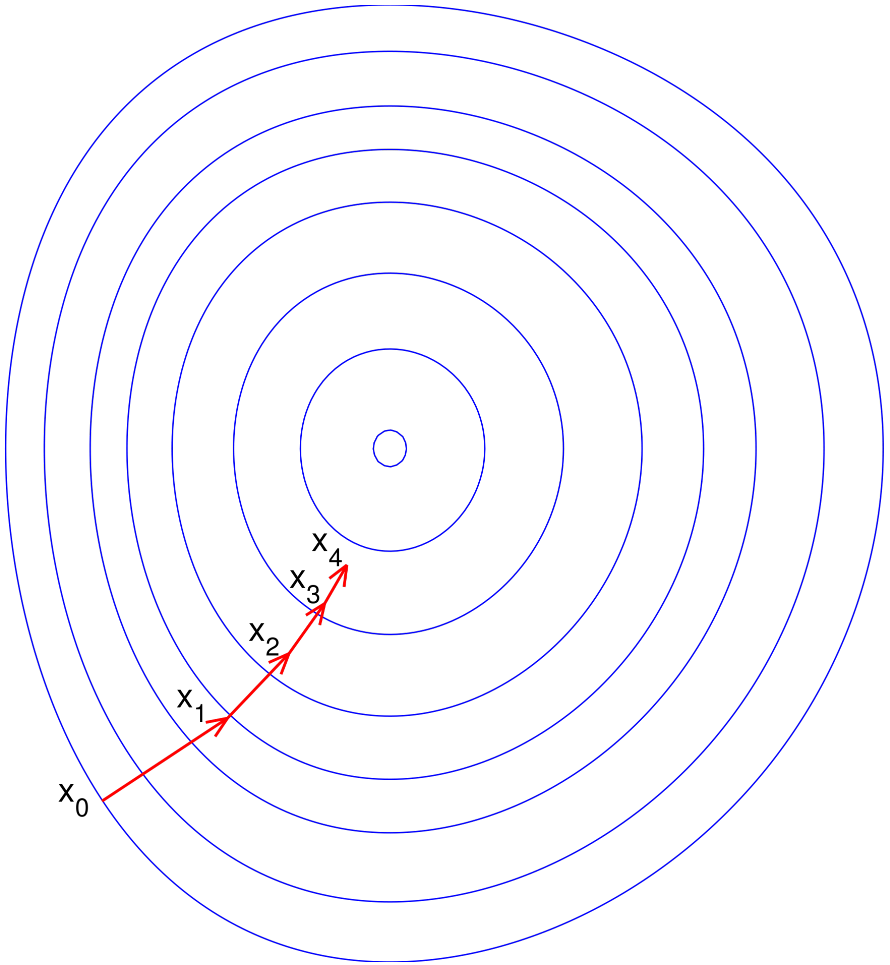


Выборка

Функционал качества

Градиентный спуск

- Допустим, мы выбрали начальное приближение $w^0 = (w_0^0, w_1^0)$
- Как его улучшить?
- Шагнуть в сторону наискорейшего убывания
- То есть в сторону антиградиента!



Градиентный спуск

- Повторять до сходимости:

$$\underbrace{w^t}_{\text{Новая точка}} = w^{t-1} - \underbrace{\eta}_{\text{Размер шага}} \, \underbrace{\nabla Q(w^{t-1})}_{\text{Градиент в предыдущей точке}}$$

Градиентный спуск

- Повторять до сходимости:

$$w^t = w^{t-1} - \eta \, \nabla Q(w^{t-1})$$

- Сходимость: $\|w^t - w^{t-1}\| < \varepsilon$

Градиент для парной регрессии

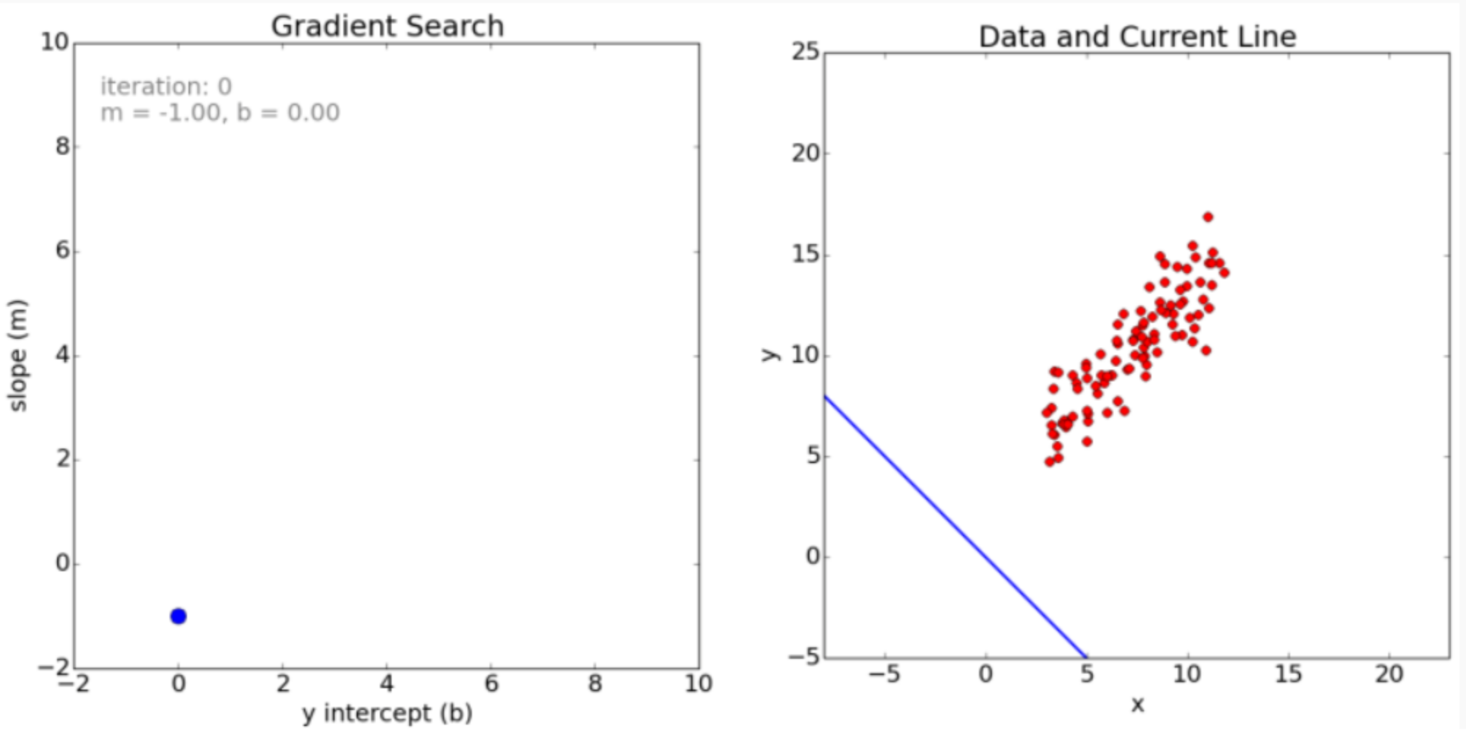
$$Q(w_0, w_1) = \sum_{i=1}^{\ell} (w_1 x_i + w_0 - y_i)^2$$

- Частные производные:

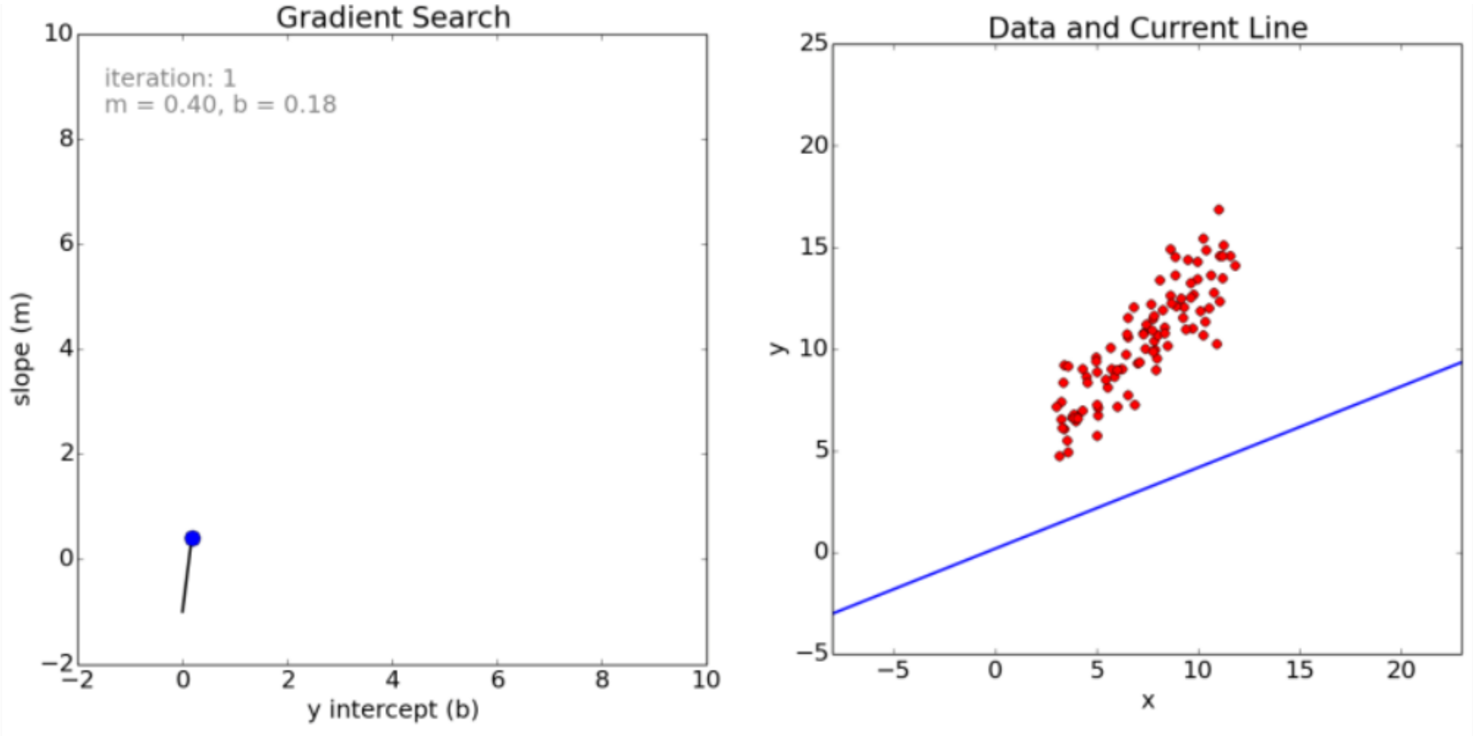
$$\frac{\partial Q}{\partial w_1} = 2 \sum_{i=1}^{\ell} (w_1 x_i + w_0 - y_i) x_i$$

$$\frac{\partial Q}{\partial w_0} = 2 \sum_{i=1}^{\ell} (w_1 x_i + w_0 - y_i)$$

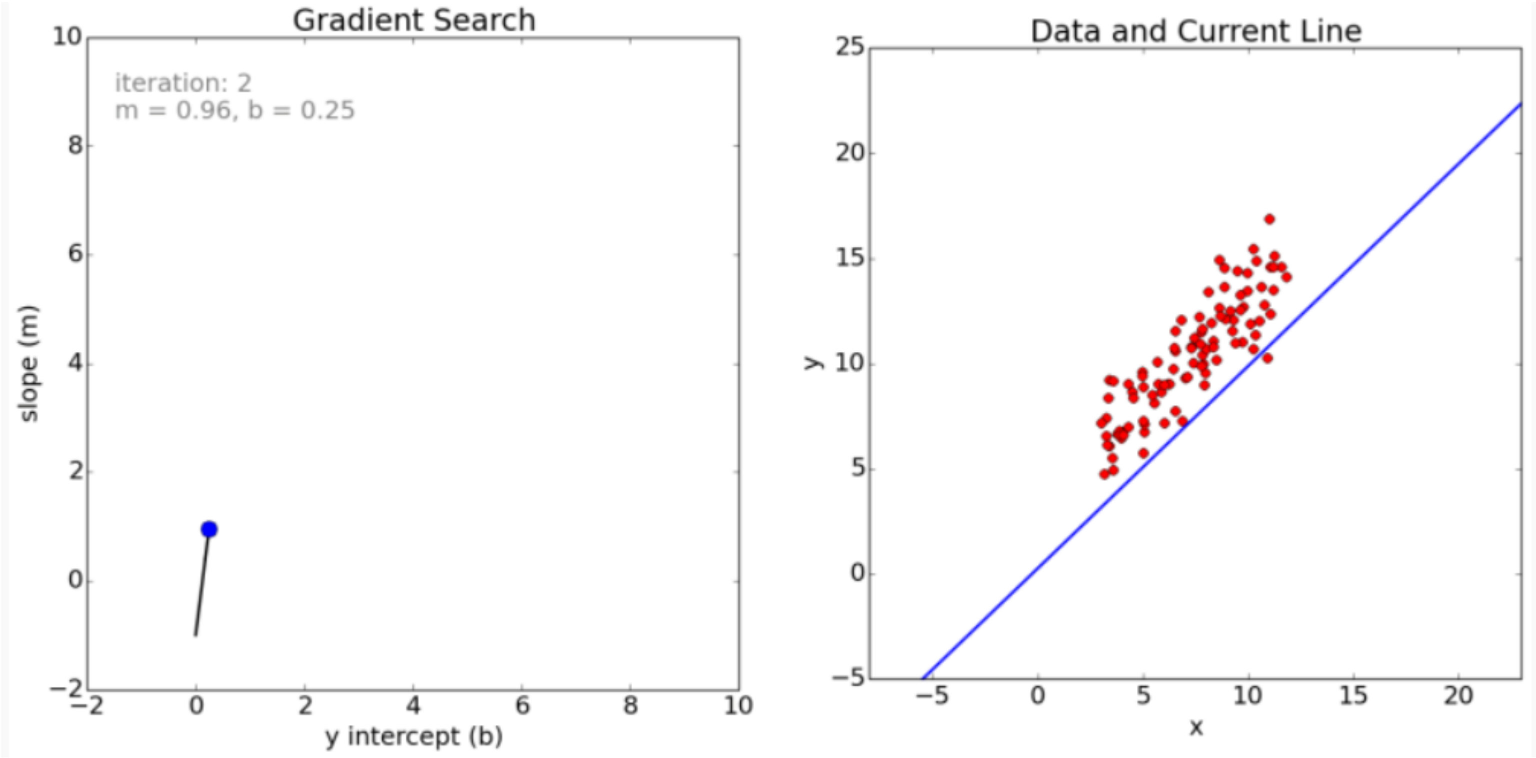
Парная регрессия



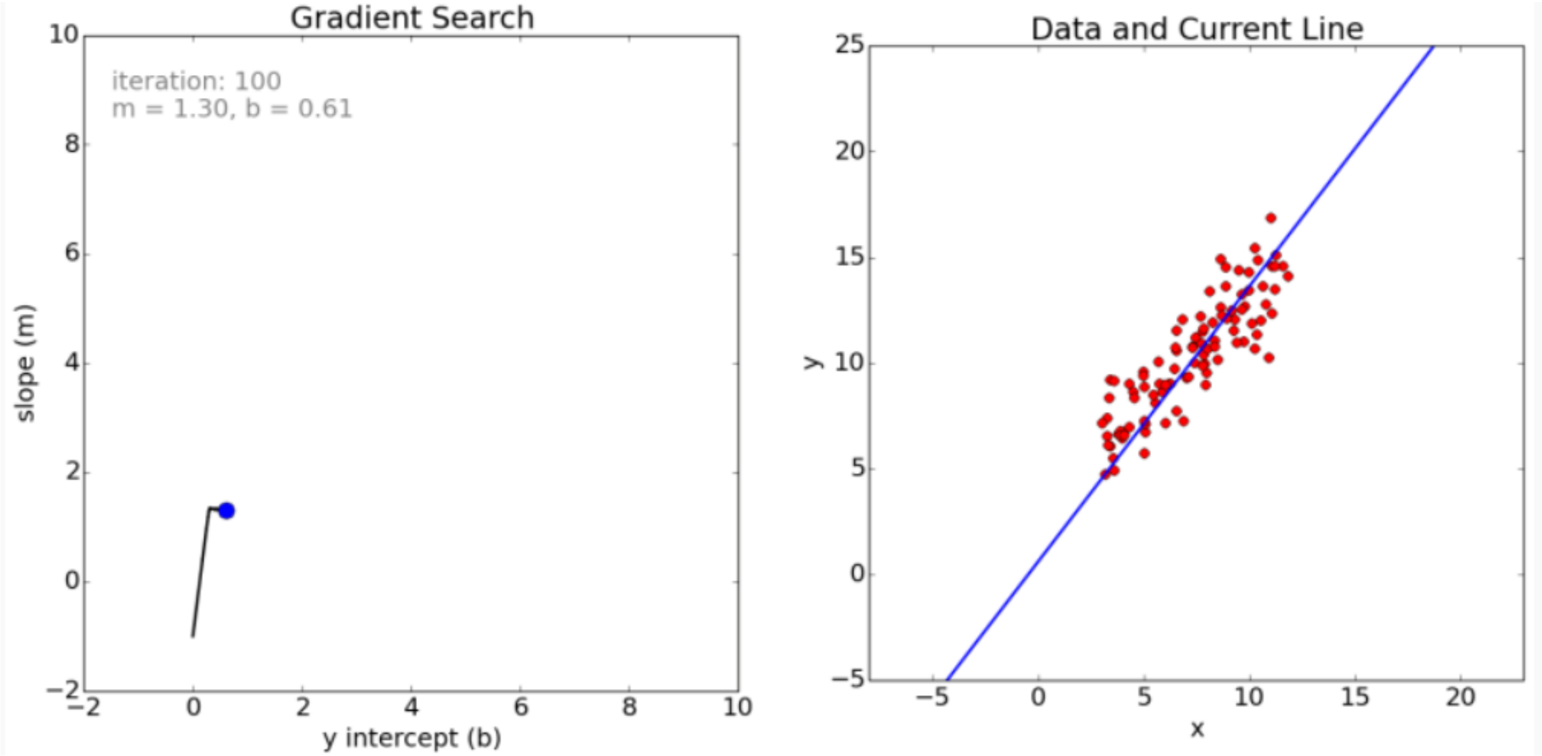
Парная регрессия



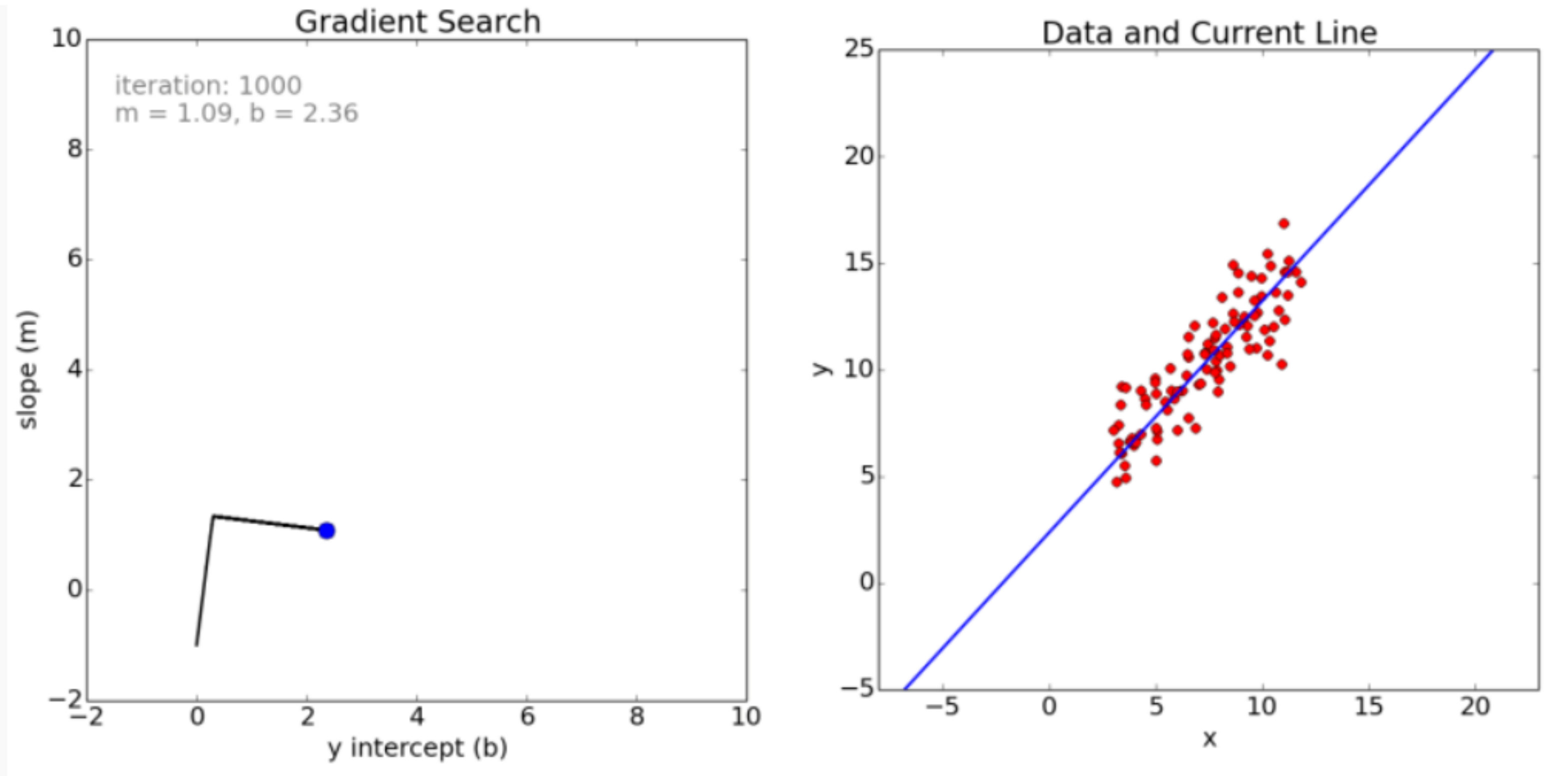
Парная регрессия



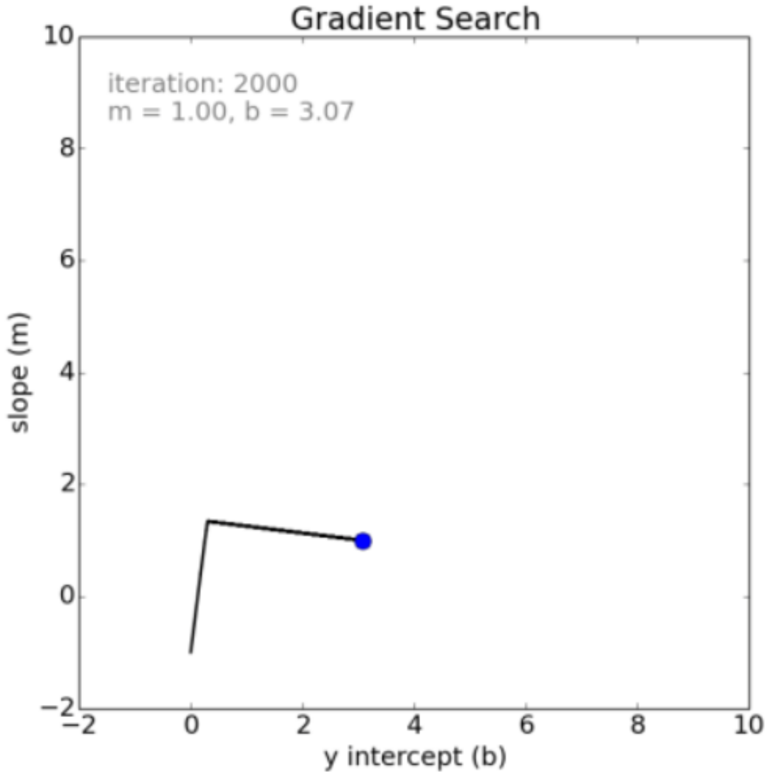
Парная регрессия

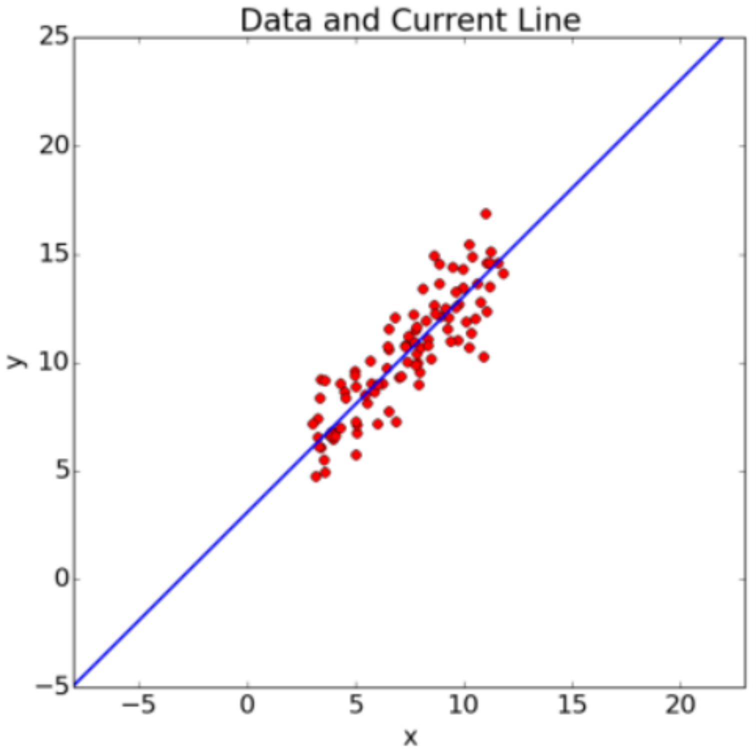


Парная регрессия

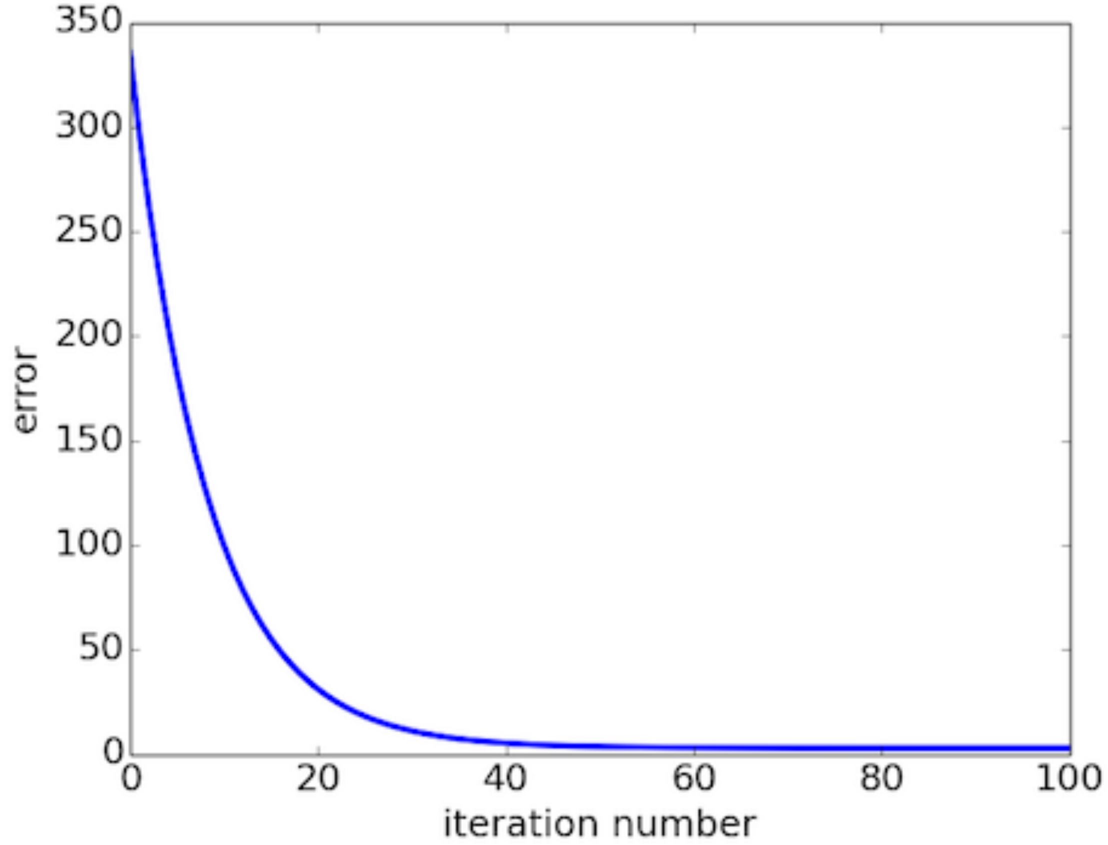


Парная регрессия



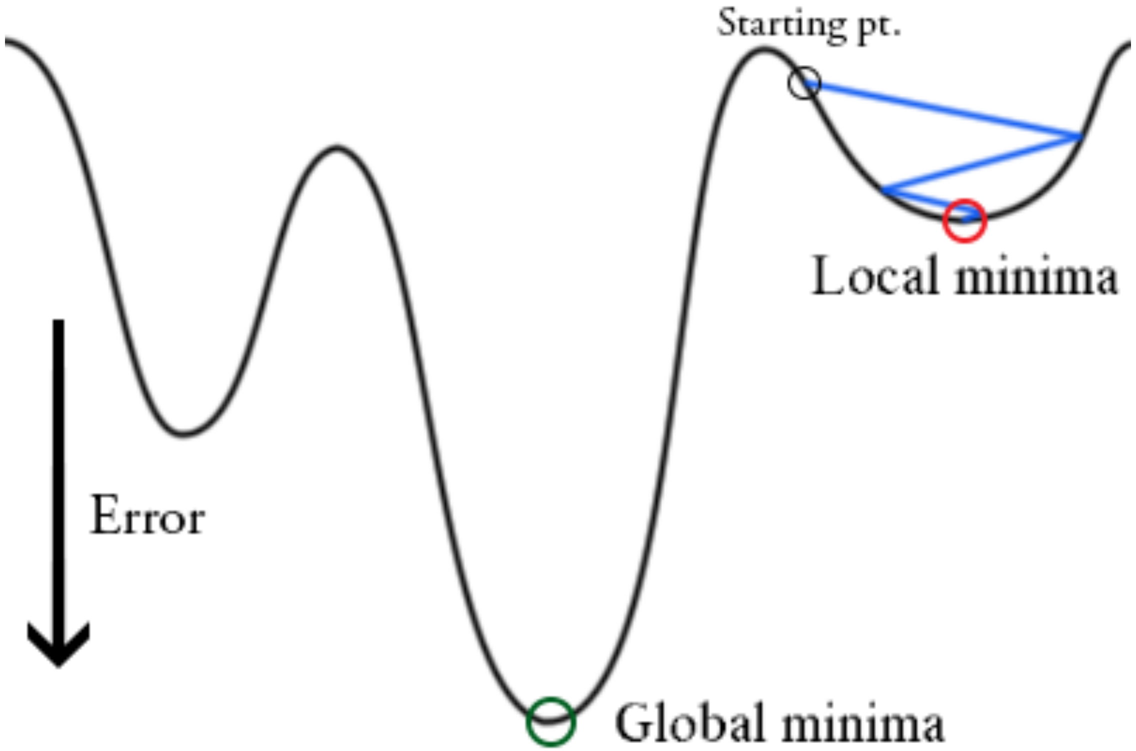


Функционал качества



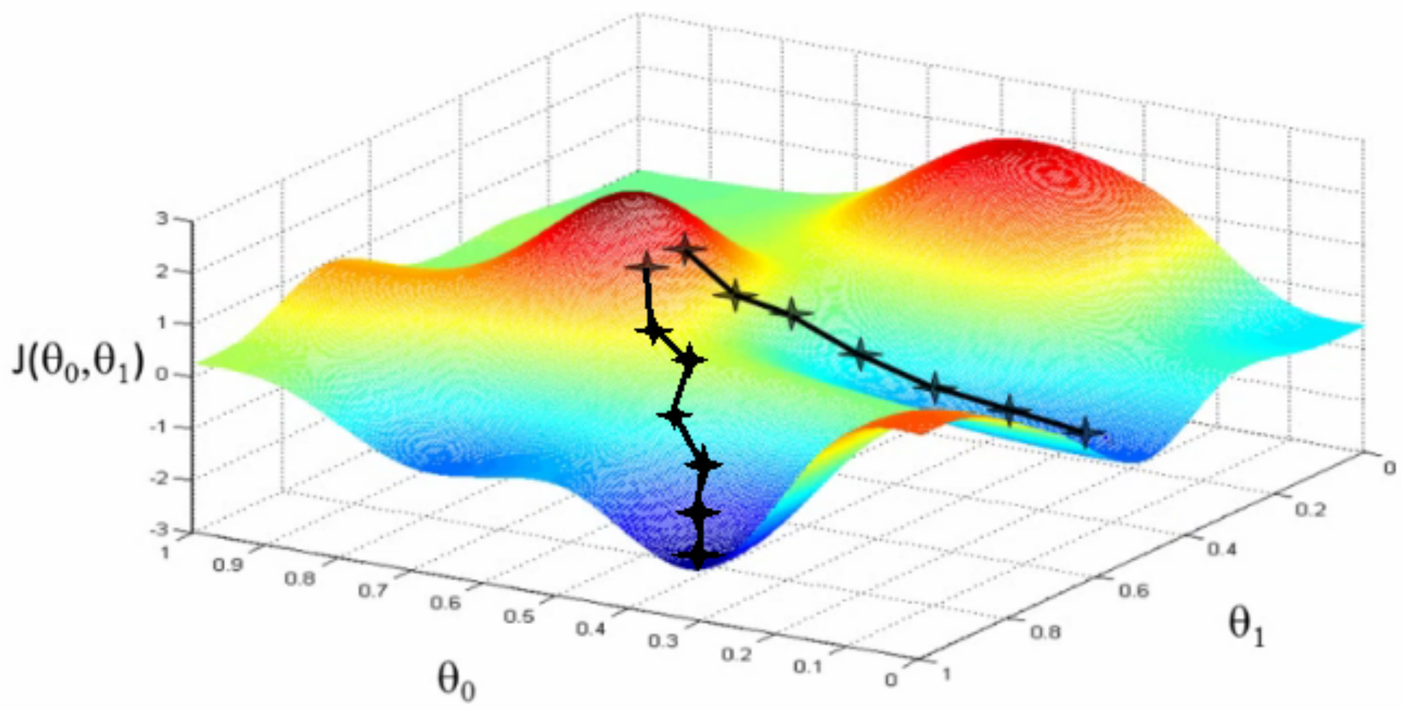
Локальные минимумы

- Градиентный спуск находит только локальные минимумы



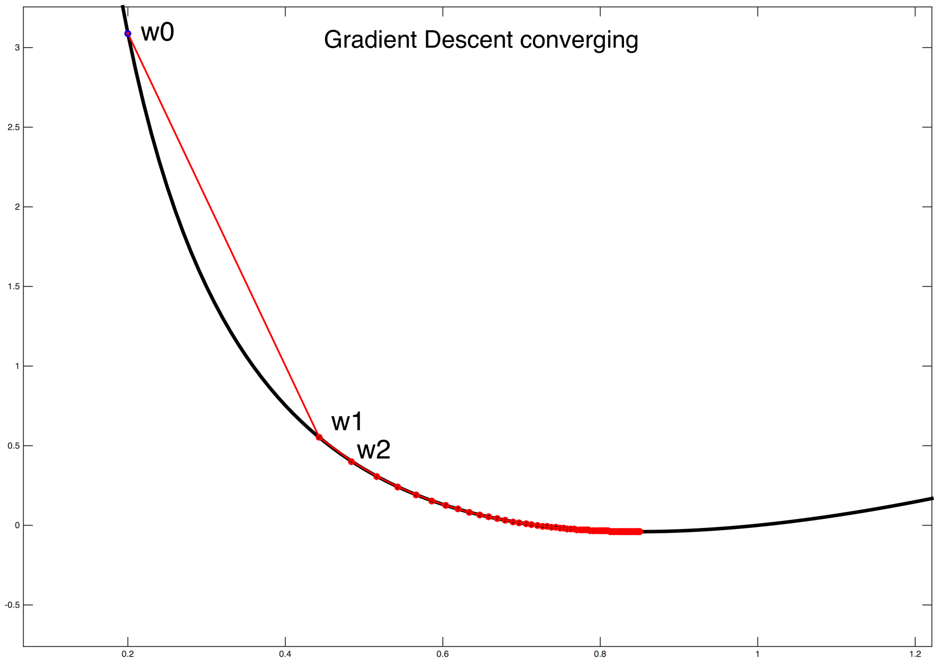
Локальные минимумы

- Результат зависит от начального приближения
- Мультистарт

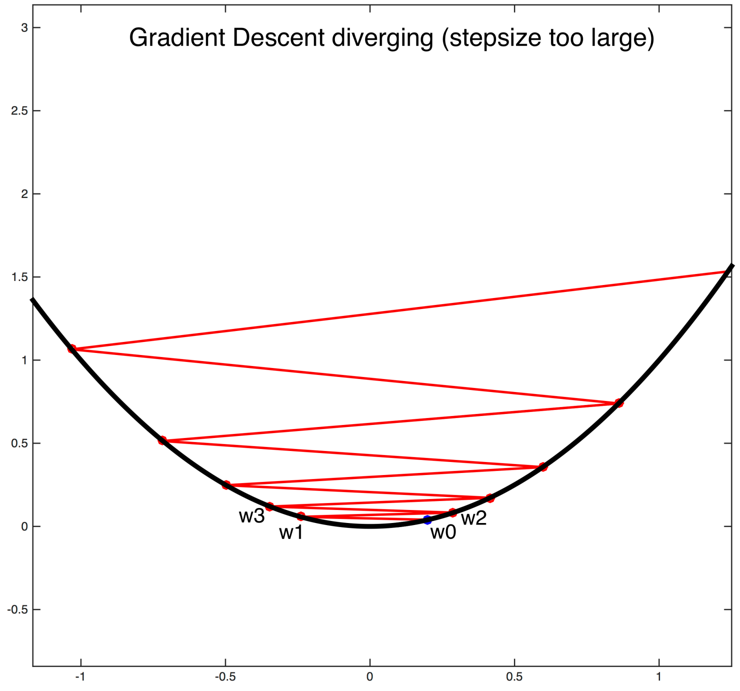


Размер шага

- Выбор размера шага η — искусство



Маленький шаг



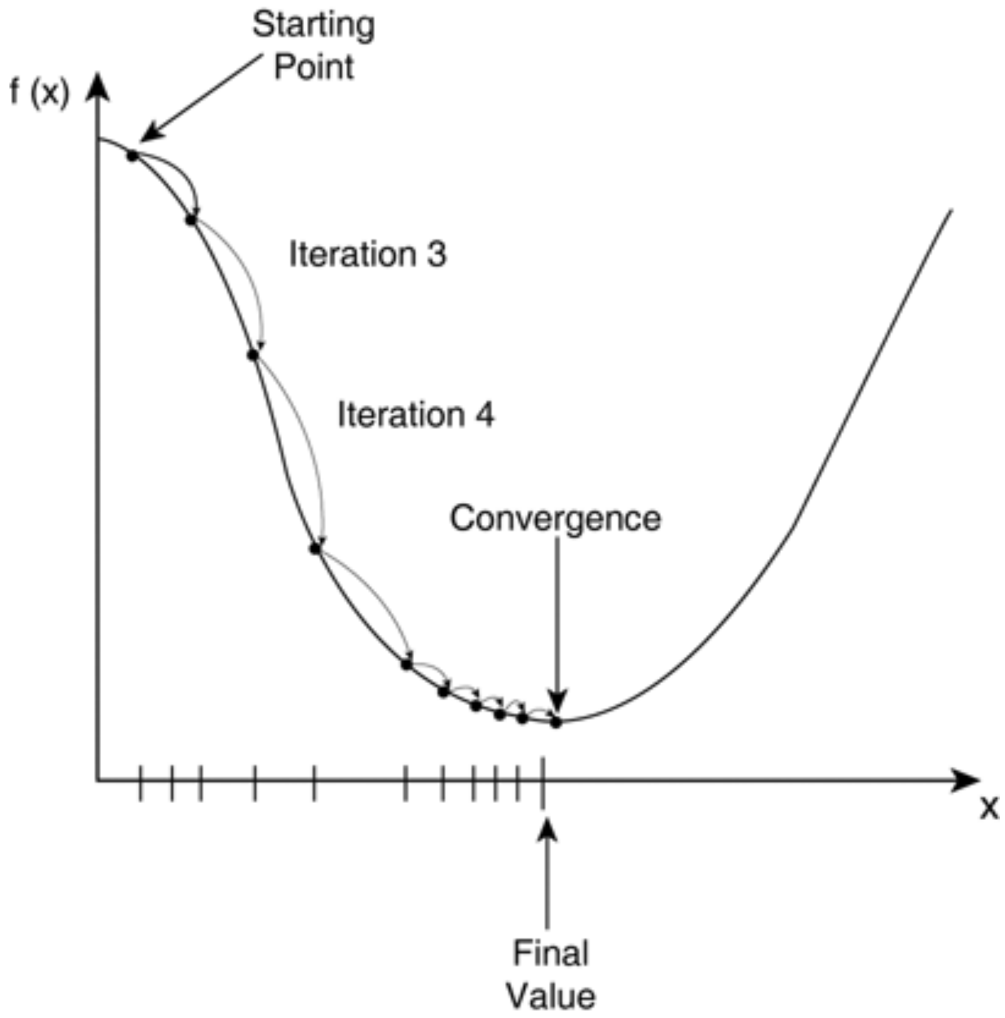
Большой шаг

Размер шага

- Маленький шаг — больше шансов на сходимость, но требуется больше итераций
- Большой шаг — есть риск отсутствия сходимости
- Наискорейший градиентный спуск:
$$\eta_t = \arg\min_{\eta} Q\left(w^{t-1} - \eta\, \nabla Q(w^{t-1})\right)$$
- Нужно делать одномерный поиск на каждой итерации

Размер шага

- Обычно пользуются эвристиками
- Чем ближе к минимуму, тем меньше надо шагать
- Неплохо работает: $\eta_t = \frac{1}{t}$
- Еще лучше: $\eta_t = \lambda \left(\frac{s}{s+t} \right)^p$, где λ, s, p — параметры



Системы линейных уравнений

- $Xw = y$
- Можно решать градиентным спуском следующую задачу:
$$\|Xw - y\|^2 \to \min_w$$
- Функционал выпуклый
- Если решение есть — минимальное значение равно нулю
- Если решения нет — найдем наилучшее приближение

Другие методы оптимизации

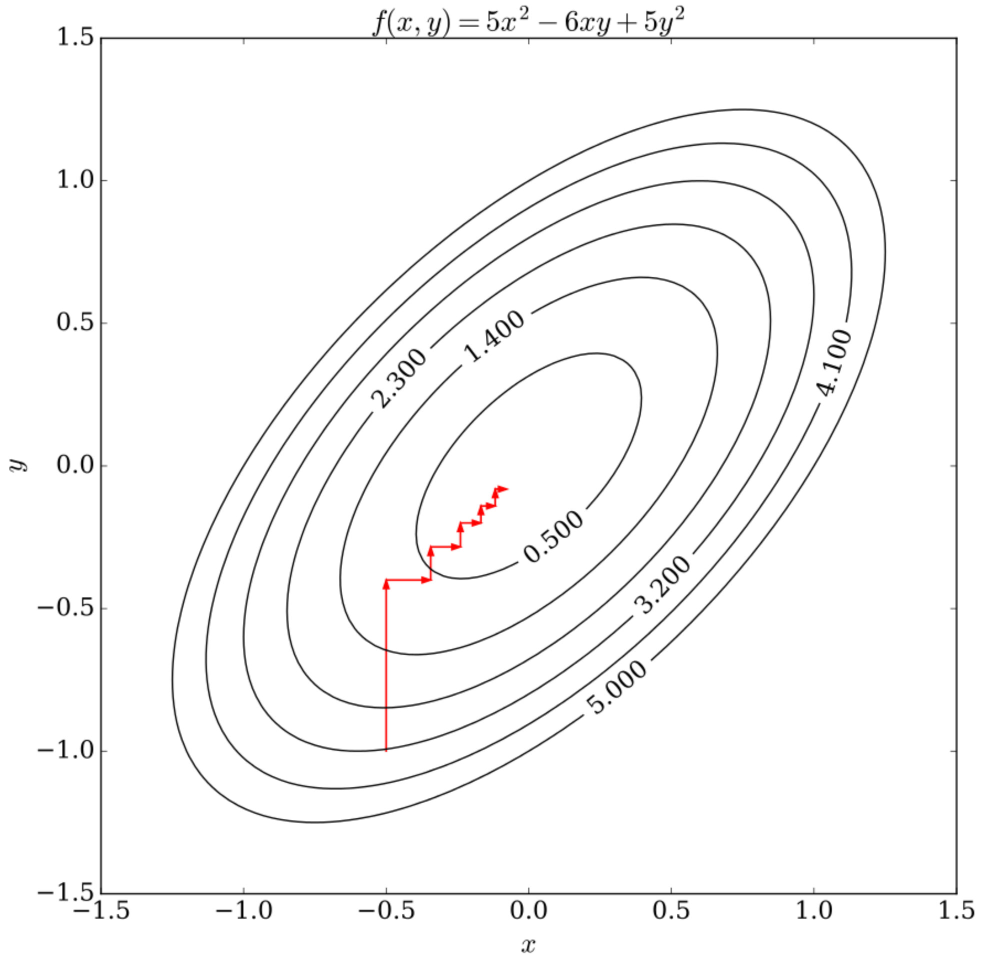
- Методы первого порядка — используют первые производные
  - Градиентный спуск
  - Стохастический градиентный спуск
  - Квазиньютоновские методы, BFGS
  - Stochastic Average Gradient, Nesterov momentum, …
- Методы второго порядка — используют вторые производные
  - Метод Ньютона
- Методы нулевого порядка — без производных
  - Покоординатный спуск
  - Стохастическая оптимизация

Покоординатный спуск

- По очереди меняем каждую координату
- Шаг по каждой координате — случайный, наискорейший, эвристический…

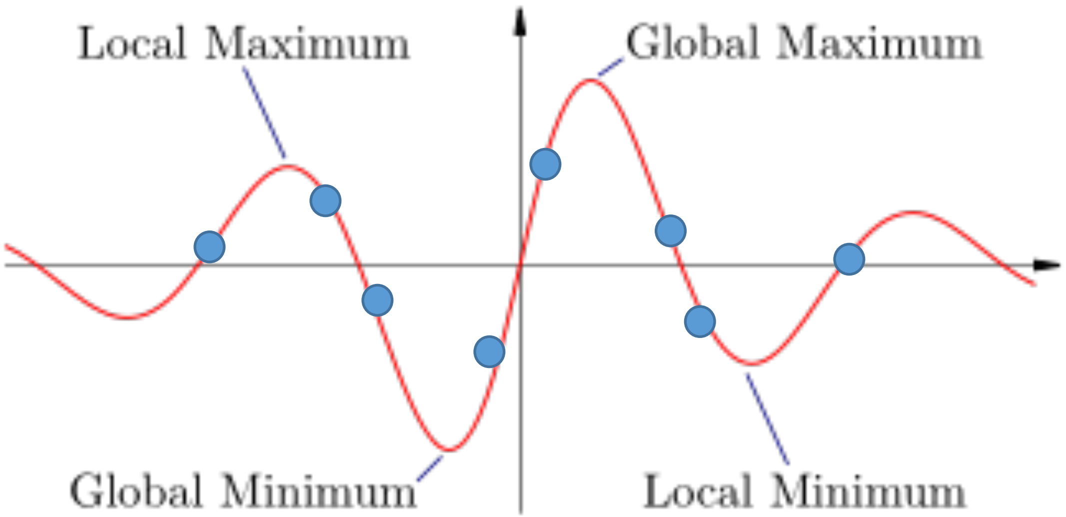
- Быстрые итерации, но может медленно сходиться
- Используется в методе опорных векторов (один из линейных)

Покоординатный спуск



Стохастическая оптимизация

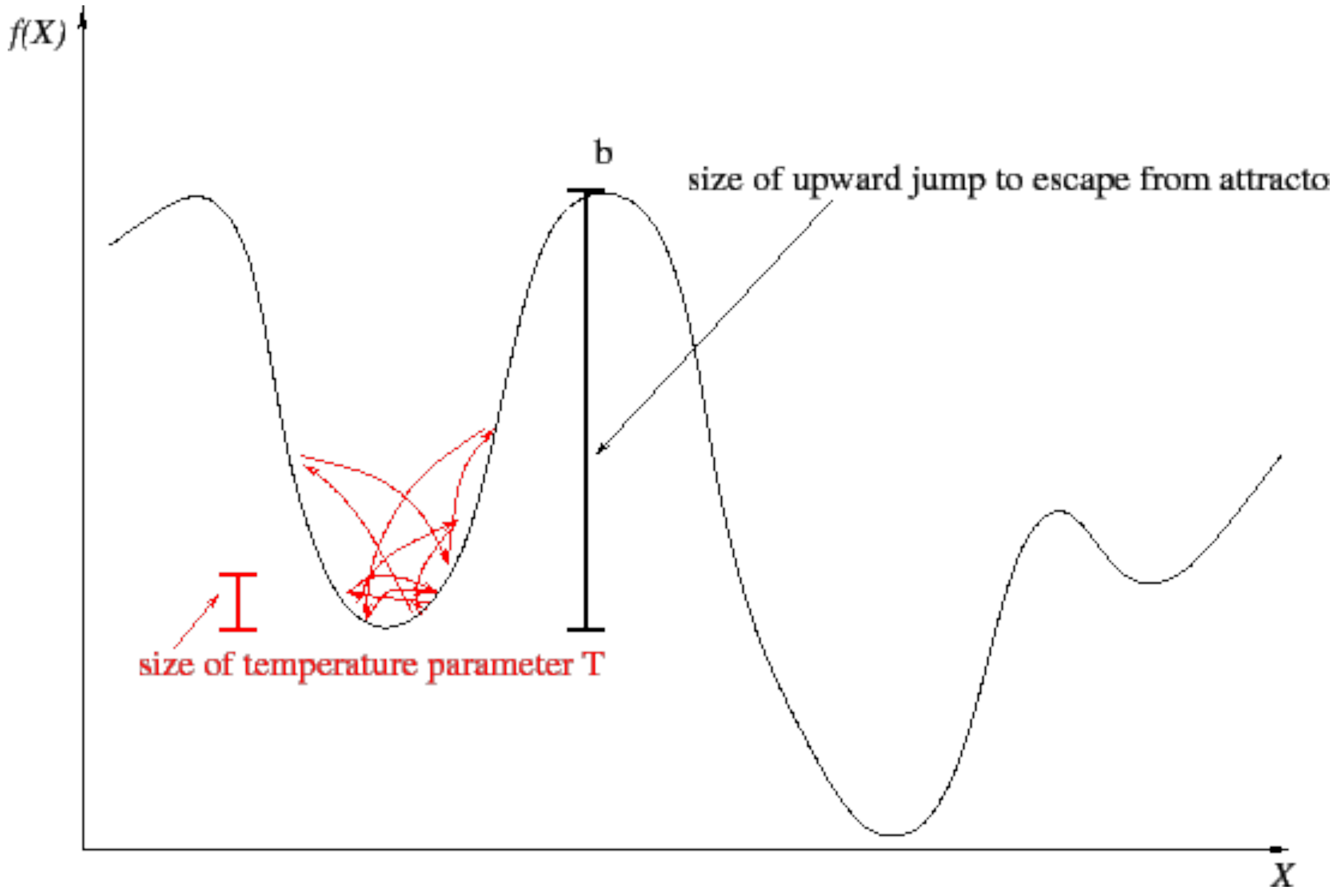
- Простейший алгоритм:
  - Генерируем N раз случайную точку
  - Выбираем ту, на которой значение функционала наименьшее
- Не самый лучший подход
- Нужно более направленной движение



Метод имитации отжига

- w^t — текущее приближение
- Генерируем кандидата w
- Если $Q(w) < Q(w^t)$
  - то переходим: $w^{t+1} = w$
- Если $Q(w) > Q(w^t)$
  - то переходим с вероятностью $\exp\left(-\frac{Q(w)-Q(w^t)}{c_t}\right)$

Метод имитации отжига



Обучение линейной регрессии

Задача оптимизации

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

- Гладкая функция
- Выпуклая функция
- Единственный минимум (не всегда)

Градиентный спуск

- Повторять до сходимости:

$$w^t = w^{t-1} - \eta \nabla Q(w^{t-1})$$

- Сходимость: $\|w^t - w^{t-1}\| < \varepsilon$

Градиент

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

Производные:

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

Нюансы

- Выбор длины шага η — пробуем разные значения
- Выборка должна быть масштабирована
- Признаки не должны коррелировать

Аналитическое решение

- Векторная запись MSE:

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

- Условие минимума:

$$\nabla Q(w, X) = 0$$

- Что, если попробуем решить эту систему уравнений?

Аналитическое решение

- Она решается аналитически!

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

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

Мультиколлинеарность

Объекты-признаки

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1000 & 5 & 3 & 4 \\ 9 & 9000 & 10 & 5 & 7.5 \\ 5 & 5000 & 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

- Задача предсказания прибыли магазина в следующем месяце
- Рассмотрим в качестве векторов столбцы матрицы (признаки)

Подозрительные зависимости

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1000 & 5 & 3 & 4 \\ 9 & 9000 & 10 & 5 & 7.5 \\ 5 & 5000 & 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

- Первый и второй признаки: $x_2 = 1000x_1$
- Первый — общий вес товаров в тоннах, второй — в килограммах

Подозрительные зависимости

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1000 & 5 & 3 & 4 \\ 9 & 9000 & 10 & 5 & 7.5 \\ 5 & 5000 & 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

- $x_5 = 0.5x_3 + 0.5x_4$
- Пятый — средняя прибыль за последние два месяца
- Третий и четвертый — прибыль в прошлом и позапрошлом месяце

Линейная зависимость

— один из векторов равен сумме с весами остальных векторов

- Это плохо:
  - Избыточная информация
  - Лишние затраты на хранение данных
  - Вредит некоторым методам машинного обучения

Линейная зависимость

- Пусть дан набор векторов $x_1, \dots, x_n$
- Они линейно зависимы, если
  - существуют такие числа $\beta_1, \dots, \beta_n$,
  - хотя бы одно из которых не равно нулю,
  - что сумма векторов с такими коэффициентами равна нулю

$$\beta_1 x_1 + \cdots + \beta_n x_n = 0$$

Мультиколлинеарность

- Наличие зависимостей между признаками
- Приводит к тому, что решений бесконечное число
- Далеко не все из них имеют хорошую обобщающую способность

Линейная зависимость

- Худший случай — линейно зависимые признаки
- Существуют такие $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d)$, что для любого объекта:

$$\alpha_1 x^1 + \dots + \alpha_d x^d = \langle \alpha, x \rangle = 0$$

Линейная зависимость

- Допустим, мы нашли решение w_*
- Модифицируем: $w_1 = w_* + t\alpha$
- (t — число)
- Ответ нового алгоритма на любом объекте:

$$\langle w_1, x\rangle = \langle w_* + t\alpha, x\rangle = \langle w_*, x\rangle + t\langle \alpha, x\rangle = \langle w_*, x\rangle$$

- w_1 — тоже решение!

Коррелирующие признаки

- Тоже плохо
- Сначала разберёмся с корреляцией

Коэффициент корреляции

$$\rho(\xi, \eta) = \frac{\mathbb{E}(\xi - \mathbb{E}\xi)(\eta - \mathbb{E}\eta)}{\sqrt{\mathbb{D}\xi\mathbb{D}\eta}}$$

Выборочная корреляция:

$$\rho(x, z) = \frac{\sum_{i=1}^{\ell}(x_i - \bar{x})(z_i - \bar{z})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{\ell}(x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^{\ell}(z_i - \bar{z})^2}}$$

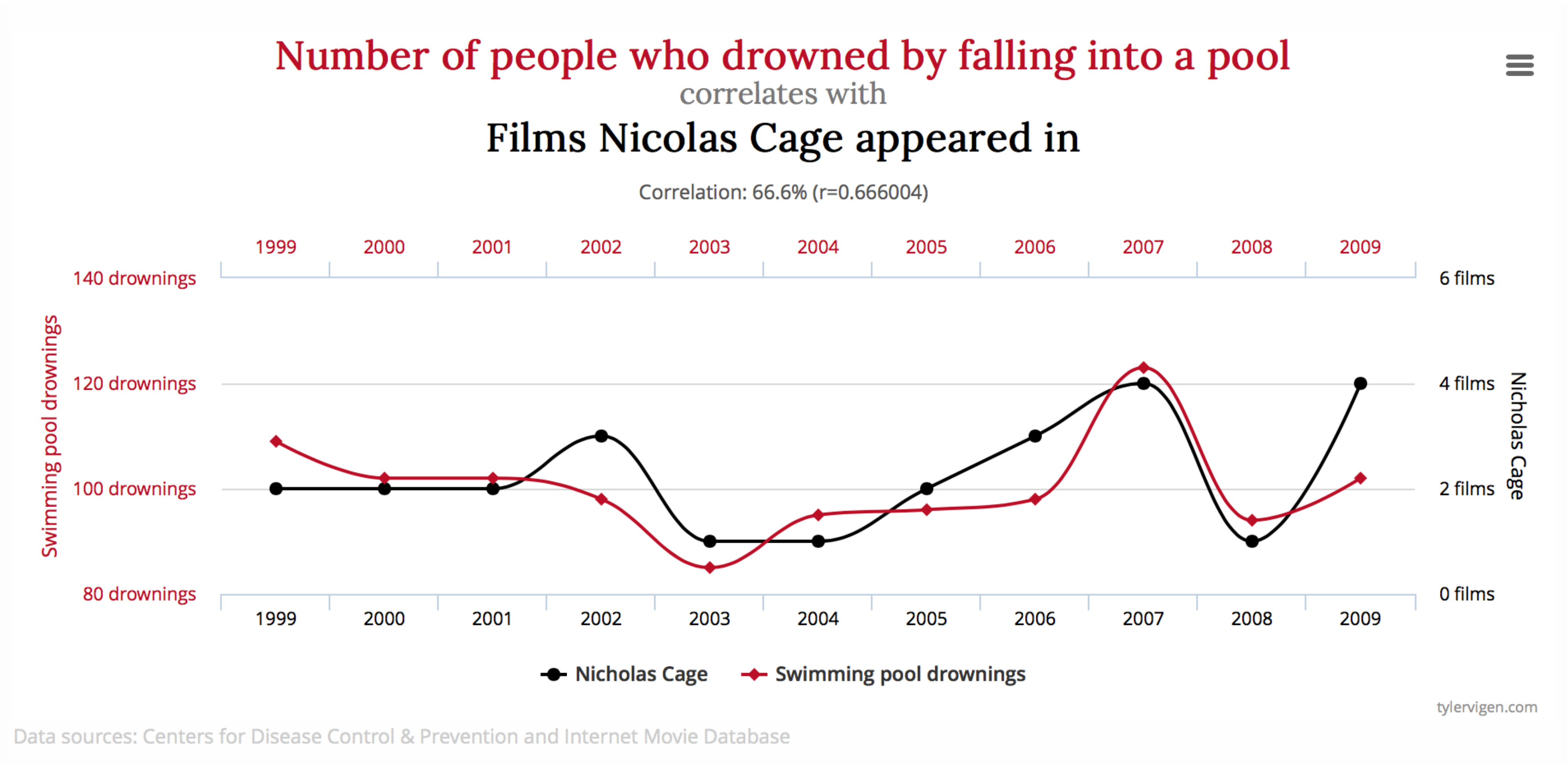
$$\bar{x} = \frac{1}{\ell}\sum_{j=1}^{\ell} x_j\,; \qquad \bar{z} = \frac{1}{\ell}\sum_{j=1}^{\ell} z_j$$

Коэффициент корреляции

$$\rho(x, z) = \frac{\sum_{i=1}^{\ell}(x_i - \bar{x})(z_i - \bar{z})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{\ell}(x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^{\ell}(z_i - \bar{z})^2}}$$

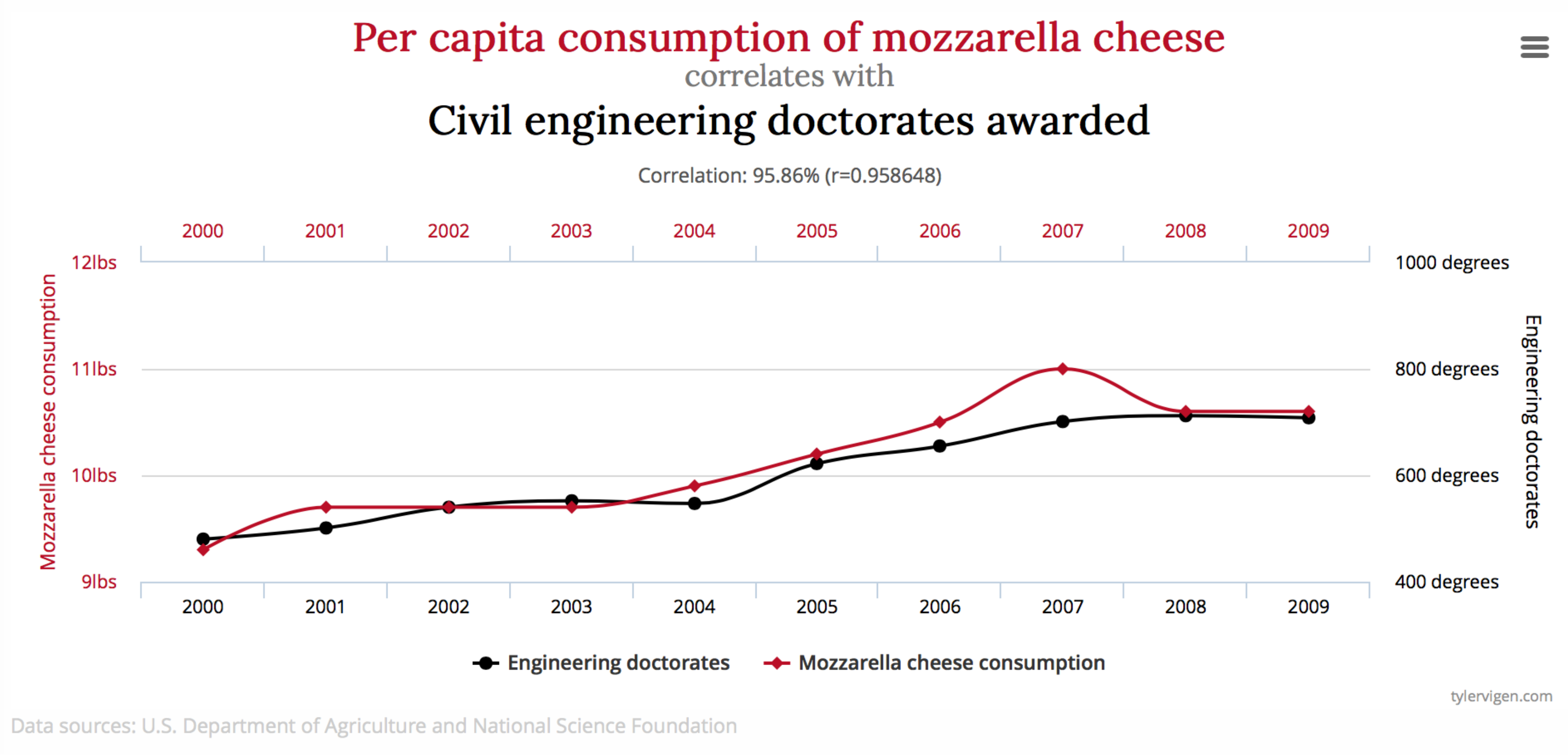
- $\rho(x, z) \in [-1, +1]$
- Очень грубо: чем ближе к +1 или -1, тем точнее выполнено уравнение
$$x = az + b$$
- Мера линейной зависимости

Пример



Number of people who drowned by falling into a pool
correlates with
Films Nicolas Cage appeared in
Correlation: 66.6% (r=0.666004)
1999
2000
2001
2002
2003
2004
2005
2006
2007
2008
2009
140 drownings
120 drownings
100 drownings
80 drownings
Swimming pool drownings
6 films
4 films
2 films
0 films
Nicholas Cage
Nicholas Cage
Swimming pool drownings
tylervigen.com
Data sources: Centers for Disease Control & Prevention and Internet Movie Database

Пример



Per capita consumption of mozzarella cheese
correlates with
Civil engineering doctorates awarded
Correlation: 95.86% (r=0.958648)
2000
2001
2002
2003
2004
2005
2006
2007
2008
2009
12lbs
11lbs
10lbs
9lbs
Mozzarella cheese consumption
1000 degrees
800 degrees
600 degrees
400 degrees
Engineering doctorates
Engineering doctorates
Mozzarella cheese consumption
tylervigen.com
Data sources: U.S. Department of Agriculture and National Science Foundation

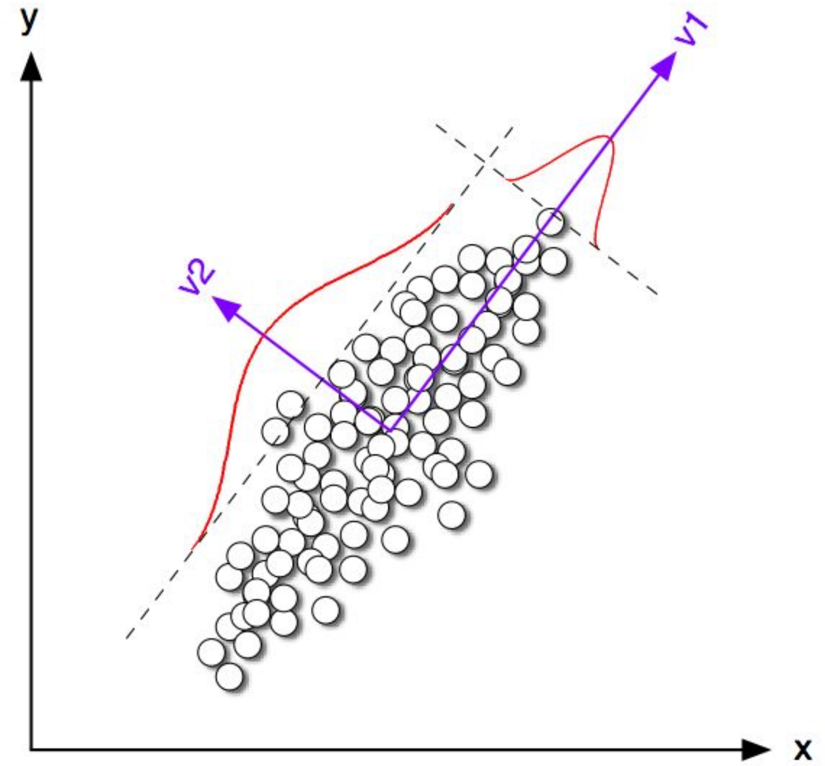
Распространённое заблуждение

- Может показаться, что из корреляции следует причинно-следственная связь
- Это не так!
- Корреляция означает, что события часто происходят вместе
- Но никак не следуют друг из друга

- Больше примеров: http://tylervigen.com/spurious-correlations

Коррелирующие признаки

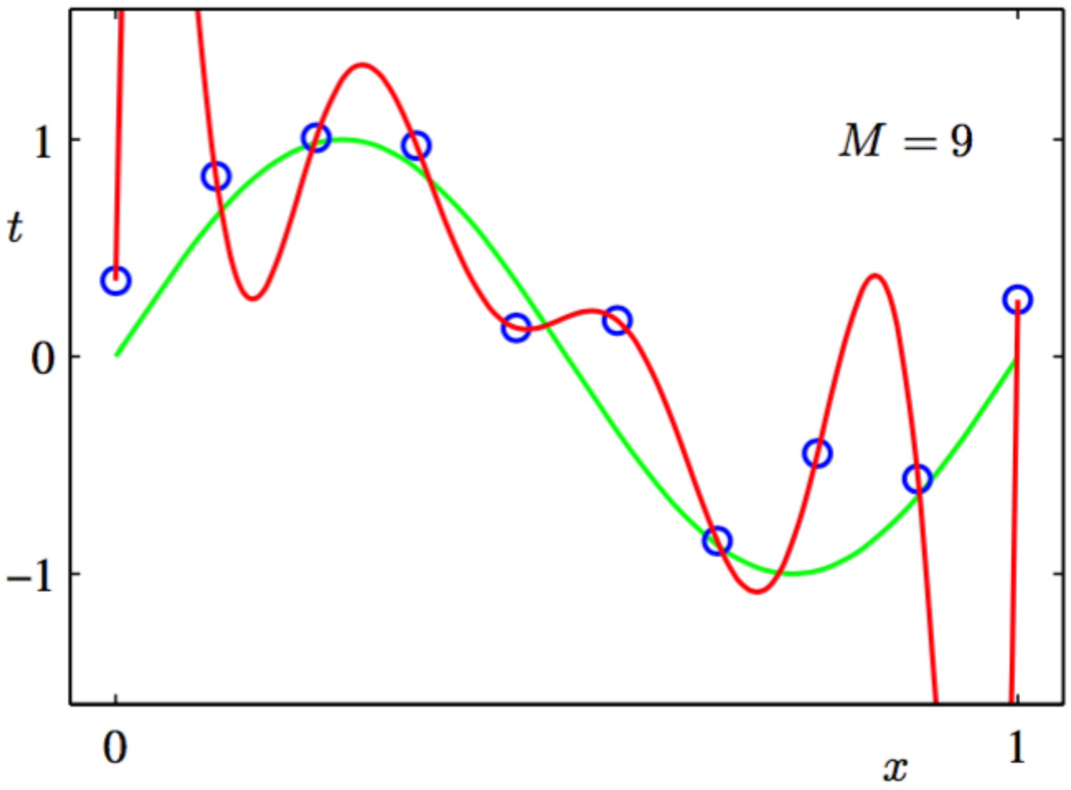
- Плохо, если есть коррелирующие признаки
- Решение: отбор признаков или их декорреляция
- В следующих лекциях



Переобучение и регуляризация

Пример

- Один признак x
- $a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + \cdots + w_9 x^9$



Пример

- Коэффициенты:

$$a(x) = 0.5 + 13458922x - 43983740x^2 + \cdots + 2740x^9$$

- 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!
- Функционал:

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

- Регуляризатор:

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

Регуляризация

- Регуляризованный функционал ошибки:

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

- Всё ещё гладкий и выпуклый

Коэффициент регуляризации

- λ — новый параметр, надо подбирать
- Высокий λ — простые модели
- Низкий λ — риск переобучения
- Нужно балансировать
- Подбор λ — с помощью кросс-валидации

Смысл регуляризации

- Минимизация регуляризованного функционала равносильна решению условной задачи:

$$\begin{cases} \dfrac{1}{\ell}\displaystyle\sum_{i=1}^{\ell}(\langle w, x_i\rangle - y_i)^2 \to \min_w \\ \|w\|^2 \le C \end{cases}$$

L_1-регуляризация

- L_1-регуляризатор:

$$\|w\|_1 = \sum_{j=1}^{d} |w_j|$$

- Регуляризованный функционал ошибки:

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\langle w, x_i \rangle - y_i)^2 + \lambda \|w\|_1 \to \min_w$$

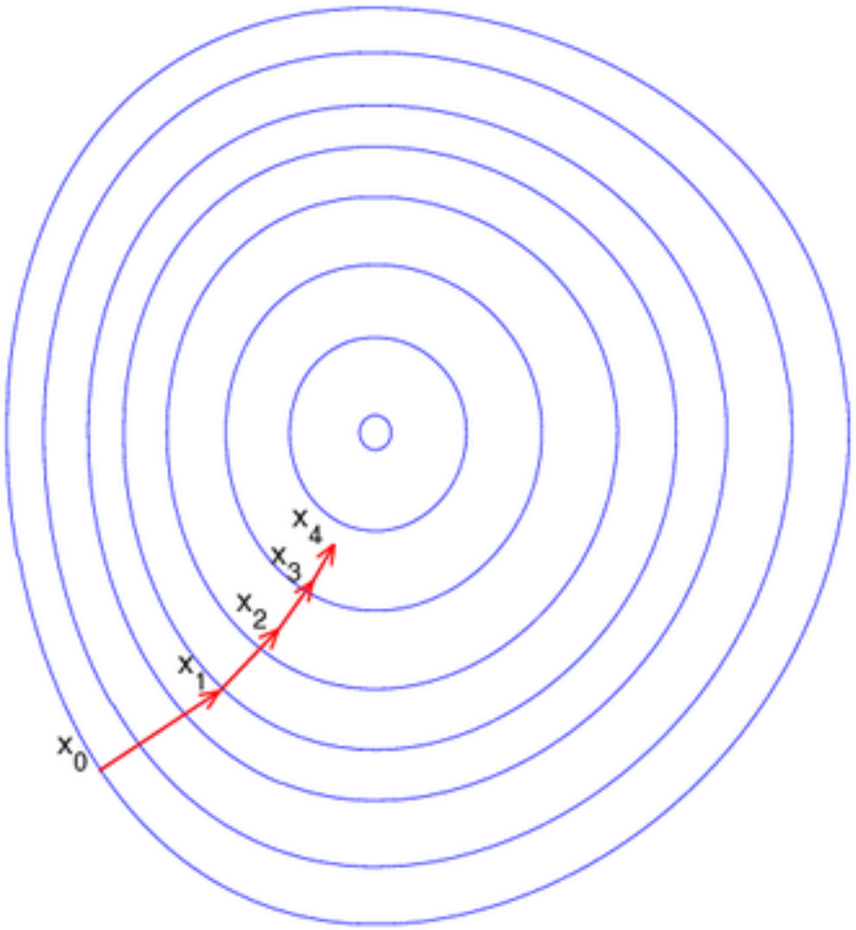
L_1-регуляризация

- Функционал становится негладким
- Сложнее оптимизировать
- Зато производится отбор признаков
- Часть весов в решении будут нулевыми

Масштабирование признаков

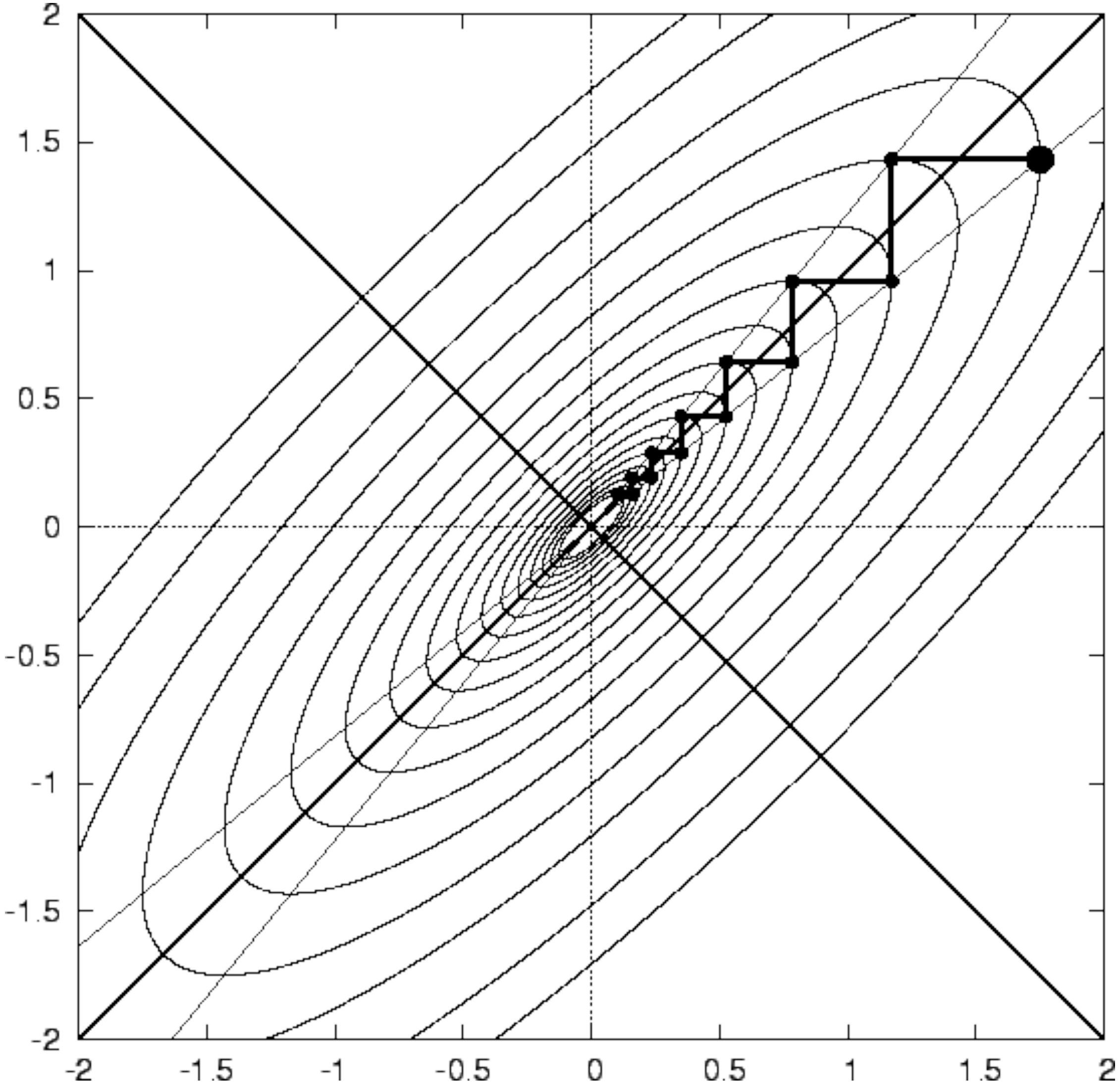
Масштабирование выборки

Хороший случай



Масштабирование выборки

Плохой случай



Масштабирование выборки

- Задача: одобрят ли заявку на грант?
- 1-й признак: сколько успешных заявок было до этого у заявителя
- 2-й признак: год рождения заявителя

- Масштаб: единицы и тысячи

- Все признаки должны иметь одинаковый масштаб

Масштабирование выборки

- 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 выборки

- Отмасштабируем j-й признак
- Вычтем из каждого значения признака среднее и поделим на стандартное отклонение:

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

Резюме

- Градиентный спуск — универсальный инструмент обучения дифференцируемых моделей
- Линейные зависимости и корреляции в признаках приводят к проблемам при обучении
- Регуляризация — способ борьбы с переобучением
- Масштабирование помогает улучшить сходимость градиентных методов