

Spis treści

1 Wstęp	1
1.1 Notacja	2
1.2 Uczenie nadzorowane	2
1.3 Uczenie nienadzorowane	3
1.4 Praktyka uczenia maszynowego	4
1.4.1 Przygotowanie danych	4
1.4.2 Metryki do oceny regresji i klasyfikacji	5
1.4.3 Tuning hiperparametrów i walidacja skrośna	9
2 Probabilistyka	10
2.1 Zmienne losowe	10
2.2 Ważne rozkłady jednowymiarowe	13
2.3 Wielowymiarowy rozkład normalny	15
2.4 Wnioskowanie statystyczne	17
2.5 Liczby losowe w komputerze	19
2.6 Monte Carlo	20
2.6.1 Algorytm Importance Sampling	21
2.6.2 Algorytm Metropolisa–Hastingsa	22
2.7 Estymator jądrowy gęstości	25
3 Podstawy statystycznego uczenia maszynowego	26
3.1 Regresja liniowa	26
3.2 Regresja bayesowska	28
3.3 Regularyzacja	29
3.4 Regresja kwantylowa	30
3.5 Regresja GAM	31
3.6 Procesy gaussowskie	32
3.7 Naiwny klasyfikator bayesowski	36
3.8 Klasyfikator najbliższych sąsiadów	37
3.9 Regresja logistyczna	38
3.10 Regresja softmax	40
3.11 Resampling	42
3.12 Selekcja cech w modelach liniowych	44

1 Wstęp

Celem tych notatek jest zwięźle przedstawienie kompletu zagadnień związanych uczeniem maszynowym. Zaczynamy od minimalnego zbioru wymaganych tematów z zakresu rachunku prawdopodobieństwa i statystyki matematycznej. Następnie opisujemy podstawowe metody uczenia maszynowego z probabilistycznego punktu widzenia. W każdej części staramy się przedstawiać opisywane tematy w sposób minimalistyczny, skupiając się głównie na matematycznej i ideowej, a nie implementacyjnej stronie zagadnień. Liczymy, iż takie podejście zapewni odpowiednio głębokie zrozumienie

tematu, dzięki któremu dalsze studiowanie całej gamy specyficznych technicznych tematów nie sprawi żadnego problemu.

1.1 Notacja

W dalszej części tekstu będziemy stosować przedstawioną tutaj pokrótce notację. Wektory, które traktujemy jako elementy przestrzeni \mathbb{R}^d ze standardowo zdefiniowanymi operacjami dodawania i mnożenia przez skalar będziemy oznaczali wytłuszczonymi małymi lub wielkimi literami np. \mathbf{x} , \mathbf{X} . Wielkość \mathbf{x}^i będzie oznaczać dany element wektora (w tym przypadku i -ty element \mathbf{x}). Wielkość \mathbf{x}_μ będzie oznaczać pewien (w tym przypadku μ -ty) element pewnego zbioru wektorów. Macierze oraz wielowymiarowe tablice (zwane również niefortunnie tensorami) będziemy oznaczać (jedyynie) wytłuszczonymi wielkimi literami np. \mathbf{X} , Φ . Analogicznie jak w przypadku wektorów przez $\mathbf{X}^{i_1 i_2 \dots i_k}$ będziemy oznaczać (i_1, i_2, \dots, i_k) element k -wymiarowej tablicy \mathbf{X} , natomiast \mathbf{X}_μ będzie oznaczać μ -ty element pewnego zbioru tablic.

1.2 Uczenie nadzorowane

Uczenie nadzorowane jest jednym z dwóch podstawowych (pomijając tzw. uczenie ze wzmocnieniem) paradygmatów w uczeniu maszynowym, którego ogólną ideą jest zdefiniowanie pewnego modelu odwzorowującego dane wejściowe na wyjściowe predykcje. Zakładamy w nim, iż mamy dostępny zbiór obserwacji $\mathcal{X} = \{y_i(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^n$, gdzie $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ nazywamy wektorem cech a $y(\mathbf{x})$ jest prawidłową wartością odpowiedzi dla tych cech. Dwa najbardziej podstawowe przypadki zagadnień tego rodzaju to regresja oraz klasyfikacja. W przypadku regresji zmienna y przyjmuje wartości z pewnego podzbioru liczb rzeczywistych. W przypadku klasyfikacji zmienna y przyjmuje wartości ze skończonego zbioru kategorii, przy czym wartości z tego zbioru nie powinny posiadać naturalnej tj. wynikającej z natury problemu, relacji porządku.

W jaki sposób tworzymy model odwzorowujący \mathbf{x} na y ? W dalszych paragrafach poznamy różne metody, ale najczęściej modelem jest pewna rodzina funkcji postaci $\phi(\mathbf{x}; \mathbf{w})$ parametryzowana skończoną liczbą parametrów, które możemy łącznie zapisać jako pewien wektor \mathbf{w} . Aby znaleźć parametry \mathbf{w} , dzięki którym dla konkretnego zagadnienia model będzie zadowalająco odwzorowywał cechy na predykcje (innymi słowy aby nauczyć model) wprowadzamy dodatkowo funkcjonal kosztu (z ang. *loss function*) $L(\mathcal{X}; \mathbf{w})$, który kwantyfikuje odpowiedzi modelu ϕ w stosunku do znanych prawidłowych odpowiedzi y dla danych ze zbioru \mathcal{X} . Najczęściej ma on

postać

$$L(\mathcal{X}; \mathbf{w}) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log p(y_i(\mathbf{x}_i) | \mathbf{w}) ,$$

gdzie $p(y(\mathbf{x}) | \mathbf{w})$ jest warunkową gęstością prawdopodobieństwa danej obserwacji $y(\mathbf{x})$ warunkowaną przez wartość parametrów \mathbf{w} (oczywiście gęstość ta zależy od estymowanych parametrów \mathbf{w} przez funkcję $\phi(\mathbf{x}; \mathbf{w})$). Do powyższego funkcjonału możemy również dodawać tzw. człony regularyzujące (z ang. *regularizers*). Trening modelu polega wówczas na znalezieniu parametrów \mathbf{w}^* , które minimalizują funkcjonał kosztu na zbiorze treningowym \mathcal{X}

$$\mathbf{w}^* = \arg \min_{\mathbf{w}} L(\mathcal{X}; \mathbf{w}) .$$

Zauważmy, że takie podejście ma jedną zasadniczą wadę – istotnie nie interesuje nas tak naprawdę, jak model radzi sobie na zbiorze treningowym (tzn. zagadnienie uczenia jest czymś więcej niż numeryczną minimalizacją funkcji), tylko jak będzie radził sobie na nowych, niewidzianych wcześniej danych (zależy nam przede wszystkim na generalizacji). Sytuację, w której model bardzo dobrze modeluje dane w zbiorze treningowym, ale słabo radzi sobie na nowych danych nazywamy przeuczeniem lub nadmiernym dopasowaniem (z ang. *overfitting*). Sytuację, w której model słabo radzi sobie zarówno na zbiorze treningowym, jak i na nowych danych nazywamy niedouczeniem lub niedopasowaniem (z ang. *underfitting*). Występowanie *overfittingu* i *underfittingu* jest powiązane z pojemnością (z ang. *capacity*) modelu. Złożony model o dużej pojemności potrafi dopasować się do bardzo skomplikowanych obserwacji (jest elastyczny), ale istnieje ryzyko jego przeuczenia (mówimy wówczas o *high variance*). Dla prostego modelu o małej pojemności istnieje z kolei ryzyko, iż nie ma on wystarczająco ekspresywności (mówimy wówczas o *high bias*).

1.3 Uczenie nienadzorowane

W przypadku uczenia nienadzorowanego naszym celem nie jest znalezienie modelu odwzorowującego cechy na predykcje. Chcemy raczej zrozumieć wewnętrzną strukturę danych oraz odkryć zależności między zmiennymi lub grupami zmiennych. Modele tego rodzaju znajdują zastosowanie w analizie biznesowej, gdzie pozwalają, chociażby na analizę ważności poszczególnych wskaźników, czy wizualizację wysoko-wymiarowych danych.

1.4 Praktyka uczenia maszynowego

W dalszej części skupiamy się przede wszystkim na matematycznej stronie prezentowanych zagadnień, ale należy pamiętać, iż dowolną próbę wdrożenia modelu uczenia maszynowego należy zacząć od dokładnej inspekcji danych, dla których przygotowujemy ów model („become one with the data”, A. Karpathy), a zakończyć dogłębną analizą metryk pozwalających na ewaluację wytrenowanego modelu. Warunkiem koniecznym udanego wdrożenia modelu jest więc odpowiednie zebranie, analiza i przygotowanie danych, które trafiają następnie jako wejście do modelu ML, a następnie odpowiedni dobór i dogłębną analizą wyników ewaluacji modelu. W tym paragrafie po krótko opisujemy elementarne praktyki, o których należy pamiętać przy wdrażaniu modeli ML.

1.4.1 Przygotowanie danych

Kluczem do uzyskania dobrych wyników przy korzystaniu z algorytmów uczenia maszynowego jest odpowiednie przygotowanie danych (z ang. *pre-processing*). Typowo preprocessing składa się z:

- eksploracji danych oraz wstępnego czyszczenia, w szczególności usunięcia jawnych wartości odstających (z ang. *outliers*) oraz cech posiadających zbyt dużo wartości brakujących;
- analizy rozkładu zmiennej docelowej oraz ewentualnej transformacji logarymicznej, która poprawia stabilność numeryczną, gdy przewidywane wartości są dużymi dodatnimi liczbami rzeczywistymi, zmienia dziedzinę zmiennej objaśnianej z \mathbb{R}_+ na \mathbb{R} oraz dodatkowo jest przykładem transformacji stabilizującej wariancję;
- podziału zbioru na część treningową oraz testową;
- dokonania skalowania i imputacji brakujących wartości cech (metody `.fit()` wywołujemy jedynie dla zbioru treningowego);
- usunięcia silnie skorelowanych cech;
- zakodowania wartości kategorycznych za pomocą tzw. *one-hot encoding* pamiętając o *dummy variable trap* – jedną z k kategorii kodujemy za pomocą wektora *one-hot* długości $n - 1$, aby uniknąć zależności liniowej między cechami (opcja `drop="first"` w `OneHotEncoder` w `scikit-learn`);

- wykonania feature engineering – dodania wielomianów cech do naszych danych lub skonstruowania innych cech (np. cech określających miesiąc, dzień itp.).

Podział zbioru na część treningową i testową jest najważniejszym etapem preprocessingu. Zbiór testowy wydzielamy, aby po wytrenowaniu modelu sprawdzić, jak poradzi on sobie na nowych, niewidzianych wcześniej danych. Powinniśmy go traktować jako dane, które będziemy w przyszłości dostawać po wdrożeniu modelu do realnego systemu. Takie dane również będziemy musieli przeskalować, zakodować itp., ale parametry potrzebne do wykonania tych transformacji możemy wziąć jedynie z dostępnego wcześniej zbioru treningowego. Wykorzystanie danych testowych w procesie treningu to *błąd wycieku danych* (z ang. *data leakage*). Skutkuje on niepoprawnym, nadmiernie optymistycznym oszacowaniem jakości modelu.

1.4.2 Metryki do oceny regresji i klasyfikacji

Zasadniczo, aby ocenić predykcje modelu używamy odpowiednich metryk, których wartości określają jak dobry jest model.

W przypadku regresji najczęściej używanymi metrykami są RMSE (z ang. *Root Mean Squared Error*) oraz MAE (z ang. *Mean Absolute Error*) zdefiniowane odpowiednio jako

$$\text{RMSE} := \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}, \quad \text{MAE} := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|.$$

Metryki te mają jednakową jednostkę jak predykcje. Jeśli chcielibyśmy mieć liczbę względną określającą jakość modelu to mamy do dyspozycji metryki MAPE (z ang. *Mean Absolute Percentage Error*) oraz SMAPE (z ang. *Symmetric Mean Absolute Percentage Error*) zdefiniowane odpowiednio jako

$$\text{MAPE} := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right|, \quad \text{SMAPE} := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|y_i - \hat{y}_i|}{|y_i| + |\hat{y}_i|}.$$

Obie te metryki mają zakres od 0 do 1, przy czym niższa wartość oznacza lepszy model. Metryki te mają jednak szereg problemów, z których najważniejsze to: problemy, gdy wartości są bliskie 0, asymetryczne traktowanie predykcji za dużych oraz za małych. Z tych powodów znacznie lepszą względną metryką jest MASE (z ang. *Mean Absolute Scaled Error*)

$$\text{MASE} := \frac{\sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|}{\sum_{i=1}^n |y_i - \bar{y}|},$$

gdzie $\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$. Metryka MASE jest zatem względnym błędem MAE jaki popełnia nasz model w stosunku do modelu naiwnego, który przewiduje zawsze wartość średnią.

W przypadku zadania klasyfikacji binarnej naszym celem dla danego wektora cech jest zwrócenie jednej z dwóch klas, które będziemy nazywać klasą pozytywną i negatywną. O ile w przypadku regresji pomiar jakości modelu był całkiem prosty, o tyle w przypadku klasyfikacji sytuacja jest nieco bardziej skomplikowana. Zauważmy bowiem, iż mamy 4 możliwości odpowiedzi klasyfikatora

- *True Positive (TP)* – poprawnie zaklasyfikowaliśmy klasę pozytywną jako pozytywną
- *True Negative (TN)* – poprawnie zaklasyfikowaliśmy klasę negatywną jako negatywną
- *False Positive (FP)* – niepoprawnie zaklasyfikowaliśmy klasę negatywną jako pozytywną
- *False Negative (FN)* – niepoprawnie zaklasyfikowaliśmy klasę pozytywną jako negatywną

Na podstawie ilości TP, TN, FP i FN w zbiorze testowym możemy wykreślić tzw. *macierz pomyłek* (z ang. *confusion matrix*) pokazującą ilość każdej z możliwości. Następnie możemy obliczyć różne stosunki tych wartości, aby uzyskać różne metryki. Najbardziej standardowymi są *accuracy*, *precision* oraz *recall* (lub inaczej *sensitivity*) zdefiniowane jako

$$\text{Accuracy} := \frac{\text{TP} + \text{TN}}{n}, \quad \text{Precision} := \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FP}}, \quad \text{Recall} := \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FN}}.$$

Wartość *accuracy* mówi po prostu jaki stosunek przykładów został poprawnie zaklasyfikowany (zauważmy tutaj, że $\text{TP} + \text{TN} + \text{FP} + \text{FN} = n$). Nie jest to jednak dobra miara jakości, gdy nasz zbiór jest niezbalansowany, tj. zawiera więcej przykładów określonej klasy.

Wartość *precision* określa jak pewny jest klasyfikator przy wykrywaniu klasy pozytywnej, natomiast *recall* mówi o tym jak dobrze klasyfikator „wylawia” przykłady pozytywne. Zauważmy jednak, iż nie możemy stosować żadnej z tych metryk w odosobnieniu. Istotnie klasyfikator, który zwraca zawsze klasę pozytywną ma maksymalny *recall*, a klasyfikator, który zwraca zawsze klasę negatywną ma nieokreślony *precision* (i jest oczywiście beznadziejnym klasyfikatorem). Musimy więc zawsze ewaluować model na obu tych metrykach i jedynie dobry wynik obu z nich mówi o jakości klasyfikatora. Oczywiście czasami chcielibyśmy określić jakość modelu za pomocą

		Predicted condition			
		Predicted Positive (PP)	Predicted Negative (PN)	Informedness, bookmaker informedness (BM) = TPR + TNR - 1	Prevalence threshold (PT) $= \frac{\sqrt{TPR \times FPR} - FPR}{TPR - FPR}$
Actual condition	Positive (P) [a]	True positive (TP), hit [b]	False negative (FN), miss, underestimation	True positive rate (TPR), recall, sensitivity (SEN), probability of detection, hit rate, power $= \frac{TP}{P} = 1 - FNR$	False negative rate (FNR), miss rate type II error [c] $= \frac{FN}{P} = 1 - TPR$
	Negative (N) [d]	False positive (FP), false alarm, overestimation	True negative (TN), correct rejection [e]	False positive rate (FPR), probability of false alarm, fall-out type I error [f] $= \frac{FP}{N} = 1 - TNR$	True negative rate (TNR), specificity (SPC), selectivity $= \frac{TN}{N} = 1 - FPR$
	Prevalence (ACC) $= \frac{P}{P+N}$	Positive predictive value (PPV), precision $= \frac{TP}{PP} = 1 - FDR$	False omission rate (FOR) $= \frac{FN}{PN} = 1 - NPV$	Positive likelihood ratio (LR+) $= \frac{TPR}{FPR}$	Negative likelihood ratio (LR-) $= \frac{FNR}{TNR}$
	Accuracy (ACC) $= \frac{TP+TN}{P+N}$	False discovery rate (FDR) $= \frac{FP}{PP} = 1 - PPV$	Negative predictive value (NPV) $= \frac{TN}{PN} = 1 - FOR$	Markedness (MK), deltaP (Δp) $= PPV + NPV - 1$	Diagnostic odds ratio (DOR) $= \frac{LR+}{LR-}$
	Balanced accuracy (BA) $= \frac{TPR + TNR}{2}$	F_1 score $= \frac{2 \cdot PPV \times TPR}{PPV + TPR}$ $= \frac{2 \cdot TP}{2 \cdot TP + FP + FN}$	Fowkes-Mallows index (FM) $= \sqrt{PPV \times TPR}$	Matthews correlation coefficient (MCC) $= \sqrt{TPR \times TNR \times PPV \times NPV} - \sqrt{FNR \times FPR \times FOR \times FDR}$	Threat score (TS), critical success index (CSI), Jaccard index $= \frac{TP}{TP + FN + FP}$

Rysunek 1: Macierz pomyłek oraz możliwe metryki oceny jakości klasyfikatora. Źródło: en.wikipedia.org/wiki/Confusion_matrix

jednej liczby, a niekoniecznie sprawdzać zawsze macierz pomyłek (choć jest to bardzo użyteczne) lub podawać wartości dwóch metryk. Metryką, która łączy precision i recall jest F_β -score zdefiniowany jako

$$F_\beta := (1 + \beta^2) \frac{\text{Precision} \cdot \text{Recall}}{\beta^2 \cdot \text{Precision} + \text{Recall}},$$

gdzie β określa ile razy bardziej ważny jest recall od precision. Typowo używa się F_1 -score

$$F_1 = 2 \frac{\text{Precision} \cdot \text{Recall}}{\text{Precision} + \text{Recall}}.$$

Wiele klasyfikatorów oprócz twardych predykcji zwraca również rozkład prawdopodobieństwa nad klasami. W przypadku klasyfikacji binarnej jest to oczywiście rozkład zero-jedynkowy z parametrem p określającym prawdopodobieństwo klasy pozytywnej dla danego wektora cech. Standardowo oczywiście twardą predykcją jest ta z klas, która ma większe prawdopodobieństwo, czyli (co równoważne) predykcją jest klasa pozytywna jeśli $p > 0.5$. W niektórych problemach chcemy jednak zmienić ten próg

i dokonać tzw. *threshold tuning*. Wykresem, który pozwala na dokonanie tuningu progu jest *krzywa ROC* (z ang. *Receiver Operatic Characteristic curve*), która jest krzywą parametryczną wyznaczoną przez punkty $(FPR(\text{threshold}), TPR(\text{threshold}))$ dla progów z zakresu $[0; 1]$, gdzie

$$TPR := \frac{TP}{TP + FN}, \quad FPR := \frac{FP}{FP + TN}.$$

Metryką niezależną od wybranego progu jest tzw. *AUROC* (z ang. *Area under ROC curve*) zdefiniowany jako pole powierzchni pod krzywą ROC dla danego klasyfikatora. Zauważmy, że klasyfikator losowy, który zwraca zawsze klasę pozytywną z prawdopodobieństwem równym wartości progu ma wartość AUROC równą 0.5, natomiast idealny klasyfikator, który niezależnie od wartości progu klasyfikuje wszystkie przykłady poprawnie ma AUROC równy 1.

Inną analogiczną metryką jest *AUPRC*, gdzie zamiast krzywej ROC stosujemy krzywą *PRC* (z ang. *Precision-Recall Curve*), w której zamiast TPR i FPR używamy odpowiednio Precision i Recall. Metryka AUPRC jest często wykorzystywana w przypadku klasyfikacji ekstremalnie niezbalansowanej, w której mamy bardzo mało ($< 1\%$) klasy pozytywnej.

W przypadku klasyfikacji wieloklasowej używamy zasadniczo takich samych metryk jak w klasyfikacji binarnej, ale wprowadzamy mikro i makro uśrednianie (z ang. *micro/macro-averaging*). Przez TP_k będziemy rozumieć liczbę prawidłowo zaklasyfikowanych przykładów z klasy k , FP_k to liczba przykładów z innych klas, które zaklasyfikowaliśmy nieprawidłowo jako k -tą klasę, FN_k to liczba przykładów z klasy k , które zaklasyfikowaliśmy jako inną klasę. Wówczas odpowiednie metryki mają postać

$$\text{MicroPrecision} := \frac{\sum_k TP_k}{\sum_k TP_k + \sum_k FP_k},$$

$$\text{MacroPrecision} := \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \frac{TP_k}{TP_k + FP_k}$$

oraz

$$\text{MicroRecall} := \frac{\sum_k TP_k}{\sum_k TP_k + \sum_k FN_k},$$

$$\text{MacroRecall} := \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \frac{TP_k}{TP_k + FN_k}.$$

W przypadku klasyfikacji wieloklasowej macierz pomyłek jest macierzą wymiaru $K \times K$, gdzie K jest liczbą klas.

1.4.3 Tuning hiperparametrów i walidacja skrośna

Praktycznie wszystkie modele uczenia maszynowego mają hiperparametry, często liczne, które w zauważalny sposób wpływają na wyniki, a szczególnie na underfitting i overfitting. Ich wartości trzeba dobrać zatem dość dokładnie. Proces doboru hiperparametrów nazywa się tuningiem hiperparametrów (z ang. *hyperparameter tuning*).

Istnieje na to wiele sposobów. Większość z nich polega na tym, że trenuje się za każdym razem model z nowym zestawem hiperparametrów i wybiera się ten zestaw, który pozwala uzyskać najlepsze wyniki. Metody głównie różnią się między sobą sposobem doboru kandydujących zestawów hiperparametrów. Najprostsze i najpopularniejsze to:

- pełne przeszukiwanie (z ang. *grid search*) – definiujemy możliwe wartości dla różnych hiperparametrów, a metoda sprawdza ich wszystkie możliwe kombinacje (czyli siatkę),
- losowe przeszukiwanie (z ang. *randomized search*) – definiujemy możliwe wartości jak w pełnym przeszukiwaniu, ale sprawdzamy tylko ograniczoną liczbę losowo wybranych kombinacji.

Jak ocenić, jak dobry jest jakiś zestaw hiperparametrów? Nie możemy sprawdzić tego na zbiorze treningowym – wyniki byłyby zbyt optymistyczne. Nie możemy wykorzystać zbioru testowego – mielibyśmy wyciek danych, bo wybieralibyśmy model explicite pod nasz zbiór testowy. Trzeba zatem osobnego zbioru, na którym będziemy na bieżąco sprawdzać jakość modeli dla różnych hiperparametrów. Jest to zbiór walidacyjny (z ang. *validation set*). Zbiór taki wycina się ze zbioru treningowego.

Jednorazowy podział zbioru na części nazywa się *split validation* lub *holdout*. Używamy go, gdy mamy sporo danych, i 10-20% zbioru jako dane walidacyjne czy testowe to dość dużo, żeby mieć przyzwoite oszacowanie. Zbyt mały zbiór walidacyjny czy testowy da nam mało wiarygodne wyniki – nie da się nawet powiedzieć, czy zbyt pesymistyczne, czy optymistyczne. W praktyce niestety często mamy mało danych. Trzeba zatem jakiejś magicznej metody, która stworzy nam więcej zbiorów walidacyjnych z tej samej ilości danych. Taką metodą jest walidacja skrośna (z ang. *cross validation*, CV). Polega na tym, że dzielimy zbiór treningowy na K równych podzbiorów, tzw. foldów. Każdy podzbiór po kolei staje się zbiorem walidacyjnym, a pozostałe łączymy w zbiór treningowy. Trenujemy zatem K modeli dla tego samego zestawu hiperparametrów i każdy testujemy na zbiorze walidacyjnym. Mamy K wyników dla zbiorów walidacyjnych, które możemy uśrednić (i ewentualnie obliczyć odchylenie standardowe). Takie wyniki są znacznie bardziej wiarygodne.

2 Probabilistyka

2.1 Zmienne losowe

Zmienna losowa to formalnie odwzorowanie ze zbioru zdarzeń elementarnych Ω tj. zbioru atomowych wyników doświadczenia losowego w zbiór \mathbb{R}^n

$$\mathbf{X} : \Omega \mapsto \mathbb{R}^n.$$

Jest to zatem funkcja, która przyporządkowuje zdarzeniom losowym wartość liczbową. Każda zmienna losowa opisuje więc zmienną w klasycznym sensie, której wartości pochodzi z pewnego rozkładu. Rozkład ten jest zadany jednoznacznie przez funkcję $F : \mathbb{R}^n \mapsto [0; 1]$ taką, że

$$F(\mathbf{x}) := \Pr(\mathbf{X}^1 \leq x^1, \dots, \mathbf{X}^n \leq x^n),$$

którą nazywa się dystrybuantą (z ang. *cumulative distribution function, cdf*). Każdy rozkład zmiennej losowej można opisać za pomocą dystrybuanty jednak jest to niewygodne. W dwóch przypadkach: rozkładów dyskretnych i rozkładów ciągłych rozkład zmiennej losowej można opisać prościej za pomocą odpowiednio funkcji prawdopodobieństwa (z ang. *probability mass function, pmf*) oraz gęstości prawdopodobieństwa (z ang. *probability density function, pdf*).

Definicja 2.1. Zmienna losowa \mathbf{X} ma dyskretny rozkład prawdopodobieństwa, jeśli istnieje skończony lub przeliczalny zbiór $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^n$ taki, że $\Pr(\mathbf{X} \in \mathcal{S}) = 1$. Wówczas rozkład ten jest zadany przez podanie funkcji prawdopodobieństwa $p(\mathbf{x}) = \Pr(\mathbf{X} = \mathbf{x})$ dla $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$.

Definicja 2.2. Zmienna losowa \mathbf{X} ma z kolei ciągły rozkład prawdopodobieństwa, jeśli istnieje funkcja $p : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}_+$ taka, że

$$\Pr(\mathbf{X}^1 \in (a_1; b_1), \dots, \mathbf{X}^n \in (a_n; b_n)) = \int_{a_1}^{b_1} \cdots \int_{a_n}^{b_n} p(\mathbf{x}) d^n \mathbf{x}$$

dla dowolnej kostki $(a_1; b_1) \times \dots \times (a_n; b_n)$.

Definicja 2.3 (Wartości oczekiwanej). Wartością oczekiwaną funkcji zmiennej losowej $\mathbf{f}(\mathbf{X})$ nazywamy wektor $\mathbb{E}[\mathbf{f}(\mathbf{x})]$ określoną wzorem

$$\sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{S}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}), \quad \int_{\mathbb{R}^n} \mathbf{f}(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d^n \mathbf{x}$$

odpowiednio dla rozkładu dyskretnego i ciągłego.

Definicja 2.4 (Macierzy kowariancji). Macierzą kowariancji funkcji zmiennej losowej $\mathbf{f}(\mathbf{X})$ nazywamy macierz

$$\mathbb{E} [(\mathbf{f}(\mathbf{x}) - \mathbf{m}_{\mathbf{f}})(\mathbf{f}(\mathbf{x}) - \mathbf{m}_{\mathbf{f}})^T],$$

gdzie

$$\mathbf{m}_{\mathbf{f}} = \mathbb{E} [\mathbf{f}(\mathbf{x})].$$

Elementy diagonalne macierzy kowariancji nazywamy wariancjami, a elementy pozadiagonalne kowariancjami.

Definicja 2.5 (Kwantyla i mody). Kwantylem q_p rzędu $p \in (0; 1)$ zmiennej losowej jednowymiarowej o rozkładzie ciągłym z dystrybuantą F nazywamy dowolne rozwiązanie równania

$$F(x) = p.$$

Modą tej zmiennej nazywamy dowolne maksimum lokalne gęstości tego rozkładu.

Twierdzenie 2.1. Niech zmienna n -wymiarowa \mathbf{X} ma rozkład ciągły o gęstości $p_{\mathbf{X}}$ i niech $\mathbf{Y}^i = \varphi^i(\mathbf{X})$ dla $i = 1, \dots, n$. Jeśli odwzorowanie φ jest różniczkowalne i odwracalne, przy czym odwzorowanie odwrotne $\psi = \varphi^{-1}$ jest różniczkowalne, to n -wymiarowa zmienna \mathbf{Y} ma rozkład o gęstości

$$p_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}) = |J| p_{\mathbf{X}}(\psi(\mathbf{y})),$$

gdzie $J := \det \left[\frac{\partial \psi^j}{\partial y^i} \right]$ jest jakobianem odwzorowania ψ .

Twierdzenie 2.2. Dla dowolnych zmiennych losowych \mathbf{X} , \mathbf{Y} zachodzi

$$p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^k} p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mathrm{d}^k \mathbf{y} \quad (\text{sum rule})$$

Twierdzenie 2.3. Dla dowolnych zmiennych losowych \mathbf{X} , \mathbf{Y} zachodzi

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = p(\mathbf{x} | \mathbf{y}) p_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}) \quad (\text{product rule})$$

Twierdzenie 2.4. Zmienne losowe \mathbf{X} i \mathbf{Y} są niezależne wtedy i tylko wtedy, gdy

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) p_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}) \quad (\text{independence})$$

Twierdzenie 2.5. Dla dowolnych zmiennych losowych \mathbf{X} , \mathbf{Y} zachodzi

$$\underbrace{p(\mathbf{x} | \mathbf{y})}_{\text{posterior}} = \frac{\underbrace{p(\mathbf{y} | \mathbf{x})}_{\text{likelihood}} \underbrace{p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x})}_{\text{prior}}}{\underbrace{\int_{\mathbb{R}^k} p(\mathbf{y} | \mathbf{x}) p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) \mathrm{d}^k \mathbf{x}}_{\text{evidence}}} \quad (\text{Bayes theorem})$$

Definicja 2.6 (Warunkowej wartości oczekiwanej). Warunkową wartość oczekiwaną $f(\mathbf{X})$ pod warunkiem $\mathbf{Y} = \mathbf{y}$ nazywamy wielkość

$$\mathbb{E}[f(\mathbf{x}) | \mathbf{y}] = \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) p(\mathbf{x} | \mathbf{y}) \mathrm{d}^n \mathbf{x}$$

2.2 Ważne rozkłady jednowymiarowe

Definicja 2.7 (Rozkładu dwupunktowego). Jeśli X jest zmienną losową rzeczywistą o rozkładzie dyskretnym i $\mathcal{S} = \{x_1, x_2\}$ oraz $p(x_1) = p$, to mówimy, że X ma rozkład dwupunktowy z parametrem p . Jeśli $x_1 = 1$ i $x_2 = 0$ to taki rozkład dwupunktowy nazywamy *rozkładem zero-jedynkowym* (lub rozkładem Bernoulliego) i oznaczamy jako $X \sim \text{Ber}(p)$.

Definicja 2.8 (Schematu dwumianowego). Rozważmy doświadczenie losowe o dwu możliwych wynikach: sukces osiągamy z prawdopodobieństwem p , porażkę z prawdopodobieństwem $1 - p$. Doświadczenie tego rodzaju nazywamy *próbą Bernoulliego*. Doświadczenie takie jest modelowane zmienną losową o rozkładzie dwupunktowym z parametrem p . Schematem dwumianowym (lub schematem Bernoulliego) nazywamy doświadczenie polegające na n -krotnym powtórzeniu próby Bernoulliego, przy założeniu, iż poszczególne próby są od siebie niezależne.

Definicja 2.9 (Rozkładu dwumianowego). Niech X będzie zmienną losową taką, że X jest liczbą sukcesów w schemacie dwumianowym długości n z prawdopodobieństwem sukcesu w każdej próbie równym p . Wówczas

$$\Pr(X = k) = \binom{n}{k} p^k (1 - p)^{n-k}.$$

Rozkład prawdopodobieństwa określony powyższym wzorem nazywam się rozkładem dwumianowym o parametrach n, p . Jeśli zmienna X ma rozkład dwumianowy to stosujemy notację $X \sim \text{Bin}(n, p)$.

Definicja 2.10 (Rozkładu geometrycznego). Mówimy, że zmienna losowa X ma rozkład geometryczny z parametrem $p \in (0; 1)$, tj. $X \sim \text{Geo}(p)$, jeśli $\mathcal{S} = \mathbb{N} \setminus \{0\}$, a funkcja prawdopodobieństwa ma postać

$$p(x) = (1 - p)^{x-1} p.$$

Zmienna X opisuje czas oczekiwania na pierwszy sukces w schemacie

dwumianowym o nieskończonej długości.

Definicja 2.11 (Rozkładu Poissona). Jeśli zmienna X o wartościach w \mathbb{N} opisuje liczbę wystąpień pewnego powtarzalnego zdarzenia w przedziale czasowym $[0; t]$, przy czym spełnione są następujące założenia:

- powtórzenia zdarzenia występują niezależnie od siebie;
- „intensywność” wystąpień r jest stała;
- w danej chwili (rozumianej jako odpowiednio mały przedział) może zajść co najwyżej jedno zdarzenie

to zmienna ta ma rozkład Poissona z parametrem $\lambda = rt$, tj. $X \sim \text{Pos}(\lambda)$. Jeśli $X \sim \text{Pos}(\lambda)$, to

$$\Pr(X = k) = \frac{e^{-\lambda} \lambda^k}{k!}.$$

Twierdzenie 2.6 (Poissona). Niech (X_n) będzie ciągiem zmiennych losowych takich, że $X_n \sim \text{Bin}(n, p_n)$, gdzie (p_n) jest ciągiem takim, że

$$\lim_{n \rightarrow \infty} np_n = \lambda$$

dla pewnej liczby $\lambda > 0$. Wówczas

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \Pr(X_n = k) = \frac{e^{-\lambda} \lambda^k}{k!}.$$

Definicja 2.12 (Rozkładu jednostajnego). Mówimy, że zmienna X o rozkładzie ciągłym ma rozkład jednostajny na przedziale $[a; b]$ tzn. $X \sim \mathcal{U}(a, b)$ jeśli jej gęstość wyraża się wzorem

$$p(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & x \in [a; b] \\ 0, & x \notin [a; b] \end{cases}.$$

Definicja 2.13 (Rozkładu wykładniczego). Niech T będzie zmienną modelującą czas oczekiwania na pierwsze zdarzenie w ciągu zdarzeń takim, że czas wystąpienia każdego z nich w przedziale $[0; t]$ jest opisany przez zmienną $X \sim \text{Pos}(\lambda t)$. wtedy

$$\Pr(T > t) = \Pr(X = 0) = e^{-\lambda t}$$

oraz

$$\Pr(T > 0) = 1.$$

Mówimy wtedy, że T ma rozkład wykładniczy z parametrem λ , tzn. $T \sim \text{Exp}(\lambda)$. Gęstość rozkładu wykładniczego ma postać

$$p(t) = \begin{cases} 0, & t \leq 0 \\ \lambda e^{-\lambda t}, & t > 0 \end{cases}.$$

Definicja 2.14 (Rozkładu normalnego). Mówimy, że zmienna losowa X o gęstości $p(x)$ ma rozkład normalny z parametrami $\mu \in \mathbb{R}, \sigma^2 \in [0; +\infty)$, tzn. $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$, jeśli

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right).$$

Jeśli $\mu = 0$ i $\sigma = 1$, to taki rozkład nazywamy standardowym rozkładem normalnym.

2.3 Wielowymiarowy rozkład normalny

Definicja 2.15 (Standardowego wielowymiarowego rozkładu normalnego). Zmienna losowa \mathbf{X} ma standardowy n -wymiarowy rozkład normalny jeśli jej składowe są niezależne i dla każdego $i = 1, \dots, n$ $\mathbf{X}^i \sim \mathcal{N}(0, 1)$. Jest to rozkład ciągły o gęstości

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}} \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{x}\right).$$

Definicja 2.16 (Wielowymiarowego rozkładu normalnego). Zmienna losowa \mathbf{X} ma n -wymiarowy rozkład normalny (z ang. *Multivariate Normal Distribution, MVN*), tzn. $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ jeśli istnieje k -wymiarowa zmienna losowa \mathbf{Z} o standardowym rozkładzie normalnym dla pewnego $k \leq n$ oraz istnieje $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^n$ i macierz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ takie, że $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{A}\mathbf{A}^T$ oraz

$$\mathbf{X} = \mathbf{A}\mathbf{Z} + \boldsymbol{\mu}.$$

Jeśli macierz $\boldsymbol{\Sigma}$ jest dodatnio określona, to rozkład $\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ jest ciągły, a jego gęstość jest dana przez

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n \det \boldsymbol{\Sigma}}} \exp \left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \right)$$

Macierz $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ nazywa się *macierzą precyzji*.

Poziomice gęstości niezdegenerowanego wielowymiarowego rozkładu normalnego są elipsoidami, których półosie są skierowane wzdłuż wektorów własnych macierzy $\boldsymbol{\Sigma}$ i mają długości proporcjonalne do pierwiastka z wartości własnych.

Twierdzenie 2.7 (Własności niezdegenerowanego rozkładu normalnego). Niech $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ dla dodatnio określonej macierzy $\boldsymbol{\Sigma}$, wówczas

1. Wszystkie rozkłady brzegowe i warunkowe \mathbf{X} są rozkładami normalnymi. Istotnie jeśli

$$\begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} \sim \mathcal{N} \left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu}_x \\ \boldsymbol{\mu}_y \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{xx} & \boldsymbol{\Sigma}_{xy} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{yx} & \boldsymbol{\Sigma}_{yy} \end{bmatrix} \right)$$

to można pokazać, iż

$$\mathbf{x} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_x, \boldsymbol{\Sigma}_{xx}), \quad \mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_y, \boldsymbol{\Sigma}_{yy}).$$

oraz $\mathbf{x} \mid \mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_{x|\mathbf{y}}, \boldsymbol{\Sigma}_{x|\mathbf{y}})$, gdzie

$$\boldsymbol{\mu}_{x|\mathbf{y}} = \boldsymbol{\mu}_x + \boldsymbol{\Sigma}_{xy} \boldsymbol{\Sigma}_{yy}^{-1}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}_y), \quad \boldsymbol{\Sigma}_{x|\mathbf{y}} = \boldsymbol{\Sigma}_{xx} - \boldsymbol{\Sigma}_{xy} \boldsymbol{\Sigma}_{yy}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{yx}.$$

2. Zmienne składowe X^1, \dots, X^n są niezależne wtedy i tylko wtedy, gdy $\boldsymbol{\Sigma}$ jest macierzą diagonalną.

2.4 Wnioskowanie statystyczne

Niech zmienna losowa \mathbf{X} określa model rozkładu pewnej cechy (cech) w ustalonym zbiorze instancji (tzw. *populacji generalnej*). Innymi słowy, przyjmujemy, że wartości cech zachowują się jakby zostały wybrane losowo zgodnie z rozkładem zmiennej \mathbf{X} . Do podstawowych zagadnień wnioskowania statystycznego należą:

- oszacowanie wielkości charakteryzujących rozkład \mathbf{X} (np. wartości średniej albo wariancji);
- weryfikacja hipotez dotyczących rozkładu \mathbf{X} (tym nie będziemy się zajmować).

Definicja 2.17 (Modelu statystycznego). Modelem statystycznym nazywamy parę $(\mathcal{P}, \mathcal{X})$, gdzie \mathcal{P} jest rodziną rozkładów prawdopodobieństwa na zbiorze \mathcal{X} . Zazwyczaj przyjmuje się

$$\mathcal{P} = \{p(\cdot \mid \boldsymbol{\theta}) : \boldsymbol{\theta} \in \Theta\}$$

dla pewnego zbioru parametrów Θ . Model statystyczny nazywamy *parametrycznym* jeśli $\Theta \subset \mathbb{R}^k$.

Definicja 2.18 (Prostej próby losowej). Prosta próba losowa o liczności n nazywamy ciąg niezależnych zmiennych losowych $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_n$ o tym samym rozkładzie $p(\cdot \mid \boldsymbol{\theta}) \in \mathcal{P}$ (z ang. *independent and identically distributed, i.i.d.*).

Definicja 2.19 (Estymatora). Estymatorem nazywa się statystykę $\hat{\theta}(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_n)$ służącą do oszacowania wartości parametru θ . Liczbę $\hat{\theta}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$ dla konkretnej realizacji prostej próby losowej nazywa się wartością estymatora albo estymatą.

Definicja 2.20 (Funkcji wiarygodności). Funkcją wiarygodności (z ang. *likelihood function*) dla modelu $\mathcal{P} = \{p(\cdot \mid \boldsymbol{\theta}) : \boldsymbol{\theta} \in \Theta\}$ nazy-

wamy funkcję

$$\mathcal{L} : \mathbb{R}^n \times \Theta \ni (\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \mapsto \mathcal{L}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}) \in [0; +\infty)$$

wyznaczającą rozkład łączny obserwowanych danych jako funkcję parametru $\boldsymbol{\theta}$.

Niech $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_n$ będzie prostą próbą losową. Jeśli $p(\cdot \mid \boldsymbol{\theta})$ opisuje rozkład warunkowy, z którego pochodzą obserwacje, to

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n; \boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^n p(\mathbf{x}_i \mid \boldsymbol{\theta}).$$

Dla wygody obliczeń często rozważa się tzw. zanegowaną logarytmiczną funkcję wiarygodności (z ang. *Negated Log-Likelihood function*, *NLL*), tzn.

$$L(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}) = -\log \mathcal{L}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}).$$

Wówczas dla realizacji prostej próby losowej mamy

$$L(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n; \boldsymbol{\theta}) = -\sum_{i=1}^n \log p(\mathbf{x}_i \mid \boldsymbol{\theta}).$$

Definicja 2.21 (Estymatora największej wiarygodności). Estymatorem największej wiarygodności (z ang. *Maximum Likelihood Estimator*, *MLE*) nazywamy funkcję $\hat{\boldsymbol{\theta}}$, która przy ustalonych wartościach obserwacji (realizacji prostej próby losowej) $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ maksymalizuje wartość funkcji wiarygodności lub, co równoważne, minimalizuje wartość zanegowanej logarytmicznej funkcji wiarygodności tj.

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = \arg \min_{\boldsymbol{\theta} \in \Theta} \left[-\sum_{i=1}^n \log p(\mathbf{x}_i \mid \boldsymbol{\theta}) \right].$$

Jeśli funkcja wiarygodności jest różniczkowalna względem $\boldsymbol{\theta}$ dla dowolnych \mathbf{x}^i , to MLE można czasem wyznaczyć analitycznie korzystając z warunku koniecznego optymalności, tzn. rozwiązując układ równań

$$\frac{\partial L(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n; \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = 0.$$

Jeśli MLE nie da się wyliczyć analitycznie, wyznacza się je przy użyciu algorytmów optymalizacji numerycznej. Estymatory MLE są asymptotycznie nieobciążone.

Definicja 2.22 (Estymatora MAP). Estymatorem MAP (z ang. *Maximum a Posteriori Estimator, MAP*) nazywamy funkcję $\hat{\theta}$, która przy ustalonych wartościach obserwacji (realizacji prostej próby losowej) $\{x_1, \dots, x_n\}$ maksymalizuje wartość iloczynu funkcji wiarygodności i priora nad wartościami parametrów lub, co równoważne, minimalizuje zregularyzowaną logarytmiczną funkcję wiarygodności tj.

$$\hat{\theta}(x_1, \dots, x_n) = \arg \min_{\theta \in \Theta} \left[- \sum_{i=1}^n \log p(x_i | \theta) - n \log p(\theta) \right].$$

2.5 Liczby losowe w komputerze

Opiszemy jeszcze pokrótce metody generowania liczb pseudolosowych z dowolnych rozkładów prawdopodobieństwa w sposób algorytmiczny. Podstawowym narzędziem, którego będziemy potrzebować do generowania próbek z bardziej skomplikowanych rozkładów będzie prosty generator liczb z rozkładu jednostajnego $\mathcal{U}(0, 1)$. Moglibyśmy oczywiście wykorzystać jakieś fizyczne urządzenie lub proces, który generuje liczby prawdziwie losowe (np. detektor Geigera-Mullera, szum lamp elektronowych, ruletka), ale błędem byłaby rezygnacja z odtwarzalności. Poszukujemy zatem deterministycznej metody, która generuje sekwencje liczb, które są w przybliżeniu losowe. Podstawową metodą do algorytmicznego generowania liczb pseudolosowych jest tzw. *liniowy generator kongruentny* (z ang. *Linear Congruential Generator, LCG*), który jest opisany zależnością rekurencyjną

$$I_{j+1} = (aI_j + c) \bmod m,$$

gdzie a, c, m to pewne ustalone dodatnie liczby całkowite, a I_0 to tzw. ziarno (z ang. *seed*). LCG generuje liczby całkowite, więc w dużym uproszczeniu liczby zmiennoprzecinkowe z rozkładu $\mathcal{U}(0, 1)$ otrzymujemy jako I_j/m (trzeba tutaj jednak uwzględnić problemy wynikające z arytmetyki zmiennoprzecinkowej).

Mając już generator liczb z rozkładu jednostajnego $\mathcal{U}(0, 1)$ i znając jawny wzór na dystrybuantę $F(x)$ innego rozkładu jednowymiarowego \mathcal{D}

możemy generować liczby z tego rozkładu korzystając z tzw. *metody odwrotnej dystrybuanty*. Istotnie, jeśli $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$, to $F^{-1}(U) \sim \mathcal{D}$. Istotnie

$$\Pr(F^{-1}(U) \leq x) = \Pr(U \leq F(x)) = F(x).$$

Metoda ta ma jedną zasadniczą wadę – musimy znać jawny wzór na dystrybuantę $F(x)$. W przypadku np. tak ważnych rozkładów, jak rozkład normalny dystrybuanta nie jest funkcją elementarną i metoda ta nie jest najlepsza. W przypadku rozkładu normalnego znacznie lepszą metodą jest tzw. *metoda Boxa–Mullera*. Weźmy rozkład łączny dwóch niezależnych zmiennych losowych X, Y pochodzących ze standardowego rozkładu normalnego

$$p(x, y) = \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{2}(x^2 + y^2)\right).$$

Skorzystamy ze wzoru na transformację zmiennych losowych. Istotnie niech

$$X = \sqrt{Z} \cos \Phi, \quad Y = \sqrt{Z} \sin \Phi,$$

dla $0 < Z$ oraz $0 \leq \Phi < 2\pi$, wówczas

$$q(z, \phi) = p(x(z, \phi), y(z, \phi)) \left| \begin{array}{c} \frac{1}{2\sqrt{z}} \cos \phi \\ -\frac{1}{\sqrt{z}} \sin \phi \end{array} \right| \frac{1}{2\sqrt{z}} \sin \phi \left| \begin{array}{c} \frac{1}{2\sqrt{z}} \sin \phi \\ \sqrt{z} \cos \phi \end{array} \right| = \frac{1}{4\pi} e^{-\frac{z}{2}}.$$

Zauważmy, że otrzymaliśmy sferycznie symetryczny rozkład wykładniczy. Możemy zatem wylosować z rozkładu jednostajnego kąt ϕ oraz z rozkładu wykładniczego wartość z korzystając z metody odwrotnej dystrybuanty. Wówczas wartości $x = \sqrt{z} \cos \phi$, $y = \sqrt{z} \sin \phi$ będą pochodzić ze standardowego rozkładu normalnego. Aby wygenerować próbki z ogólnego wielowymiarowego rozkładu normalnego, korzystamy z definicji, tj. najpierw generujemy n próbek ze standardowego rozkładu normalnego, a następnie korzystamy z przekształcenia afinicznego $\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{z} + \boldsymbol{\mu}$, gdzie $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{A}\mathbf{A}^T$.

2.6 Monte Carlo

Umiemy już generować próbki z wielowymiarowego rozkładu normalnego. Chcemy teraz poznać metodę, która umożliwi generowanie próbek ze skomplikowanych, wielowymiarowych rozkładów prawdopodobieństwa, których gęstość znamy jedynie z dokładnością do stałej normalizującej, tj. znamy jedynie $\tilde{p}(\mathbf{x}) = Zp(\mathbf{x})$. Ograniczenie to wynika z chęci próbkowania z posteriora $p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y})$ w sytuacji, gdy znamy jedynie rozkład łączny $p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x})$. Okazuje się, iż znajomość rozkładu jedynie z dokładnością do stałej normalizującej jest wystarczająca do generowania próbek z

tego rozkładu. Generowanie próbek z kolei wystarczy natomiast, na mocy silnego prawa wielkich liczb, do szacowania wartości średnich dowolnych funkcji zmiennej \mathbf{x} . Przypomnijmy, iż na mocy silnego prawa wielkich liczb ciąg średnich częściowych $(\bar{\mathbf{X}}_n)$ ciągu zmiennych losowych (\mathbf{X}_n) i.i.d. z rozkładu $\mathbf{X} \sim \mathcal{D}$ jest zbieżny z prawdopodobieństwem 1 do wartości oczekiwanej $\mathbb{E}[\mathbf{X}]$ tj.

$$\Pr \left(\lim_{n \rightarrow \infty} \bar{\mathbf{X}}_n = \mathbb{E}[\mathbf{X}] \right) = 1.$$

Wartość oczekiwaną $\mathbb{E}[\mathbf{X}]$ możemy zatem przybliżyć średnią $\bar{\mathbf{X}}_n$ z dużej ilości próbek.

Pozostaje pytanie w jaki sposób generować próbki ze skomplikowanych rozkładów prawdopodobieństwa, których gęstości znamy jedynie z dokładnością do stałej normalizującej. Poniżej przedstawimy dwa algorytmy próbkowania: algorytm IS oraz Metropolisa–Hastingsa będący szczególną realizacją całej rodziny algorytmów próbkowania zwanych Markov Chain Monte Carlo (MCMC).

2.6.1 Algorytm Importance Sampling

Założmy, iż chcemy obliczyć wartość oczekiwaną pewnej funkcji zmiennej losowej \mathbf{x} względem skomplikowanego rozkładu prawdopodobieństwa $p(\mathbf{x})$, który znamy jedynie z dokładnością do stałej normalizującej

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z_p} \tilde{p}(\mathbf{x})$$

tj. szukamy

$$\mathbb{E}_p[f(\mathbf{x})] = \int f(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d^n \mathbf{x}.$$

Jeśli umiemy generować próbki \mathbf{x} z innego (prostsze) rozkładu $q(\mathbf{x})$ (np. wielowymiarowego rozkładu normalnego), który nazywamy rozkładem proponującym kandydatów (z ang. *proposal distribution*) to możemy zapisać

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_p[f(\mathbf{x})] &= \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) \frac{p(\mathbf{x})}{q(\mathbf{x})} q(\mathbf{x}) d^n \mathbf{x} \\ &= \mathbb{E}_q \left[f(\mathbf{x}) \frac{p(\mathbf{x})}{q(\mathbf{x})} \right] = \frac{Z_q}{Z_p} \mathbb{E}_q \left[f(\mathbf{x}) \frac{\tilde{p}(\mathbf{x})}{\tilde{q}(\mathbf{x})} \right]. \end{aligned}$$

Zakładamy tutaj, iż nośnik rozkładu p zawiera się w nośniku q tj. $\text{supp } p \subseteq \text{supp } q$. Stosunek stałych Z_p/Z_q również możemy oszacować z próbek z q ,

gdyż mamy

$$Z_p = \int_{\mathbb{R}^n} \tilde{p}(\mathbf{x}) \, d^n \mathbf{x} = Z_q \int_{\mathbb{R}^n} \frac{\tilde{p}(\mathbf{x})}{\tilde{q}(\mathbf{x})} q(\mathbf{x}) \, d^n \mathbf{x} = Z_q \mathbb{E}_q \left[\frac{\tilde{p}(\mathbf{x})}{\tilde{q}(\mathbf{x})} \right],$$

skąd ostatecznie

$$\mathbb{E}_p[f(\mathbf{x})] = \frac{\mathbb{E}_q \left[f(\mathbf{x}) \frac{\tilde{p}(\mathbf{x})}{\tilde{q}(\mathbf{x})} \right]}{\mathbb{E}_q \left[\frac{\tilde{p}(\mathbf{x})}{\tilde{q}(\mathbf{x})} \right]}.$$

Jeśli z rozkładu q wygenerowaliśmy próbki $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m\}$ to na mocy silnego prawa wielkich liczb mamy

$$\mathbb{E}_p[f(\mathbf{x})] \approx \frac{\sum_{i=1}^m f(\mathbf{x}_i) \frac{\tilde{p}(\mathbf{x}_i)}{\tilde{q}(\mathbf{x}_i)}}{\sum_{j=1}^m \frac{\tilde{p}(\mathbf{x}_j)}{\tilde{q}(\mathbf{x}_j)}} = \sum_{i=1}^m \lambda_i f(\mathbf{x}_i),$$

gdzie

$$\lambda_i = \frac{\tilde{p}(\mathbf{x}_i)/\tilde{q}(\mathbf{x}_i)}{\sum_{j=1}^m \tilde{p}(\mathbf{x}_j)/\tilde{q}(\mathbf{x}_j)}.$$

Algorytm Importance Sampling jest prostym algorytmem Monte Carlo, który ma jeden zasadniczy problem. W jaki sposób mamy wybrać rozkład proponujący kandydatów q ? Pewną odpowiedź na to pytanie sugeruje analiza wariancji statystyki

$$\bar{f}_m(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \frac{f(\mathbf{x}_i) p(\mathbf{x}_i)}{q(\mathbf{x}_i)}$$

dla $\mathbf{x}_i \sim q$ mamy

$$\mathbb{V}[\bar{f}_m] = \frac{1}{m} \mathbb{V}_q \left[f(\mathbf{x}) \frac{p(\mathbf{x})}{q(\mathbf{x})} \right] = \frac{1}{m} \int_{\mathbb{R}^n} \frac{(f(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) - \mu_f q(\mathbf{x}))^2}{q(\mathbf{x})} \, d^n \mathbf{x}.$$

Chcemy oczywiście, aby wariancja była jak najmniejsza, gdyż wówczas mała liczba próbek da dobre przybliżenie wartości oczekiwanej. Rozkład proponujący kandydatów powinien być zatem proporcjonalny do $f(\mathbf{x}) p(\mathbf{x})$, co może być trudne do praktycznego zrealizowania.

2.6.2 Algorytm Metropolisa–Hastingsa

Cała klasa algorytmów próbkowania MCMC opiera się na idei wyrażenia generowania próbek jako ewolucji pewnego łańcucha Markowa.

Definicja 2.23 (Łańcucha Markowa). Łańcuchem Markowa nazywamy ciąg zmiennych losowych (\mathbf{X}_t) o wartościach w \mathbb{R}^n taki, że spełnione jest *kryterium Markowa*

$$\begin{aligned}\forall A \subset \mathbb{R}^n : \Pr(\mathbf{X}_t \in A \mid \mathbf{X}_{t-1} = \mathbf{x}_{t-1}, \dots, \mathbf{X}_0 = \mathbf{x}_0) \\ = \Pr(\mathbf{X}_t \in A \mid \mathbf{X}_{t-1} = \mathbf{x}_{t-1}).\end{aligned}$$

Elementy ciągu nazywamy stanami łańcucha.

Dany łańcuch jest zadany jednoznacznie przez podanie gęstości prawdopodobieństwa przejścia łańcucha ze stanu $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y}$, którą będziemy oznaczać przez $\pi(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})$ (zakładamy, iż prawdopodobieństwo przejścia jest niezależne od chwili t – łańcuch taki nazywamy jednorodnym). Funkcja π spełnia oczywiście warunek unormowania

$$\int_{\mathbb{R}^n} \pi(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) d^n \mathbf{y} = 1,$$

istotnie prawdopodobieństwo przejścia gdziekolwiek ze stanu \mathbf{x} jest równe 1. Będziemy zakładać dodatkowo, iż $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n : \pi(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) > 0$. Rozkład $p(\mathbf{x})$ łańcucha Markowa (tj. rozkład prawdopodobieństwa z którego losujemy stan łańcucha w danej chwili t) z daną funkcją przejścia π nazwiemy rozkładem stacjonarnym tego łańcucha jeśli

$$p(\mathbf{y}) = \int_{\mathbb{R}^n} \pi(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d^n \mathbf{x}.$$

Rozkład stacjonarny danego łańcucha oznaczmy przez $p^*(\mathbf{x})$. Zauważmy, iż jeśli stan początkowy łańcucha \mathbf{X}_0 pochodzi z rozkładu stacjonarnego p^* to każdy kolejny stan \mathbf{X}_t również pochodzi z rozkładu stacjonarnego. Jeśli z kolei stan początkowy pochodzi z jakiegoś innego rozkładu p_0 to rozkład łańcucha w chwili t jest dany przez relację rekurencyjną

$$p_t(\mathbf{y}) = \int_{\mathbb{R}^n} \pi(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) p_{t-1}(\mathbf{x}) d^n \mathbf{x}, \quad \text{dla } t > 1.$$

Rozkładem granicznym łańcucha Markowa nazwiemy granicę w sensie zbieżności punktowej

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p_t(\mathbf{x}).$$

Przy podanych wyżej założeniach istnieje twierdzenie, które mówi iż taki łańcuch Markowa posiada jednoznaczny rozkład stacjonarny tożsamy z rozkładem granicznym. Ponadto warunkiem wystarczającym, aby dany rozkład $p(\mathbf{x})$ był rozkładem stacjonarnym łańcucha Markowa jest

$$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n : \pi(\mathbf{y} | \mathbf{x})p(\mathbf{x}) = \pi(\mathbf{x} | \mathbf{y})p(\mathbf{y}),$$

co wynika z scałkowania powyższego równania

$$\int_{\mathbb{R}^n} \pi(\mathbf{y} | \mathbf{x})p(\mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^n} \pi(\mathbf{x} | \mathbf{y})p(\mathbf{y}) d^n \mathbf{x} = p(\mathbf{y}) \int_{\mathbb{R}^n} \pi(\mathbf{x} | \mathbf{y}) d^n \mathbf{x} = p(\mathbf{y}).$$

Kryterium to nazywamy *kryterium lokalnego balansu* (z ang. *detailed balance condition*).

Podstawowa idea wykorzystania łańcuchów Markowa do generowania próbek ze skomplikowanego rozkładu p jest więc następująca: tworzymy łańcuch Markowa, dla którego p jest rozkładem stacjonarnym, wówczas rozpoczynając w dowolnym dopuszczalnym stanie początkowym \mathbf{X}_0 po wykonaniu dużej liczby kroków (etap ten nazywamy okresem przejściowym z ang. *burn-in period*) stan \mathbf{X}_t (dla $t \gg 1$) tego łańcucha będzie w przybliżeniu pochodził z rozkładu granicznego p (nie jest jednak prosto stwierdzić po jak długim okresie przejściowym przybliżenie to jest wystarczająco dobre). Aby otrzymać z takiej procedury próbki prawdziwie i.i.d. każda z próbek musiałaby pochodzić z ponownego uruchomienia takiego łańcucha. Oczywiście jest to nieefektywne, więc w praktyce generujemy próbki z jednego łańcucha po prostu odrzucając pewne z nich tak aby uniknąć znaczących korelacji. Pozostaje pytanie jak skonstruować funkcję przejścia $\pi(\mathbf{y} | \mathbf{x})$ dla danego rozkładu granicznego $p(\mathbf{x})$. Podstawową konstrukcję podaje algorytm Metropolisa–Hastingsa.

```

1 # Metropolis-Hastings
2 # -----
3 # Initialize state  $\mathbf{x}$  using any admissible value.
4 for i in range(max_iter):
5     # Step 1. Sample candidate  $\mathbf{y}$  from the conditional
6     # proposal distribution  $q(\mathbf{y} | \mathbf{x})$ .
7
8     # Step 2. Accept new candidate with probability
9      $r(\mathbf{y} | \mathbf{x}) = \min \left\{ 1, \frac{p(\mathbf{y})q(\mathbf{x} | \mathbf{y})}{p(\mathbf{x})q(\mathbf{y} | \mathbf{x})} \right\}$ 
10    # and change state to  $\mathbf{y}$ , otherwise stay in state  $\mathbf{x}$ .

```

Funkcja przejścia ma zatem postać

$$\pi_{\text{MH}}(\mathbf{y} | \mathbf{x}) = q(\mathbf{y} | \mathbf{x})r(\mathbf{y} | \mathbf{x}).$$

Pozostaje tylko wykazać, iż spełnione jest kryterium lokalnego balansu. Istotnie mamy

$$\begin{aligned}\pi_{\text{MH}}(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})p(\mathbf{x}) &= \min \{q(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})p(\mathbf{x}), q(\mathbf{x} \mid \mathbf{y})p(\mathbf{y})\} \\ \pi_{\text{MH}}(\mathbf{x} \mid \mathbf{y})p(\mathbf{y}) &= \min \{q(\mathbf{x} \mid \mathbf{y})p(\mathbf{y}), q(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})p(\mathbf{x})\}\end{aligned}\quad ,$$

skąd $\pi_{\text{MH}}(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})p(\mathbf{x}) = \pi_{\text{MH}}(\mathbf{x} \mid \mathbf{y})p(\mathbf{y})$. Zauważmy, iż nie musimy znać $p(\mathbf{x})$ z dokładnością do stałej normalizującej, gdyż

$$\frac{p(\mathbf{y})}{p(\mathbf{x})} = \frac{\tilde{p}(\mathbf{y})/Z_p}{\tilde{p}(\mathbf{x})/Z_p} = \frac{\tilde{p}(\mathbf{y})}{\tilde{p}(\mathbf{x})}.$$

Poza algorytmem Metropolis–Hastingsa jest wiele innych algorytmów z rodziny MCMC. Większość z nich implementuje konkretny sposób generowania (zostawiając resztę struktury) tak, aby zmniejszyć korelację po okresie przejściowym i przyspieszyć zbieżność. Standardowo wykorzystywanymi algorytmami z tej klasy są algorytmy HMC (*Hamiltonian Monte Carlo*) oraz NUTS (*No U-Turn Sampler*).

2.7 Estymator jądroowy gęstości

W poprzednim paragrafie opisaliśmy w jaki sposób mając (nieznormalizowaną) funkcję gęstości prawdopodobieństwa $\tilde{p}(\mathbf{x})$ generować algorytmicznie próbki z opisanego przez nią rozkładu. Teraz zajmijmy się problemem odwrotnym tj. mając realizację prostej próby losowej z pewnego rozkładu chcemy znaleźć funkcję $\hat{p}(\mathbf{x})$, która estymuje gęstość rozkładu prawdopodobieństwa, z którego pochodzą próbki. Opiszemy tutaj jedną z najprostszych metod zwaną estymatorem jądrowym (z ang. *Kernel Density Estimator*, *KDE*). Estymatorem jądrowym gęstości funkcji p nazywamy funkcję

$$\hat{p}(\mathbf{x}) := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n K_{\mathbf{H}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i),$$

gdzie \mathbf{H} jest symetryczną i dodatnio określoną macierzą zwaną *bandwidth matrix*, funkcja $K_{\mathbf{H}}$ ma postać

$$K_{\mathbf{H}}(\mathbf{x}) = (\det \mathbf{H})^{-1/2} K(\mathbf{H}^{-1/2} \mathbf{x}),$$

gdzie funkcja K zwaną jądrem (z ang. *kernel*) jest gęstością prawdopodobieństwa pewnego sferycznie symetrycznego rozkładu wielowymiarowego. Wybór funkcji K nie jest kluczowy ze statystycznego punktu widzenia,

więc możemy bez problemu założyć, iż jest to gęstość wielowymiarowego rozkładu normalnego, tj.

$$K_{\mathbf{H}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^m \det \mathbf{H}}} \exp \left(-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{H}^{-1} \mathbf{x} \right),$$

gdzie zakładamy $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$. Większym problemem w przypadku KDE jest wybór odpowiedniego parametru \mathbf{H} . Jednym z prostszych wyborów w przypadku estymatora

$$\hat{p}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n \sqrt{(2\pi)^m \det \mathbf{H}}} \sum_{i=1}^n \exp \left(-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)^T \mathbf{H}^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \right)$$

jest tzw. *reguła Silvermana*, która podaje następujący przepis na macierz \mathbf{H}

$$\mathbf{H}^{ij} = 0, \quad \sqrt{\mathbf{H}^{ii}} = \left(\frac{4}{4+m} \right)^{\frac{1}{m+4}} n^{\frac{-1}{m+4}} \sigma_i,$$

gdzie σ_i jest estymatorem wariancji i -tej współrzędnej zmiennej \mathbf{X} . Inną możliwością jest tzw. *reguła Scotta*

$$\mathbf{H}^{ij} = 0, \quad \sqrt{\mathbf{H}^{ii}} = n^{\frac{-1}{m+4}} \sigma_i.$$

KDE w praktycznych zastosowaniach często przyspiesza się za pomocą odpowiednich struktur danych do wyszukiwania najbliższych sąsiadów w przestrzeni \mathbb{R}^m , tj. zamiast sumować przyczynki od wszystkich punktów \mathbf{x}_i dla danego \mathbf{x} , znajdujemy jego k najbliższych sąsiadów \mathbf{x} ze zbioru $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n$ stosując np. ANN i obliczamy przyczynki do $\hat{p}(\mathbf{x})$ tylko od nich.

3 Podstawy statystycznego uczenia maszynowego

Przechodzimy teraz do zagadnień uczenia maszynowego, w których wykorzystamy przedstawioną wcześniej teorię rachunku prawdopodobieństwa (w szczególności teorię zmiennych losowych) oraz wnioskowania statystycznego.

3.1 Regresja liniowa

Rozpatrujemy teraz zagadnienie regresji tj. predykcji ciągłej wartości $y \in \mathbb{R}$ w zależności od wektora cech \mathbf{x} . Zakładamy ponadto prosty model liniowy,

tj. nasze predykcje będą miały postać

$$\phi(\mathbf{x}; \mathbf{w}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$$

dla pewnych estymowanych parametrów \mathbf{w} . Zauważmy, iż taka postać modelu ϕ uwzględnia człon stały poprzez transformację $\mathbf{x} \leftarrow [\mathbf{x}^T \ 1]^T$. W przypadku regresji liniowej parametry estymujemy za pomocą metody MLE dla następującego modelu statystycznego

$$y(\mathbf{x}) \mid \mathbf{w} \sim \mathcal{N}(\phi(\mathbf{x}; \mathbf{w}), \sigma^2).$$

Niech $\mathcal{X} = \{y_i(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^n$ będzie naszym zbiorem obserwacji i.i.d. Wiarygodność ma zatem postać

$$\mathcal{L}(\mathcal{X}; \mathbf{w}) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} \prod_{i=1}^n \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} [y_i - \phi(\mathbf{x}_i; \mathbf{w})]^2\right).$$

Zanegowana logarytmiczna funkcja wiarygodności (funkcjonał kosztu) ma zatem postać

$$L(\mathcal{X}; \mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n [y_i - \phi(\mathbf{x}_i; \mathbf{w})]^2,$$

gdzie pominęliśmy multiplikatywne i addytywne człony stałe, gdyż nie wpływają one na zagadnienie optymalizacji. Minimalizując funkcję L względem \mathbf{w} otrzymamy estymatę MLE tych parametrów. Otrzymana funkcja L ma postać formy kwadratowej, a otrzymany problem optymalizacyjny nazywamy metodą najmniejszych kwadratów (z ang. *Ordinary Least Squares, OLS*). Wprowadźmy macierz $\mathbf{X}^{ij} := \mathbf{x}_i^j$ oraz wektory $\mathbf{y}^i = y_i$, $\phi^i = \phi(\mathbf{x}_i; \mathbf{w}) = \sum_j \mathbf{X}^{ij} \mathbf{w}^j$. Wówczas możemy zapisać funkcję kosztu jako

$$L(\mathcal{X}; \mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (\mathbf{y}^i - \phi^i(\mathbf{X}; \mathbf{w}))^2,$$

skąd

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}^a} = \sum_b \frac{\partial L}{\partial \phi^b} \frac{\partial \phi^b}{\partial \mathbf{w}^a}.$$

Jednocześnie

$$\frac{\partial L}{\partial \phi^b} = \mathbf{y}^b - \phi^b, \quad \frac{\partial \phi^b}{\partial \mathbf{w}^a} = \mathbf{X}^{ba},$$

skąd

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}^a} = \sum_b \mathbf{X}^{ba} (\mathbf{y}^b - \phi^b),$$

co możemy zapisać w kompaktowej formie macierzowej

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{X}^T (\mathbf{y} - \phi) = \mathbf{X}^T (\mathbf{y} - \mathbf{X} \mathbf{w}).$$

Przyrównując powyższe równanie do 0 otrzymujemy następujący wzór na estymatę MLE parametrów \mathbf{w}

$$\mathbf{w}_{\text{MLE}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} = \mathbf{X}^+ \mathbf{y},$$

gdzie \mathbf{X}^+ oznacza *pseudoodwrotność Moore'a-Penrose'a*, którą można efektywnie obliczyć korzystając z rozkładu SVD macierzy \mathbf{X} .

3.2 Regresja bayesowska

Estymacja największej wiarygodności daje nam jedynie punktową wartość parametru \mathbf{w} . Pełniejszą informację o parametrze \mathbf{w} możemy uzyskać rozpatrując rozkład a posteriori $p(\mathbf{w} \mid \mathcal{X})$. Jeśli jako prior przyjmimy rozkład normalny $\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_0, \boldsymbol{\Sigma}_0)$ to zauważmy, iż otrzymujemy instancję liniowego modelu Gaussowskiego

$$\begin{aligned} \mathbf{y} \mid \mathbf{w} &\sim \mathcal{N}(\mathbf{X} \mathbf{w}, \sigma^2 \mathbf{1}) \\ \mathbf{w} &\sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_0, \boldsymbol{\Sigma}_0) \end{aligned},$$

skąd rozkład a posteriori jest rozkładem normalnym

$$\mathbf{w} \mid \mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_m, \boldsymbol{\Sigma}_m)$$

z parametrami

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Sigma}_m &= [\boldsymbol{\Sigma}_0^{-1} + \sigma^{-2} \mathbf{X}^T \mathbf{X}]^{-1} \\ \boldsymbol{\mu}_m &= \boldsymbol{\Sigma}_m [\sigma^{-2} \mathbf{X}^T \mathbf{y} + \boldsymbol{\Sigma}_0^{-1} \boldsymbol{\mu}_0] \end{aligned}.$$

Rozkład predykcyjny dla nowej obserwacji y poczynionej w punkcie \mathbf{t} jest dany przez

$$p(y(\mathbf{t}) \mid \mathcal{X}) = \int p(y(\mathbf{t}) \mid \mathbf{w}) p(\mathbf{w} \mid \mathcal{X}) d\mathbf{w},$$

skąd

$$y(\mathbf{t}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{t}^T \boldsymbol{\mu}_m, \sigma^2 + \mathbf{t}^T \boldsymbol{\Sigma}_m \mathbf{t}).$$

3.3 Regularyzacja

Regularyzacją nazywamy proces polegający na wprowadzeniu ad hoc do zagadnienia optymalizacji dodatkowych członów tak, aby rozwiązanie było regularne (prostsze, nieosobliwe, jednoznaczne). W przypadku funkcji kosztu L najczęściej dodajemy człon penalizujący rozwiązanie o dużej normie estymowanego parametru tj. człon postaci $\lambda\|\mathbf{w}\|$ dla pewnej normy $\|\cdot\|$ i hiperparametru λ zwanego *siłą regularyzacji*. W kontekście bayesowskim regularyzację można również rozumieć jako użycie estymacji MAP zamiast MLE dla odpowiednio dobranego priora nad estymowanymi parametrami.

Jeśli dla modelu regresji liniowej jako człon regularyzujący przyjmiemy $\lambda\|\mathbf{w}\|_2^2$, tj. kwadrat normy L2 wektora estymowanych parametrów, to otrzymana funkcja kosztu ma postać

$$L(\mathcal{X}; \mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n [y_i - \phi(\mathbf{x}_i; \mathbf{w})]^2 + \lambda\|\mathbf{w}\|_2^2.$$

Analogiczną postać można otrzymać rozważając estymatę MAP dla identycznego modelu statystycznego z priorem na wartości parametrów \mathbf{w} będącym rozkładem normalnym $\mathcal{N}(0, \tau^2 \mathbf{1})$ dla odpowiednio dobranego τ . Dla powyższej funkcji kosztu możemy bez problemu wyznaczyć wartość \mathbf{w} , która ją minimalizuje. Istotnie korzystając z wyników dla modelu regresji liniowej mamy

$$\mathbf{w}_{\text{MAP}} = (\lambda \mathbf{1} + \mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y},$$

Zagadnienie minimalizacji funkcji kosztu będącej formą kwadratową z dodanym członem regularyzującym w postaci normy L2 wektora nazywamy *regresją grzbietową* (z ang. *ridge regression*).

Innym przykładem regularyzacji jest tzw. regularyzacja L1, która polega na dodaniu do funkcji kosztu członu postaci $\lambda \sum_{j=1}^d |\mathbf{w}^j|$ tj. normy L1 wektora wag. Zagadnienie optymalizacji formy kwadratowej z członem regularyzującym L1 nazywamy *regresją LASSO*. W takim przypadku nie da się prosto analitycznie znaleźć estymaty punktowej MAP i trzeba używać algorytmów optymalizacji numerycznej. W ogólności można połączyć regularyzacje L1 i L2 tj. rozważać zregularyzowaną funkcję kosztu postaci

$$L(\mathcal{X}; \mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n [y_i - \phi(\mathbf{x}_i; \mathbf{w})]^2 + \lambda_1 \|\mathbf{w}\|_1 + \lambda_2 \|\mathbf{w}\|_2^2.$$

Zagadnienie minimalizacji takiej funkcji kosztu nazywamy ElasticNet i tak jak w przypadku LASSO musimy korzystać z algorytmów optymalizacji

numerycznej. Często wykorzystuje się tutaj algorytmy bezgradientowe np. coordinate descent.

3.4 Regresja kwantylowa

Zastanówmy się wpierw na czym tak naprawdę polega modelowanie rozkładu warunkowego $y(\mathbf{x}) \mid \mathbf{w}$ za pomocą określonego rozkładu prawdopodobieństwa. Na pierwszy rzut oka może się wydawać, iż takie podejście wprowadza bardzo silne założenia, a co za tym idzie ograniczenia w stosowaniu naszego modelu. Zauważmy jednak, iż w przypadku podejścia typu *likelihood* rozkład jest niejako wybierany w taki sposób, aby jego parametry były użyteczne. Istotnie w przypadku regresji zwykle nie ma jak zweryfikować rzeczywistego rozkładu $y(\mathbf{x})$, gdyż mamy tylko po jednej wartości y dla danego \mathbf{x} . Modelując $y(\mathbf{x})$ rozkładem normalnym chodzi nam zatem raczej o to, że w takim modelu chcemy znaleźć parametr (prostą) taką, że masa prawdopodobieństwa punktów po obu stronach prostej jest jednakowa i większość masy jest zgromadzona w bliskiej odległości od prostej (wynika to z kształtu rozkładu normalnego, który nie posiada tzw. ciężkich ogonów)

W takim ujęciu możemy zakładać różne inne rozkłady na $y(\mathbf{x})$ jeśli interesują nas proste, które inaczej mają rozdzielać masę prawdopodobieństwa między punkty lub też dopuszczać obserwacje leżące daleko od prostej regresji. Problemem w przypadku rozkładu normalnego jest jego czułość na wartości odstające, gdyż w rozkładzie normalnym ogony tego rozkładu mają stosunkowo niewielką masę prawdopodobieństwa. Chcielibyśmy zatem rozkład z ciężkimi ogonami (z ang. *heavy tails*). Dodatkowo chcielibyśmy mieć rozkład, który pozwala znaleźć prostą, która nie rozkłada masy po równo, ale np. tak, że 90% masy prawdopodobieństwa jest pod nią. Oba te problemy możemy rozwiązać modelując rozkład $y(\mathbf{x})$ przez tzw. *asymetryczny rozkład Laplace'a* (z ang. *Asymmetric Laplace Distribution*, *ALD*).

Definicja 3.1 (Asymetrycznego rozkładu Laplace'a). Mówimy, iż zmienna losowa rzeczywista X ma asymetryczny rozkład Laplace'a, tzn. $X \sim \text{ALD}(m, \lambda, q)$ jeśli jej gęstość wyraża się wzorem

$$p(x; m, \lambda, q) = \frac{q(1-q)}{\lambda} \begin{cases} e^{-\frac{q-1}{\lambda}(x-m)}, & x \leq m \\ e^{-\frac{q}{\lambda}(x-m)}, & x \geq m \end{cases}.$$

Zauważmy, że dystrybuanta rozkładu ALD ma postać

$$F(x; m, \lambda, q) = \begin{cases} qe^{\frac{1-q}{\lambda}(x-m)}, & x \leq m \\ 1 - (1-q)e^{-\frac{q}{\lambda}(x-m)}, & x \geq m \end{cases}$$

zatem parametr q określa rząd kwantyla m . W przypadku regresji możemy zatem modelować wartość $y(\mathbf{x})$ przez rozkład ALD dla ustalonego q postaci

$$y(\mathbf{x}) \mid \mathbf{w}, \lambda \sim \text{ALD}(\phi(\mathbf{x}; \mathbf{w}), \lambda, q),$$

gdzie λ pełni podobną rolę jak σ w przypadku rozkładu normalnego. Widzimy wówczas, iż estymacja MLE \mathbf{w} daje prostą regresję taką, że ułamek $1 - q$ masy prawdopodobieństwa znajduje się pod prostą (estymujemy zatem warunkowy kwantyl rzędu q). Zanegowana logarytmiczna funkcja wiarygodności (inaczej funkcja kosztu) dla modelu ALD ma postać

$$L(\mathcal{X}; \mathbf{w}, \lambda) = \sum_{i=1}^n [(q-1)r_i\theta(-r_i) + qr_i\theta(r_i)],$$

gdzie

$$r_i := y_i - \phi(\mathbf{x}_i; \mathbf{w})$$

są tzw. *rezyduami*, a θ oznacza funkcję skokową Heaviside'a. Taką funkcję kosztu nazywamy *pinball loss*, a otrzymane zagadnienie optymalizacji – regresję kwantylową. Modelowanie $y(\mathbf{x})$ za pomocą rozkładu ALD pozwala nam w prosty i „robust” sposób znaleźć niepewność naszych predykcji punktowych, tj. dla danego zagadnienia dopasowujemy trzy modele oparte na ALD dla $q = 0.5$ (estymacja punktowa, mediana, odporna na outliery) oraz np. $q = 0.1$ i $q = 0.9$ będące oszacowaniem niepewności punktowej estymaty. Minimalizację powyższej funkcji kosztu można przedstawić jako zagadnienie programowania liniowego i efektywnie rozwiązać korzystając z odpowiednich solverów. Można również dodać człon regularyzujący w postaci normy L1 wektora estymowanych parametrów.

3.5 Regresja GAM

Zastępując w liniowej regresji wielokrotnej predyktory przez ich transformacje (również nieliniowe) otrzymujemy *uogólniony model addytywny* (ang. *generalized additive model*, *GAM*)

$$y(\mathbf{x}) \mid \beta_0, f_1, \dots, f_d \sim \mathcal{N}(\phi(\mathbf{x}; \beta_0, f_1, \dots, f_d), \sigma^2),$$

gdzie

$$\phi(\mathbf{x}; \beta_0, f_1, \dots, f_d) = \beta_0 + f_1(\mathbf{x}^1) + \dots + f_d(\mathbf{x}^d).$$

Dopuszczalnymi transformacjami f_i są między innymi: wielomiany, funkcje sklejane, regresja lokalna i dowolne ich kombinacje. Jeśli to możliwe to GAM można dopasować metodą klasyczną (np. najmniejszych kwadratów), w ogólności stosuje się efektywny algorytm dopasowania wstecznego (ang. *backfitting*). GAM pozwala dopasować funkcję nieliniową do każdego predyktora, co potencjalnie umożliwia osiągnięcie większej dokładności predykcji. Z uwagi na addytywność modelu możemy analizować indywidualny wpływ predyktorów na odpowiedź. Addytywność jest też największym ograniczeniem modelu, bo pomija interakcje między zmiennymi – możliwe są rozszerzenia dopuszczające jawne interakcje między np. wybranymi parami zmiennych.

```
1 # Backfitting
2 # -----
3 # 1. Assume we are given a dataset  $\mathcal{X} = \{y_i(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^N$ .
4
5 # 2. Initialize
6  $\beta_0 = 1/N \sum_{i=1}^N y_i$ 
7 for j in range(1, d+1):
8      $f_j = \text{lambda } x: 0$ 
9
10 # 3. Iterative improvement
11 while not converged:
12     for j in range(1, d+1):
13          $f_j = \text{Smooth}(\{(\mathbf{x}_i^j, y_i - \beta_0 - \sum_{k \neq j} f_k(\mathbf{x}_i^k))\}_{i=1}^N)$ 
14         # (Optional) Center the function  $f_j$  by subtracting
15          $1/N \sum_{i=1}^N f_j(\mathbf{x}_i^j)$ 
16     # Check convergence criteria
17     ...
```

3.6 Procesy gaussowskie

Jak już wspomnieliśmy macierz kowariancji n -wymiarowej zmiennej losowej \mathbf{x} o wartości oczekiwanej $\boldsymbol{\mu}$ jest zdefiniowana jako

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{E}[(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T].$$

Wiemy również, iż macierz ta jest nieujemnie określona. Pokażemy teraz, iż dla każdej nieujemnie określonej macierzy symetrycznej \mathbf{K} wymiaru $n \times n$ istnieje n -wymiarowa zmienna losowa o wielowymiarowym rozkładzie

normalnym, dla której \mathbf{K} jest macierzą kowariancji. Istotnie dla każdej nieujemnie określonej macierzy symetrycznej istnieje macierz \mathbf{L} taka, że

$$\mathbf{K} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T,$$

jest to tzw. *dekompozycja Choleskiego*. Niech $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{1})$, wówczas zmienna losowa \mathbf{Lz} ma rozkład o zerowej wartości oczekiwanej i macierzy kowariancji

$$\mathbb{E}[(\mathbf{Lz})(\mathbf{Lz})^T] = \mathbb{E}[\mathbf{Lzz}^T\mathbf{L}^T] = \mathbf{L}\mathbb{E}[\mathbf{zz}^T]\mathbf{L}^T = \mathbf{L}\mathbf{1}\mathbf{L}^T = \mathbf{K}.$$

Powyższe własności wskazują, iż macierze kowariancji można w pewnym sensie utożsamiać z nieujemnie określonymi macierzami symetrycznymi.

Definicja 3.2 (Funkcji kowariancji). Funkcję $k : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ taką, że $\forall m \in \mathbb{N} : \forall X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m\} \subset \mathbb{R}^n$ macierz

$$k(X, X) = \begin{bmatrix} k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & \cdots & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_m) \\ k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) & k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2) & \cdots & k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_m) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k(\mathbf{x}_m, \mathbf{x}_1) & k(\mathbf{x}_m, \mathbf{x}_2) & \cdots & k(\mathbf{x}_m, \mathbf{x}_m) \end{bmatrix}$$

jest dodatnio określoną macierzą symetryczną nazywamy funkcją kowariancji, jądrem dodatnio określonym (z ang. *positive definite kernel*) lub *jądrem Mercera*.

Dla dwóch zbiorów punktów $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m\} \subset \mathbb{R}^n$ i $Y = \{\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_s\} \subset \mathbb{R}^n$ i funkcji kowariancji k wprowadzimy oznaczenie

$$k(X, Y) := \begin{bmatrix} k(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1) & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_2) & \cdots & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_s) \\ k(\mathbf{x}_2, \mathbf{y}_1) & k(\mathbf{x}_2, \mathbf{y}_2) & \cdots & k(\mathbf{x}_2, \mathbf{y}_s) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k(\mathbf{x}_m, \mathbf{y}_1) & k(\mathbf{x}_m, \mathbf{y}_2) & \cdots & k(\mathbf{x}_m, \mathbf{y}_s) \end{bmatrix}.$$

Poniżej podajemy kilka przykładów funkcji kowariancji

- *Gaussian kernel* dla normy $\|\cdot\|$ i hiper-parametrów a, l (amplituda i skala długości)

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = a^2 \exp \left\{ -\frac{1}{2l^2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 \right\}$$

- *Periodic kernel* dla normy $\|\cdot\|$ i hiper-parametrów a, l, p (amplituda, skala długości, okres zmienności)

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = a^2 \exp \left\{ -\frac{2}{l^2} \sin^2 \left(\frac{\pi}{p} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \right) \right\}$$

- *White noise kernel* dla hiper-parametru σ

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sigma^2 \delta_{\mathbf{x}, \mathbf{y}}$$

- *Matérn kernel* dla normy $\|\cdot\|$ i hiper-parametrów a, l, ν (amplituda, skala długości, regularność)

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = a^2 \frac{2^{1-\nu}}{\Gamma(\nu)} \left(\frac{\sqrt{2\nu}}{l} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \right)^\nu K_\nu \left(\frac{\sqrt{2\nu}}{l} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \right),$$

gdzie $\Gamma(x)$ to funkcja gamma Eulera, a $K_\nu(x)$ to zmodyfikowana funkcja Bessela 2-go rodzaju rzędu ν .

Twierdzenie 3.1 (Własności funkcji kowariancji). Suma lub iloczyn dwóch funkcji kowariancji oraz złożenie funkcji kowariancji z wielomianem o nieujemnych współczynnikach jest również funkcją kowariancji.

Definicja 3.3 (Procesu gaussowskiego). Procesem Gaussowskim (z ang. *Gaussian Process*) nazywamy rodzinę skalarnych zmiennych losowych indeksowanych przez punkty $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$

$$\mathcal{GP} = \{f_{\mathbf{x}} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\}$$

taką że każdy skończony podzbiór \mathcal{GP} ma łącznie wielowymiarowy rozkład normalny tj. dla dowolnego zbioru $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m\} \subset \mathbb{R}^n$ zachodzi

$$\begin{bmatrix} f_{\mathbf{x}_1} \\ \vdots \\ f_{\mathbf{x}_m} \end{bmatrix} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_X, \boldsymbol{\Sigma}_X).$$

Zauważmy, iż proces Gaussowski możemy jednoznacznie zdefiniować podając przepisy na parametry $\boldsymbol{\mu}_X$ i $\boldsymbol{\Sigma}_X$ dla dowolnego zbioru X . W praktyce

często przyjmujemy $\boldsymbol{\mu}_X = \mathbf{0}$, natomiast przepisem na macierz kowariancji może być zdefiniowana wyżej funkcja kowariancji $k(X, X)$ tj.

$$\begin{bmatrix} f_{\mathbf{x}_1} \\ \vdots \\ f_{\mathbf{x}_m} \end{bmatrix} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, k(X, X)).$$

Process Gaussowski daje nam w praktyce rozkład prawdopodobieństwa nad funkcjami $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$, których charakter jest określony przez jądro k (np. funkcja gładka dla jądra Gaussowskiego, okresowa dla jądra periodycznego, itp.). Zauważmy, że nie wnioskujemy tu o parametrach konkretnej rodziny funkcji (jak w przypadku regresji liniowej); interesuje nas jedynie rozkład predykcyjny. Załóżmy, iż w dokładnie znanych przez nas punktach $X = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_m\}$ zaobserwowaliśmy wartości pewnej funkcji, o których zakładamy, iż pochodzą z procesu Gaussowskiego zadanego jądrem k , które wyraża nasze założenia a priori co do charakteru badanej funkcji

$$\mathbf{f}_X = \begin{bmatrix} f_{\mathbf{x}_1} \\ \vdots \\ f_{\mathbf{x}_m} \end{bmatrix} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, k(X, X)).$$

Powiedzmy, iż chcemy znać wartości \mathbf{f}_Y tej funkcji w zadanych punktach $Y = \{\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_s\}$. Ponieważ założyliśmy, iż wartości funkcji pochodzą z procesu Gaussowskiego, więc rozkład łączny \mathbf{f}_X i \mathbf{f}_Y jest rozkładem normalnym

$$\begin{bmatrix} \mathbf{f}_X \\ \mathbf{f}_Y \end{bmatrix} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, \begin{bmatrix} k(X, X) & k(X, Y) \\ k(Y, X) & k(Y, Y) \end{bmatrix}\right).$$

Zauważmy, iż z twierdzenia o własnościach niezdegenerowanego rozkładu normalnego wnioskujemy, iż warunkowy $\mathbf{f}_Y \mid \mathbf{f}_X$ jest również rozkładem normalnym o parametrach

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu} &= k(Y, X)k^{-1}(X, X)\mathbf{f}_X \\ \boldsymbol{\Sigma} &= k(Y, Y) - k(Y, X)k^{-1}(X, X)k(X, Y) \end{aligned}$$

Dodatkową niepewność związaną z pomiarem wartości \mathbf{f}_X możemy uchwycić zmieniając postać jądra

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leftarrow k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \mathcal{I}_X(\mathbf{x})\sigma^2\delta_{\mathbf{x}, \mathbf{y}},$$

gdzie σ jest hiper-parametrem określającym precyzję pomiaru. Oczywiście k jest dalej funkcją kowariancji, gdyż takie podstawienie powoduje jedynie

dodanie dodatnich członów do pewnych elementów diagonalnych macierzy kowariancji, więc macierz ta jest nadal symetryczna i dodatnio określona. Wówczas rozkład predykcyny ma parametry

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu} &= k(Y, X) [k(X, X) + \sigma^2 \mathbf{1}]^{-1} \mathbf{f}_X \\ \boldsymbol{\Sigma} &= k(Y, Y) - k(Y, X) [k(X, X) + \sigma^2 \mathbf{1}]^{-1} k(X, Y) \end{aligned} \quad .$$

3.7 Naiwny klasyfikator bayesowski

Przechodzimy teraz do zagadnienia klasyfikacji, tj. predykcji zmiennej t pochodzącej ze skończonego zbioru kategorii (inaczej klas) dla danego wektora cech \mathbf{x} . Będziemy rozważać jedynie modele probabilistyczne, których wyjściem jest zbiór prawdopodobieństw $p_i(\mathbf{x})$ dla $i = 1, \dots, k$, gdzie k jest liczbą klas, a $p_i(\mathbf{x})$ określa prawdopodobieństwo, iż prawidłową klasą dla wektora \mathbf{x} jest i -ta klasa. Oczywiście musi zachodzić

$$\sum_j p_j(\mathbf{x}) = 1$$

dla dowolnego \mathbf{x} . Przewidywaną klasą zostaje następnie ta z największym prawdopodobieństwem. W przypadku klasyfikacji binarnej są natomiast możliwe inne reguły, np. przewidywaną klasą jest 0 jeśli $p_0 \geq p_{\text{threshold}}$ dla pewnego ustalonego progu niekoniecznie równego 0.5.

Pierwszym modelem, który rozważymy będzie bardzo prosty model bayesowski. Korzystając z twierdzenia Bayesa możemy zapisać

$$p_i(\mathbf{x}) = p(c_i | \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} | c_i)p(c_i)}{\sum_j p(\mathbf{x} | c_j)p(c_j)} .$$

Jeśli $\mathcal{X} = \{t_i(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^n$ oznacza nasz zbiór obserwacji i.i.d. to gęstości prawdopodobieństwa $p(\mathbf{x} | c_i)$ i $p(c_i)$ możemy oszacować z danych \mathcal{X} . W przypadku drugiego członu możemy go prosto oszacować jako

$$p(c_i) = \frac{|\{t | t = c_i, t \in \mathcal{X}\}|}{|\mathcal{X}|} .$$

W przypadku pierwszego członu sytuacja jest bardziej skomplikowana. Możemy założyć pewien rozkład parametryczny dla rozkładu warunkowego $p(\mathbf{x} | c_i)$ dla każdej klasy i następnie oszacować parametry tego rozkładu z danych. Możemy również wykorzystać KDE i estymować rozkłady w sposób nieparametryczny. Oba te podejścia mają jednak problem związany z

tzew. *klątwą wymiaru* (z ang. *curse of dimensionality*). Istotnie przestrzenie o dużej liczbie wymiarów są bardzo „puste”, tj. aby wyczerpująco wypróbować taką przestrzeń potrzebujemy wykładniczo wielu punktów. Jedną z możliwości poradzenia sobie z klątwą jest wprowadzenie naiwnego założenia o warunkowej niezależności cech w wektorze $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_d]^T$. Wówczas gęstości prawdopodobieństw $p(\mathbf{x} \mid c_i)$ można zapisać jako

$$p(\mathbf{x} \mid c_i) = p(x_1, \dots, x_d \mid c_i) = \prod_{j=1}^d p(x_j \mid c_i).$$

Teraz estymacja rozkładów warunkowych $p(x_j \mid c_i)$ dla każdej z klasy jest o wiele prostsza i możemy wykorzystać jedno ze wspomnianych podejść, tj. albo estymację parametrów pewnego rozkładu, albo KDE. Przewidywaną klasą dla wektora cech zostaje więc

$$t(\mathbf{x}) = \arg \max_{c_i \in \{c_1, \dots, c_k\}} p_i(\mathbf{x}) = \arg \max_{c_i \in \{c_1, \dots, c_k\}} p(c_i) \prod_{j=1}^d p(x_j \mid c_i).$$

3.8 Klasyfikator najbliższych sąsiadów

Klasyfikator najbliższych sąsiadów (z ang. *k Nearest Neighbors*) jest jednym z najprostszych klasyfikatorów, w którym prawdopodobieństwo $p_i(\mathbf{x})$ jest dane wzorem

$$p_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{\kappa} \sum_{\mathbf{x}' \in N(\mathbf{x}; \kappa, d)} [t(\mathbf{x}') = c_i],$$

gdzie $N(\mathbf{x}; \kappa, d)$ jest zbiorem κ najbliższych sąsiadów punktu \mathbf{x} ze zbioru obserwacji \mathcal{X} względem ustalonej metryki, półmetryki lub podobieństwa d , a $[\cdot]$ oznacza nawias Iwersona. Metodę najbliższych sąsiadów można również wykorzystać do regresji, gdzie zamiast sumowania wartości nawiasów Iwersona, sumujemy wartości zmiennej objaśnianej dla sąsiadów punktu \mathbf{x} ze zbioru \mathcal{X} (powoduje to, że model taki potrafi tylko interpolować wartości, więc nie jest dobrym modelem dla regresji).

Klasyfikator kNN jest bardzo elastycznym modelem z nieliniową granicą decyzyjną. Jakość klasyfikacji silnie zależy od lokalnej gęstości punktów w przestrzeni oraz wybranej wartości κ , będącej hiperparametrem tego modelu. Ogólnie małe κ powoduje, że kNN ma duży variance i dość „poszarpaną” granicę decyzyjną, natomiast duże κ powoduje, że kNN ma duży bias i „gładką” granicę decyzyjną. Typowo wykorzystywane funkcje d to metryka euklidesowa, półmetryka euklidesowa, metryka Manhattan i podobieństwo cosinusowe.

Jedną z modyfikacji klasyfikatora kNN, który może polepszyć wyniki w przypadku, gdy w naszej przestrzeni istnieją obszary, w których mamy małą gęstość punktów ze zbioru \mathcal{X} jest *ważenie sąsiadów*, które polega na tym, iż prawdopodobieństwa danej klasy wśród κ sąsiadów obliczamy teraz jako średnią ważoną, gdzie wagą jest odwrotność odległości danego sąsiada od nowego wektora cech $w(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 1/d(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, tj.

$$p_i(\mathbf{x}) = \frac{\sum_{\mathbf{x}' \in N(\mathbf{x}; \kappa, d)} w(\mathbf{x}, \mathbf{x}') [t(\mathbf{x}') = c_i]}{\sum_{\mathbf{x}' \in N(\mathbf{x}; \kappa, d)} w(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}.$$

W przypadku naiwnego kNN podczas treningu zapamiętujemy jedynie zbiór \mathcal{X} natomiast naiwna implementacja predykcji ma złożoność czasową $O(\kappa nm)$, gdzie m jest wymiarem wektora cech, przy założeniu, że złożoność obliczenia funkcji d dla pary punktów ma złożoność $O(m)$. Jest to nieakceptowalna złożoność, gdyż zwykle chcemy używać klasyfikatora kNN do setek milionów punktów. Dwa podejścia, które stosuje się zwykle do rozwiązania tego problemu to:

- zbudowanie odpowiedniej struktury danych w fazie treningu, aby w czasie predykcji można było szybciej znajdować najbliższych sąsiadów (np. k-d tree, ball tree);
- wykorzystanie algorytmów aproksymacyjnych (z ang. *Approximate Nearest Neighbors*, *ANN*) do znajdowania sąsiadów, którzy niekoniecznie naprawdę są najbliżsi, ale aproksymacja jest wystarczająco dobra do praktycznych zastosowań.

Obecnie to drugie podejście jest dominujące i wykorzystywane na przykład w przypadku dużych modeli językowych do wyszukiwania kontekstów dla danych zapytań (z ang. *Retrieval Augmented Generation*).

3.9 Regresja logistyczna

Rozpatrzmy teraz problem klasyfikacji binarnej z perspektywy estymacji MLE parametrów. Niech $\mathcal{X} = \{t_i(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^n$ będzie zbiorem obserwacji i.i.d., gdzie zakładamy, iż $t \in \{0, 1\}$. Jako model statystyczny przyjmujemy, iż klasa $t(\mathbf{x})$ pochodzi z rozkładu Bernoulliego z parametrem $\pi(\mathbf{x}; \mathbf{w})$ (prawdopodobieństwem klasy pozytywnej, zwanym również funkcją wiążącą, z ang. *link function*) zależnym od estymowanych parametrów \mathbf{w}

$$t(\mathbf{x}) \mid \mathbf{w} \sim \text{Ber}(\pi(\mathbf{x}; \mathbf{w})).$$

W przypadku regresji logistycznej jako funkcję $\pi(\mathbf{x}; \mathbf{w})$ przyjmiemy $\sigma(\phi(\mathbf{x}; \mathbf{w}))$, gdzie

$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

to tzw. *funkcja logistyczna* (będąca szczególnym przypadkiem funkcji sigmoidalnej), natomiast $\phi(\mathbf{x}; \mathbf{w})$ może być dowolną funkcją wykorzystywaną do zagadnienia regresji. W przypadku regresji logistycznej przyjmujemy prosty model liniowy

$$\phi(\mathbf{x}; \mathbf{w}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x}.$$

Ponownie zauważmy, iż taka postać uwzględnia człon stały poprzez podstawienie $\mathbf{x} \leftarrow [\mathbf{x}^T \ 1]^T$. Funkcja wiarygodności dla powyższego modelu statystycznego ma postać

$$\mathcal{L}(\mathcal{X}; \mathbf{w}) = \prod_{i=1}^n \pi(\mathbf{x}_i; \mathbf{w})^{t_i} (1 - \pi(\mathbf{x}_i; \mathbf{w}))^{1-t_i},$$

skąd funkcja kosztu

$$\begin{aligned} L(\mathcal{X}; \mathbf{w}) &= - \sum_{i=1}^n [t_i \log \pi(\mathbf{x}_i; \mathbf{w}) + (1 - t_i) \log(1 - \pi(\mathbf{x}_i; \mathbf{w}))] \\ &= - \sum_{i=1}^n [t_i \log \sigma(\phi(\mathbf{x}_i; \mathbf{w})) + (1 - t_i) \log(1 - \sigma(\phi(\mathbf{x}_i; \mathbf{w})))]. \end{aligned}$$

Taką funkcję kosztu nazywamy *entropią krzyżową* (z ang. *cross-entropy function*). Niestety dla takiej postaci funkcji kosztu nie można znaleźć minimum w postaci analitycznej, dlatego musimy wykorzystywać algorytmy optymalizacji numerycznej, które najczęściej wykorzystują pierwsze pochodne funkcji kosztu po parametrach. Wyznamy więc jeszcze pochodną funkcji L po parametrach \mathbf{w} . Wprowadzając macierz $\mathbf{X}^{ij} = \mathbf{x}_i^j$ oraz wektory $\mathbf{t}^i = t_i$, $\phi^i = \phi(\mathbf{x}_i; \mathbf{w}) = \sum_j \mathbf{X}^{ij} \mathbf{w}^j$, $\sigma^i = \sigma(\phi^i)$ możemy zapisać

$$L(\mathcal{X}; \mathbf{w}) = - \sum_{i=1}^n [\mathbf{t}^i \log \sigma^i + (1 - \mathbf{t}^i) \log(1 - \sigma^i)].$$

W takim razie mamy

$$\frac{\partial L}{\partial \phi^a} = \sum_b \frac{\partial L}{\partial \sigma^b} \frac{\partial \sigma^b}{\partial \phi^a},$$

gdzie

$$\frac{\partial L}{\partial \sigma^b} = - \sum_i \left[\frac{t^i}{\sigma^i} \delta_{ib} - \frac{1 - t^i}{1 - \sigma^i} \delta_{ib} \right] = \frac{1 - t^b}{1 - \sigma^b} - \frac{t^b}{\sigma^b}$$

oraz

$$\frac{\partial \sigma^b}{\partial \phi^a} = \sigma'(\phi^b) \delta_{ab}, \quad \sigma'(z) = \frac{e^{-z}}{(1 + e^{-z})^2} = \sigma(z)(1 - \sigma(z))$$

zatem

$$\frac{\partial L}{\partial \phi^a} = \left(\frac{1 - t^a}{1 - \sigma^a} - \frac{t^a}{\sigma^a} \right) \sigma^a (1 - \sigma^a) = \sigma^a - t^a.$$

W takim razie, z powyższego mamy

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}^a} = \sum_b \frac{\partial L}{\partial \phi^b} \frac{\partial \phi^b}{\partial \mathbf{w}^a} = \sum_b \mathbf{X}^{ba} (\sigma^b - t^b),$$

co możemy zapisać w zwartej postaci macierzowej

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{X}^T (\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{t}).$$

3.10 Regresja softmax

Regresję logistyczną możemy w prosty sposób uogólnić na przypadek klasyfikacji jednej z k klas. Zakładamy teraz, iż zbiór obserwacji i.i.d. ma postać $\mathcal{X} = \{t_i(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^n$ dla $t \in \{1, \dots, k\}$. Nasz model statystyczny uogólnimy do postaci rozkładu kategoryjnego (z ang. *categorical distribution* lub *multinomial distribution*) z parametrem $\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x}; \mathbf{W})$ (wektorem prawdopodobieństw każdej klasy) zależnym od estymowanych parametrów \mathbf{W}

$$t(\mathbf{x}) \mid \mathbf{W} \sim \text{Cat}(\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x}; \mathbf{W})).$$

W przypadku regresji softmax jako funkcję $\boldsymbol{\pi} : \mathbb{R}^m \mapsto [0; 1]^k$ przyjmujemy funkcję $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}; \mathbf{W}))$, gdzie $\boldsymbol{\sigma} : \mathbb{R}^k \mapsto [0; 1]^k$

$$\sigma^i(z) = \frac{\exp(z^i)}{\sum_{j=1}^k \exp(z^j)}$$

to tzw. *funkcja softmax*, natomiast $\boldsymbol{\phi} : \mathbb{R}^m \mapsto \mathbb{R}^k$, to dowolna funkcja. W przypadku regresji softmax przyjmujemy prosty model liniowy

$$\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}; \mathbf{W}) = \mathbf{W} \mathbf{x}.$$

Funkcja wiarygodności dla powyższego modelu ma postać

$$\mathcal{L}(\mathcal{X}; \mathbf{W}) = \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^k \pi^j(\mathbf{x}_i; \mathbf{W})^{[t_i=j]},$$

skąd

$$\begin{aligned} L(\mathcal{X}; \mathbf{W}) &= - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^k [t_i = j] \log \pi^j(\mathbf{x}_i; \mathbf{W}) \\ &= - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^k [t_i = j] \log \sigma^j(\phi(\mathbf{x}_i; \mathbf{W})) \end{aligned}$$

Niestety dla takiej postaci funkcji kosztu nie można znaleźć minimum w postaci analitycznej, dlatego musimy wykorzystywać algorytmy optymalizacji numerycznej. Wyznamy więc jeszcze pierwsze pochodne funkcji L po parametrach \mathbf{W} . Wprowadźmy macierze

$$\begin{aligned} \mathbf{T}^{ij} &= [t_i = j] \\ \mathbf{X}^{ij} &= \mathbf{x}_i^j \\ \Phi^{ij} &= \phi^j(\mathbf{x}_i; \mathbf{W}) = \sum_l \mathbf{W}^{jl} \mathbf{X}^{il} \\ \mathbf{S}^{ij} &= \sigma^j(\phi(\mathbf{x}_i; \mathbf{W})) = \frac{\exp(\Phi^{ij})}{\sum_{l=1}^k \exp(\Phi^{il})} \end{aligned},$$

gdzie każdy wiersz macierzy \mathbf{X} jest wektorem cech danego przykładu; każdy wiersz \mathbf{T} jest tzw. *wektorem one-hot* dla danego przykładu tj. wektorem binarnym, w którym dokładnie na jednej pozycji jest wartość 1 i pozycja ta odpowiada prawidłowej klasie dla danego przykładu; każdy wiersz macierzy Φ jest wektorem *mlogitów* tj. liczb rzeczywistych, które po zastosowaniu funkcji softmax dają wartości prawdopodobieństwa każdej klasy. Wówczas

$$L(\mathcal{X}; \mathbf{W}) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^k \mathbf{T}^{ij} \log \mathbf{S}^{ij},$$

skąd

$$\frac{\partial L}{\partial \Phi^{ab}} = \sum_{c,d} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{S}^{cd}} \frac{\partial \mathbf{S}^{cd}}{\partial \Phi^{ab}},$$

gdzie

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{S}^{cd}} = - \sum_{i,j} \frac{\mathbf{T}^{ij}}{\mathbf{S}^{ij}} \delta_{ic} \delta_{jd} = - \frac{\mathbf{T}^{cd}}{\mathbf{S}^{cd}}$$

oraz

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{S}^{cd}}{\partial \Phi^{ab}} &= \exp(\Phi^{cd}) \frac{\delta_{ac} \delta_{bd} [\sum_l \exp(\Phi^{cl})] - \delta_{ac} \exp(\Phi^{cb})}{[\sum_l \exp(\Phi^{cl})]^2} \\ &= \mathbf{S}^{cd} \delta_{ac} \delta_{bd} - \delta_{ac} \mathbf{S}^{cd} \mathbf{S}^{cb} \end{aligned}$$

Z powyższego

$$\frac{\partial L}{\partial \Phi^{ab}} = \sum_{c,d} \frac{\mathbf{T}^{cd}}{\mathbf{S}^{cd}} (\delta_{ac} \mathbf{S}^{cd} \mathbf{S}^{cb} - \mathbf{S}^{cd} \delta_{ac} \delta_{bd}) = \mathbf{S}^{ab} - \mathbf{T}^{ab},$$

gdzie skorzystaliśmy z faktu, iż z konstrukcji dla dowolnego wiersza a macierzy \mathbf{T} zachodzi $\sum_d \mathbf{T}^{ad} = 1$. W takim razie

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{W}^{ab}} = \sum_{c,d} \frac{\partial L}{\partial \Phi^{cd}} \frac{\partial \Phi^{cd}}{\partial \mathbf{W}^{ab}} = \sum_c (\mathbf{S}^{ca} - \mathbf{T}^{ca}) \mathbf{X}^{cb},$$

co możemy zapisać w zwartej postaci macierzowej

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{W}} = (\mathbf{S} - \mathbf{T})^T \mathbf{X}.$$

3.11 Resampling

Zazwyczaj specjalny zbiór testowy rozłączny ze zbiorem uczącym jest niedostępny. Istnieje oczywista potrzeba estymacji błędu testowego, który jest na ogół znacząco niedoszacowywany przez błąd treningowy. Jedną z dostępnych grup metod uwzględniających powyższe problemy polega na wydzielaniu części zbioru uczącego, dopasowaniu modelu na pozostałej części, a następnie zastosowaniu nauczonego modelu do części wydzielonej.

Jest to bardzo prosta metoda, w której dostępne obserwacje dzielone są losowo na dwie części: zbiór uczący, zbiór walidacyjny (ang. *validation set*, *hold-out set*). Model jest dopasowywany na zbiorze uczącym, a następnie użyty do predykcji wartości zmiennej odpowiedzi na zbiorze walidacyjnym. Obliczony przy jej pomocy *błąd walidacyjny* (np. MSE) stanowi estymatę błędu testowego. Otrzymana estymata jest silnie zależna od wybranego zbioru walidacyjnego. Otrzymana estymata jest silnie zależna od wybranego

zbioru walidacyjnego. Powyższe problemy uwzględnia walidacja krzyżowa (ang. *cross-validation*, CV).

Walidacja krzyżowa bez jednego (ang. *Leave-One-Out Cross-Validation*, LOOCV) jest metodą iteracyjną, której kroki wyglądają następująco:

- wybieramy kolejny element zbioru obserwacji (\mathbf{x}_i, y_i) ;
- zbiorem walidacyjnym jest $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}$, a zbiorem uczącym reszta obserwacji;
- metodą zbioru walidacyjnego wyliczamy błąd walidacyjny E_i .

Na koniec obliczamy estymatę błędu testowego

$$CV_{(n)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E_i.$$

Korzyściami z zastosowania LOOCV jest redukcja obciążenia – uczenie modelu korzysta w każdym kroku z $n - 1$ obserwacji – w konsekwencji ewentualne przeszacowanie błędu treningowego jest nieznaczące. Dodatkowo metoda jest *deterministyczna* – wielokrotne uruchomienie daje ten sam wynik.

k -krotna walidacja krzyżowa (ang. *k-fold cross validation*) to także metoda iteracyjna, w której najpierw dzielimy losowo zbiór dostępnych obserwacji na k w przybliżeniu równolicznych grup. Następnie w każdym kroku:

- wybieramy po kolei jedną z grup;
- wybrana grupa staje się zbiorem walidacyjnym, suma pozostałych staje się zbiorem uczącym;
- metodą zbioru walidacyjnego obliczamy błąd walidacyjny E_i .

Estymatą błędu testowego jest

$$CV_{(k)} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k E_i.$$

Uwaga, n -krotna walidacja krzyżowa to LOOCV. Typowo przyjmowanymi wartościami k są $k = 5, 10$. Przewagi k -krotnej CV nad LOOCV (dla $k < n$):

- koszt obliczeniowy jest wyraźnie mniejszy;
- k -krotna CV ma wprawdzie większe obciążenie, ale mniejszą wariancję od LOOCV, stąd daje często dokładniejszą estymatę błędu testowego.

Bootstrap to metoda statystyczna stosowana do oszacowania niepewności związanej z danym estymatorem lub metodą uczenia statystycznego. Łatwo stosuje się w sytuacjach, w których nie ma innych – lepiej uzasadnionych teoretycznie – metod oszacowania zmienności. Mamy do dyspozycji zbiór danych \mathcal{X} o wielkości n , przy pomocy którego wyznaczamy estymatę $\hat{\alpha}$ pewnej statystyki α . Zadanie polega na estymowaniu błędu standardowego $\hat{\alpha}$, tzn. $\sigma(\hat{\alpha})$ przy braku możliwości uzyskania nowych danych. Konstruujemy zbiory danych bootstrap $\mathcal{X}^{*1}, \dots, \mathcal{X}^{*B}$ o wielkości n przez *losowanie ze zwracaniem* z \mathcal{X} dla pewnego dużego B i na każdym z \mathcal{X}^{*b} obliczamy estymatę $\hat{\alpha}^{*b}$. Ostatecznie błąd standardowy (tzw. *błąd typu bootstrap*) ma postać

$$\sigma(\hat{\alpha}) = \sqrt{\frac{1}{B-1} \sum_{b=1}^B \left(\hat{\alpha}^{*b} - \frac{1}{B} \sum_{r=1}^B \hat{\alpha}^{*r} \right)^2}.$$

3.12 Selekcja cech w modelach liniowych

Po wytrenowaniu modelu liniowego może okazać się, że część predyktorów nie ma istotnego wpływu na zmienną odpowiedzi. Utrzymywanie tych nieistotnych zmiennych nadmiernie zwiększa złożoność modelu, a więc ich usunięcie, tzn. wyzerowanie odpowiednich współczynników, wpływa dodatnio na interpretowalność modelu. Usuwanie nieistotnych predyktorów z modelu regresji wielokrotnej nazywa się selekcją cech lub selekcją zmiennych.

Selekcja podzbioru polega na wyznaczeniu podzbioru predyktorów, które ocenia się jako najsilniej związane z odpowiedzią. Następnie dopasowuje się model liniowy używając metody najmniejszych kwadratów na zredukowanym zbiorze predyktorów. Do metod selekcji podzbioru należą:

- wybór najlepszego podzbioru;
- metody selekcji krokowej.

W metodzie najlepszego podzbioru dopasowujemy model z każdą możliwą kombinacją spośród wszystkich p predyktorów. Spośród otrzymanych 2^p modeli wybieramy najlepszy (najbardziej optymalny według przyjętego kryterium). Zazwyczaj postępuje się według algorytmu:

1. Za \mathcal{M}_0 przyjmujemy *model zerowy* (bez predyktorów).
2. Dla $k = 1, \dots, p$:
 - (a) dopasowujemy wszystkie $\binom{p}{k}$ modeli z k predyktorami;
 - (b) wybieramy \mathcal{M}_k , który ma najmniejszy RSS lub największy R^2 .

3. Spośród $\mathcal{M}_0, \dots, \mathcal{M}_p$ wybieramy najbardziej optymalny według przyjętego kryterium.

Ani RSS, ani R^2 nie są dobrymi kryteriami porównywania modeli o różnej liczbie predyktorów, ponieważ – jako miary związane z treningowym MSE – mają lepsze wartości dla modeli o większej liczbie zmiennych. Potrzebne są zatem miary estymujące błąd testowy. Istnieją dwa powszechnie używane podejścia: podejście pośrednie, w którym wprowadzamy poprawki do błędu treningowego uwzględniające potencjalnie nadmierne obciążenie związane z przecuciem; podejście bezpośrednie, w którym estymujemy błąd testowy przy pomocy zbioru walidacyjnego albo walidacji krzyżowej. Oczywiście wadą metody wyboru najlepszego podzbioru jest potencjalnie znaczny koszt obliczeniowy. Alternatywą są metody selekcji krokowej, które przeszukują znacznie mniejszy zbiór możliwych modeli.

Algorytm selekcji krokowej w przód ma postać

- \mathcal{M}_0 jest modelem zerowym jak poprzednio.
- Dla $k = 0, \dots, p - 1$:
 1. rozważamy wszystkie $p - k$ modeli dodających jeden predyktor do \mathcal{M}_k ;
 2. wybieramy \mathcal{M}_{k+1} , który ma najmniejszy RSS lub największy R^2
- Spośród $\mathcal{M}_0, \dots, \mathcal{M}_p$ wybieramy najbardziej optymalny względem przyjętego kryterium.

Selekcja krokowa w przód dopasowuje $1 + p(p + 1)/2$ modeli (zamiast 2^p), przy czym efektywnie przeszukiwana podprzestrzeń zawiera istotnie więcej modeli. Nie ma gwarancji odnalezienia globalnie najlepszego modelu.

Algorytm selekcji krokowej wstecz ma postać

- \mathcal{M}_p jest modelem pełnym, czyli zawierającym wszystkie predyktory.
- Dla $k = p, p - 1, \dots, 1$:
 1. rozważamy wszystkie k modeli eliminujących jeden predyktor z \mathcal{M}_k ;
 2. wybieramy \mathcal{M}_{k-1} , który ma najmniejszy RSS lub największy R^2 .
- Spośród $\mathcal{M}_0, \dots, \mathcal{M}_p$ wybieramy najbardziej optymalny względem przyjętego kryterium.

W podejściach hybrydowych zmienne są sekwencyjnie dodawane do modelu tak jak w selekcji krokowej w przód. Po każdym dodaniu nowej zmiennej, jedna nieistotna zmienna może zostać usunięta — podobnie jak w selekcji krokowej wstecz. Podejścia te starają się ściślej naśladować wybór najlepszego podzbioru przy zachowaniu niskiego kosztu obliczeniowego metod krokowych.