Dữ Liệu Lớn

Linear Regression

Thân Quang Khoát

khoattq@soict.hust.edu.vn

Viện Công nghệ thông tin và Truyền thông
Trường Đại Học Bách Khoa Hà Nội

Năm 2019

Nội dung khoá học

- Overview of data analytics/science
- Basic statistics
- Python and programming tools
- Exploratory data analysis
- Data integration and preprocessing
- **Prediction with machine learning**
- Data visualization
- Evaluation of analysis results
- Basics of natural language processing
- Anomaly detection
- Big data analysis
- Capstone project

Học có giám sát

- **Học có giám sát (Supervised learning)**
  - Tập dữ liệu học (*training data*) bao gồm các quan sát (*examples, observations*), mà mỗi quan sát được *gắn kèm với một giá trị đầu ra mong muốn.*
  - Mục đích là học một hàm (vd: một phân lớp, một hàm hồi quy,...) phù hợp với tập dữ liệu hiện có và khả năng tổng quát hoá cao.
  - Hàm học được sau đó sẽ được dùng để dự đoán cho các quan sát mới.
  - *Phân loại (classification):* nếu đầu ra (output – y) thuộc tập rời rạc và hữu hạn.
  - *Hồi quy (regression):* nếu đầu ra (output – y) là các số thực.

Hồi quy tuyến tính: Giới thiệu

- Bài toán hồi quy: cần học một hàm $y = f(\mathbf{x})$ từ một tập học cho trước $\mathbf{D} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \ldots, (\mathbf{x}_M, y_M)\}$ trong đó $y_i \approx f(\mathbf{x}_i)$ với mọi i.
  - Mỗi quan sát được biểu diễn bằng một véctơ *n* chiều, chẳng hạn $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \ldots, x_{in})^T$.
  - Mỗi chiều biểu diễn một thuộc tính (attribute/feature)
- Mô hình tuyến tính: nếu giả thuyết hàm $y = f(\mathbf{x})$ là hàm tuyến tính.

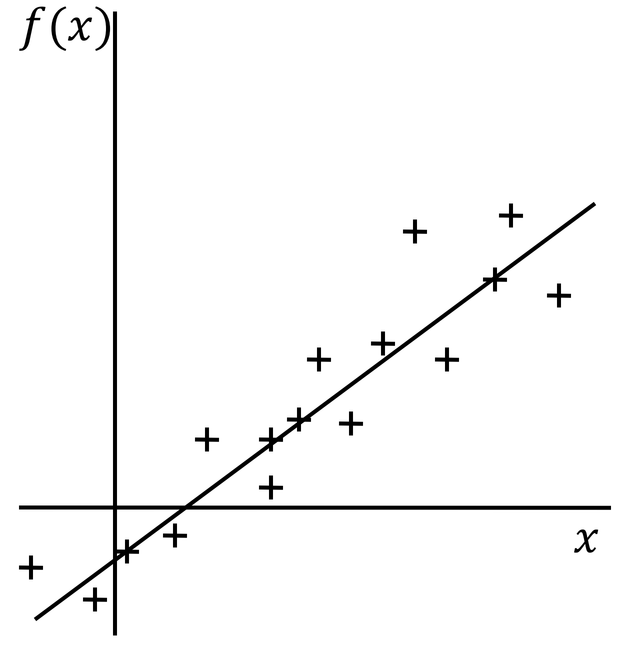
$$f(\mathbf{x}) = w_0 + w_1x_1 + \ldots + w_nx_n$$

- Học một hàm hồi quy tuyến tính thì tương đương với việc học véctơ trọng số $\mathbf{w} = (w_0, w_1, \ldots, w_n)^T$

Hồi quy tuyến tính: Ví dụ

Hàm tuyến tính f(**x**) nào phù hợp?

0.13	-0.91
1.02	-0.17
3.17	1.61
-2.76	-3.31
1.44	0.18
5.28	3.36
-1.74	-2.46
7.93	5.56
...	...



Ví dụ: $f(x) = -1.02 + 0.83x$

Phán đoán tương lai

- Đối với mỗi quan sát $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^T$:
  - Giá trị đầu ra mong muốn c_x
    (Không biết trước đối với các quan sát trong tương lai)
  - Giá trị phán đoán (bởi hệ thống)

$$y_x = w_0 + w_1x_1 + \ldots + w_nx_n$$

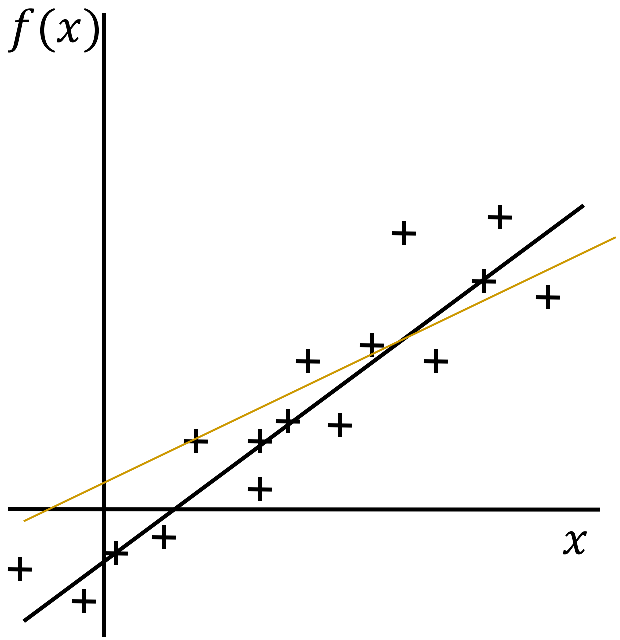
  - Ta thường mong muốn y_x xấp xỉ tốt c_x

- Phán đoán cho quan sát tương lai $\mathbf{z} = (z_1, z_2, \ldots, z_n)^T$
  - Cần dự đoán giá trị đầu ra, bằng cách áp dụng hàm mục tiêu đã học được `f`:

$$f(\mathbf{z}) = w_0 + w_1z_1 + \ldots + w_nz_n$$

Học hàm hồi quy

- Mục tiêu học: *học một hàm f* sao cho khả năng phán đoán trong tương lai là tốt nhất.*
  - Tức là sai số $|c_z - f(\mathbf{z})|$ là nhỏ nhất cho các quan sát tương lai **z**.
  - Khả năng tổng quát hóa (generalization) là tốt nhất.
- Vấn đề: Có vô hạn hàm tuyến tính!!
  - Làm sao để học? Quy tắc nào?
- Dùng một tiêu chuẩn để đánh giá.
  - Tiêu chuẩn thường dùng là hàm lỗi (generalization error, loss function, …)



Hàm đánh giá lỗi (loss function)

- Định nghĩa hàm lỗi E
  - Lỗi (error/loss) phán đoán cho quan sát **x** = $(x_1, x_2, \ldots, x_n)^T$

$$r(\mathbf{x}) = [c_x - f^*(\mathbf{x})]^2 = (c_x - w_0 - w_1x_1 - \ldots - w_nx_n)^2$$

  - Lỗi của hệ thống trên toàn bộ không gian của **x**:

$$E = \mathbf{E}_x[r(\mathbf{x})] = \mathbf{E}_x[c_x - f^*(\mathbf{x})]^2$$

- Mục tiêu học là tìm hàm f* mà E là nhỏ nhất:

$$f^* = \arg\min_{f \in \boldsymbol{H}} \boldsymbol{E}_x [r(\boldsymbol{x})]$$

  - Trong đó ***H*** là không gian của hàm *f*.
- Nhưng: trong quá trình học ta không thể làm việc được với bài toán này.

Hàm lỗi thực nghiệm

- Ta chỉ quan sát được một tập **D** = {($\mathbf{x}_1$, y_1), ($\mathbf{x}_2$, y_2), …, ($\mathbf{x}_M$, y_M)}. Cần học hàm f từ **D**.
- Lỗi thực nghiệm (empirical loss; residual sum of squares)

$$RSS(f) = \sum_{i=1}^{M} (y_i - f(\boldsymbol{x}_i))^2 = \sum_{i=1}^{M} (y_i - w_0 - w_1 x_{i1} - \cdots - w_n x_{in})^2$$

  - *RSS/M* là một xấp xỉ của $\mathbf{E}_x[r(\mathbf{x})]$ trên tập học ***D***

- Nhiều phương pháp học thường gắn với RSS.

Bình phương tối thiểu (OLS)

- Cho trước **D**, ta đi tìm hàm *f* mà có *RSS* nhỏ nhất.

$$f^* = \arg\min_{f \in \boldsymbol{H}} RSS(f)$$

$$\Leftrightarrow \boldsymbol{w}^* = \arg\min_{\boldsymbol{w}} \sum_{i=1}^{M} (y_i - w_0 - w_1 x_{i1} - \cdots - w_n x_{in})^2 \quad (1)$$

- Đây được gọi là bình phương tối thiểu (least squares).
- Tìm nghiệm **w*** bằng cách lấy đạo hàm của RSS và giải phương trình RSS' = 0. Thu được:

$$\boldsymbol{w}^* = (\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A})^{-1} \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{y}$$

  - Trong đó **A** là ma trận dữ liệu cỡ Mx(n+1) mà hàng thứ i là $\mathbf{A}_i$ = (1, x_{i1}, x_{i2}, …, x_{in}); $\mathbf{B}^{-1}$ là ma trận nghịch đảo; **y** = $(y_1, y_2, \ldots, y_M)^T$.
  - Chú ý: giả thuyết $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ tồn tại nghịch đảo.

Bình phương tối thiểu: thuật toán

- Input: **D** = {($\mathbf{x}_1$, y_1), ($\mathbf{x}_2$, y_2), …, ($\mathbf{x}_M$, y_M)}
- Output: **w***
- Học **w*** bằng cách tính:

$$\boldsymbol{w}^* = (\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}$$

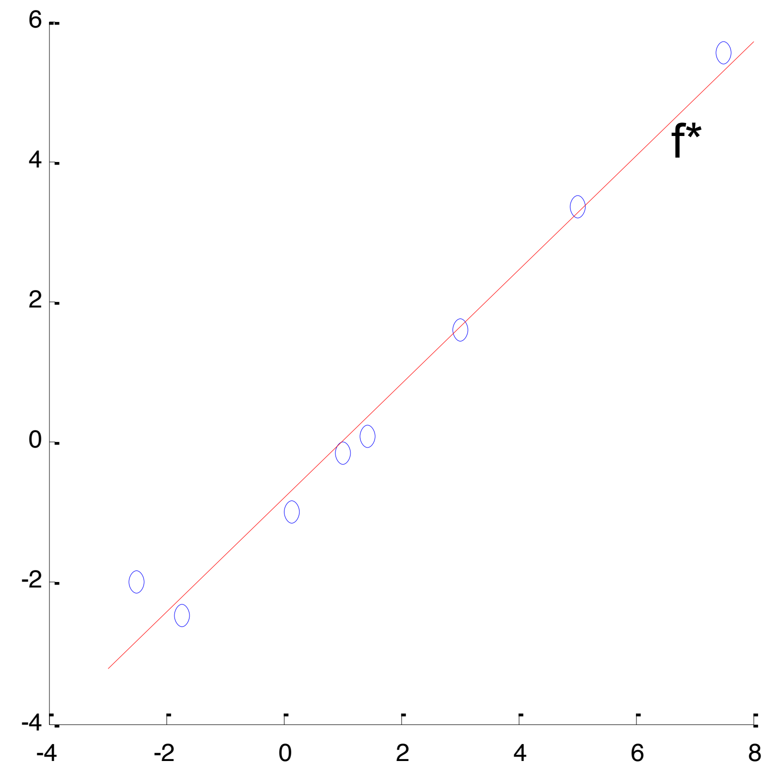
  - Trong đó **A** là ma trận dữ liệu cỡ Mx(n+1) mà hàng thứ i là $\mathbf{A}_i$ = (1, x_{i1}, x_{i2}, …, x_{in}); $\mathbf{B}^{-1}$ là ma trận nghịch đảo; **y** = $(y_1, y_2, \ldots, y_M)^T$.
  - Chú ý: giả thuyết $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ tồn tại nghịch đảo.
- Phán đoán cho quan sát mới **x**:

$$y_x = w_0^* + w_1^* x_1 + \cdots + w_n^* x_n$$

Bình phương tối thiểu: ví dụ

Kết quả học bằng bình phương tối thiểu

0.13	-1
1.02	-0.17
3	1.61
-2.5	-2
1.44	0.1
5	3.36
-1.74	-2.46
7.5	5.56



$f^*(x) = 0.81x - 0.78$

Bình phương tối thiểu: nhược điểm

- Nếu $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ không tồn tại nghịch đảo thì không học được.
  - Nếu các thuộc tính (cột của A) có phụ thuộc lẫn nhau.
- Độ phức tạp tính toán lớn do phải tính ma trận nghịch đảo.
  →Không làm việc được nếu số chiều n lớn.
- Khả năng overfitting cao vì việc học hàm f chỉ quan tâm tối thiểu lỗi đối với tập học đang có.

Ridge regression (1)

- Cho trước **D** = {($\mathbf{x}_1$, y_1), ($\mathbf{x}_2$, y_2), …, ($\mathbf{x}_M$, y_M)}, ta đi giải bài toán: $$f^* = \arg\min_{f \in \boldsymbol{H}} RSS(f) + \lambda \|\boldsymbol{w}\|_2^2$$

$$\Leftrightarrow \boldsymbol{w}^* = \arg\min_{\boldsymbol{w}} \sum_{i=1}^{M} (y_i - \boldsymbol{A_i w})^2 + \lambda \sum_{j=0}^{n} w_j^2 \qquad (2)$$

Trong đó $\mathbf{A}_i$ = (1, x_{i1}, x_{i2}, …, x_{in}) được tạo ra từ $\mathbf{x}_i$; λ là một hằng số phạt (λ> 0).

- Đại lượng hiệu chỉnh (phạt) $\lambda \|\boldsymbol{w}\|_2^2$
  - Có vai trò hạn chế độ lớn của **w*** (hạn chế không gian hàm f).
  - Đánh đổi chất lượng của hàm f đối với tập học **D**, để có khả năng phán đoán tốt hơn với quan sát tương lai.

Ridge regression (2)

- Tìm nghiệm **w*** bằng cách lấy đạo hàm của RSS và giải phương trình RSS' = 0. Thu được:

$$\boldsymbol{w}^* = (\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} + \lambda\boldsymbol{I}_{n+1})^{-1}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}$$

  - Trong đó **A** là ma trận dữ liệu cỡ Mx(n+1) mà hàng thứ i là $(1, x_{i1}, x_{i2}, \ldots, x_{in})$; $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \ldots, y_M)^T$; $\mathbf{I}_{n+1}$ là ma trận đơn vị cỡ n+1.
- So sánh với phương pháp bình phương tối thiểu:
  - Tránh được trường hợp ma trận dữ liệu suy biến. Hồi quy Ridge luôn làm việc được.
  - Khả năng overfitting thường ít hơn.
  - Lỗi trên tập học có thể nhiều hơn.
- *Chú ý: chất lượng của phương pháp phụ thuộc rất nhiều vào sự lựa chọn của tham số λ.*

Ridge regression: thuật toán

- Input: $\mathbf{D} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \ldots, (\mathbf{x}_M, y_M)\}$, hằng số $\lambda>0$
- Output: $\mathbf{w}^*$
- Học $\mathbf{w}^*$ bằng cách tính:

$$\boldsymbol{w}^* = (\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} + \lambda\boldsymbol{I}_{n+1})^{-1}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}$$

  - Trong đó **A** là ma trận dữ liệu cỡ Mx(n+1) mà hàng thứ i là $\mathbf{A}_i = (1, x_{i1}, x_{i2}, \ldots, x_{in})$; $\mathbf{B}^{-1}$ là ma trận nghịch đảo; $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \ldots, y_M)^T$.
- Phán đoán cho quan sát mới **x**:

$$y_x = w_0^* + w_1^* x_1 + \cdots + w_n^* x_n$$

- ***Chú ý:*** để tránh vài ảnh hưởng xấu từ độ lớn của y, ta nên loại bỏ thành phần w_0 trong đại lượng phạt ở công thức (2). Khi đó nghiệm $\mathbf{w}^*$ sẽ thay đổi một chút.

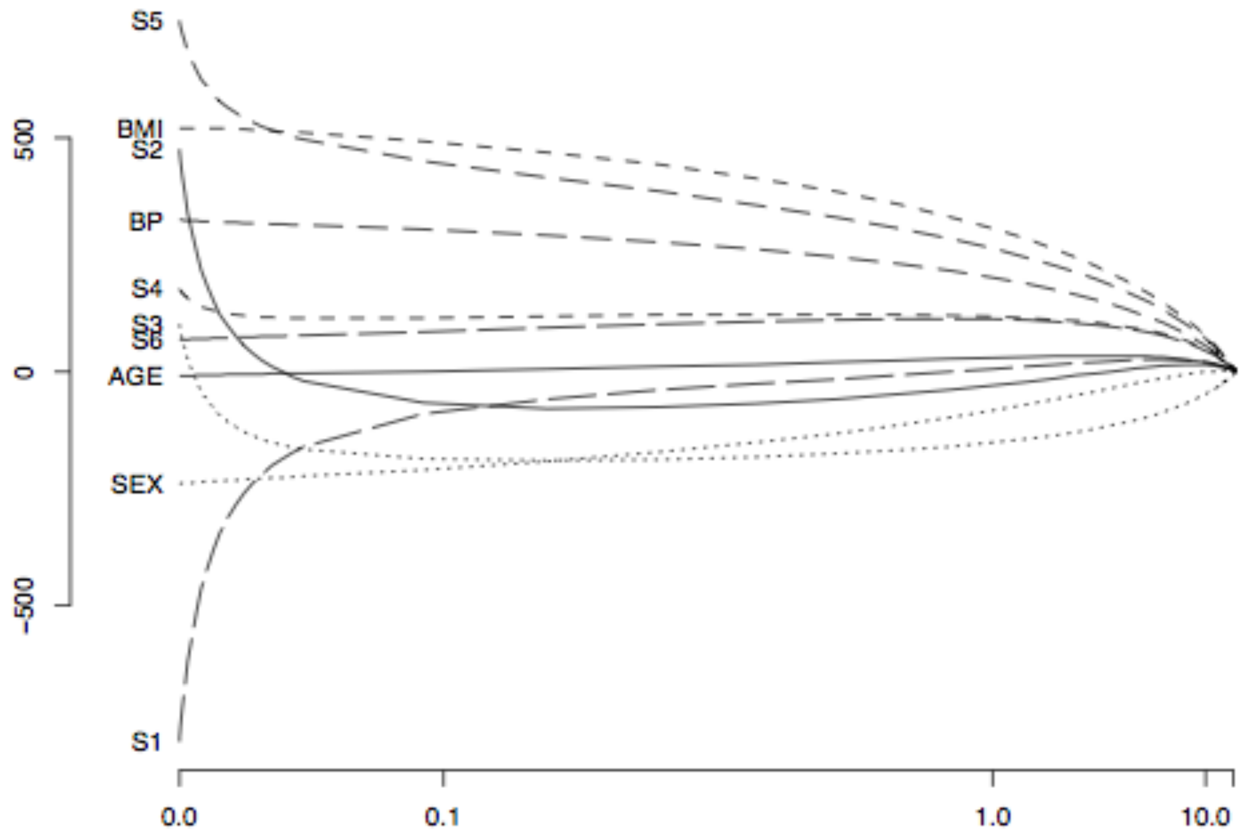
Ridge regression: ví dụ

- Xét tập dữ liệu Prostate gồm 67 quan sát dùng để học, và 31 quan sát dùng để kiểm thử. Dữ liệu gồm 8 thuộc tính.

w	Least squares	Ridge
0	2.465	2.452
lcavol	0.680	0.420
lweight	0.263	0.238
age	−0.141	−0.152
lbph	0.210	0.002
svi	0.305	0.094
lcp	−0.288	−0.051
gleason	−0.021	0.232
pgg45	0.267	−0.056
Test RSS	**0.521**	**0.492**

Ridge regression: ảnh hưởng của λ

- **W*** = (w_0, S1, S2, S3, S4, S5, S6, AGE, SEX, BMI, BP) thay đổi khi cho λ thay đổi.



Câu hỏi ôn tập

- Viết chi tiết từng bước giải để tìm nghiệm cho bài toán (1) và (2).
- Tìm nghiệm của bài toán (2) khi loại bỏ w_0 ra khỏi đại lượng phạt.