

#### План

Линейная регрессия
Решение проблемы вырожденности
Регуляризация, гребневая регрессия, LASSO, Elastic Net
Устойчивая регрессия
Градиентный метод обучения

# Линейная регрессия

# Гипотеза о линейной зависимости целевой переменной, ищем решение в виде:

$$a(X_1,...,X_n) = w_0 + w_1 X_1 + ... + w_n X_n$$

#### Практика:

- часто неплохо работает и при монотонных зависимостях
- хорошо работает, когда есть много «однородных» зависимостей:

цель - число продаж

признак 1 – число заходов на страницу продукта

признак 2 – число добавлений в корзину

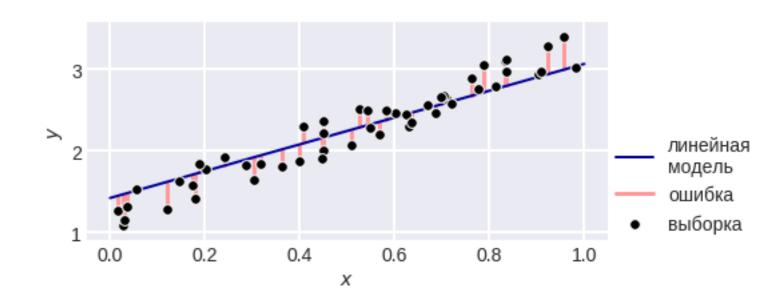
признак 3 – число появлений продукта в поисковой выдачи

$$a(X_1) = w_0 + w_1 X_1$$

обучение:  $\{(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)\}, x_i \in \mathbb{R}$ 

#### хотели бы...

$$\begin{cases} w_0 + w_1 x_1 = y_1 \\ \cdots \\ w_0 + w_1 x_m = y_m \end{cases}$$

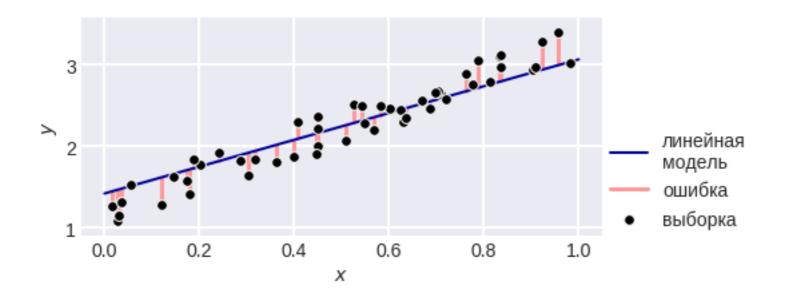


### невязки / отклонения (residuals):

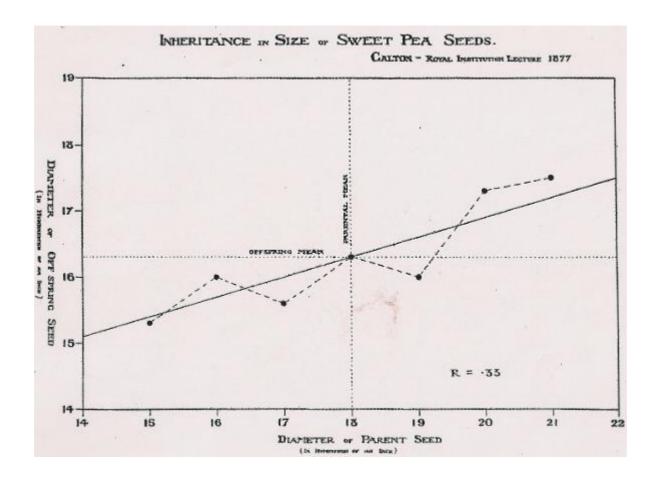
$$\begin{cases} e_1 = y_1 - w_0 - w_1 x_1 \\ \cdots \\ e_m = y_m - w_0 - w_1 x_m \end{cases}$$

# Задача минимизации суммы квадратов отклонений (residual sum of squares)

$$RSS = e_1^2 + \ldots + e_m^2 \rightarrow \min$$

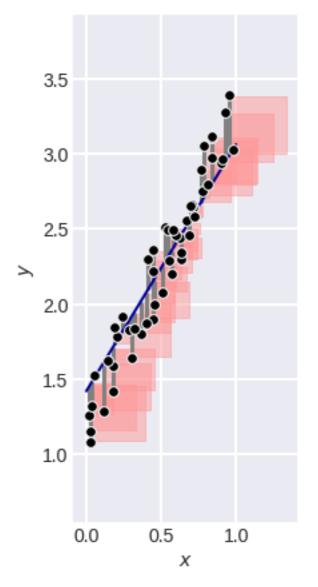


~ задача описания данных гиперплоскостью (но тут конкретная ф-я ошибки) потом вероятностное обоснование, пока... довольно логично

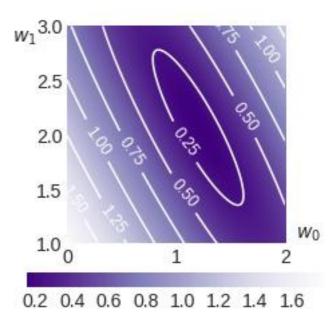


Francis Galton, 1877

# Линейная регрессия от одной переменной: геометрический смысл ошибки



$$a(X_1) = w_0 + w_1 X_1$$



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

Отличается от суммы расстояний до поверхности!

### Нетрудно показать (Д3):

$$w_{1} = \frac{\sum_{i=1}^{m} (x_{i} - \overline{x})(y_{i} - \overline{y})}{\sum_{i=1}^{m} (x_{i} - \overline{x})^{2}} = \frac{\text{cov}(\{x_{i}\}, \{y_{i}\})}{\text{var}(\{x_{i}\})},$$

$$w_0 = \overline{y} - w_1 \overline{x},$$

где 
$$\overline{x} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} x_i, \ \overline{y} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} y_i.$$

# Общий случай (многих переменных)

$$a(X_1,\ldots,X_n)=w_0+w_1X_1+\cdots+w_nX_n=x^{^{\mathrm{T}}}w$$
 веса (параметры) –  $w=(w_0,w_1,\ldots,w_n)^{^{\mathrm{T}}}$  объект –  $x=(X_0,X_1,\ldots,X_n)^{^{\mathrm{T}}}$ 

для удобства записи вводим фиктивный признак  $X_0\equiv 1$ 

обучение: 
$$\{(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)\}$$
,  $x_i \in \mathbf{R}^{n+1}$ ,

опять хотим решить Xw = y:

$$\begin{cases} x_1^{\mathrm{T}} w = y_1 \\ \dots \\ x_m^{\mathrm{T}} w = y_m \end{cases}$$

как решать?

# Общий случай (многих переменных): в матричной форме

$$Xw = y$$

# в матрице X по строкам записаны описания объектов, в векторе y значения их целевого признака

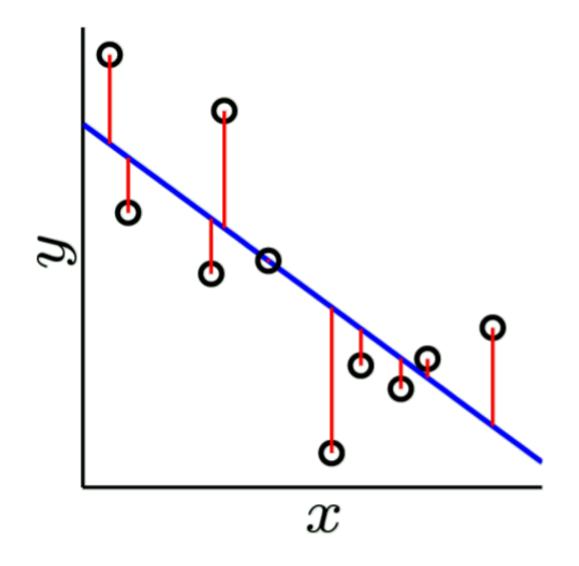
(здесь есть коллизия в обозначении у)

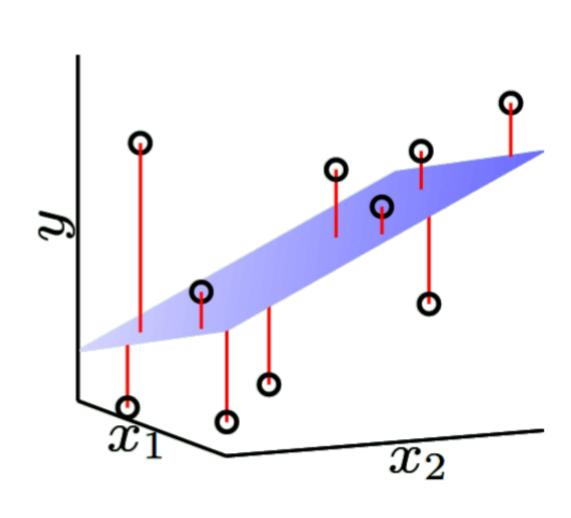
# будем решать так:

$$||Xw - y||_2^2 \rightarrow \min_{w}$$

почему?

# Общий случай (многих переменных): геометрический смысл





Кстати, полученная задача оптимизации выпукла, единственный глобальный минимум

(кроме вырожденного случая)

### Решение задачи минимизации: прямой метод

$$||Xw - y||_2^2 \rightarrow \min_w$$

$$||Xw - y||_2^2 = (Xw - y)^{\mathrm{T}}(Xw - y) = w^{\mathrm{T}}X^{\mathrm{T}}Xw - w^{\mathrm{T}}X^{\mathrm{T}}y - y^{\mathrm{T}}Xw + y^{\mathrm{T}}y$$

$$\nabla ||Xw - y||_2^2 = 2X^TXw - 2X^Ty = 0$$

$$X^{\mathrm{T}}Xw = X^{\mathrm{T}}y$$

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

решение существует, если столбцы л/н

помним, что 
$$\operatorname{rg}(X^{\mathsf{\scriptscriptstyle T}}X) = \operatorname{rg}(X)$$

 $(X^{\mathrm{T}}X)^{-1}X^{\mathrm{T}}$  – псевдообратная матрица Мура-Пенроуза обобщение обратной на неквадратные матрицы

# Обобщённая линейная регрессия: вместо Х – что угодно

# выражаем целевое значение через л/к базисных функций

(они фиксированы)

$$a(X_1,...,X_n) = w_0 + w_1 \varphi_1(X_1,...,X_n) + \cdots + w_k \varphi_k(X_1,...,X_n)$$

$$w = (w_0, w_1, ..., w_k)^T$$
  
 $x = (X_0, X_1, ..., X_n)^T$ 

$$\varphi(x) = (\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_k(x))^{\mathrm{T}}$$

$$a(x) = \sum_{i=1}^k w_i \varphi_i(x) = \varphi(x)^{\mathrm{T}} w$$

$$\|\varphi(X)w - y\|_2^2 \rightarrow \min_{w}$$

$$\varphi(X) = \begin{bmatrix} \varphi_0(x_1) & \cdots & \varphi_k(x_1) \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \varphi_0(x_m) & \cdots & \varphi_k(x_m) \end{bmatrix}$$

# Подробности в нелинейных методах...

# Проблема вырожденности матрицы

$$W = (X^{\mathsf{T}}X)^{-1}X^{\mathsf{T}}y$$

Только ли вырожденность плоха?

Что делать?

#### Проблема вырожденности матрицы

$$W = (X^{\mathsf{T}}X)^{-1}X^{\mathsf{T}}y$$

Проблемы, когда матрица X плохо обусловлена...

#### Решения:

- 1. Регуляризация здесь и в «сложности»
- 2. Селекция (отбор) признаков «селекция»
- 3. Уменьшение размерности (в том числе, PCA) USL
- 4. Увеличение выборки

если объектов много – то работать с гигантской матрицей невозможно... но выдели как это делается в оптимизации онлайн-методами

# Регуляризация: упрощённое объяснение смысла

$$a(X_1,...,X_n) = w_0 + w_1 X_1 + ... + w_n X_n$$

# если есть два похожих объекта, то должны быть похожи метки, пусть отличаются в j-м признаке, тогда ответы модели отличаются на

$$\mathcal{E}_j W_j$$

### Поэтому не должно быть очень больших весов

(у признаков, по которым могут отличаться похожие объекты)

Поэтому вместе с 
$$||Xw - y||_2^2 \rightarrow \min$$
 хотим  $||w||_2^2 \rightarrow \min$ 

Не на все коэффициенты нужна регуляризация! Почему?

# Регуляризация: упрощённое объяснение смысла

Пусть есть какая-то зависимость и лишние признаки, например

$$y = X_1 = X_1 + w'X_2 - w'X_3$$
 при  $X_2 = X_3$ 

Если теперь 
$$X_2 pprox X_3$$
, тогда  $\mathcal{E} = X_2 - X_3$ 

$$a = X_1 + w'\varepsilon$$

– может быть сколь угодно большим при больших  $w^{\prime}$ 

аналогично при линейных зависимостях! автоматически, когда объектов мало (сколько?)

# Регуляризация

Иванова

Тихонова

$$\begin{cases} ||Xw - y||_2^2 \rightarrow \min \\ ||w||_2^2 \le \lambda \end{cases}$$

$$||Xw - y||_2^2 + \lambda ||w||_2^2 \rightarrow \min$$

Удобнее: безусловная оптимизация

$$||w||_2^2 = w_1^2 + w_2^2 + \dots + w_n^2$$

эти две формы эквивалентны: решение одного можно получить как решение другого

Всё это справедливо и для общих задач минимизации!

$$\begin{cases} L(a) \to \min \\ \text{complexity}(a) \le \lambda \end{cases}$$

$$L(a) + \lambda \operatorname{complexity}(a) \rightarrow \min$$

Есть ещё регуляризация Морозова...

#### Регуляризация и гребневая регрессия

$$\displaystyle rg\min_{w} \| \ Xw - y \|_2^2 + \lambda \| \ w \|_2^2 = (X^{ \mathrm{\scriptscriptstyle T}} X + \lambda I)^{-1} X^{ \mathrm{\scriptscriptstyle T}} y$$
 Д3 Доказать!  $\lambda \geq 0$ 

Такая регрессия называется гребневой регрессией (Ridge Regression)

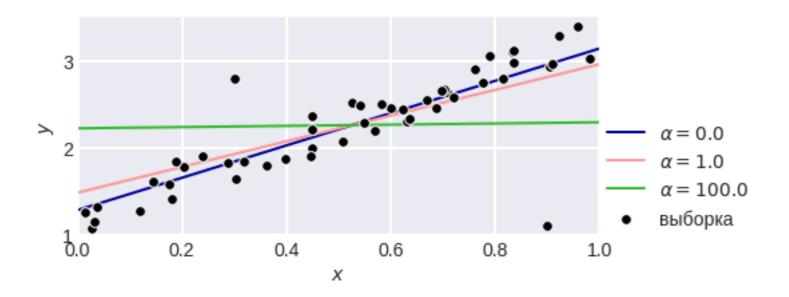
Виден другой смысл регрессии: складываем две матрицы Грама, неотрицательно определённая + положительно определённая

- боремся с вырожденностью матрицы потом вернёмся к этому

 $\lambda = 0$  – получаем классическое решение  $\lambda \to +\infty$  – меньше «затачиваемся на данные» и больше регуляризуем Матрица очевидно становится обратимой!

значение параметра регуляризации можно выбрать на скользящем контроле

#### Минутка кода: регуляризация и гребневая регрессия



```
from sklearn.linear_model import Ridge

model = Ridge(alpha=0.0) # ридж-регрессия
# обучение
model.fit(x_train[:, np.newaxis], y_train)
# обратите внимание: np.newaxis
# контроль
a_train = model.predict(x_train[:, np.newaxis])
a_test = model.predict(x_test[:, np.newaxis])
```

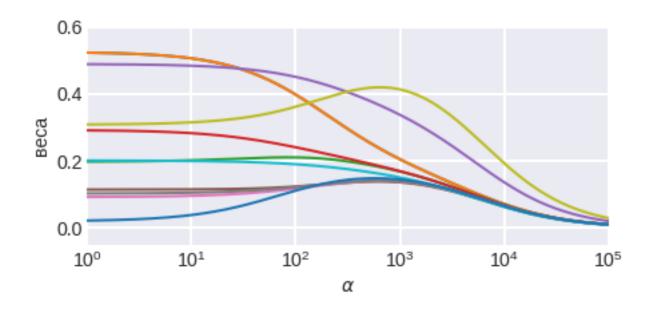
Кажется, что при регуляризации отклоняемся к выбросам, но дело не в этом

# Регуляризация и гребневая регрессия

$$\sum_{i=1}^{m} (y_i - a(x_i))^2 + \lambda \sum_{j=1}^{n} w_j^2 \to \min$$

$$\lambda \ge 0$$

### добавление shrinkage penalty (регуляризатора)



параметр регуляризации может подбираться с помощью скользящего контроля

# Регуляризация и гребневая регрессия

Для ridge-регрессии нужна правильная нормировка признаков! Нет инвариантности (в отличие от линейной) от умножения признаков на скаляры

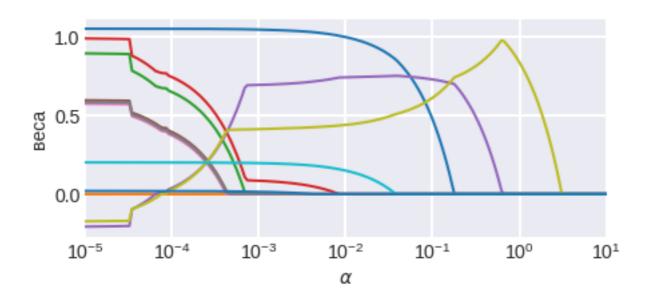
Перед регуляризацией – стандартизация!!!

# **LASSO (Least Absolute Selection and Shrinkage Operator)**

Попробуем другой «штраф за сложность» (сейчас поймём название)

$$\sum_{i=1}^{m} (y_i - a(x_i))^2 + \lambda \sum_{j=1}^{n} |w_j| \to \min$$

$$\lambda \ge 0$$



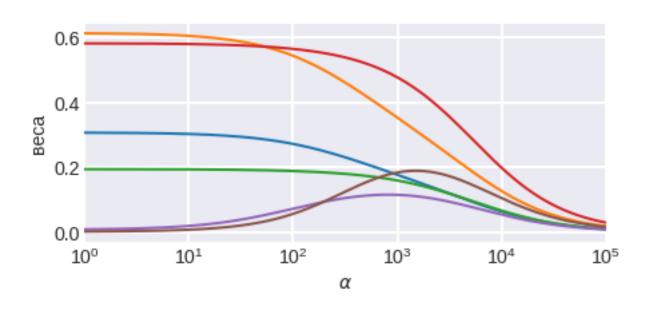
Здесь коэффициенты интенсивнее зануляются при увеличении  $\lambda \geq 0$ 

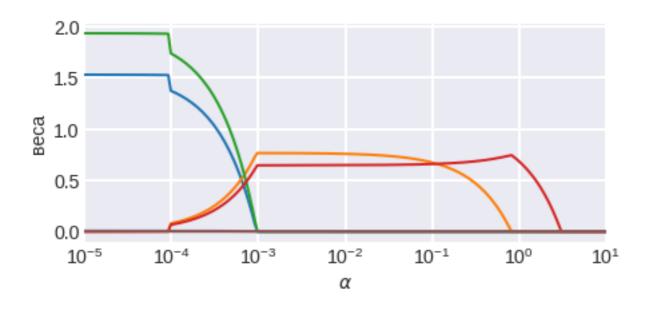
#### здесь была задача

зависит от масштаба признаков,

но из-за предварительной нормировки этот эффект не наблюдается

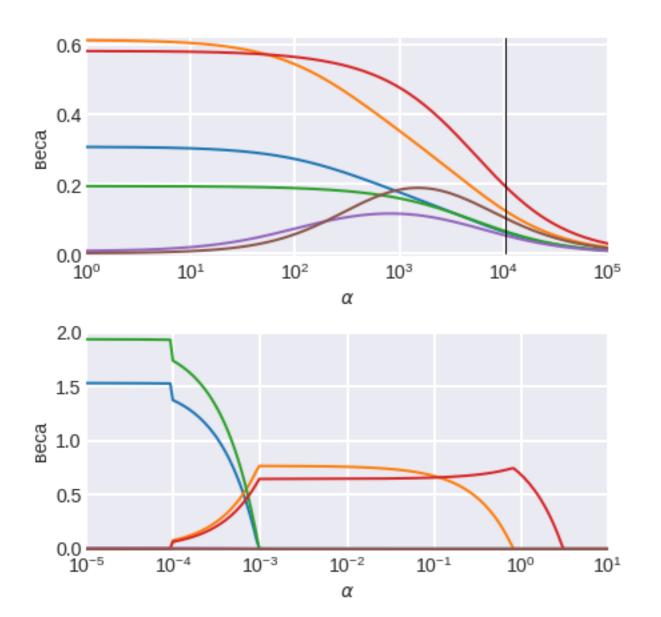
Масштаб очень важен! см. дальше





```
np.random.seed(10)
X = np.random.rand(1000, 6)
X[:,1] = X[:,0]
X[:,2] = X[:,3]
X[:,0] = 1 * X[:,0]
X[:,1] = 2 * X[:,1]
X[:,2] = 1 * X[:,2]
X[:,3] = 3 * X[:,3]
X[:,4] = 1 * X[:,4]
X[:,5] = 2 * X[:,5]
y = 1.5 * X[:,0] + 2*X[:,2] +
0.5*np.random.randn(1000)
```

$$Y = 1.5X_1 + 2X_3 = 0.75X_2 + 0.66X_4$$



$$\lambda = 1$$

$$Y = 0.31X_1 + 0.61X_2 + 0.19X_3 + 0.58X_4 + 0.01X_5 + 0.0X_6$$

$$\lambda \sim 10500$$

$$Y = 0.06X_1 + 0.12X_2 + 0.06X_3 + 0.19X_4 + 0.05X_5 + 0.1X_6$$

$$\lambda = 10^{-5}$$

$$Y = 1.53X_1 + 1.94X_3$$

$$\lambda \sim 0.01 Y = 0.76X_2 + 0.65X_4$$

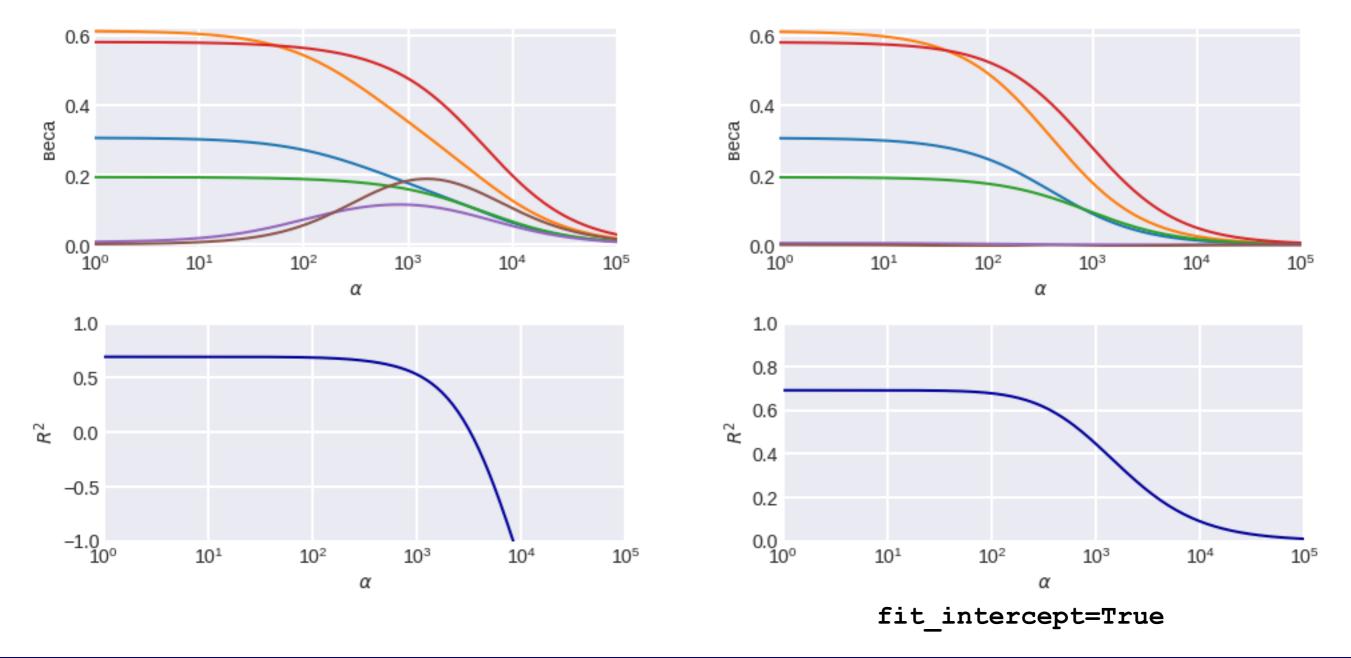
#### веса зависят от масштаба признаков

# при сильной регуляризации меняется распределение весов зависимых признаков

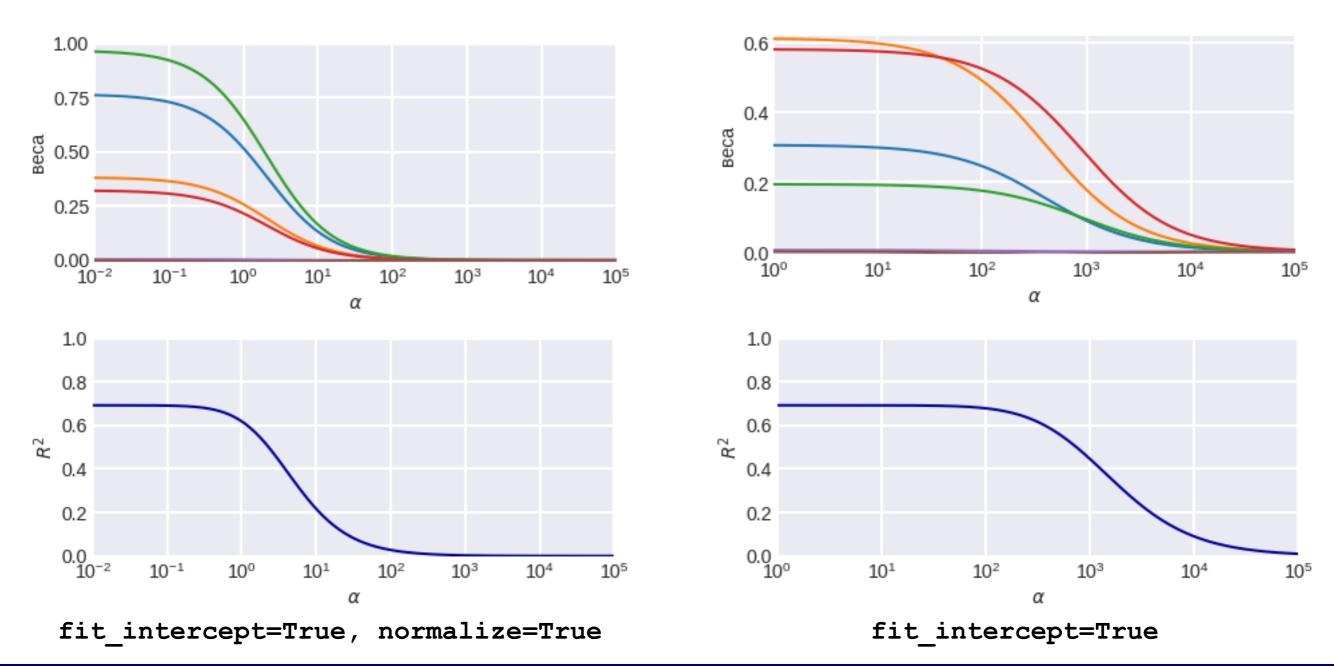
Пусть 
$$Y = 4X_1$$
,  $X_1 = X_2$ 

$w_1$	$W_2$	$  w  _1$	$  w  _2^2$
5	- 1	6	26
4	0	4	16
3	1	4	10
2	2	4	8

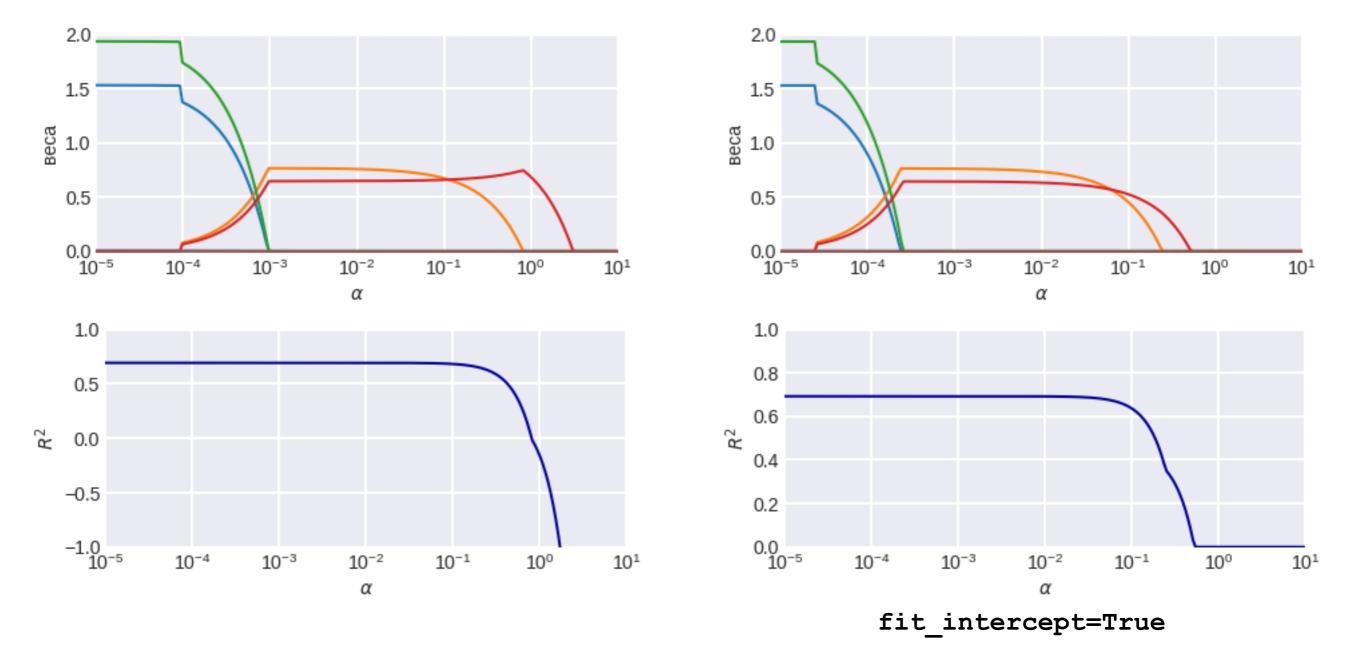
# Эксперименты с одинаковыми и зависимыми признаками: L<sub>2</sub>-регуляризация



### Эксперименты с одинаковыми и зависимыми признаками: L<sub>2</sub>-регуляризация



# Эксперименты с одинаковыми и зависимыми признаками: L<sub>1</sub>-регуляризация

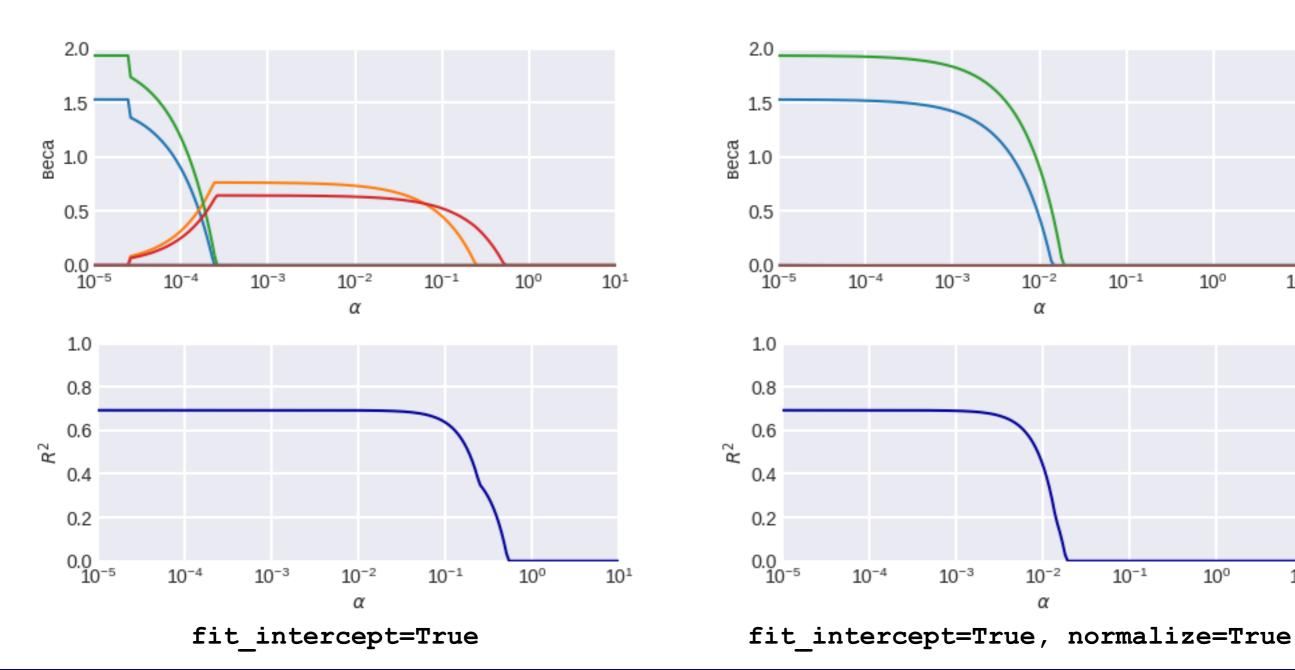


10°

10°

10<sup>1</sup>

### Эксперименты с одинаковыми и зависимыми признаками: L<sub>1</sub>-регуляризация



10<sup>1</sup>

#### Часто важно

- использовать свободный член
- предварительно нормировать данные

# Семейство регуляризированных линейных методов

#### Ridge

$$||y - Xw||_2^2 + \lambda ||w||_2^2 \rightarrow \min_{w}$$

# **LASSO (Least Absolute Selection and Shrinkage Operator)**

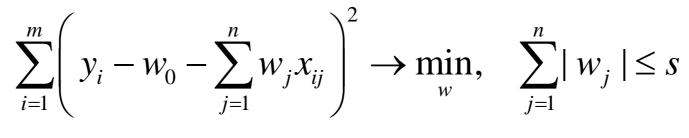
$$||y - Xw||_{2}^{2} + \lambda ||w||_{1} \rightarrow \min_{w}$$

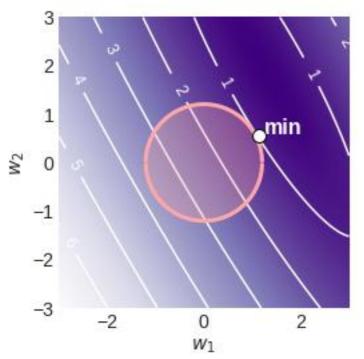
# **Elastic Net = LASSO + Ridge**

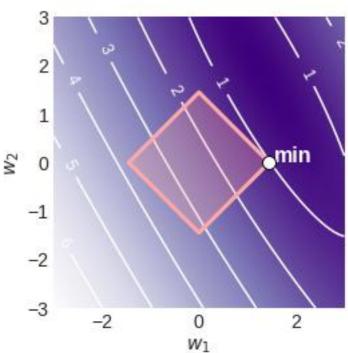
$$||y - Xw||_2^2 + \lambda_1 ||w||_1 + \lambda_2 ||w||_2^2 \rightarrow \min_{w}$$

# Геометрический смысл Ridge, LASSO и Elastic Net

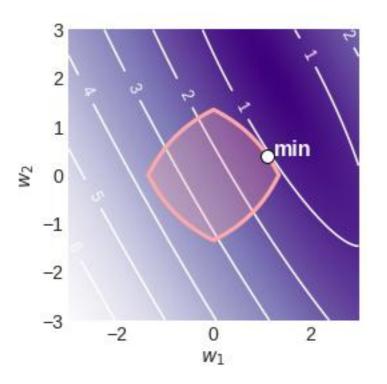
$$\sum_{i=1}^{m} \left( y_i - w_0 - \sum_{j=1}^{n} w_j x_{ij} \right)^2 \to \min_{w}, \quad \sum_{j=1}^{n} w_j^2 \le s$$







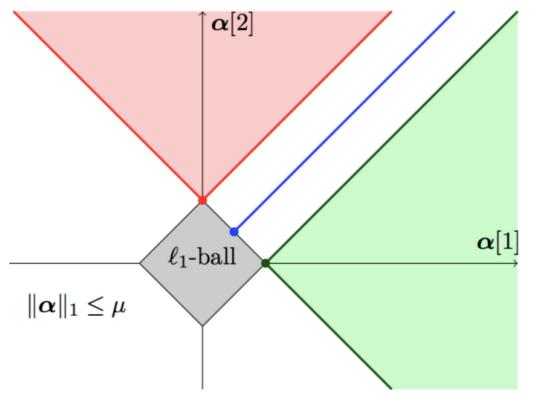
# Геометрический смысл Ridge, LASSO и Elastic Net



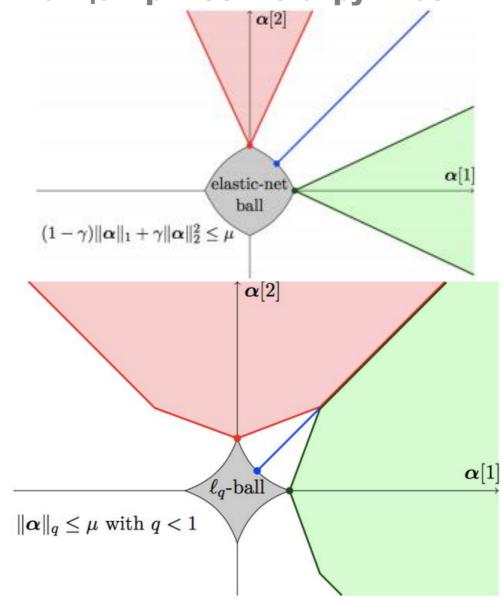
на практике часто модель и не может зависеть от небольшого числа переменных

# Эффект разреженности

если линии уровня оптимизируемой функции - концентрические окружности...



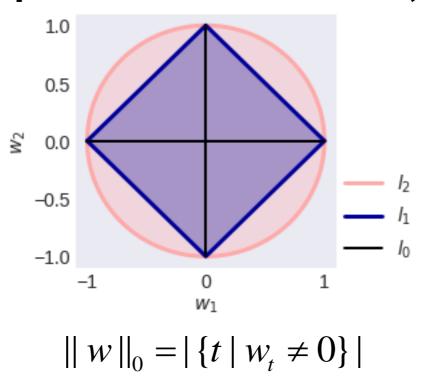
David S. Rosenberg «Foundations of Machine <u>Learning</u>» https://bloomberg.github.io/foml/



# Почему L1-норма ⇒ разреженность

1. Больше вероятность, что линии уровней функции ошибки касаются области ограничений в точках с нулевыми координатами, см. рис.

# 2. L1-норма больше похожа на L0, чем L2



При увеличении коэффициента регуляризации веса стремятся к нулю Обеспечивается автоматическая селекция признаков!

# **Регуляризация** ⇒ **упрощение**

# Соблюдение принципа Оккама

регуляризация  $\Rightarrow$  зануление коэффициентов  $\Rightarrow$  упрощение модели

В целом, неверно, что чем меньше коэффициентов, тем проще модель, но у нас линейная модель..

потом будет обоснование регуляризации с помощью вероятностных предположений

# Проблема вырожденности / плохой обусловленности матрицы

$$W = (X^{\mathsf{T}}X)^{-1}X^{\mathsf{T}}y$$

#### Решения:

- 1. Регуляризация
- 2. Селекция (отбор) признаков
- 3. Уменьшение размерности (в том числе, РСА)
- 4. Увеличение выборки

# Селекция признаков в линейной регрессии отдельная тема

# Какие признаки включить в модель

$$a(X_1,...,X_n) = w_0 + w_1 X_1 + ... + w_n X_n$$

# Маленький обзор стратегий:

1 стратегия – перебор – умный перебор подмножества признаков 2 стратегий – оценка – оценка качества признаков (фильтры) 3 стратегия – автомат – встроенные методы (ex: LASSO)

# Обоснование необходимости селекции

- Проблема вырожденности в линейной регрессии
  - Проблема «почти дубликатов»
  - Уменьшение модели и интерпретация
    - Уменьшение стоимости данных

# Проблема вырожденности матрицы

$$W = (X^{\mathsf{T}}X)^{-1}X^{\mathsf{T}}y$$

#### Решения:

- 1. Регуляризация
- 2. Селекция (отбор) признаков
- 3. Уменьшение размерности (в том числе, РСА)
- 4. Увеличение выборки

обоснование необходимости аналогично селекции

# Линейная регрессия: градиентный метод обучения

### недостатки прямого...

# работа с большими матрицами (тем более обращение)

# В лекции «оптимизация»...

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} (a(x_i \mid w) - y_i)^2 \rightarrow \min$$

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta \sum_{i=1}^{m} (a(x_i \mid w^{(t)}) - y_i) \frac{\partial a(x_i \mid w^{(t)})}{\partial w}$$

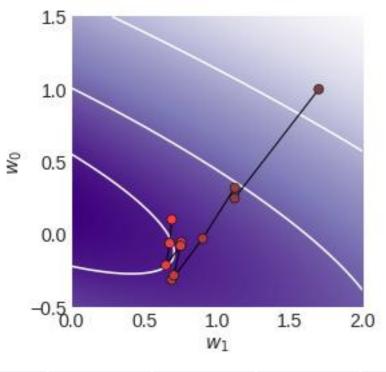
# $a(x \mid w) = w^{\mathrm{T}} x$

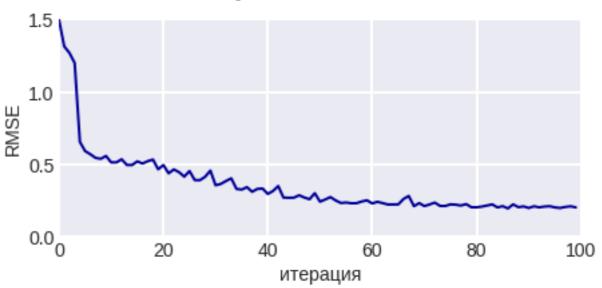
$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta \sum_{i=1}^{m} (a(x_i \mid w^{(t)}) - y_i) x_i$$

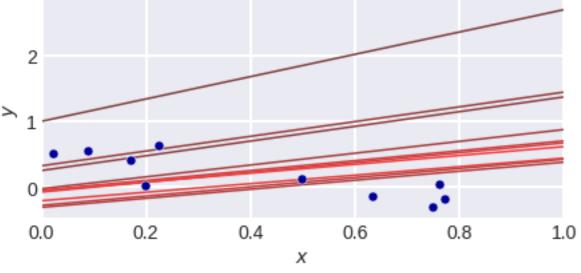
### **Stochastic Gradient Descent**

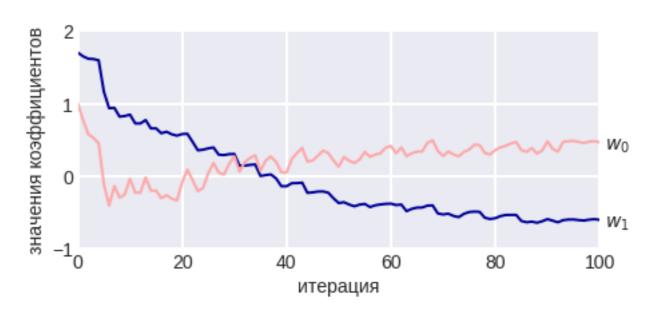
$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta_t (a(x_i \mid w^{(t)}) - y_i) x_i$$

# Линейная регрессия: градиентный метод обучения









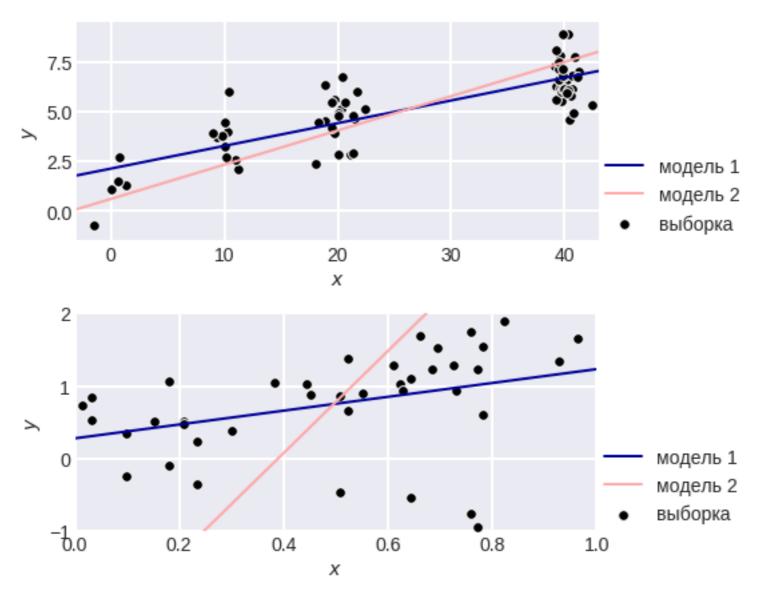
# Реализация в scikit-learn

# sklearn.linear model.Ridge

alpha=1.0	Коэффициент регуляризации, больше – сильнее
	(в отличие от других функций)
fit_intercept=True	Использовать ли свободный член
normalize=False	Нормализация данных
	Игнорируется без свободного члена
solver="auto"	Метод оптимизации
	"auto", "svd", "cholesky", "lsqr", "sparse_cg", "sag",
	"saga"
copy X=Tr	ue, max iter=None, tol=0.001, random state=None

sklearn.linear\_model.ElasticNet(alpha=1.0, l1\_ratio=0.5, fit\_intercept=True,
normalize=False, precompute=False, max\_iter=1000, copy\_X=True, tol=0.0001,
warm\_start=False, positive=False, random\_state=None, selection="cyclic")

# Две регрессии



Чем отличаются модели 1 и 2?

# Две регрессии: y(x) vs x(y)

# разные задачи y(x) и x(y), хотя зависимость линейная

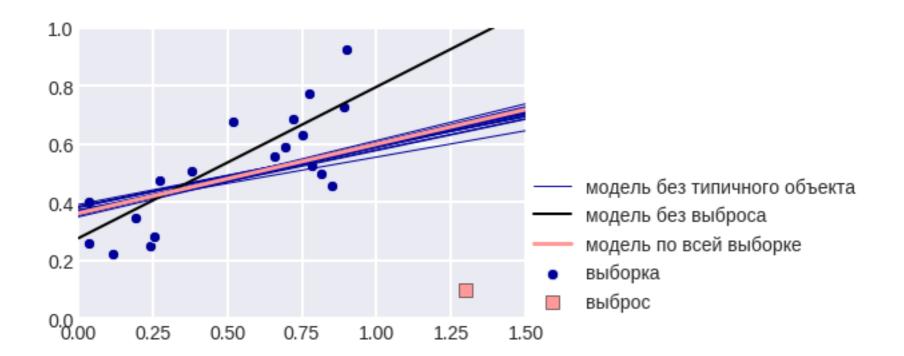
$$X_{1} = w_{0} + w_{1}Y$$

$$\begin{bmatrix} y_{1} & 1 \\ \vdots & \vdots \\ y_{m} & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} w_{1} \\ w_{0} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x_{1} \\ \vdots \\ x_{m} \end{pmatrix} \Big|_{2}^{2} \rightarrow \min$$

$$\begin{bmatrix} 0.8 \\ 0.6 \\ 0.4 \\ 0.2 \\ 0.0 \\ 1.0 \end{bmatrix} \xrightarrow{-0.5} \begin{bmatrix} 0.0 \\ 0.5 \end{bmatrix} \xrightarrow{0.5} \begin{bmatrix} 1.0 \\ 0.5 \end{bmatrix} \xrightarrow{1.5} \begin{bmatrix} 2.0 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

есть и «промежуточная стратегия» - дальше РСА

# Линейная регрессия – неустойчивость к выбросам



### Ошибка с весами

# Если у каждого объекта есть цена ошибки...

$$\sum_{i=1}^{m} v_i \left( y_i - w^{\mathsf{T}} x_i \right)^2 + \dots = \sum_{i=1}^{m} \left( \sqrt{v_i} y_i - w^{\mathsf{T}} \left( \sqrt{v_i} x_i \right) \right)^2 + \dots \to \min$$

# небольшая переформулировка задачи:

$$\{(x_{1}, y_{1}), \dots, (x_{m}, y_{m})\} \rightarrow \{(\sqrt{v_{1}}x_{1}, \sqrt{v_{1}}y_{1}), \dots, (\sqrt{v_{m}}x_{m}, \sqrt{v_{m}}y_{m})\}$$

$$(y - Xw)^{\mathsf{T}}V(y - Xw) \sim ||V^{1/2}y - V^{1/2}Xw||_{2}^{2} \rightarrow \min_{w}$$

$$w = (X^{\mathsf{T}}VX)^{-1}X^{\mathsf{T}}Vy$$

### Ошибка с весами

$$\{(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)\} \rightarrow \{(\sqrt{v_1}x_1, \sqrt{v_1}y_1), \dots, (\sqrt{v_m}x_m, \sqrt{v_m}y_m)\}$$

# Как реализовать:

- 1) перейти к новым данным («испорченными весам»)
- 2) если веса целые числа можно продублировать объекты
- 3) если веса из отрезка [0, 1] при численном градиентном решении можно выбирать следующий объект с соответствующей вероятностью

# Устойчивая регрессия (Robust Regression)

# 0. Инициализация весов объектов

$$v = (v_1, ..., v_m) = (1/m, ..., 1/m)$$

# 1. Цикл

# 1.1. Настроить алгоритм, учитывая веса объектов

$$a = fit(\{x_i, y_i, v_i\})$$

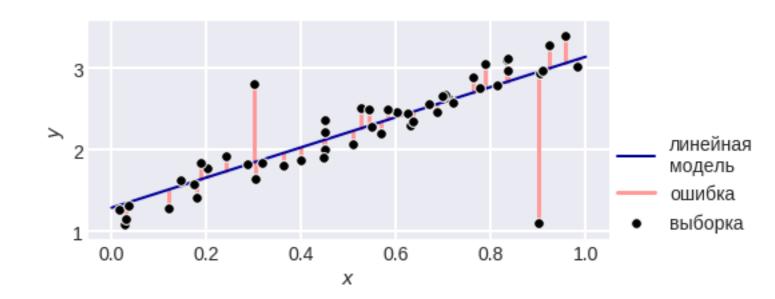
# 1.2. Вычислить ошибки на обучении

$$\varepsilon_i = a(x_i) - y_i$$

# 1.3. Пересчитать веса объектов

$$v_i = \exp(-\varepsilon_i^2)$$

нормировать на сумму



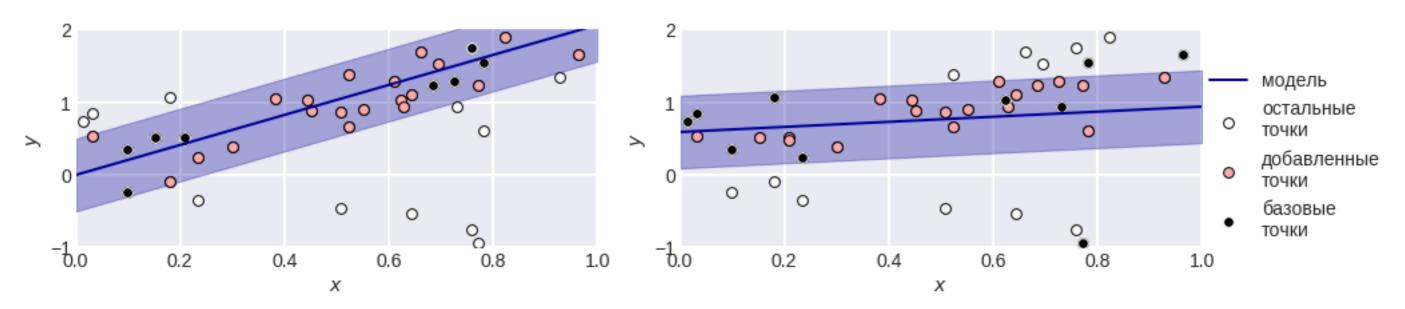
можно использовать любую регрессионную модель

при пересчёте весов можно использовать другую невозрастающую функцию; можно (иногда нужно) нормировать

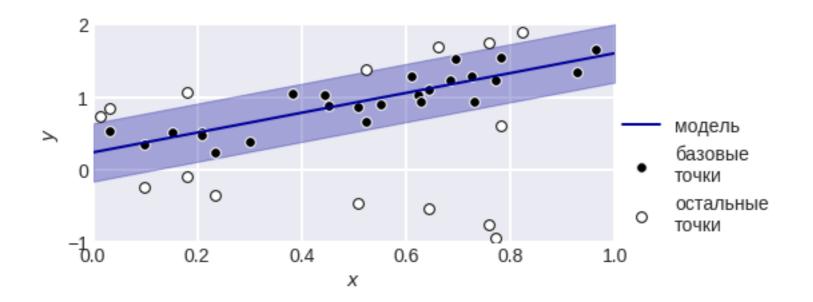
# RANdom SAmple Consensus (RANSAC)

### •несколько раз

- о выбрать случайное подмножество точек базовое (inliers)
- о обучить модель на базовом подмножестве
- найти все точки, которые хорошо предсказываются моделью например, ошибка не больше ε
- о пополнить ими базовое множество
- (если добавили много) переобучить модель на новом множестве
- •выбрать модель с наименьшей ошибкой



# Минутка кода: RANSAC в scikit-learn



```
from sklearn.linear_model import RANSACRegressor
# Robustly fit linear model with RANSAC algorithm
ransac = RANSACRegressor()
ransac.fit(x[:, np.newaxis], y)
inlier_mask = ransac.inlier_mask_
outlier mask = np.logical not(inlier_mask)
```

# Минутка кода: RANSAC в scikit-learn

sklearn.linear\_model import RANSACRegressor

base_estimator=None	Базовый алгоритм (по умолчанию – линейная регрессия)
min_samples=None	Число / доля базовых объектов ( <i>n</i> +1)
residual_threshold=None	Порог для пополнения базового множества (MAD(y))
max_trials=100	Число итераций
stop_n_inliers	Остановить вычисления, если найдено столько базовых точек
loss="absolute_loss"	Как оценивать ошибку

is\_data\_valid=None, is\_model\_valid=None, max\_skips=inf,
stop\_score=inf, stop\_probability=0.99, lossrandom\_state=None

# Реализация в scikit-learn немного отличается от некоторых описаний:

Качество = число базовых (inliers) объектов; лучшая модель выбирается по числу базовых, если у нескольких моделей число совпадает, тогда сравнивается ошибка на всей выборке.

# Плюсы и минусы линейных алгоритмов

- + простой, надёжный, быстрый, популярный метод
- + интерпретируемость ( $\Rightarrow$  нахождение закономерностей)
  - + интерполяция и экстраполяция
- + может быть добавлена нелинейность, с помощью генерации новых признаков

(дальше – это можно автоматизировать)

- + хороши для теоретических исследований (в Rldge есть явная формула)
  - + коэффициенты асимптотически нормальны

(можно тестировать гипотезы о влиянии признаков)

- + глобальный минимум в оптимизируемом функционале
  - линейная гипотеза вряд ли верна
- в теоретическом обосновании ещё предполагается нормальность **ошибок**

(зависит от функции ошибок)

- «страдает» из-за выбросов
- признаки в одной шкале и однородные (см. успешные примеры)
  - проблема коррелированных признаков
  - ⇒ необходимость регуляризации, селекции, РСА, data↑