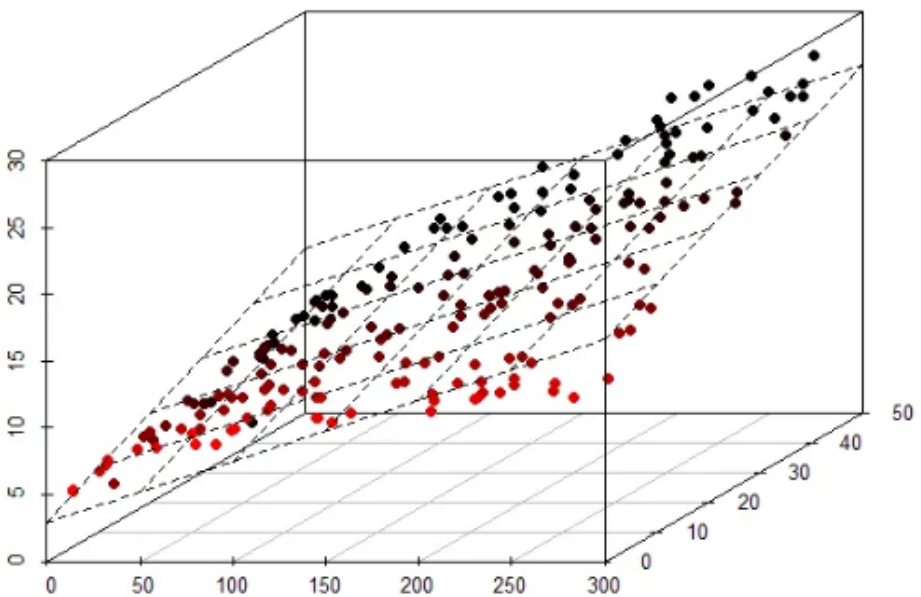
Линейная регрессия и обобщения

Виктор Китов



Содержание

Линейная регрессия

- Линейная регрессия

$$\widehat{y} = x^T \widehat{\beta} = \sum_{i=1}^{D} \widehat{\beta}_i x^i$$

$$\widehat{\beta} = \arg\min_{\beta} \sum_{n=1}^{N} \left(x_n^T \beta - y_n \right)^2$$

- Если смещение $\widehat{\beta}_0$ явно не указано, всегда включают константный признак в x.
- Предположения:
  - каждый x^i линейно влияет y с коэффициентом $\widehat{\beta}_i$
  - вклад каждого признака x^i не зависит от значений др. признаков.

Анализ метода

Преимущества:

- интерпретируемость
  - знак коэффициентов=направление влияния x^i
  - модуль коэффициента=сила влияния x^i (при признаках из одной шкалы!)
  - $\widehat{\beta}$ асимптотически нормальны (см. ссылку), можем тестировать:
    - значимость отличия коэффициентов (или группы коэффициентов) от нуля,
    - гипотезу положительного влияния признака на отклик (положительности коэффициента)
  - есть аналитическое решение
  - быстро и просто строятся прогнозы
  - меньше переобучается, чем сложные модели
    - для больших D может быть оптимальной моделью

Недостатки: модельные предположения слишком простые

- признаки могут влиять нелинейно
- признаки могут иметь взаимозависимое влияние

Признаки

- Можно использовать вещественные признаки и бинарные.
- Категориальные можно закодировать:
  - номером категории (плохо)
  - счетчиком встречаемости категории
  - в виде бинарных (one-hot encoding)
  - в виде вещественных (mean value encoding)

One-hot кодирование

Row Number	Direction
1	North
2	North-West
3	South
4	East
5	North-West

Row Number	Direction_N	Direction_S	Direction_W	Direction_E	Direction_NW
1	1	0	0	0	0
2	0	0	0	0	1
3	0	1	0	0	0
4	0	0	0	1	0
5	0	0	0	0	1

Mean value кодирование

- можно делать по вещественному признаку
- если делаем по y, то на отдельной выборке!

id	job	job_mean	target
1	Doctor	0,50	1
2	Doctor	0,50	0
3	Doctor	0,50	1
4	Doctor	0,50	0
5	Teacher	1	1
6	Teacher	1	1
7	Engineer	0,50	0
8	Engineer	0,50	1
9	Waiter	1	1
10	Driver	0	0

Решение

Определим $X \in \mathbb{R}^{N \times D}$, $\{X\}_{ij}$ - значение j-го признака i-го объекта, $Y \in \mathbb{R}^N$, $\{Y\}_i$ - отклик i-го объекта.
Метод наименьших квадратов (МНК, ordinary least squares):

$$L(\beta) = \sum_{n=1}^{N} \left(x_n^T \beta - y_n \right)^2 = \|X\beta - Y\|_2^2 \to \min_{\beta}$$

$$L'(\beta) = 2 \sum_{n=1}^{N} x_n \left(x_n^T \beta - y_n \right) = 0$$

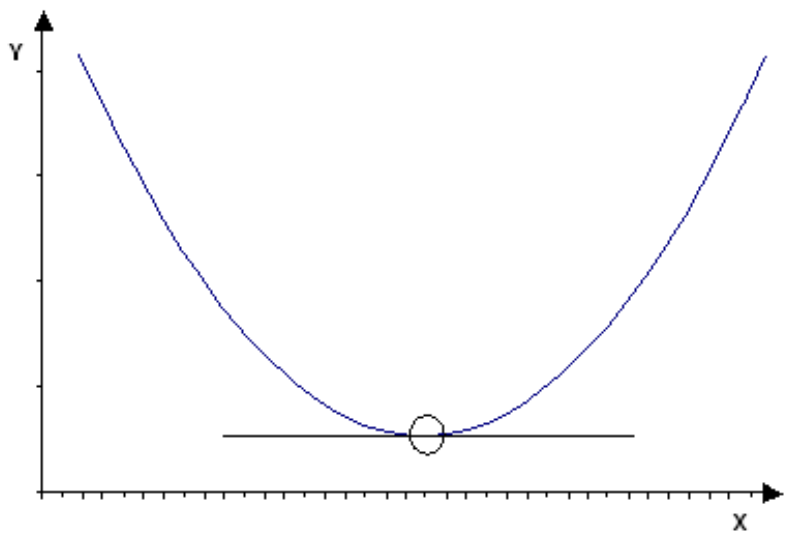
$$2X^T(X\beta - Y) = 0$$

$$\widehat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

Интуиция: $\widehat{\beta}_i$ пропорциональна ковариации x_n^i и y_n, нормализованная $Var[x^i]$ и $cov[x^i, x^j]$.

Глобальность минимума

- Это глобальный минимум, т.к. оптимизируемый критерий выпуклый.
  - выпуклая ф-ция от линейной выпукла[1], сумма выпуклых - выпукла
  - для выпуклой ф-ции достаточное условие минимума - равенство нулю производной.



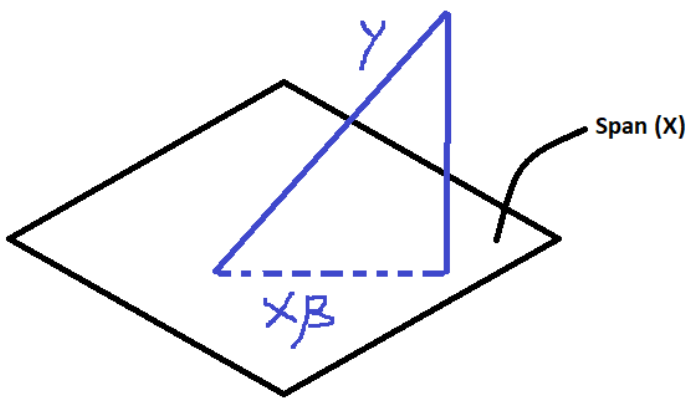
[1] Будет ли суперпозиция произвольных выпуклых ф-ций выпуклой?

Геометрическая интерпретация

- Находится линейная комбинация признаков, чтобы приблизить Y в $\mathbb{R}^N$:

$$L(\beta) = \sum_{n=1}^{N} \left(x_n^T \beta - y_n \right)^2 = \|X\beta - Y\|_2^2 \to \min_{\beta}$$

- Решение - проекция на линейную оболочку признаков в $\mathbb{R}^N$.



Линейно зависимые признаки - проблема

- Решение $\widehat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y$ существует, когда $X^T X$ невырождена.
- Поскольку $rank(X) = rank(X^T X)\ \forall X$, проблема возникает при линейной зависимости признаков.
  - пример: константный признак и one-hot закодированные $e_1, e_2, ...e_K$, поскольку $\sum_k e_k \equiv 1$
  - интерпретация: возникает неоднозначность $\widehat{\beta}$ для зависимых признаков:
    - линейная зависимость: $\exists \alpha:\ x^T \alpha = 0\ \forall x$
    - предположим $\widehat{\beta}$ - решение $\sum_{n=1}^{N} \left(x_n^T \beta - y_n\right)^2 \to \min_\beta$
    - тогда $\widehat{\beta} + k\alpha$ - тоже решение $\forall k \in \mathbb{R}: x^T \widehat{\beta} \equiv x^T \widehat{\beta} + k x^T \alpha \equiv x^T (\widehat{\beta} + k\alpha)$.
- При почти зависимых признаках ($X^T X$ плохо обусловлена, т.е. $\lambda_{max}/\lambda_{min}$ велико):
  - $\widehat{\beta}$ неустойчиво и принимает большие по модулю значения.

Линейно зависимые признаки - решение

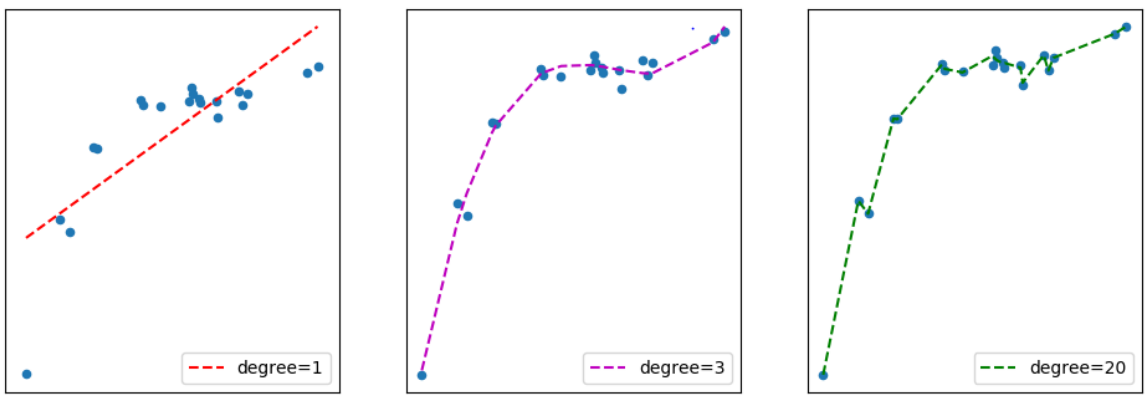
- Проблема может быть решена:
  - отбором признаков (feature selection)
  - снижением размерности (dimensionality reduction)
  - накладыванием доп. условий на решение (регуляризация)
    - $\|\beta\|$ должна быть мала
    - некоторые β_i должны быть неотрицательные
    - ...

Нелинейные зависимости в линейной регрессии

Перейдем от $x \in \mathbb{R}^D$ к его нелинейному преобразованию $\in \mathbb{R}^M$:

$$x \to [\phi_1(x), \phi_2(x), \dots \phi_M(x)]$$

$$\widehat{y}(x) = \phi(x)^T \widehat{\beta} = \sum_{m=1}^{M} \widehat{\beta}_m \phi_m(x)$$



Underfit
High Bias

Correct Fit
Low Bias

Overfit
Low Bias

Линейная регрессия с полиномиальным преобразованием признака

Анализ

$\widehat{y}(x)$ уже нелинейно зависит от x. При этом преимущества лин. регрессии сохраняются:

- интерпретируемость (для несложных преобразований)
- аналитическое решение
- глобальный минимум потерь

Популярные трансформации признаков

Рассмотрим популярные преобразования признаков.

$\phi_k(x)$	**примеры**
$\left(x^i\right)^2, \sqrt{x^i}, \ln x^i$	учитываем нелинейное влияние расстояния до метро на стоимость квартиры
$\mathbb{I}\left\{x^i \in [a,b]\right\}$	принадлежит ли клиент определенному возрасту? (совершеннолетний, но не пенсионер)
$x^i\mathbb{I}[x^i \leq a],\ x^i\mathbb{I}[x^i > a]$	учесть изменения влияния x^i при $x^i > a$
$\left(x^i\right)\left(x^j\right)$	длина x ширина участка = площадь
$\langle x,z\rangle/(\|x\|\,\|z\|)$	угол между объектом и репрезентативым объектом z
$\|x-z\|^2$	расстояние объекта к репрезентативному объекту z (чаще используют близость)
x^i/x^j	стоимость квартиры/метраж = стоимость одного метра
$F_{x^i}(x^i)$	приводим признак к равномерному распределению ($F(\cdot)$ - ф-ция распределения)

Нелинейная регрессия

- Можно исходные признаки подставлять в нелинейную ф-цию $\widehat{y} = f(x|\theta)$

$$L(\theta|X,Y) = \sum_{n=1}^{N} (f(x_n|\theta) - y_n)^2$$

$$\widehat{\theta} = \arg\min_{\theta} L(\theta|X,Y)$$

- В общем случае не существует аналитического решения $\widehat{\theta}$.
  - используем численные методы, например SGD.

Содержание

Регуляризация

- Для лучшей обобщающей способности важна не только точность, но и простота модели.
- Учтем простоту дополнительным регуляризатором $R(\beta)$:

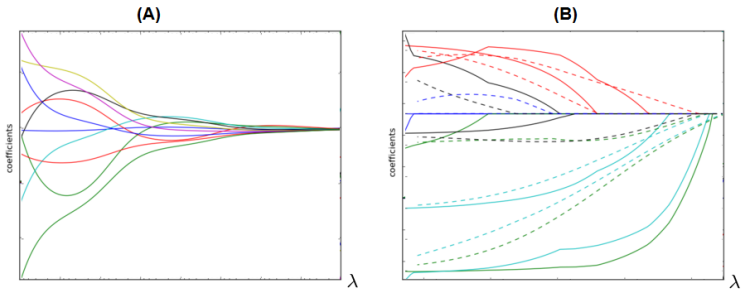
$$\sum_{n=1}^{N}\left(x_n^T\beta - y_n\right)^2 + \lambda R(\beta) \to \min_{\beta}$$

- $\lambda > 0$ - гиперпараметр, контролирующий сложность модели.
  - как он влияет на сложность?

$R(\beta) = ||\beta||_1$, Лассо регрессия (Lasso regression)
$R(\beta) = ||\beta||_2^2$ Гребневая регрессия (Ridge regression)

Зависимость $\widehat{\beta}$ от λ

- Зависимость $\widehat{\beta}$ от λ для гребневой (A) и лассо (B) регрессии:



- Лассо регрессия может использоваться для автоматического отбора признаков.
- λ находят по экспоненциальной сетке $[10^{-6}, 10^{-5}, ...10^{5}, 10^{6}]$.
  - потом уточняют
- Всегда рекомендуется включать регуляризацию:
  - плавный контроль сложности модели
  - решение однозначно даже для линейно зависимых признаков
    - выбирается коэффициент, отвечающий минимальному $\|\theta\|$

ElasticNet

- ElasticNet:

$$R(\beta) = \alpha||\beta||_1 + (1-\alpha)||\beta||_2^2 \to \min_{\beta}$$

$$\alpha \in [0,1] - \text{гиперпараметр.}$$

- Если два признака x^i и x^j равны:
  - Гребневая регрессия выберет оба с равным весом
    - правильно, т.к. нет априорных предпочтений
  - Лассо регрессия выберет один из них (в общем случае)
    - зато отберет лишние признаки
- ElasticNet обладает обоими преимуществами.

Аналитическое решение для гребневой регрессии

Критерий гребневой регрессии

$$\sum_{n=1}^{N}\left(x_n^T\beta - y_n\right)^2 + \lambda\beta^T\beta \to \min_{\beta}$$

Условие стационарности (равенство нулю производной):

$$2\sum_{n=1}^{N} x_n\left(x_n^T\beta - y_n\right) + 2\lambda\beta = 0$$

$$2X^T(X\beta - Y) + \lambda\beta = 0$$

$$\left(X^TX + \lambda I\right)\beta = X^TY$$

поэтому

$$\widehat{w} = (X^TX + \lambda I)^{-1}X^TY$$

$X^TX + \lambda I$ всегда невырождена как сумма $X^TX \succeq 0$ и $\lambda I \succ 0$.

Учет разных признаков с разной силой

- Прогнозы обычной регрессии инвариантны к масштабированию признаков:

$$\widehat{y} = \widehat{\beta}_1 x^1 + \widehat{\beta}_2 x^2 + \ldots \overset{x^1 \to x^1/\alpha}{\longrightarrow} \left(\alpha\widehat{\beta}_1\right)\left(\frac{x^1}{\alpha}\right) + \widehat{\beta}_2 x^2 + \ldots$$

- Но не регуляризованной:

$$\sum_{n=1}^{N}\left(x_n^T\beta - y_n\right)^2 + \lambda R(\beta) \to \min_{\beta}$$

- После изменения масштаба признаков, они будут вносить другой вклад в прогноз.
  - для большего учета признака как нужно изменить его масштаб?

Агрегация разных моделей

- Пусть $x_i = [x_i^1, ...x_i^D]$ состоит из прогнозов y D разными моделями, которые мы линейно объединяем.
- Веса $\frac{1}{D}, \frac{1}{D}, ...\frac{1}{D}$ - разумный бейзлайн, но модели могут быть разной точности.
- Учтем их с настраиваемыми весами $\widehat{\beta}_1, ...\widehat{\beta}_D$ (blending, linear stacking):

$$\widehat{y} = x_n^T \widehat{\beta}$$

- Логично предположить неотрицательность весов и несильное отклонение от бейзлайна.

$$\begin{cases} \sum_{n=1}^N \left(x_n^T \beta - y_n\right)^2 + \lambda \sum_{d=1}^D \left(\beta - \frac{1}{D}\right)^2 \to \min_\beta \\ \beta_i \geq 0, \quad i = 1, 2, ...D \end{cases}$$

- Во избежание переобучения нужно базовые модели и $\widehat{\beta}$ настраивать на разных обучающих выборках.

Содержание

Обобщение функции потерь[2]

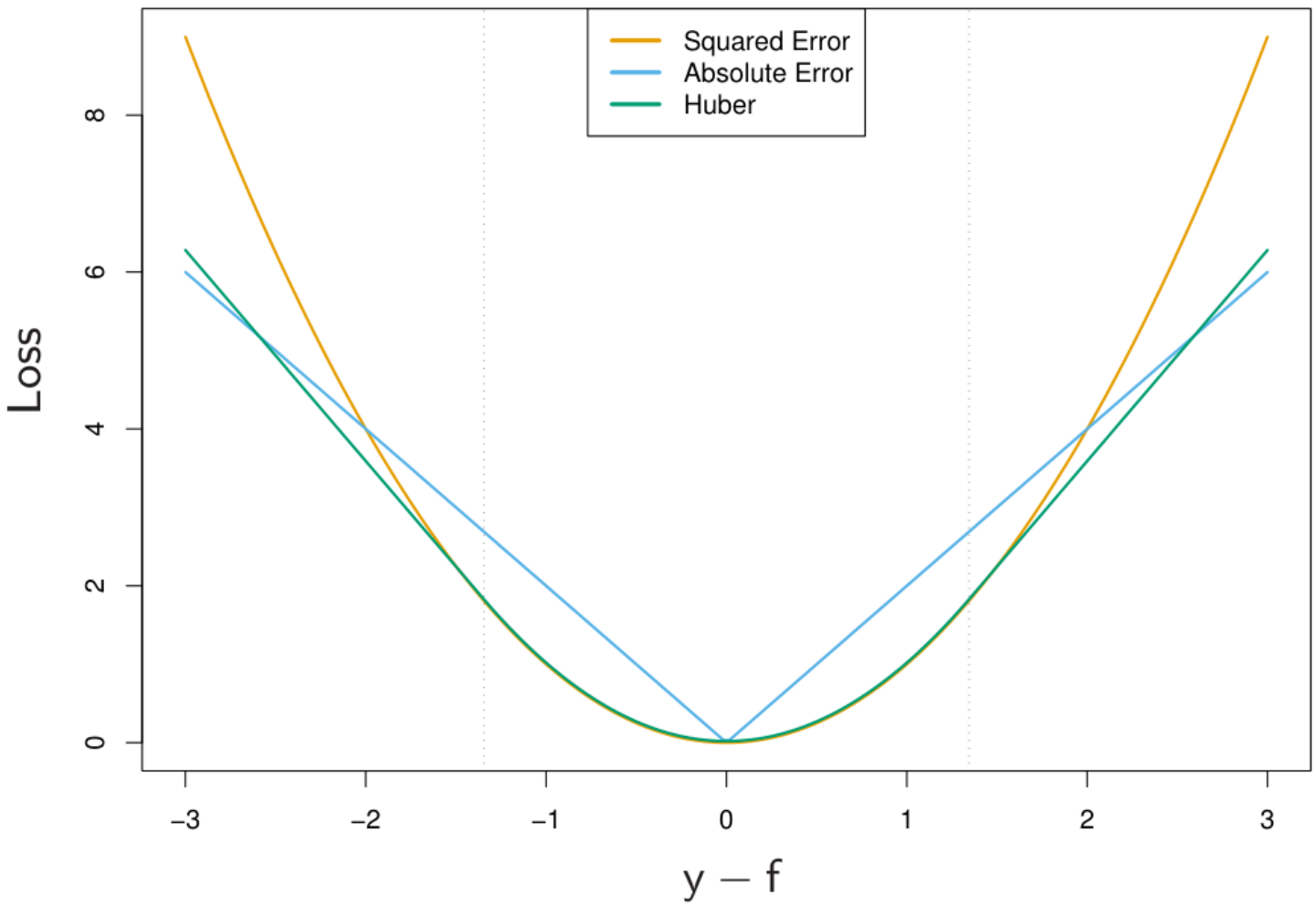
- Обобщим квадратичные потери на произвольные:

$$\sum_{n=1}^{N}\left(x^T\beta - y_n\right)^2 \to \min_\beta \qquad \Longrightarrow \qquad \sum_{n=1}^{N}\mathcal{L}(x_n^T\beta - y_n) \to \min_\beta$$

ФУНКЦИЯ ПОТЕРЬ	НАЗВАНИЕ	СВОЙСТВА
$\mathcal{L}(\varepsilon) = \varepsilon^2$	квадратичная	дифференцируемая
$\mathcal{L}(\varepsilon) = \lvert\varepsilon\rvert$	абсолютная	устойчивая к выбросам
$\mathcal{L}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{2}\varepsilon^2, & \lvert\varepsilon\rvert \le \delta \\ \delta\left(\lvert\varepsilon\rvert - \frac{1}{2}\delta\right) & \lvert\varepsilon\rvert > \delta \end{cases}$	Хубера	оба свойства

[2]Чему равен константный прогноз, минимизирующий квадратичные и абсолютные ошибки?

Визуализация функций потерь



Оптимальный прогноз для квадратичной ошибки

Константный прогноз $\widehat{y} \in \mathbb{R}$ при квадратичной ф-ции потерь:

$$L(\widehat{y}) = \mathbb{E}\left\{(\widehat{y} - y)^2\right\} \to \min_{\widehat{y} \in \mathbb{R}}$$

$$\frac{\partial L(\widehat{y})}{\partial \widehat{y}} = \mathbb{E}\left\{2(\widehat{y} - y)\right\} = 2\widehat{y} - 2\mathbb{E}y = 0$$

$$\widehat{y} = \mathbb{E}y$$

Оптимальный прогноз для абсолютной ошибки

Константный прогноз $\widehat{y} \in \mathbb{R}$ при абсолютной ф-ции потерь:

$$L(\widehat{y}) = \mathbb{E}\{|\widehat{y} - y|\} = \int |\widehat{y} - y|\, p(y)dy =$$

$$= \int (\widehat{y} - y)\mathbb{I}[\widehat{y} \geq y]p(y)dy + \int (y - \widehat{y})\mathbb{I}[\widehat{y} < y]p(y)dy \to \min_{\widehat{y}\in\mathbb{R}}$$

$$\frac{\partial L(\widehat{y})}{\partial \widehat{y}} = \int \mathbb{I}[\widehat{y} - y]p(y)dy - \int \mathbb{I}[\widehat{y} - y]p(y)dy = 0$$

$$\widehat{y} = \text{median}[y]$$

Влияние функции потерь на результат

- Следовательно, для фиксированного x оптимальный функциональный прогноз будет:

$$\arg\min_{\widehat{y}(x)} \mathbb{E}\left\{ (\widehat{y}(x)-y)^2 \middle| x \right\} = \mathbb{E}[y|x]$$

$$\arg\min_{\widehat{y}(x)} \mathbb{E}\left\{ |\widehat{y}(x)-y| \,|\, x \right\} = \text{median}[y|x]$$

- При фиксированных обучающей выборке и модели результат будет получаться разный для различных ф-ций потерь!

Содержание

Взвешенный учет наблюдений[3]

- Взвешенный учет наблюдений

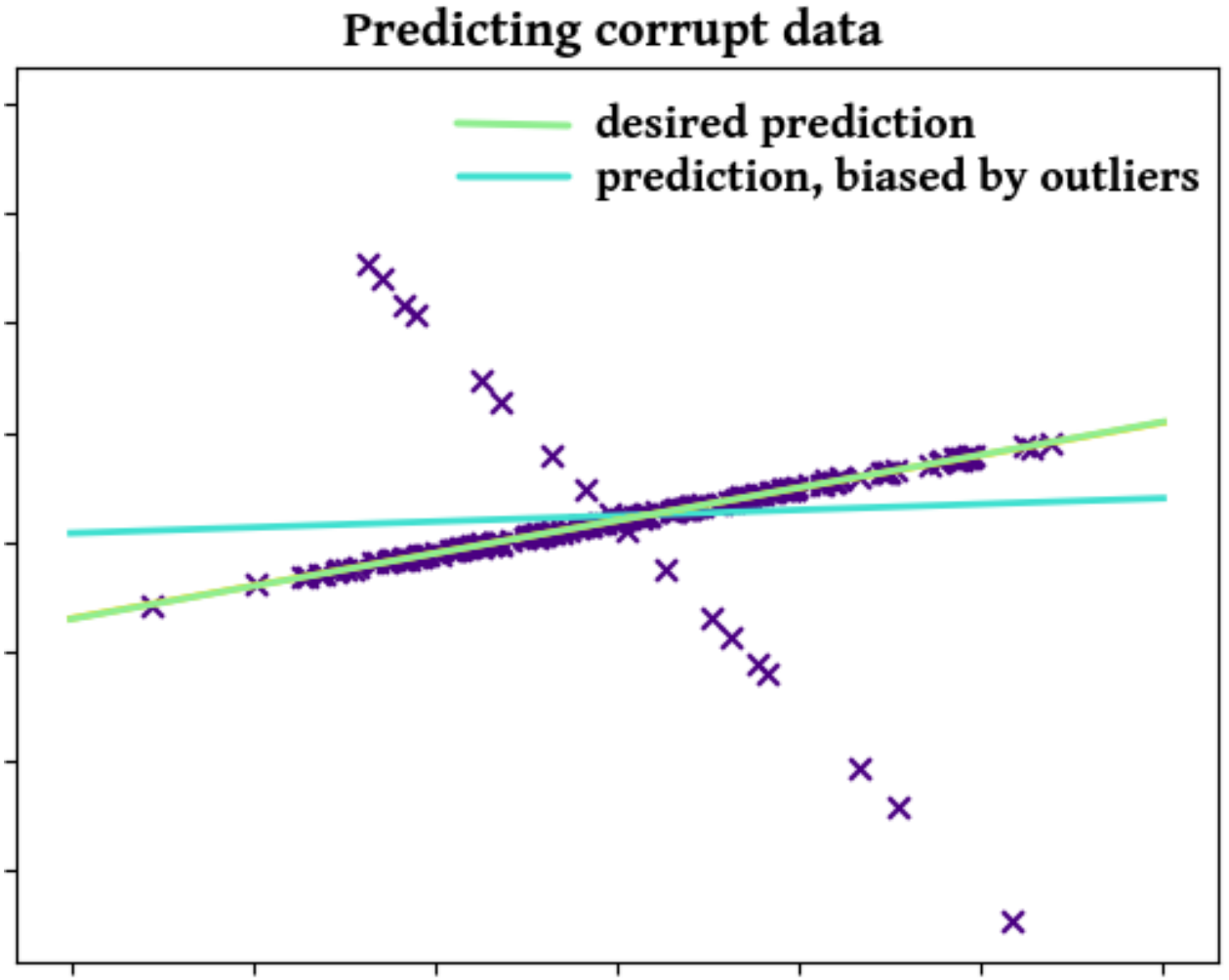
$$\sum_{n=1}^{N} w_n(x_n^T\beta - y_n)^2 \to \min_{\beta\in\mathbb{R}^D}$$

$$w_1 \geq 0, \ldots w_N \geq 0$$

- Неравномерные веса могут быть обусловлены:
  - разному доверию различным фрагментам обучающей выборки
  - желанием снизить влияние объектов-выбросов
  - желанием сделать сделать сбалансированную выборку
    - Например, результаты голосования. Женщины много голосовали, мужчины мало. Хотим построить модель без перекоса на женские предпочтения.

[3] Выведите решение для взвешенной линейной регрессии.

Проблема выбросов



Робастная регрессия

- Инициализировать $w_1 = ... = w_N = 1/N$
- Повторять до сходимости:
  - оценить регрессию $\widehat{y}(x)$ используя (x_i, y_i) с весами w_i.
  - для каждого $i = 1, 2, ...N$:
    - переоценить $\varepsilon_i = \widehat{y}(x_i) - y_i$
    - пересчитать веса $w_i = K(|\varepsilon_i|)$
  - нормализовать веса $w_i = \frac{w_i}{\sum_{n=1}^{N} w_n}$

Комментарии:

- $K(\cdot)$ - некоторая убывающая функция.
- Веса объектов-выбросов убывают, получаем устойчивое к выбросам решение.
- Алгоритм обобщается на любой метод, допускающий взвешенный учет наблюдений.

Содержание

Регрессия опорных векторов

Идея: допускаем небольшие $\pm\varepsilon$ отклонения, L_2 регуляризация.

$$\begin{cases} \frac{1}{2}\|\beta\|_2^2 \to \min_{\beta\in\mathbb{R}^D} & \text{(смещение } \beta_0 \text{ пишем явно)} \\ x_n^T\beta+\beta_0-y_n\le\varepsilon & n=\overline{1,N} \\ y_n-x_n^T\beta-\beta_0\le\varepsilon & n=\overline{1,N} \end{cases}$$

Если невозможно вписать все ошибки в интервал $[-\varepsilon,\varepsilon]$, воспользуемся методом общего вида:

$$\begin{cases} \frac{1}{2}\|\beta\|_2^2+C\sum_{n=1}^N(\xi_n+\xi_n^*)\to\min_{\beta\in\mathbb{R}^D;\xi_n,\xi_n^*\in\mathbb{R}^N} & & \\ x_n^T\beta+\beta_0-y_n\le\varepsilon+\xi_n, \quad \xi_n\ge 0 & & n=\overline{1,N} \\ y_n-x_n^T\beta-\beta_0\le\varepsilon+\xi_n^*, \quad \xi_n^*\ge 0 & & n=\overline{1,N} \end{cases}$$

$C\ge 0$ - гиперпараметр, контролирующий противоречие между точностью и простотой модели.

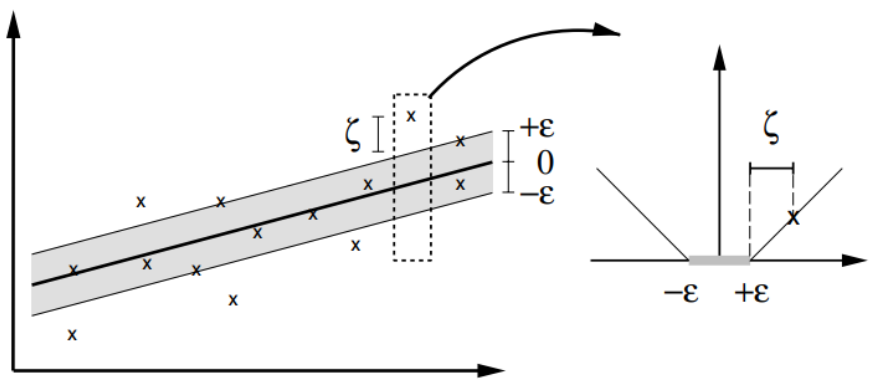
Регрессия опорных векторов

Эквивалентная формулировка (без ограничений неравенства):

$$\frac{1}{2}\|\beta\|_2^2 + C\sum_{n=1}^{N}\mathcal{L}(x_n^T\beta + \beta_0 - y_n) \to \min_{\beta\in\mathbb{R}^D}$$

$$\mathcal{L}(u) = \begin{cases} 0, & \text{if } |u| \le \varepsilon \\ |u| - \varepsilon & \text{иначе} \end{cases}$$

ε – нечувствительная ф-ция потерь



Решение будет зависеть только от объектов с |ошибка|$\ge \varepsilon$, называемых опорными векторами.

Multi-task Lasso

- T задач: $Y \in \mathbb{R}^{N \times T}$
- $\widehat{Y} = X\widehat{B}$, $X \in \mathbb{R}^{N \times D}$, $\widehat{B} \in \mathbb{R}^{D \times T}$
  - индивидуальный набор весов для каждой задачи
- Хотим:
  - исключить лишние признаки
  - чтобы одинаковый набор признаков влиял на все прогнозы
    - например, одни и те же признаки должны определять стоимость акций и выручку компании
- Достигается специальной регуляризацией:[4]

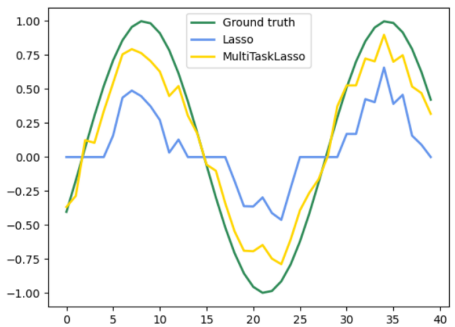
$$\frac{1}{2N}\|XB - Y\|_2^2 + \lambda \|B\|_{21} \to \min_B$$

$$\|B\|_{21} = \sum_d \sqrt{\sum_t \beta_{dt}^2}$$

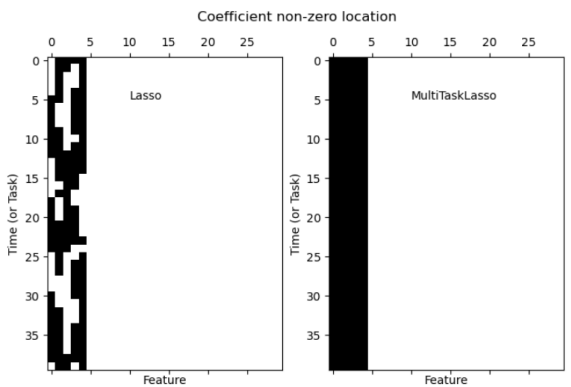
[4] Почему такой вид регуляризации обеспечивает требуемое свойство? Посчитайте производную регуляризатора=влиянию регуляризации при оптимизации. В каком случае для малого веса она будет велика?

Пример

Прогнозы точнее, если действительно важен одинаковый набор признаков:



Влияет один и тот же набор признаков (коэффициенты при них обозначены черным):



Orthogonal matching pursuit: задача

Метод Orthogonal Matching Pursuit решает задачу:

$$\begin{cases} \|X\beta - Y\|_2^2 \to \min_\beta \\ \|\beta\|_0 \leq K \end{cases}$$

или эквивалентную (с точностью до $K(\varepsilon)$):

$$\begin{cases} \|\beta\|_0 \to \min_\beta \\ \|X\beta - Y\|_2^2 \leq \varepsilon \end{cases}$$

- $\|\beta\|_0 = \#$[число ненулевых весов]

Orthogonal matching pursuit: метод

1. Инициализировать модель, равную константному нулю.
2. Повторять, пока $\|\beta\|_0 < K$ (или пока $\|X\beta - Y\|_2^2 > \varepsilon$)
   1. добавить признак, максимально коррелирующий с ошибками прогноза последней модели.
   2. переобучить линейную регрессию на данных (отобранные признаки, ошибки прогнозирования)
   3. обновить ошибки прогнозирования

- Метод обобщается
  - на произвольный алгоритм прогнозирования
  - на произвольную меру взаимосвязи признаков и откликов

Заключение

- Линейная регрессия дает интерпретируемое аналитическое решение.
- Нелинейные закономерности моделируются:
  - добавлением нелинейных преобразований признаков
  - прогнозированием произвольной нелинейной функцией
- Регуляризация позволяет:
  - считать прогнозы для линейно-зависимых признаков
  - плавно настраивать сложность модели
  - отбирать признаки (лассо регрессия)
- Автоматический отбор признаков:
  - Лассо регрессия, orthogonal matching pursuit
- Различные функции потерь приводят к разным прогнозам.
- Устойчивость к выбросам достигается:
  - применением L_1 потерь (лассо регрессия)
  - взвешенным учётом наблюдений (робастная регрессия)