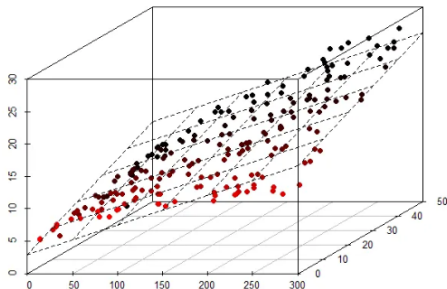


Линейная регрессия и обобщения

Виктор Китов



Содержание

- 1 Линейная регрессия
- 2 Регуляризация
- 3 Разные функции потерь
- 4 Взвешенный учет наблюдений
- 5 Другие типы регрессии

Линейная регрессия

- Линейная регрессия

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

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

- Если смещение $\hat{\beta}_0$ явно не указано, всегда включают константный признак в x .
- Предположения:
 - каждый x^i линейно влияет y с коэффициентом $\hat{\beta}_i$
 - 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!)
 - $\hat{\beta}$ 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):

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

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

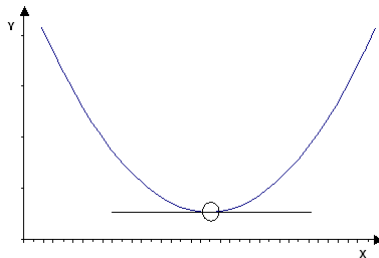
$$2X^T(X\beta - Y) = 0$$

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

Интуиция: $\hat{\beta}_i$ 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 выпукла¹, сумма выпуклых - выпукла
 - для выпуклой ф-ции достаточное условие минимума - равенство нулю производной.



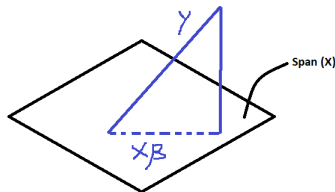
¹Будет ли суперпозиция произвольных выпуклых ф-ций выпуклой?

Геометрическая интерпретация

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

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

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



Линейно зависимые признаки - проблема

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

Линейно зависимые признаки - решение

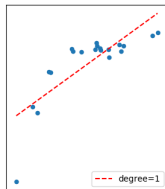
- Проблема может быть решена:
 - отбором признаков (feature selection)
 - снижением размерности (dimensionality reduction)
 - накладыванием доп. условий на решение (регуляризация)
 - $\|\beta\|$ должна быть мала
 - некоторые β_i должны быть неотрицательные
 - ...

Нелинейные зависимости в линейной регрессии

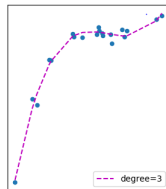
Перейдем от $x \in \mathbb{R}^D$ к его нелинейному преобразованию $\in \mathbb{R}^M$:

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

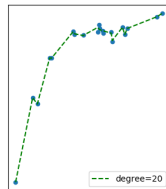
$$\hat{y}(x) = \phi(x)^T \hat{\beta} = \sum_{m=1}^M \hat{\beta}_m \phi_m(x)$$



Underfit
High Bias



Correct Fit
Low Bias



Overfit
Low Bias

Линейная регрессия с полиномиальным преобразованием признака

Анализ

$\hat{y}(x)$ 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
$(x^i)^2, \sqrt{x^i}, \ln x^i$	учитываем нелинейное влияние расстояния до метро на стоимость квартиры
$\mathbb{I} \{x^i \in [a, b]\}$	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 $x^i > a$
$(x^i)(x^j)$	длина \times ширина участка = площадь
$\langle x, z \rangle / (\ x\ \ z\)$	угол между объектом и репрезентативным объектом z
$\ x - z\ ^2$	расстояние от объекта до репрезентативного объекта 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 $\hat{y} = f(x|\theta)$

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

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

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

Содержание

- 1 Линейная регрессия
- 2 Регуляризация**
- 3 Разные функции потерь
- 4 Взвешенный учет наблюдений
- 5 Другие типы регрессии

Регуляризация

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

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

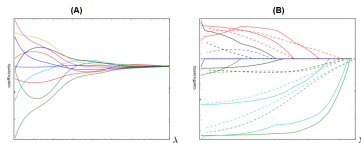
- $\lambda > 0$ - гиперпараметр, контролирующий сложность модели.
 - как он влияет на сложность?

$R(\beta) = \|\beta\|_1$, Лассо регрессия (Lasso regression)

$R(\beta) = \|\beta\|_2^2$ Гребневая регрессия (Ridge regression)

Зависимость $\hat{\beta}$ от λ

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



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

ElasticNet

- ElasticNet:

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

$\alpha \in [0, 1]$ — 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

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

Условие стационарности (равенство нулю производной):

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

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

$$(X^T X + \lambda I) \beta = X^T Y$$

поэтому

$$\hat{w} = (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T Y$$

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

Учет разных признаков с разной силой

- Прогнозы обычной регрессии инвариантны к масштабированию признаков:

$$\hat{y} = \hat{\beta}_1 x^1 + \hat{\beta}_2 x^2 + \dots \xrightarrow{x^1 \rightarrow x^1/\alpha} \left(\alpha \hat{\beta}_1 \right) \left(\frac{x^1}{\alpha} \right) + \hat{\beta}_2 x^2 + \dots$$

- Но не регуляризованной:

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

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

Агрегация разных моделей

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

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

- Логично предположить неотрицательность весов и несильное отклонение от бейзлайна.

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

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

Содержание

- 1 Линейная регрессия
- 2 Регуляризация
- 3 Разные функции потерь**
- 4 Взвешенный учет наблюдений
- 5 Другие типы регрессии

Обобщение функции потерь²

- Обобщим квадратичные потери на произвольные:

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

ФУНКЦИЯ ПОТЕРЬ

$$\mathcal{L}(\varepsilon) = \varepsilon^2$$

$$\mathcal{L}(\varepsilon) = |\varepsilon|$$

$$\mathcal{L}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{2}\varepsilon^2, & |\varepsilon| \leq \delta \\ \delta \left(|\varepsilon| - \frac{1}{2}\delta \right) & |\varepsilon| > \delta \end{cases}$$

НАЗВАНИЕ

квадратичная

абсолютная

Хубера

СВОЙСТВА

дифференцируемая

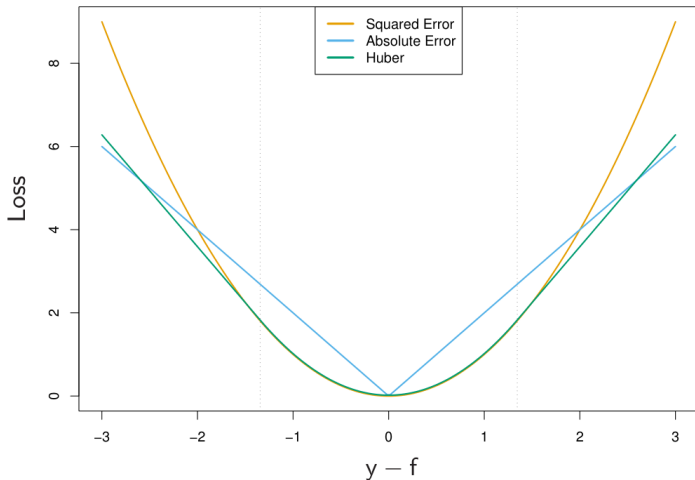
устойчивая

к выбросам

оба свойства

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

Визуализация функций потерь



Оптимальный прогноз для квадратичной ошибки

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

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

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

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

Оптимальный прогноз для абсолютной ошибки

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

$$\begin{aligned}L(\hat{y}) &= \mathbb{E} \{ |\hat{y} - y| \} = \int |\hat{y} - y| p(y) dy = \\&= \int (\hat{y} - y) \mathbb{I}[\hat{y} \geq y] p(y) dy + \int (y - \hat{y}) \mathbb{I}[\hat{y} < y] p(y) dy \rightarrow \min_{\hat{y} \in \mathbb{R}} \\ \frac{\partial L(\hat{y})}{\partial \hat{y}} &= \int \mathbb{I}[\hat{y} \geq y] p(y) dy - \int \mathbb{I}[\hat{y} < y] p(y) dy = 0 \\ \frac{\partial L(\hat{y})}{\partial \hat{y}} &= \int_{y \leq \hat{y}} p(y) dx - \int_{y > \hat{y}} p(y) dy = 0 \\ \hat{y} &= \text{median}[y]\end{aligned}$$

Влияние функции потерь на результат

- Следовательно, для фиксированного x оптимальный функциональный прогноз будет:

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

$$\arg \min_{\hat{y}(x)} \mathbb{E} \{ |\hat{y}(x) - y| \mid x \} = \text{median}[y|x]$$

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

Содержание

- 1 Линейная регрессия
- 2 Регуляризация
- 3 Разные функции потерь
- 4 Взвешенный учет наблюдений**
- 5 Другие типы регрессии

Взвешенный учет наблюдений³

- Взвешенный учет наблюдений

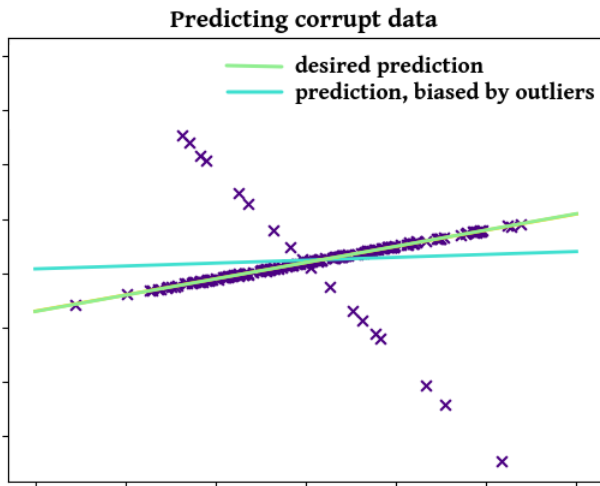
$$\sum_{n=1}^N w_n (x_n^T \beta - y_n)^2 \rightarrow \min_{\beta \in \mathbb{R}^D}$$

$$w_1 \geq 0, \dots, w_N \geq 0$$

- Неравномерные веса могут быть обусловлены:
 - разному доверию различным фрагментам обучающей выборки
 - желанием снизить влияние объектов-выбросов
 - желанием 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 $w_1 = \dots = w_N = 1/N$
- Повторять до сходимости:
 - оценить регрессию $\hat{y}(x)$ используя (x_i, y_i) с весами w_i .
 - для каждого $i = 1, 2, \dots, N$:
 - переоценить $\varepsilon_i = \hat{y}(x_i) - y_i$
 - 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

- 1 Линейная регрессия
- 2 Регуляризация
- 3 Разные функции потерь
- 4 Взвешенный учет наблюдений
- 5 Другие типы регрессии

Регрессия опорных векторов

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

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

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

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

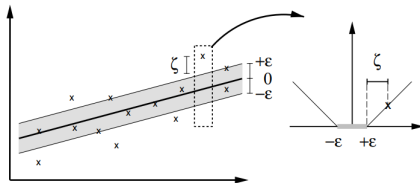
$C \geq 0$ - гиперпараметр, контролирующий противоречие между точностью и простотой модели.

Регрессия опорных векторов

Эквивалентная формулировка (без ограничений неравенства):

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

$$\mathcal{L}(u) = \begin{cases} 0, & \text{if } |u| \leq \varepsilon \\ |u| - \varepsilon & \text{иначе} \end{cases} \quad \varepsilon - \text{нечувствительная ф-ция потерь}$$



Решение будет зависеть только от объектов с $|\text{ошибка}| \geq \varepsilon$,
называемых опорными векторами.

Orthogonal matching pursuit: задача

Метод Orthogonal Matching Pursuit решает задачу:

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

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

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

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

Orthogonal matching pursuit: метод

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