Введение в анализ данных

Лекция 2

Линейная регрессия

Ковалев Евгений

ekovalev@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2020

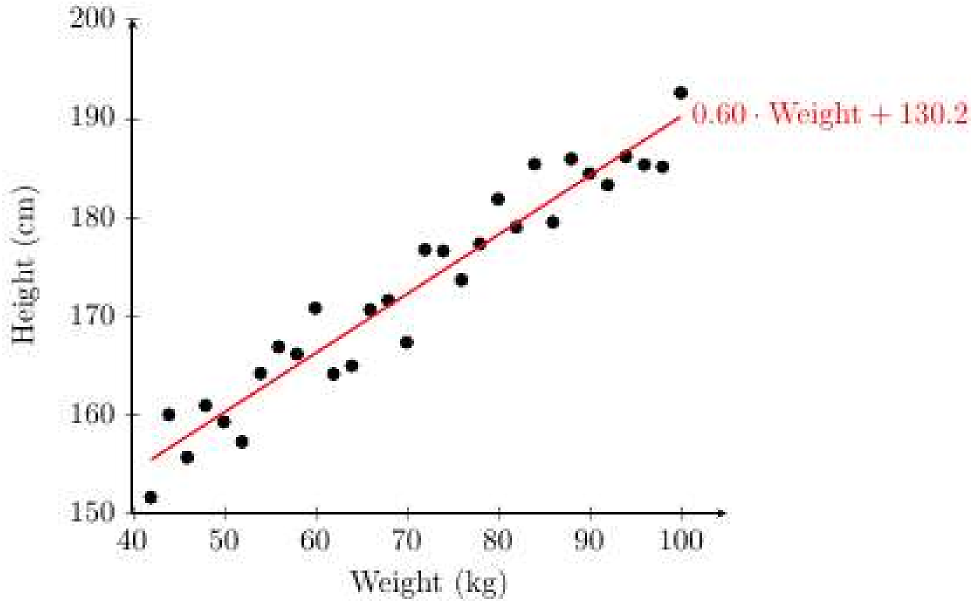
Напоминание

- $\mathbb{X}$ — пространство объектов, $\mathbb{Y}$ — пространство ответов
- $x = (x^1, \dots, x^d)$ — признаковое описание
- $X = (x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$ — обучающая выборка
- $a(x)$ — алгоритм, модель
- $L(a, X)$ — функция потерь для алгоритма a на выборке X
- Обучение: $a(x) = \arg\min_{a \in \mathcal{A}} L(a, X)$

Типы ответов

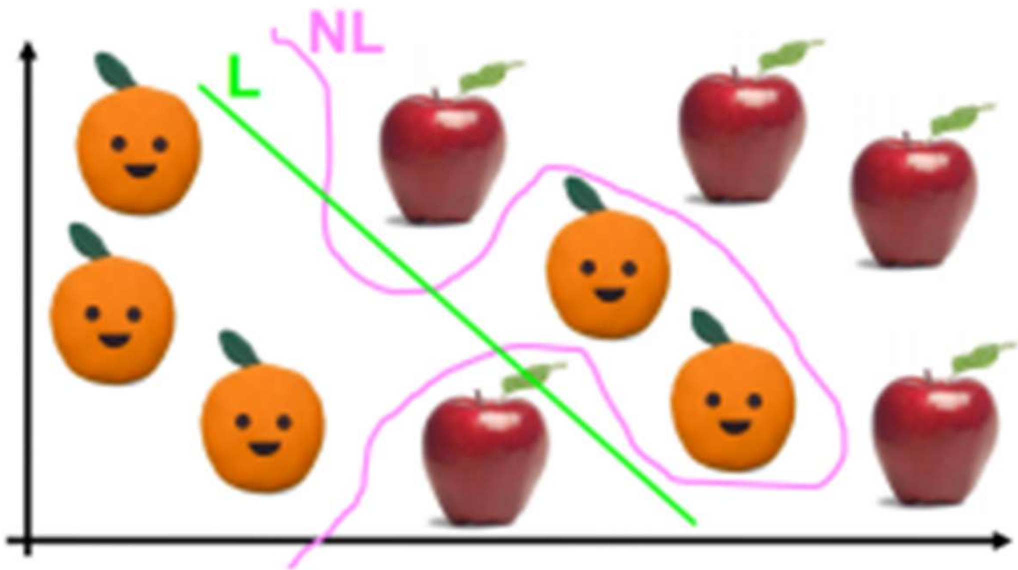
Регрессия

- Вещественные ответы: $\mathbb{Y} = \mathbb{R}$
- Пример: предсказание роста по весу



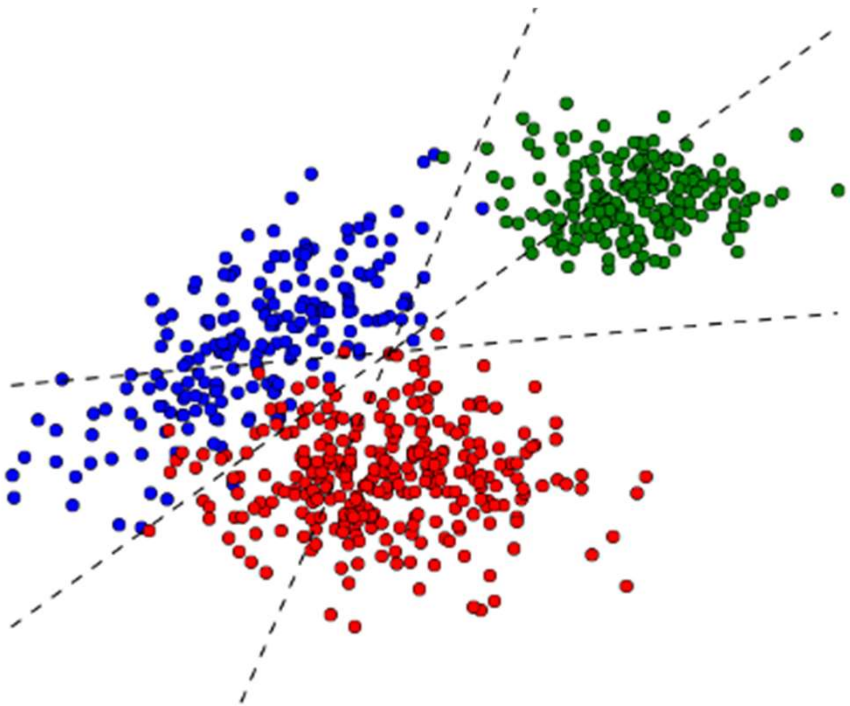
Классификация

- Конечное число ответов: $|\mathbb{Y}| < \infty$
- Бинарная классификация: $\mathbb{Y} = \{-1, +1\}$



Классификация

- Многоклассовая классификация: $\mathbb{Y} = \{1, 2, \dots, K\}$



Классификация

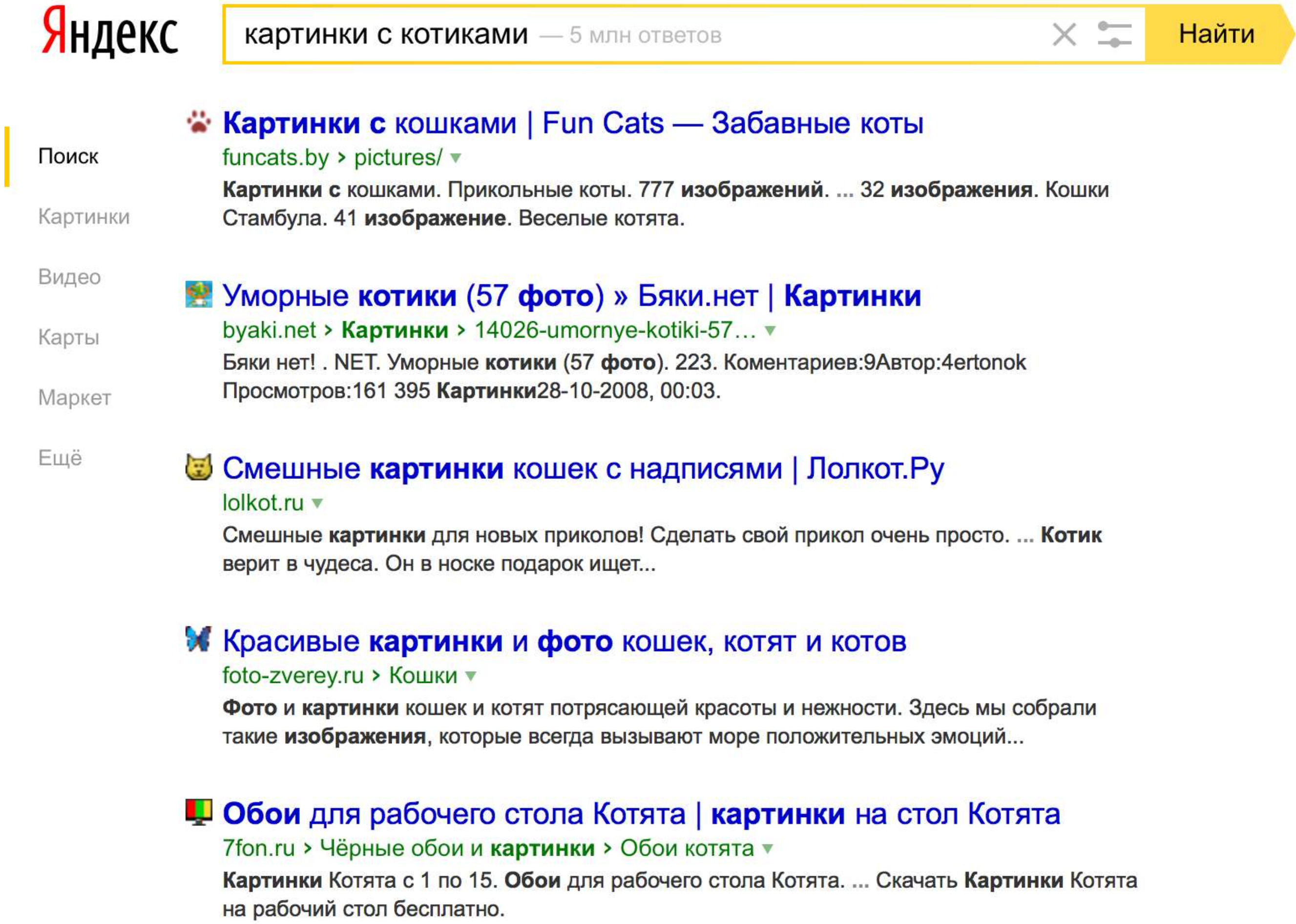
- Классификация с пересекающимися классами: $\mathbb{Y} = \{0, 1\}^K$
  - (multi-label classification)
- Ответ — набор из K нулей и единиц
- i-й элемент ответа — принадлежит ли объект i-му классу

- Какие темы присутствуют в статье?
- (математика, биология, экономика)

Ранжирование

- Набор документов $d_1, \ldots, d_n$
- Запрос q
- Задача: отсортировать документы по *релевантности* запросу
- $a(q, d)$ — оценка релевантности

Ранжирование



Кластеризация

- $\mathbb{Y}$ — отсутствует
- Нужно найти группы похожих объектов
- Сколько таких групп?
- Как измерить качество?

- Пример: сегментация пользователей мобильного оператора

Типы признаков

Типы признаков

- D_j — множество значений признака

Бинарные признаки

- $D_j = \{0, 1\}$
- Доход клиента выше среднего по городу?
- Цвет фрукта — зеленый?

Вещественные признаки

- $D_j = \mathbb{R}$
- Возраст
- Площадь квартиры
- Количество звонков в колл-центр

Категориальные признаки

- D_j — неупорядоченное множество
- Цвет глаз
- Город
- Образование (может быть упорядоченным)

- Нуждаются в обработке

Порядковые признаки

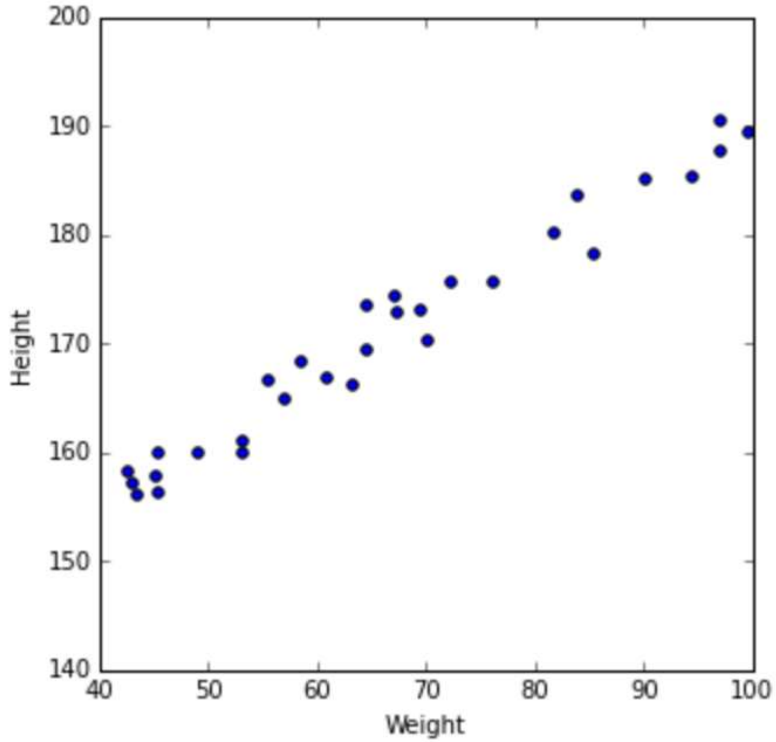
- D_j — упорядоченное множество
- Воинское звание
- Роль в фильме (первого плана, второго плана, массовка)
- Тип населенного пункта

Другие типы данных

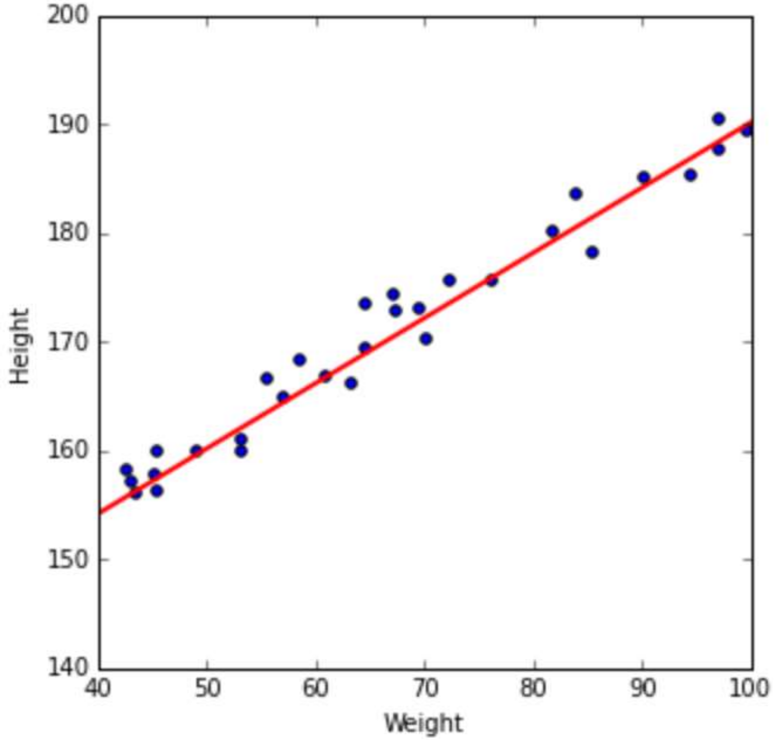
- Тексты
- Изображения
- Видео
- Звук
- Временные ряды
- Графы

Линейная регрессия

Парная регрессия



Парная регрессия



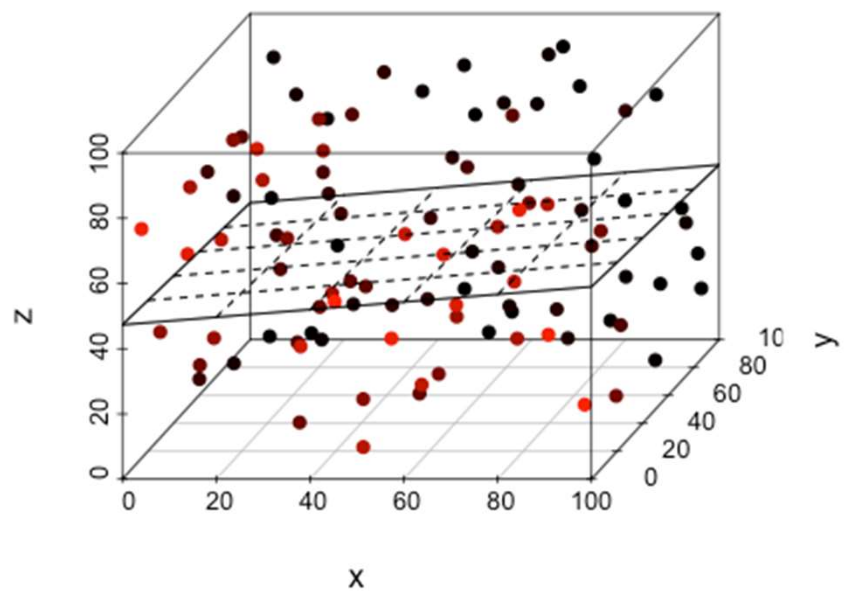
Парная регрессия

- Простейший случай: один признак
- Модель: $a(x) = w_1\, x + w_0$
- Два параметра: w_1 и w_0
- w_1 — тангенс угла наклона
- w_0 — где прямая пересекает ось ординат

Два признака

- Чуть более сложный случай: два признака
- Модель: $a(x) = w_0 + w_1\, x_1 + w_2 x_2$
- Три параметра

Два признака



Много признаков

- Общий случай: d признаков
- Модель

$$a(x) = w_0 + w_1 x_1 + \cdots + w_d x_d$$

- Количество параметров: $d + 1$

Много признаков

- Общий случай: d признаков
- Модель

$$a(x) = w_0 + w_1 x_1 + \cdots + w_d x_d$$

Веса/коэффициенты

Свободный коэффициент/сдвиг/bias

- Количество параметров: $d + 1$

Много признаков

$$a(x) = w_0 + w_1 x_1 + \dots + w_d x_d =$$
$$= w_0 + \langle w, x \rangle$$

- Будем считать, что есть признак, всегда равный единице:

$$a(x) = w_1 x_1 + \dots + w_d x_d =$$
$$= w_1 * 1 + w_2 x_2 + \dots + w_d x_d =$$
$$= \langle w, x \rangle$$

Применимость линейной регрессии

Модель линейной регрессии

$$a(x) = w_1 x_1 + \cdots + w_d x_d = \langle w, x \rangle$$

- Нет гарантий, что целевая переменная именно так зависит от признаков
- Надо формировать признаки так, чтобы модель подходила

Предсказание стоимости квартиры

- Признаки: площадь, район, расстояние до метро
- Целевая переменная: рыночная стоимость квартиры
- Линейная модель:

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$
$$+ w_2 * (\text{район})$$
$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$
$$+ w_2 * (\text{район})$$
$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$
$$+ w_2 * (\text{район})$$
$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$

- За каждый квадратный метр добавляем w_1 к прогнозу

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$
$$+ w_2 * (\text{район})$$
$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$

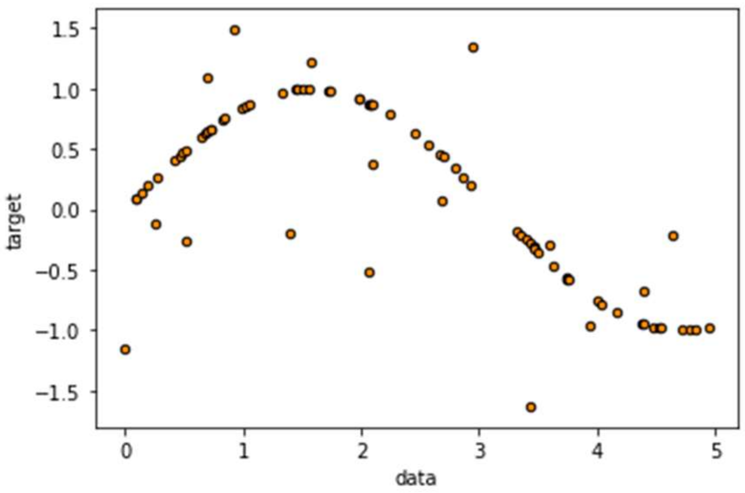
- Что-то странное

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$

$$+ w_2 * (\text{район})$$

$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$



Кодирование категориальных признаков

- Значения признака «район»: $U = \{u_1, \dots, u_m\}$
- Новые признаки вместо x_j: $[x_j = u_1], \dots, [x_j = u_m]$
- One-hot кодирование

Кодирование категориальных признаков

Район
ЦАО
ЮАО
ЦАО
САО
ЮАО

ЦАО	**ЮАО**	**САО**
1	0	0
0	1	0
1	0	0
0	0	1
0	1	0

Кодирование категориальных признаков

Район
ЦАО
ЮАО
ЦАО
САО
ЮАО

→

ЦАО	ЮАО	САО
1	0	0
0	1	0
1	0	0
0	0	1
0	1	0

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$

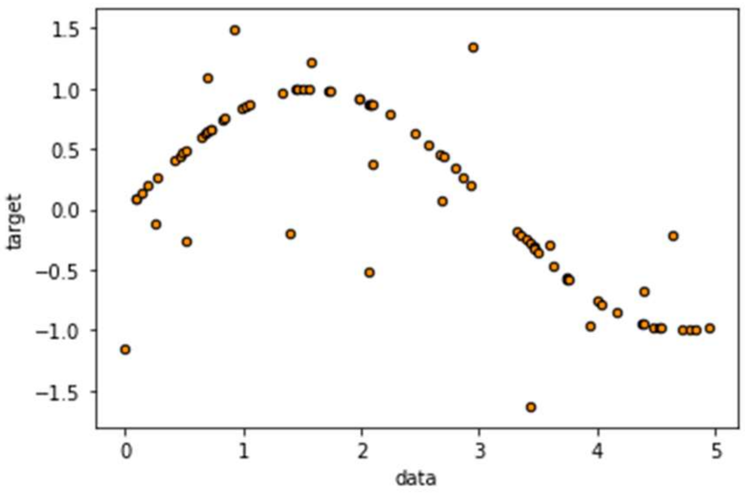
$$+ w_2 * (\text{квартира в ЦАО?})$$

$$+ w_3 * (\text{квартира в ЮАО?})$$

$$+ w_4 * (\text{квартира в САО?})$$

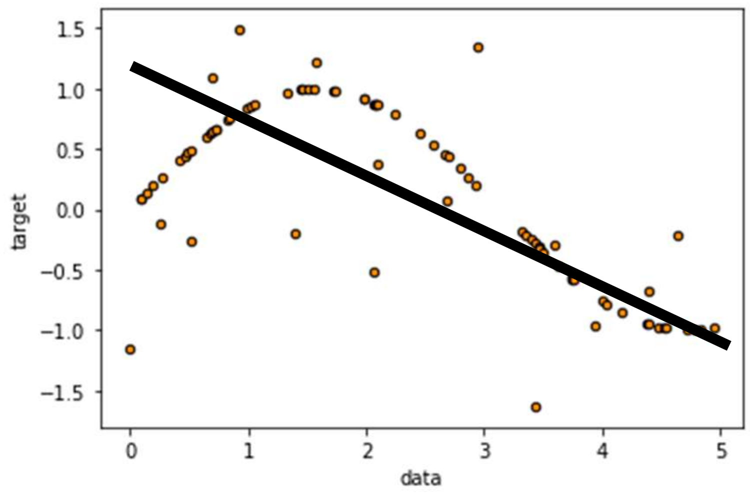
Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$
$$+ w_2 * (\text{район})$$
$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$



Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$
$$+ w_2 * (\text{район})$$
$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$

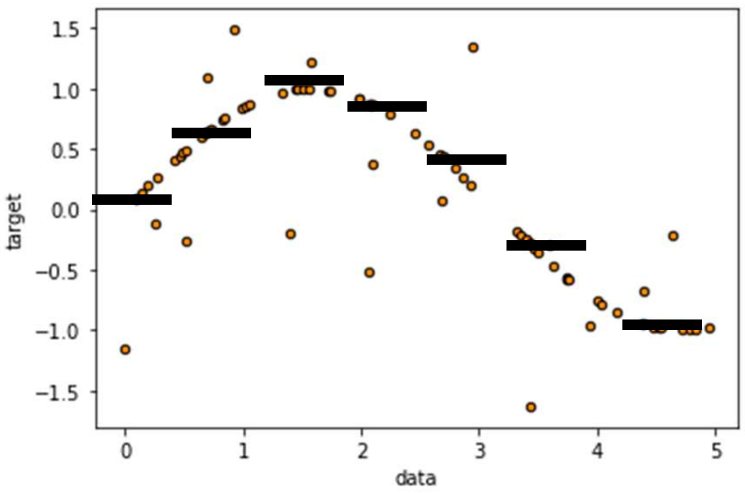


Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$

$$+ w_2 * (\text{район})$$

$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$

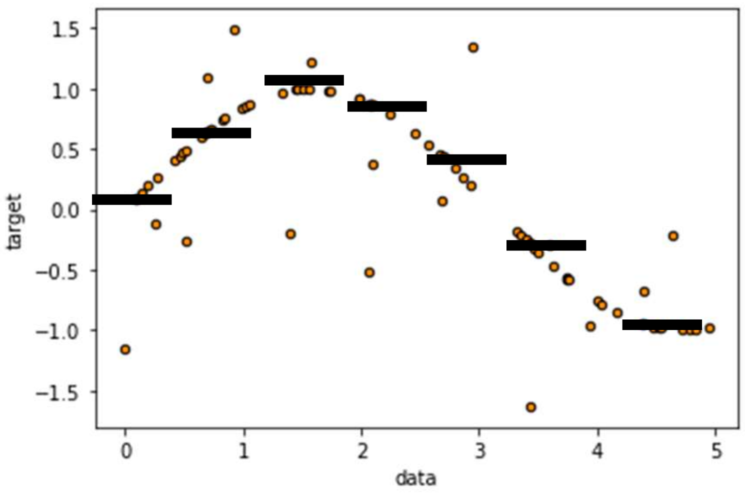


Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$

$$+ w_2 * (\text{район})$$

$$+ w_3 * [t_0 \le x_3 < t_1] + \cdots + w_{3+n}[t_{n-1} \le x_3 < t_n]$$



Линейные модели

- Модель линейной регрессии хороша, если признаки сделаны специально под неё
- Пример: one-hot кодирование категориальных признаков или бинаризация числовых признаков

Измерение ошибки модели

Функция потерь для регрессии

- Частый выбор — квадратичная функция потерь

$$L(y, a) = (a - y)^2$$

- Функционал ошибки — среднеквадратичная ошибка (mean squared error, MSE)

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2$$

Функция потерь для регрессии

- Ещё один вариант — средняя абсолютная ошибка (mean absolute error, MAE)

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} |a(x_i) - y_i|$$

- Слабее штрафует за серьёзные отклонения от правильного ответа

Линейная регрессия в векторном виде

Модель линейной регрессии

$$a(x) = \langle w, x \rangle$$

- Среднеквадратичная ошибка и задача обучения:

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\langle w, x_i \rangle - y_i)^2 \to \min_w$$

Матрицы

- Матрица — таблица с числами
- Матрица «объекты-признаки»:

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{\ell \times d}$$

Матрицы

- Матрица — таблица с числами (для простоты)
- Матрица «объекты-признаки»:

$$
\begin{array}{r}
\\
\text{объект и его признаки} \\
\\
\\
\end{array}
\begin{pmatrix}
x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\
x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d}
\end{pmatrix}
$$

Матрицы

- Матрица — таблица с числами (для простоты)
- Матрица «объекты-признаки»:

$$\begin{pmatrix} x_{11} & \boxed{\begin{matrix} x_{12} \\ x_{22} \\ \vdots \\ x_{\ell 2} \end{matrix}} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix}$$

значения признака на всех объектах

Векторы

- Вектор размера d — тоже матрица

- Вектор-строка: $w = (w_1, \dots, w_d) \in \mathbb{R}^{1 \times d}$

- Вектор-столбец: $w = \begin{pmatrix} w_1 \\ \cdots \\ w_d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{d \times 1}$

Применение линейной модели

- $a(x) = \langle w, x \rangle = w_1 x_1 + \cdots + w_d x_d$
- Как применить модель к обучающей выборке?

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_d \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{d} w_i x_{1i} \\ \sum_{i=1}^{d} w_i x_{2i} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{d} w_i x_{\ell i} \end{pmatrix}$$

Матричное умножение

- Только для матриц $A \in \mathbb{R}^{m \times k}$ и $B \in \mathbb{R}^{k \times n}$
- Результат: $AB = C \in \mathbb{R}^{m \times n}$
- Правило:

$$c_{ij} = \sum_{p=1}^{k} a_{ip} b_{pj}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxed{1} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} \boxed{1 \quad 2} \\ 0 \quad 1 \\ 10 \quad 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & \boxed{\begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix}} & 0 \\ 0 & & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \boxed{0} & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \boxed{4} \\ & & \\ & & \end{pmatrix}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ \boxed{0 \quad 1} \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} \boxed{\begin{matrix}1\\0\end{matrix}} & \begin{matrix}0\\0\end{matrix} & \begin{matrix}0\\2\end{matrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 4 \\ \boxed{0} & & \\ & & \end{pmatrix}$$

Модель линейной регрессии

- Среднеквадратичная ошибка и задача обучения:

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}(\langle w, x_i\rangle - y_i)^2 \to \min_w$$

Вычисление ошибки

- Отклонения прогнозов от ответов:

$$Xw - y = \begin{pmatrix} \langle w, x_1 \rangle - y_1 \\ \vdots \\ \langle w, x_\ell \rangle - y_\ell \end{pmatrix}$$

Вычисление ошибки

- Евклидова норма:

$$\|z\| = \sqrt{\sum_{j=1}^{n} z_j^2}$$

$$\|z\|^2 = \sum_{j=1}^{n} z_j^2$$

Вычисление ошибки

- Отклонения прогнозов от ответов:

$$Xw - y = \begin{pmatrix} \langle w, x_1 \rangle - y_1 \\ \vdots \\ \langle w, x_\ell \rangle - y_\ell \end{pmatrix}$$

- Среднеквадратичная ошибка:

$$\frac{1}{\ell} \|Xw - y\|^2 = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\langle w, x_i \rangle - y_i)^2$$

Обучение линейной регрессии

$$\frac{1}{\ell}\|Xw - y\|^2 \to \min_w$$

Обобщающая способность

Обобщающая способность

Как готовиться к экзамену?

Заучить все примеры с занятий	Разобраться в предмете и усвоить алгоритмы решения задач

Обобщающая способность

Как готовиться к экзамену?

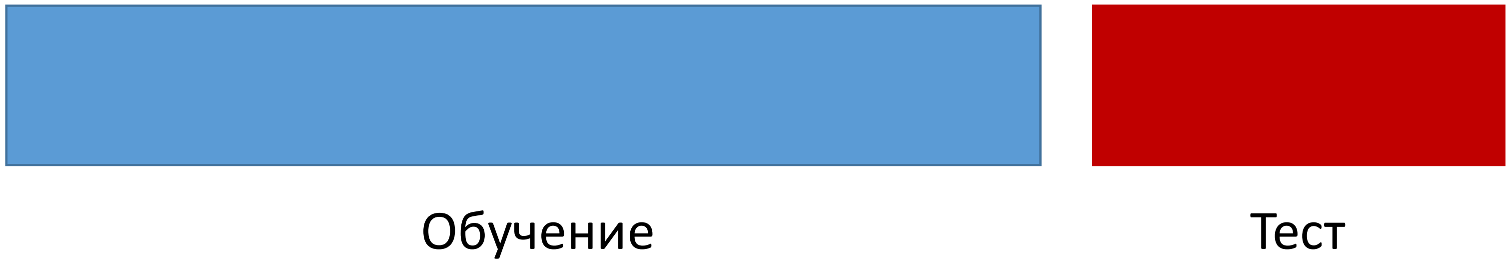
Заучить все примеры с занятий	Разобраться в предмете и усвоить алгоритмы решения задач
Переобучение (overfitting)	Обобщение (generalization)

Обобщающая способность

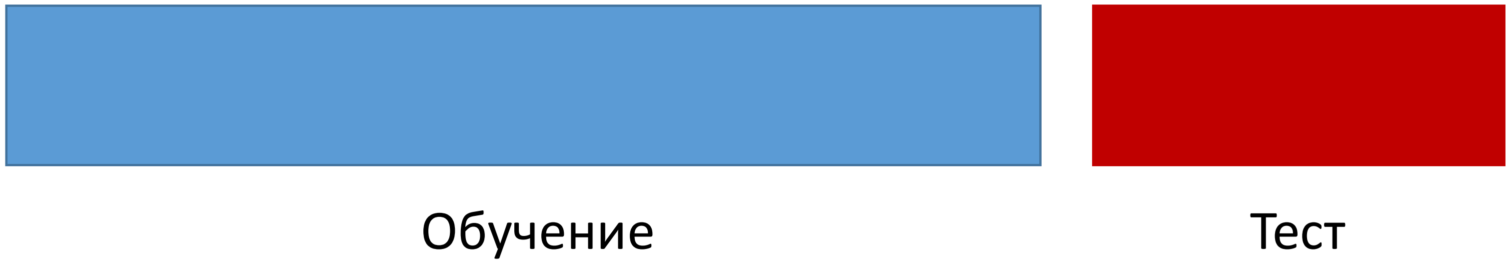
Как готовиться к экзамену?

Заучить все примеры с занятий	Разобраться в предмете и усвоить алгоритмы решения задач
Переобучение (overfitting)	Обобщение (generalization)
Хорошее качество на обучении Низкое качество на новых данных	Хорошее качество на обучении Хорошее качество на новых данных

Отложенная выборка

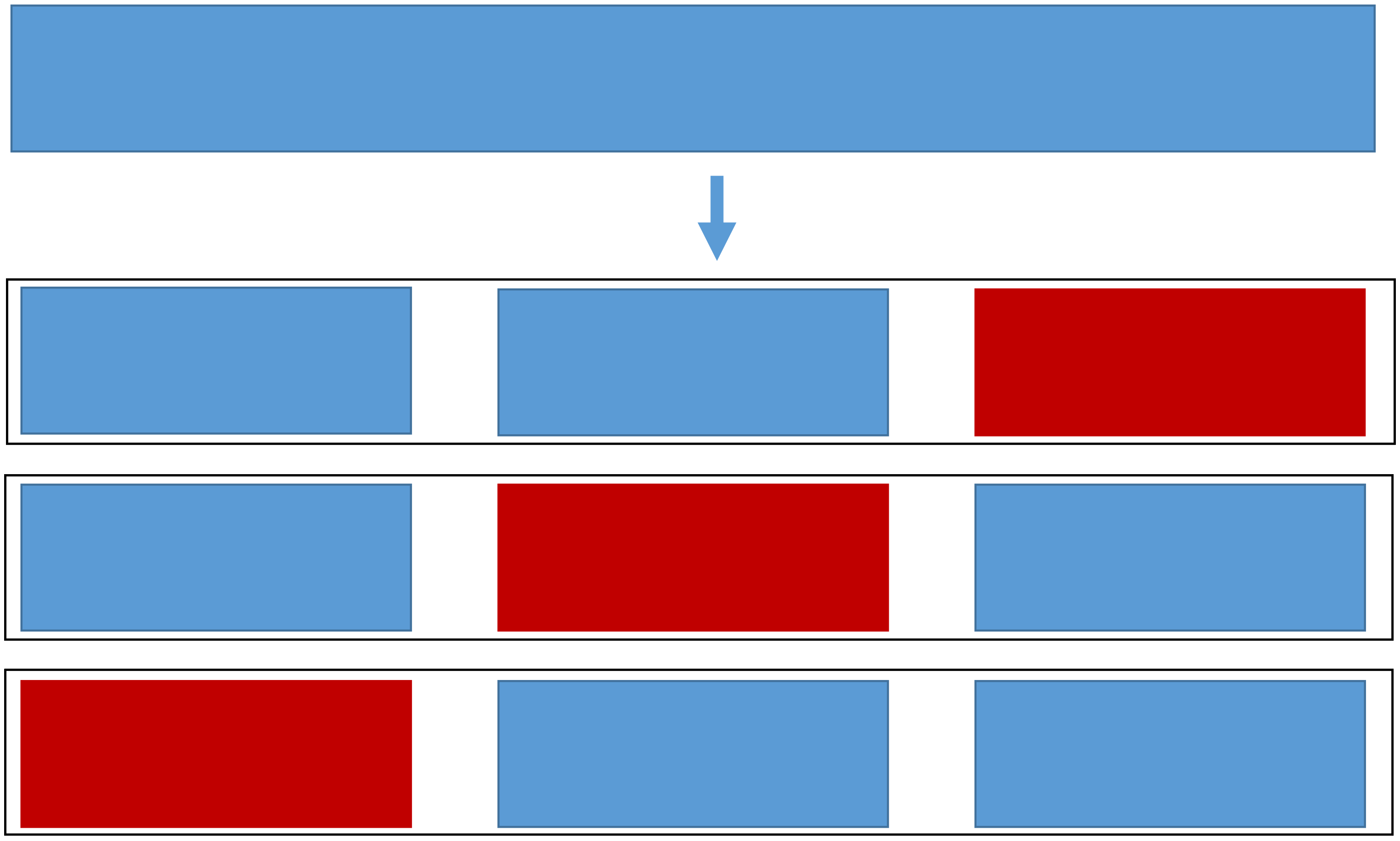


Отложенная выборка



- Слишком большое обучение — тестовая выборка нерепрезентативна
- Слишком большой тест — модель не сможет обучиться
- Обычно: 70/30, 80/20

Кросс-валидация



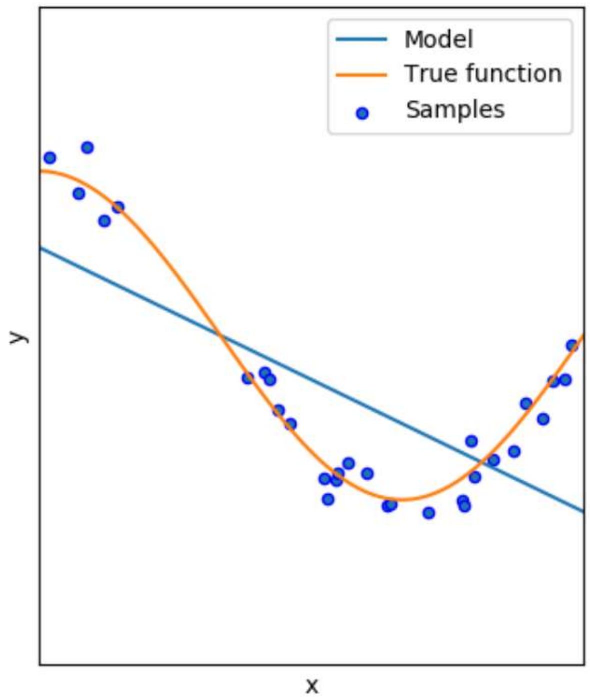
Кросс-валидация

- Надёжнее отложенной выборки, но медленнее
- Параметр — количество разбиений n (фолдов, folds)
- Хороший, но медленный вариант — $n = \ell$ (leave-one-out)
- Обычно: $n = 3$ или $n = 5$ или $n = 10$

Переобучение и регуляризация линейных моделей

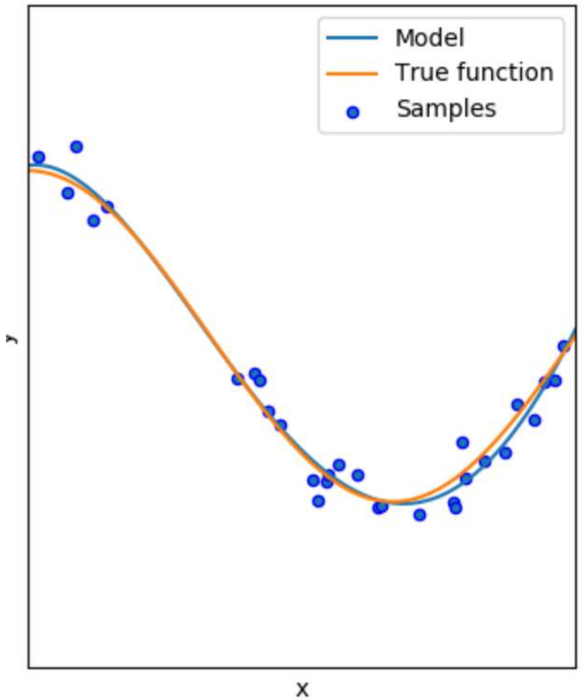
Нелинейная задача

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



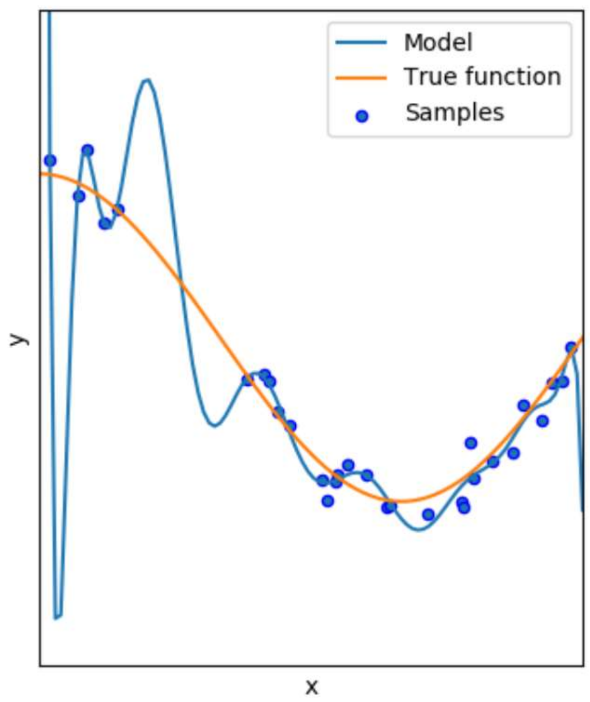
Нелинейная задача

$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4$$



Нелинейная задача

$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + \cdots + w_{15} x^{15}$$



Симптом переобучения

$$a(x) = 0.5 + 13458922x - 43983740x^2 + \cdots$$

- Большие коэффициенты — симптом переобучения
- Эмпирическое наблюдение

Симптом переобучения

- Большие коэффициенты в линейной модели — это плохо
- Пример: предсказание роста по весу

$$a(x) = 698x - 41714$$

- Изменение веса на 0.01 кг приведет к изменению роста на 7 см
- Не похоже не правильную зависимость

Регуляризация

- Будем штрафовать за большие веса!
- Пример функционала:

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\langle w, x_i \rangle - y_i)^2$$

- Регуляризатор:

$$\|w\|^2 = \sum_{j=1}^{d} w_j^2$$

Регуляризация

- Регуляризованный функционал

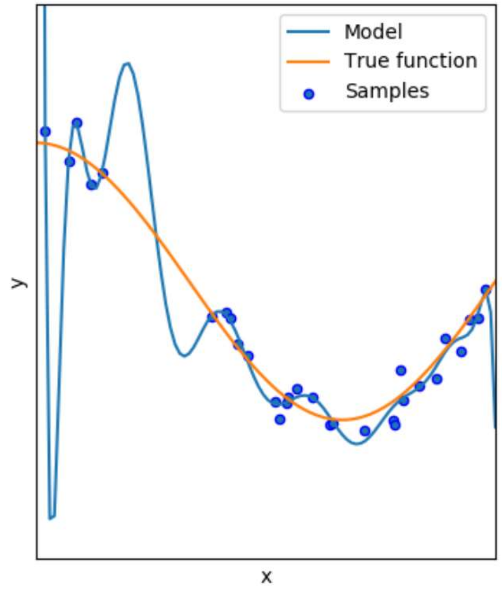
$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}(\langle w, x_i\rangle - y_i)^2 + \lambda\|w\|^2 \to \min_w$$

- λ — коэффициент регуляризации
- Ridge (гребневая регрессия)

Эффект регуляризации

$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + \dots + w_{15} x^{15}$$

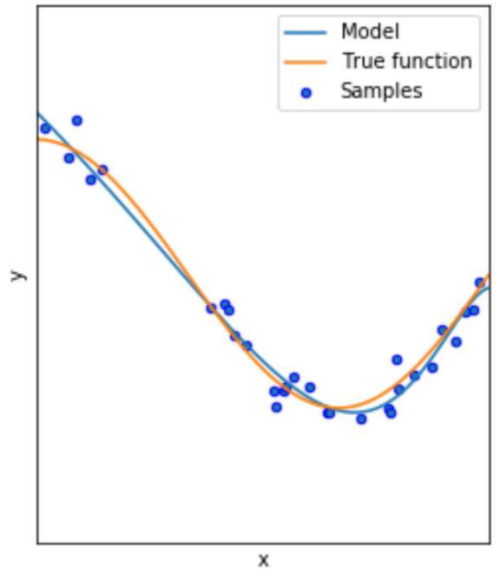
$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 \to \min_w$$



Эффект регуляризации

$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + \dots + w_{15} x^{15}$$

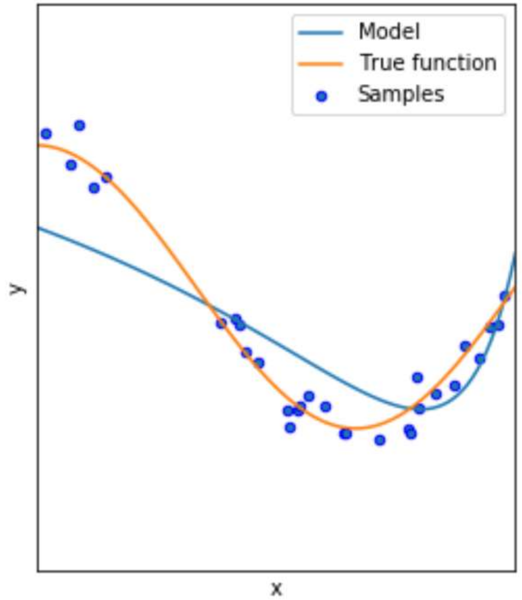
$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 + 0.01\, \|w\|^2 \to \min_w$$



Эффект регуляризации

$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + \dots + w_{15} x^{15}$$

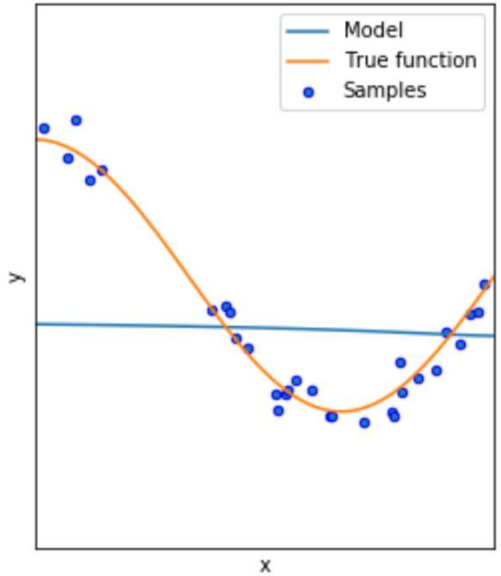
$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 + {\color{red}1}\, \|w\|^2 \to \min_w$$



Эффект регуляризации

$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + \cdots + w_{15} x^{15}$$

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 + 100 \; \|w\|^2 \to \min_w$$



Лассо

- Регуляризованный функционал

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}(\langle w, x_i\rangle - y_i)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{d}|w_j| \to \min_w$$

- LASSO (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator)
- Некоторые веса зануляются
- Приводит к отбору признаков

Регуляризаторы

- $\|z\|_2 = \sqrt{\sum_{j=1}^{d} z_j^2}$ — L_2-норма
- $\|z\|_1 = \sum_{j=1}^{d} |z_j|$ — L_1-норма

Гиперпараметры

- **Гиперпараметр** алгоритма — то, что задается вручную
  - Пример: коэффициент регуляризации
- **Параметр** алгоритма — то, что определяется моделью
  - Пример: веса регрессии
- Как подбирать гиперпараметры алгоритма?
  - Нельзя подбирать по обучающей выборке — это приведет к переобучению
  - Нужно использовать дополнительные данные (валидация)

Чуть больше терминов

- После подбора всех гиперпараметров стоит проверить на совсем новых данных, что модель работает

- Обучающая выборка — построение модели
- Валидационная выборка — подбор гиперпараметров модели
- Тестовая выборка — финальная оценка качества модели

Интерпретация линейных моделей

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = 100.000 * (\text{площадь})$$
$$+\, 500.000 * (\text{число магазинов рядом})$$
$$+\, 100 * (\text{средний доход жильцов дома})$$

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = 100.000 * (\text{площадь})$$
$$+ 500.000 * (\text{число магазинов рядом})$$
$$+ 100 * (\text{средний доход жильцов дома})$$

- Чем больше вес, тем важнее признак?

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = 100.000 * (\text{площадь в кв. м.})$$
$$+ 500.000 * (\text{число магазинов рядом})$$
$$+ 100 * (\text{средний доход жильцов дома})$$

- Чем больше вес, тем важнее признак?

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = 10 * (\text{площадь в кв. см.})$$
$$+ 500.000 * (\text{число магазинов рядом})$$
$$+ 100 * (\text{средний доход жильцов дома})$$

- Чем больше вес, тем важнее признак?

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = 100.000 * (\text{площадь в кв. м.})$$
$$+ 500.000 * (\text{число магазинов рядом})$$
$$+ \color{red}{100 * (\text{средний доход жильцов дома})}$$

- Чем больше вес, тем важнее признак?

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = 100.000 * (\text{площадь в кв. м.})$$
$$+ 500.000 * (\text{число магазинов рядом})$$
$$+ 100 * (\text{средний доход жильцов дома})$$

- Чем больше вес, тем важнее признак?
- Только если признаки масштабированы!

Масштабирование признаков

- Отмасштабируем j-й признак
- Вычисляем среднее и стандартное отклонение признака на обучающей выборке:

$$\mu_j = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} x_i^j$$

$$\sigma_j = \sqrt{\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left(x_i^j - \mu_j\right)^2}$$

Масштабирование признаков

- Вычтем из каждого значения признака среднее и поделим на стандартное отклонение:

$$x_i^j := \frac{x_i^j - \mu_j}{\sigma_j}$$

Регуляризация

- Если модель переобучается, то веса используются для запоминания обучающей выборки
- Правильнее масштабировать признаки и регуляризовать модель перед изучением весов

Пример

- 1000 объектов
- Два признака
- Первый принимает значения от 0 до 1
- Второй равен единице на 10 объектах и нулю на 990 объектах
- $y = x_1 + 2x_2$

Пример

```
[0.3175037 , 1.        ],
[0.59558502, 1.        ],
[0.48660609, 1.        ],
[0.69255463, 1.        ],
[0.81968981, 1.        ],
[0.48844247, 1.        ],
[0.13426702, 1.        ],
[0.850628  , 1.        ],
[0.57499033, 1.        ],
[0.73993748, 1.        ],
[0.70466465, 0.        ],
[0.96821177, 0.        ],
[0.29530732, 0.        ],
[0.70530677, 0.        ],
[0.36567633, 0.        ],
[0.39541072, 0.        ],
[0.23059464, 0.        ],
[0.34401018, 0.        ],
[0.94829675, 0.        ],
[0.29257085, 0.        ],
[0.24599061, 0.        ],
[0.58313798, 0.        ],
```

Пример

$$a(x) = x_1 + 2x_2$$

- Удаляем первый признак, получаем MSE = 0.08
- Удаляем второй признак, получаем MSE = 0.04

- Правильнее удалить признак и посмотреть, как сильно растёт ошибка без него