Занятие 2 Линейные методы регрессии. Часть 1.

Елена Кантонистова

elena.kantonistova@yandex.ru

ВШЭ, 2020

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Пример (напоминание):

Предположим, что мы хотим предсказать *стоимость дома* y по его *площади* (x_1) и *количеству комнат* (x_2).

Линейная модель для предсказания стоимости:

$$\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w_0} + \boldsymbol{w_1 x_1} + \boldsymbol{w_2 x_2},$$

где w_0, w_1, w_2 -

параметры модели (*веса*).

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

<u>Пример (напоминание):</u>

Предположим, что мы хотим предсказать *стоимость дома* y по его *площади* (x_1) и *количеству комнат* (x_2).

Линейная модель для предсказания стоимости:

$$\boldsymbol{a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2},$$

где w_0, w_1, w_2 -

параметры модели (*веса*).

Общий вид (линейная регрессия):

$$\boxed{\boldsymbol{a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n},}$$

где $x_1, \ldots, x_n$ - признаки объекта x.

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n$$

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$\boxed{a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n}$$

- сокращенная запись:

$$a(x) = w_0 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_j$$

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n$$

- сокращенная запись:

$$a(x) = w_0 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_j$$

- запись через скалярное произведение (с добавлением признака $x_0 = 1$):

$$a(x) = w_0 \cdot 1 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_j = \sum_{j=0}^{n} w_j x_j = (w, x)$$

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$\boxed{a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_n x_n}$$

- сокращенная запись:

$$a(x) = w_0 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_j$$

- запись через скалярное произведение (с добавлением признака $x_0 = 1$):

$$a(x) = w_0 \cdot 1 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_J = \sum_{j=0}^{n} w_j x_j = (w, x) \leftrightarrow \boxed{a(x) = (w, x)}$$

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$a(x) = w_0 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_j = (w, x)$$

Обучение линейной регрессии - минимизация среднеквадратичной ошибки:

$$\mathrm{Q}(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}(a(x_i) - y_i)^2 = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}((w, x_i) - y_i)^2 \to \min_{w}$$

(здесь l – количество объектов)

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ МНК

Задачу обучения линейной регрессии можно записать в матричной форме:

$$Q(a, X) = \frac{1}{l} \left|\left|Xw - y\right|\right|^2 \to \min_{w}$$

Аналитическое решение задачи МНК

Задачу обучения линейной регрессии можно записать в матричной форме:

$$Q(a, X) = \frac{1}{l} ||Xw - y||^2 \to \min_w$$

Существует точное (аналитическое) решение этой задачи:

$$\boxed{w = (X^T X)^{-1} X^T y}$$

Недостатки аналитической формулы

- Обращение матрицы – сложная операция ($O(N^3)$ от числа признаков)
- Матрица $X^T X$ может быть вырожденной или плохо обусловленной
- Если заменить среднеквадратичный функционал ошибки на другой, то скорее всего не найдем аналитическое решение

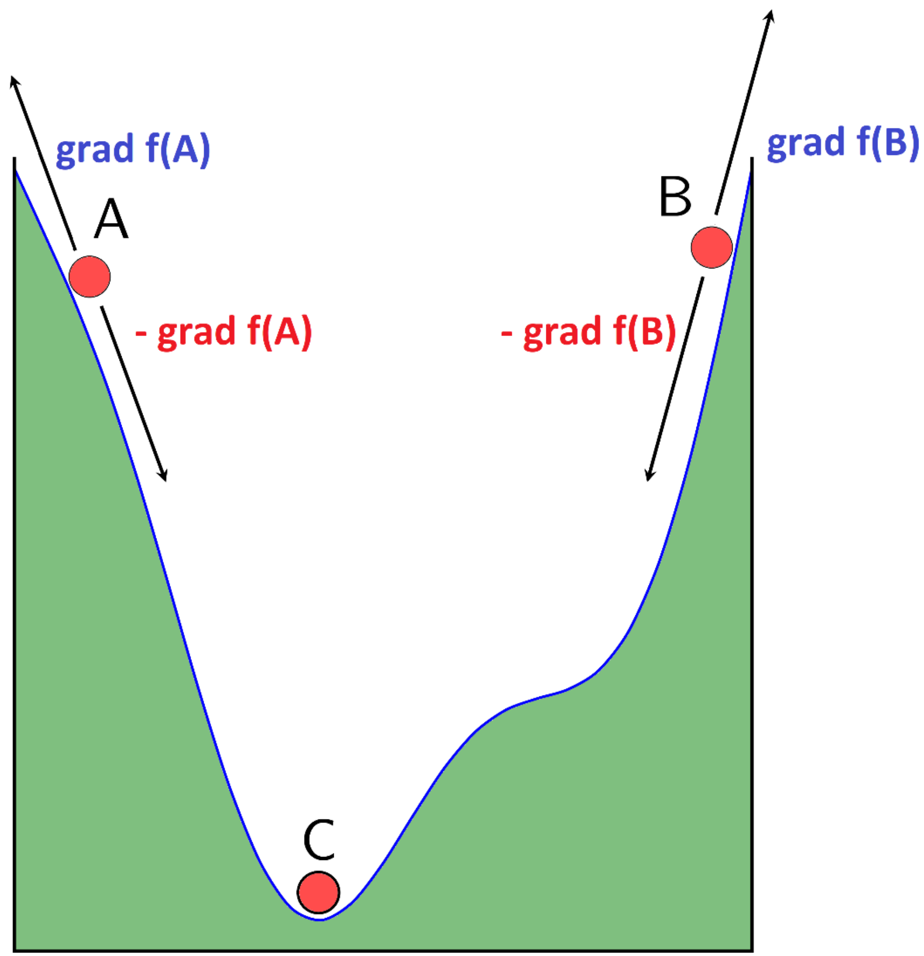
ТЕОРЕМА О ГРАДИЕНТЕ

Теорема. Градиент **–** это вектор, в направлении которого функция быстрее всего растёт.

Антиградиент (вектор, противоположный градиенту) – вектор, в направлении которого функция быстрее всего убывает.

ТЕОРЕМА О ГРАДИЕНТЕ

Аантиградиент (вектор, противоположный градиенту) – вектор, в направлении которого функция быстрее всего убывает.



МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

- Наша задача при обучении модели – найти такие веса $\boldsymbol{w}$, на которых достигается **минимум функции ошибки**.

Метод градиентного спуска

- Наша задача при обучении модели – найти такие веса $\boldsymbol{w}$, на которых достигается минимум функции ошибки.
- Грубо говоря, график среднеквадратичной ошибки – это парабола.

МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

- Наша задача при обучении модели – найти такие веса $\boldsymbol{w}$, на которых достигается минимум функции ошибки.
- Грубо говоря, график среднеквадратичной ошибки – это парабола.
- Идея метода градиентного спуска:

На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потерь!

То есть на каждом шаге движемся в направлении уменьшения ошибки.

Метод градиентного спуска

- Наша задача при обучении модели – найти такие веса $\boldsymbol{w}$, на которых достигается минимум функции ошибки.
- Грубо говоря, график среднеквадратичной ошибки – это парабола.
- Идея метода градиентного спуска:

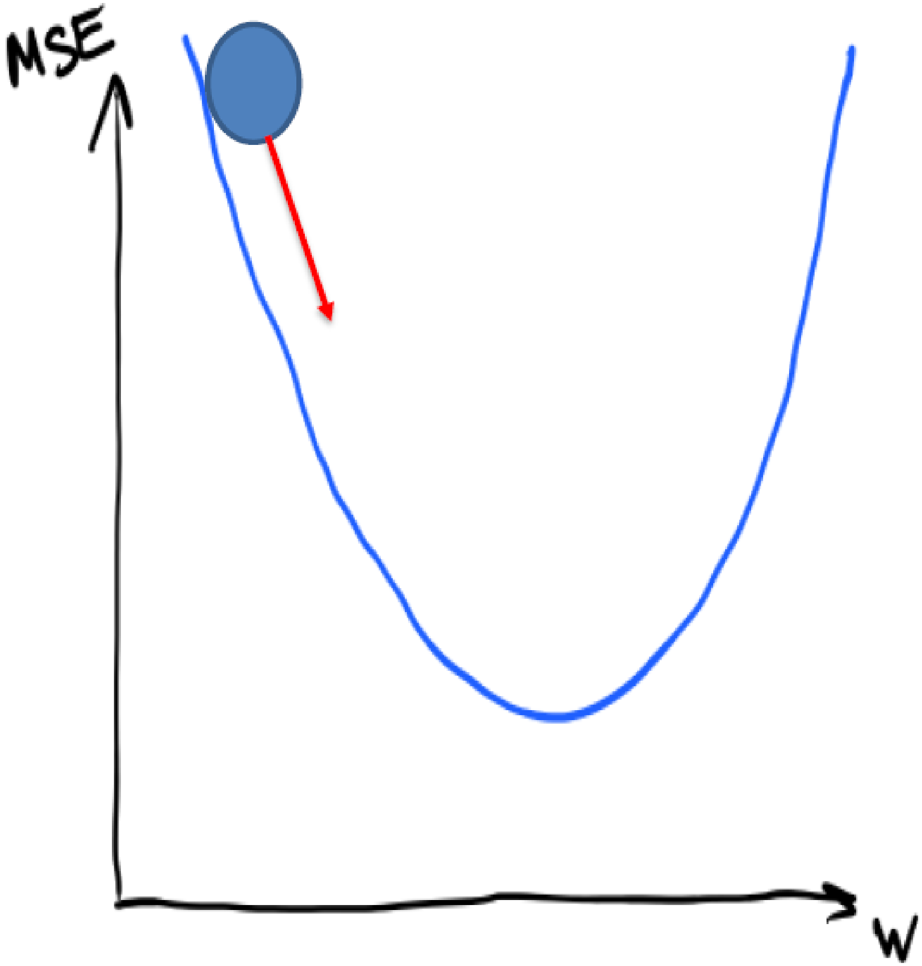
На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потерь!

То есть на каждом шаге движемся в направлении уменьшения ошибки.

Вектор градиента функции потерь обозначают $\boldsymbol{grad\ Q}$ *или* $\boldsymbol{\nabla Q}$.

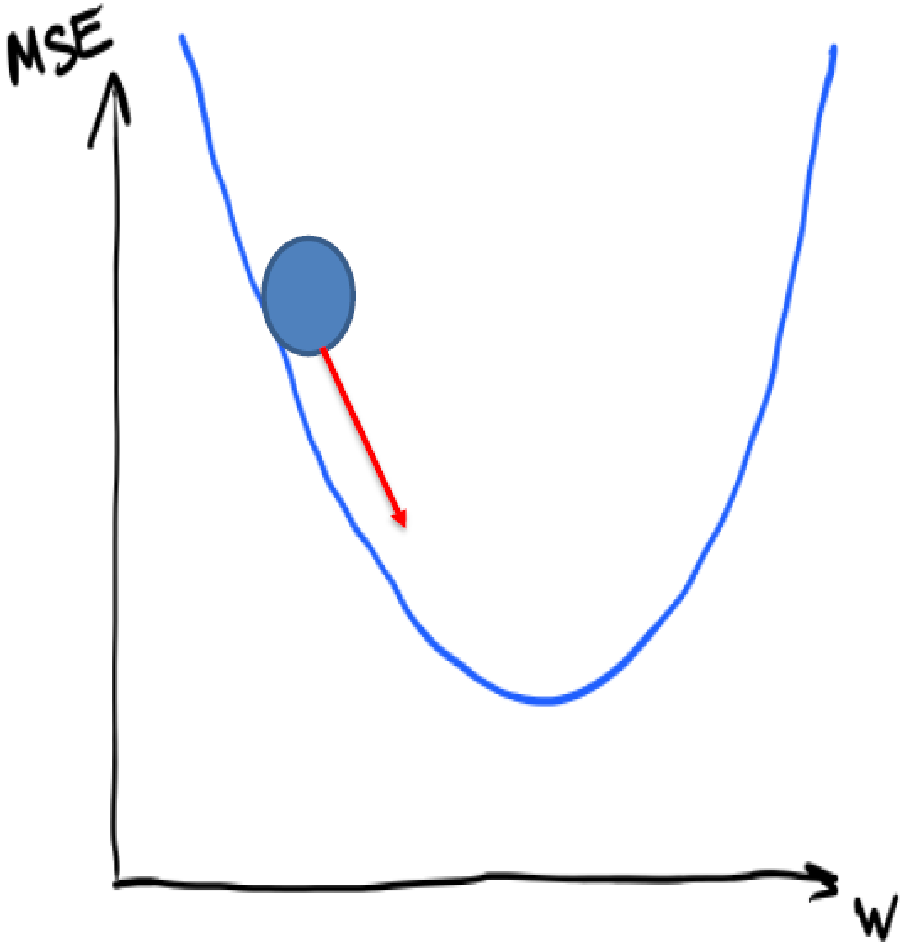
МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потерь!



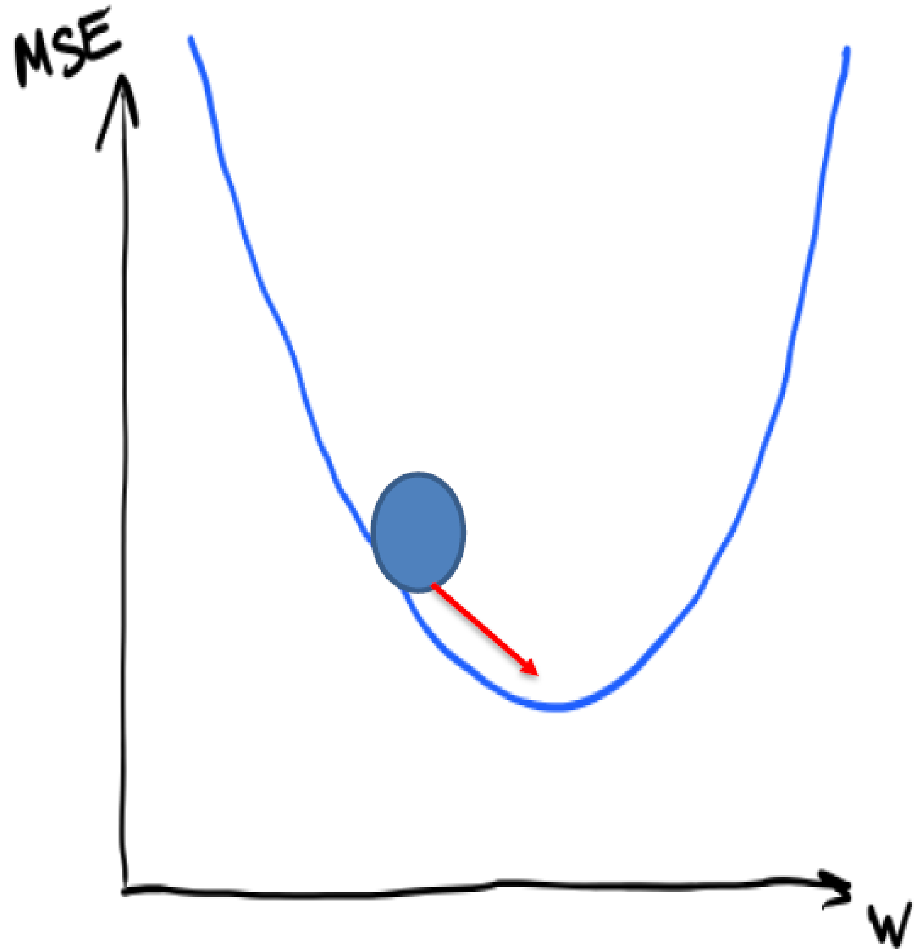
МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потерь!



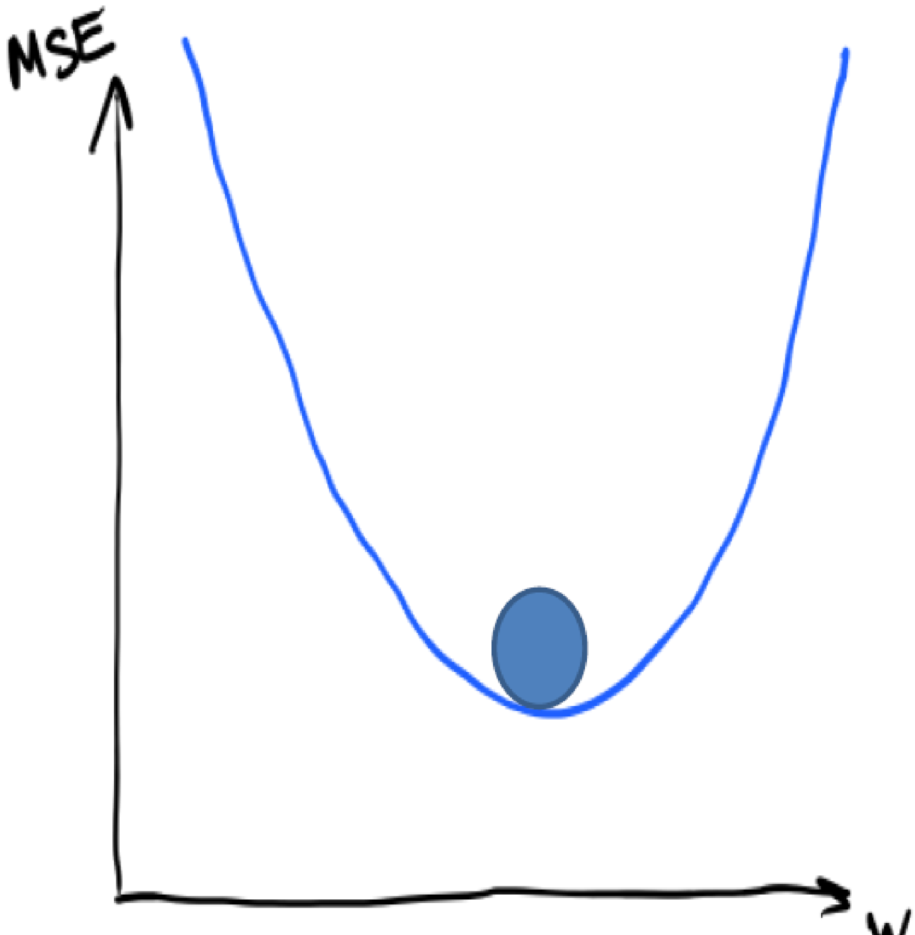
МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потерь!



МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потерь!



МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потерь!

Метод градиентного спуска:

- Инициализируем веса $w_0^{(0)}, w_1^{(0)}, w_2^{(0)}, \dots, w_n^{(0)}$.

Метод градиентного спуска

На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потерь!

Метод градиентного спуска:

- Инициализируем веса $w_0^{(0)}, w_1^{(0)}, w_2^{(0)}, \dots, w_n^{(0)}$.
- На каждом следующем шаге обновляем веса, сдвигаясь в направлении антиградиента функции потерь Q:

$$w_0^{(k)} = w_0^{(k-1)} - \nabla Q\left(w_0^{(k-1)}\right),$$

МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потерь!

Метод градиентного спуска:

- Инициализируем веса $w_0^{(0)}, w_1^{(0)}, w_2^{(0)}, \dots, w_n^{(0)}$.
- На каждом следующем шаге обновляем веса, сдвигаясь в направлении антиградиента функции потерь Q:

$$w_0^{(k)} = w_0^{(k-1)} - \nabla Q\left(w_0^{(k-1)}\right),$$

$$w_1^{(k)} = w_1^{(k-1)} - \nabla Q\left(w_1^{(k-1)}\right),$$

$$\dots$$

$$w_n^{(k)} = w_n^{(k-1)} - \nabla Q\left(w_n^{(k-1)}\right),$$

МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потери!

Метод градиентного спуска можно записать в векторном виде:

- Инициализируем веса $\boldsymbol{w}^{(0)}$.
- На каждом следующем шаге обновляем веса по формуле:

$$\boldsymbol{w}^{(k)} = \boldsymbol{w}^{(k-1)} - \nabla \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{w}^{(k-1)})$$

Метод градиентного спуска

На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потерь!

Метод градиентного спуска можно записать в векторном виде:

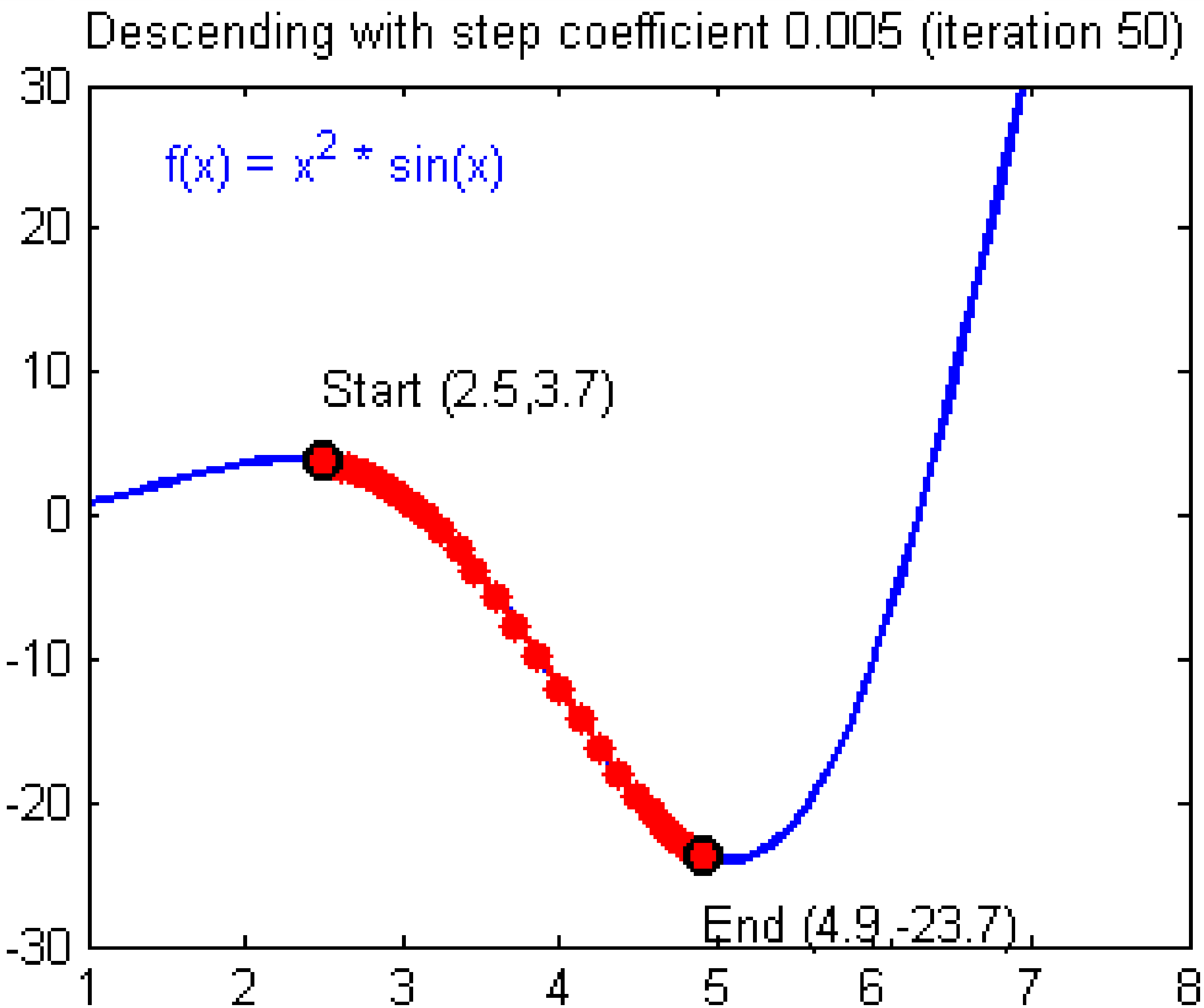
- Инициализируем веса $\boldsymbol{w}^{(0)}$.
- На каждом следующем шаге обновляем веса по формуле:

$$\boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k})} = \boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k}-\mathbf{1})} - \nabla \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k}-\mathbf{1})})$$

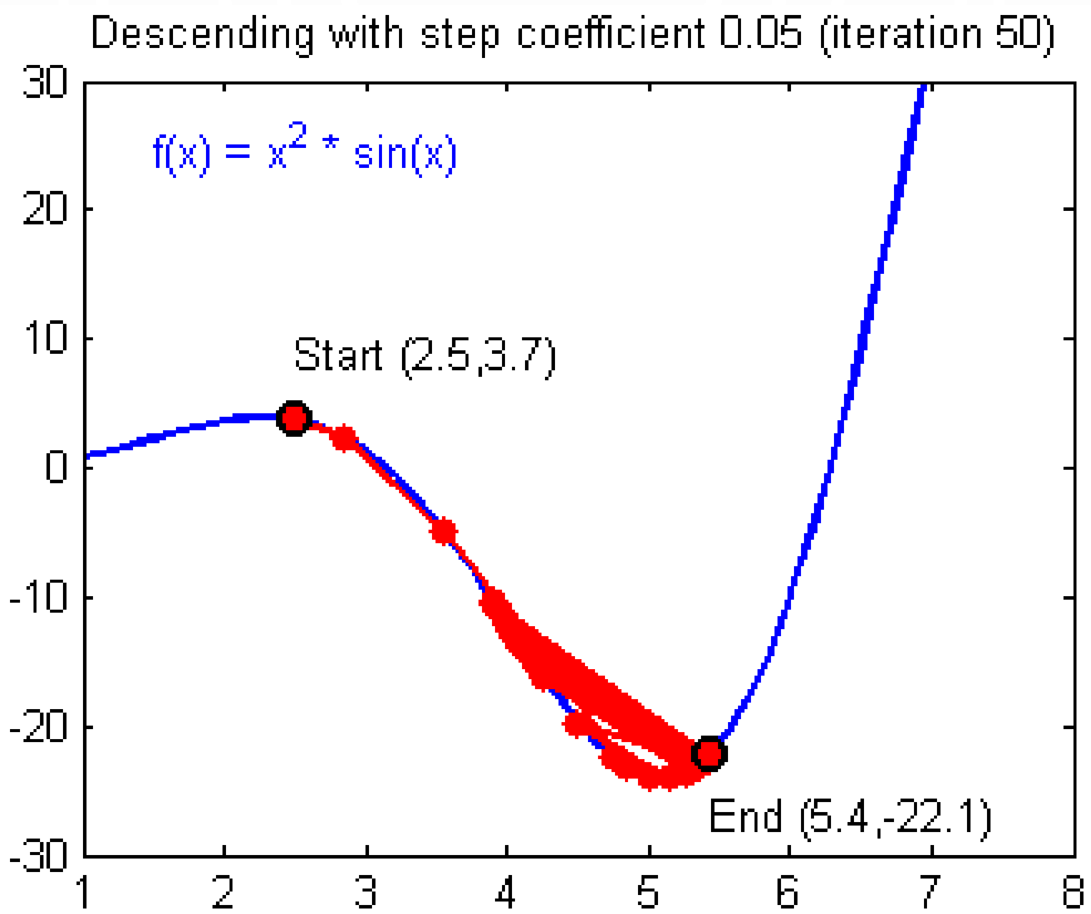
В формулу обычно добавляют параметр $\boldsymbol{\eta}$ – величина градиентного шага (learning rate). Он отвечает за скорость движения в сторону антиградиента:

$$\boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k})} = \boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k}-\mathbf{1})} - \boldsymbol{\eta} \nabla \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k}-\mathbf{1})})$$

ГРАДИЕНТНЫЙ СПУСК



ПРОБЛЕМА ВЫБОРА ГРАДИЕНТНОГО ШАГА



ВАРИАНТЫ ИНИЦИАЛИЗАЦИИ ВЕСОВ

- $w_j = 0, j = 1, \dots, n$
- Небольшие случайные значения:
$$w_j := random(-\varepsilon, \varepsilon)$$
- Обучение по небольшой случайной подвыборке объектов
- Мультистарт: многократный запуск из разных случайных начальных приближений и выбор лучшего решения

КРИТЕРИИ ОСТАНОВА

- $\left|\nabla Q\left(w^{(k-1)}\right)\right| < \varepsilon$

- $\Delta w = \left|w^{(k)} - w^{(k-1)}\right| < \varepsilon$

ГРАДИЕНТНЫЙ ШАГ

- $\eta_k = c$
- $\eta_k = \frac{1}{k}$
- $\eta_k = \lambda \left(\frac{s_0}{s_0 + k} \right)^p$, λ, s_0, p - параметры

ОЦЕНКА ОБОБЩАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ МОДЕЛИ И МЕТОДЫ БОРЬБЫ С ПЕРЕОБУЧЕНИЕМ

ОЦЕНКА ОБОБЩАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ МОДЕЛИ

Переобучение (overfitting) – явление, при котором качество модели на новых данных сильно хуже, чем качество на тренировочных данных.

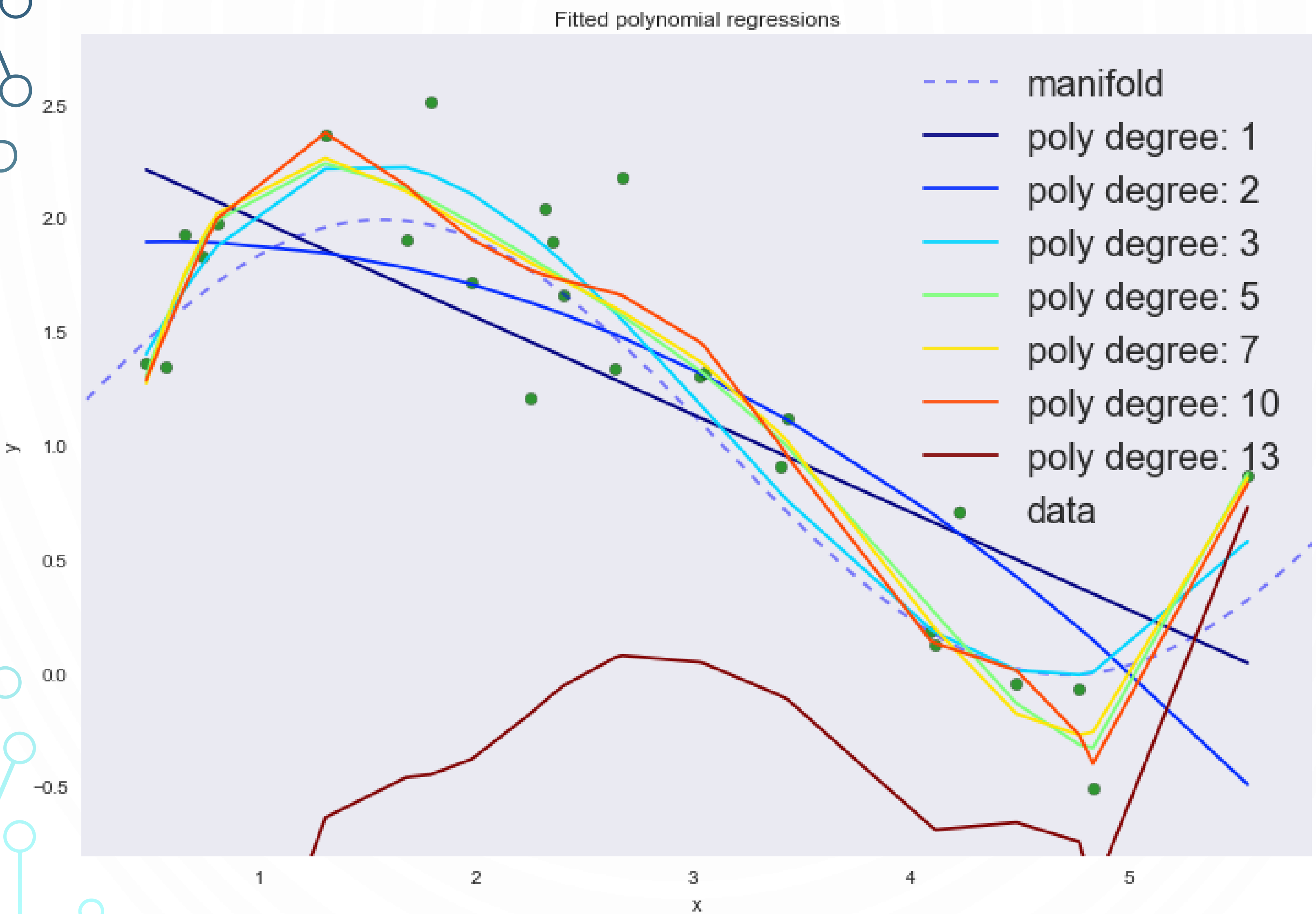
ПРИЗНАКИ ПЕРЕОБУЧЕННОЙ МОДЕЛИ

- Большая разница в качестве на тренировочных и тестовых данных (модель подгоняется под тренировочные данные и не может найти истинную зависимость)

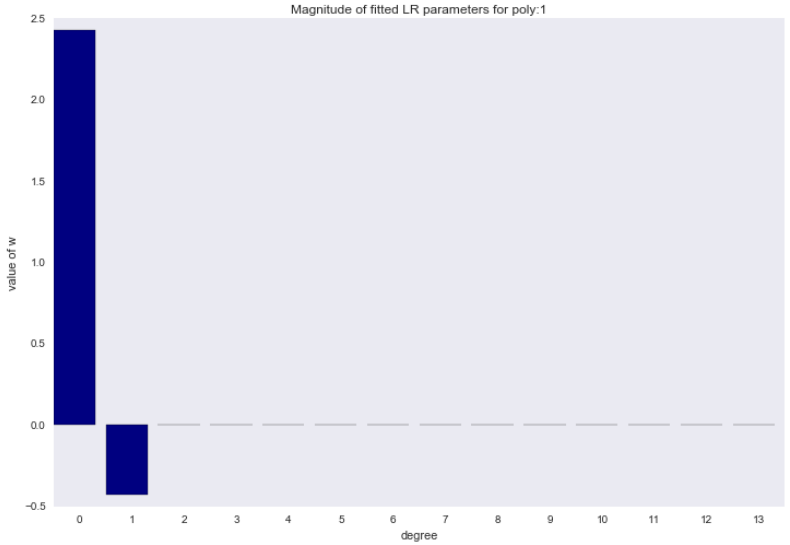
ПРИЗНАКИ ПЕРЕОБУЧЕННОЙ МОДЕЛИ

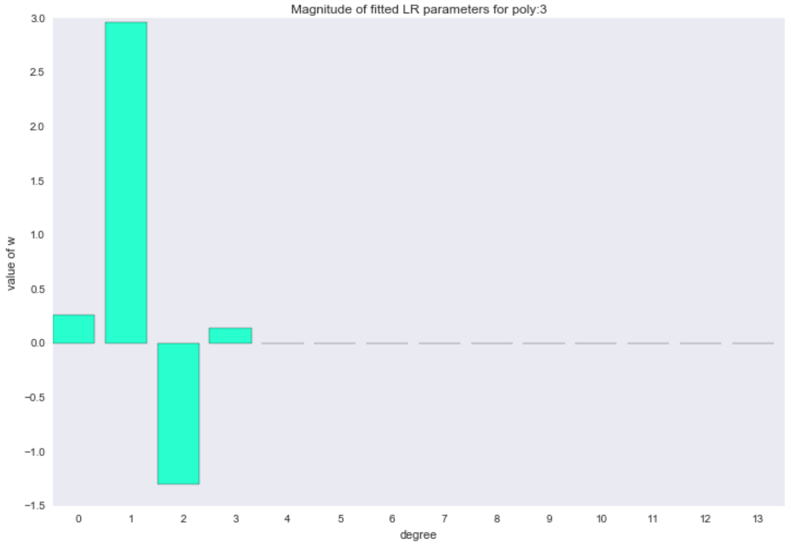
- Большая разница в качестве на тренировочных и тестовых данных (модель подгоняется под тренировочные данные и не может найти истинную зависимость)
- Большие значения параметров (весов) w_j модели

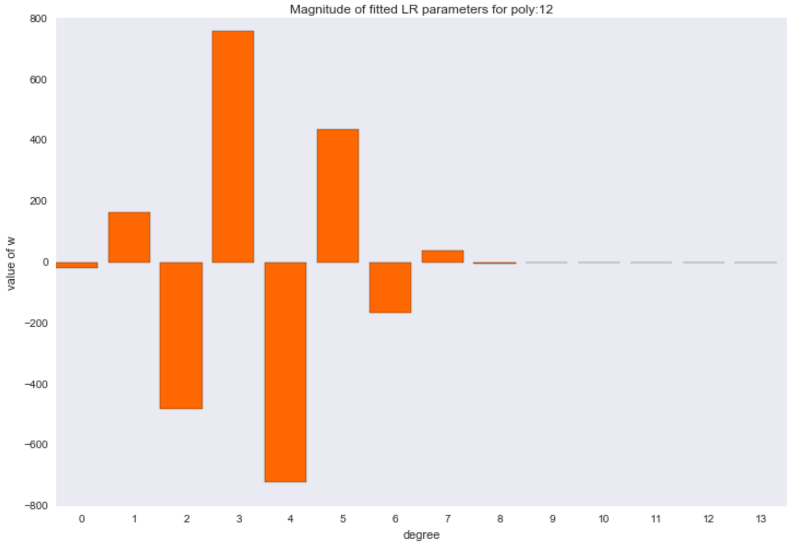
ПЕРЕОБУЧЕНИЕ: ПРИМЕР



ПЕРЕОБУЧЕНИЕ: ПРИМЕР







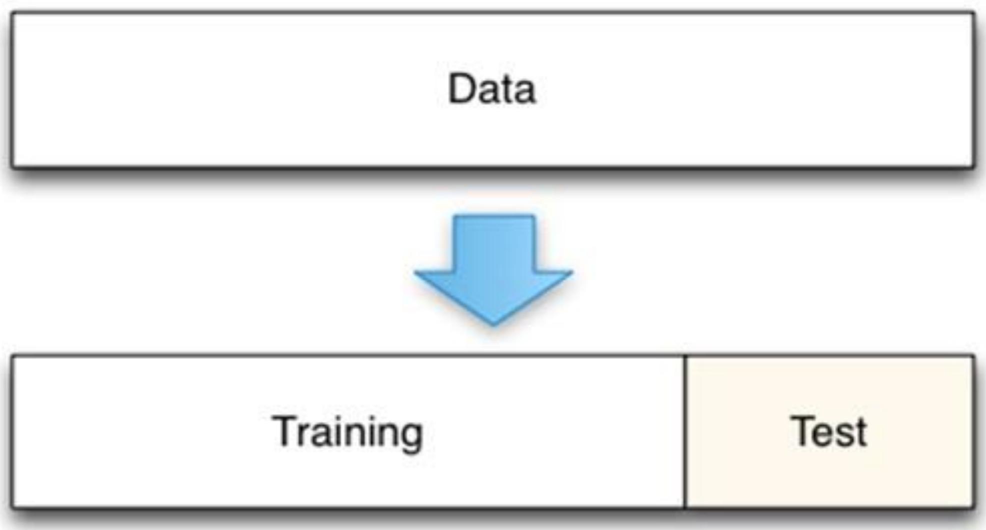
Оценивание качества модели

- Отложенная выборка
- Кросс-валидация

ОТЛОЖЕННАЯ ВЫБОРКА

Делим тренировочную выборку на две части:

- По первой части обучаем модель (train)
- По оставшимся данным – оцениваем качество (test)

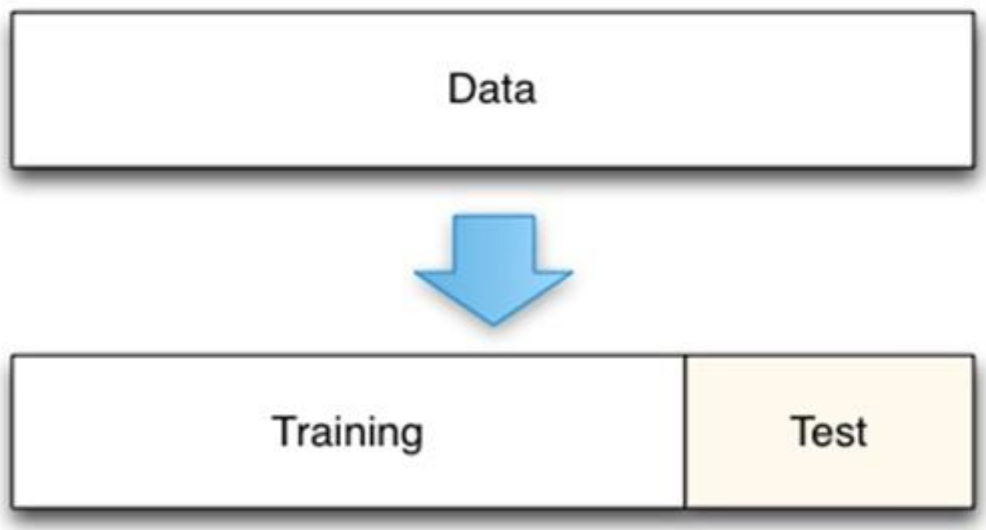


Какой недостаток?

ОТЛОЖЕННАЯ ВЫБОРКА

Делим тренировочную выборку на две части:

- По первой части обучаем модель (train)
- По оставшимся данным – оцениваем качество (test)

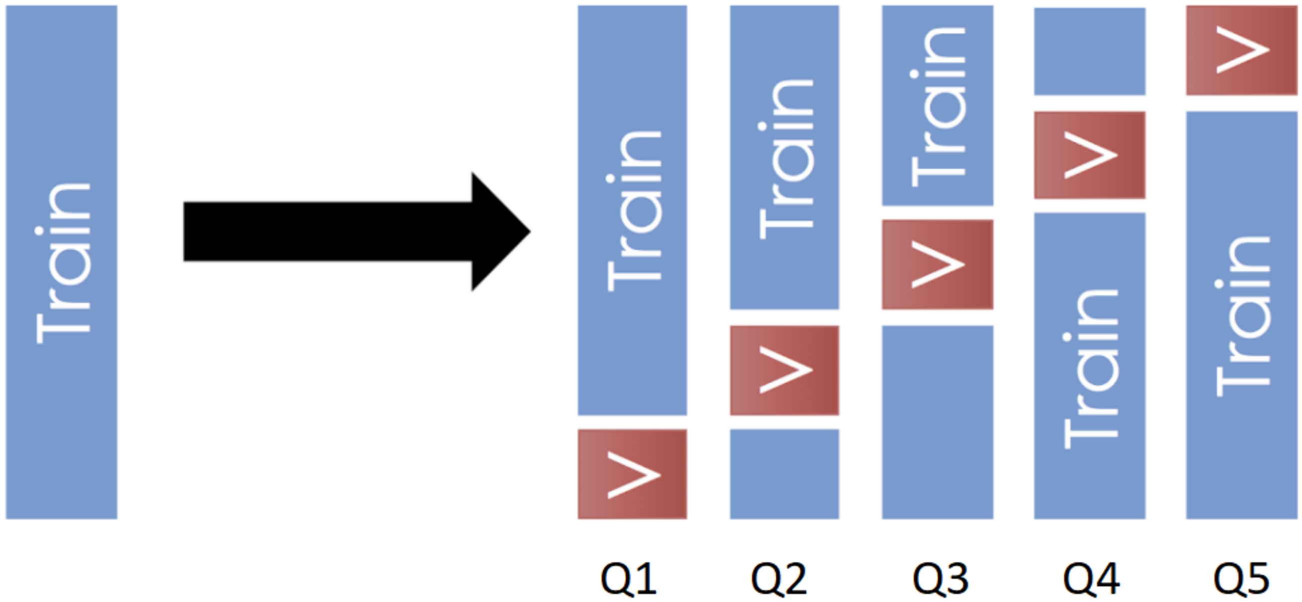


Недостаток:

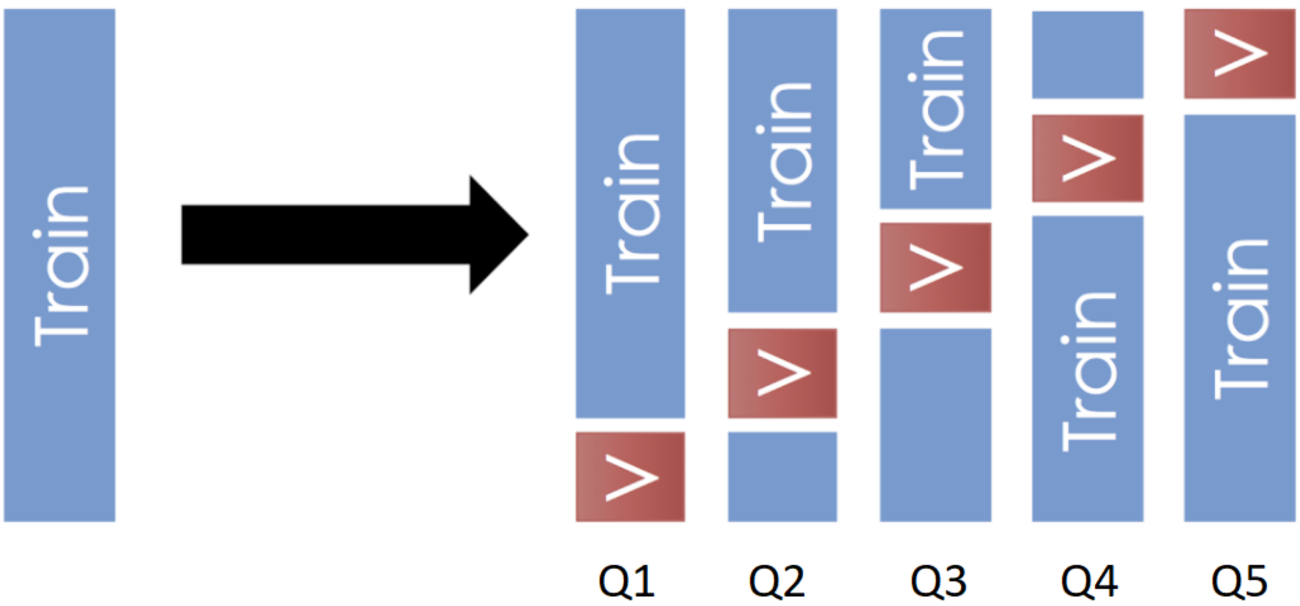
- Результат сильно зависит от разбиения на train и test

КРОСС-ВАЛИДАЦИЯ

- Разбиваем объекты на тренировку (train) и валидацию (validation) **несколько раз** (при разбиении k раз получаем k-fold кросс-валидацию)
- Для каждого разбиения вычисляем качество на валидационной части
- Усредняем полученные результаты



КРОСС-ВАЛИДАЦИЯ

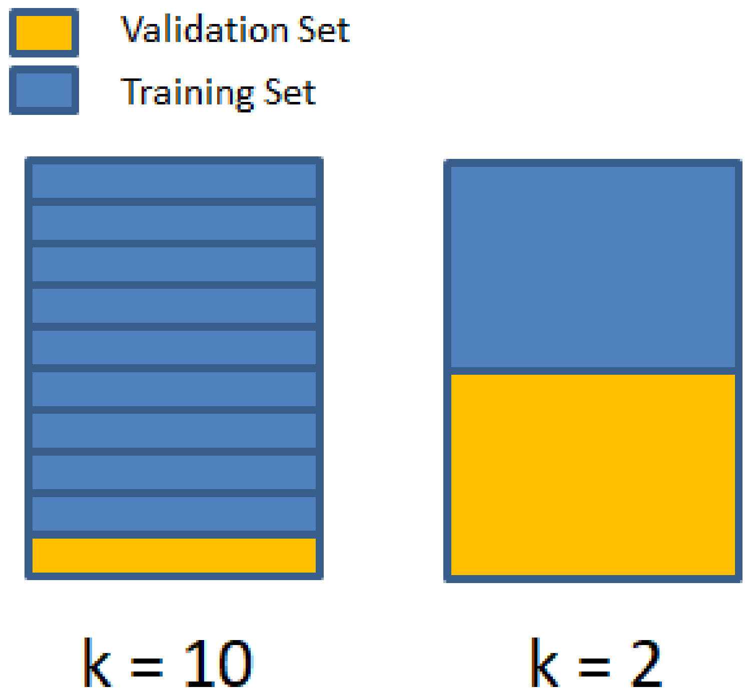


$$CV = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} Q_i$$

ВИДЫ КРОСС-ВАЛИДАЦИИ

- **k-fold** cross-validation – разбиваем данные на k блоков, каждый из которых по очереди становится контрольным (валидационным)
- **Complete** cross-validation – перебираем ВСЕ разбиения
- **Leave-one-out** cross-validation – каждый блок состоит из одного объекта (число блоков = числу объектов)

Выбор количества блоков в k-fold кросс-валидации



- Маленькое k – оценка может быть пессимистично занижена из-за маленького размера тренировочной части
- Большое k – оценка может быть неустойчивой из-за маленького размера валидационной части