Методы машинного обучения

Шорохов С.Г.

кафедра информационных технологий

Лекция 1. Линейная регрессия

Машинное обучение

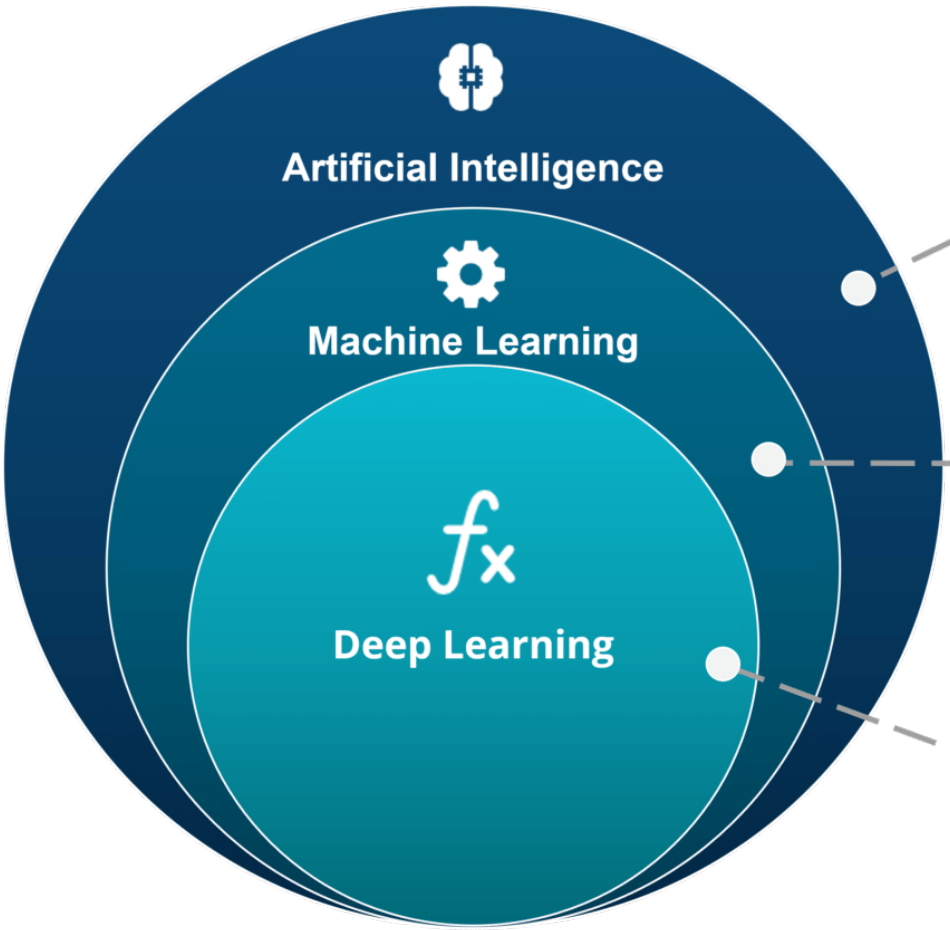
Термин «машинное обучение» (machine learning) был впервые введен А. Самюэлом из компании IBM (A.L. Samuel, Some Studies in Machine Learning Using the Game of Checkers // IBM Journal. July 1959. P. 210–229).

Основоположниками современной теории машинного обучения принято считать советских ученых В. Вапника и А. Червоненкиса:

- В.Н. Вапник, А.Я. Червоненкис. Теория распознавания образов. Статистические проблемы обучения. – М.: Наука, 1974.– 416 с.
- В.Н. Вапник. Восстановление зависимостей по эмпирическим данным. – М.: Наука, 1979. – 448 с.

В. Вапник и А. Червоненкис использовали термин «обучение машин распознаванию образов». В дальнейшем В. Вапник использовал термин «Statistical Learning Theory».

Искусственный интеллект и машинное обучение



ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ –
технологии, позволяющие компьютерным системам воспроизводить разумное поведение человека

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ –
набор технологий искусственного интеллекта, позволяющий улучшать качество работы компьютерных систем по мере накопления опыта

ГЛУБОКОЕ ОБУЧЕНИЕ –
совокупность методов машинного обучения, основанных на использовании различных архитектур многослойных нейронных сетей

AI VS ML (mem)

> *When you're fundraising, it's AI*
> *When you're hiring, it's ML*
> *When you're implementing, it's linear regression*
> *When you're debugging, it's printf()*
>
> *— Baron Schwartz (@xaprb) November 15, 2017*

Основная литература

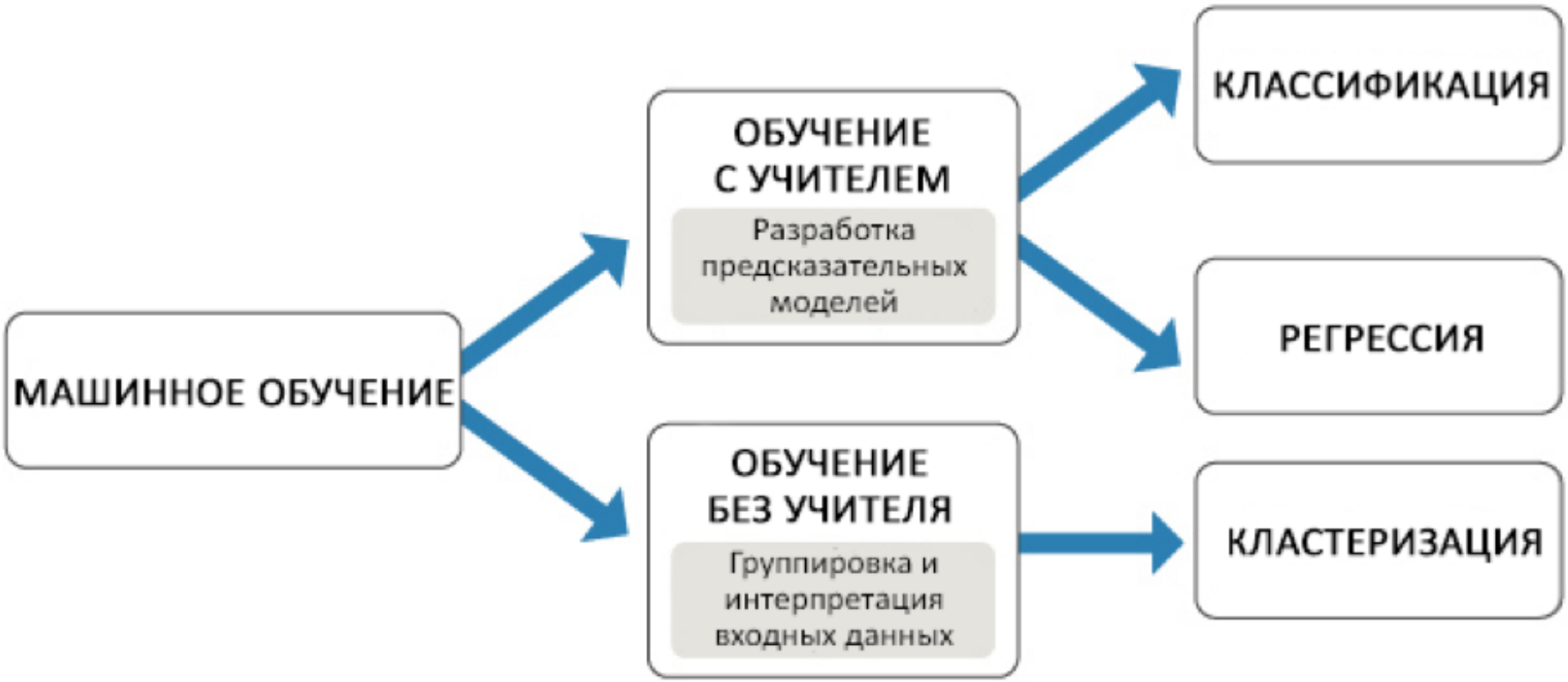
Лекции (теория):

- M.Zaki, W.Meira, Data Mining and Machine Learning. Fundamental Concepts and Algorithms 2e (2020)

Лабораторные работы:

- F.Chollet, Deep Learning with Python 2e (2021)

Основные задачи машинного обучения



Основные задачи машинного обучения

- Задача кластеризации — это задача группировки множества объектов на подмножества (кластеры) таким образом, чтобы объекты из одного кластера были более похожи друг на друга, чем на объекты из других кластеров по какому-либо критерию.
- В задаче классификации имеется множество объектов, разделённых некоторым образом на классы, и задано конечное подмножество объектов (выборка), для которых известно, к каким классам они относятся (классовая принадлежность остальных объектов неизвестна). Задача классификации – это задача построения алгоритма, способного классифицировать (определять номер или наименование класса) произвольного объекта из исходного множества.
- В задаче регрессии на множестве объектов определена некоторая (вообще говоря) неизвестная функция и задано конечное подмножество объектов (выборка), для которых известны значения функции. Задача регрессии – это задача построения алгоритма, способного находить значение функции для произвольного объекта из исходного множества.

Регрессия

Пусть даны независимые переменные (признаки) $X_1, X_2, ..., X_d$ и зависимая переменная (отклик) Y, тогда целью регрессии является прогнозирование значения Y на основе значений $X_1, X_2, ..., X_d$, т.е. цель состоит в том, чтобы определить функцию регрессии f, такую, что

$$Y = f(\mathbf{X}) + \varepsilon = f(X_1, X_2, ..., X_d) + \varepsilon,$$

где ε – случайная ошибка, которая предполагается независимой от многомерной случайной величины $\mathbf{X} = (X_1, X_2, ..., X_d)^T \in \mathbb{R}^d$, причем $\mathbb{E}[\varepsilon] = 0$.

Выражение для Y состоит из двух слагаемых, одно из которых зависит от переменных $X_1, X_2, ..., X_d$, а другое зависит от ошибки, независимой от переменных $X_1, X_2, ..., X_d$. Слагаемое ошибки соответствует неустранимой неопределенности, присущей Y, а также, возможно, влиянию ненаблюдаемых, скрытых (латентных) переменных. Таким образом, функция регрессии может быть построена как условное математическое ожидание

$$f(x_1, ..., x_d) = \mathbb{E}[Y \mid X_1 = x_1, ..., X_d = x_d]$$

Линейная регрессия

В линейной регрессии функция f предполагается линейной по $\mathbf{X}$, т.е.

$$f(\mathbf{X}) = \beta + \omega_1 X_1 + \omega_2 X_2 + ... + \omega_d X_d = \beta + \sum_{i=1}^{d} \omega_i X_i = \beta + \boldsymbol{\omega}^{\mathbf{T}} \mathbf{X},$$

где β – истинное (неизвестное) смещение (bias), ω_i – истинный (неизвестный) коэффициент регрессии или вес для признака X_i, $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, \omega_2, ..., \omega_d)^T$ – истинный d-мерный вектор весов.

Функция f определяет гиперплоскость $f(\mathbf{X}) = 0$ в пространстве признаков $\mathbb{R}^d$, причем вектор весов $\boldsymbol{\omega}$ ортогонален (перпендикулярен) гиперплоскости $f(\mathbf{X}) = 0$, а смещение β задает точки пересечения гиперплоскости с осями координат пространства признаков. Функция регрессии f полностью определяется $d+1$ параметрами β и ω_i для $i = 1, ..., d$.

Наиболее распространенным подходом к прогнозированию параметров линейной регрессии (коэффициентов смещения и регрессии) является использование метода наименьших квадратов.

Метод наименьших квадратов

Задача оценки параметров линейной регрессии заключается в подборе таких значений коэффициентов смещения b и регрессии $\mathbf{w} = (w_1, ..., w_d)^T$, чтобы значения функции регрессии $\hat{\mathbf{y}} = b + \mathbf{w}^T\mathbf{x}$ были максимально близки к имеющимся значениям отклика. Суть метода наименьших квадратов (МНК) заключается в выборе в качестве «меры близости» суммы квадратов отклонений значений функции регрессии от значений отклика.

Пусть обучающие данные $\mathbf{D}$ содержат d-мерные векторы значений признаков $\mathbf{x}_i$ и значения откликов y_i (для $i = 1, ..., n$), тогда требуется определить параметры b и $\mathbf{w}$, минимизирующие сумму квадратов остаточных ошибок (SSE или sum of squared errors)

$$\min_{b,\mathbf{w}} SSE = \min_{b,\mathbf{w}} \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \min_{b,\mathbf{w}} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)_i^2 = \min_{b,\mathbf{w}} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - b - \mathbf{w}^\mathbf{T}\mathbf{x}_i\right)^2$$

Основные подходы к минимизации SSE:

- продифференцировать SSE по неизвестным параметрам, приравнять производные к нулю и решить полученную систему уравнений
- использовать численные методы минимизации

Коэффициент смещения в парной регрессии

В парной (bivariate) регрессии обучающие данные $\mathbf{D}$ содержат один признак $\mathbf{X} = (x_1, x_2, ..., x_n)^T$ вместе с откликом $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, ..., y_n)^T$, а линейная функция регрессии зависит от двух параметров b и w: $\hat{y} = b + w\,x$.

Остаточная ошибка для точки x_i равна $\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = y_i - b - w\,x_i$ и параметры парной регресии b, w определяются из условия:

$$\min_{b,\,w} SSE = \min_{b,\,w} \sum_{i=1}^{n} (y_i - b - w\,x_i)^2 .$$

Дифференцируем SSE по b и приравниваем результат к нулю:

$$\frac{\partial}{\partial b} SSE = -2 \sum_{i=1}^{n} (y_i - b - w\,x_i) = 0 \Rightarrow b = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i - w \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i .$$

Отсюда получаем следующее выражение для коэффициента смещения

$$b = \mu_{\mathbf{Y}} - w\,\mu_{\mathbf{X}},\ \mu_{\mathbf{X}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i,\ \mu_{\mathbf{Y}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i .$$

Коэффициент регрессии в парной регрессии

Дифференцируем SSE по w и получаем:

$$\frac{\partial}{\partial w} SSE = -2 \sum_{i=1}^{n} x_i \left(y_i - b - w\, x_i \right) = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - b \sum_{i=1}^{n} x_i - w \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 0 \Rightarrow$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \mu_{\mathbf{Y}} \sum_{i=1}^{n} x_i + w\, \mu_{\mathbf{X}} \sum_{i=1}^{n} x_i - w \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 0 \Rightarrow$$

$$w = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\, \mu_{\mathbf{X}} \mu_{\mathbf{Y}}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\, \mu_{\mathbf{X}}^2}$$

Коэффициент регрессии w также может быть выражен через ковариацию $\mathbf{X}$ и $\mathbf{Y}$ и дисперсию $\mathbf{X}$:

$$w = \frac{\sum_{i=1}^{n} \left(x_i - \mu_{\mathbf{X}} \right) \left(y_i - \mu_{\mathbf{Y}} \right)}{\sum_{i=1}^{n} \left(x_i - \mu_{\mathbf{X}} \right)^2} = \frac{\sigma_{\mathbf{XY}}}{\sigma_{\mathbf{X}}^2} = \frac{\operatorname{cov}\left(\mathbf{X}, \mathbf{Y} \right)}{\operatorname{var}\left(\mathbf{X} \right)}$$

Оценка параметров парной регрессии

Итак, в парной регресии

$$\hat{y} = b + w\,x$$

оценка параметров регрессии b и w по обучающим данным

$$\mathbf{D} = \left\{ \mathbf{X} = (x_1, x_2, ..., x_n)^T,\ \mathbf{Y} = (y_1, y_2, ..., y_n)^T \right\}$$

производится по формулам

$$b = \mu_{\mathbf{Y}} - \frac{\sigma_{\mathbf{XY}}}{\sigma^2_{\mathbf{X}}}\,\mu_{\mathbf{X}},\ w = \frac{\sigma_{\mathbf{XY}}}{\sigma^2_{\mathbf{X}}},$$

где

$$\mu_{\mathbf{X}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i,\ \mu_{\mathbf{Y}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i,$$

$$\sigma_{\mathbf{XY}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu_{\mathbf{X}})\,(y_i - \mu_{\mathbf{Y}}),$$

$$\sigma^2_{\mathbf{X}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu_{\mathbf{X}})^2.$$

Пример: набор данных Ирисы

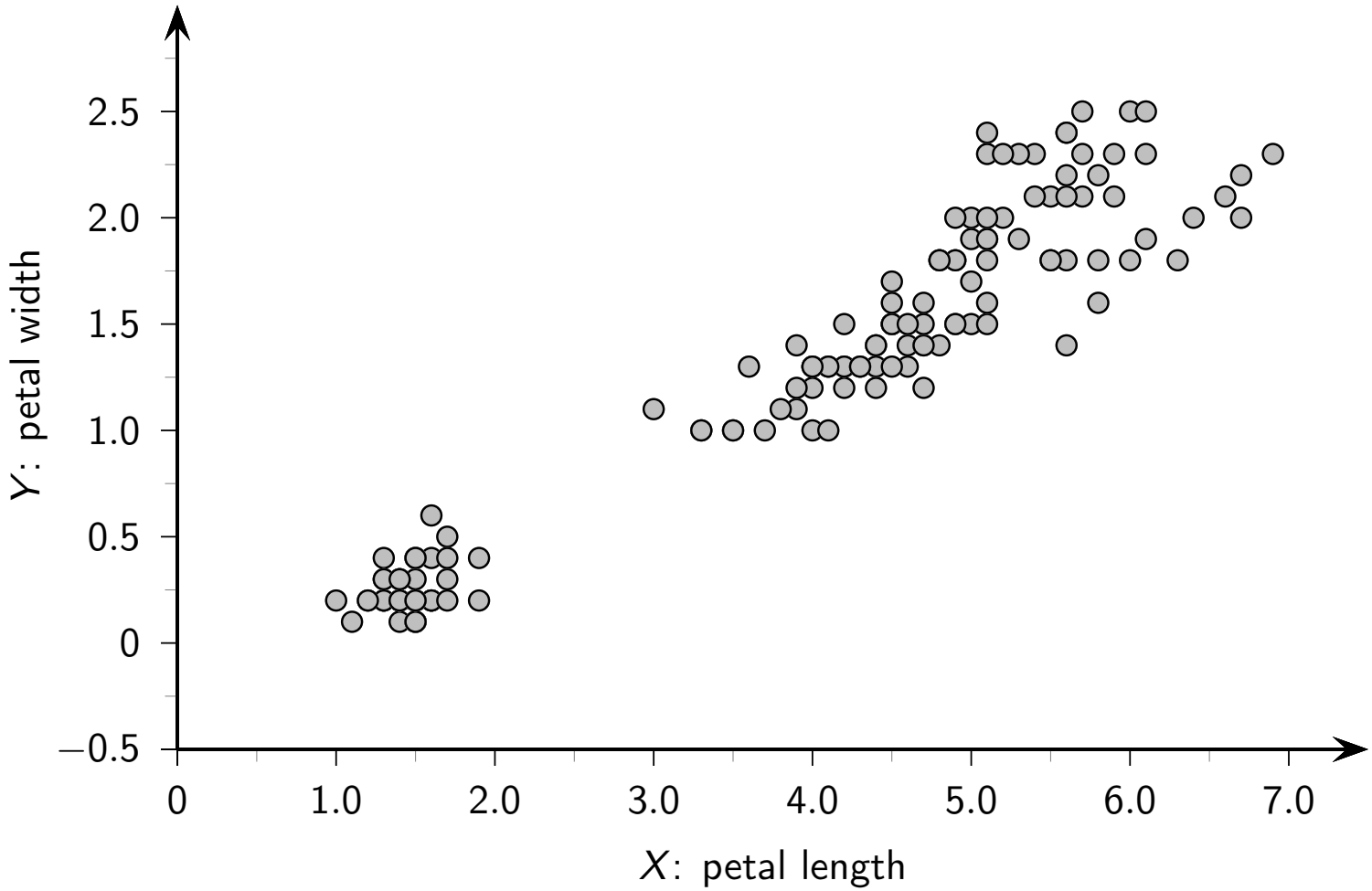
Набор данных Ирисы (Iris) изучался Р. Фишером в 1936 г. Набор состоит из 150 записей и содержит следующие пять признаков:

1. длина чашелистника (sepal length) в см
2. ширина чашелистника (sepal width) в см
3. длина лепестка (petal length) в см
4. ширина лепестка (petal width) в см
5. класс (class) ириса, принимающий значения:
   - Iris-setosa
   - Iris-versicolour
   - Iris-virginica

Набор данных Ирисы размещен в репозитарии данных машинного обучения UCI по адресу https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Iris, количество обращений к набору с 2007 года составляет более 4 миллионов.

Пример парной регрессии в наборе Ирисы

Даны два признака: длина лепестка (petal length) X (независимая переменная) и ширина лепестка (petal width) Y (отклик) в наборе данных Ирисы. Исследуем зависимость ширины лепестка Y от длины лепестка X.



Средние, дисперсии и ковариация в наборе Ирисы

Средние значения для переменных X и Y равны

$$\mu_X = \frac{1}{150}\sum_{i=1}^{150} x_i = \frac{563.8}{150} = 3.7587$$

$$\mu_Y = \frac{1}{150}\sum_{i=1}^{150} y_i = \frac{179.8}{150} = 1.1987$$

Дисперсии X и Y и ковариация X и Y равны

$$\sigma_X^2 = \frac{1}{150}\sum_{i=1}^{150} (x_i - \mu_X)^2 = 3.0924$$

$$\sigma_Y^2 = \frac{1}{150}\sum_{i=1}^{150} (y_i - \mu_Y)^2 = 0.5785$$

$$\sigma_{XY} = \frac{1}{150}\sum_{i=1}^{150} (x_i - \mu_X) \cdot (y_i - \mu_Y) = 1.2877$$

Линейная регрессия для набора Ирисы

Предполагая линейную связь между откликом Y и независимой переменной X, вычислим следующие коэффициенты регрессии (наклона) и смещения

$$w = \frac{\sigma_{XY}}{\sigma_X^2} = \frac{1.2877}{3.0924} = 0.4164$$

$$b = \mu_Y - w\,\mu_X = 1.1987 - 0.4164 \cdot 3.7587 = -0.3665$$

Таким образом, полученная функция линейной регрессии имеет вид

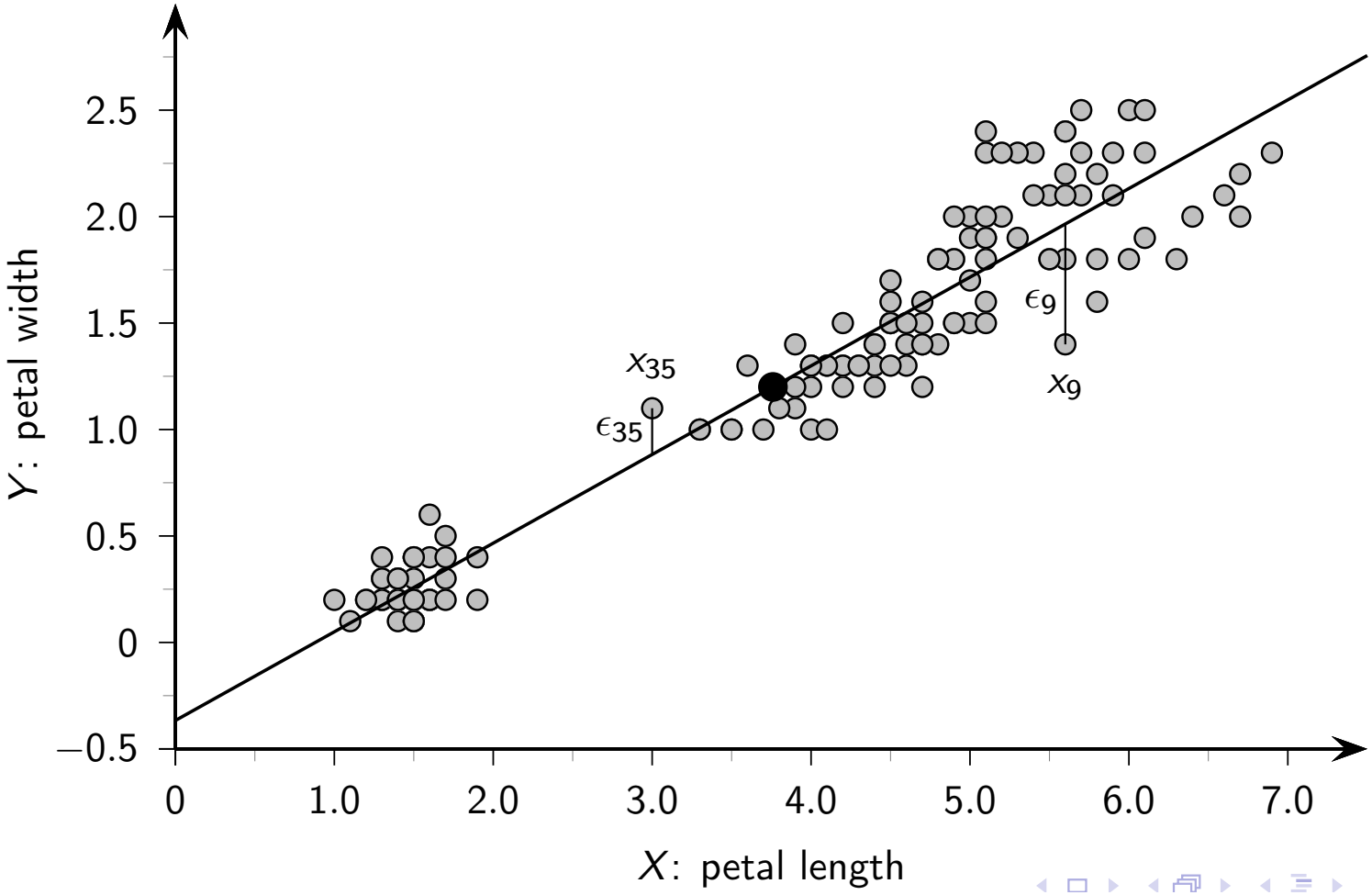
$$\hat{y} = -0.3665 + 0.4164\,x$$

Сумма квадратов остаточных ошибок SSE вычисляется следующим образом:

$$SSE = \sum_{i=1}^{150} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{150} (y_i - \hat{y}_i)^2 = 6.343$$

Линия парной регрессии для набора Ирисы

Изобразим на плоскости линию регресии, отражающую зависимость ширины лепестка Y от длины лепестка X. Сплошной черный кружок показывает среднюю точку, остаточная ошибка показана для двух точек x_9 и x_{35}.



Множественная регрессия

В множественной регрессии (multiple regression) несколько независимых признаков $X_1, X_2, ..., X_d$ и один отклик Y. Обучающая выборка $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{n \times d}$ содержит n точек $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, ..., x_{id})^T$ в d-мерном пространстве вместе с соответствующими наблюдаемыми значениями откликов y_i.

Вместо того, чтобы рассматривать смещение b отдельно от весов w_i, можно ввести новый атрибут X_0, значение которого всегда равно единице ($x_{i0} = 1$).

Тогда прогнозируемое значение отклика для расширенной $(d+1)$-мерной точки $\tilde{\mathbf{x}}_i$ можно записать как

$$\hat{y}_i = w_0 x_{i0} + w_1 x_{i1} + w_2 x_{i2} + \cdots + w_d x_{id} = \tilde{\mathbf{w}}^T \tilde{\mathbf{x}}_i,$$

где $\tilde{\mathbf{w}} = (w_0, w_1, w_2, ..., w_d)^T$, $\tilde{\mathbf{x}}_i = (x_{i0}, x_{i1}, x_{i2}, ..., x_{id})^T$. Таким образом, для обучающей выборки $\mathbf{D}$ вектор прогнозируемых значений откликов равен

$$\hat{\mathbf{Y}} = \tilde{\mathbf{D}}\tilde{\mathbf{w}},$$

где $\tilde{\mathbf{D}}$ – дополненная обучающая выборка, состоящая из расширенных точек $\tilde{\mathbf{x}}_i = (1, x_{i1}, x_{i2}, ..., x_{id})^T$.

Решение задачи множественной регрессии

Задача множественной регрессии состоит в том, чтобы найти наиболее подходящую линейную функцию регресии $f(\tilde{\mathbf{x}}) = \tilde{\mathbf{w}}^T\tilde{\mathbf{x}}$, определяемую расширенным вектором весов $\tilde{\mathbf{w}}$, которая минимизирует ошибку SSE:

$$SSE = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \|\varepsilon\|^2 = \left\|\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}\right\|^2 = \left(\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}\right)^T \left(\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}\right) =$$

$$= \mathbf{Y}^T\mathbf{Y} - 2\mathbf{Y}^T\hat{\mathbf{Y}} + \hat{\mathbf{Y}}^T\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{Y}^T\mathbf{Y} - 2\mathbf{Y}^T\left(\tilde{\mathbf{D}}\tilde{\mathbf{w}}\right) + \left(\tilde{\mathbf{D}}\tilde{\mathbf{w}}\right)^T\left(\tilde{\mathbf{D}}\tilde{\mathbf{w}}\right) =$$

$$= \mathbf{Y}^T\mathbf{Y} - 2\tilde{\mathbf{w}}^T\left(\tilde{\mathbf{D}}^T\mathbf{Y}\right) + \tilde{\mathbf{w}}^T\left(\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}}\right)\tilde{\mathbf{w}}$$

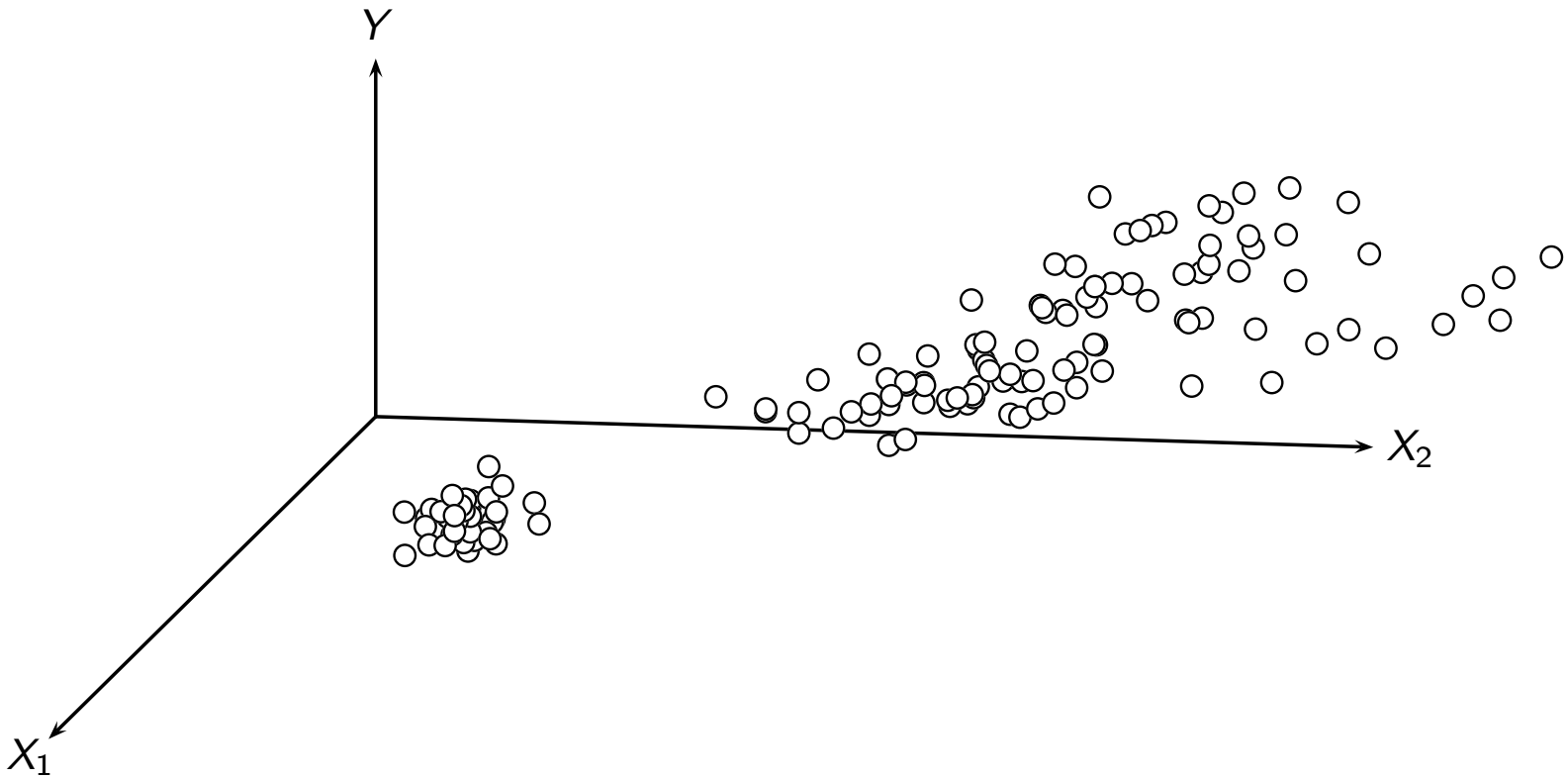
Дифференцируя SSE по $\tilde{\mathbf{w}}$ и приравнивая результат к нулю, получим, что оптимальный вектор весов $\tilde{\mathbf{w}}$ множественной регрессии задается формулой

$$\tilde{\mathbf{w}} = \left(\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}}\right)^{-1}\tilde{\mathbf{D}}^T\mathbf{Y},$$

где $\tilde{\mathbf{D}} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{D} \end{pmatrix}$ – дополненная обучающая выборка (матрица размерами $n \times (d+1)$), $\mathbf{Y}$ – вектор значений откликов для точек $\mathbf{D}$.

Множественная регрессия для набора Ирисы

Рассматривая независимые признаки длину чашелистика X_1 (sepal length) и длину лепестка X_2 (petal length), а также ширину лепестка (petal width) как отклик Y, исследуем множественную регрессию в наборе данных Iris (количество точек $n = 150$).



Уравнение множественной регрессии

Имеем $X_0 = \mathbf{1}_{150}$ и $\tilde{\mathbf{D}} \in \mathbb{R}^{150\times 3}$ (всего три признака X_0, X_1, X_2), тогда

$$\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}} = \begin{pmatrix} 150.0 & 876.50 & 563.80 \\ 876.5 & 5223.85 & 3484.25 \\ 563.8 & 3484.25 & 2583.00 \end{pmatrix}, \tilde{\mathbf{D}}^T\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 179.80 \\ 1127.65 \\ 868.97 \end{pmatrix}$$

$$\left(\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}}\right)^{-1} = \begin{pmatrix} 0.793 & -0.176 & 0.064 \\ -0.176 & 0.041 & -0.017 \\ -0.017 & 0.064 & 0.009 \end{pmatrix}$$

Дополненный вектор весов $\tilde{\mathbf{w}}$ вычисляется как

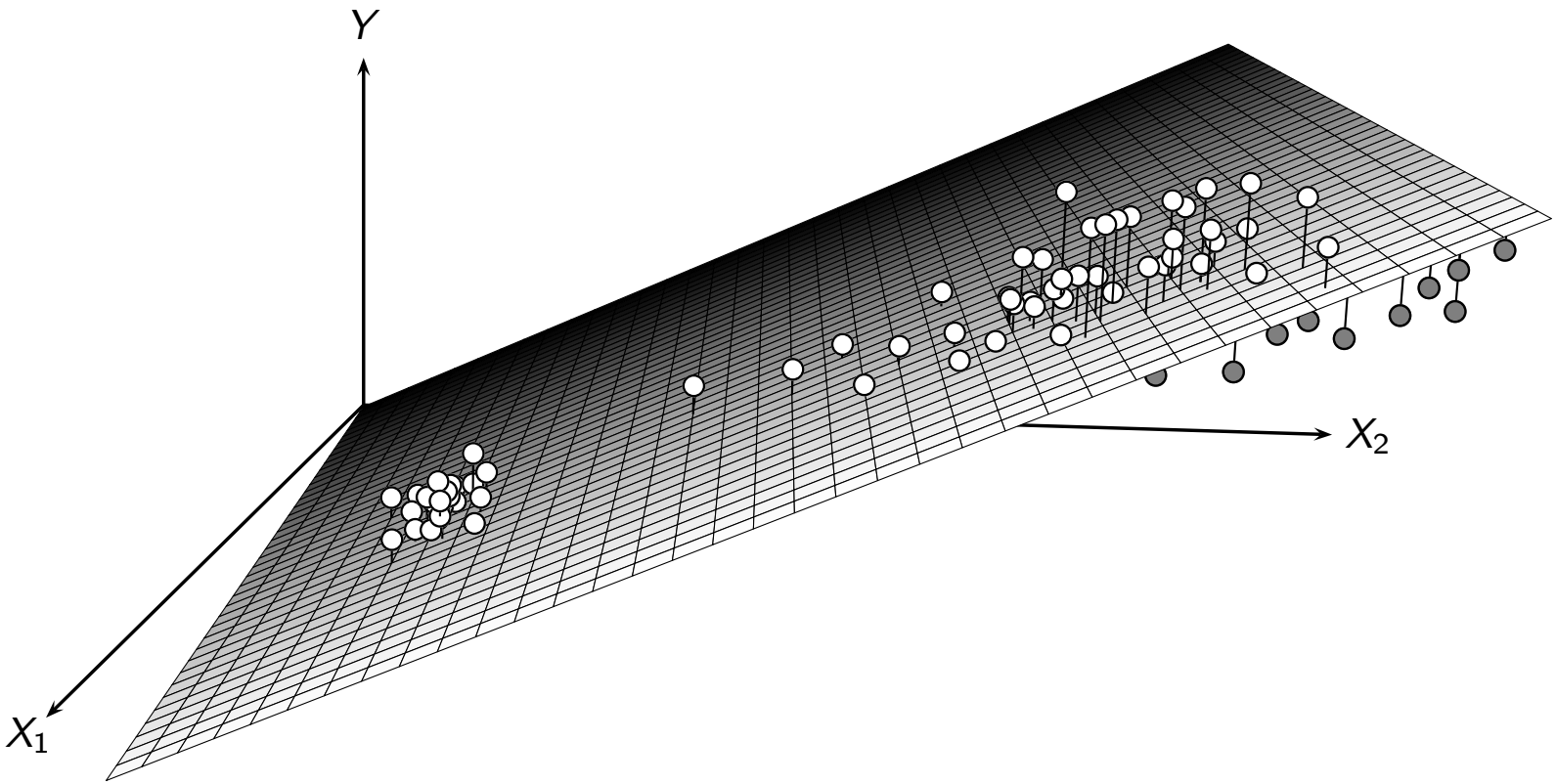
$$\tilde{\mathbf{w}} = \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} = \left(\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}}\right)^{-1}\tilde{\mathbf{D}}^T\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} -0.014 \\ -0.082 \\ 0.45 \end{pmatrix}$$

Тогда $b = w_0 = -0.014$ и уравнение множественной регрессии имеет вид

$$\hat{y} = -0.014 - 0.082\,x_1 + 0.45\,x_2$$

Гиперплоскость множественной регрессии

На рисунке показана построенная гиперплоскость и остаточная ошибка для каждой точки. Положительные ошибки (т.е. $\varepsilon_i > 0$ или $\hat{y}_i > y_i$) белые, а отрицательные ошибки (т.е. $\varepsilon_i < 0$ или $\hat{y}_i < y_i$) серые. Значение ошибки SSE для модели множественной регрессии равно 6.18.



QR-факторизация матрицы (1)

Если размерность d пространства признаков высока, то задача вычисления обратной матрицы к матрице $\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}}$ размерности $(d+1)\times(d+1)$ (нецентрированной матрице рассеяния) является вычислительно сложной.

Для того, чтобы облегчить вычисление обратной матрицы $\left(\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}}\right)^{-1}$, можно использовать т.н. ортогонализацию Грама-Шмидта для матрицы $\tilde{\mathbf{D}}$, в результате которой получаем QR-разложение $\tilde{\mathbf{D}} = \mathbf{Q}\,\mathbf{R}$, где по построению $\mathbf{Q}$ – матрица размерами $n \times (d+1)$ с ортогональными стобцами вида

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} | & | & & | \\ U_0 & U_1 & \ldots & U_d \\ | & | & & | \end{pmatrix}$$

и $\mathbf{R}$ – верхнетреугольная матрица размерами $(d+1)\times(d+1)$ вида

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1 & p_{10} & p_{20} & \ldots & p_{d0} \\ 0 & 1 & p_{21} & \ldots & p_{d1} \\ 0 & 0 & 1 & \ldots & p_{d2} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 \end{pmatrix}$$

QR-факторизация матрицы (2)

Тогда для $\tilde{\mathbf{D}}$ имеем представление

$$\underbrace{\begin{pmatrix} | & | & & | \\ X_0 & X_1 & \dots & X_d \\ | & | & & | \end{pmatrix}}_{\tilde{\mathbf{D}}} = \underbrace{\begin{pmatrix} | & | & & | \\ U_0 & U_1 & \dots & U_d \\ | & | & & | \end{pmatrix}}_{\mathbf{Q}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & p_{10} & \dots & p_{d0} \\ 0 & 1 & \dots & p_{d1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{R}}$$

и в силу ортогональности столбцов матрицы $\mathbf{Q}$ имеем

$$\mathbf{Q}^T\mathbf{Q} = \mathbf{\Delta} = \begin{pmatrix} \|U_0\|^2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \|U_d\|^2 \end{pmatrix}$$

Отсюда выводим уравнение для определения вектора весов $\tilde{\mathbf{w}}$:

$$\tilde{\mathbf{w}} = \left(\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}}\right)^{-1}\tilde{\mathbf{D}}^T\mathbf{Y} \Rightarrow \tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}}\tilde{\mathbf{w}} = \tilde{\mathbf{D}}^T\mathbf{Y} \Rightarrow \mathbf{R}^T\left(\mathbf{Q}^T\mathbf{Q}\right)\mathbf{R}\tilde{\mathbf{w}} = \mathbf{R}^T\mathbf{Q}^T\mathbf{Y} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \mathbf{R}^T\mathbf{\Delta}\mathbf{R}\tilde{\mathbf{w}} = \mathbf{R}^T\mathbf{Q}^T\mathbf{Y} \Rightarrow \mathbf{\Delta}\mathbf{R}\tilde{\mathbf{w}} = \mathbf{Q}^T\mathbf{Y} \Rightarrow \mathbf{R}\tilde{\mathbf{w}} = \mathbf{\Delta}^{-1}\mathbf{Q}^T\mathbf{Y}$$

Система уравнений $\mathbf{R}\tilde{\mathbf{w}} = \mathbf{\Delta}^{-1}\mathbf{Q}^T\mathbf{Y}$ решается обратной подстановкой.

Алгоритм регрессии методом QR-факторизации

Алгоритм основан на QR-факторизации, которая выражает матрицу $\tilde{\mathbf{D}}$ как произведение двух матриц: ортогональной матрицы $\mathbf{Q}$ и верхней (или правой) треугольной матрицы $\mathbf{R}$.

Multiple-Regression $(\mathbf{D}, \mathbf{Y})$:

1 $\tilde{\mathbf{D}} \leftarrow \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{D} \end{pmatrix}$ // дополненные входные данные с $X_0 = \mathbf{1} \in \mathbb{R}^n$

2 $\{\mathbf{Q}, \mathbf{R}\} \leftarrow$ QR-факторизация$(\tilde{\mathbf{D}})$ // $\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} U_0 & U_1 & \cdots & U_d \end{pmatrix}$

3 $\boldsymbol{\Delta} \leftarrow \begin{pmatrix} \|U_0\|^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \|U_1\|^2 & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \\ 0 & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \|U_d\|^2 \end{pmatrix}$ // квадраты норм по диагонали

4 $\boldsymbol{\Delta}^{-1} \leftarrow \begin{pmatrix} \frac{1}{\|U_0\|^2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\|U_1\|^2} & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \\ 0 & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{\|U_d\|^2} \end{pmatrix}$ // обратные квадраты норм

5 $\mathbf{R}\tilde{\mathbf{w}} \leftarrow \boldsymbol{\Delta}^{-1}\mathbf{Q}^T\mathbf{Y}$ // веса $\tilde{\mathbf{w}}$ находятся обратной подстановкой

6 $\hat{\mathbf{Y}} \leftarrow \mathbf{Q}\boldsymbol{\Delta}^{-1}\mathbf{Q}^T\mathbf{Y}$ // прогноз отклика без определения весов $\tilde{\mathbf{w}}$

QR-факторизация в наборе Ирисы

Найдем зависимость ширины лепестка Y от длины чашелистника X_1 и длины лепестка X_2 для набора данных Ирисы с $n = 150$ точками.

Ортогонализация Грама–Шмидта приводит к следующей QR-факторизации:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} | & | & | \\ X_0 & X_1 & X_2 \\ | & | & | \end{pmatrix}}_{\tilde{\mathbf{D}}} = \underbrace{\begin{pmatrix} | & | & | \\ U_0 & U_1 & U_2 \\ | & | & | \end{pmatrix}}_{\mathbf{Q}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 5.843 & 3.759 \\ 0 & 1 & 1.858 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{R}},$$

где $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{150\times 3}$ и матрицы $\boldsymbol{\Delta}$ и $\boldsymbol{\Delta}^{-1}$ равны

$$\boldsymbol{\Delta} = \begin{pmatrix} 150.0 & 0 & 0 \\ 0 & 102.17 & 0 \\ 0 & 0 & 111.35 \end{pmatrix}, \boldsymbol{\Delta}^{-1} = \begin{pmatrix} 0.00667 & 0 & 0 \\ 0 & 0.00979 & 0 \\ 0 & 0 & 0.00898 \end{pmatrix}$$

Уравнение регрессии в наборе Ирисы

Используем обратную подстановку для определения $\tilde{\mathbf{w}}$:

$$\mathbf{R}\tilde{\mathbf{w}} = \boldsymbol{\Delta}^{-1}\mathbf{Q}^T\mathbf{Y} \text{ или } \begin{pmatrix} 1 & 5.843 & 3.759 \\ 0 & 1 & 1.858 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.1987 \\ 0.7538 \\ 0.4499 \end{pmatrix}$$

Обратная подстановка начинается с веса w_2, потом определяется w_1 и, наконец, w_0:

$$w_2 = 0.4499,$$

$$w_1 + 1.858\, w_2 = 0.7538 \Rightarrow$$

$$w_1 = 0.7538 - 0.8358 = -0.082,$$

$$w_0 + 5.843\, w_1 + 3.759\, w_2 = 1.1987 \Rightarrow$$

$$w_0 = 1.1987 + 0.4786 - 1.6911 = -0.0139$$

Модель множественной регрессии в наборе Ирисы построена в виде:

$$\hat{y} = -0.0139 - 0.082\, x_1 + 0.4499\, x_2$$

Множественная регрессия при помощи SGD

Вместо использования подхода на основе QR-факторизации для точного решения задачи множественной регрессии можно использовать алгоритм стохастического градиентного спуска (SGD). Градиент целевой функции SSE по весам $\tilde{\mathbf{w}}$ задается как

$$\nabla_{\tilde{\mathbf{w}}} = \frac{\partial}{\partial \tilde{\mathbf{w}}} SSE = -\tilde{\mathbf{D}}^T \mathbf{Y} + \left(\tilde{\mathbf{D}}^T \tilde{\mathbf{D}}\right) \tilde{\mathbf{w}}$$

Стартуя с начального вектора весов $\tilde{\mathbf{w}}^{(0)}$, мы обновляем веса согласно следующей итеративной процедуре:

$$\tilde{\mathbf{w}}^{(t+1)} = \tilde{\mathbf{w}}^{(t)} - \eta \nabla_{\tilde{\mathbf{w}}} = \tilde{\mathbf{w}}^{(t)} + \eta \tilde{\mathbf{D}}^T \left(\mathbf{Y} - \tilde{\mathbf{D}} \tilde{\mathbf{w}}^{(t)}\right),$$

где $\tilde{\mathbf{w}}^{(t)}$ – оценка вектора весов на шаге t, $\eta > 0$ – шаг обучения. Вектор весов обновляется по одной (случайной) точке набора $\mathbf{D}$ на каждой итерации, т.е.

$$\tilde{\mathbf{w}}^{(t+1)} = \tilde{\mathbf{w}}^{(t)} - \eta \nabla_{\tilde{\mathbf{w}}} \left(\tilde{\mathbf{x}}_k\right) = \tilde{\mathbf{w}}^{(t)} + \eta \left(y_k - \tilde{\mathbf{x}}_k \tilde{\mathbf{w}}^{(t)}\right) \tilde{\mathbf{x}}_k$$

Алгоритм регрессии методом SGD

Входными данными для алгоритма множественной регрессии при помощи SGD являются матрица входных данных $\mathbf{D}$, вектор откликов $\mathbf{Y}$ для точек набора $\mathbf{D}$, шаг обучения $\eta > 0$, требуемая точность $\varepsilon > 0$.

Multiple Regression: SGD $(\mathbf{D}, \mathbf{Y}, \eta, \varepsilon)$:

$\tilde{\mathbf{D}} \leftarrow \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{D} \end{pmatrix}$ // создаем дополненные входные данные

$t \leftarrow 0$ // инициализируем счетчик шагов/итераций

$\tilde{\mathbf{w}}^{(0)} \leftarrow$ случайный вектор в $\mathbb{R}^{d+1}$ // начальный вектор весов

repeat

  foreach $k = 1, 2, \cdots, n$ (в случайном порядке) do

    $\nabla_{\tilde{\mathbf{w}}}(\tilde{\mathbf{x}}_k) \leftarrow -(y_k - \tilde{\mathbf{x}}_k^T \tilde{\mathbf{w}}^{(t)}) \cdot \tilde{\mathbf{x}}_k$ // вычислить градиент в $\tilde{\mathbf{x}}_k$

    $\tilde{\mathbf{w}}^{(t+1)} \leftarrow \tilde{\mathbf{w}}^{(t)} - \eta \cdot \nabla_{\tilde{\mathbf{w}}}(\tilde{\mathbf{x}}_k)$ // обновить оценку для весов

  $t \leftarrow t + 1$

until $\left\| \tilde{\mathbf{w}}^{(t)} - \tilde{\mathbf{w}}^{(t-1)} \right\| \leqslant \varepsilon$

Пример множественной регрессии с SGD

Рассматривается множественная регрессия для набора данных Ирисы с признаками длины чашелистника X_1 и длины лепестка X_2 и шириной лепестка Y в качестве отклика.

Используя точный подход, получаем модель множественной регрессии в виде

$$\hat{y} = -0.0139 - 0.082\,x_1 + 0.4499\,x_2$$

Используя SGD, получаем следующую модель для $\eta = 0.001$ и $\varepsilon = 0.0001$:

$$\hat{y} = -0.031 - 0.078\,x_1 + 0.45\,x_2$$

Результаты подхода SGD по сути такие же, как и для точного метода, с небольшой разницей в коэффициенте смещения.

Значение ошибки SSE для точного метода составляет 6.179, тогда как для SGD ошибка составляет 6.181.

Гребневая (L_2) регрессия

Для линейной регрессии вектор $\hat{\mathbf{Y}}$ лежит в линейном подпространстве, порожденном вектор-столбцами дополненной матрицы данных $\tilde{\mathbf{D}}$.

Часто данные бывают зашумлены и неопределены, поэтому вместо того, чтобы подгонять модель к данным точно, бывает лучше использовать модель, более устойчивую к ошибкам в данных.

Регуляризация модели – это метод добавления некоторых дополнительных ограничений к условиям модели (обычно в форме штрафа за сложность модели) с целью повысить качество модели. Например, регуляризация может накладывать ограничение на норму вектора весов $\tilde{\mathbf{w}}$.

Для этого в гребневой (ridge) регрессии к ошибке $\left\|\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}\right\|^2$ добавляется слагаемое регуляризации ($\|\tilde{\mathbf{w}}\|^2$) и решается задача минимизации функции

$$J\left(\tilde{\mathbf{w}}\right) = \left\|\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}\right\|^2 + \alpha \left\|\tilde{\mathbf{w}}\right\|^2 = \left\|\mathbf{Y} - \tilde{\mathbf{D}}\tilde{\mathbf{w}}\right\|^2 + \alpha \left\|\tilde{\mathbf{w}}\right\|^2$$

Коэффициент $\alpha \geqslant 0$ управляет балансом между квадратом нормы вектора весов и квадратом ошибки прогноза в процессе минимизации.

Вектор весов в гребневой регрессии

Для построения точного решения дифференцируем функцию $J(\tilde{\mathbf{w}})$ по $\tilde{\mathbf{w}}$ и приравниваем результат к нулю, чтобы получить вектор весов в виде

$$\tilde{\mathbf{w}} = \left(\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}} + \alpha\,\mathbf{I}\right)^{-1}\tilde{\mathbf{D}}^T\mathbf{Y},$$

где $\mathbf{I}$ – единичная $(d+1) \times (d+1)$-матрица. Матрица $\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}} + \alpha\,\mathbf{I}$ всегда является обратимой (невырожденной) для $\alpha > 0$, даже если матрица $\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}}$ не обратима (вырождена).

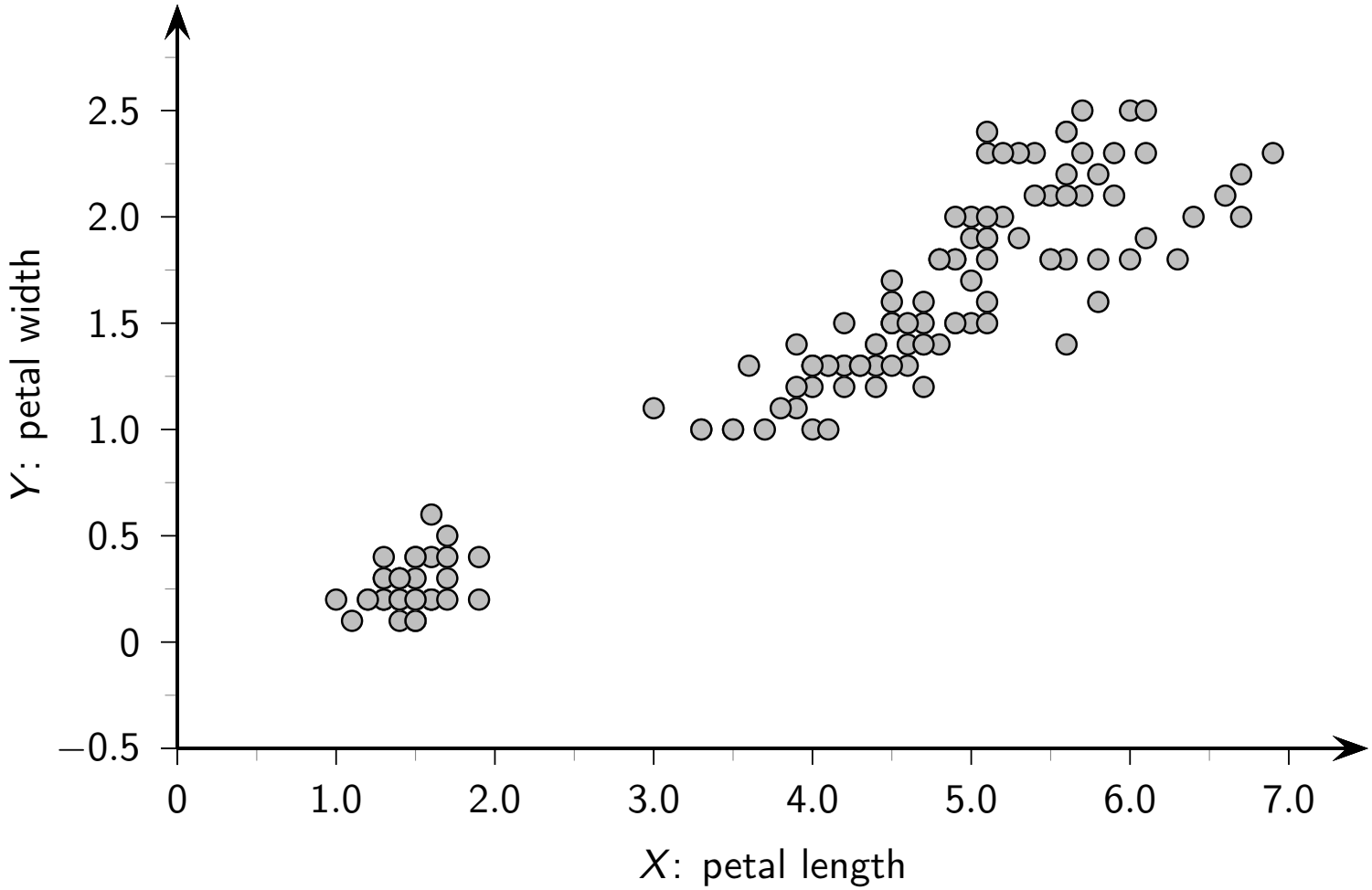
Если число λ_i является собственным значением матрицы $\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}}$, то $\lambda_i + \alpha$ является собственным значением матрицы $\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}} + \alpha\,\mathbf{I}$. Поскольку матрица $\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}}$ неотрицательно определенная, она имеет неотрицательные собственные значения. Даже если $\lambda_i = 0$, то соответствующее собственное значение матрицы $\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}} + \alpha\,\mathbf{I}$ равно $\lambda_i + \alpha = \alpha > 0$.

Регуляризованная таким образом регрессия называется гребневой (ridge) регрессией, потому что она добавляет «гребень» вдоль главной диагонали матрицы $\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}}$, т.е. решение зависит от $\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}} + \alpha\,\mathbf{I}$.

Если выбирается положительное $\alpha > 0$, то гребневая регрессия гарантирует существование точного решения.

Гребневая регрессия для набора Ирисы

Рассматриваем длину лепестка X (petal length) как признак и ширину лепестка (petal width) как переменную отклика Y и исследуем гребневую регрессию в наборе данных Ирисы (с количеством точек $n = 150$).



Уравнения гребневой регрессии для набора Ирисы

Нецентрированная матрица рассеяния (uncentered scatter matrix) равна

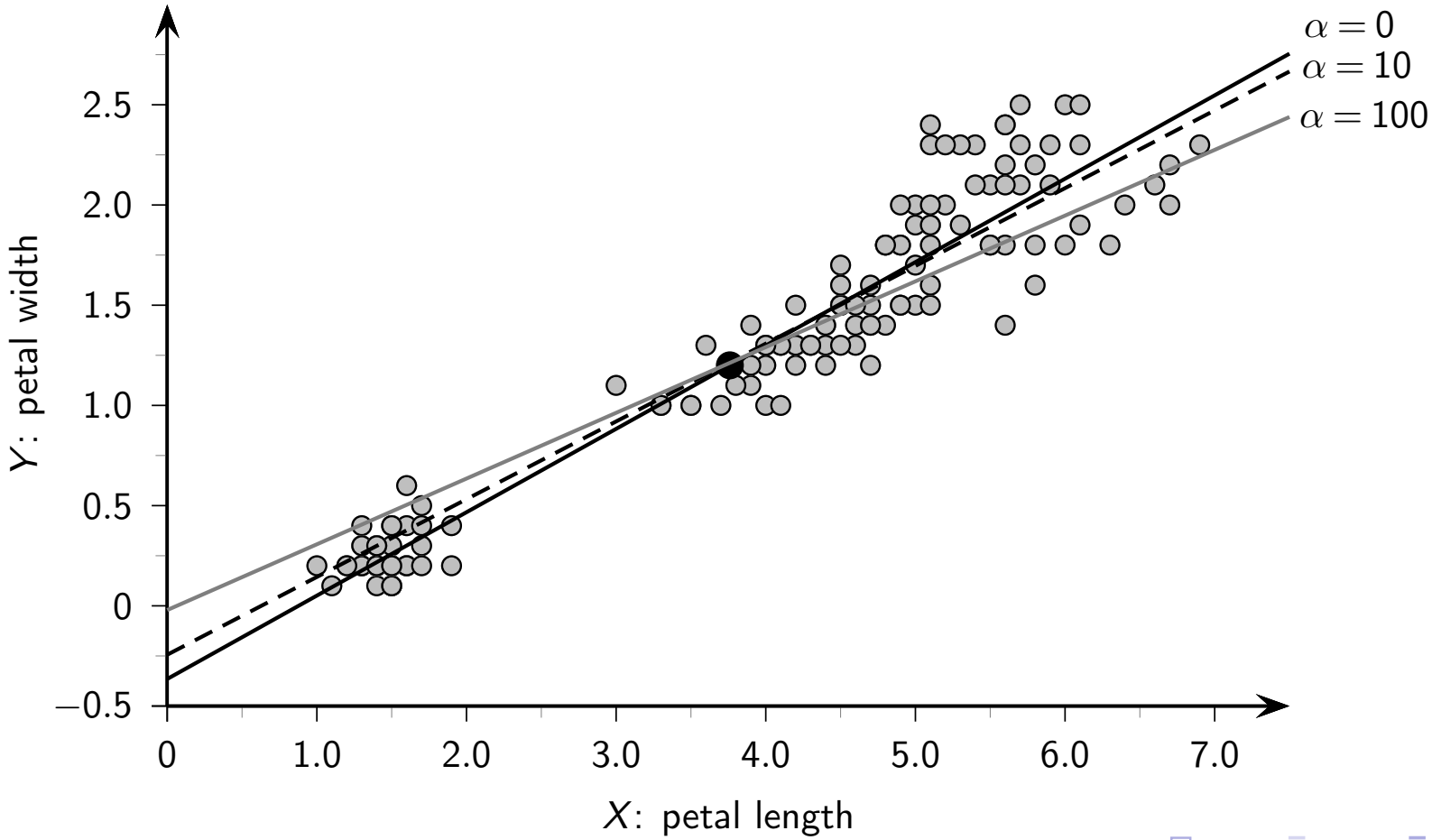
$$\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}} = \begin{pmatrix} 150.0 & 563.8 \\ 563.8 & 2583.0 \end{pmatrix}$$

Получим различные линии наилучшего соответствия для различных значений параметра регуляризации α:

$$\alpha = 0 \Rightarrow \hat{y} = -0.367 + 0.416\,x,$$
$$\|\tilde{\mathbf{w}}\|^2 = \left\|(-0.367, 0.416)^T\right\|^2 = 0.308,\ SSE = 6.34$$
$$\alpha = 10 \Rightarrow \hat{y} = -0.244 + 0.388\,x,$$
$$\|\tilde{\mathbf{w}}\|^2 = \left\|(-0.244, 0.388)^T\right\|^2 = 0.210,\ SSE = 6.75$$
$$\alpha = 100 \Rightarrow \hat{y} = -0.021 + 0.328\,x,$$
$$\|\tilde{\mathbf{w}}\|^2 = \left\|(-0.021, 0.328)^T\right\|^2 = 0.108,\ SSE = 9.97$$

Линии гребневой регрессии для набора Ирисы

По мере увеличения α больше внимания уделяется минимизации квадрата нормы $\tilde{\mathbf{w}}$. Поскольку с увеличением α роль слагаемого с $\|\tilde{\mathbf{w}}\|^2$ в минимизации увеличивается, соответствие модели данным обучающего набора уменьшается, что видно по увеличению значений ошибки SSE.



Гребневая регрессия при помощи SGD

Вместо обращения матрицы $\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}} + \alpha\,\mathbf{I}$, как это требуется в точном решении для гребневой регрессии, можно использовать алгоритм стохастического градиентного спуска. Градиент функции $J(\tilde{\mathbf{w}})$ по $\tilde{\mathbf{w}}$, умноженный для удобства на $\frac{1}{2}$, равен

$$\nabla_{\tilde{\mathbf{w}}} = \frac{\partial}{\partial\tilde{\mathbf{w}}} J(\tilde{\mathbf{w}}) = -\tilde{\mathbf{D}}^T\mathbf{Y} + \left(\tilde{\mathbf{D}}^T\tilde{\mathbf{D}}\right)\tilde{\mathbf{w}} + \alpha\,\tilde{\mathbf{w}}$$

Используя (пакетный) градиентный спуск, можно итеративно вычислить $\tilde{\mathbf{w}}$ следующим образом

$$\tilde{\mathbf{w}}^{(t+1)} = \tilde{\mathbf{w}}^{(t)} - \eta\,\nabla_{\tilde{\mathbf{w}}} = (1 - \eta\,\alpha)\,\tilde{\mathbf{w}}^{(t)} + \eta\,\tilde{\mathbf{D}}^T\left(\mathbf{Y} - \tilde{\mathbf{D}}\tilde{\mathbf{w}}^{(t)}\right)$$

В методе SGD вектор весов обновляется по одной (случайной) точке на каждой итерации:

$$\tilde{\mathbf{w}}^{(t+1)} = \tilde{\mathbf{w}}^{(t)} - \eta\,\nabla_{\tilde{\mathbf{w}}}(\tilde{\mathbf{x}}_k) = \left(1 - \frac{\eta\,\alpha}{n}\right)\tilde{\mathbf{w}}^{(t)} + \eta\,\left(y_k - \tilde{\mathbf{x}}_k\tilde{\mathbf{w}}^{(t)}\right)\,\tilde{\mathbf{x}}_k$$

Здесь константа регуляризации α масштабируется делением на n, так как исходное значение предназначалось для всех n точек набора данных $\mathbf{D}$.

Алгоритм гребневой регрессии при помощи SGD

Входными данными для алгоритма множественной гребневой регрессии при помощи SGD являются матрица входных данных $\mathbf{D}$, вектор откликов $\mathbf{Y}$ для точек набора $\mathbf{D}$, шаг обучения $\eta > 0$, требуемая точность $\varepsilon > 0$.

Ridge Regression: SGD $(\mathbf{D}, \mathbf{Y}, \eta, \varepsilon)$:

$\tilde{\mathbf{D}} \leftarrow \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{D} \end{pmatrix}$ // дополненные входные данные

$t \leftarrow 0$ // инициализация счетчика шагов/итераций

$\tilde{\mathbf{w}}^{(0)} \leftarrow$ случайный вектор в $\mathbb{R}^{d+1}$ // начальный вектор весов

repeat

  foreach $k = 1, 2, \cdots, n$ (в случайном порядке) do

    $\nabla_{\tilde{\mathbf{w}}}(\tilde{\mathbf{x}}_k) \leftarrow -(y_k - \tilde{\mathbf{x}}_k^T \tilde{\mathbf{w}}^{(t)}) \cdot \tilde{\mathbf{x}}_k + \frac{\alpha}{n} \tilde{\mathbf{w}}$ // градиент в точке $\tilde{\mathbf{x}}_k$

    $\tilde{\mathbf{w}}^{(t+1)} \leftarrow \tilde{\mathbf{w}}^{(t)} - \eta \cdot \nabla_{\tilde{\mathbf{w}}}(\tilde{\mathbf{x}}_k)$ // обновить оценку для весов

  $t \leftarrow t + 1$

until $\left\| \tilde{\mathbf{w}}^{(t)} - \tilde{\mathbf{w}}^{(t-1)} \right\| \leqslant \varepsilon$

Гребневая регрессия с SGD для набора Ирисы

Применим гребневую регрессию к набору данных Ирисы ($n = 150$), используя длину лепестка X (petal length) в качестве независимого признака и ширину лепестка Y (petal width) в качестве переменной отклика.

Используя SGD (с параметрами $\eta = 0.001$ и $\varepsilon = 0.0001$), получим уравнения гребневой регресии для разных значений константы регуляризации α:

$$\alpha = 0 \Rightarrow \hat{y} = -0.366 + 0.416\,x,\ SSE_{SGD} = 6.37,\ SSE_{Ridge} = 6.34$$

$$\alpha = 10 \Rightarrow \hat{y} = -0.244 + 0.387\,x,\ SSE_{SGD} = 6.76,\ SSE_{Ridge} = 6.38$$

$$\alpha = 100 \Rightarrow \hat{y} = -0.022 + 0.327\,x,\ SSE_{SGD} = 10.04,\ SSE_{Ridge} = 8.87$$

Полученные уравнения регрессии, в целом, соответствуют уравнениям гребневой регресии, полученным ранее точным способом.

Регрессия лассо (L_1)

Лассо (least absolute selection and shrinkage operator, lasso) – это метод регуляризации, направленный на обнуление части весов регрессии.

Сделаем допущение, что признаки $X_1, X_2, ..., X_d$ и отклик Y центрированы (будем использовать обозначения $\bar{\mathbf{D}}$ и $\bar{\mathbf{Y}}$). Центрирование освобождает нас от необходимости явного использования в регрессии коэффициента смещения $b = w_0$.

Регрессия лассо использует норму L_1 для регуляризации:

$$\min_{\mathbf{w}} J(\mathbf{w}),\ J(\mathbf{w}) = \frac{1}{2}\left\|\bar{\mathbf{Y}} - \bar{\mathbf{D}}\mathbf{w}\right\|^2 + \alpha\left\|\mathbf{w}\right\|_1,$$

где коэффициент $\alpha \geqslant 0$ – константа регуляризации и для вектора весов $\mathbf{w} = (w_1, w_2, ..., w_d)$

$$\left\|\mathbf{w}\right\|_1 = \sum_{i=1}^{d} |w_i|$$

Целевая функция в регрессии лассо (L_1)

Использование нормы L_1 приводит к разреженности вектора весов $\mathbf{w}$.

Гребневая регрессия L_2 уменьшает значения коэффициентов регрессии w_i, но они могут оставаться небольшими, но все же отличными от нуля.

Регрессия L_1 способна обнулять коэффициенты регрессии, что приводит к более интерпретируемой модели, особенно когда в наборе данных много признаков.

Целевая функция в регрессии лассо состоит из двух частей: функции квадрата ошибки $\left\|\bar{\mathbf{Y}} - \bar{\mathbf{D}}\mathbf{w}\right\|^2$, являющейся выпуклой и дифференцируемой, и функции штрафа L_1

$$\alpha \left\|\mathbf{w}\right\|_1 = \alpha \sum_{i=1}^{d} \left|w_i\right|,$$

которая является выпуклой, но недифференцируемой при $w_i = 0$.

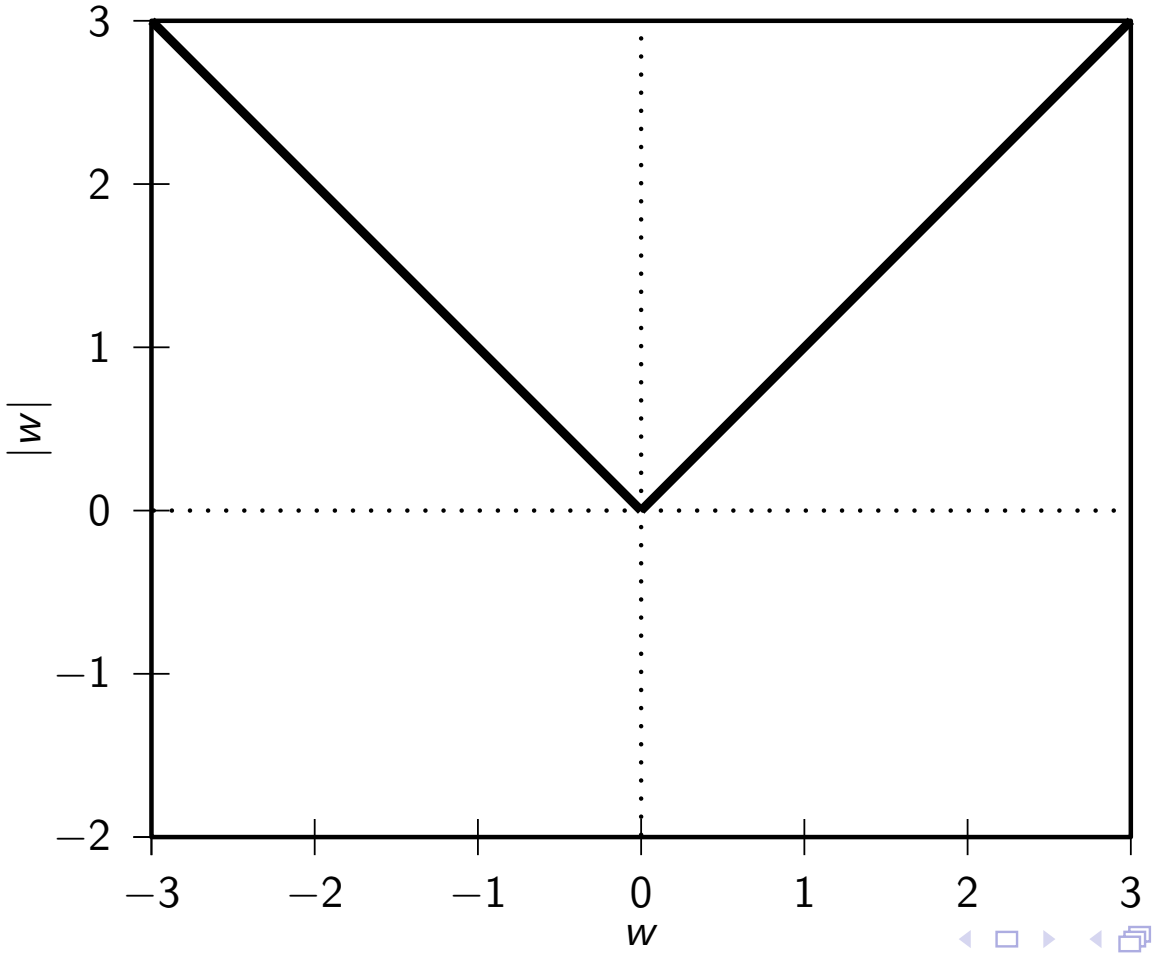
Поэтому мы не можем просто вычислить градиент и приравнять его к нулю, как это делается в случае гребневой регрессии. Задачу минимизации можно решить с помощью обобщенного подхода субградиентов.

Регрессия L_1: существование производной

Рассмотрим функцию абсолютного значения $f(w) = |w|$.

Когда $w > 0$, имеем $f'(w) = +1$, а когда $w < 0$, имеем $f'(w) = -1$.

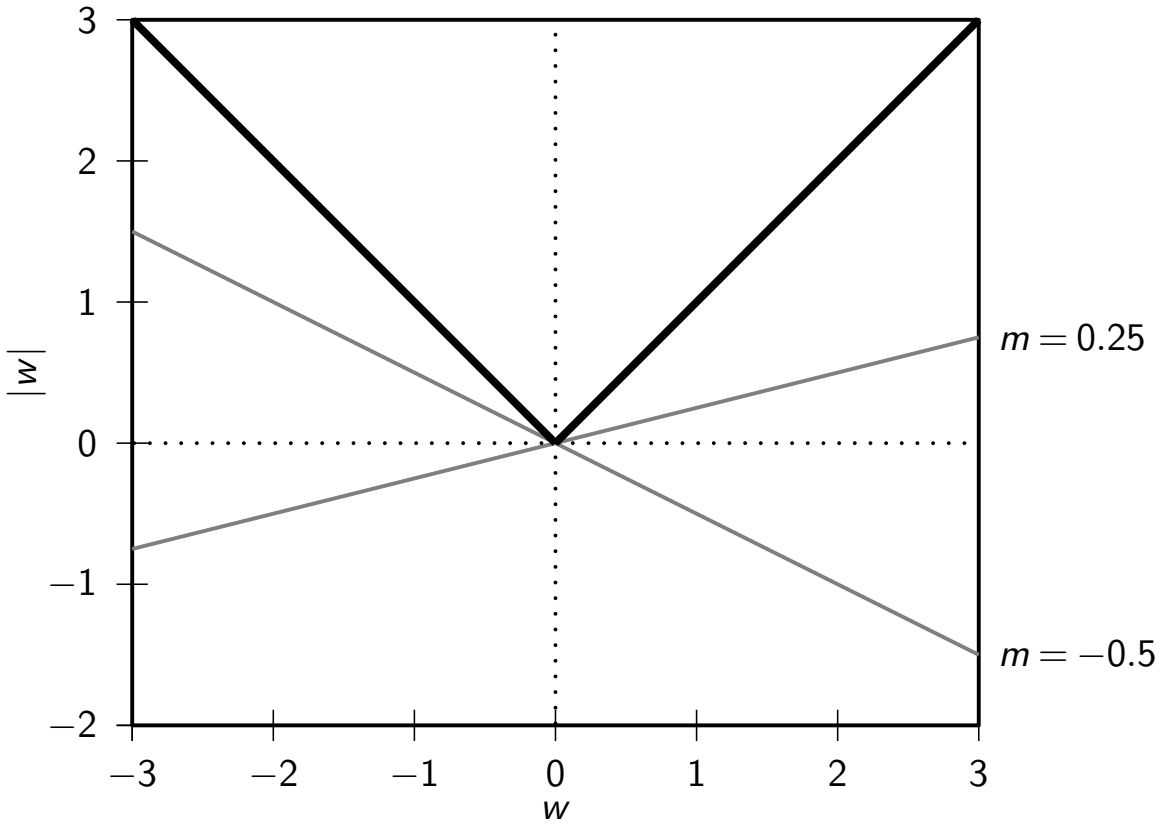
В точке $w = 0$ производная не существует.



Регрессия L_1: субградиенты

Субградиенты обобщают понятие производной.

Для функции $f(w) = |w|$ наклон m любой прямой, проходящей через точку $w = 0$ и остающей ниже или касающейся графика функции f, называется субградиентом функции f в точке $w = 0$.



Множество всех субградиентов функции $|w|$ называется субдифференциалом и обозначается как $\partial |w|$.

Субдифференциал функции $f(w) = |w|$ при $w = 0$ определяется формулой $\partial |w| = [-1, 1]$.

Рассматривая любые значения w, получим следующую формулу для субдифференциала функции $f(w) = |w|$:

$$\partial |w| = \begin{cases} +1, & w > 0 \\ -1, & w < 0 \\ [-1, 1], & w = 0 \end{cases}$$

Когда производная (градиент) функции существует, субдифференциал принимает единственное значение и равен значению производной (или градиенту). Когда производной не существует, субдифференциал соответствует набору субградиентов.

Субдифференциал в парной регрессии L_1

Рассмотрим парную регрессию L_1 с единственным независимым признаком $\bar{X}$ и откликом $\bar{Y}$ (оба признака центрированы). Тогда модель парной регрессии задается в виде

$$\hat{y}_i = w\, x_i.$$

Целевая функция регрессии лассо записывается в виде

$$J(w) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(y_i - w\, x_i)^2 + \alpha\ |w|\,.$$

Субдифференциал функции $J(w)$ вычисляется следующим образом:

$$\partial J(w) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} 2\,(y_i - w\, x_i)\,(-x_i) + \alpha\,\partial\,|w| =$$

$$= -\sum_{i=1}^{n} x_i y_i + w\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + \alpha\,\partial\,|w| = -\bar{\mathbf{X}}^T\bar{\mathbf{Y}} + w\left\|\bar{\mathbf{X}}\right\|^2 + \alpha\,\partial\,|w|$$

Определение весов в парной регрессии L_1

Приравняем субдифференциал $J(w)$ к нулю и получим

$$\partial J(w) = 0 \Rightarrow w \left\|\bar{\mathbf{X}}\right\|^2 + \alpha\, \partial |w| = \bar{\mathbf{X}}^T \bar{\mathbf{Y}} \Rightarrow w + \eta\, \alpha\, \partial |w| = \eta\, \bar{\mathbf{X}}^T \bar{\mathbf{Y}},\ \eta = \frac{1}{\left\|\bar{\mathbf{X}}\right\|^2}$$

В соответствии с тремя случаями для субдифференциала функции абсолютного значения $|w|$, нужно рассмотреть три случая:

1. $w > 0,\ \partial |w| = +1$:
$$w = \eta\, \bar{\mathbf{X}}^T \bar{\mathbf{Y}} - \eta\, \alpha$$
$$w > 0 \Rightarrow \eta\, \bar{\mathbf{X}}^T \bar{\mathbf{Y}} > \eta\, \alpha \Rightarrow \left|\eta\, \bar{\mathbf{X}}^T \bar{\mathbf{Y}}\right| > \eta\, \alpha$$
2. $w < 0,\ \partial |w| = -1$:
$$w = \eta\, \bar{\mathbf{X}}^T \bar{\mathbf{Y}} + \eta\, \alpha$$
$$w < 0 \Rightarrow \eta\, \bar{\mathbf{X}}^T \bar{\mathbf{Y}} < -\eta\, \alpha \Rightarrow \left|\eta\, \bar{\mathbf{X}}^T \bar{\mathbf{Y}}\right| > \eta\, \alpha$$
3. $w = 0,\ \partial |w| \in [-1, +1]$:
$$w \in \left[\eta\, \bar{\mathbf{X}}^T \bar{\mathbf{Y}} - \eta\, \alpha,\ \eta\, \bar{\mathbf{X}}^T \bar{\mathbf{Y}} + \eta\, \alpha\right]$$
$$w = 0 \Rightarrow \left|\eta\, \bar{\mathbf{X}}^T \bar{\mathbf{Y}}\right| \leqslant \eta\, \alpha$$

Функция мягкого порога

Пусть $\tau \geqslant 0$ – некоторое фиксированное значение. Определим функцию мягкого порога (soft-threshold function) $S_\tau : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ следующим образом:

$$S_\tau(z) = \operatorname{sign}(z) \max\{0, |z| - \tau\}$$

Тогда указанные выше три случая можно компактно записать как:

$$w = S_{\eta\,\alpha}\left(\eta\,\bar{\mathbf{X}}^T\bar{\mathbf{Y}}\right),$$

где $\tau = \eta\,\alpha$. Таким образом, полученная формула задает оптимальное решение (вектор весов) задачи двумерной регрессии L_1 (лассо).

Алгоритм регрессии L_1 при помощи SGD

L_1-Regression $(\mathbf{D}, Y, \alpha, \eta, \varepsilon)$:

$\boldsymbol{\mu} \leftarrow mean(\mathbf{D}), \mu_Y \leftarrow mean(\mathbf{Y})$ // вычисляем средние значения

$\bar{\mathbf{D}} \leftarrow \mathbf{D} - \mathbf{1} \cdot \boldsymbol{\mu}^T$ // центрируем входные данные

$\bar{\mathbf{Y}} \leftarrow Y - \mu_Y \cdot \mathbf{1}$ // центрируем отклик

$t \leftarrow 0$ // счетчик шагов/итераций

$\mathbf{w}^{(0)} \leftarrow$ случайный вектор в $\mathbb{R}^d$ // начальный вектор весов

repeat

  foreach $k = 1, 2, \cdots, d$ do

    $\nabla(w_k^{(t)}) \leftarrow -\bar{X}_k^T(\bar{\mathbf{Y}} - \bar{\mathbf{D}}\,\mathbf{w}^{(t)})$ // вычисляем градиент

    $w_k^{(t+1)} \leftarrow w_k^{(t)} - \eta \cdot \nabla(w_k^{(t)})$ // обновить оценку весов

    $w_k^{(t+1)} \leftarrow \mathcal{S}_{\eta\cdot\alpha}\left(w_k^{(t+1)}\right)$ // функция мягкого порога

  $t \leftarrow t + 1$

until $\left\|\mathbf{w}^{(t)} - \mathbf{w}^{(t-1)}\right\| \leq \varepsilon$

$b \leftarrow \mu_Y - \left(\mathbf{w}^{(t)}\right)^T \mu$ // вычислить смещение

Регрессия L_1 для полного набора Ирисы

Применяем регрессию L_1 к полному набору данных Ирисы с $n = 150$ точками и четырьмя независимыми признаками, а именно шириной чашелистика X_1 (sepal-width), длиной чашелистника X_2 (sepal-length), шириной лепестка X_3 (petal-width) и длиной лепестка X_4 (petal-length).

Признак типа ириса содержит переменную отклика Y. Существует три типа ирисов, а именно Iris-setosa, Iris-versicolor и Iris-virginica, которые имеют коды 0, 1 и 2 соответственно.

Результаты регрессии L_1 для различных α и $\eta = 0.0001$ показаны ниже:

$$\alpha = 0 : \hat{y} = +0.19 - 0.11\,x_1 - 0.05\,x_2 + 0.23\,x_3 + 0.61\,x_4,\ SSE = 6.96,\ \|\mathbf{w}\|_1 = 0.44$$
$$\alpha = 1 : \hat{y} = -0.08 - 0.08\,x_1 - 0.02\,x_2 + 0.25\,x_3 + 0.52\,x_4,\ SSE = 7.09,\ \|\mathbf{w}\|_1 = 0.34$$
$$\alpha = 5 : \hat{y} = -0.55 + 0.00\,x_1 + 0.00\,x_2 + 0.36\,x_3 + 0.17\,x_4,\ SSE = 8.82,\ \|\mathbf{w}\|_1 = 0.16$$
$$\alpha = 10 : \hat{y} = -0.58 + 0.00\,x_1 + 0.00\,x_2 + 0.42\,x_3 + 0.00\,x_4,\ SSE = 10.15,\ \|\mathbf{w}\|_1 = 0.18$$

Обратите внимание на эффект обнуления некоторых весов для значений $\alpha = 5$ и $\alpha = 10$.

Отбор значимых признаков регрессией L_1

Построим и сравним коэффициенты регрессии L_2 (гребневая) и L_1 (лассо) с одинаковым уровнем квадратичной ошибки.

При $\alpha = 5$ модель регрессии L_1 имеет ошибку SSE $= 8.82$.

Установим значение параметра $\alpha = 35$ в регрессии L_2, что приведет к аналогичной ошибке SSE. Две модели имеют следующее представление:

$$L_1 : \hat{y} = -0.553 + 0.00\,x_1 + 0.00\,x_2 + 0.359\,x_3 + 0.17\,x_4,\ \|\mathbf{w}\|_1 = 0.156$$

$$L_2 : \hat{y} = -0.394 + 0.019\,x_1 - 0.051\,x_2 + 0.316\,x_3 + 0.212\,x_4,\ \|\mathbf{w}\|_1 = 0.598$$

В модели регрессии L_2 коэффициенты при x_1 и x_2 малы и, следовательно, менее важны, но они не равны нулю.

В модели регрессии L_1 коэффициенты для x_1 и x_2 в точности равны нулю, остаются только признаки x_3 и x_4.

Таким образом, регрессия L_1 (лассо) может осуществлять отбор значимых признаков.

Сравнение регрессии лассо и гребневой регрессии

Основное различие регрессии лассо (L_1) и гребневой регрессии (L_2) заключается в том, что регрессия L_1 может приводить к обнулению весов некоторых независимых переменных, тогда как регрессия L_2 уменьшает их до значений, близких к нулю.