732G57 Maskininlärning för statistiker

Föreläsning 2

Josef Wilzén
IDA, Linköping University, Sweden

Dagens föreläsning

- Modellval
- Klassificering: utvärdering
- Generaliserade linjära modeller
- Modellval för linjär regression

Modellval

- Vi söker en modell som **generaliserar** väl.
  - Med generalisering menas att den ska fungera bra på ny data.
- En flexibel (komplex) modell har lättare att överanpassa.
- Vad är ”komplexitet”?
  - Linjär modell: Antal variabler, interaktioner, transformationer etc
  - Splines: frihetsgrader
  - Neurala nätverk: Bredd och djup av modellen
  - Trädmodeller: Djupet/antal löv

Regularisering

Regularisering är ett sätt att motverka överanpassning.

- Idé att hindra modellen att bli för komplex.
- Ger förhoppningsvis bättre generaliseringsfel.
- **Mycket viktigt tema inom maskininlärning**
- Görs på olika sätt för olika modeller.

Idén är att

$$\text{Flexibel modell} + \text{regularisering} = \text{en bra modell}$$

Kommer prata mer om detta senare.

Regression och Klassificering

Två klassiska problem är regression och klassificering.

- Regression: Prediktera en variabel y, oftast y kontinuerlig. Bruset ε är:
  - Vanligast är normalfördelat.
  - Alternativt, t-fördelning, Gamma, Log-normal,...
  - Kan också vara disktet, Poisson, Negativ binomial,...
- Fördelningen ger felfunktionen.
- Klassificering: y är kategorisk med 2 eller flera utfall:
  - Binär: logistisk/probit regression
  - Fler klasser: Multinomial logistisk/probit regression
  - Kommer diskutera fler metoder senare
  - Hur skapar vi en felfunktion? Utvärdering?

Förväxlingsmatris

		Predikterad klass	
		Class = 1	Class = 0
Sann klass	Class = 1	f_{11}	f_{10}
	Class = 0	f_{01}	f_{00}

- Träffsäkerhet:

$$\mathrm{T} = \frac{f_{11} + f_{00}}{f_{11} + f_{10} + f_{01} + f_{00}}.$$

- Felkvot (error rate):

$$\mathrm{E} = \frac{f_{10} + f_{01}}{f_{11} + f_{10} + f_{01} + f_{00}}.$$

- Obalanserade klasser? Olika typer av fel är olika allvarliga?

Förväxlingsmatris

		Predikterad klass	
		Class = 1	Class = 0
Sann klass	Class = 1	f_{11}	f_{10}
	Class = 0	f_{01}	f_{00}

- Sensitivitet (recall, hit rate, true positive rate):

$$\text{TPR} = \frac{f_{11}}{f_{11} + f_{10}}.$$

- Specificitet (selectivity, true negative rate):

$$\text{TNR} = \frac{f_{00}}{f_{00} + f_{01}}.$$

- Beräknas klassvis.

F-score

- Precision (positive predictive value):

$$\text{PPV} = \frac{f_{11}}{f_{11} + f_{01}}.$$

- F-score är ett mått av träffsäkerhet baserat på precision och sensitivitet.

$$F_\beta = (1 + \beta^2)\frac{\text{PPV} \cdot \text{TPR}}{\beta^2 \cdot \text{PPV} + \text{TPR}}$$

- Vanligt med $\beta = 1$ vilket ger (harmoniska medelvärdet)

$$F_1 = 2\frac{\text{PPV} \cdot \text{TPR}}{\text{PPV} + \text{TPR}}$$

- F-score är mellan 0 och 1, högre är bättre.
- β säger hur du värderar precision och sensivitet.
- Beräknas klassvis.

Klassificering - utvärdering

- Vanligt att skatta modellen med en felfunktion (tex negativa loglikelihoodfunktionen/cross entropy loss) och sen utvärdera med andra mått (felkvot, sensitivitet, specificitet etc)
- Problemet och strukturen på data avgör vilka mått som är lämpliga
- Förväxlingsmatris - fler klasser, se separat dokument: kommer snart

Generaliserade linjära modeller

Antag att data $\mathbf{y} = y_1, y_2, \ldots, y_n$ är oberoende observationer från sannolikhetsfördelning från exponentialfamiljen.

Vi har en linjär prediktor $\mathbf{X}\beta$ samt en länkfunktion g som kopplar ihop prediktorn med medelvärdet μ genom

$$g(\mu) = \mathbf{X}\beta.$$

Tar "vanlig" linjär regression till andra typer av responsvariabler

- Kontinuerlig: Normal, t, gamma, log-normal
- Binär: Logistisk regression
- Nominell: Multinomiell logistisk regression
- Frekvensdata: Poissonregression, Negativ binomialregression

Generaliserade linjära modeller - Exempel

Linjär regression

- Likelihood: Normal
- Länkfunktion: identitetsfunktionen
- SKattas genom att minimera:

$$\text{RSS} = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2$$

Generaliserade linjära modeller - Exempel

Logistisk regression

- Likelihood: Bernoulli (y kan vara 0 eller 1, $\mathbb{P}(y = 1) = p$)
- Länkfunktion: Logit,

$$g(\mu) = \log\left(\frac{\mu}{1-\mu}\right)$$

- Skattas med att maximera likelihoodfunktionen (MLE)

Modellval för linjära regression

Utgå ifrån: y kontinuerlig med normal likelihood.

Vi har ett antal förklarande variabler $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_p)$. Vill hitta parametrar/modell som ger minst generaliseringsfel.

Två alternativ:

- Alternativ 1: Välj ut en delmängd av variablerna.
  - Best subset, forward selection, backward selection
- Alternativ 2: Behåll alla variabler men begränsa parametrarna.
  - Regularisering, Ridge och Lasso.

Utvärderingsmått

Om vi har flera modeller, hur jämför vi dessa?

Två alternativ:

- Indirekt skatta testfelet
  - Utgå från träningsmängden
  - Försök att minska den bias som uppstår när vi inte använder all data.
- Direkt skatta testfelet
  - Valideringsdata
  - Korsvalidering

Indirekt skatta testfelet

MSE på träningsdatan underskattar "riktiga" MSE värdet, kan inte användas för att välja modell.

Idé: justera träningsfelet för att ta hänsyn till detta.

$$C_p = \frac{1}{n}(\text{RSS} + 2d\hat{\sigma}^2),$$

Litet C_p är bäst.

$$\text{adjusted } \text{R}^2 = 1 - \frac{\text{RSS}/(n-d-1)}{\text{TSS}/(n-1)},$$

där

$$\text{TSS} = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2.$$

Stort adjusted R^2 är bäst.

Indirekt skatta testfelet

Tre andra mått AIC, BIC och HQIC är baserade på MLE skattning ev modeller.

Låt $\log(\hat{L})$ vara log-likelihood för optimala parametervärden.

$$\begin{aligned} \text{AIC} &= 2d - 2\log(\hat{L}) \\ \text{BIC} &= d \cdot \log(n) - 2\log(\hat{L}) \\ \text{HQIC} &= d \cdot \log(\log(n)) - 2\log(\hat{L}) \end{aligned}$$

Lågt värde är bättre.

Indirekt skatta testfelet

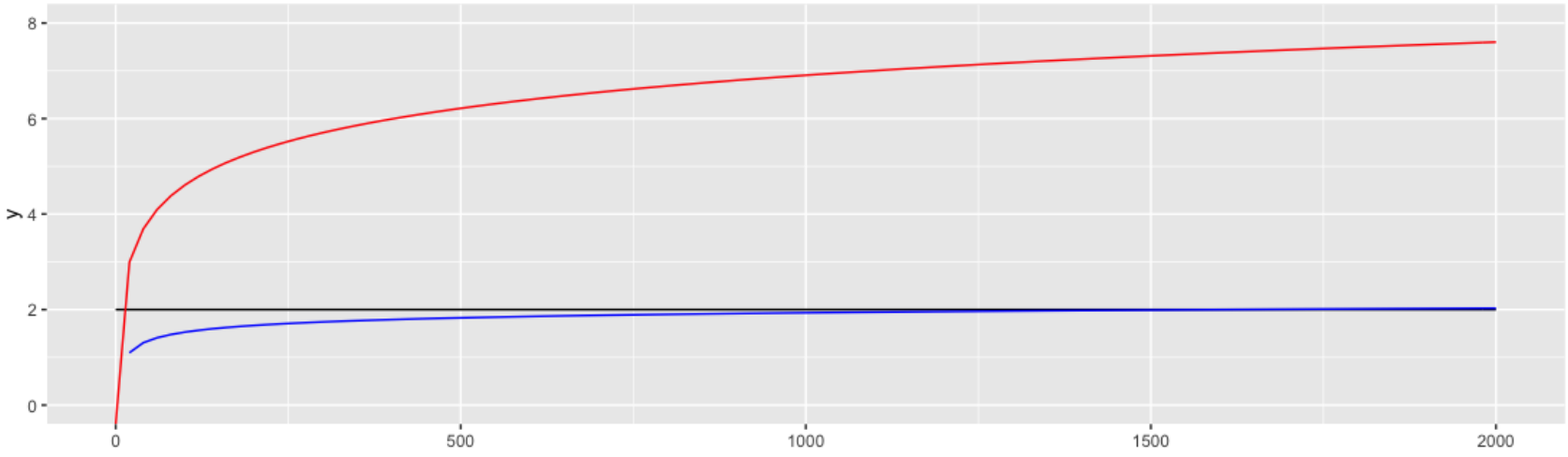
Linjär Regression

$$\text{AIC} = \frac{1}{n\hat{\sigma}^2}(\text{RSS} + 2d\hat{\sigma}^2)$$

$$\text{BIC} = \frac{1}{n\hat{\sigma}^2}(\text{RSS} + \log(n)d\hat{\sigma}^2)$$

$$\text{HQIC} = \frac{1}{n\hat{\sigma}^2}(\text{RSS} + \log(\log(n))d\hat{\sigma}^2)$$

För linjär regression är $C_p \propto \text{AIC}$.



Best subset selection

Algorithm 6.1 *Best subset selection*

1. Let $\mathcal{M}_0$ denote the *null model*, which contains no predictors. This model simply predicts the sample mean for each observation.
2. For $k = 1, 2, \ldots p$:
   (a) Fit all $\binom{p}{k}$ models that contain exactly k predictors.
   (b) Pick the best among these $\binom{p}{k}$ models, and call it $\mathcal{M}_k$. Here *best* is defined as having the smallest RSS, or equivalently largest R^2.
3. Select a single best model from among $\mathcal{M}_0, \ldots, \mathcal{M}_p$ using cross-validated prediction error, C_p (AIC), BIC, or adjusted R^2.

Bild från kursboken "An Introduction to Statistical Learning with Applications in R".

Forward selection

Algorithm 6.2 *Forward stepwise selection*

1. Let $\mathcal{M}_0$ denote the *null* model, which contains no predictors.
2. For $k = 0, \ldots, p-1$:
   (a) Consider all $p-k$ models that augment the predictors in $\mathcal{M}_k$ with one additional predictor.
   (b) Choose the *best* among these $p-k$ models, and call it $\mathcal{M}_{k+1}$. Here *best* is defined as having smallest RSS or highest R^2.
3. Select a single best model from among $\mathcal{M}_0, \ldots, \mathcal{M}_p$ using cross-validated prediction error, C_p (AIC), BIC, or adjusted R^2.

Bild från kursboken "An Introduction to Statistical Learning with Applications in R".

Backward selection

Algorithm 6.3 *Backward stepwise selection*

1. Let $\mathcal{M}_p$ denote the *full* model, which contains all p predictors.
2. For $k = p, p-1, \ldots, 1$:
   (a) Consider all k models that contain all but one of the predictors in $\mathcal{M}_k$, for a total of $k-1$ predictors.
   (b) Choose the *best* among these k models, and call it $\mathcal{M}_{k-1}$. Here *best* is defined as having smallest RSS or highest R^2.
3. Select a single best model from among $\mathcal{M}_0, \ldots, \mathcal{M}_p$ using cross-validated prediction error, C_p (AIC), BIC, or adjusted R^2.

Bild från kursboken "An Introduction to Statistical Learning with Applications in R".

Krympning (Shrinkage)

Idé: begränsa hur stora parametrarna får vara.

- Straffa stora parametrar
- Ändra deras värdemängd

Vanligaste metoderna:

- Ridge: l^2-norm
- Lasso: l^1-norm

Kom ihåg att standardisera era förklarande variabler först innan krympning!

Ridge Regression

I vanliga regression minimerar vi

$$f(\beta) = \text{RSS} = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2$$

I Ridge lägger vi till l^2-norm på β vilket ger

$$f_{\text{Ride}}(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2, \quad \lambda \geq 0.$$

λ är en **hyperparameter** som vi behöver sätta.

Notera att β_0 inte påverkas.

Ridge Regression

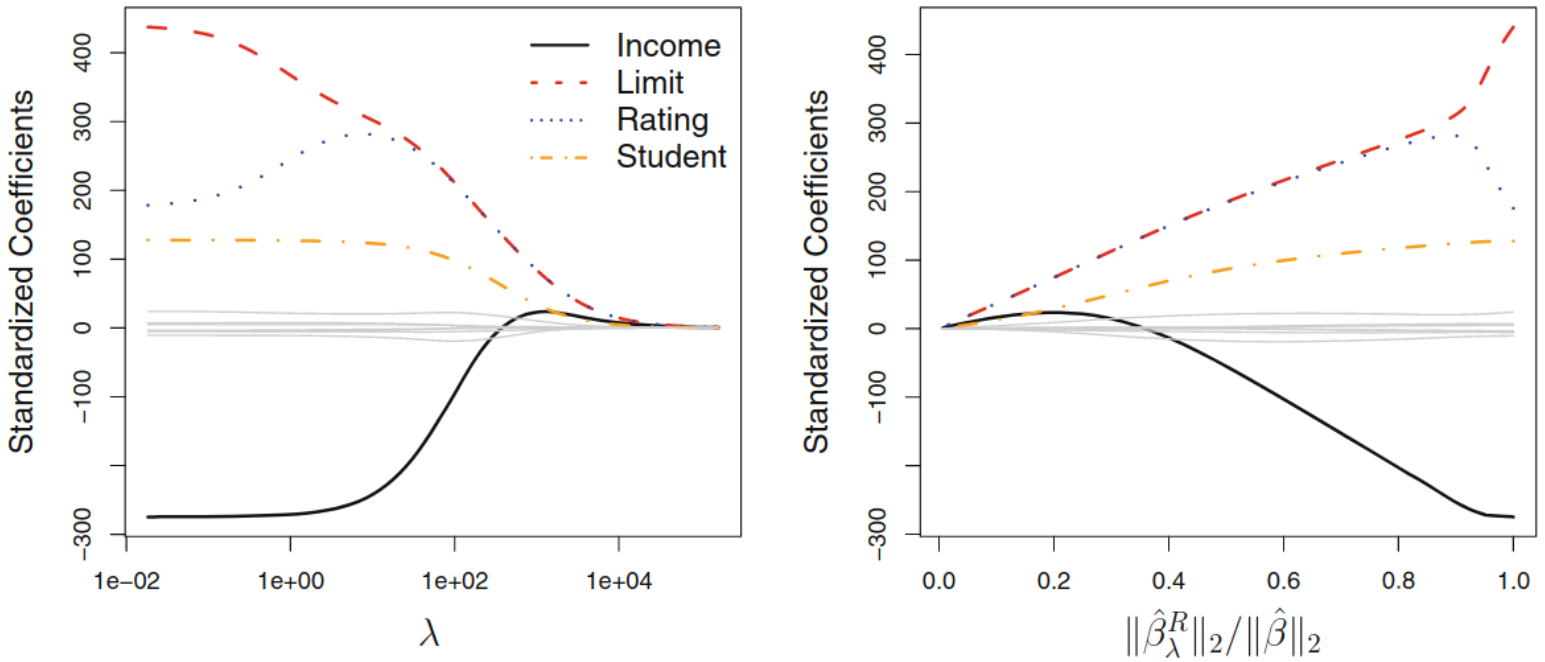


FIGURE 6.4. *The standardized ridge regression coefficients are displayed for the* `Credit` *data set, as a function of* λ *and* $\|\hat{\beta}^R_\lambda\|_2/\|\hat{\beta}\|_2$.

Lasso Regression

I vanliga regression minimerar vi

$$f(\beta) = \text{RSS} = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2$$

I Ridge lägger vi till l^1-norm på β vilket ger

$$f_{\text{Ride}}(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|, \quad \lambda \geq 0.$$

λ är en **hyperparameter** som vi behöver sätta.

Notera att β_0 inte påverkas.

Lasso Regression

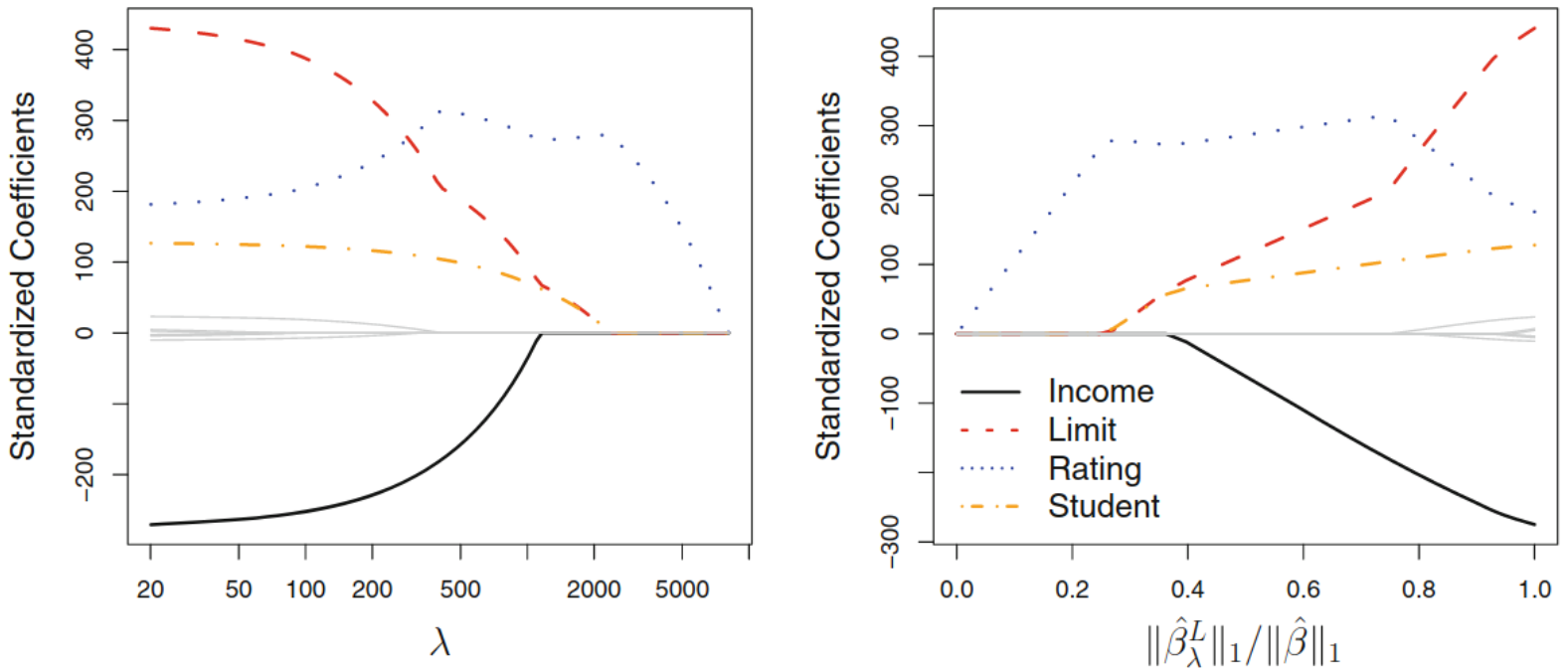


FIGURE 6.6. *The standardized lasso coefficients on the* `Credit` *data set are shown as a function of* λ *and* $\|\hat{\beta}_\lambda^L\|_1/\|\hat{\beta}\|_1$.

Ridge vs Lasso

	Ridge	Lasso
$\lambda \to 0$	$\hat{\beta}_{\text{Ridge}} \to \hat{\beta}_{\text{OLS}}$	$\hat{\beta}_{\text{Lasso}} \to \hat{\beta}_{\text{OLS}}$
$\lambda \to \infty$	$\hat{\beta}_{\text{Ridge}} \to 0$	$\hat{\beta}_{\text{Lasso}} \to 0$
Norm	l^2-norm	l^1-norm
Område	Hypersfär	Polytop
Parametrar	Krymper och ger många små β	Sätter många till 0
Korrelerade variabler	Krymper alla lika mycket	Sätter en till 0

Ridge vs Lasso

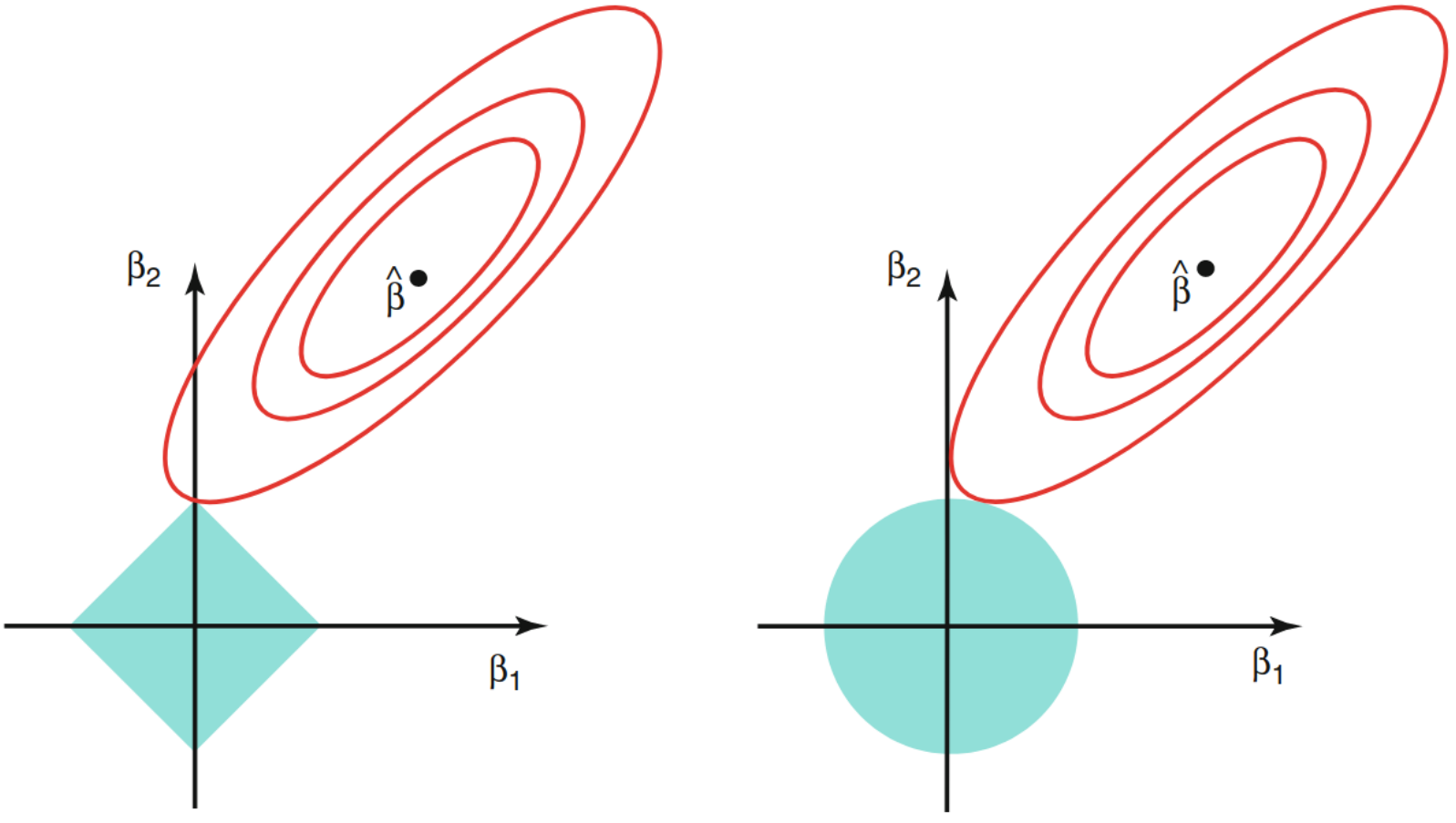


FIGURE 6.7. *Contours of the error and constraint functions for the lasso* (left) *and ridge regression* (right). *The solid blue areas are the constraint regions,* $|\beta_1| + |\beta_2| \leq s$ *and* $\beta_1^2 + \beta_2^2 \leq s$, *while the red ellipses are the contours of the RSS.*

Ridge vs Lasso

- I R, skattas enkelt med `glmnet()` eller `cv.glmnet()`.
- Vilken som är bäst beror på kontext.
- Ridge passar bra när y beror på de flesta variablerna.
  - Många variabler och ungefär samma effektstorlek.
- Lasso passar bra när y beror på bara några få variabler.
  - Fåtal variabler med hög effektstorlek, resten nära 0.
- Lasso kan vara lättare att tolka.
- Lättare att göra inferens på parameterarna i Ridge.
- Vilken man ska välja får ofta avgöras empiriskt för specifika dataset.
- Finns många utökningar och varianter.
- l^2-norm och l^1-norm används som regularisering inom många olika modeller inom maskininlärning

Adaptive-Lasso

- Låt varje parameter β_j ha sin egen vikt w_j

$$f(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} w_j |\beta_j|, \quad \lambda \geq 0.$$

- Välj vikter

$$w_j = |\hat{\beta}_{j,\text{start}}|^{-\gamma}$$

- Ofta väljs $\gamma = 1$.
- Behöver startvärde $\hat{\beta}_{j,\text{start}}$, kan använda OLS eller Ridge skattning.
- Stora startvärden ger små vikter vilket gör att parametern krymper mindre.
- Finns vissa teorestiska fördelar, men kräver extra skattning.

Elasticnet regression

- Kombinerar Ridge och Lasso.
- Ny hyperparameter α för att mixa dessa,

$$f(\beta) = \text{RSS} + \lambda \left((1-\alpha) \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2 + \alpha \sum_{j=1}^{p} |\beta_j| \right), \qquad \lambda \geq 0,\ 0 \leq \alpha \leq 1.$$

- λ är likt tidigare hur mycket regularisering vi gör.
- α väljer hur mycket vikt vid Ridge respektive Lasso.
- Kan tvinga vissa β till 0, men inte lika många som Lasso.
- Klarar av korrelerade/grupper av variabler bättre än Lasso.
- Nackdel är att vi har två hyperparametrar.

Adaptive Elasticnet regression

- Kombinerar Ridge, Lasso och vikter.
- Ny hyperparameter α för att mixa dessa,

$$f(\beta) = \text{RSS} + \lambda \sum_{j=1}^{p} w_j \left((1-\alpha)\frac{1}{2}\beta_j^2 + \alpha|\beta_j| \right), \qquad \lambda \geq 0,\ 0 \leq \alpha \leq 1.$$

- Välj vikter

$$w_j = |\hat{\beta}_{j,\text{start}}|^{-\gamma}$$

- Ofta väljs $\gamma = 1$.
- Behöver startvärde $\hat{\beta}_{j,\text{start}}$, kan använda OLS eller Ridge skattning.
- Två hyperparameterar: α och λ