732G57 Maskininlärning för statistiker

Föreläsning 3

Josef Wilzén
IDA, Linköping University, Sweden

Dagens föreläsning

- Variabelselektion och inferens
- Linjära och icke-linjära modeller
- Splines

Variabelselektion och inferens

- I linjär regression används ibland automatiska metoder för att välja variabler (t.ex. stegvis regression, LASSO).
- Efter variabelselektion är det vanligt att analysera p-värden och konfidensintervall för de valda variablerna $\rightarrow$ kallas **post-selection inference**
- **Problem:** Dessa inferenser antar att modellen är fördefinierad – men valet av variabler påverkar fördelningen av skattningarna.
- Detta leder till:
  - För snäva konfidensintervall
  - P-värden som är för små
  - Ökad risk för falska positiva resultat
- **Slutsats**: Standardinferens efter variabelselektion ska undvikas

Varför fungerar inte vanlig inferens efter variabelselektion?

- Klassisk inferens (t.ex. p-värden, konfidensintervall) bygger på att modellen är fixerad innan data analyseras.
- Vid variabelselektion används data för att välja modell – detta introducerar ett beroende mellan data och modellen.
- Parametrarna skattas i en modell som valts utifrån samma data $\rightarrow$ fördelningen av skattningarna ändras.
- Om vi bara rapporterar resultat för variabler som ”överlevde” selektionen, får vi en snedvriden bild.
- Detta kallas **selektionsbias** och leder till:
  - Överskattad signifikans
  - Underskattad osäkerhet
- Lösningar kräver att man tar hänsyn till selektionssteget i inferensen.

Metoder för att hantera post-selection inference

- För att få korrekt inferens efter variabelselektion krävs att selektionssteget tas med i beräkningen.
- Några vanliga metoder:
  - **Selective inference:** Justerar p-värden och konfidensintervall baserat på hur modellen valdes.
    - **Metoder från Tibshirani et al.:** R-paketet `selectiveInference` implementerar selektionsjusterad inferens för t.ex. LASSO, med exakta eller asymptotiska p-värden och konfidensintervall.
  - **Sample splitting:** Ena delen av datan används för selektion, den andra för inferens.
  - **Bayesianska metoder:** Inkluderar osäkerhet i modellvalet direkt i analysen.
- Ingen metod är perfekt – valet beror på syftet (prediktion vs inferens) och tillgång till data.

Linjära och icke-linjära modeller

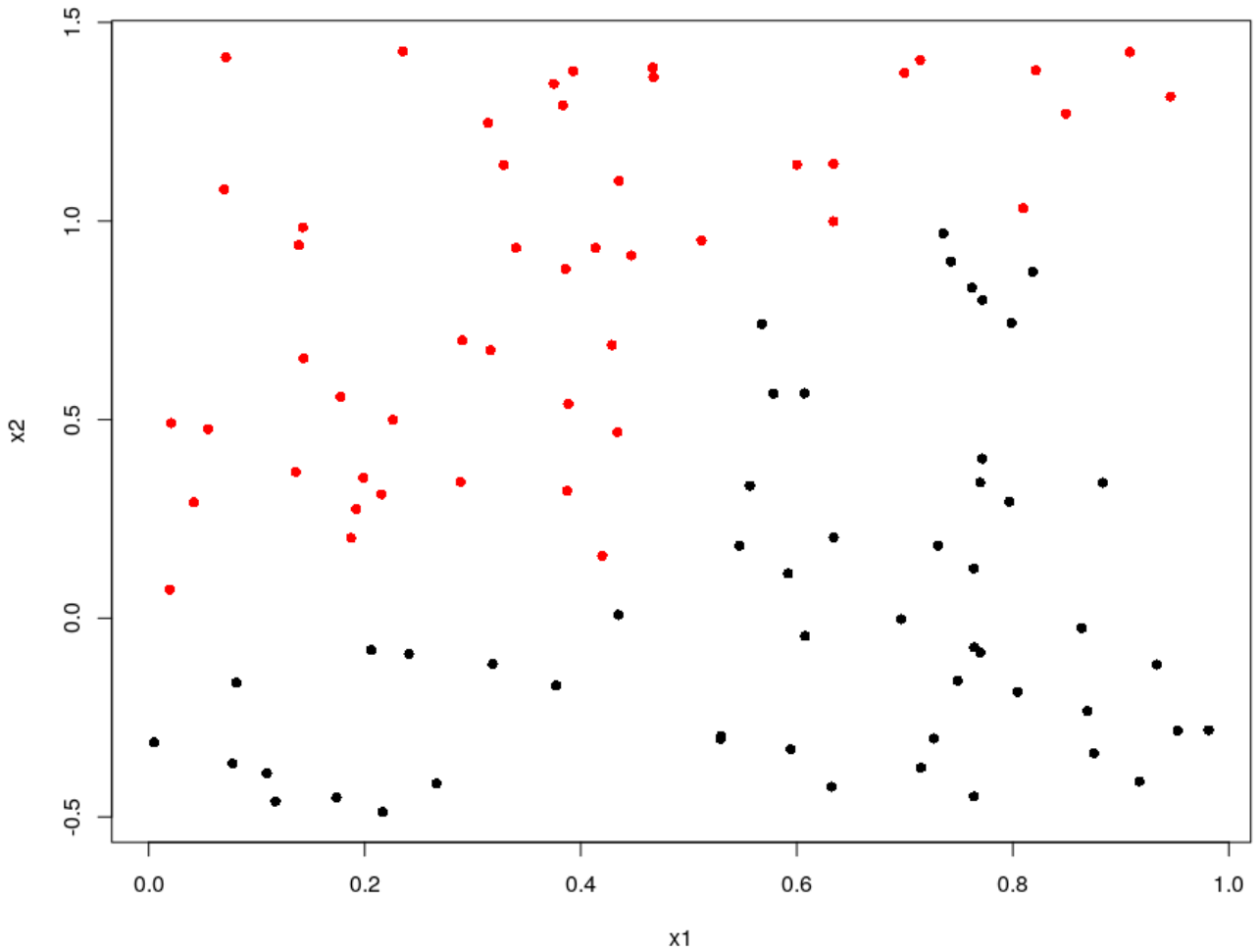
Inom både regression och klassificering har vi pratat om linjära modeller.

Exempel:

- Linjär regression
- Linjär logistisk regression

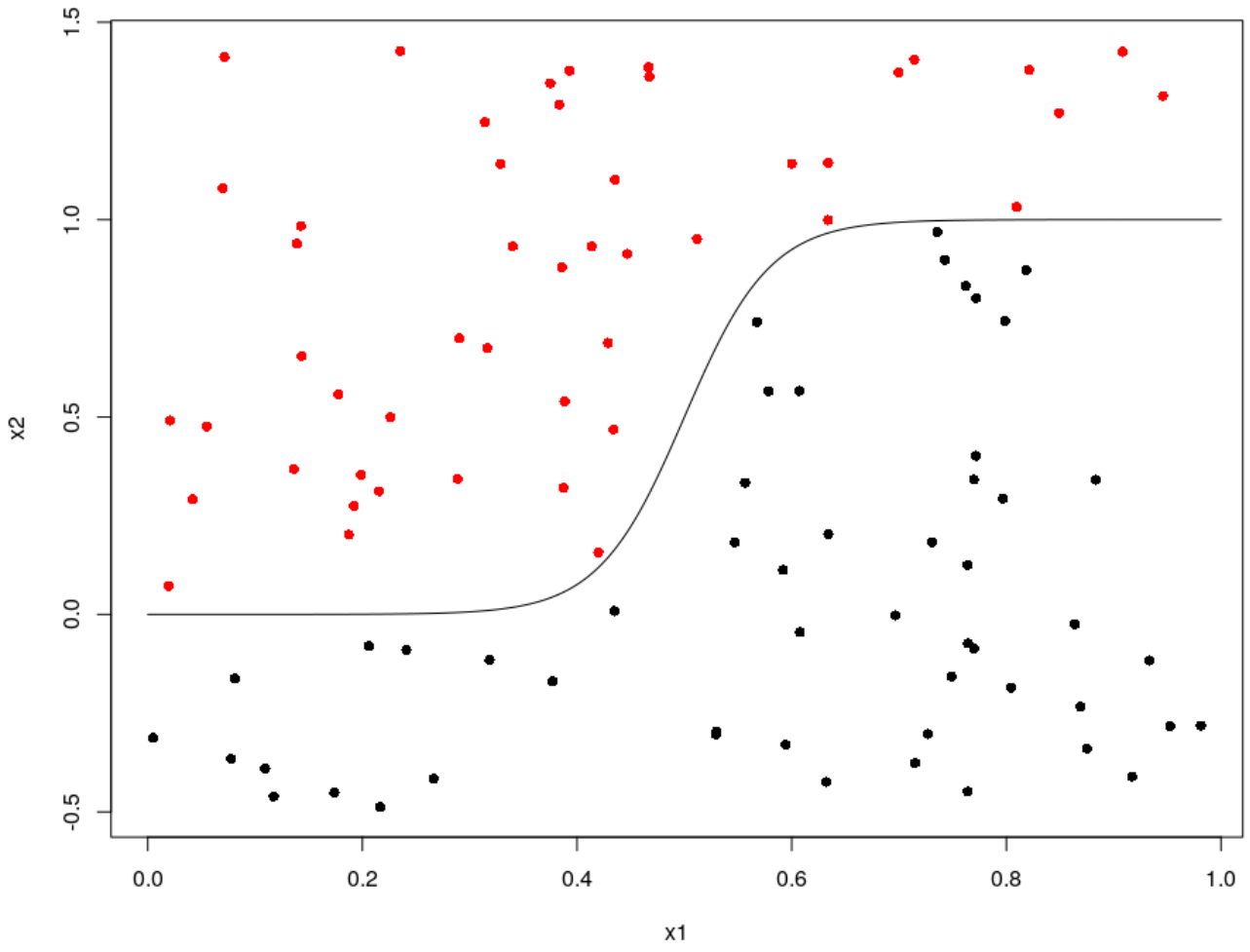
Lätta att skatta och tolka $\rightarrow$ Kan inte lösa alla problem.

Exempel klassificering



100 observationer, två förklarande variabler, binär respons.

Exempel - Klassificering



Sann beslutsregel: $x_2 \cdot (1 + \exp(-25 \cdot (x_1 - 0.5))) > 1$ Bästa linjära?

Icke-linjär regression

Vanlig linjär regression i en variabel:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i, \qquad \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2).$$

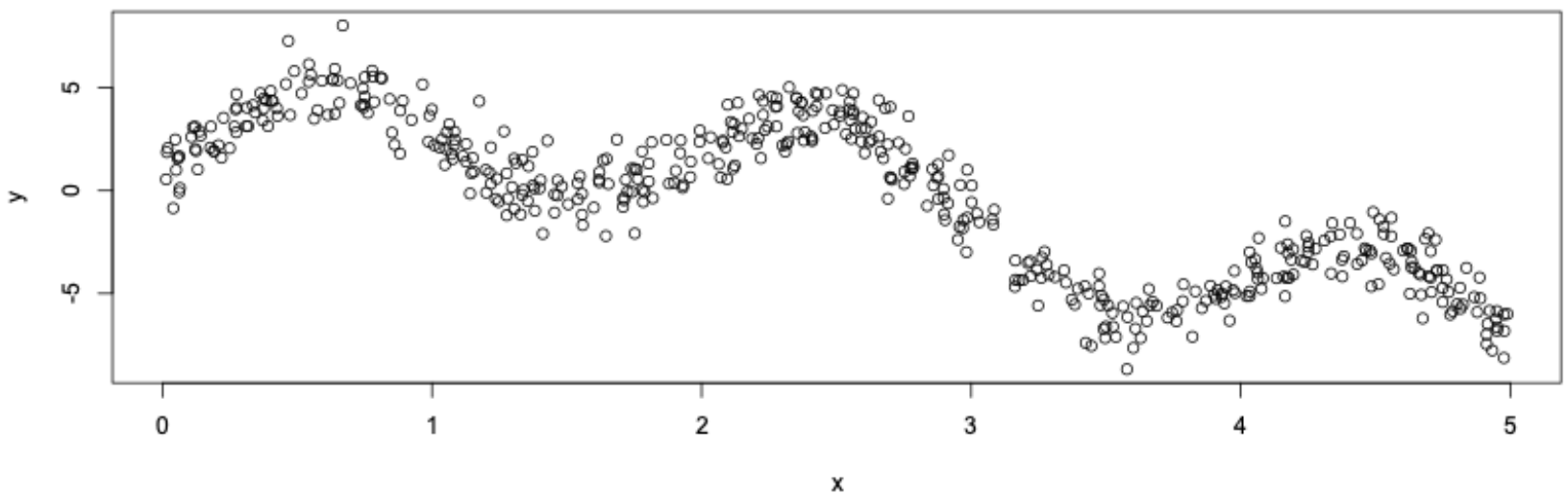
Vad gör vi om en linjär funktion inte passar till datan?

Icke-linjär regression

Vanlig linjär regression i en variabel:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i, \qquad \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2).$$

Vad gör vi om en linjär funktion inte passar till datan?

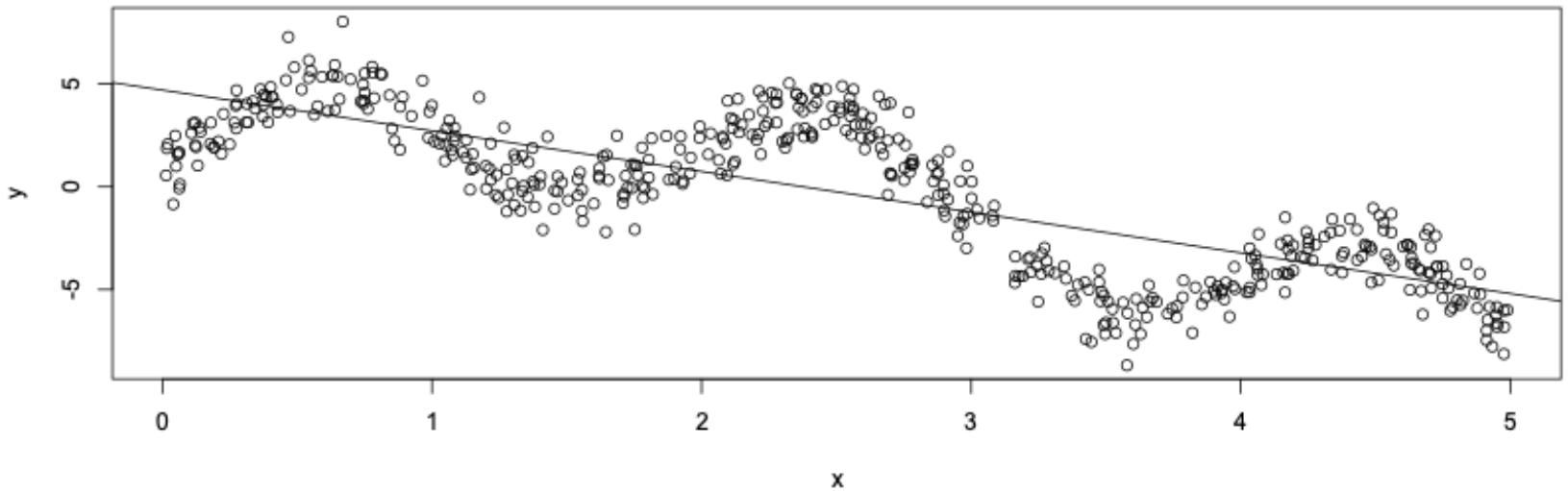


Icke-linjär regression

Vanlig linjär regression i en variabel:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i, \qquad \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2).$$

Vad gör vi om en linjär funktion inte passar till datan?



Polynomregression

Ett alternativ är att modellera som ett polynom,

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \ldots + \beta_p x_i^p + \varepsilon_i.$$

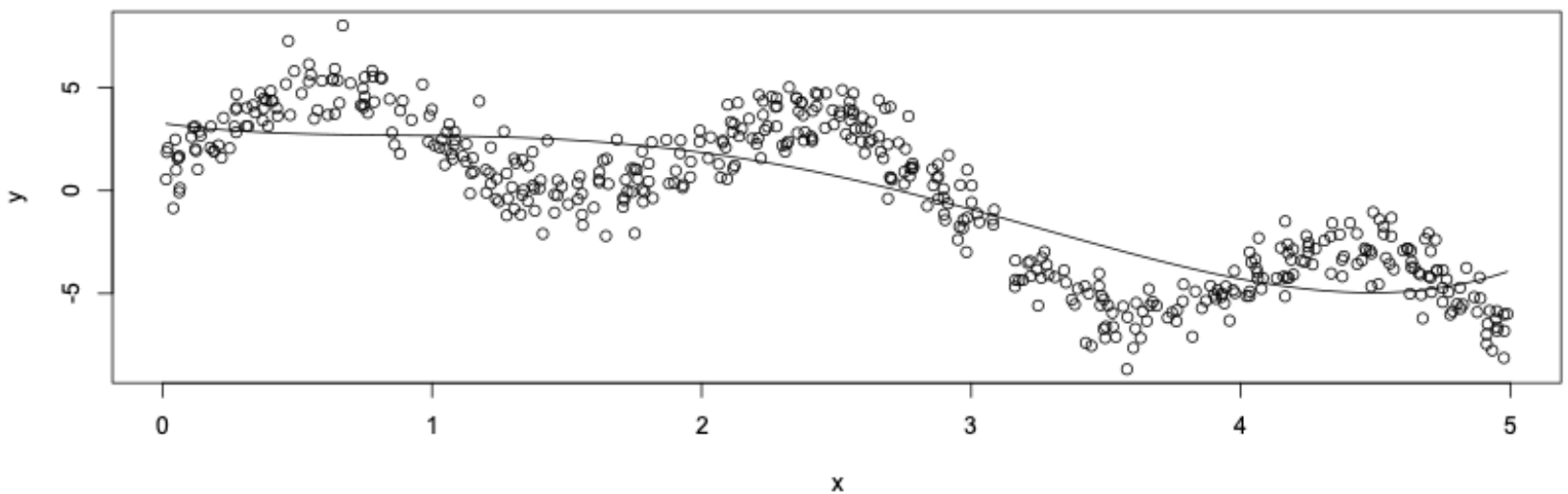
Men vilken ordning p ska vi ha?

Polynomregression

Ett alternativ är att modellera som ett polynom,

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \ldots + \beta_p x_i^p + \varepsilon_i.$$

Men vilken ordning p ska vi ha?

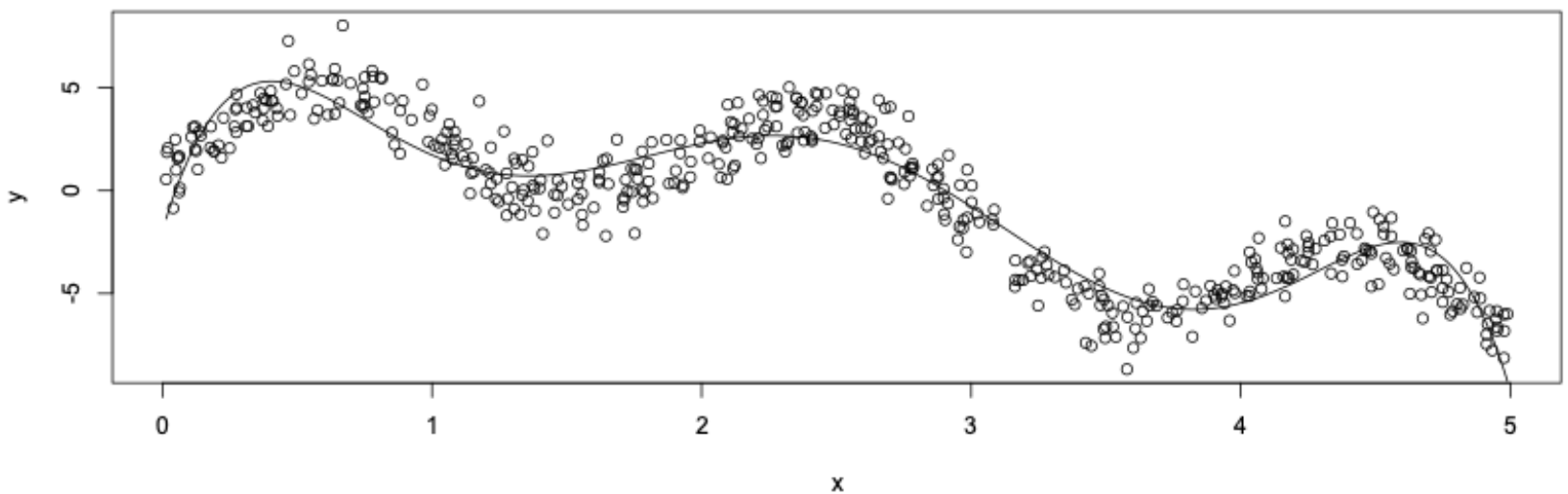


Polynomregression

Ett alternativ är att modellera som ett polynom,

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \ldots + \beta_p x_i^p + \varepsilon_i.$$

Men vilken ordning p ska vi ha?

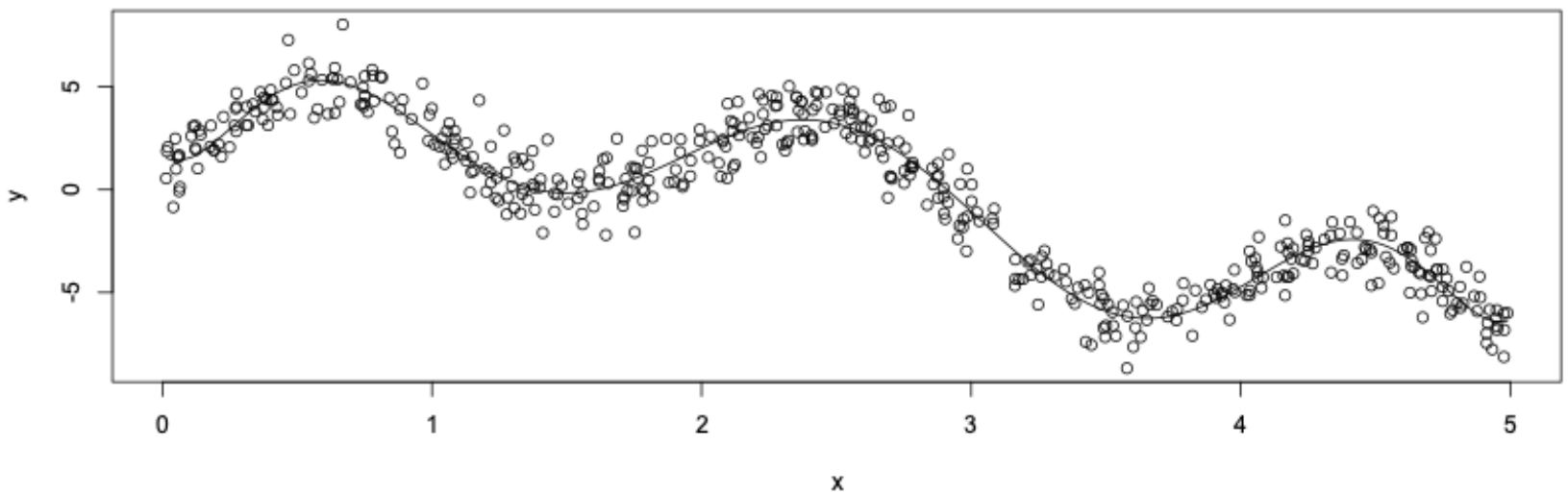


Polynomregression

Ett alternativ är att modellera som ett polynom,

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \ldots + \beta_p x_i^p + \varepsilon_i.$$

Men vilken ordning p ska vi ha?



Stegfunktion

Ett alternativ är att använda en steg-funktion, vi delar in x i ett antal regioner C_j:

$$y_i = \beta_1 \mathbb{I}(x_i \in C_1) + \beta_2 \mathbb{I}(x_i \in C_2) + \ldots + \beta_k \mathbb{I}(x_i \in C_k) + \varepsilon_i.$$

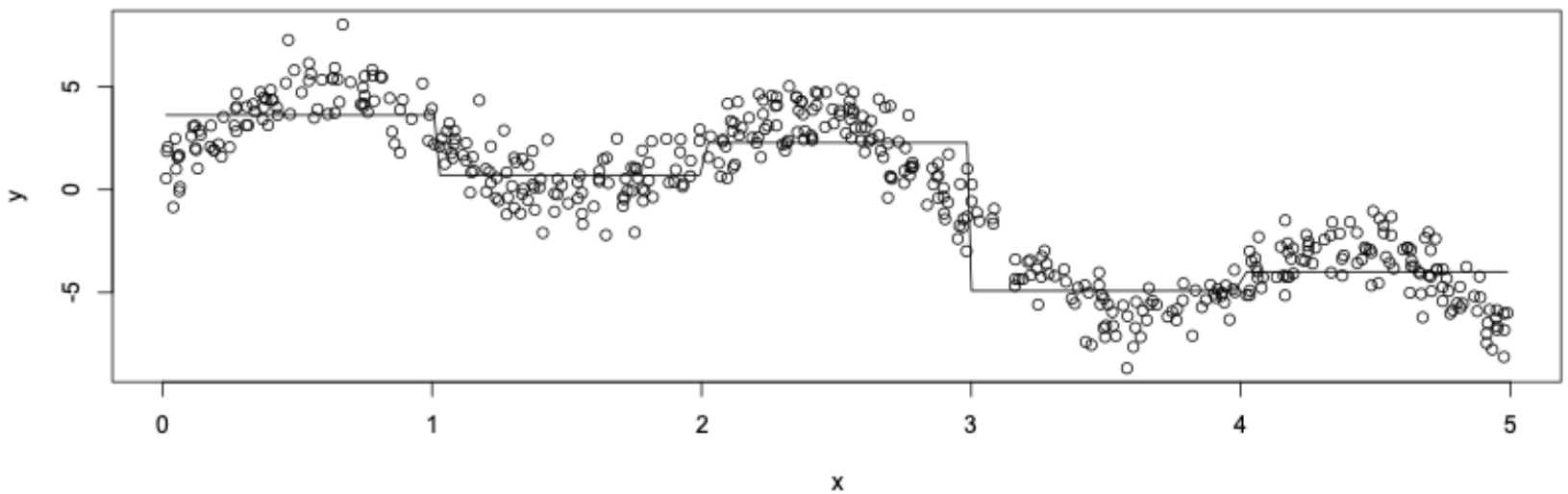
Vilka områden ska vi välja?

Stegfunktion

Ett alternativ är att använda en steg-funktion, vi delar in x i ett antal regioner C_j:

$$y_i = \beta_1 \mathbb{I}(x_i \in C_1) + \beta_2 \mathbb{I}(x_i \in C_2) + \ldots + \beta_k \mathbb{I}(x_i \in C_k) + \varepsilon_i.$$

Vilka områden ska vi välja?

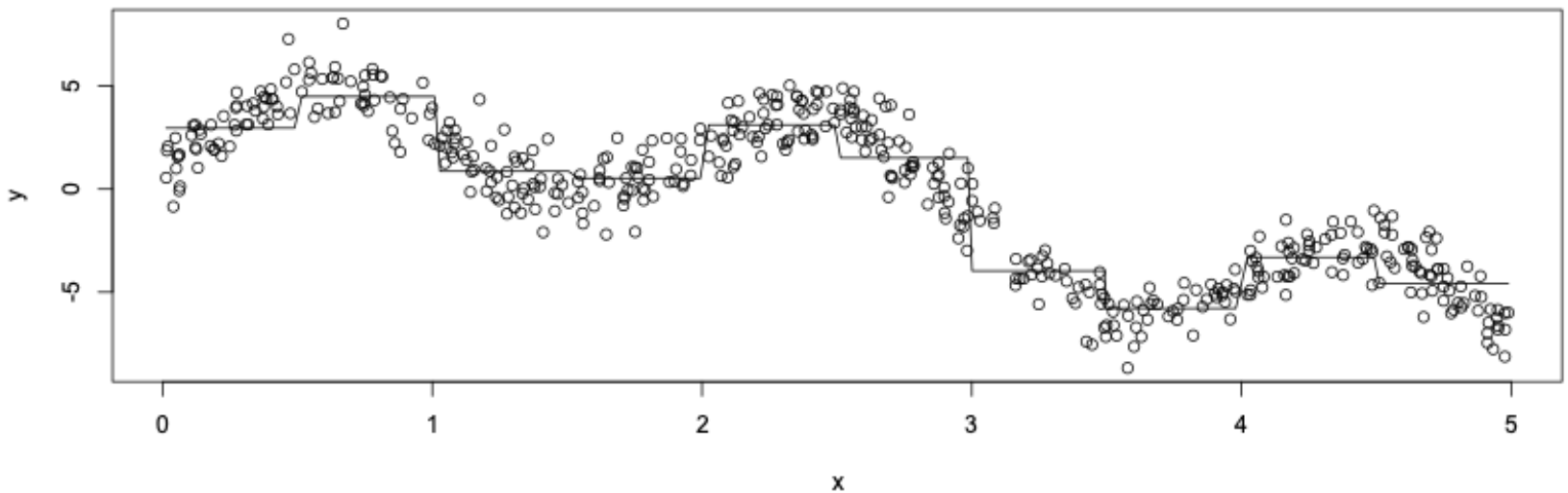


Stegfunktion

Ett alternativ är att använda en steg-funktion, vi delar in x i ett antal regioner C_j:

$$y_i = \beta_1 \mathbb{I}(x_i \in C_1) + \beta_2 \mathbb{I}(x_i \in C_2) + \ldots + \beta_k \mathbb{I}(x_i \in C_k) + \varepsilon_i.$$

Vilka områden ska vi välja?



Polynomregression och stegfunktioner

Fördelar:

- Generellt applicerbara.
- Enkelt att skala upp komplexiteten (fler polynom, fler områden).

Nackdelar:

- Svårt i högre dimensioner.
- Svårt att prediktera utanför data.
- Polynom av en hög ordning kan ofta vara ”instabila”
- Stegfunktioner: hur många och vilka områden ska väljas?

Basfunktioner

Gemensamt för dessa metoder är att de bygger på basfunktioner.

Givet ett gäng funktioner $(b_1(x), b_2(x), \ldots, b_k(x))$ kan vi göra regression som

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 b_1(x_i) + \beta_2 b_2(x_i) + \ldots + \beta_k b_k(x_i) + \varepsilon_i.$$

Observera att vi har ett linjärt problem (i basfunktionerna), vi kan enkelt skatta parametrarna β som i vanlig linjär regression, dvs med OLS (eller med Ridge/LASSO)

Basfunktioner

Basfunktioner kommer i många olika former:

- Polynom: $b_i(x) = x^i$.
- Stegfunktioner: $b_i(x) = \mathbb{I}(x \in C_i)$ där C_i är något intervall.
- Andra funktioner är också vanliga, t.ex. log, exp, sin, cos, osv.

Ett problem: Behöver ofta väldigt många basfunktioner för att väl anpassa data.

Leder ofta till överanpassning $\rightarrow$ vi behöver variabelselektion eller regularisering!

Consinusbaser

En annan variant av basfunktioner som kan modellera icke-linjära funktioner är cosinusbaser. De defineras som

$$x_{min} = min\,(x) \qquad x_{max} = max\,(x) \qquad L = x_{max} - x_{min}$$

$$g_h\,(x) = cos\left(\frac{\pi \cdot h \cdot (x - x_{min})}{L}\right) \qquad h = 1, 2, \ldots, H \qquad (1)$$

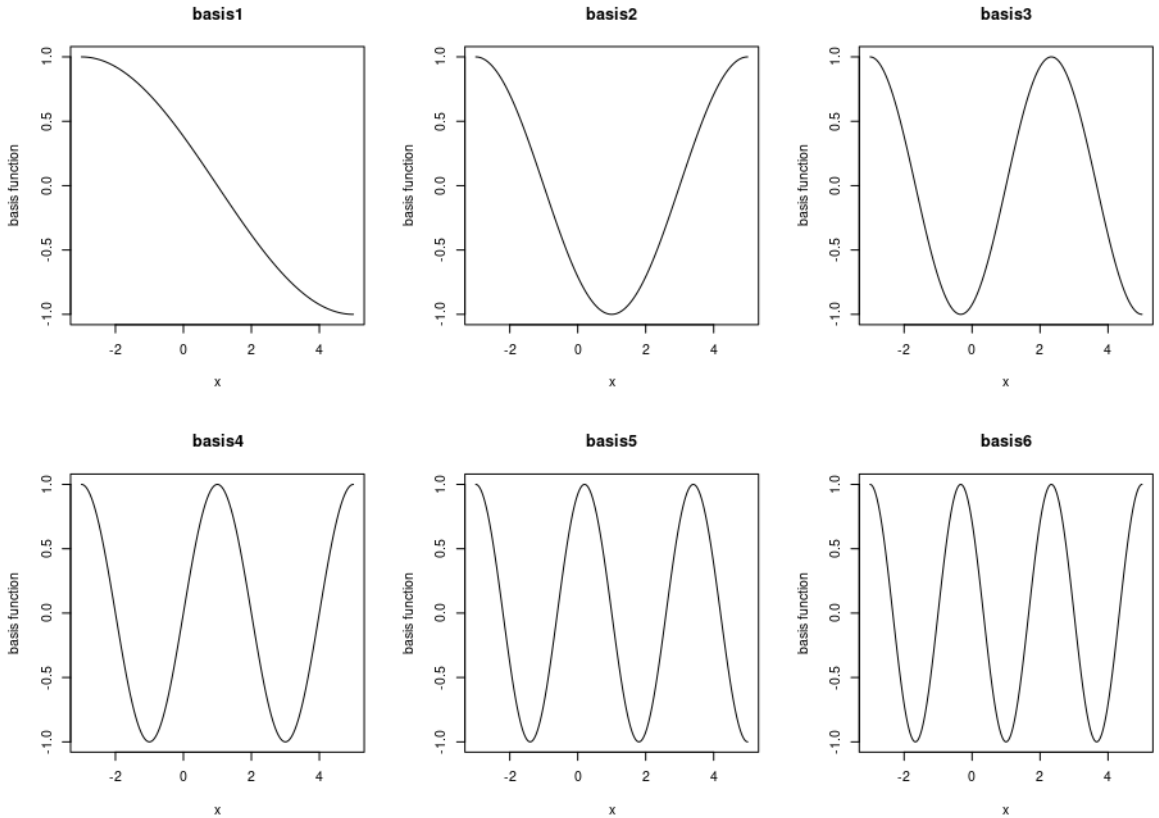
h är ordningen för basen, och H är den högsta ordningen. Vi kan likna h med graden i ett polynom.

Större H leder till en mer flexibel anpassning.

Consinusbaser - exempel

Låt x vara en numerisk variabel, och låt $x_{min} = -3$ och $x_{max} = 5$.

Nedan visas alla baser upp till $H = 6$



Exempel på anpassning med R-kod: länk

Stegvisa basfunktioner

Idé: Istället för att anpassa ett polynom (eller annan funktion) till hela datarymden. Anpassa en funktion per intervall.

Modellen blir då:

$$y_i = \begin{cases} h_0(x_i) + \varepsilon_i, & x_i \in C_0 \\ \vdots & \vdots \\ h_K(x_i) + \varepsilon_i, & x_i \in C_K, \end{cases}$$

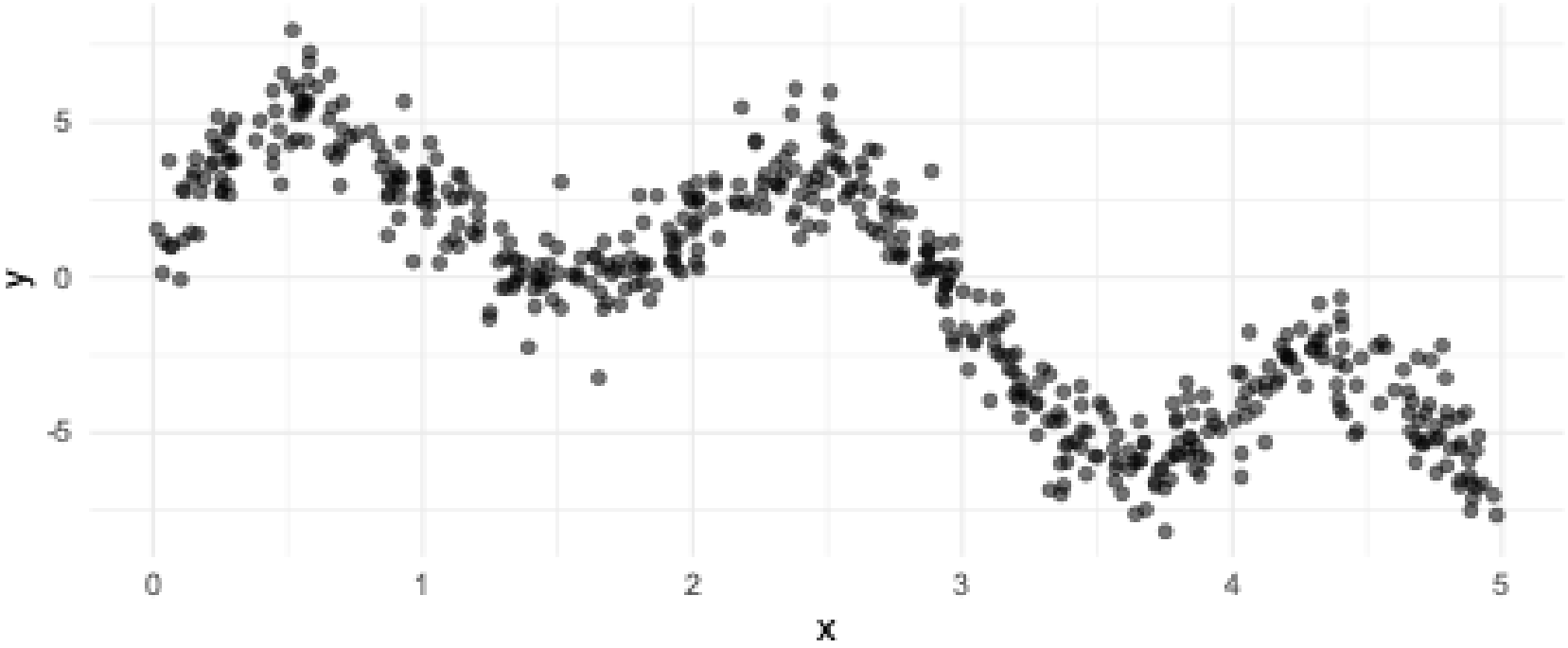
där varje funktion h_i ges av

$$h_i(x) = \beta_{0,i} + \beta_{1,i} b_1(x) + \ldots + \beta_{k,i} b_k(x).$$

Vi löser helt enkelt en massa "simpla" problem på olika intervall.

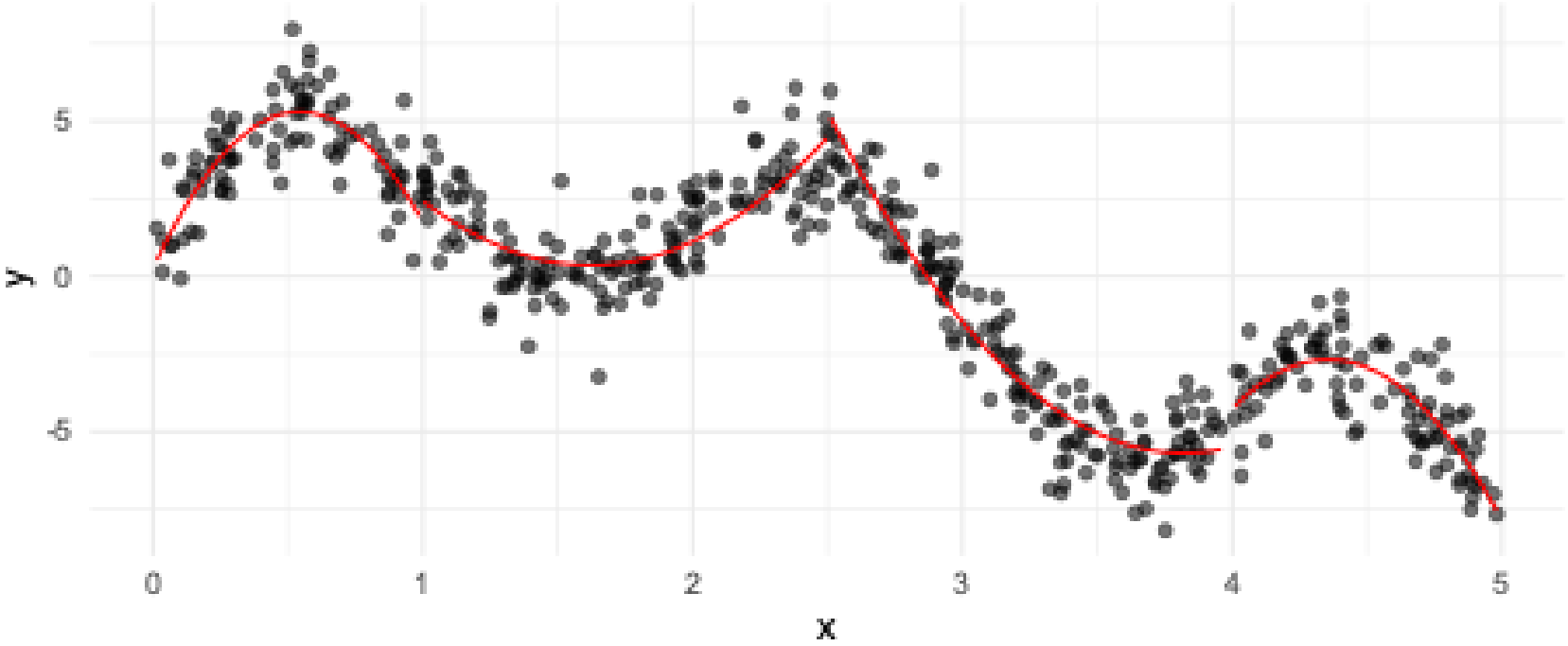
Stegvisa basfunktioner - Exempel

Vi delar upp data i fyra intervall. $x < 1$, $1 \leq x < 2.5$, $2.5 \leq x < 4$ och $4 \leq x$ och skattar en kvadratisk funktion i varje intervall.



Stegvisa basfunktioner - Exempel

Vi delar upp data i fyra intervall. $x < 1$, $1 \leq x < 2.5$, $2.5 \leq x < 4$ och $4 \leq x$ och skattar en kvadratisk funktion i varje intervall.



Regression Splines

Stegvis polynomregression som i exemplet innan är en form av Regression Splines.

Målet är att anpassa en stegvis polynomfunktion med begränsningar i skarvarna för att få kontinuitet, kontinuerliga derivator osv.

Termonologi:

knut (knot) : Antal brytpunkter som vi använder oss av.

frihetsgrader (degrees of freedom) : Antal parametrar som skattas.

trunkerad polynombas (truncated power basis) : en funktion $h(x, \xi)$ som ges av

$$h(x, \xi) = (x - \xi)_+^p = \begin{cases} (x - \xi)^p & \text{if } x > \xi, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Regression splines

Vårt mål: Skatta en stegvis polynomfunktion av grad-d under begränsningen att den ska vara kontinuerlig (kanske även kontinuerliga derivator).

Ett grad-d polynom regression med K knutar kan modelleras med basfunktioner som

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 b_1(x_i) + \beta_2 b_2(x_i) + \ldots + \beta_k b_k(x_i) + \varepsilon_i,$$

för ett lämpligt val av basfunktioner. Observera att $k \neq K$.

Regression splines - Basfunktioner

För att få till ett grad-d polynom med rätt egenskaper skapar vi en modell som

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \ldots \beta_d x_i^d + \beta_{d+1} h(x_i, \xi_1) + \beta_{d+2} h(x_i, \xi_2) + \ldots + \beta_{d+K} h(x_i \xi_K) + \varepsilon_i,$$

där $h(x, \xi) = (x - \xi)^d$.

Antal frihetsgrader:

- För ett grad-d polynom har vi $d + 1$ frihetsgrader.
- Med K knutar ($K + 1$ intervall) får vi $(K + 1) \cdot (d + 1)$ frihetsgrader.
- Regression splines ger $d + 1 + K$ frihetsgrader.

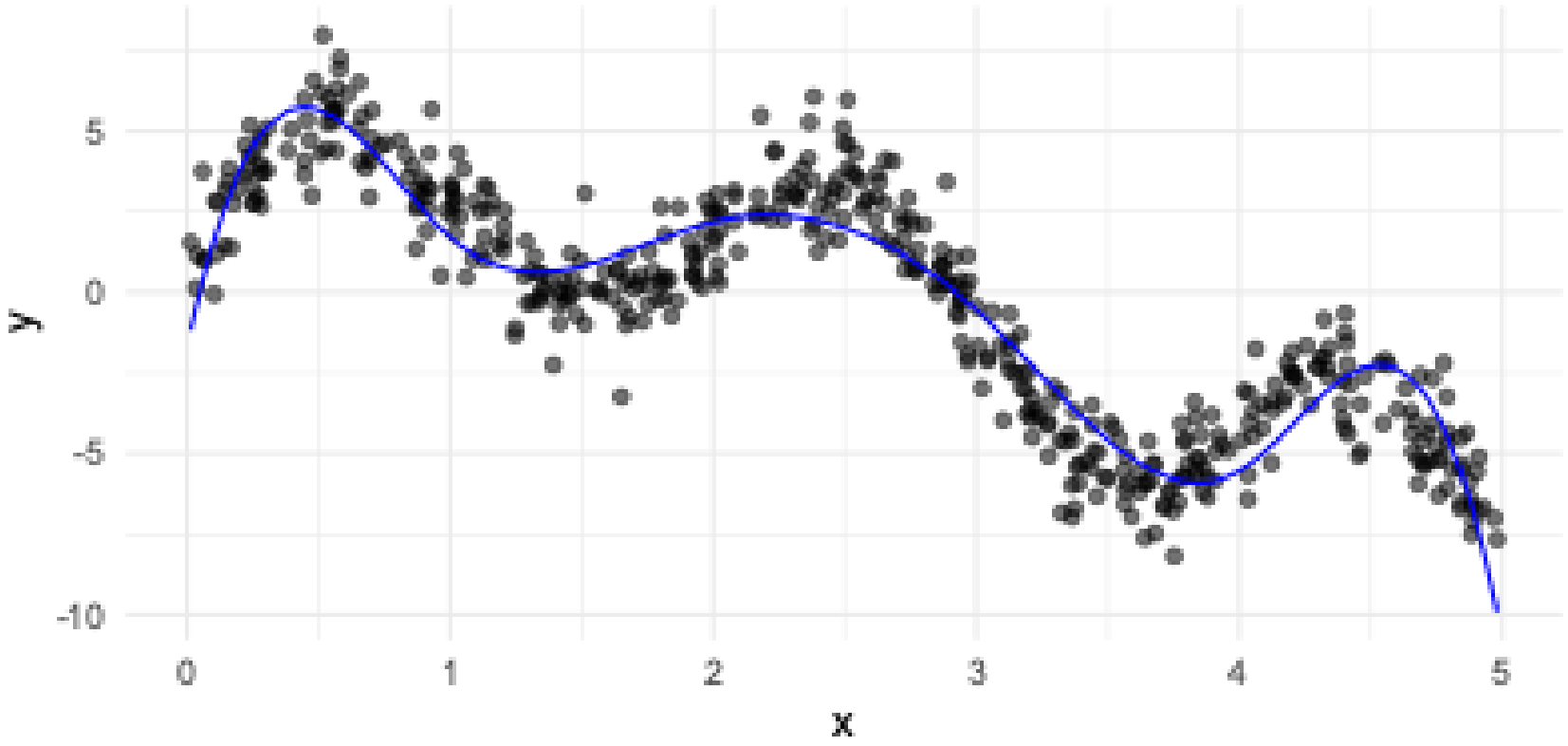
Regression splines - Sammanfattning

- Att dela upp och skatta oberoende polynom i varje intervall ger diskontinuerlig funktion.
- För varje begränsning (kontinuerlig, kontinuerliga derivator) minskar antalet frihetsgrader.
- Vilken grad ska vi välja?
  - Vanligt med kubiska polynom (grad-3).
- Hur välja antal knutar och deras placeringar?
- Skattningar utanför intervallet blir dåliga.

  Natural spline : Lägger till ett extra krav, att funktionen ska vara linjär i ändarna (innan första och efter sista knuten).
- Jämfört med vanlig polynomregression skulle vi behöva grad $d + k$ för samma antal frihetsgrader.

Natural Splines - Exempel

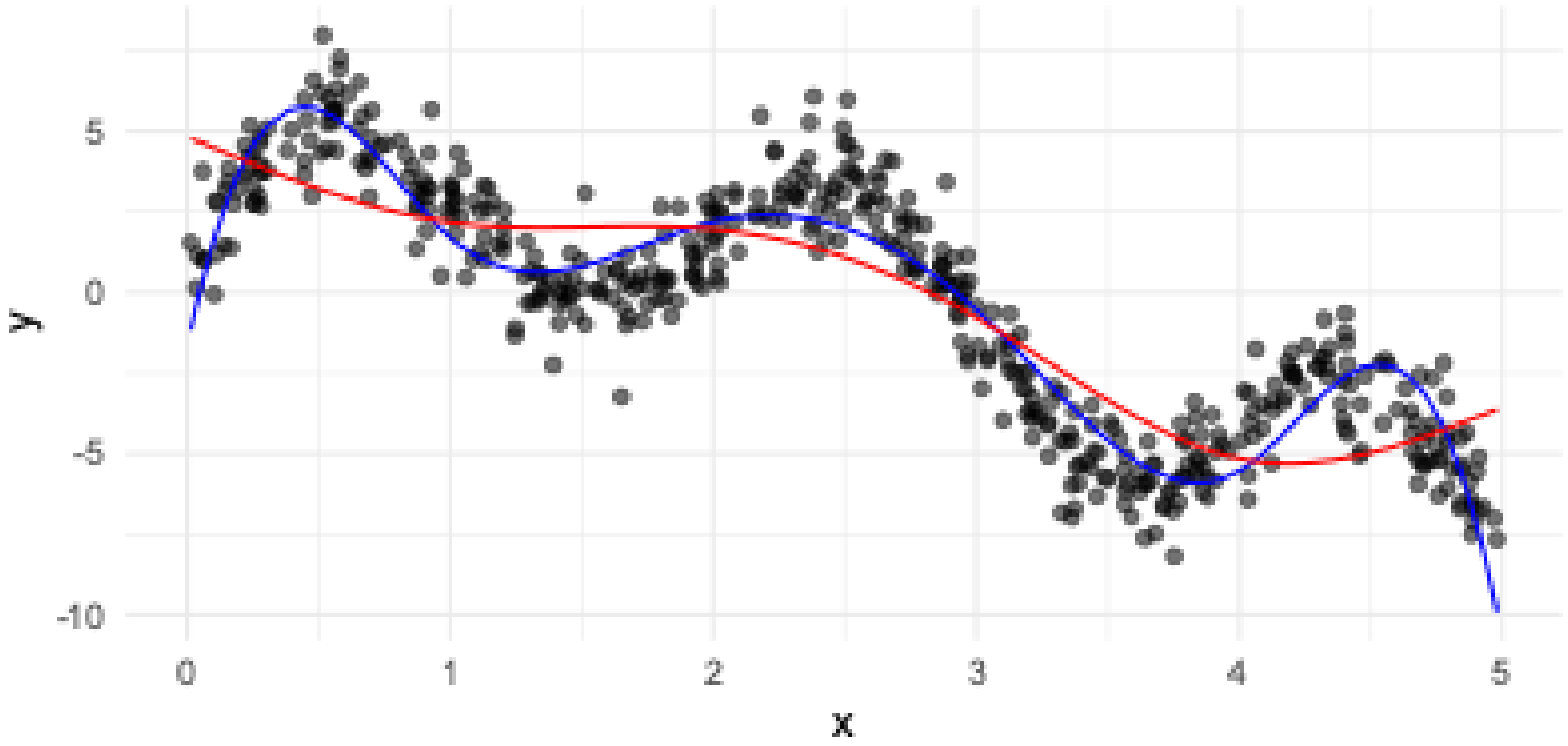
Vi modellerar med kubiska splines med knutar i $1, 2, 3$ och 4.



Natural Splines - Exempel

Vi modellerar med kubiska splines med knutar i $1, 2, 3$ och 4.

Lägger till Natural Splines med samma knutar.

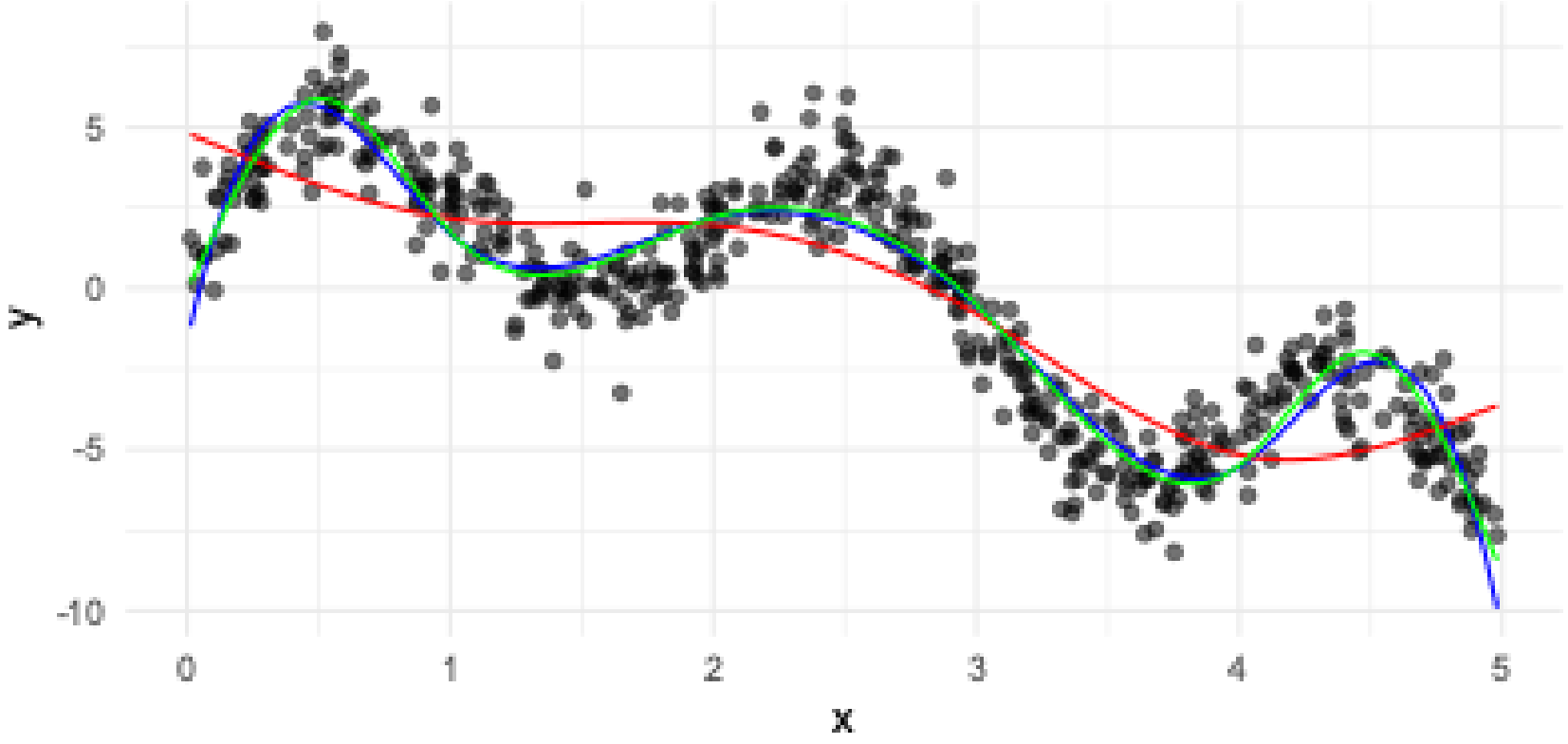


Natural Splines - Exempel

Vi modellerar med kubiska splines med knutar i $1, 2, 3$ och 4.

Lägger till Natural Splines med samma knutar.

Lägger till nya knutar i 0.5 och 4.5 och kör natural splines.

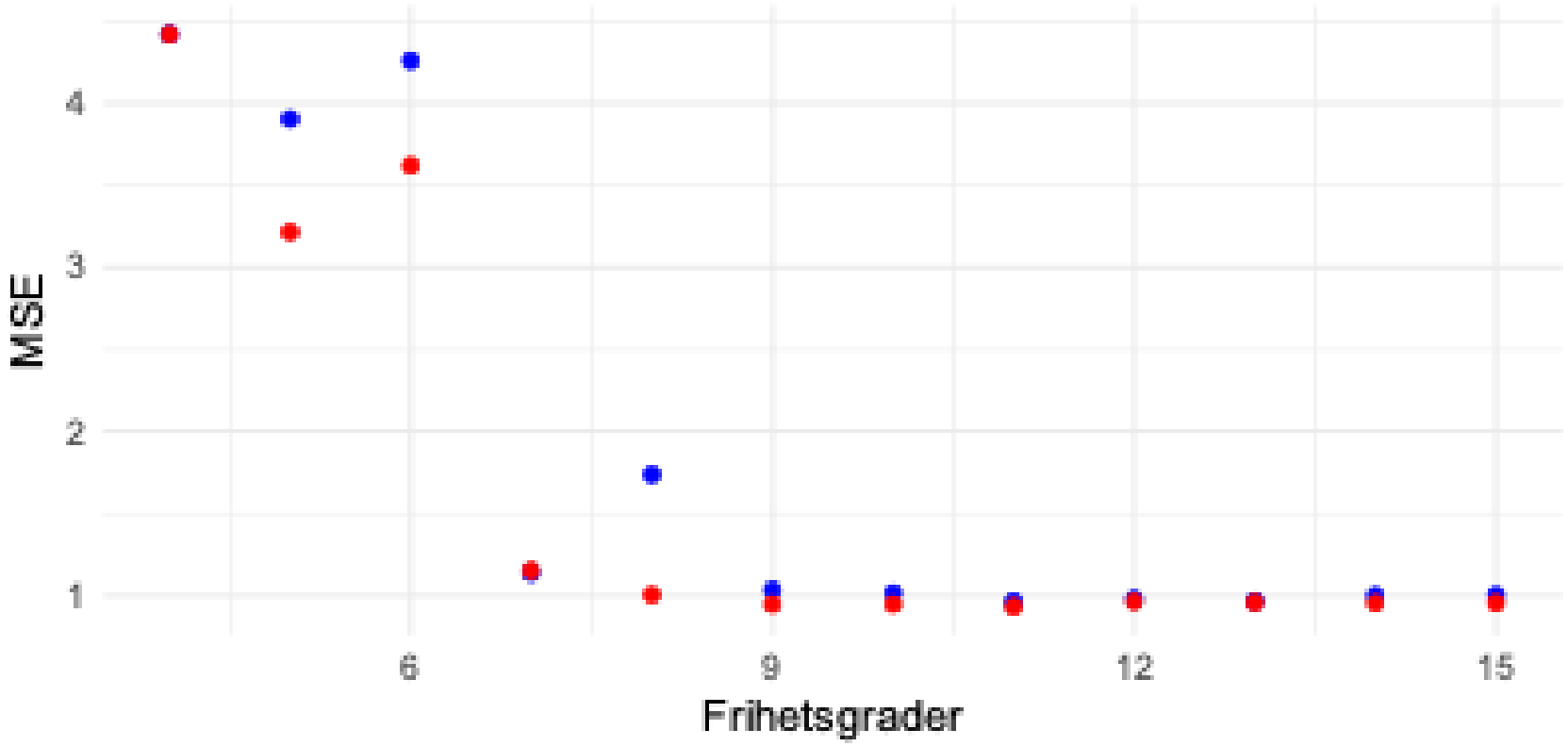


Antal knutar och deras placeringar

- Funktionen kommer ha mest flexibilitet vid knutarna.
  - Knutarna tillåter parametrarna att ändras.
  - Placera fler knutar där du tror att det behövs.
- Specificera antalet frihetsgrader och sprid ut knutarna jämnt.
  - Givet en förbestämd grad d så är antalet frihetsgrader $d + 1 + k$
  - Fler frihetsgrader ger fler knutar.
- Använd korsvalidering för att bestämma antalet.

Antalet knutar och deras placeringar - Exempel

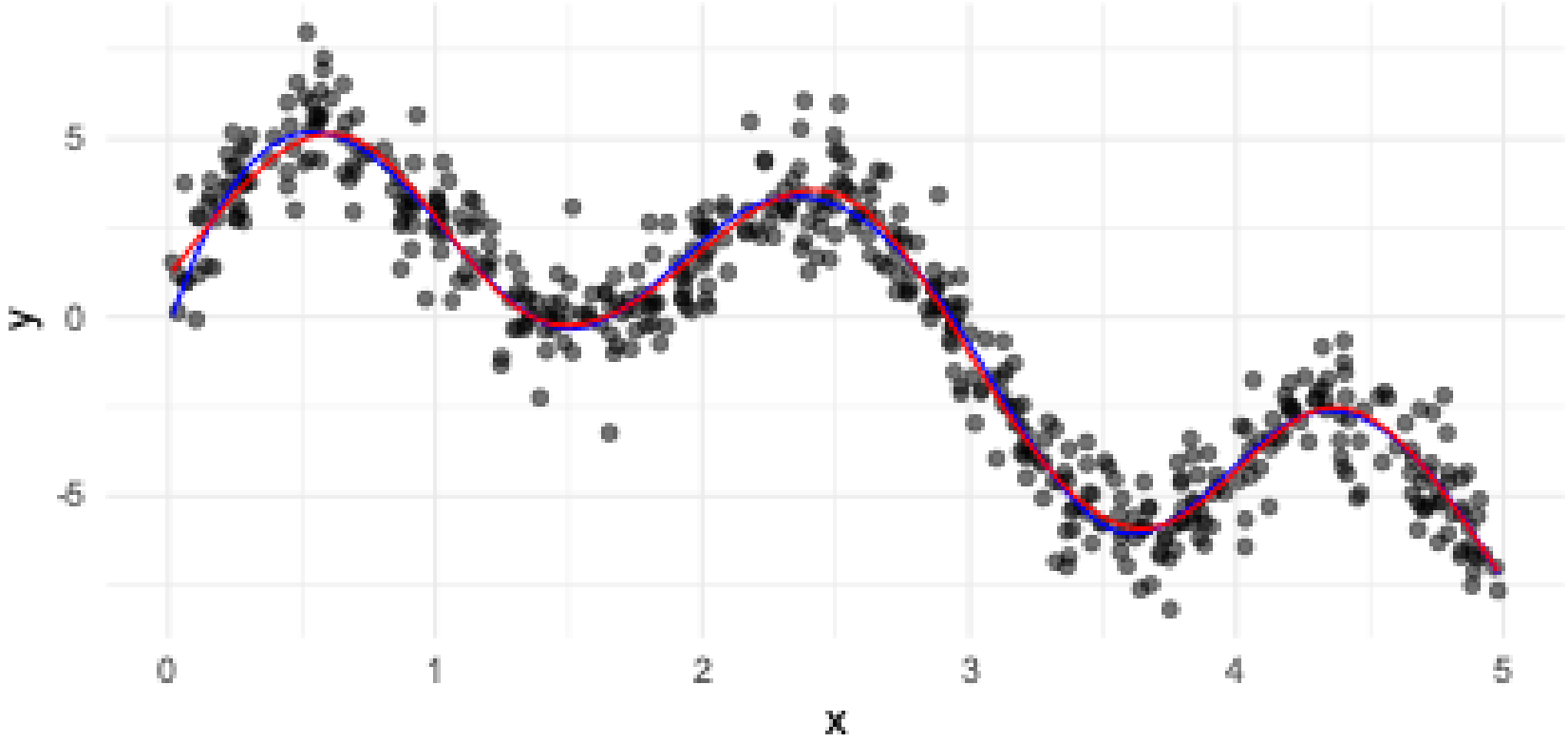
Vi använder samma data som tidigare och beräknar MSE för olika frihetsgrader



Antalet knutar och deras placeringar - Exempel

Bästa modellen ser vi 8 frihetsgrader för natural splines och 9 frihetsgrader för cubic splines.

Det ger 4 respektive 5 knutar.



Smoothing Splines

Vårt mål är att hitta en funktion $g(x)$ som passar vår data väl.

Ett generellt sätt att göra detta på är att hitta g som minimerar

$$\text{RSS} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - g(x_i))^2$$

Problem: Utan begränsningar på g kan vi alltid få RSS till 0.

Vad vi vill ha är en funktion som passar data bra men också är "mjuk".

Mellanspel - Derivator

Givet en funktion $g(x)$, låt $g'(x)$ beteckna dess förstaderivata och $g''(x)$ dess andraderivata.

- Förstaderivatan g' är lutningen (hastigheten) av en kurva.
- Andraderivatan g'' är hur lutningen ändrar sig (acceleration).

Vi kan se andraderivatan som ett mått på funktionens grovhet (roughness).

Ett sätt att mäta grovhet av en funktion är att summera andraderivatan över funktionen (kontinuerlig funktion $=$ integral)

$$\int g''(x)^2 \mathrm{d}x.$$

Linjär funktion har $g''(x) = 0$ vilket är en helt mjuk funktion.

Om $g(x)$ rör sig väldigt mycket kommer integralen bli väldigt stor.

Smoothing Splines

Vi kan använda måttet för att skatta en funktion som har en viss ”mjukhet”.

Hitta funktionen $g(x)$ som minimerar

$$L_{\text{Sm.Spl.}} = \sum_{i=1}^{n}(y_i - g(x_i))^2 + \lambda \int g''(x)^2 \mathrm{d}x \qquad \lambda \geq 0$$

Använder förlustfunktion + straffterm likt regularisering vi sett tidigare i Ridge och LASSO.

- Om $\lambda = 0$ har vi ingen begränsning.
- Om $\lambda = \infty$ får vi linjär funktion.

Smoothing splines

$$L_{\text{Sm.Spl.}} = \sum_{i=1}^{n}(y_i - g(x_i))^2 + \lambda \int g''(x)^2 \mathrm{d}x.$$

Teorem: Funktionen $g(x)$ som optimerar förlustfunktionen är stegvis kubiskt med knutar i (unika) punkterna $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ och linjär utanför detta område.

Resultatet är naturliga splines, men inte samma som om man gjort optimeringen som tidigare med samma knutar.

Det blir en "krympt" version av dessa naturliga splines där krympningen beror på λ.

Smoothing Splines - Sammanfattning

- Efter optimering får vi kubisk natural splines.
- En knut i varje datapunkt.
- För många frihetsgrader? $(4 + n)$
- λ krymper parameterarna vilket ändrar den effektiva frihetsgraden df_λ.
  - $\lambda = 0$ ger $df_\lambda = 4 + n$.
  - $\lambda = \infty$ ger $df_\lambda = 2$.
  - Ofta vill vi istället välja λ som ger oss viss frihetsgrad.
- Hur välja λ?

Att välja λ

Eftersom smoothing splines resulterar i natural splines med ett fixt antal knutar med ridge regularisering kan vi skriva

$$\hat{\mathbf{g}}_\lambda = \mathbf{S}_\lambda \mathbf{y},$$

där $\hat{\mathbf{g}}_\lambda$ är lösningen för vårt problem.

Matrisen $\mathbf{S}_\lambda$ kallas utjämningsmatris (smoothing matrix).

Se Kap 5.4 i Elements of Statistical Learning för tekniska detaljer.

Effektiva frihetsgrader

En intressant detalj från formeln är att hur vi hittar $\hat{\mathbf{g}}_\lambda$ beror bara på data x_i och λ **inte** på $\mathbf{y}$.

Ett annat resultat är att vi kan definera effektiva frihetsgraderna som

$$df_\lambda := \text{tr}(\mathbf{S}_\lambda) = \sum_{i=1}^{n} \{\mathbf{S}_\lambda\}_{ii}.$$

Eftersom knutarna positioner är förbestämda x_i så behöver vi bara bestämma λ.

LOOCV

Det visar sig (igen see Elements of Statistical Learning för detaljer) att vi kan beräkna leave-one out cross-validation felet (RSS_{cv}) väldigt effektivt,

$$\text{RSS}_{\text{cv}} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{g}_\lambda^{(-i)}(x_i))^2 = \sum_{i=1}^{n} \left[\frac{y_i - \hat{g}_\lambda(x_i)}{1 - \{\mathbf{S}_\lambda\}_{ii}} \right]^2 .$$

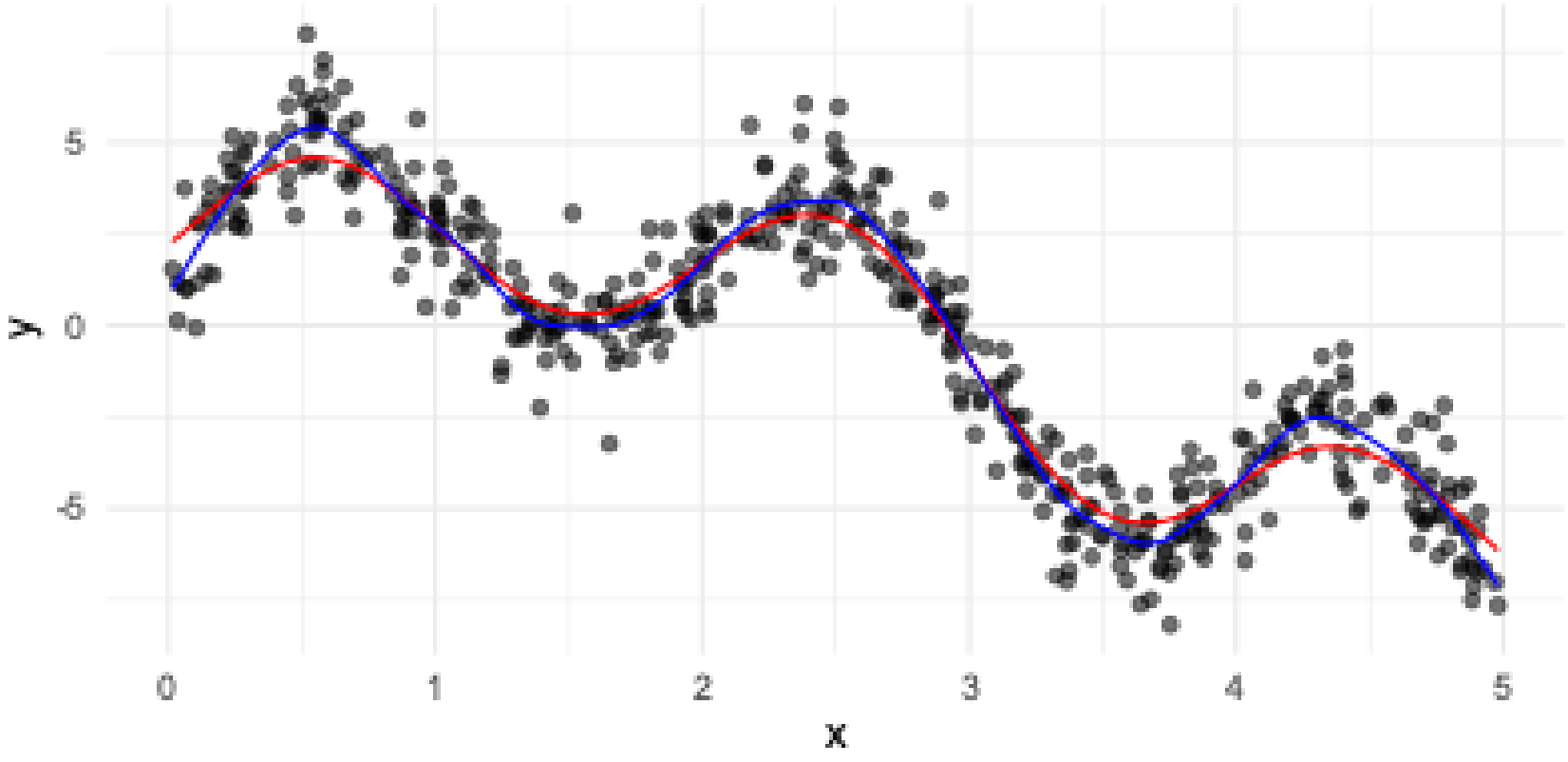
Observera: Vi behöver bara funktionen anpassad på all träningsdata för att beräkna detta.

Smoothing Splines - Exempel

Använder samma data som tidigare.

Skattar smoothing splines med effektiva frihetsgrader 9. (Blå)

Använder också LOOCV för att hitta bästa värdet 20.6. (Röd)



Smoothing Splines för klassificering

Vi har hittills gjort smoothing splines för regression, vi kan såklart använda metoden för klassificering.

För logistisk regression har vi

$$p(x) = \mathbb{P}(Y = 1|X = x) = \frac{e^{f(x)}}{1 + e^{f(x)}},$$

där $f(x)$ är en linjär funktion.

Vi kan såklart använda smoothing splines istället.

Smoothing Splines för Klassificering

Om vi skriver upp optimeringsproblemet får vi log-likelihood (med straffterm)

$$\ell = \sum_{i=1}^{n} \left[y_i f(x_i) - \log(1 + e^{f(x_i)}) \right] - \frac{1}{2}\lambda \int \{f''(x)\}^2 \mathrm{d}x.$$

Vilket igen kan visas resultera i natural splines med knutar i datapunkterna.

Flerdimensionella Splines

Hittills har vi pratat om endimensionella modeller. Alla går utöka till flerdimensionella modeller.

Antag att vi har $x \in \mathbb{R}^2$ och att vi har basfunktioner
$h_{1k}(x_1), k = 1, \ldots, K_1$ för första koordinaten och motsvarande
$h_{2k}(x_2), k = 1, \ldots, K_2$ för andra koordinaten.

Vi kan då definera den $K_1 \times K_2$ dimensionella tensorprodukten basen

$$g_{jk}(x) = h_{1j}(x_1)h_{2k}(x_2), j = 1, \ldots, K_1 \; k = 1, \ldots, K_2.$$

Dessa baser kan vi använda för att beskriva vår tvådimensionella funktion

$$g(x) = \sum_{j=1}^{K_1} \sum_{k=1}^{K_2} g_{jk}(x).$$

Flerdimensionella Smoothing Splines

Vi kan igen sätta upp smoothing splines problemet för dessa flerdimensionella problem. Om $x_i \in \mathbb{R}^d$ ställer vi upp problemet

$$\min_g \sum_{i=1}^{n} \{y_i - g(x_i)\}^2 + \lambda J[g],$$

där $J[g]$ är en lämplig straffterm.

Om $d = 2$ har vi

$$J[g] = \int\int_{\mathbb{R}^2} \left[\left(\frac{\partial^2 g(x)}{\partial x_1^2} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial^2 g(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 g(x)}{\partial x_2^2} \right)^2 \right] \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2$$

Flerdimensionella Smoothing Splines

Precis som för endimensionella smoothing splines har vi

- $\lambda = 0$ ger en funktion som interpolerar alla datapunkter.
- $\lambda = \infty$ ger ett plan.
- Andra värden ger en lösning som kan representeras som en linjärfunktion av basfunktioner med koefficient från ridge regression.

Lösningen är inte kubiska basfunktioner (som i endimensionella fallet) utan **radiala basfunktioner** (radial basis functions).

Också kallade **thin-plate splines**.