

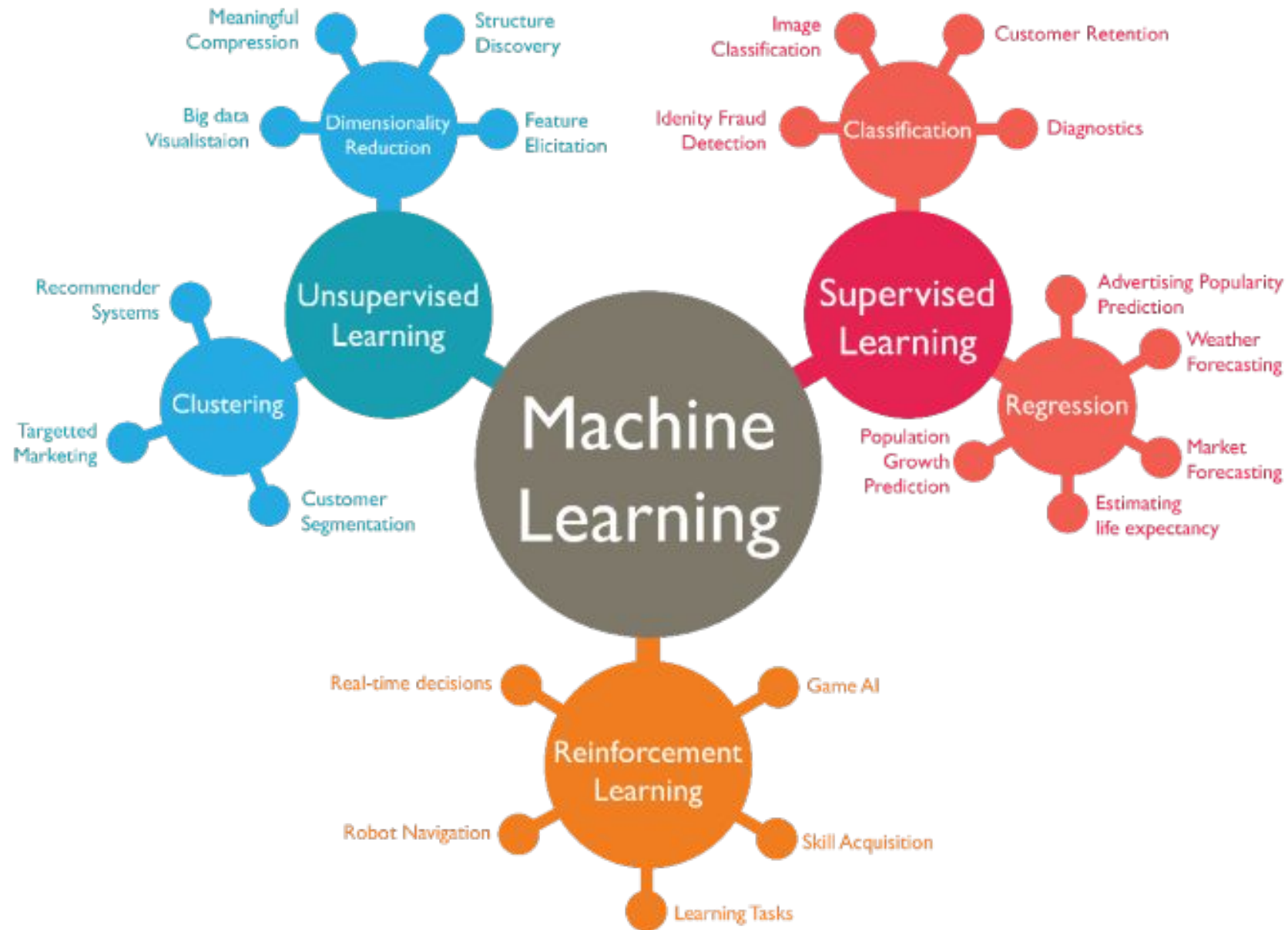
Машинное обучение и майнинг данных

Лекция 2: Линейная и Логистическая регрессия

Полина Полунина

Структура презентации

- Задачи машинного обучения: обзор
- Простая парная регрессия
- Множественная регрессия
- Логистическая регрессия
- Градиентный спуск



Обучение с учителем и без учителя

Обучение с учителем \Leftrightarrow
размеченные данные

Цель: построить модель,
которая обучается
предсказывать целевую
переменную

Соответствующие задачи:
Регрессия, Классификация

Обучение без учителя \Leftrightarrow
данные без разметки

Цель: найти скрытые
закономерности в данных

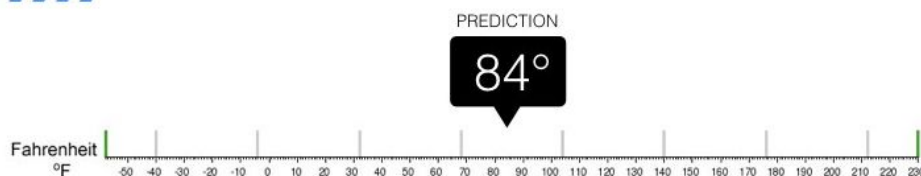
Соответствующие задачи:
Кластеризация, Понижение
размерности

Регрессия vs Классификация



Regression

What is the temperature going to be tomorrow?



Регрессия \Leftrightarrow непрерывная целевая переменная

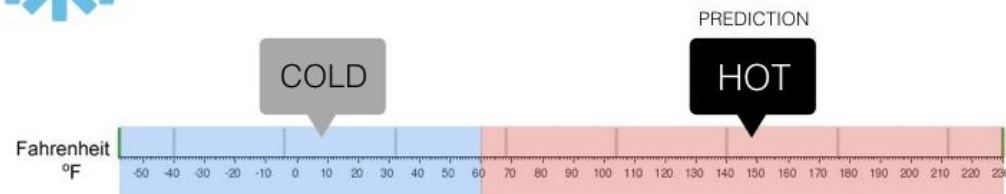
Цель: предсказать значения

Example: цены на квартиры, цены на акцию, выходная мощность ветряных турбин, температура воздуха, etc.



Classification

Will it be Cold or Hot tomorrow?



Классификация \Leftrightarrow дискретная целевая переменная

Цель: предсказать класс

Example: кошка/собака, настроения рынка, типы сейсмических событий, спам, музыкальные жанры, etc.

Модель парной регрессии

- ▶ Задача: построить модель, описывающую зависимость между ценой дома и его общей жилой площадью

X – total living area

Y – historical price values

- ▶ Модель:

$$Y = a + bX + \varepsilon$$

$$Y = \hat{a} + \hat{b}X + r,$$

где ε – настоящие ошибки (errors); r – остатки (residuals), т.е. оценка случайных ошибок

- ▶ Как найти коэффициенты a и b ?

Минимизация ошибки: $\sum_{i=1}^l (y_i - a - bx_i)^2 \rightarrow \min$ - a.k.a. MSE, Mean Squared Error

Решение в явном виде: $\hat{b} = \frac{\text{cov}(X,Y)}{\text{var}(X,Y)}$, $\hat{a} = \bar{Y} - \hat{b}\bar{X}$

Простая линейная регрессия



Линейная регрессия: Предпосылки модели

Теорема Гаусса-Маркова:

\hat{a}, \hat{b} наилучшие линейные несмещенные оценки настоящих значений коэффициентов a and b в модели линейной регрессии, если:

- ▶ $E\varepsilon_i = 0, E\varepsilon_i^2 = Var(\varepsilon_i) = \sigma^2$ - гомоскедастичность ошибок
- ▶ $Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0$ for $i \neq j$ – некоррелированность ошибок
- ▶ Вектор признаков $(x_1, x_2, \dots, x_l)^T$ не коллинеарен единичному вектору $(1, 1, \dots, 1)^T$

Множественная регрессия

- Задача: предсказание цены дома по каким-либо признакам (total living area, year built, roof style, garage area, etc.)

X – набор признаков

Y – исторические значения цены на дома

- Модель:

$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_lx_l + \varepsilon = Xb + \varepsilon$, где X – матрица

- Как найти вектор b ?

Минимизация суммы квадрата ошибок:

$$\sum_{i=1}^l r_i^2 = \sum_{i=1}^l (y_i - b_0 - \sum_{j=1}^k b_j x_{ij})^2 = (y - Xb)'(y - Xb) \rightarrow \min$$

Решение в явном виде:

$$\hat{b} = (X'X)^{-1}X'y$$

Классификация: Логистическая регрессия

- Задача: научиться классифицировать виды ирисов по каким-либо признакам

X – длина и ширина лепестков (petal), длина и ширина чашелистиков

Y – три вида ирисов: setosa, versicolor, virginica



Iris Versicolor



Iris Setosa



Iris Virginica

Логистическая регрессия: Maximum Likelihood Estimation

► Модель для двух классов:

$$P(y_i = 1|X) = \sigma(Xb) = \frac{1}{1 + e^{-Xb}}$$

Функция плотности вероятности:

$$P(Y = y|X) = \sigma(Xb)^y [1 - \sigma(Xb)]^{1-y}$$

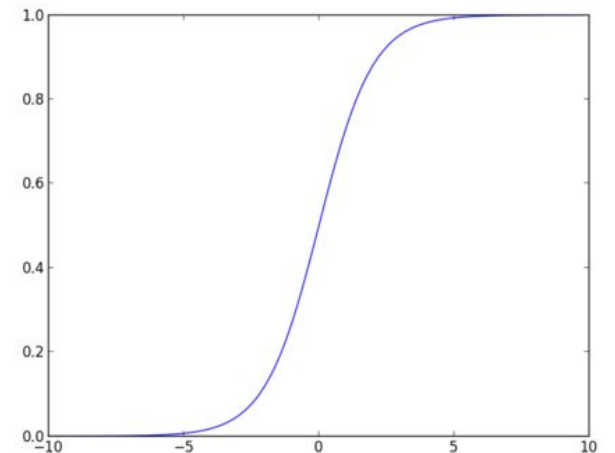
► Правдоподобие (Likelihood):

$$L(b) = \prod_{i=1}^l P(Y = y^{(i)}|X = x^{(i)}) = \prod_{i=1}^l \sigma(x^{(i)}b)^{y^{(i)}} [1 - \sigma(x^{(i)}b)]^{1-y^{(i)}}$$

► Log-likelihood:

$$\ln(L(b)) = \sum_{i=1}^l y^{(i)} \ln \sigma(x^{(i)}b) + (1 - y^{(i)}) \ln [1 - \sigma(x^{(i)}b)] \rightarrow \max$$

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$



Логистическая регрессия:

Градиентный спуск

- Формула для обновления параметров на каждой итерации: $b_j^{new} = b_j^{old} + \eta \frac{\partial LL(b^{old})}{\partial b_j^{old}}$

Initialize: $\theta_j = 0$ for all $0 \leq j \leq m$

Repeat many times:

gradient[j] = 0 for all $0 \leq j \leq m$

For each training example (x, y):

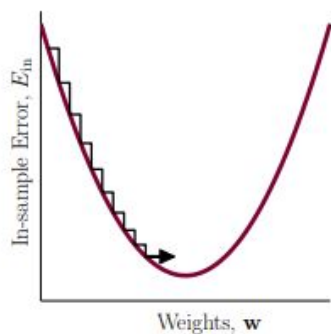
For each parameter j:

$$\text{gradient}[j] \quad += \quad x_j \left(y - \frac{1}{1 + e^{-\theta^T \mathbf{x}}} \right)$$

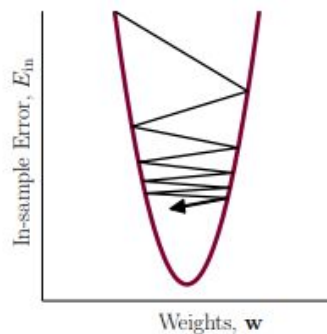
$\theta_j += \eta * \text{gradient}[j]$ for all $0 \leq j \leq m$

Градиентный спуск

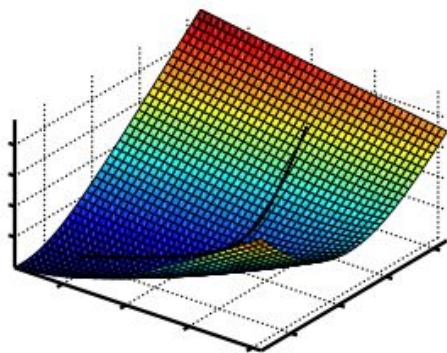
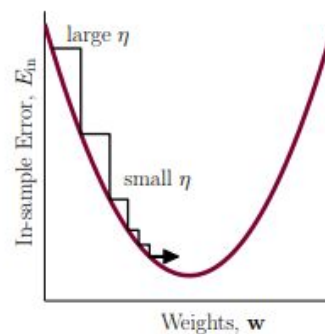
η too small



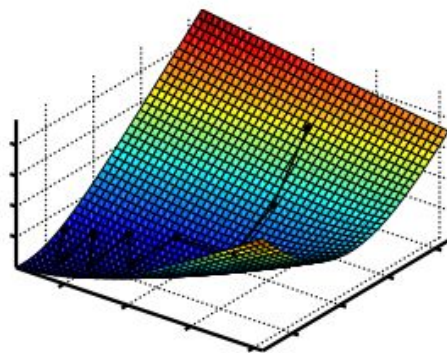
η too large



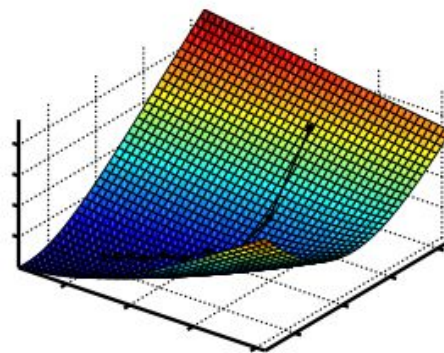
variable η_t – just right



$\eta = 0.1$; 75 steps



$\eta = 2$; 10 steps



variable η_t ; 10 steps