Linearna regresija

Predstavljajmo si, da izvajamo fizikalni poskus. Imamo vzmet, na kateri merimo raztezek v odvisnosti od sile s katero napenjamo vzmet (na vzmet obešamo uteži z znano težo in merimo raztezek).

Velja Hookov zakon ($F = kx$), torej sta x in F med seboj linearno odvisna. Poskušali bomo najti premico, ki se bo najbolje prilegala danim točkam v ravnini.

Če imamo 2 točki $T_1(x_1, y_1), T_2(x_2, y_2)$ lahko brez težav najdemo premico, ki gre točno skozi niju. Če pa je točk več, ni nujno, da obstaja premica, ki gre skozi vse točke. Lahko bi našli polinom, ki se natančno prilega vsem točkam, vendar to v primeru linearne odvisnosti ni dobra ideja, saj bi bila krivulja natančna samo v tistih točkah, drugje pa bi bila odstopanja velika. Iščemo takšna a in b, da se bo premica kar najbolje prilegala danim točkam. Če gre premica skozi neko točko $T_i(x_i, y_i)$, potem velja:

$$0 = ax_i + b - y_i$$

Ker pa naša premica ne poteka direktno skozi vse točke, pride do napake, ki jo bomo v točki T_i označili z ε_i.

$$\varepsilon_i = ax_i + b - y_i$$

Napaka je lahko pozitivna ali negativna, odvisno ali točka leži pod ali nad premico. Želimo zmanjšati velikost vseh napak, ne glede na to ali so pozitivne ali negativne. Lahko bi preprosto sešteli absolutne vrednosti napak, ampak pozneje funkcije ne bi mogli odvajati, zato seštejemo kvadrate vseh napak.

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i^2$$

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^{N} (ax_i + b - y_i)^2$$

Naš cilj je, da minimiziramo to napako. To bomo naredili s pomočjo gradientnega spusta.

Gradientni spust

Z gradientnim spustom iščemo minimum ali pa maksimum neke funkcije, to pomeni, kje ima funkcija največjo oziroma najmanjšo vrednost. Gradientni spust je zelo primitivna metoda, pri kateri se preprosto premikamo v smer kamor funkcija narašča oziroma pada.

To si lahko predstavljamo s pomočjo slepega človeka, ki želi priti na vrh Golovca. Ko bo naš človek, poimenujmo ga Lojze, na neki točki hriba, ne bo videl v katero smer mora hoditi (ker je slep), čutil pa bo, kako strm je hrib in v katero smer hrib narašča, v katero pa pada. Ker hoče priti na vrh, bo korak vsakokrat naredil v smer, v kateri je podlaga najbolj strma. Na začetku, ko je hrib bolj strm, bo Lojze naredil večji korak, ko pa se bo približeval vrhu in bo hrib postajal manj strm, pa bo delal manjše korake, ker se lahko drugače zgodi, da bo prestopil vrh in se znašel na drugi strani Golovca.

Z gradientnim spustom se torej premikamo v smer, v katero funkcija pada. Gradient te funkcije predstavlja smer, v katero funkcija pada oziroma narašča. Preden nadaljujemo z gradientom, si moramo ogledati kdaj funkcija pada in kdaj narašča.

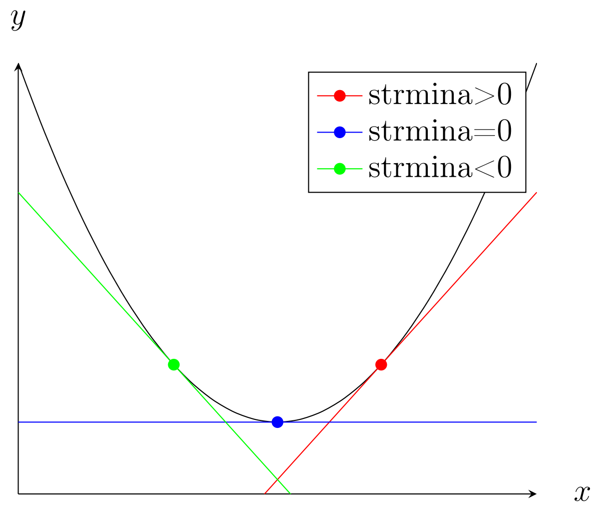
Odvod

Odvod neke funkcije $f(x)$ v točki x_0 je strmina funkcije v tej točki. Odvod je pozitiven če funkcija narašča in negativen, če funkcija pada. Večji kot je odvod, bolj strma je funkcija v dani točki. Odvod funkcije $f(x)$, ki ga označimo z $f'(x)$, nam torej pove, kakšen je koeficient tangente na graf fukncije $f(x)$ v točki x_0.

Malo o funkcijah

Ker ne rešujemo enostavnih problemov, potrebujemo zakomplicirati tudi samoumevne stvari kot so funkcije. Celo življenje smo zapisovali funkcije kot $f(x)$. Ta zapis nam predstavlja funkcijo f, ki je odvisna od parametra x. To pomeni, da nam za vsak dani x priredi novo številko. Če želimo narisati

Slika 1: Odvod



graf take funkcije uporabimo 2D koordinatni sistem in nanj narišemo točke, ki nam jih vrne funkcija; to pomeni urejene pare $(x, f(x))$.

Ker pa smo v svobodni državi, nam ni prepovedano, da bi bila funkcija odvisna od več parametrov. Funkcijo odvisno od dveh parametrov bi zapisali kot $f(x, y)$. Taki funkciji podamo dve številki x in y, vrne pa nam eno številko. Če želimo narisati graf take funkcije potrebujemo 3D koordinatni sistem. Za vsak urejen par (x, y), bi nam taka funkcija priredila novo številko, ki bi v tem koordinatnem sistemu predstavljala višino, to je vrednost na z osi. Primer take funkcije je:

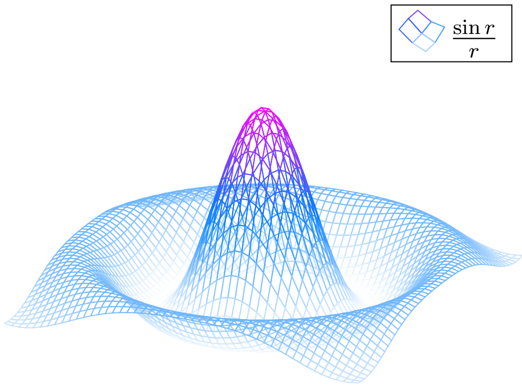
$$f(x, y) = \frac{\sin \sqrt{x^2 + y^2}}{\sqrt{x^2 + y^2}}$$

$\sqrt{x^2 + y^2}$ predstavlja oddaljenost točke, ki jo podamo funkciji, od izhodišča.

Funkcija je seveda lahko odvisna tudi od več kot dveh spremenljivk. Takih funkcij pa na našo žalost ne moremo narisati, ker bi že za funkcijo odvisno od treh spremenljivk, potrebovali 4 dimenzionalni prostor.

Glede na to, da smo še vedno v svobodni državi, se lahko pri parametrih funkcije poigramo tudi z njihovim poimenovanjem. Nikjer ne piše, da ne

Slika 2: 3D funkcija



smemo na mesto x uporabljati a in da naša funkcija ne sme izgledati kot $f(a)$. To seveda velja tudi za funkcije, ki vzamejo več parametrov, tako da lahko namesto $f(x, y)$ pišemo $f(a, b)$. Funkcijo katere graf je narisan od zgoraj, bi lahko potemtakem zapisali kot:

$$f(a, b) = \frac{\sin \sqrt{a^2 + b^2}}{\sqrt{a^2 + b^2}}$$

Definirali smo že napako premice za dane točke. Ker sedaj vemo, da je funkcija lahko odvisna od večih spremenljivk in da ni nujno da sta ti spremenljivki x in y, lahko ugotovimo, da je naša napaka funkcija, ki je odvisna od spremenljivk a in b. Drugače seveda ne more biti, ker imamo skupino točk že podano, to pomeni $(x_1, y_1), (x_2, y_2) \ldots$ za katere želimo najti premico, ki se jim prilega, tako da lahko v naši funkciji napake spreminjamo samo parametra a in b.

Delni odvod

Pri funkciji, ki je odvisna od večih parametrov se zakomplicira tudi odvod. Tako funkcijo moramo odvajati po vsaki spremenljivki posebej, kar pomeni da potrebujemo funkcijo $f(x, y)$ odvajati po x in po y. S tem dobimo dva odvoda. Odvod po x nam pove, kako funkcija narašča oziroma pada po x osi, odvod po y pa nam pove, kako funkcija narašča oziroma pada po y osi. Takemu odvodu rečemo delni odvod, zapišemo ga kot $\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}$ za delni odvod po x in $\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}$ za delni odvod po y.

Za trenutek se vrnimo na začetni problem, ki nas je pripeljal do sem. Želelimo najti takšno premico, ki se najbolj prilega vsem danim točkam. Definirali smo že skupno napako in ugotovili, da je naša napaka funkcija, ki je odvisna od spremenjivk a in b. Sedaj lahko poračunamo, kako strma je naša napaka za dani a in b po parametru a in kako strma je po parametru b. Drugače povedano, izračunamo lahko delni odvod napake po a in delni odvod napake po b.

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial a} = \sum_{i=1}^{N} 2\frac{\partial(ax_i + b - y_i)}{\partial a} = 2\sum_{i=1}^{N}(ax_i + b - y_i)x_i$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial b} = \sum_{i=1}^{N} 2\frac{\partial(ax_i + b - y_i)}{\partial b} = 2\sum_{i=1}^{N}(ax_i + b - y_i) \cdot 1 = 2\sum_{i=1}^{N}(ax_i + b - y_i)$$

Gradient

Gradient neke funkcije je vektor, ki kaže v smer naraščanja te funkcije. Gradient funkcije f označimo z ∇f. Pri funkciji z enim parametrom ($f(x)$), ima gradient te funkcije samo eno komponento, to je odvod funkcije $f(x)$. To zapišemo kot:

$$\nabla f = \begin{pmatrix} f' \end{pmatrix}$$

Če je funkcija odvisna od dveh spremenljivk, je vsaka komponenta gradienta en delni odvod. To pomeni, da nam prva komponenta gradienta pove kam narašča funkcija in kako strma je glede na prvi parameter, druga komponenta gradienta pa nam pove kam narašča funkcija in kako strma je glede na drugi parameter funkcije.

Za lažjo predstavo si oglejmo gradient funkcije $f(x, y)$. Prva komponenta tega gradienta nam bo povedala strmino funkcije v smeri x osi, druga komponenta tega gradienta pa nam pove strmino funkcije v smeri y osi.

V splošnem lahko gradient funkcije f, ki je odvisna od n parametrov zapišemo kot:

$$\nabla f = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} & \frac{\partial f}{\partial x_2} & \frac{\partial f}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Gradient naše napake bi izgledal takole:

$$\nabla\varepsilon = \begin{pmatrix} \frac{\partial\varepsilon}{\partial a} & \frac{\partial\varepsilon}{\partial b} \end{pmatrix}$$

Prilagajanje premice

Sedaj ko razumemo kaj je gradient, se lahko vrnemo na naš začetni problem, to je najti tako premico, ki se najbolj prilega N točkam. Na tem primeru bomo razložili tudi gradientni spust.

Najprej se spomnimo, kaj sploh želimo narediti. Naša funkcija je $\varepsilon_i = ax_i + b - y_i$ kjer ε_i predstavlja napako te funkcije v točki $T_i(x_i, y_i)$. Skupno napako smo definirali kot: $\varepsilon = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i^2$ in jo tudi odvajali. Definirali smo tudi gradient naše funkcije.

Začetna parametra a in b določimo sami, kasneje pa jih spreminjamo z matematičnimi enačbami. Od začetnih parametrov je odvisna natančnost našega rezultata. Več o tem bomo povedali kasneje.

Vemo torej, v katero smer naša funkcija napake narašča. Sedaj se lahko premaknemo v nasprotno smer, to pomeni tja, kamor naša funkcija pada. To da se premaknemo v neko smer, pomeni da spremenimo naš a in b tako, da bo napaka manjša. Parameter a zmanjšamo za vrednost prve komponente našega gradienta, ker je ta komponenta delni odvod napake po a in nam pove, kako se napaka spreminja, če spreminjamo a. Parameter b pa seveda zmanjšamo za vrednost druge komponente našega gradienta.

Pa razpišimo te spremembe. Spremembo a lahko napišemo kot:

$$\Delta a = -(\nabla\varepsilon)_1 \cdot \lambda$$

Minus uporabimo zato, ker se premikamo v smer kamor funkcija pada, to pomeni nasprotno od tega kamor kaže gradient. λ je konstanta, ki nam predstavlja kako hitro spreminjamo naš parameter. λ določimo mi. O točnem pomenu λ se bomo pogovorli nekoliko kasneje.

Spremembo b pa lahko zapišemo kot:

$$\Delta b = -(\nabla\varepsilon)_2 \cdot \lambda$$

V te dve enačbi lahko sedaj vstavimo delna odvoda, ki smo ju naračunali prej in dobimo:

$$\Delta a = -\sum_{i=1}^{N}(ax_i + b - y_i)x_i \cdot \lambda$$

$$\Delta b = -\sum_{i=1}^{N}(ax_i + b - y_i) \cdot \lambda$$

Pri obeh enačbah smo se lahko znebili 2, ker lahko povečamo našo konstanto λ in dobimo enak rezultat.

Sedaj ko vemo za koliko moramo spremeniti naša parametra a in b, jih seveda tudi spremenimo. Naša nova parametra sta torej:

$$a = a + \Delta a$$

$$b = b + \Delta b$$

Z vsem tem delom smo en korak bližje našim želenim vrednostim. Ta postopek moramo ponoviti še velikokrat, zato izkoristimo računalnik. Večkrat kot ponovimo postopek, bolj natančen bo naš rezultat. Temu spreminjanju parametrov v smer gradienta pravimo gradientni spust.

Natančnost našega rezultata je odvisna od λ (velikost premika) in začetnih vrednost spremenljivk a in b. Z manjšo velikostjo premika bo rezultat bolj natančen, vendar bomo morali postopek večkrat ponoviti. Ker s postopkom iščemo samo lokalne minimume, nam začetna vrednost spremenljivk določi kateri minimum bomo našli.

Linerana regresija elipse

Seveda se nam ni treba omejiti samo na prilagajanje premice točkam. Če imamo na primer točke na krožnici nekega planeta, bomo tem točkam prilagodili elipso. Recimo da imamo N točk krožnice nekega planeta $T_i(x_i, y_i)$. [1]

[1] Točke za planete so podane v ekliptičnem koordinatnem sistemu. Več si lahko preberete v dodatku.

Podobno kot pri prejšnjem primeru, bomo tudi tokrat iskali funkcijo, ki se točkam najbolj prilega. Tokrat bomo namesto premice iskali elipso, saj se elipsa bolj prilega krožnici planeta kot premica.

Ker je elipsa stožnica bomo za funkcijo, ki jo prilagajamo vzeli splošno enačbo stožnic:

$$Ax^2 + Bxy + Cy^2 + Dx + Ey + F = 0$$

Tako kot prej se nam bo pojavila napaka, ki jo označimo z ε.

$$\varepsilon_i = Ax_i^2 + Bx_iy_i + Cy_i^2 + Dx_i + Ey_i + F$$

Za razliko od premice je oblika stožnice odvisna od šestih parametrov namesto dveh. To so: A, B, C, D, E in F. Zato bomo spreminjali teh šest parametrov. To pomeni, da je naša napaka funkcija, ki je odvisna od šestih parametrov.

Podobno kot pri premici najprej definiramo skupno napako kot vsoto kvadratov vseh napak:

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i^2$$

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^{N} (Ax_i^2 + Bx_iy_i + Cy_i^2 + Dx_i + Ey_i + F)^2$$

Enako kot pri premici moramo našo napako delno odvajati po spremenljivkah, od katerih je naša napaka odvisna. To pomeni, da moramo izračunati delni odvod napake po A, B, C, D, E in F. Delni odvodi za enačbo stožnic so:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial A} = \sum_{i=1}^{N} 2(Ax_i^2 + Bx_iy_i + Cy_i^2 + Dx_i + Ey_i + F)(x_i^2)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial B} = \sum_{i=1}^{N} 2(Ax_i^2 + Bx_iy_i + Cy_i^2 + Dx_i + Ey_i + F)(x_iy_i)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial C} = \sum_{i=1}^{N} 2(Ax_i^2 + Bx_iy_i + Cy_i^2 + Dx_i + Ey_i + F)(y_i^2)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial D} = \sum_{i=1}^{N} 2(Ax_i^2 + Bx_iy_i + Cy_i^2 + Dx_i + Ey_i + F)(x_i)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial E} = \sum_{i=1}^{N} 2(Ax_i^2 + Bx_iy_i + Cy_i^2 + Dx_i + Ey_i + F)(y_i)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial F} = \sum_{i=1}^{N} 2(Ax_i^2 + Bx_iy_i + Cy_i^2 + Dx_i + Ey_i + F)$$

Da najdemo najboljše parametre, pri katerih bo funkcija imela najmanjšo napako, bomo ponovno uporabili gradientni spust. Za razliko od gradientnega spusti pri eni premici bomo tokrat spreminjali šest parametrov. Naš gradient je torej:

$$\nabla \varepsilon = \begin{pmatrix} \frac{\partial \varepsilon}{\partial A} & \frac{\partial \varepsilon}{\partial B} & \frac{\partial \varepsilon}{\partial C} & \frac{\partial \varepsilon}{\partial D} & \frac{\partial \varepsilon}{\partial E} & \frac{\partial \varepsilon}{\partial F} \end{pmatrix}$$

To pomeni da so naše spremembe parametrov:

$$\Delta A = -(\nabla \varepsilon)_1 \cdot \lambda$$

$$\Delta B = -(\nabla \varepsilon)_2 \cdot \lambda$$

$$\Delta C = -(\nabla \varepsilon)_3 \cdot \lambda$$

$$\Delta D = -(\nabla \varepsilon)_4 \cdot \lambda$$

$$\Delta E = -(\nabla \varepsilon)_5 \cdot \lambda$$

$$\Delta F = -(\nabla \varepsilon)_6 \cdot \lambda$$

Iz česar sledi, da so naši novi parametri podobno kot pri premici:

$$A = A + \Delta A$$

$$B = B + \Delta B$$

$$C = C + \Delta C$$

$$D = D + \Delta D$$

$$E = E + \Delta E$$

$$F = F + \Delta F$$

Pravilnost našega rezultata je seveda odvisna od: koliko ponovitev bomo naredili, kolikšna bo naša λ in kakšne začetne vrednosti A, B, C, D, E in F smo si izbrali.

Logistična regresija

Glavna razlika med logistično in linearno regesijo je, da pri linearni regresiji določamo zvezno spremenljivko (y je odvisen od x), medtem ko nam pri logistični regresiji model vrne kakšna je verjetnost, da vhodni podatki sodijo v določeno kategorijo.

To si lahko predstavljamo kot funkcijo, ki vrne več parametrov. Linearna regresija nam predstavlja funkcijo, ki vrne eno številko oziroma parameter. Logistična regresija je funkcija, ki vzame več parametrov in vrne več parametrov, to je številk.

Logistična regresija se uporablja za klasifikacijo. Eden izmed takih primerov je prepoznavanje števil na sliki. Če se lotimo prepoznavanja enomestnih števil, bi nam logistična regresija vrnila 10 parametrov oziroma števil. Vsako izmed teh števil nam predstavlja verjetnost, da je na sliki določena cifra. Prvo število nam recimo predstavlja verjetnost, da je na sliki 0, drugo da je na sliki 1, tretje da je na sliki 2 in tako naprej.

Nevronska mreža

Logistično regresijo lahko zakompliciramo še nekoliko bolj. Števila, ki nam jih vrne logistična regresija lahko vzamemo kot vhodne parametre na novi logistični regresiji. Potem lahko to ponovimo še enkrat, dvakrat ali pa celo n-krat. Takemu sistemu pravimo nevronska mreža.

Dodatno

Ekliptični koordinatni sistem

Ekliptični koordinatni sistem je eden izmed koordinatnih sistemov za določanje lege nebesnih teles. Lokacijo se določa glede na sonce. Tako kot imamo za določanje lokacije na zemlji zemljepisno širino in zemljepisno dolžino, imamo pri ekliptičnem koordinatnem sistemu ekliptična dolžino in ekliptično širino, ki pomenita isto, samo da namesto točke na zemljinem površju definirata točko na površju sonca. Predstavljamo si, da smo na Soncu (seveda ponoči, da ni prevroče) in za določanje koordinat z latitudo in longitudo naredimo isto kot na Zemlji, samo da je tokrat Sonce naša Zemlja. Za dodatek imamo še tretji podatek, to je razdalja od Sonca. Da povzamemo:

l longtituda, ekliptična dolžina, od $0°$ do $360°$

b latituda, ekliptična širina od $-90°$ do $90°$

r razdalja

Ekliptična širina je definirana egoistično, tako da je ravnina na kateri leži zemljina orbita, vedno 0^o latitude.

Ekliptična širina je definirana glede na neko sončno pego.

V kartezične koordinate lahko podatke pretvorimo na podoben način kot polarne koordinate pretvarjamo v kartezične. Samo da imamo tokrat neke vrste 3D polarni zapis. Naše formule so:

$$x = r \cos b \cos l$$

$$y = r \cos b \sin l$$

$$z = r \sin b$$

Te koordinate želimo sedaj pretvoriti iz 3D v 2D koordinatni sistem, da jih bomo lahko uporabili v enačbi za stožnice. To bi lahko naredili tako, da bi vzeli projekcijo naših točk na ravnino. Ker pa tiri večine planetov v našem osončju ležijo v (skoraj) isti ravnini, se bomo naredili fizike in preprosto zanemarili z koordianto.