Model Linear

Ali Akbar Septiandri

November 24, 2017

untuk Astra Graphia IT

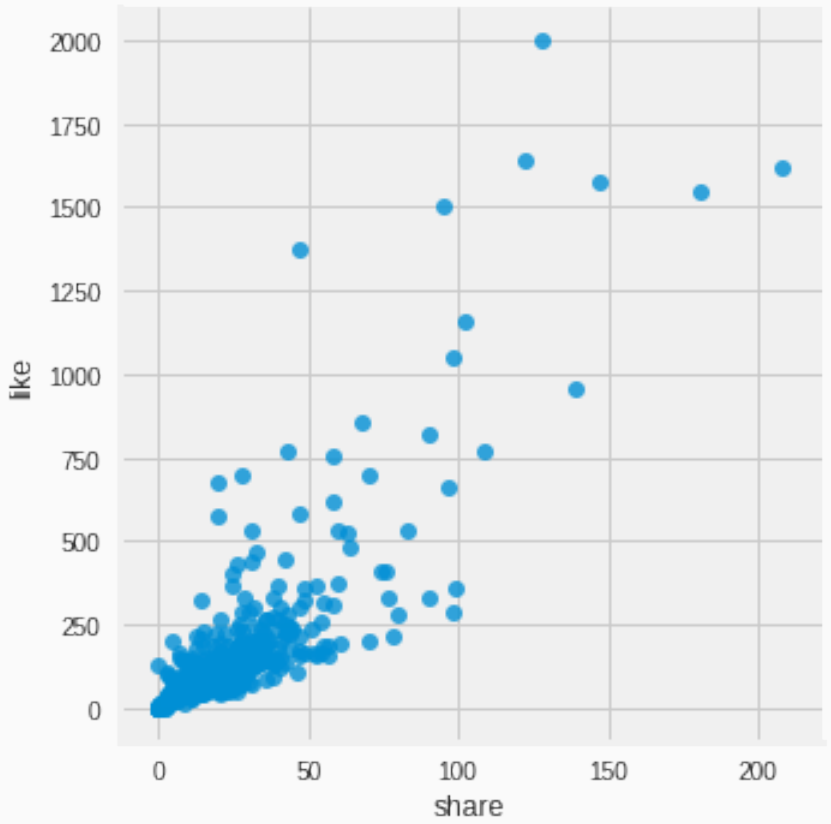
Daftar Isi

Bahan Bacaan

1. Witten, I. H., Frank, E., Hall, M. A., & Pal, C. J. (2016). Data Mining: Practical machine learning tools and techniques. Morgan Kaufmann. (Section 4.6 Linear Models)
2. VanderPlas, J. (2016). Python Data Science Handbook. (In Depth: Linear Regression) `http://nbviewer.jupyter.org/github/jakevdp/PythonDataScienceHandbook/blob/master/notebooks/05.06-Linear-Regression.ipynb`
3. Murray, I. (2016). MLPR class notes. (Linear Regression; Regression and Gradients; Logistic Regression) `http://www.inf.ed.ac.uk/teaching/courses/mlpr/2016/notes/` (graduate level)

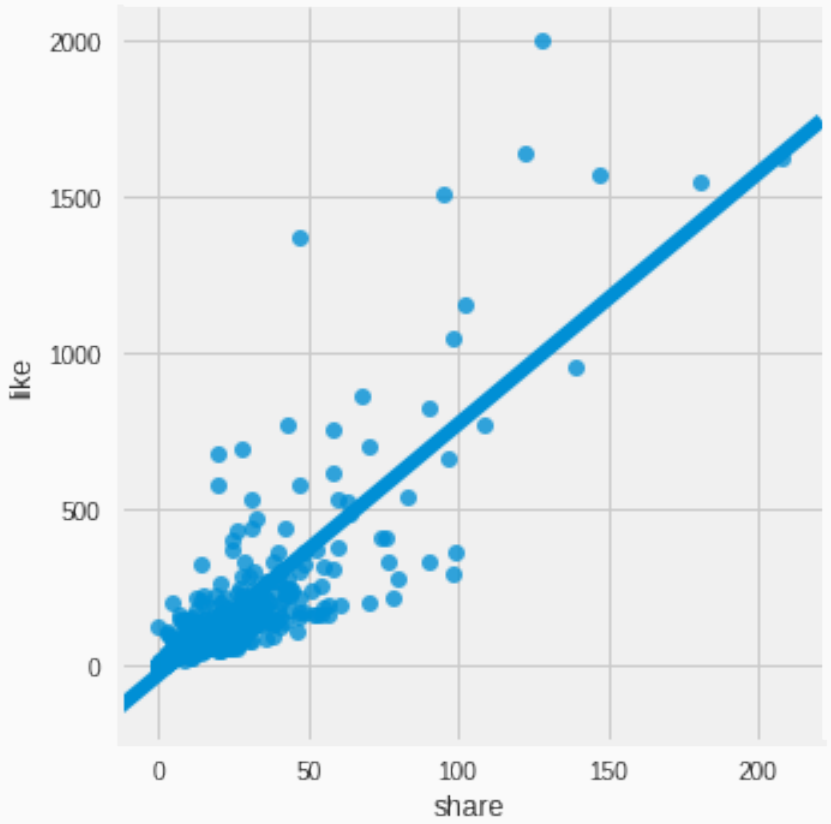
Regresi Linear

Prediksi hubungan antara dua variabel



Gambar 1: Data hubungan antara ‘share’ dengan ‘like’ pada Facebook

Prediksi hubungan antara dua variabel



Gambar 1: Data hubungan antara ‘share’ dengan ‘like’ pada Facebook

Simple Linear Regression

Fungsi linear

Kasus paling sederhana adalah mencocokkan garis lurus ke sekumpulan data

$$y = ax + b$$

dengan a adalah *slope*, sedangkan b dikenal dengan nama *intercept*.

Notasi lain

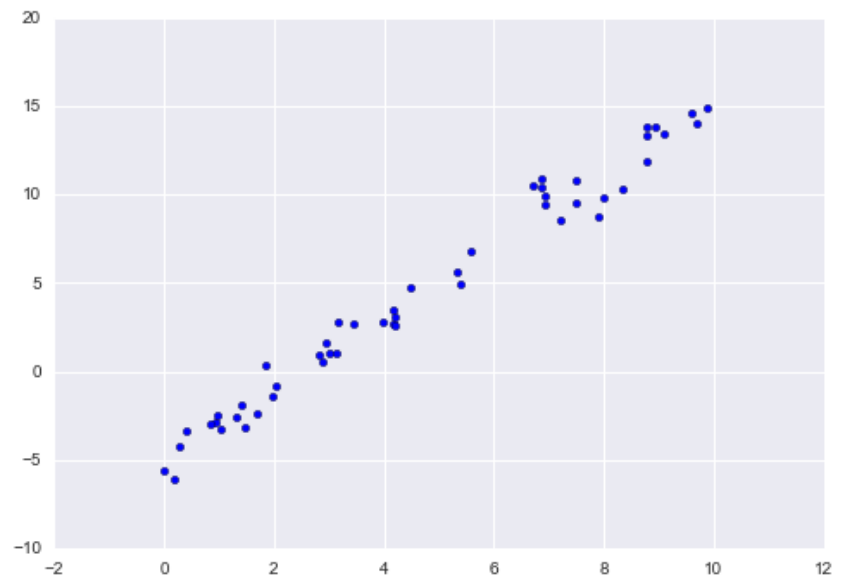
$$y = w_0 + w_1 x_1$$

dengan w adalah bobot atau koefisien.

Simple Linear Regression

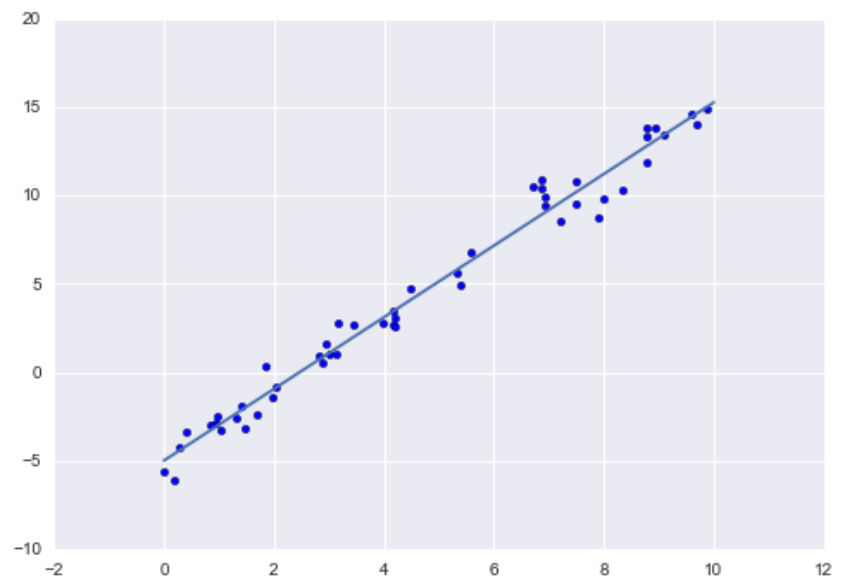
Example

```
rng = np.random.RandomState(1)
x = 10 * rng.rand(50)
y = 2 * x - 5 + rng.randn(50)
plt.scatter(x, y);
```



Gambar 2: Data yang dimunculkan secara acak [VanderPlas, 2016]

Mencocokkan Garis



Gambar 3: Hasil pencocokan garis [VanderPlas, 2016]

```
Model slope:  2.02720881036
Model intercept:  -4.99857708555
```

Bagaimana kalau ada lebih dari dua variabel
yang ingin kita lihat hubungannya?

Multidimensional Linear Regression

Model

$$y = w_0 x_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + ... + w_D x_D = \sum_{i=0}^{D} w_j x_j$$

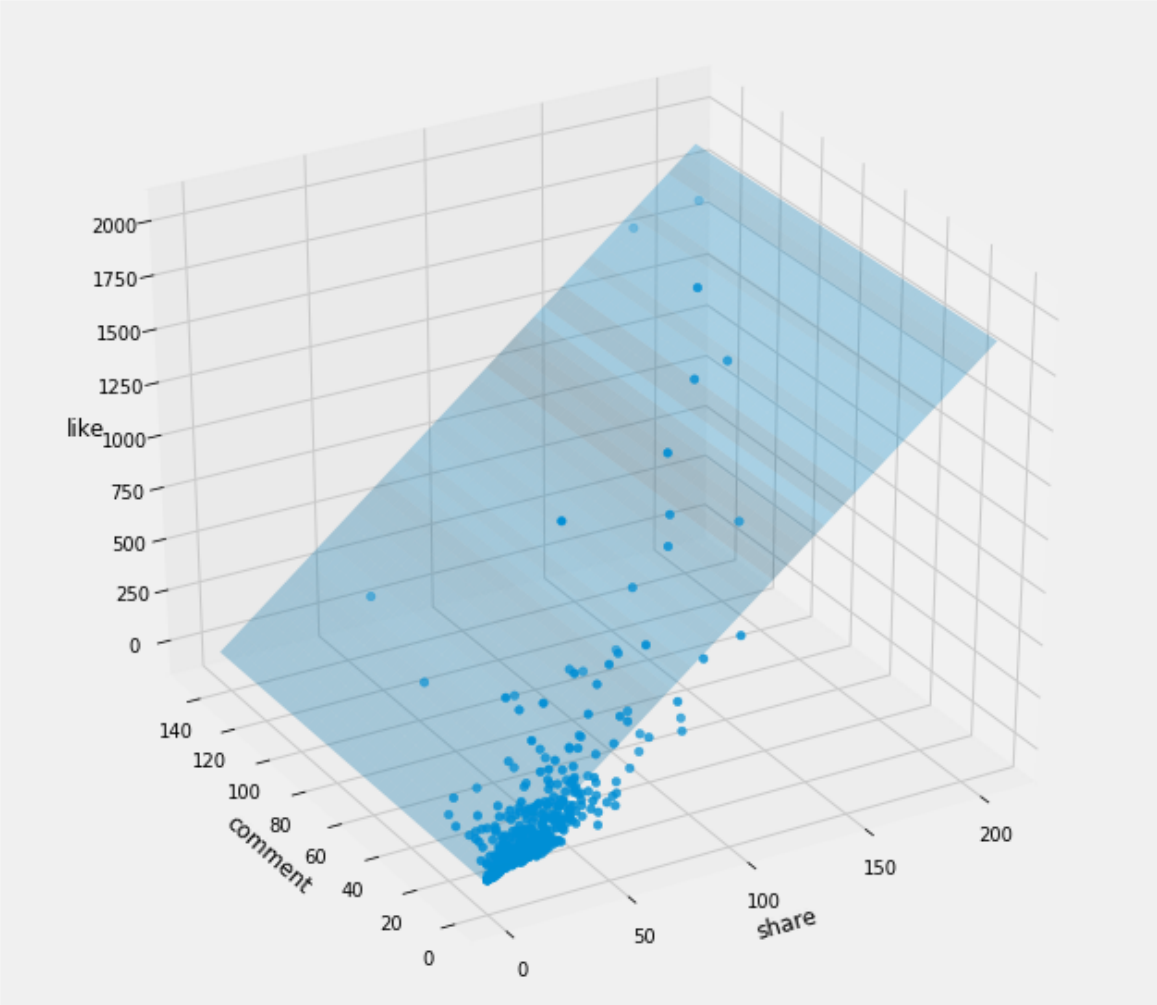
dengan $x_0 = 1$

Notasi matriks-vektor

$$y = \phi \mathbf{w}$$

dengan $\phi = (1, \mathbf{x}^T)$

Regresi linear untuk dua variabel



Gambar 4: Hubungan antara ‘share’, ‘comment’, dan ‘like’ pada foto di Facebook

Prediktor linear (contoh)

Vektor bobot $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^D$

bias: -20.24

share: 6.65

comment: 3.53

Vektor fitur $\phi(x) \in \mathbb{R}^D$

bias: 1

share: 147

comment: 58

$$\begin{aligned}\hat{y} &= \mathbf{w} \cdot \phi(x) \\ &= \sum_{j=1}^{D} w_j \phi_j(x) \\ &= -20.24(1) + 6.65(147) + 3.53(58) = 1162.05\end{aligned}$$

Jadi, *diprediksi* bahwa untuk foto dengan *share* $= 147$ dan *comment* $= 58$, foto tersebut akan mendapatkan ≈ 1162.05 *likes*.

Kita sudah tahu nilai y dan ϕ,
tapi berapa nilai $\mathbf{w}$?

Nyatanya, kita tidak bisa mencari nilai ϕ^{-1}

Loss Function

- ϕ bukan matriks bujur sangkar dan datanya mengandung *noise*
- Harus menggunakan *loss function* $O(\mathbf{w})$ yang dapat diminimalkan
- Pilihan umum: *squared error*

$$
\begin{aligned}
O(\mathbf{w}) &= \sum_{i=1}^{n} (y_i - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)^2 \\
&= (\mathbf{y} - \phi\mathbf{w})^T (\mathbf{y} - \phi\mathbf{w})
\end{aligned}
$$

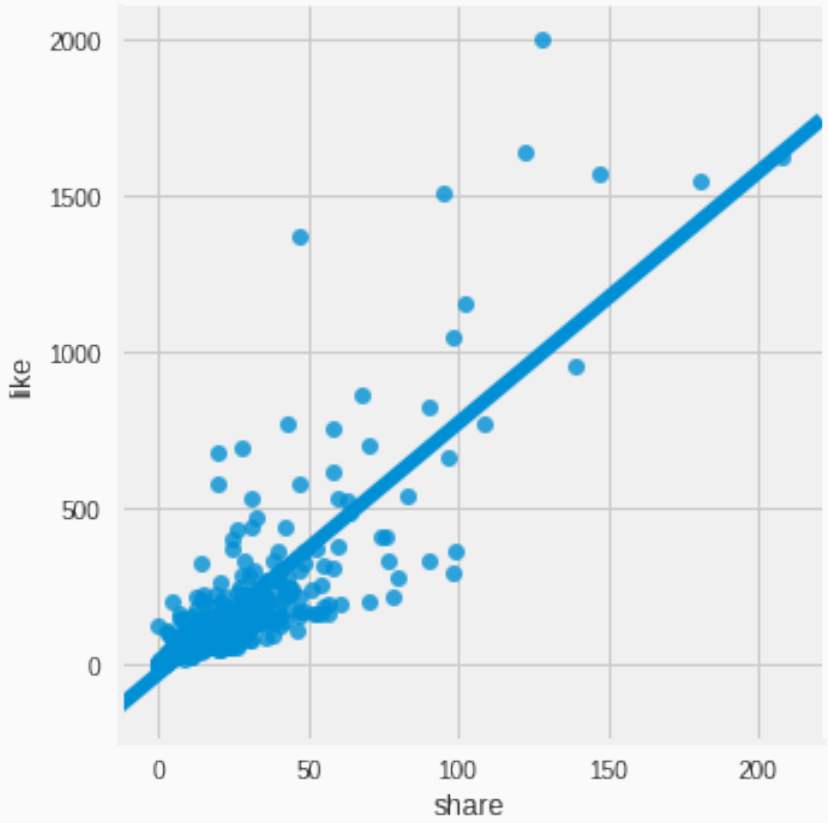
Solusi

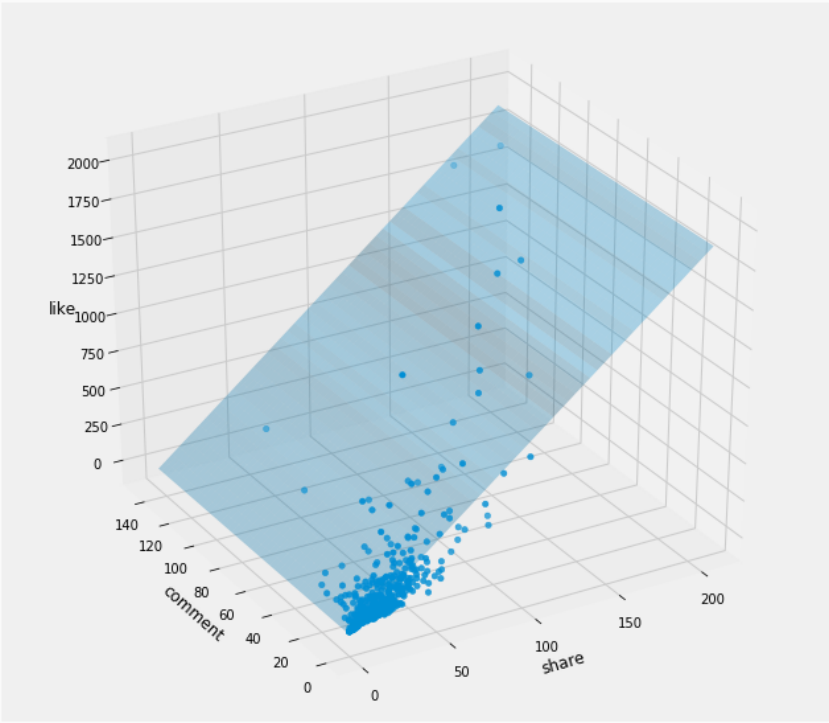
- Jawaban: Minimalkan $O(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)^2$ dengan mencari turunan parsial yang diatur sama dengan 0
- Solusi analitis:

$$\hat{\mathbf{w}} = (\phi^T\phi)^{-1}\phi^T\mathbf{y}$$

- Bagian $(\phi^T\phi)^{-1}\phi^T$ dikenal sebagai *pseudo-inverse*

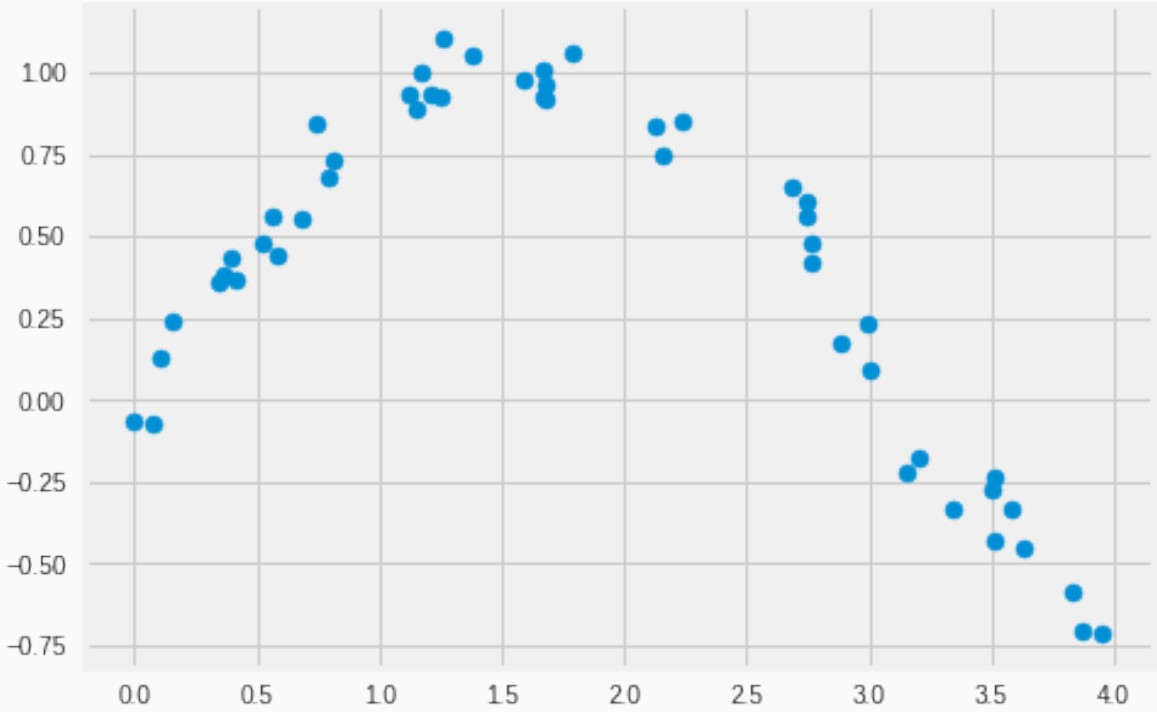
Perhatikan kembali





Apa kekurangan dari regresi linear sederhana seperti ini?

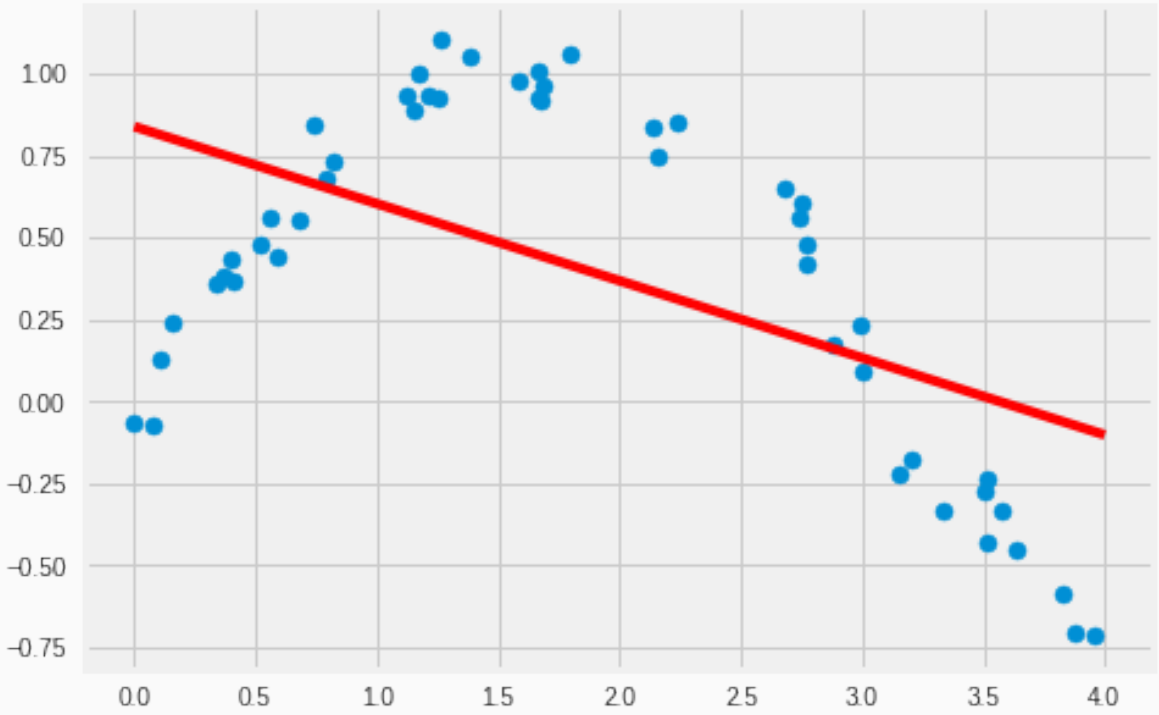
Non-linearity



Gambar 5: Data yang dihasilkan dari fungsi sin dengan *noise*

Bagaimana kalau datanya seperti ini?

Underfitting



Gambar 6: Hasil *fitting* regresi linear sederhana

Jika model yang dihasilkan lebih sederhana
dibandingkan data yang seharusnya dicocokkan,
maka model tersebut disebut mengalami underfitting.

Polynomial Basis Functions

Regresi linear dengan fungsi basis polinomial

Jika kita mengubah $x_p = f_p(x)$, dengan $f_p()$ adalah fungsi transformasi, maka untuk $f_p() = x^p$ dan x adalah input berdimensi satu, modelnya menjadi

$$y = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + ...$$

Polynomial Basis Functions

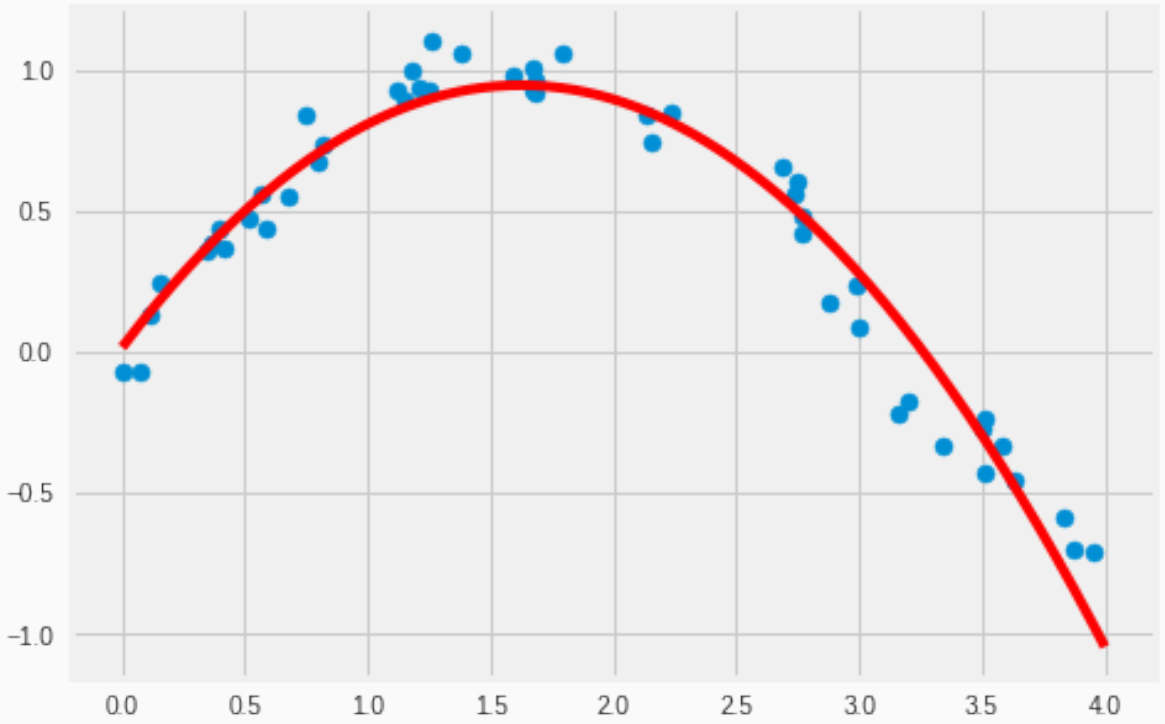
In

```
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
x = np.array([2, 3, 4])
poly = PolynomialFeatures(3, include_bias=False)
poly.fit_transform(x[:, None])
```

Out

```
array([[  2.,   4.,   8.],
       [  3.,   9.,  27.],
       [  4.,  16.,  64.]])
```

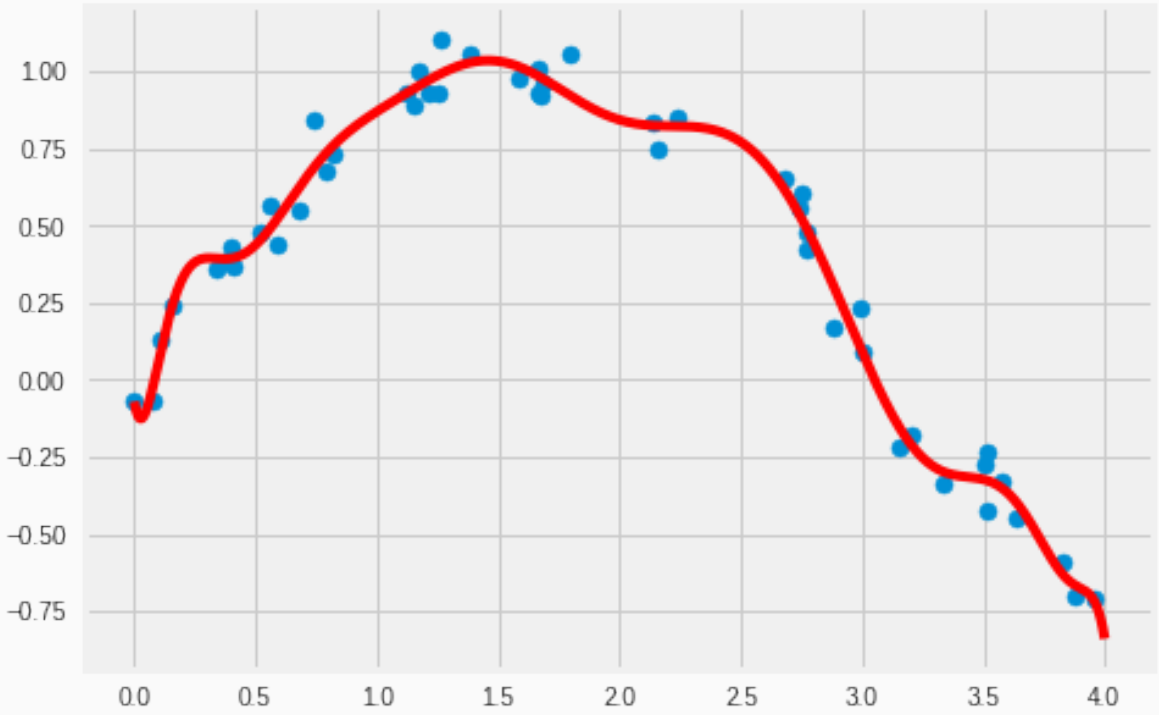
Best-fit



Gambar 7: Hasil *fitting* fungsi basis polinomial $p = 2$

Apa yang terjadi jika p dibuat lebih besar?

Overfitting



Gambar 8: Hasil *fitting* fungsi basis polinomial $p = 15$

Jika model yang dihasilkan lebih kompleks ($\sim$ parameternya banyak)
dibandingkan data yang seharusnya dicocokkan,
maka model tersebut disebut mengalami overfitting.

Kita dapat menggunkan fungsi basis Gaussian sebagai alternatif

Bagaimana cara menghindari *overfitting*?

Ridge Regression

- Digunakan untuk menghindari *overfitting*
- Dikenal juga sebagai L_2 *regularisation* atau *Tikhonov regularisation*
- Pemberian penalti untuk koefisien model

$$P = \alpha \sum_{j=1}^{p} w_j^2 = \alpha \|\mathbf{w}\|_2^2$$

Loss Function pada Ridge Regression

- *Loss function* yang harus diminimalkan menjadi

$$O(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)^2 - \alpha \|\mathbf{w}\|_2^2$$

dengan $\|\mathbf{w}\|_d = (\sum_{j=1}^{p} |w_j|^d)^{\frac{1}{d}}$

Loss Function pada Ridge Regression

- *Loss function* yang harus diminimalkan menjadi

$$O(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)^2 - \alpha \|\mathbf{w}\|_2^2$$

  dengan $\|\mathbf{w}\|_d = (\sum_{j=1}^{p} |w_j|^d)^{\frac{1}{d}}$

- Parameter α (terkadang juga ditulis sebagai λ) bernilai bebas (ditentukan oleh pengguna)

Loss Function pada Ridge Regression

- *Loss function* yang harus diminimalkan menjadi

$$O(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)^2 - \alpha \|\mathbf{w}\|_2^2$$

  dengan $\|\mathbf{w}\|_d = (\sum_{j=1}^{p} |w_j|^d)^{\frac{1}{d}}$
- Parameter α (terkadang juga ditulis sebagai λ) bernilai bebas (ditentukan oleh pengguna)
- Solusi analitis:

$$\hat{\mathbf{w}} = (\phi^T \phi + \alpha I_p)^{-1} \phi^T \mathbf{y}$$

Lasso Regression

- Secara konsep mirip seperti *ridge regression*
- Penalti dengan jumlah nilai absolut dari koefisien (1-norms; L_1 *regularisation*)

$$P = \alpha \sum_{j=1}^{p} |w_j|$$

- Bekerja dengan membuat banyak koefisien bernilai nol

Regresi Logistik

Mengubah Keluaran

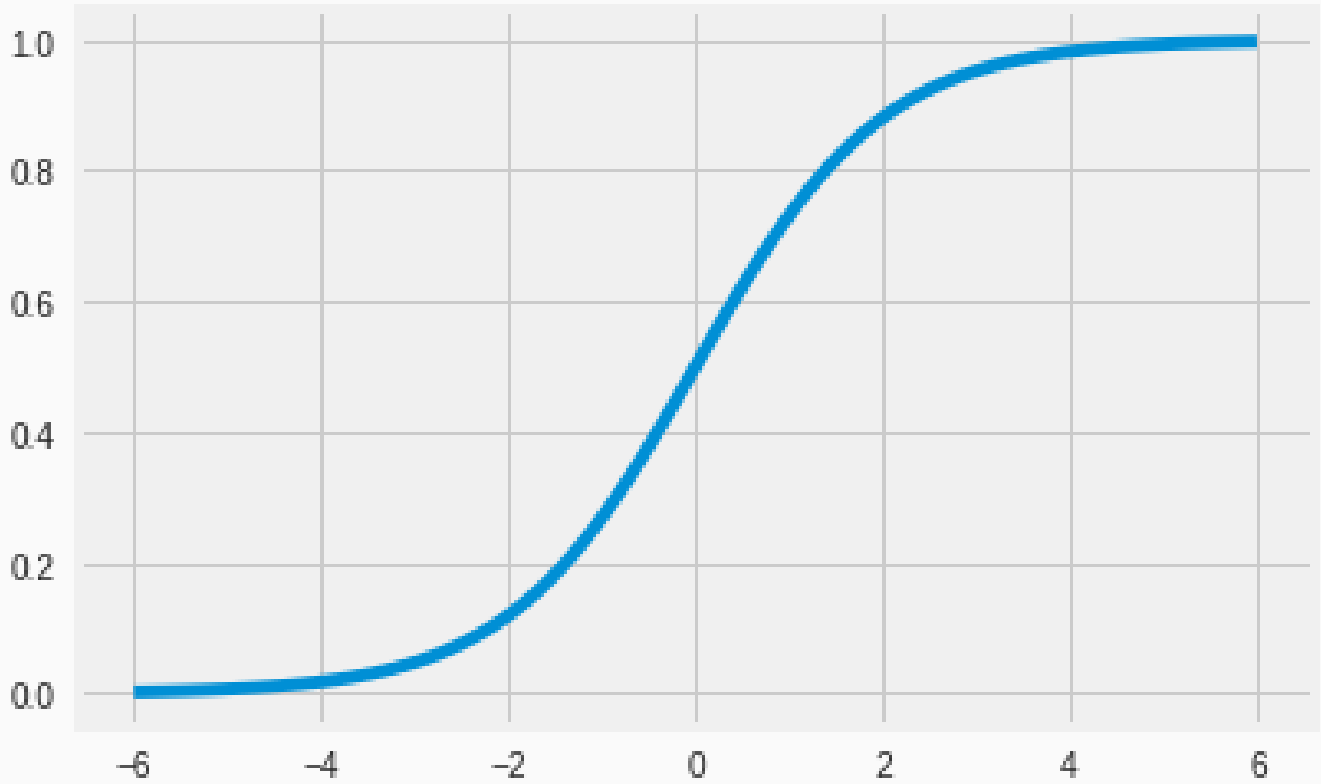
- Berdasarkan keluaran regresi linear, kita bisa memaksanya menjadi [0, 1]
- Gunakan fungsi sigmoid:

$$P(y = 1|\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}; \mathbf{w}) = \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + e^{-\mathbf{w}^T\mathbf{x}}}$$

- Nilai [0, 1] dapat diartikan sebagai probabilitas dari kelas
- Karena probabilitas harus memiliki total 1, maka

$$P(y = 0|\mathbf{x}) = 1 - P(y = 1|\mathbf{x})$$

Fungsi Sigmoid

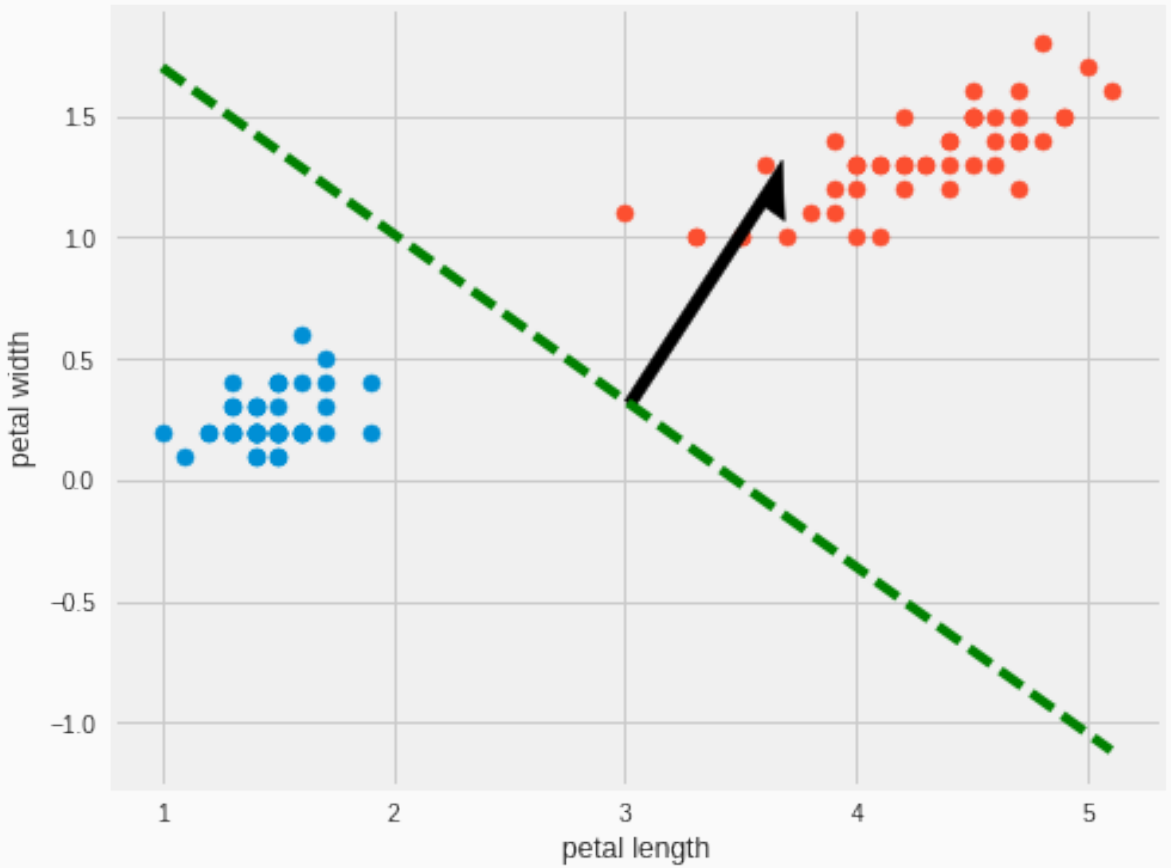


Gambar 9: Fungsi sigmoid/logistik $\sigma(z) = \frac{1}{1+exp(-z)}$

Decision Boundary

- $\sigma(z) = 0.5$ saat $z = 0$ sehingga batas keputusannya diberikan oleh $\mathbf{w}^T\mathbf{x} = 0$
- Batas keputusannya merupakan $M - 1$ *hyperplane* untuk masalah M dimensi
- Kita perlu mencari nilai $\mathbf{w}$

Decision Boundary



Gambar 10: Batas keputusan dan vektor bobot untuk klasifikasi dua kelas

Likelihood

- Asumsi i.i.d.
- Dataset $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), ..., (\mathbf{x}_n, y_n)\}$
- *Likelihood*-nya menjadi

$$p(\mathcal{D}|\mathbf{w}) = \prod_{i=1}^{n} p(y = y_i|\mathbf{x}_i, \mathbf{w})$$
$$= \prod_{i=1}^{n} p(y = 1|\mathbf{x}_i, \mathbf{w})^{y_i}(1 - p(y = 1|\mathbf{x}_i, \mathbf{w}))^{1-y_i}$$

- *Log likelihood* $L(\mathbf{w}) = log\ p(\mathcal{D}|\mathbf{w})$

$$L(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n} y_i log\ \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i) + (1 - y_i) log(1 - \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i))$$

Solusi

- Nilai optimum untuk kasus ini unik, i.e. *convex*
- Untuk memaksimalkan nilainya, gunakan gradien

$$\frac{\partial L}{\partial w_j} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)) x_{ij}$$

- Tidak ada solusi tertutup sehingga harus menggunakan *optimasi numerik*, e.g. dengan *gradient descent*

Model Generatif dan Diskriminatif

- Naïve Bayes memodelkan bagaimana kelas "menghasilkan" vektor fitur $p(\mathbf{x}|y)$ untuk kemudian diklasifikasikan dengan

$$p(y|\mathbf{x}) \propto p(\mathbf{x}|y)p(y)$$

Model Generatif dan Diskriminatif

- Naïve Bayes memodelkan bagaimana kelas "menghasilkan" vektor fitur $p(\mathbf{x}|y)$ untuk kemudian diklasifikasikan dengan

$$p(y|\mathbf{x}) \propto p(\mathbf{x}|y)p(y)$$

- Regresi logistik langsung memodelkan $p(y|\mathbf{x})$, i.e. diskriminatif

Model Generatif dan Diskriminatif

- Naïve Bayes memodelkan bagaimana kelas "menghasilkan" vektor fitur $p(\mathbf{x}|y)$ untuk kemudian diklasifikasikan dengan

$$p(y|\mathbf{x}) \propto p(\mathbf{x}|y)p(y)$$

- Regresi logistik langsung memodelkan $p(y|\mathbf{x})$, i.e. diskriminatif
- Keuntungan metode diskriminatif: Buat apa memodelkan $p(\mathbf{x})$? Kita selalu punya input.

Model Generatif dan Diskriminatif

- Naïve Bayes memodelkan bagaimana kelas "menghasilkan" vektor fitur $p(\mathbf{x}|y)$ untuk kemudian diklasifikasikan dengan

$$p(y|\mathbf{x}) \propto p(\mathbf{x}|y)p(y)$$

- Regresi logistik langsung memodelkan $p(y|\mathbf{x})$, i.e. diskriminatif
- Keuntungan metode diskriminatif: Buat apa memodelkan $p(\mathbf{x})$? Kita selalu punya input.
- Keuntungan metode generatif: Bisa menangani kasus data yang hilang, mendeteksi pencilan, atau mungkin *memang* perlu menghasilkan input

Klasifikasi Multikelas

- Buat vektor bobot $\mathbf{w}_k$ untuk setiap kelas, untuk mengklasifikasikan k dan bukan-k
- Gunakan fungsi *softmax*

$$p(y = k|\mathbf{x}) = \frac{exp(\mathbf{w}_k^T \mathbf{x})}{\sum_{j=1}^{C} exp(\mathbf{w}_j^T \mathbf{x})}$$

- Perhatikan bahwa $0 \leq p(y = k|\mathbf{x}) \leq 1$ dan $\sum_{j=1}^{C} p(y = j|\mathbf{x}) = 1$

Optimasi

Mengapa dinamakan *machine learning*?

Alasan Melakukan Optimasi

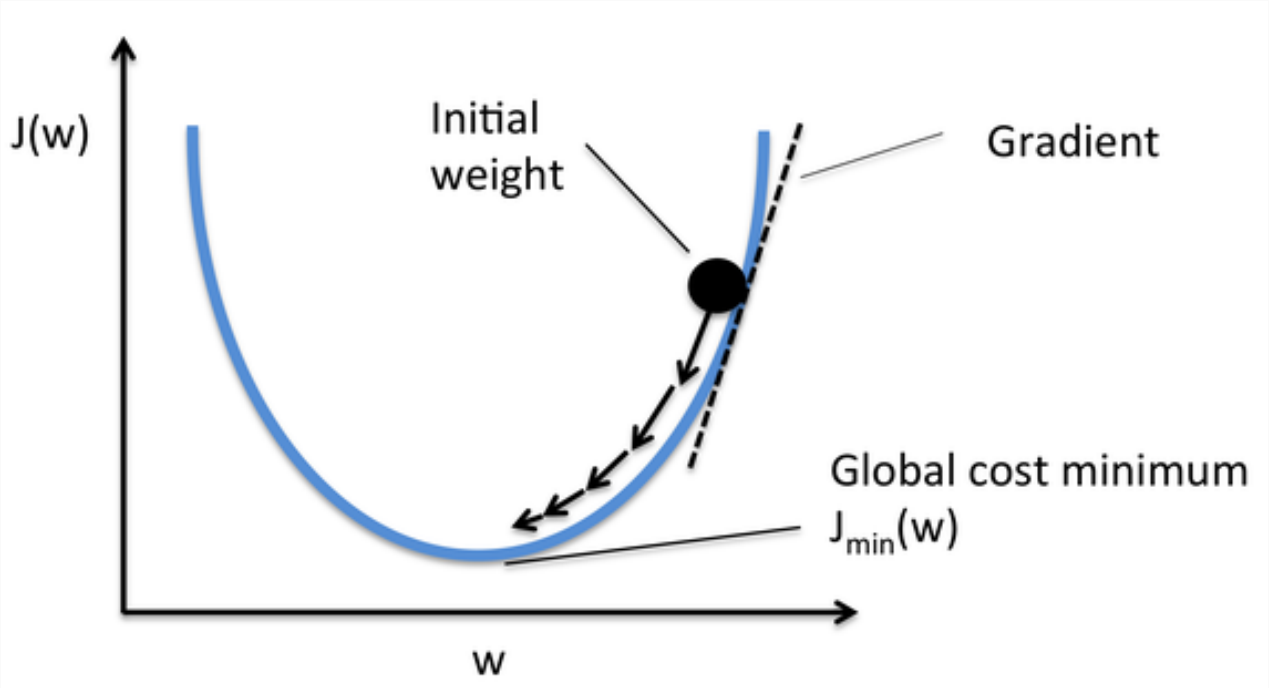
- Belajar $\rightarrow$ masalah optimasi kontinu
- Contoh: regresi linear, regresi logistik, jaringan saraf tiruan, SVM
- Salah satu caranya adalah dengan *maximum likelihood*

“Berapa peluangnya kita melihat data ini jika diketahui parameternya?”

Cara Melakukan Optimasi

- Menggunakan fungsi galat/error $E(\mathbf{w})$ yang akan diminimalkan
- e.g. dapat berupa $-L(\mathbf{w})$
- Beda nilai $\mathbf{w}$, beda besar error
- Belajar $\equiv$ menuruni permukaan error

Menuruni Permukaan Fungsi Error



Gambar 11: Menuruni lembah fungsi error J(w) [Raschka, 2015]

Gradient Descent

begin
  Inisialisasi $\mathbf{w}$
  while $E(\mathbf{w})$ *masih terlalu besar* **do**
    Hitung $\mathbf{g} \leftarrow \frac{\partial E}{\partial \mathbf{w}}$
    $\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} - \eta \mathbf{g}$
  end
  return $\mathbf{w}$
end

Algorithm 1: Melatih dengan gradient descent

Learning Rate

- η (baca: "eta") dikenal sebagai *step size* atau *learning rate* dengan nilai $\eta > 0$
- η terlalu kecil $\rightarrow$ lambat
- η terlalu besar $\rightarrow$ tidak stabil

Batch vs Online

- Untuk data yang sedikit, kita bisa menjumlahkan semua error sebelum memperbarui nilai $\mathbf{w}$ (*batch*)

Batch vs Online

- Untuk data yang sedikit, kita bisa menjumlahkan semua error sebelum memperbarui nilai **w** (*batch*)
- Bagaimana untuk 10 juta data?

Batch vs Online

- Untuk data yang sedikit, kita bisa menjumlahkan semua error sebelum memperbarui nilai **w** (*batch*)
- Bagaimana untuk 10 juta data?
- Ternyata, kita bisa memperbarui nilai **w** untuk setiap satu data (*online*)

Gradient Descent (Batch)

begin

  Inisialisasi $\mathbf{w}$

  while $E(\mathbf{w})$ *masih terlalu besar* **do**

    Hitung $\mathbf{g} \leftarrow \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial E_i}{\partial \mathbf{w}}$

    $\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} - \eta \mathbf{g}$

  end

  return $\mathbf{w}$

end

Algorithm 2: Melatih dengan batch gradient descent

Stochastic Gradient Descent

begin
  Inisialisasi **w**
  while $E(\mathbf{w})$ *masih terlalu besar* **do**
    Pilih j sebagai integer acak antara 1..N
    Hitung $\mathbf{g} \leftarrow \frac{\partial E_j}{\partial \mathbf{w}}$
    $\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} - \eta \mathbf{g}$
  end
  return **w**
end

Algorithm 3: Stochastic gradient descent (SGD)

Kelebihan dan Kekurangan

- **Batch** lebih *powerful*
- **Batch** lebih mudah dianalisis
- **Online** lebih praktikal untuk data yang besar
- **Online** dapat melompati optimum lokal

Pengembangan Gradient Descent

- "Why **Momentum** Really Works" [Goh, 2017]
- **Performance-dependent** η, e.g. "NewBOB": η berubah menjadi setengahnya saat validation set tidak menjadi lebih baik
- **Time-dependent schedules**, e.g. eksponensial: $\eta(t) = \eta(0)exp(-t/r)$ ($r \sim$ ukuran data latih)

Tentang Metode Optimasi

- Masih banyak metode optimasi yang tidak dibahas, e.g. linear programming, Newton's method, dll.
- Optimasi merupakan bidang matematika yang kompleks
- Masalah convex: optimum global. Non-convex: optimum lokal.
- Pahami mengapa *gradient descent* bisa mengalami masalah

Referensi

Jake VanderPlas (2016)

In Depth: Linear Regression

Python Data Science Handbook

Sebastian Raschka (2015)

Single-Layer Neural Networks and Gradient Descent

`http://sebastianraschka.com/Articles/2015_singlelayer_neurons.html`

Gabriel Goh (2017)

“Why Momentum Really Works”

Distill `http://distill.pub/2017/momentum/`

Terima kasih