ТЕХНОСФЕРА

Лекция 9
Линейные модели
вероятностная перспектива

Николай Анохин

16 ноября 2015 г.

План занятия

Линейная регрессия

Логистическая регрессия

Постановка задачи

Дано. Признаковые описания N объектов $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_m) \in \mathcal{X}$, образующие тренировочный набор данных X, и значения целевой переменной $y = f(\mathbf{x}) \in \mathcal{Y}$ для каждого объекта из X.

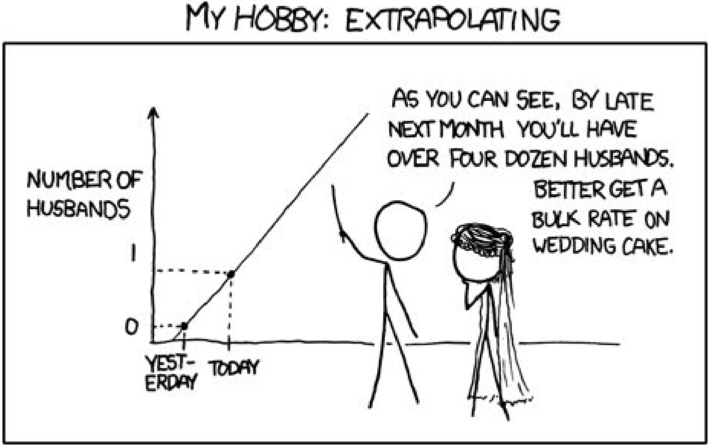
Найти. Для семейства параметрических функций

$$H = \{h(\mathbf{x}, \theta) = y : \mathcal{X} \times \Theta \to \mathcal{Y}\},$$

найти значение вектора параметров θ^*, такое что $h^*(\mathbf{x}) = h(\mathbf{x}, \theta^*)$ наилучшим образом приближает целевую функцию.

$$\begin{aligned} Y &\in \{C_1, C_2, \ldots, C_N\} \text{ – задача классификации} \\ Y &\in [a, b] \subset \mathcal{R} \text{ – задача регресии} \end{aligned}$$

Линейная регрессия



Модель

$$y = h(\mathbf{x}, \theta) + \epsilon,$$

где ϵ – гауссовский шум

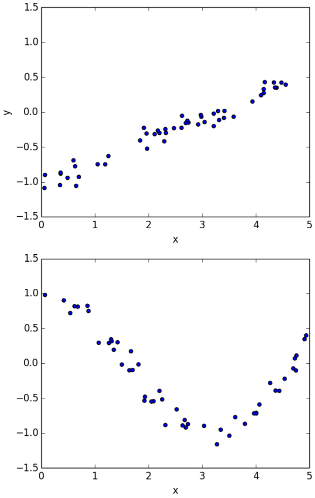
$$p(\epsilon) = \mathcal{N}(\epsilon | 0, \beta^{-1}),$$

откуда

$$p(y|\mathbf{x}, \theta, \beta) = \mathcal{N}(y | h(\mathbf{x}, \theta), \beta^{-1}).$$

Предсказание

$$E[y|\mathbf{x}] = \int y p(y|\mathbf{x}) dy = h(\mathbf{x}, \theta).$$



Линейная модель

простейшая модель

$$h(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = w_0 + w_1 x_1 + \ldots + w_M x_M = \sum_{j=0}^{M} w_j x_j$$

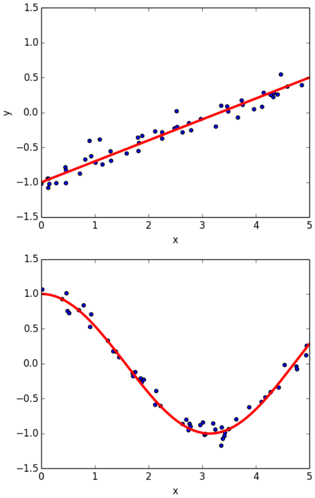
улучшенная модель

$$h(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \sum_{j=0}^{M} w_j \phi_j(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x}),$$

$\phi_j(\mathbf{x})$ – базисные функции, $\phi_0(\mathbf{x}) = 1$

примеры

$$\varphi_j(x) = x^j, \quad \varphi_j(x) = \exp\left\{-\frac{(x-\mu_j)^2}{2s^2}\right\}$$



ML – функция правдоподобия

Дана обучающая выборка $\mathcal{D} = (X, Y)$ из N объектов $(\mathbf{x_n}, y_n)$

Функция правдоподобия

$$\log p(Y|X, \mathbf{w}, \beta) = \sum_{n=1}^{N} \log \mathcal{N}(y|\mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x_n}), \beta^{-1}) =$$

$$= \frac{N}{2} \log \beta - \frac{N}{2} \log 2\pi - \frac{\beta}{2} \sum_{n=1}^{N} \{y_n - \mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x}_n)\}^2 \to \max_{\mathbf{w}, \beta}$$

Квадратичная функция потерь

$$E_D(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \{y_n - \mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x}_n)\}^2 \to \min_{\mathbf{w}}$$

ML – решение

$$\log p(Y|X, \mathbf{w}, \beta) = \frac{N}{2} \log \beta - \frac{N}{2} \log 2\pi - \frac{\beta}{2} \sum_{n=1}^{N} \{y_n - \mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x}_n)\}^2 \to \max_{\mathbf{w}, \beta}$$

Градиент

$$\beta \sum_{n=1}^{N} \{y_n - \mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x}_n)\} \phi(\mathbf{x_n})^T = 0$$

Решение

$$\mathbf{w}_{ML} = \mathbf{\Phi}^\dagger Y = (\mathbf{\Phi}^T \mathbf{\Phi})^{-1} \mathbf{\Phi}^T Y, \quad \frac{1}{\beta_{ML}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \{y_n - \mathbf{w}_{ML}^T \phi(\mathbf{x}_n)\}^2,$$

где

$$\mathbf{\Phi} = \begin{pmatrix} \phi_0(\mathbf{x_1}) & \dots & \phi_M(\mathbf{x_1}) \\ \phi_0(\mathbf{x_2}) & \dots & \phi_M(\mathbf{x_2}) \\ \dots & \dots & \dots \\ \phi_0(\mathbf{x_N}) & \dots & \phi_M(\mathbf{x_N}) \end{pmatrix}$$

Регуляризация

Функция потерь

$$E(\mathbf{w}, \lambda) = E_D(\mathbf{w}) + \lambda E_W(\mathbf{w}),$$

где (как и раньше)

$$E_D(\mathbf{w}) = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\{y_n - \mathbf{w}^T\phi(\mathbf{x}_n)\}^2 \to \min_{\mathbf{w}},$$

плюс регуляризация

$$E_W(\mathbf{w}) = E_q(\mathbf{w}) = \sum_{j=1}^{M}|\mathbf{w}_j|^q$$

Зоопарк

- $q = 1$ – Lasso
- $q = 2$ – Ridge (байесовский вывод: $p(\mathbf{w}|\alpha) = \mathcal{N}(\mathbf{w}|0, \alpha^{-1}\mathbf{I})$)
- $E_W(\mathbf{w}) = \rho E_1(\mathbf{w}) + (1-\rho)E_2(\mathbf{w})$ – Elastic Net

Робастная регрессия

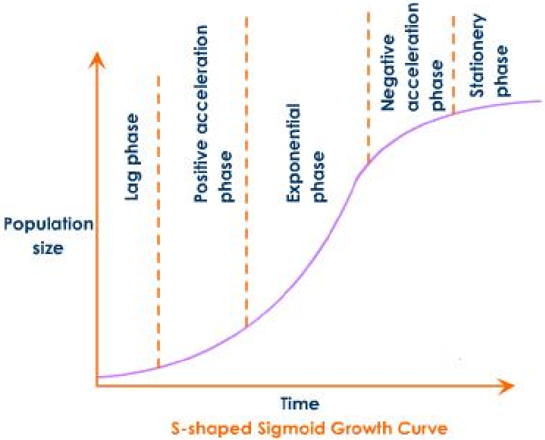
Проблема: линейная регрессия чувствительна к шуму из-за того, что плотность нормального распределение очень быстро убывает

Решения:

- MAE вместо MSE
- LTS: Least Trimmed Sum of Squares [1]
- RANSAC [2]
- t-Distribution вместо Гаусса

[1] Least trimmed squares (wikipedia)
[2] RANSAC (wikipedia)

Логистическая регрессия



Ирисы Фишера

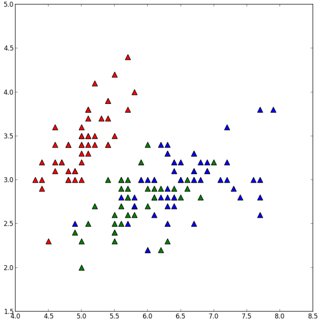
  

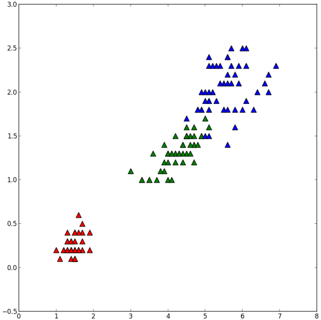
Setosa Versicolor Virginica

Задача

Определить вид ириса на основании длины чашелистика, ширины чашелистика, длины лепестка и ширины лепестка.

Ирисы Фишера





Многомерное нормальное распределение

$$\mathcal{N}(\mathbf{x}|\mu, \mathbf{\Sigma}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \frac{1}{|\mathbf{\Sigma}|^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mu)^T \Sigma^{-1} (\mathbf{x}-\mu)\right\}$$

Параметры

D-мерный вектор средних

$$\mu = \int \mathbf{x} p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

$D \times D$-мерная матрица ковариации

$$\mathbf{\Sigma} = E[(\mathbf{x}-\mu)(\mathbf{x}-\mu)^T]$$

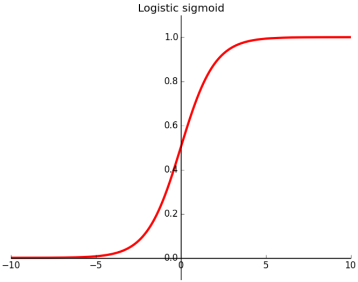
Генеративная модель

Рассматриваем 2 класса

$$p(y_1|x) = \frac{p(x|y_1)p(y_1)}{p(x|y_1)p(y_1) + p(x|y_2)p(y_2)} = \frac{1}{1+e^{-a}} = \sigma(a)$$

$$a = \ln \frac{p(x|y_1)p(y_1)}{p(x|y_2)p(y_2)}$$

$\sigma(a)$ – сигмоид-функция, $a = \ln(\sigma/(1-\sigma))$



Случай нормальных распределений

Пусть

$$p(\mathbf{x}|y_k) = \mathcal{N}(\mathbf{x}|\mu_k, \mathbf{\Sigma}),$$

тогда

$$p(y_1|\mathbf{x}) = \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x} + w_0),$$

где

$$\mathbf{w} = \mathbf{\Sigma}^{-1}(\mu_1 - \mu_2)$$

$$w_0 = -\frac{1}{2}\mu_1^T\mathbf{\Sigma}^{-1}\mu_1 + \frac{1}{2}\mu_2^T\mathbf{\Sigma}^{-1}\mu_2 + \ln\frac{p(y_1)}{p(y_2)}$$

Аналогичный результат для любых распределений из экспоненциального семейства

Maximum Likelihood

$$p(y_1, \mathbf{x}) = p(y_1)p(\mathbf{x}|y_1) = \pi\mathcal{N}(\mathbf{x}|\mu_1, \mathbf{\Sigma})$$
$$p(y_2, \mathbf{x}) = p(y_2)p(\mathbf{x}|y_2) = (1-\pi)\mathcal{N}(\mathbf{x}|\mu_2, \mathbf{\Sigma})$$

Функция правдоподобия

$$p(Y, X|\pi, \mu_1, \mu_2, \mathbf{\Sigma}) = \prod_{n=1}^{N} \left[\pi\mathcal{N}(\mathbf{x}|\mu_1, \mathbf{\Sigma})\right]^{y_n} \left[(1-\pi)\mathcal{N}(\mathbf{x}|\mu_2, \mathbf{\Sigma})\right]^{1-y_n}$$

Максимизируя $\log p(Y, X|\pi, \mu_1, \mu_2, \mathbf{\Sigma})$, имеем

$$\pi = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} y_n = \frac{N_1}{N_1 + N_2},$$

$$\mu_1 = \frac{1}{N_1}\sum_{n=1}^{N} y_n \mathbf{x}_n, \quad \mu_2 = \frac{1}{N_2}\sum_{n=1}^{N}(1-y_n)\mathbf{x}_n,$$

аналогично для $\mathbf{\Sigma}$

Логистическая регрессия

Дано.

$$\mathcal{D} = \{\phi_n = \phi(\mathbf{x}_n), y_n\},\ y_n \in \{0, 1\},\ n = 1 \dots N$$

Модель.

$$p(y = 1|\phi) = \sigma(\mathbf{w}^\top \phi)$$

функция правдоподобия (кросс-энтропия)

$$l(\mathbf{w}) = \log \left[\prod_{n=1}^{N} p^{y_n}(y = 1|\phi_n)(1 - p(y = 1|\phi_n))^{1-y_n} \right] =$$

$$= \sum_{n=1}^{N} y_n \log p(y = 1|\phi_n) + (1 - y_n) \log(1 - p(y = 1|\phi_n)) = -J_c(\mathbf{w}) \to \max_{\mathbf{w}}$$

Градиент

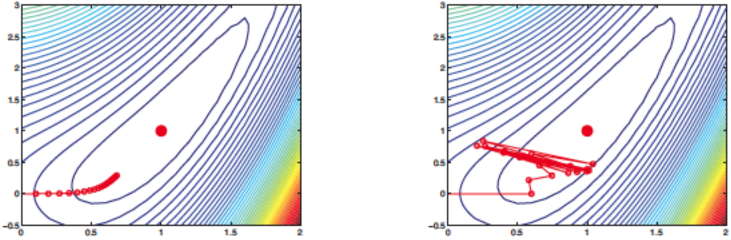
$$\nabla J_c(\mathbf{w}) = \sum_{n=1}^{N} (p(y=1|\phi_n) - y_n)\phi_n$$

Гессиан

$$\nabla^2 J_c(\mathbf{w}) = \sum_{n=1}^{N} p(y=1|\phi_n)(1 - p(y=1|\phi_n))\phi_n \phi_n^T$$

Градиентный спуск

```
function gd(grad, a0, epsilon):
    initialise eta(k)
    k = 0
    a = a0
    do:
        k = k + 1
        a = a - eta(k) grad(a)
    until eta(k) grad(a) < epsilon
    return a
```

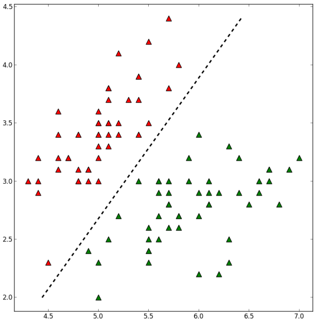


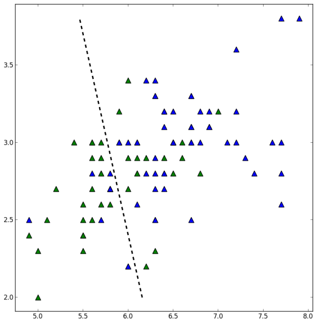
(a)

(b)

Добавление момента: $\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k - \eta_k \nabla J(\mathbf{a}_k) + \mu_k(\mathbf{a}_k - \mathbf{a}_{k-1})$

Логистическая регрессия: результаты

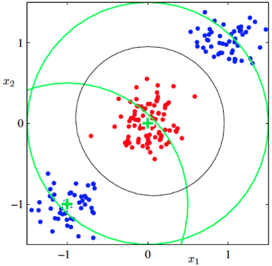


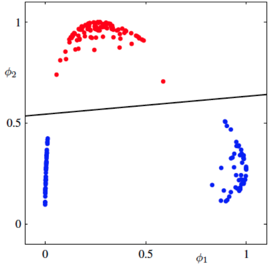


Обобщенная линеная модель / GLM

$$y(\mathbf{x}, \mathbf{w}) \sim pdf\left[f(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}))\right],$$

- $\phi_n(\mathbf{x})$ – базисные функции
- $f(a)$ – функция активации
- pdf – распределение из экспоненциального семейства





Distribution	Support of distribution	Typical uses	Link name	Link function	Mean function
Normal	real: $(-\infty, +\infty)$	Linear-response data	Identity	$\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \mu$	$\mu = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$
Exponential	real: $(0, +\infty)$	Exponential-response data, scale parameters	Inverse	$\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = -\mu^{-1}$	$\mu = -(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^{-1}$
Gamma					
Inverse Gaussian	real: $(0, +\infty)$		Inverse squared	$\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = -\mu^{-2}$	$\mu = (-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^{-1/2}$
Poisson	integer: $0, 1, 2, \ldots$	count of occurrences in fixed amount of time/space	Log	$\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \ln(\mu)$	$\mu = \exp(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$
Bernoulli	integer: $\{0, 1\}$	outcome of single yes/no occurrence	Logit	$\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \ln\left(\frac{\mu}{1-\mu}\right)$	$\mu = \frac{\exp(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})}{1+\exp(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})} = \frac{1}{1+\exp(-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})}$
Binomial	integer: $0, 1, \ldots, N$	count of # of "yes" occurrences out of N yes/no occurrences			
Categorical	integer: $[0, K)$	outcome of single K-way occurrence			
	K-vector of integer: $[0, 1]$, where exactly one element in the vector has the value 1				
Multinomial	K-vector of integer: $[0, N]$	count of occurrences of different types (1 .. K) out of N total K-way occurrences			

Источник: Wikipedia

Мультикласс классификация

- one-vs-rest
  Строим K моделей, каждая соответствует одному классу
- one-vs-one
  Строим $K(K-1)/2$ моделей, каждая соответствует паре классов

Вопросы