Методы машинного обучения

Лекция 5

Линейная регрессия и методы оптимизации

Эльвира Зиннурова

elvirazinnurova@gmail.com

НИУ ВШЭ, 2019

Градиент

- Градиент — вектор из частных производных:

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_d}(x)\right)$$

- И зачем нам этот вектор?
- У градиента есть очень важное свойство!

Градиент

- Зафиксируем точку x_0
- В каком направлении функция быстрее всего растет?

$$f'_v(x_0) \to \max_v$$

Угол между градиентом и направлением

- Связь производной по направлению и градиента:

$$f'_v(x_0) = \langle \nabla f(x_0), v \rangle = \|\nabla f(x_0)\| * \|v\| * \cos \varphi$$

Градиент

- Произвольная по направлению максимальна, если направление совпадает с градиентом!
- **Градиент — направление наискорейшего роста функции**
- Антиградиент — направление наискорейшего убывания

Условие оптимальности

- Как понять, является ли точка x_0 экстремумом?
- Обобщение теоремы Ферма: если точка x_0 — экстремум, и в ней существует градиент, то $\nabla f(x_0) = 0$

- Если функция везде имеет градиент: решаем $\nabla f(x) = 0$
- Если с градиентом проблемы: не повезло

Методы оптимизации

Поиск минимума

- Функционал качества линейной регрессии — например, MSE:

$$Q(w_1, \dots, w_d) = \sum_{i=1}^{\ell} \left(w_1 x^1 + \cdots + w_d x^d - y_i \right)^2$$

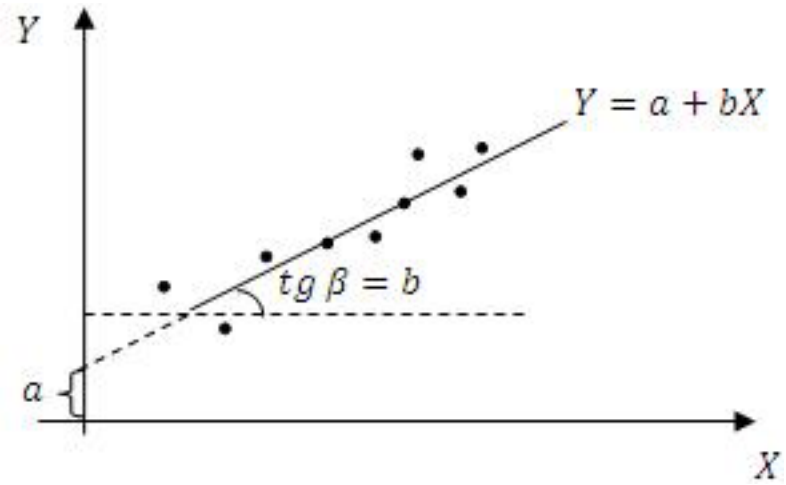
- Как искать минимум?

Поиск минимума

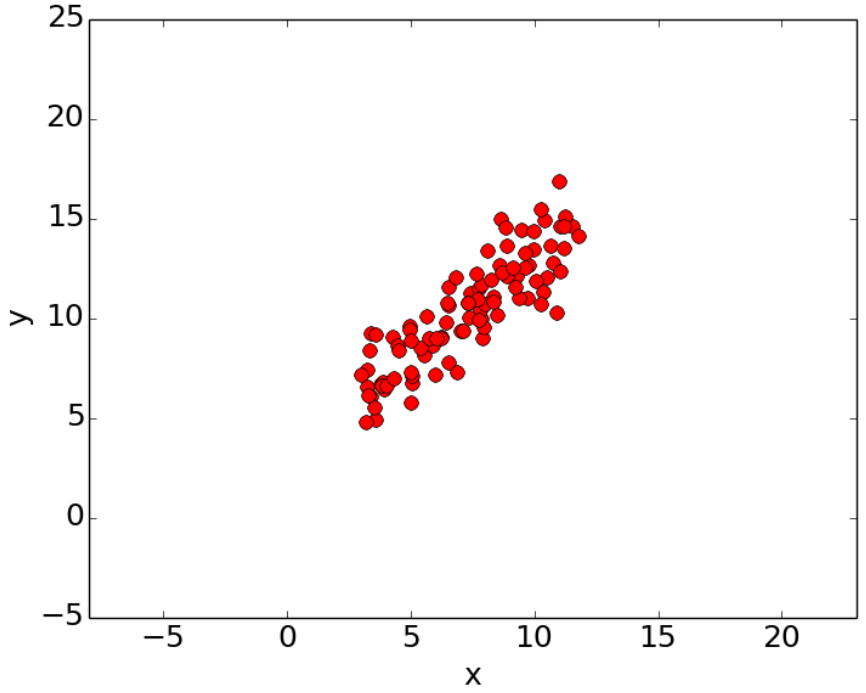
- Можно решать уравнение: $\nabla Q(w) = 0$
- А если уравнение сложное, и аналитически решить нельзя?
- Нужна численная оптимизация

Парная регрессия

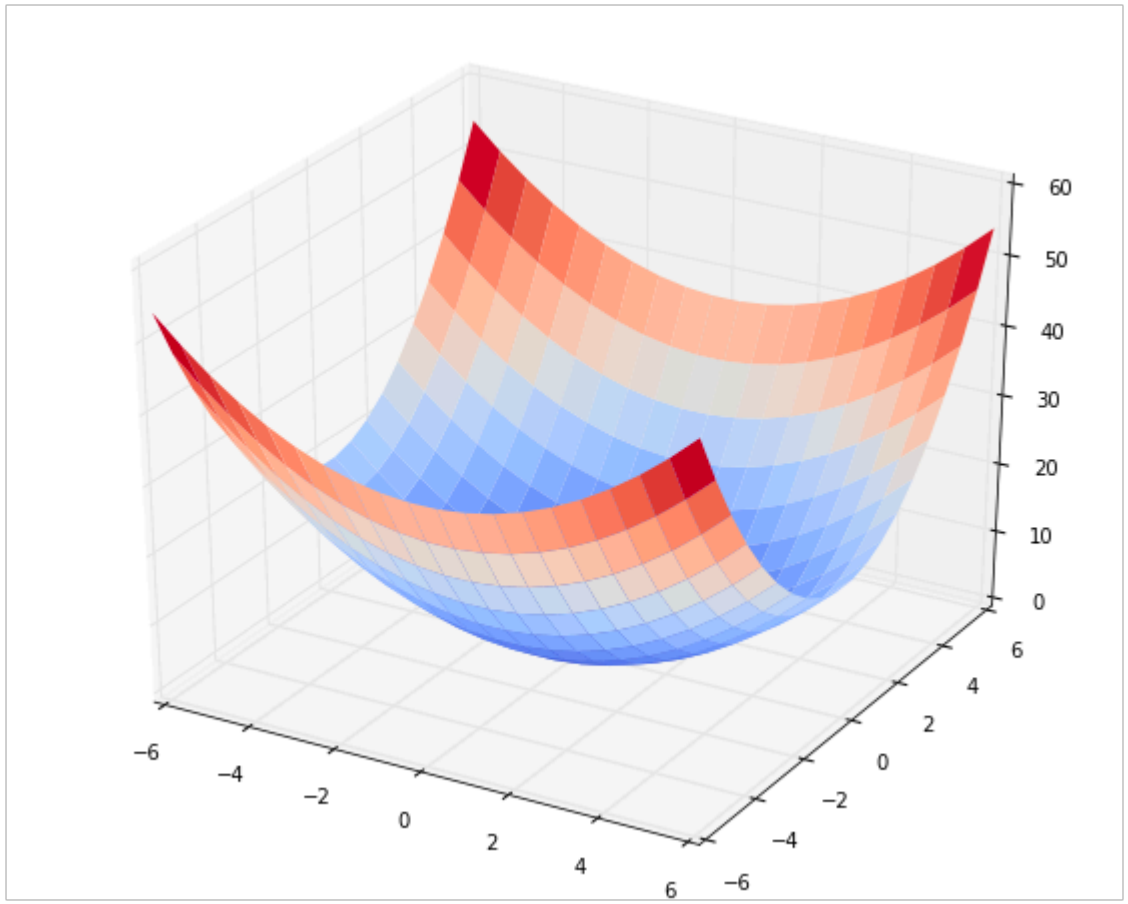
- Простейший случай: один признак
- Модель: $a(x) = w_1 x + w_0$
- Два параметра: w_1 и w_0
- Функционал: $Q(w_0, w_1) = \sum_{i=1}^{\ell}(w_1 x_i + w_0 - y_i)^2$



Парная регрессия



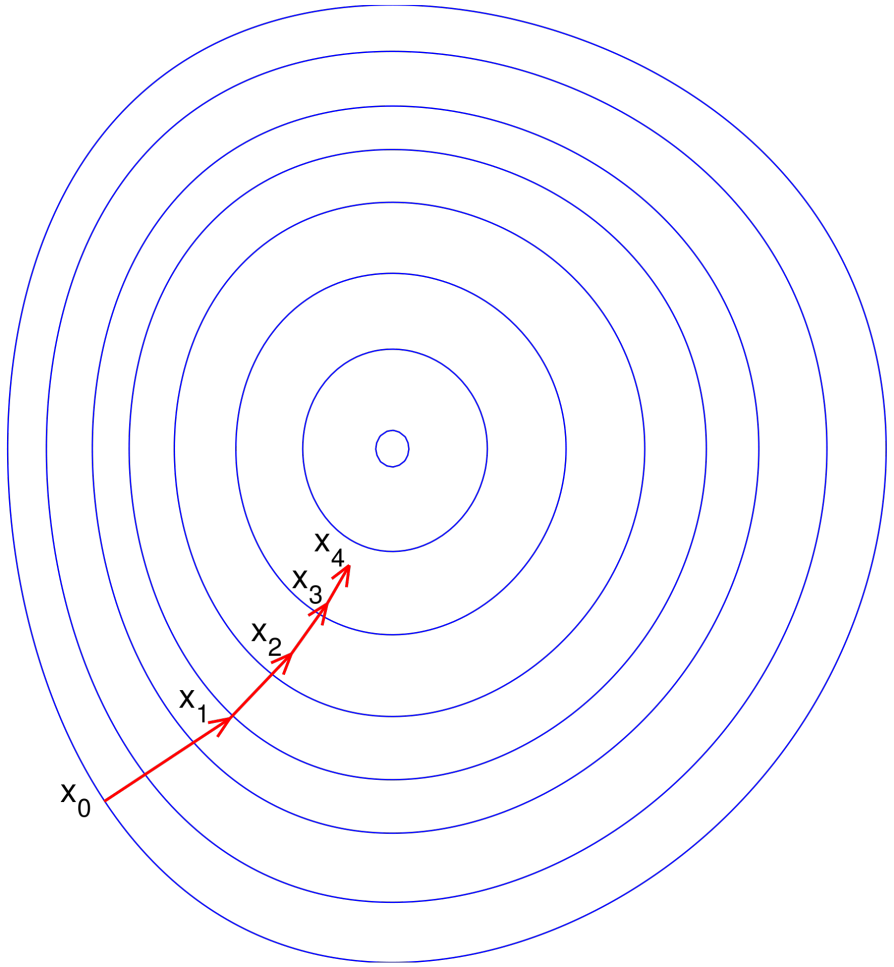
Выборка



Функционал качества

Градиентный спуск

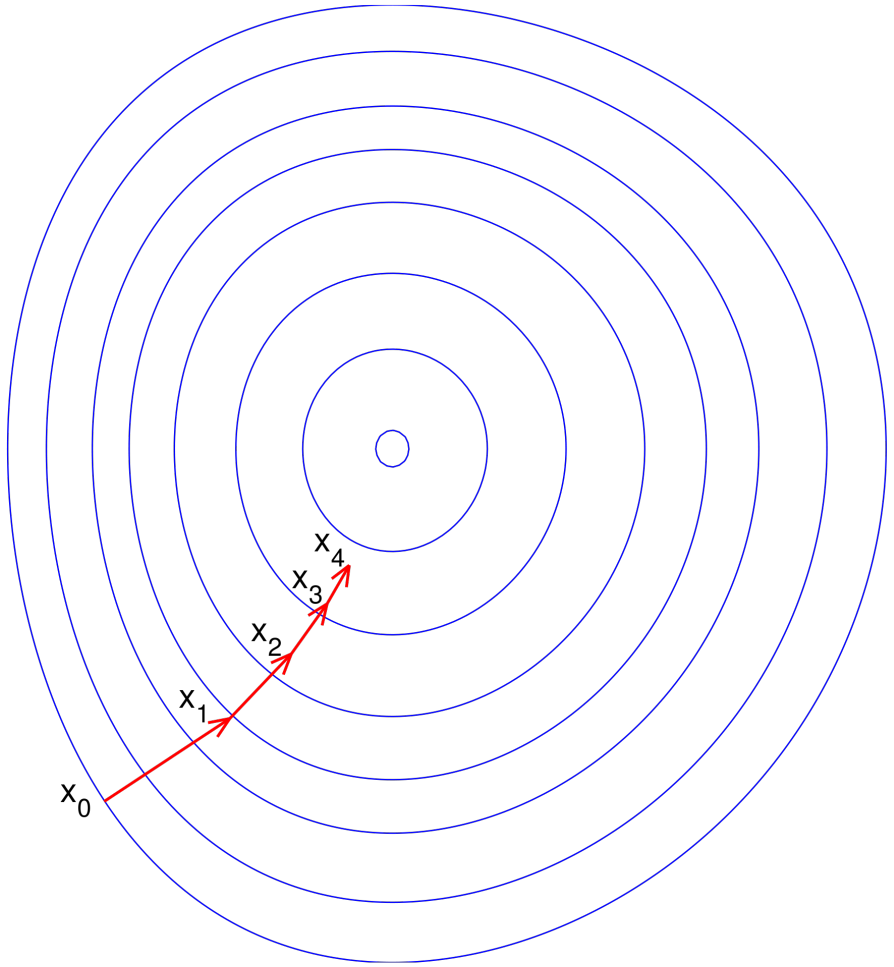
- Допустим, мы выбрали начальное приближение $w^0 = (w_0^0, w_1^0)$
- Как его улучшить?
- Шагнуть в сторону наискорейшего убывания
- То есть в сторону антиградиента!



Градиентный спуск

- Допустим, мы выбрали начальное приближение $w^0 = (w_0^0, w_1^0)$
- Как его улучшить?
- Шагнуть в сторону наискорейшего убывания
- То есть в сторону антиградиента!

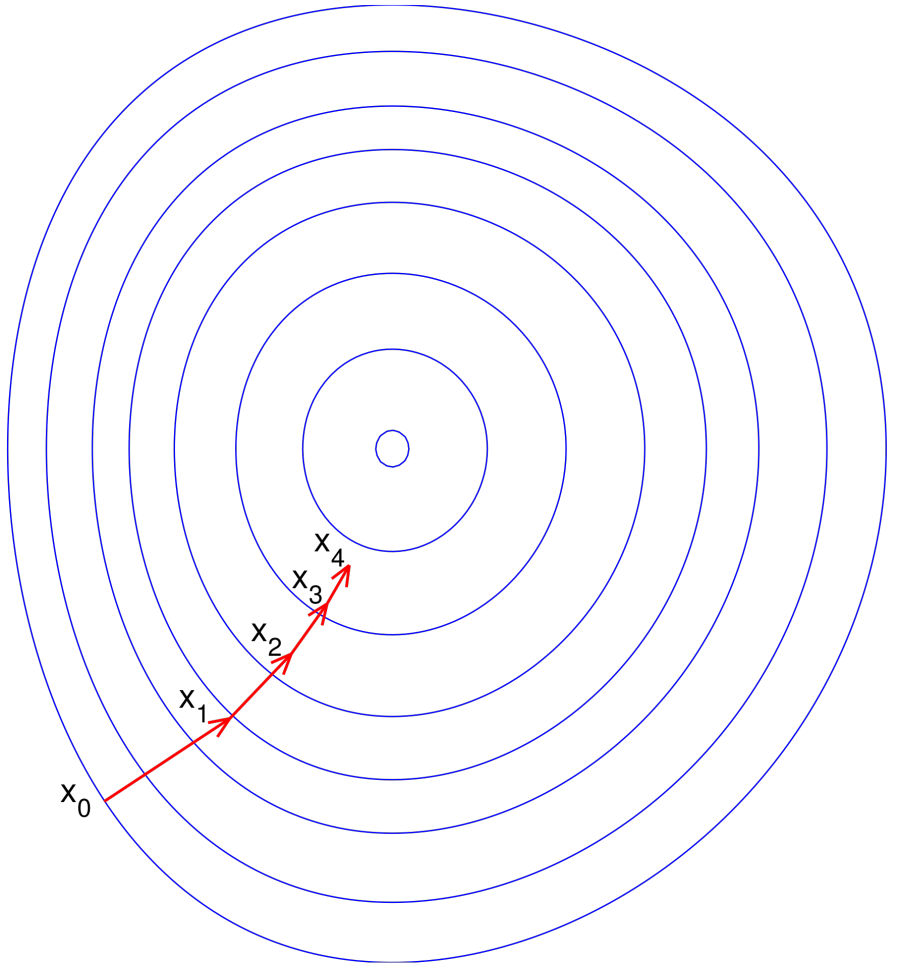
$$w^1 = w^0 - \eta \nabla Q(w^0)$$



Градиентный спуск

- Допустим, мы выбрали начальное приближение $w^0 = (w_0^0, w_1^0)$
- Как его улучшить?
- Шагнуть в сторону наискорейшего убывания
- То есть в сторону антиградиента!

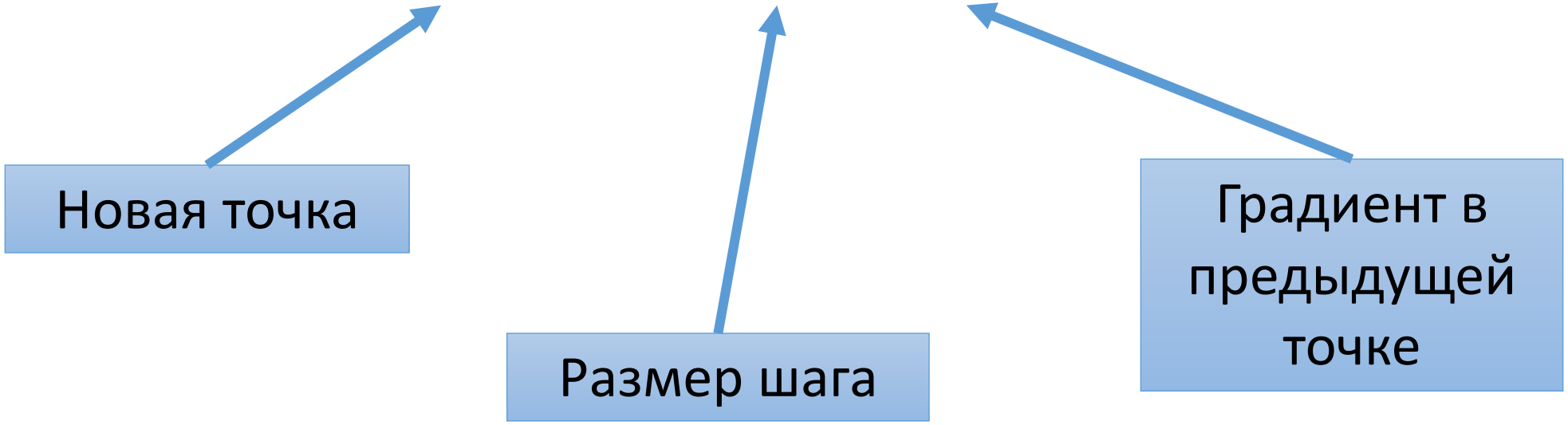
$$w^1 = w^0 - \eta \nabla Q(w^0)$$
$$w^2 = w^1 - \eta \nabla Q(w^1)$$
$$\dots$$



Градиентный спуск

- Повторять до сходимости:

$$w^t = w^{t-1} - \eta \nabla Q(w^{t-1})$$



Градиентный спуск

- Повторять до сходимости:

$$w^t = w^{t-1} - \eta \nabla Q(w^{t-1})$$

- Сходимость: $\|w^t - w^{t-1}\| < \varepsilon$

Градиент для парной регрессии

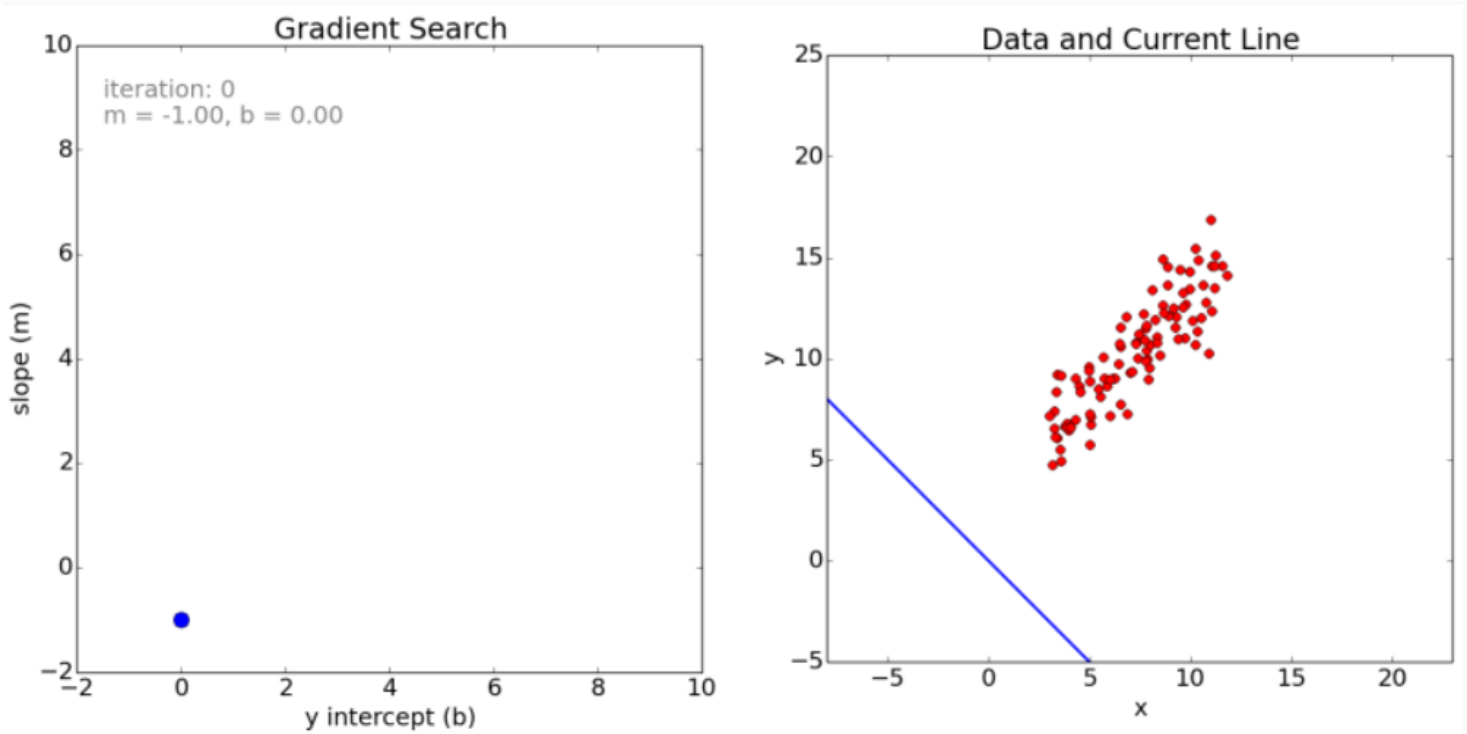
$$Q(w_0, w_1) = \sum_{i=1}^{\ell} (w_1 x_i + w_0 - y_i)^2$$

- Частные производные:

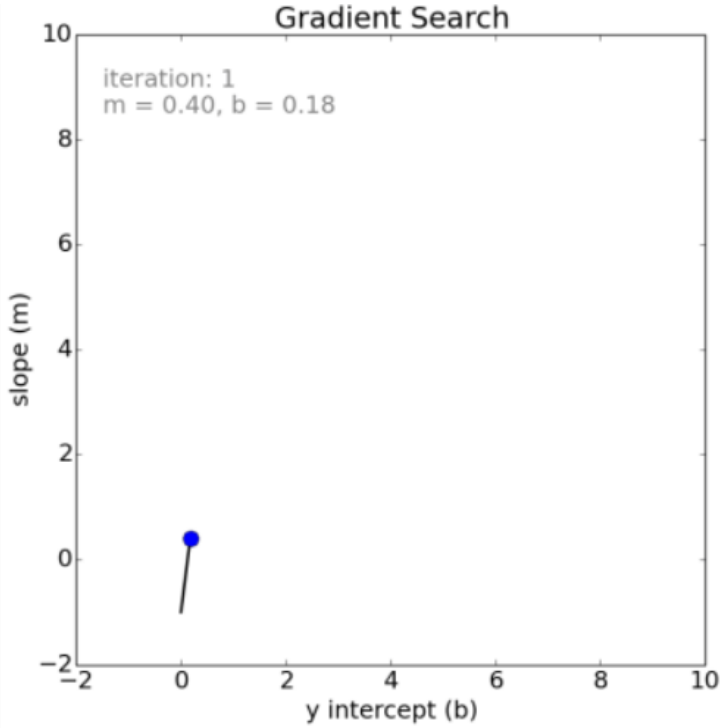
$$\frac{\partial Q}{\partial w_1} = 2 \sum_{i=1}^{\ell} (w_1 x_i + w_0 - y_i) x_i$$

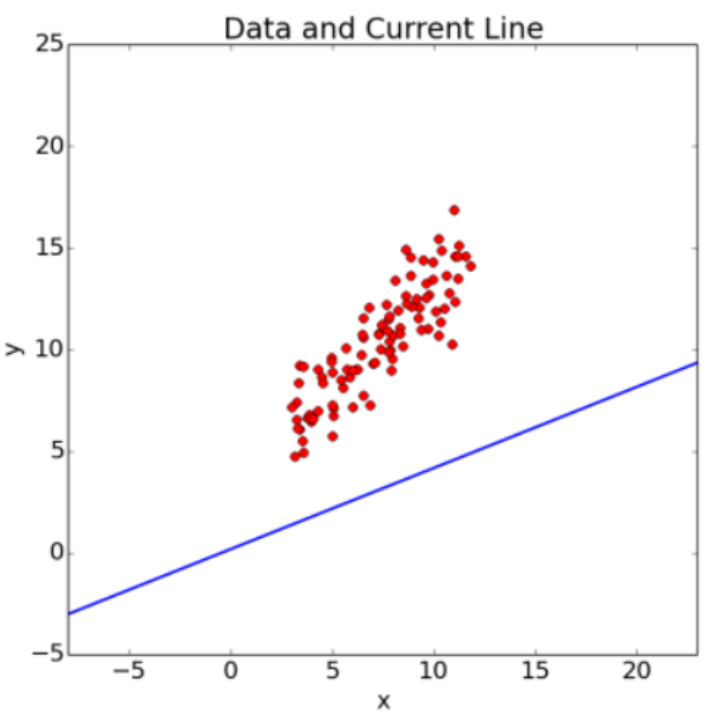
$$\frac{\partial Q}{\partial w_0} = 2 \sum_{i=1}^{\ell} (w_1 x_i + w_0 - y_i)$$

Парная регрессия

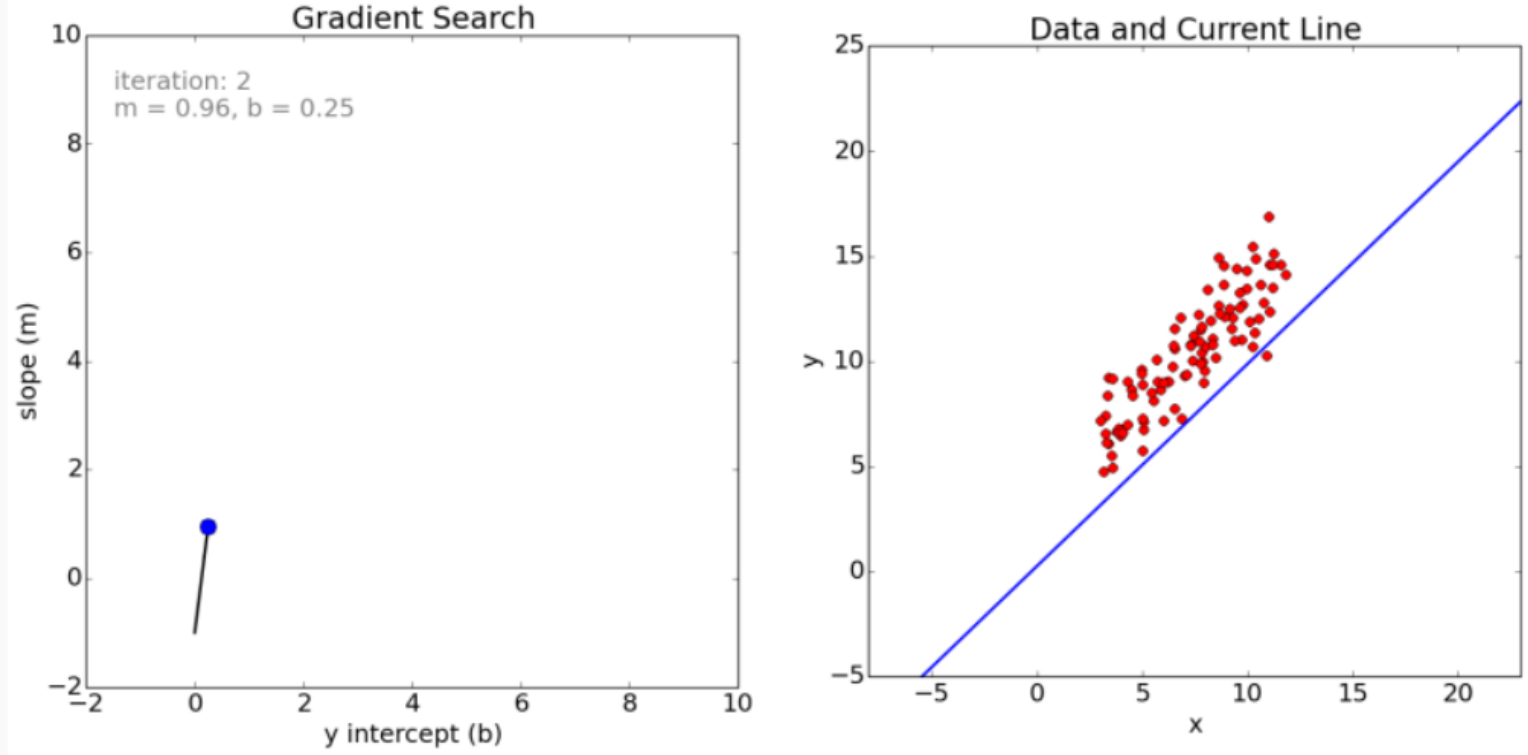


Парная регрессия

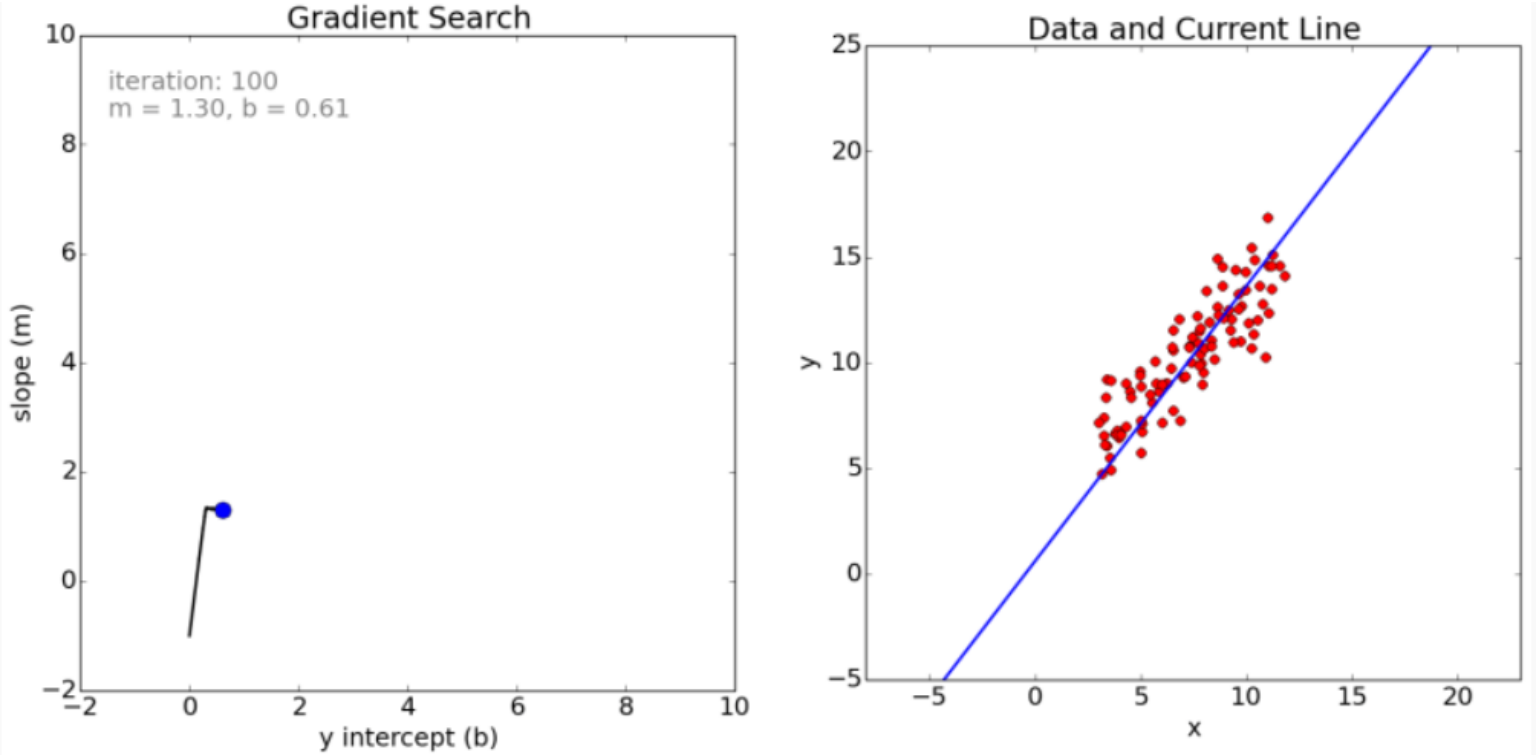




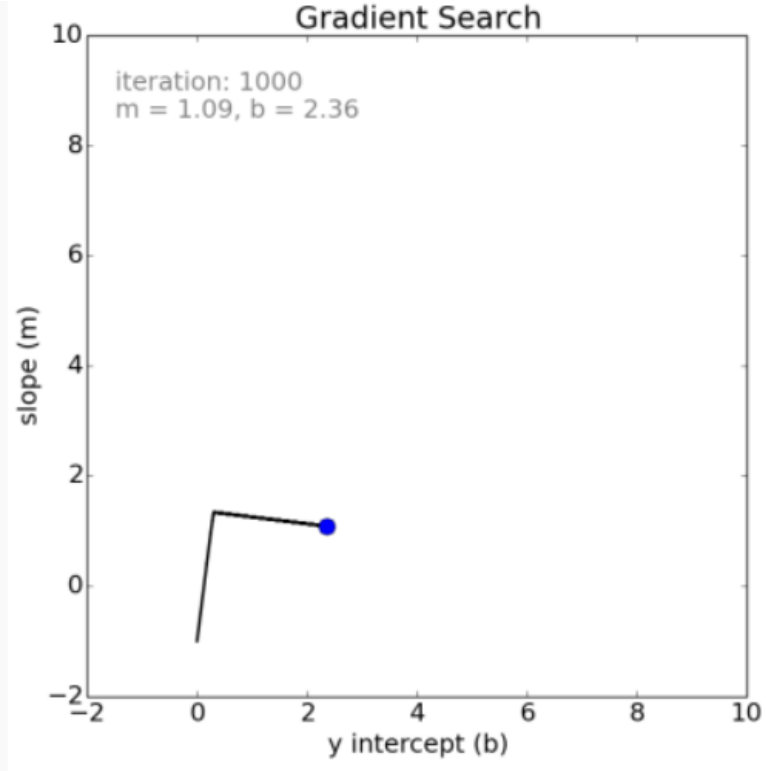
Парная регрессия

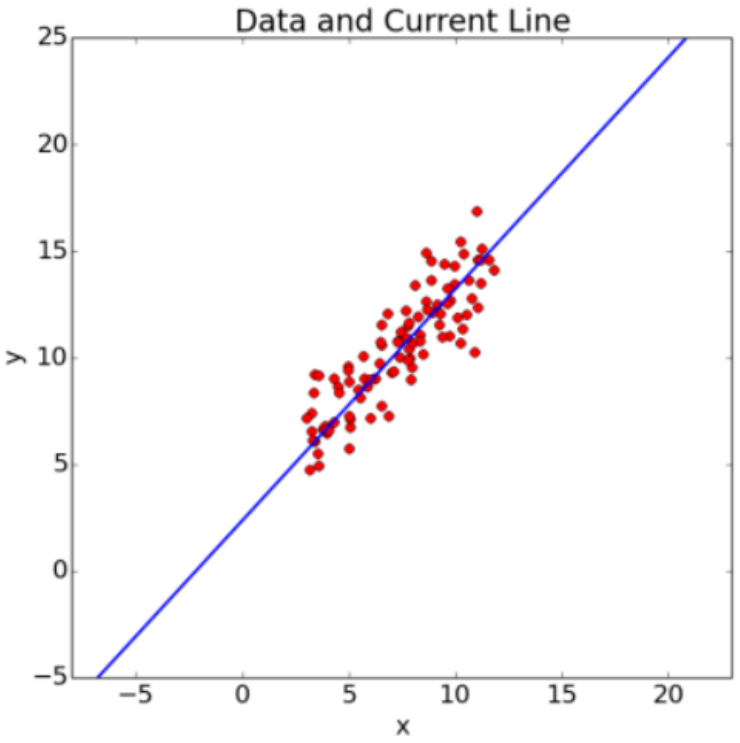


Парная регрессия

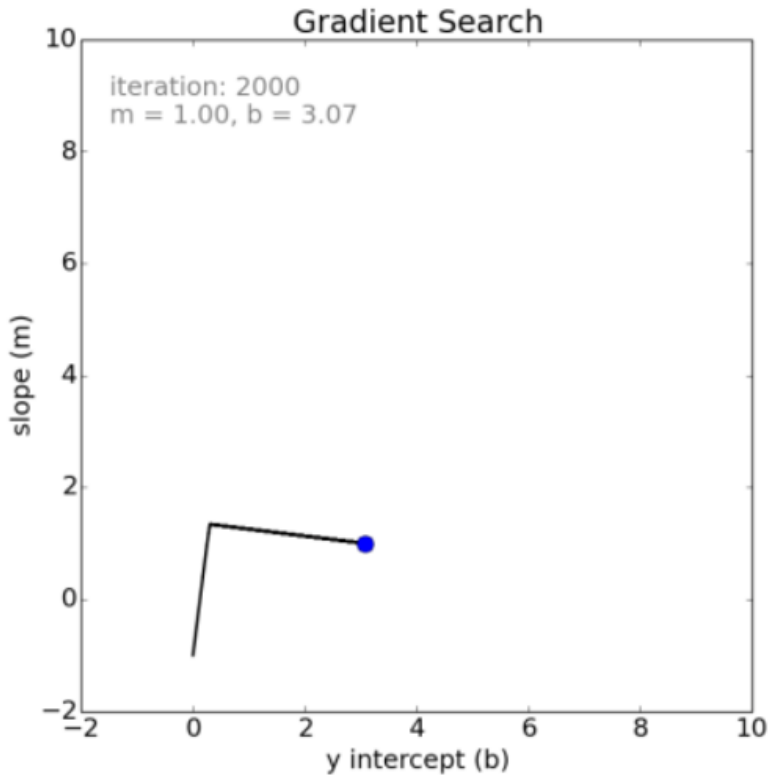


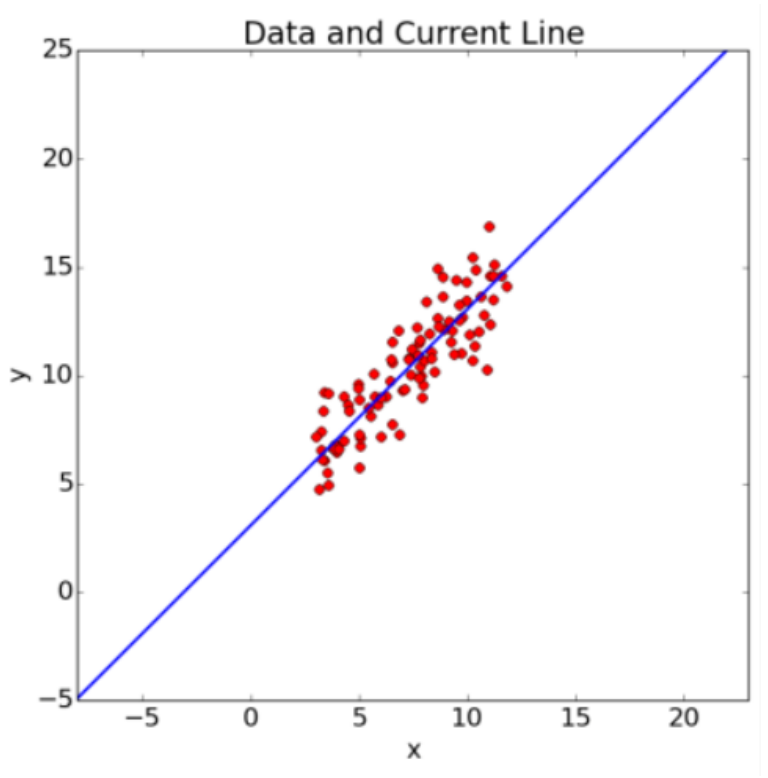
Парная регрессия

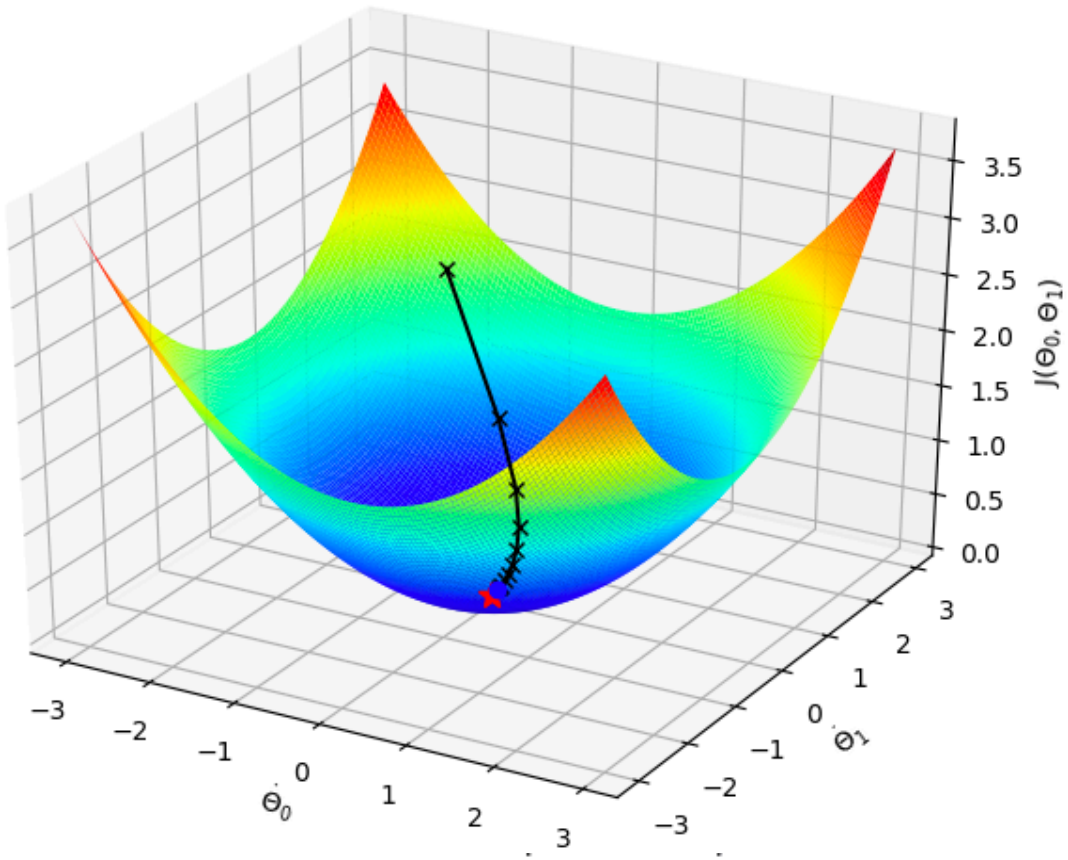


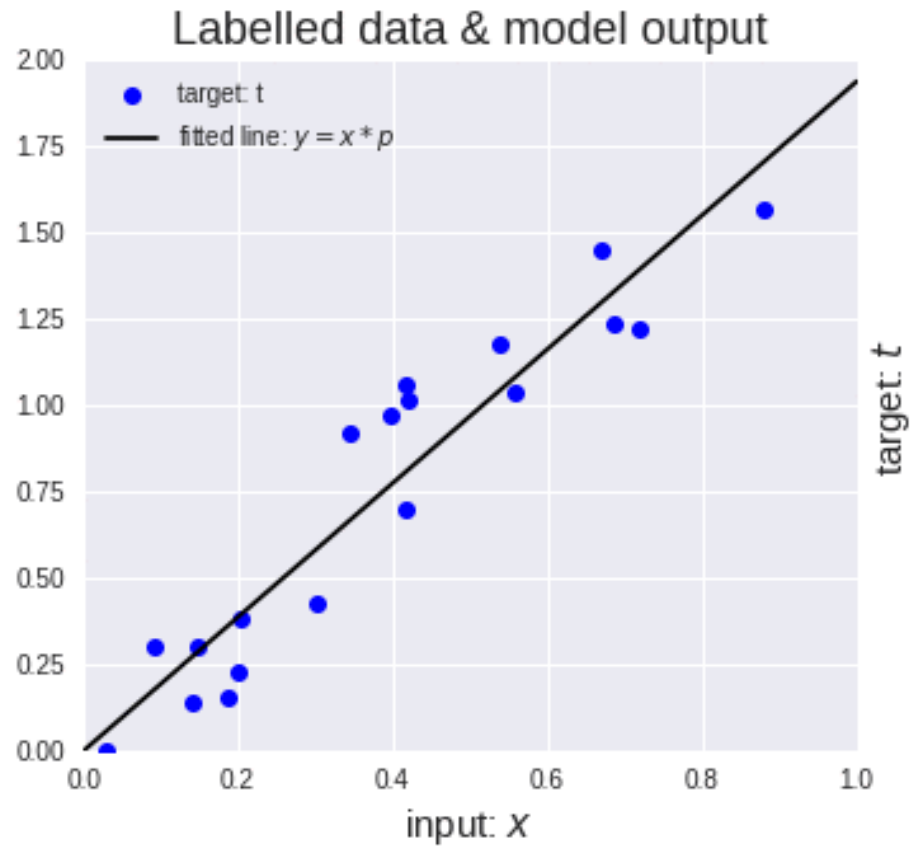


Парная регрессия

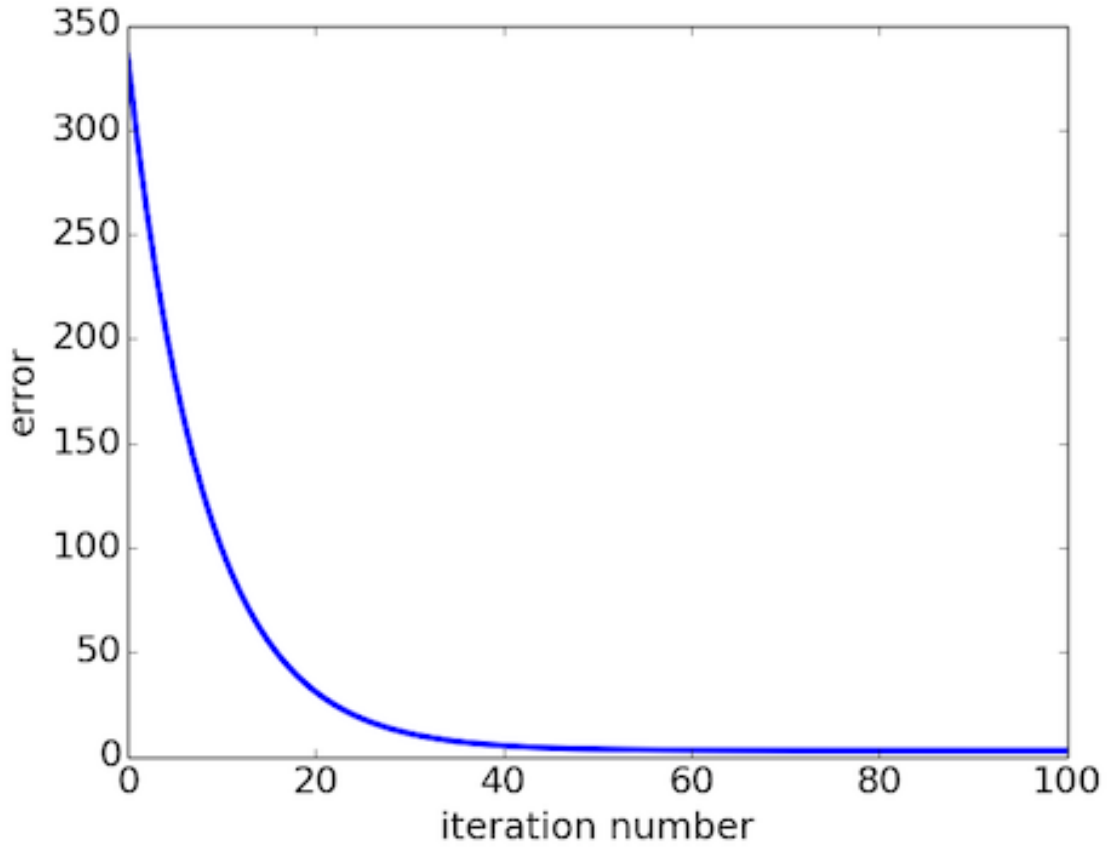





3.5
3.0
2.5
2.0
1.5
1.0
0.5
0.0
$J(\Theta_0, \Theta_1)$
−3
−2
−1
0
1
2
3
Θ_0
Θ_1

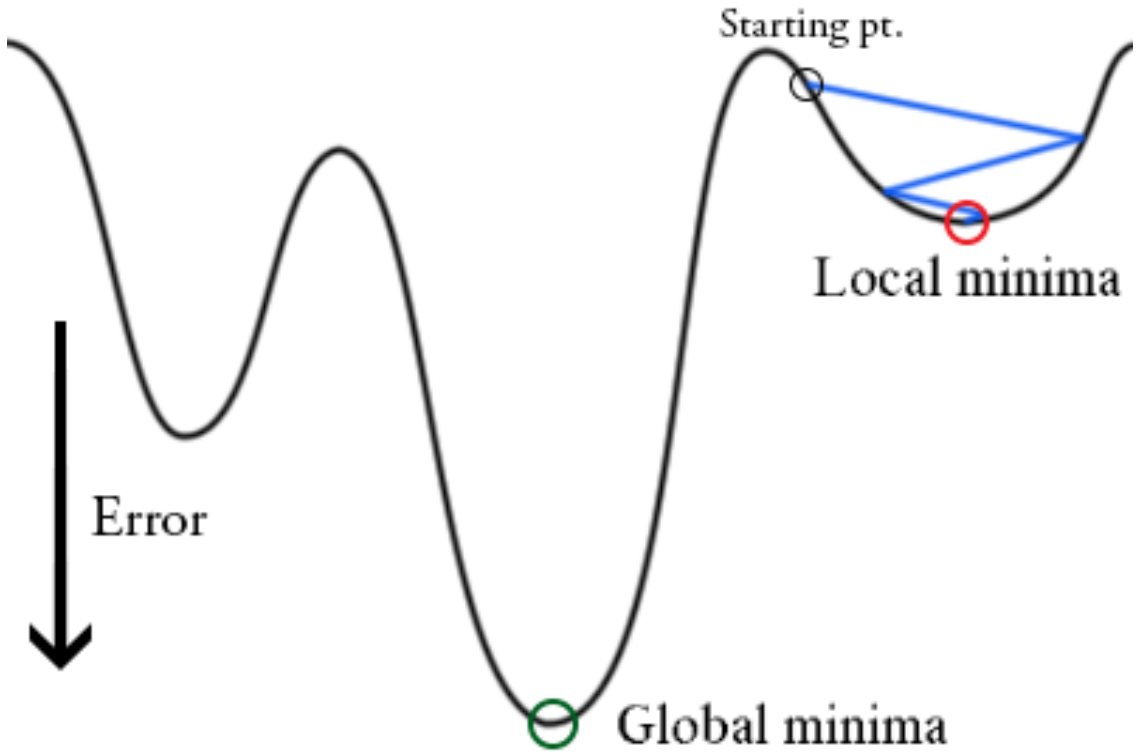

Labelled data & model output
target: t
fitted line: $y = x * p$
2.00
1.75
1.50
1.25
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
input: x
target: t

Функционал качества



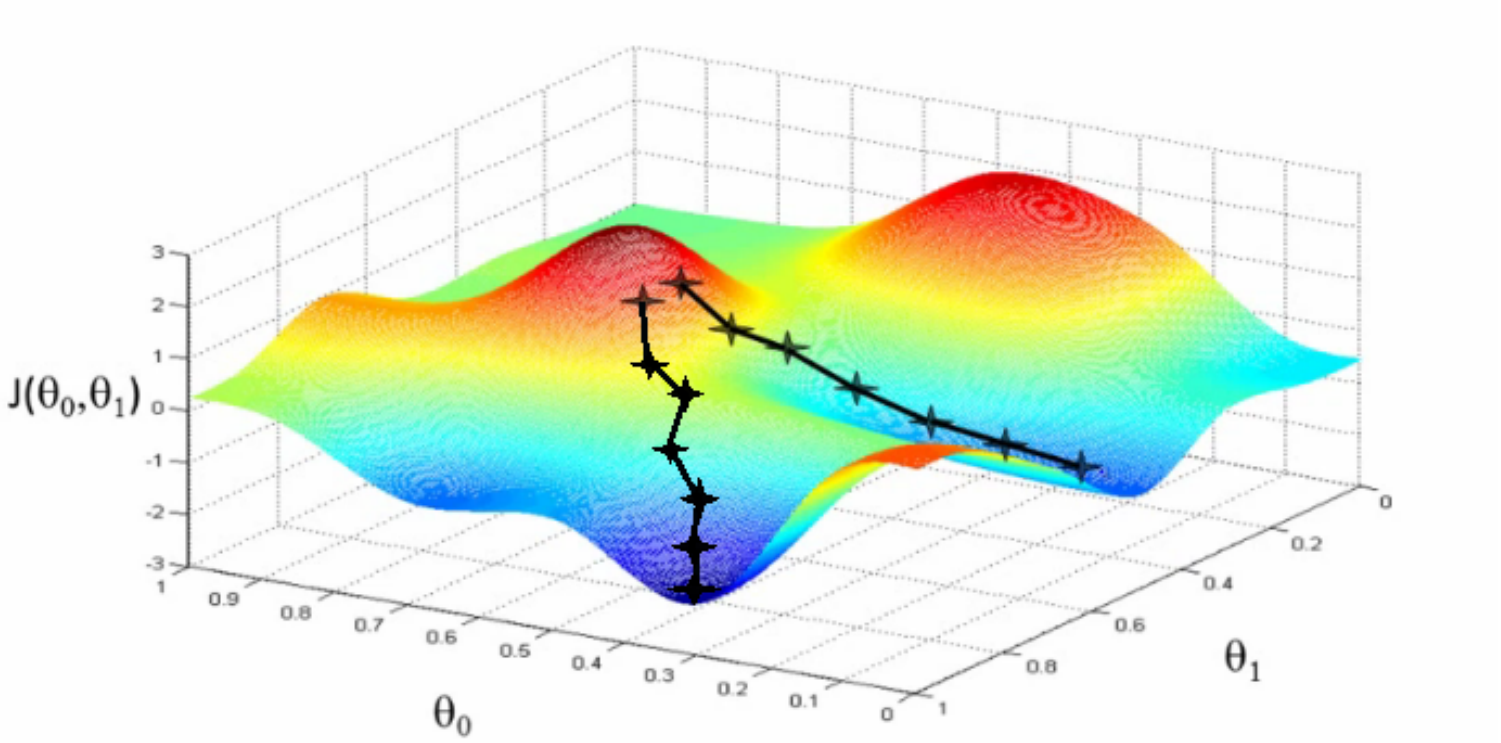
Локальные минимумы

- Градиентный спуск находит только локальные минимумы



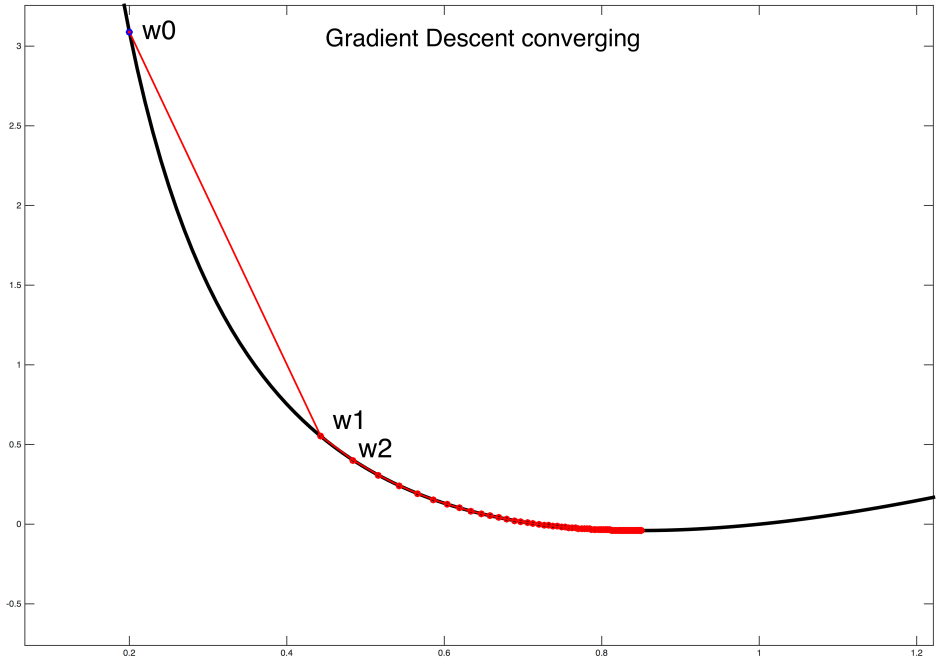
Локальные минимумы

- Результат зависит от начального приближения
- Мультистарт — оптимизируем несколько раз из разных начальных точек

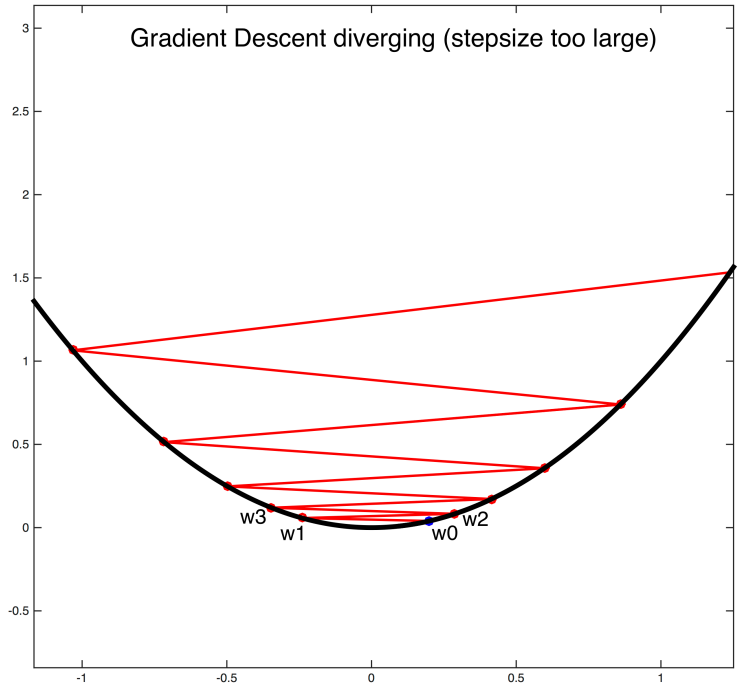


Размер шага

- Выбор размера шага η — искусство



Маленький шаг



Большой шаг

Размер шага

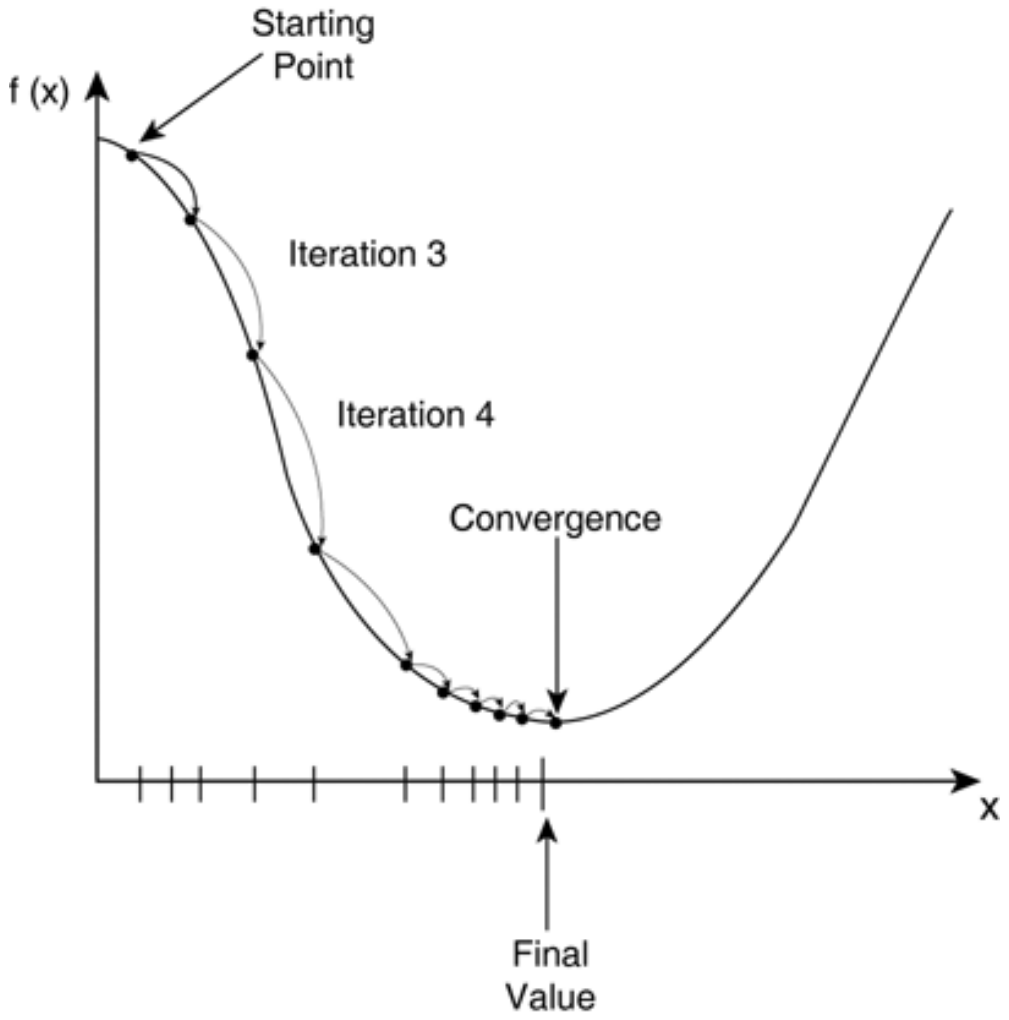
- Маленький шаг — больше шансов на сходимость, но требуется больше итераций
- Большой шаг — есть риск отсутствия сходимости
- Наискорейший градиентный спуск:

$$\eta_t = \arg\min_{\eta} Q\left(w^{t-1} - \eta\, \nabla Q\left(w^{t-1}\right)\right)$$

- Нужно делать одномерный поиск на каждой итерации

Размер шага

- Обычно пользуются эвристиками
- Чем ближе к минимуму, тем меньше надо шагать
- Неплохо работает: $\eta_t = \frac{1}{t}$
- Еще лучше: $\eta_t = \lambda \left(\frac{s}{s+t}\right)^p$ (но нужно подбирать λ, s, p)



Другие методы оптимизации

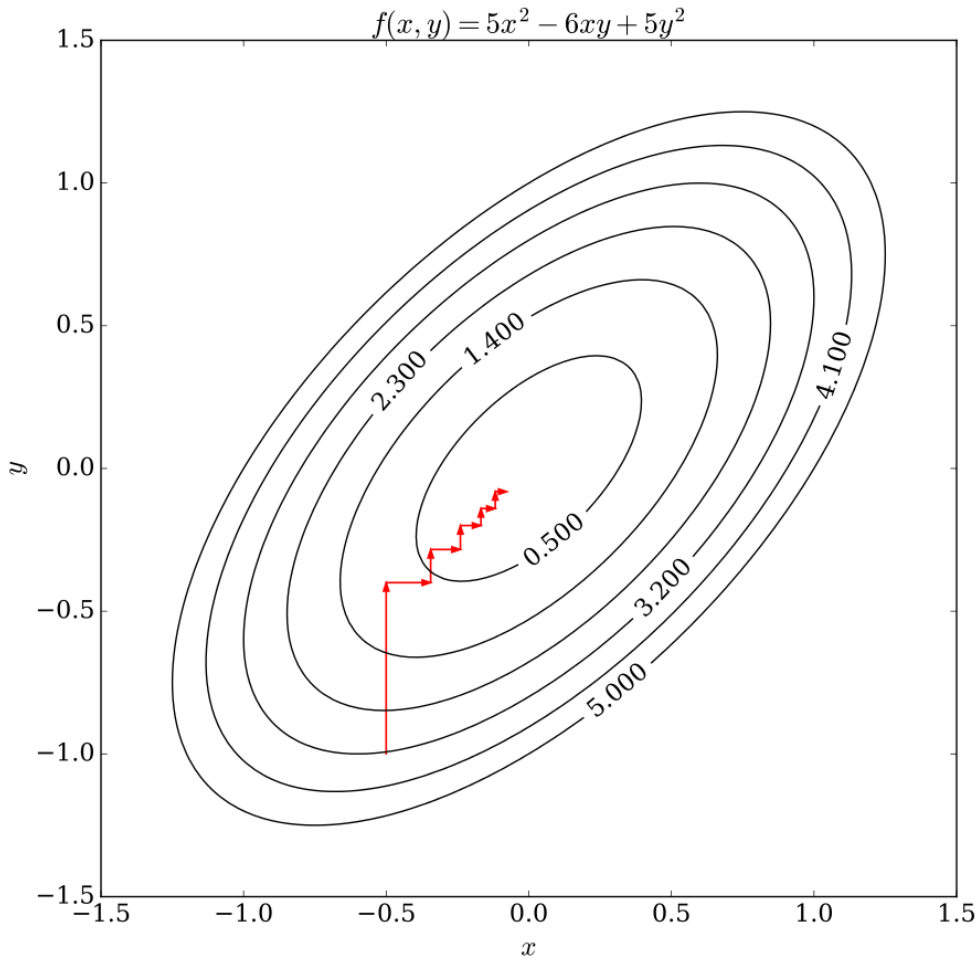
- Методы первого порядка — используют первые производные
  - Градиентный спуск
  - Стохастический градиентный спуск
  - Квазиньютоновские методы, BFGS
  - Stochastic Average Gradient, Nesterov momentum, …
- Методы второго порядка — используют вторые производные
  - Метод Ньютона
- Методы нулевого порядка — без производных
  - Покоординатный спуск
  - Стохастическая оптимизация

Покоординатный спуск

- По очереди меняем каждую координату
- Шаг по каждой координате — случайный, наискорейший, эвристический…

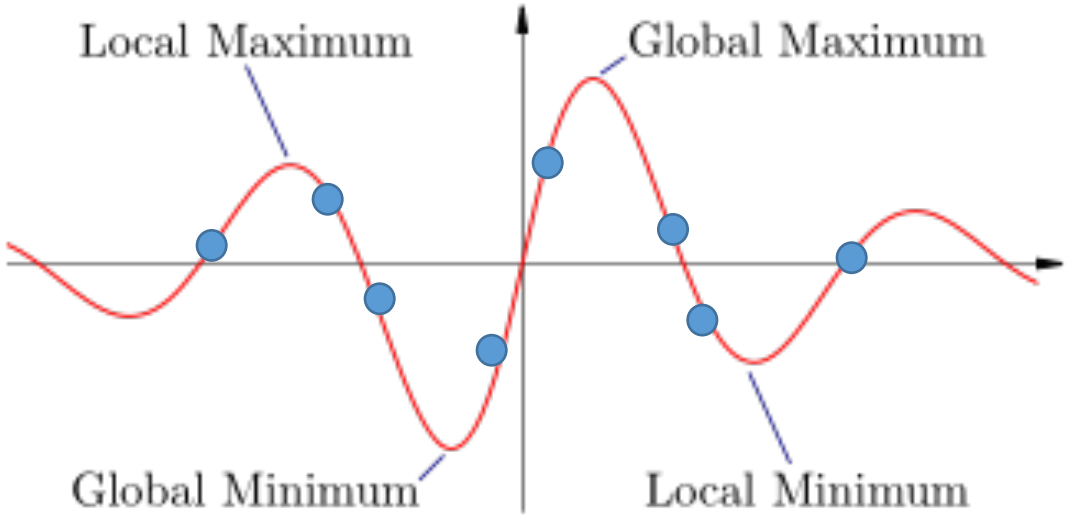
- Быстрые итерации, но может медленно сходиться

Покоординатный спуск



Стохастическая оптимизация

- Простейший алгоритм:
  - Генерируем N раз случайную точку
  - Выбираем ту, на которой значение функционала наименьшее
- Не самый лучший подход
- Нужно более направленное движение



Обучение линейной регрессии

Задача оптимизации

$$Q(w, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\langle w, x_i \rangle - y_i)^2 \to \min_w$$

- Гладкая функция
- Выпуклая функция
- Единственный минимум (не всегда)

Градиент

$$\nabla Q(w, X) = \left(\frac{\partial Q}{\partial w_1}(w), \dots, \frac{\partial Q}{\partial w_d}(w) \right)$$

Производные:

$$\frac{\partial Q}{\partial w_j} = \frac{2}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} x_i^j (\langle w, x_i \rangle - y_i)$$

Аналитическое решение

- Векторная запись MSE:

$$Q(w, X) = \frac{1}{\ell} \|Xw - y\|^2$$

- Условие минимума:

$$\nabla Q(w, X) = 0$$

- Что, если попробуем решить эту систему уравнений?

Аналитическое решение

- Она решается аналитически!

$$w = (X^T X)^{-1} X^T y$$

- Но обращение матрицы — очень сложная операция
- Градиентный спуск гораздо быстрее
- Для MSE получилось выписать решение, но не для любого функционала это получается сделать

Градиентный спуск

- Повторять до сходимости:

$$w^t = w^{t-1} - \eta \nabla Q(w^{t-1})$$

- Сходимость: $\|w^t - w^{t-1}\| < \varepsilon$

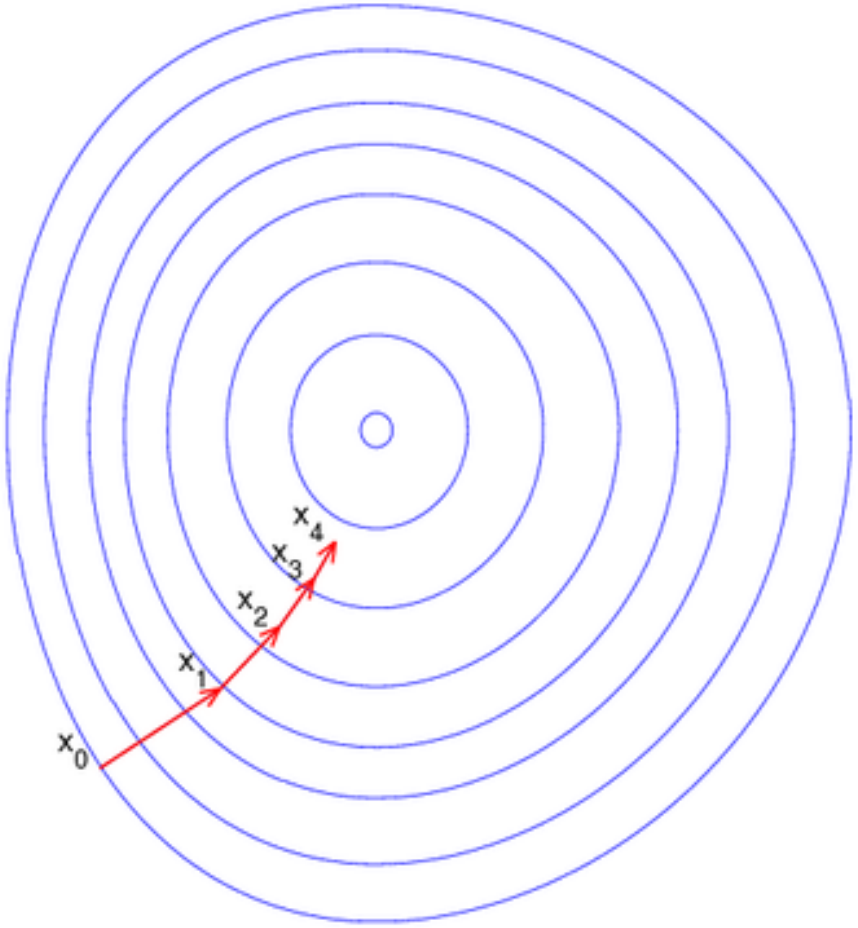
Нюансы

- Выбор длины шага η — пробуем разные значения
- Выборка должна быть масштабирована
- Признаки не должны коррелировать

Масштабирование признаков

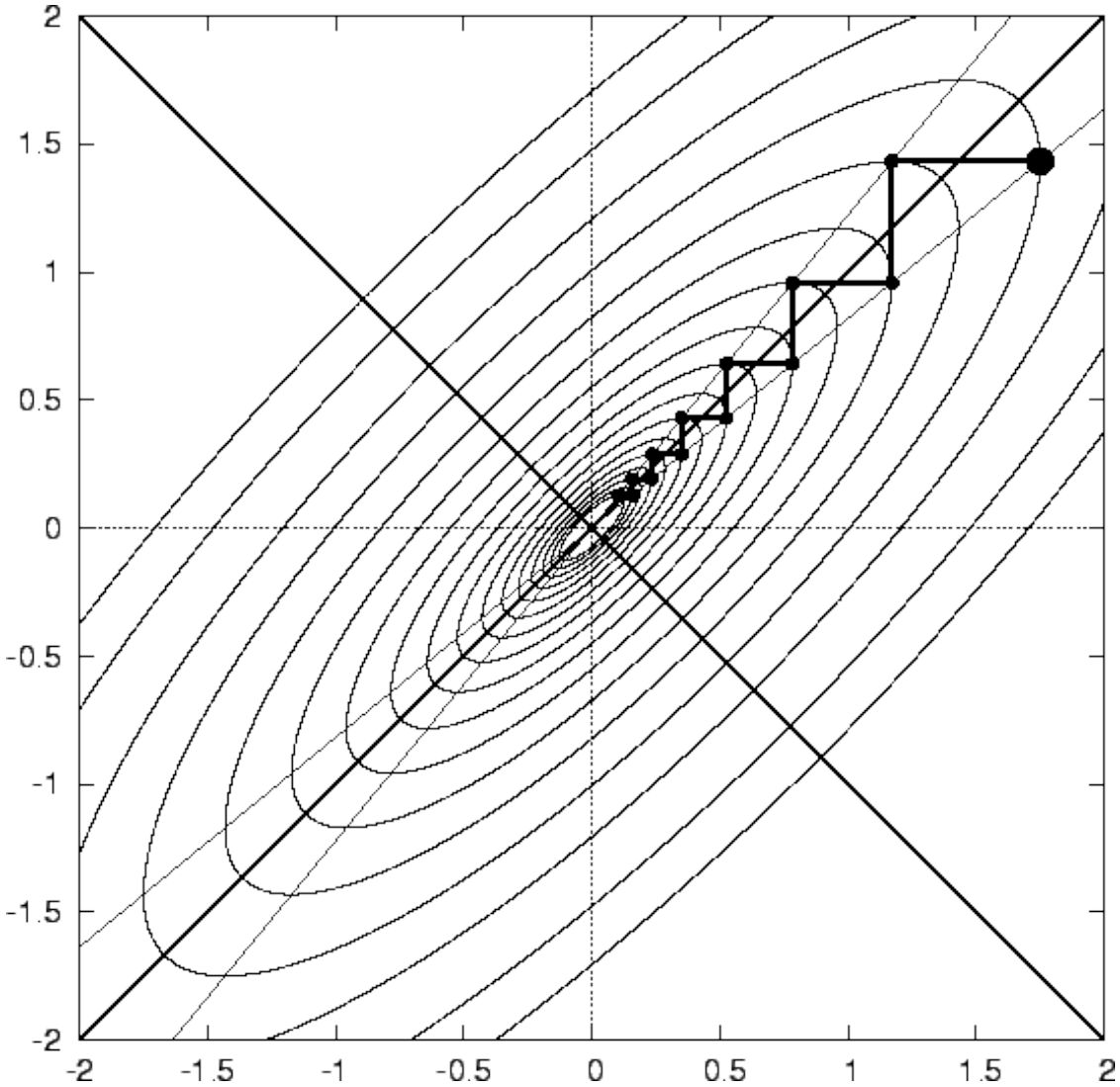
Масштабирование выборки

Хороший случай



Масштабирование выборки

Плохой случай



Масштабирование выборки

- Задача: одобрят ли заявку на грант?
- 1-й признак: сколько успешных заявок было до этого у заявителя
- 2-й признак: год рождения заявителя

- Масштаб: единицы и тысячи

- Все признаки должны иметь одинаковый масштаб

Масштабирование выборки

- Отмасштабируем j-й признак
- Вычисляем среднее и стандартное отклонение признака на обучающей выборке:

$$\mu_j = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell} x_i^j$$

$$\sigma_j = \sqrt{\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}\left(x_i^j - \mu_j\right)^2}$$

Масштабирование выборки

- Отмасштабируем j-й признак
- Вычтем из каждого значения признака среднее и поделим на стандартное отклонение:

$$x_i^j := \frac{x_i^j - \mu_j}{\sigma_j}$$

Мультиколлинеарность

Объекты-признаки

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1000 & 5 & 3 & 4 \\ 9 & 9000 & 10 & 5 & 7.5 \\ 5 & 5000 & 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

- Задача предсказания прибыли магазина в следующем месяце
- Рассмотрим в качестве векторов столбцы матрицы (признаки)

Подозрительные зависимости

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1000 & 5 & 3 & 4 \\ 9 & 9000 & 10 & 5 & 7.5 \\ 5 & 5000 & 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

- Первый и второй признаки: $x_2 = 1000x_1$
- Первый — общий вес товаров в тоннах, второй — в килограммах

Подозрительные зависимости

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1000 & 5 & 3 & 4 \\ 9 & 9000 & 10 & 5 & 7.5 \\ 5 & 5000 & 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

- $x_5 = 0.5x_3 + 0.5x_4$
- Пятый — средняя прибыль за последние два месяца
- Третий и четвертый — прибыль в прошлом и позапрошлом месяце

Линейная зависимость

— один из векторов равен сумме с весами остальных векторов

- Это плохо:
  - Избыточная информация
  - Лишние затраты на хранение данных
  - Вредит некоторым методам машинного обучения

Линейная зависимость

- Пусть дан набор векторов $x_1, \dots, x_n$
- Они линейно зависимы, если
  - существуют такие числа $\beta_1, \dots, \beta_n$,
  - хотя бы одно из которых не равно нулю,
  - что сумма векторов с такими коэффициентами равна нулю

$$\beta_1 x_1 + \cdots + \beta_n x_n = 0$$

Мультиколлинеарность

- Наличие зависимостей между признаками
- Приводит к тому, что решений бесконечное число
- Многие из них дают переобученные модели

Линейная зависимость

- Худший случай — линейно зависимые признаки
- Существуют такие $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d)$, что для любого объекта:

$$\alpha_1 x^1 + \cdots + \alpha_d x^d = \langle \alpha, x \rangle = 0$$

Линейная зависимость

- Допустим, мы нашли решение w_*
- Модифицируем: $w_1 = w_* + t\alpha$ (t — число)
- Ответ нового алгоритма на любом объекте:

$$\langle w_1, x\rangle = \langle w_* + t\alpha, x\rangle = \langle w_*, x\rangle + t\langle \alpha, x\rangle = \langle w_*, x\rangle$$

- w_1 — тоже решение!

Линейная зависимость

- Если w_*—решение, то $w_1 = w_* + t\alpha$ тоже решение
- Если будем увеличивать t очень сильно, получим решение с большими по модулю весами
- Запомним этот факт

Коррелирующие признаки

- Тоже плохо
- Сначала разберёмся с корреляцией

Коэффициент корреляции

$$\rho(\xi,\eta) = \frac{\mathbb{E}(\xi - \mathbb{E}\xi)(\eta - \mathbb{E}\eta)}{\sqrt{\mathbb{D}\xi\,\mathbb{D}\eta}}$$

Выборочная корреляция:

$$\rho(x,z) = \frac{\sum_{i=1}^{\ell}(x_i - \bar{x})(z_i - \bar{z})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{\ell}(x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^{\ell}(z_i - \bar{z})^2}}$$

$$\bar{x} = \frac{1}{\ell}\sum_{j=1}^{\ell} x_j\,; \qquad \bar{z} = \frac{1}{\ell}\sum_{j=1}^{\ell} z_j$$

Коэффициент корреляции

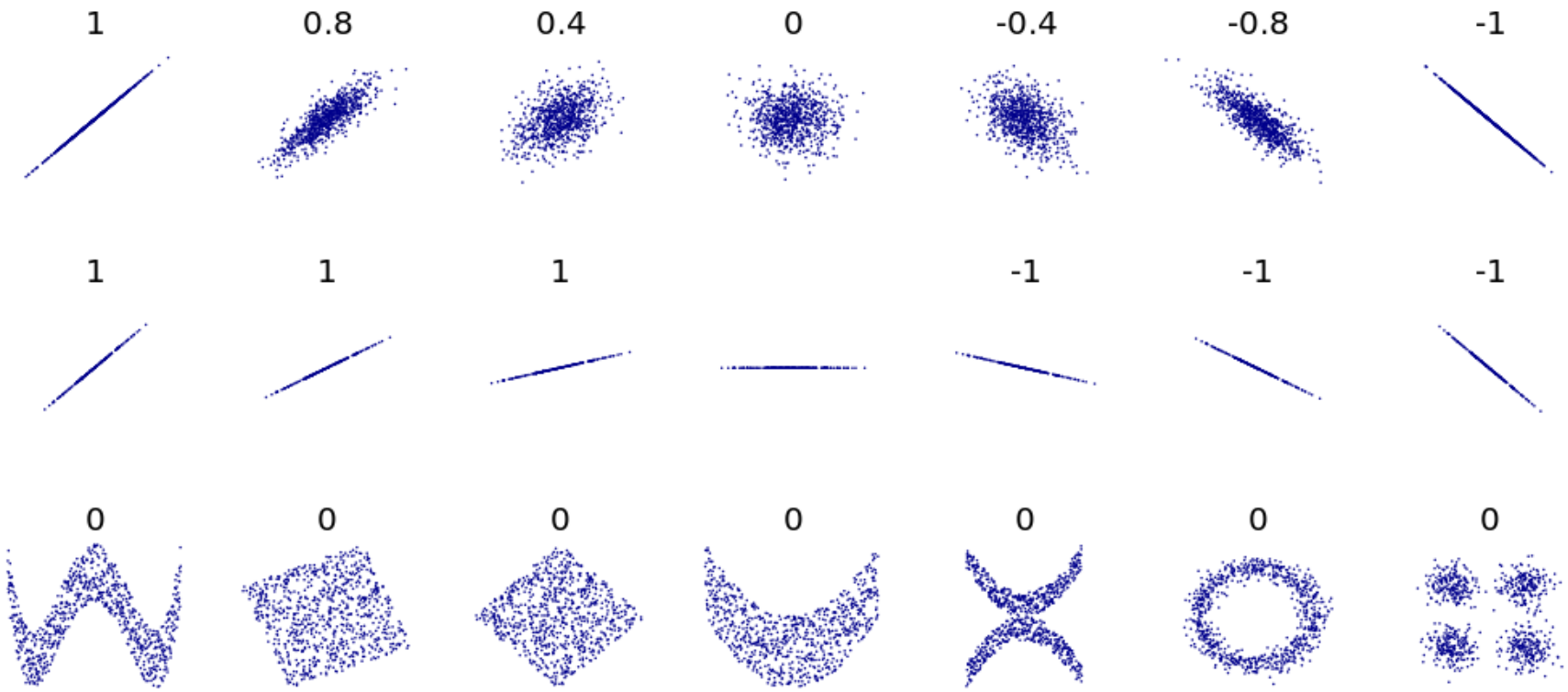
$$\rho(x,z) = \frac{\sum_{i=1}^{\ell}(x_i - \bar{x})(z_i - \bar{z})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{\ell}(x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^{\ell}(z_i - \bar{z})^2}}$$

- $\rho(x,z) \in [-1,+1]$
- Очень грубо: чем ближе к +1 или -1, тем точнее выполнено уравнение

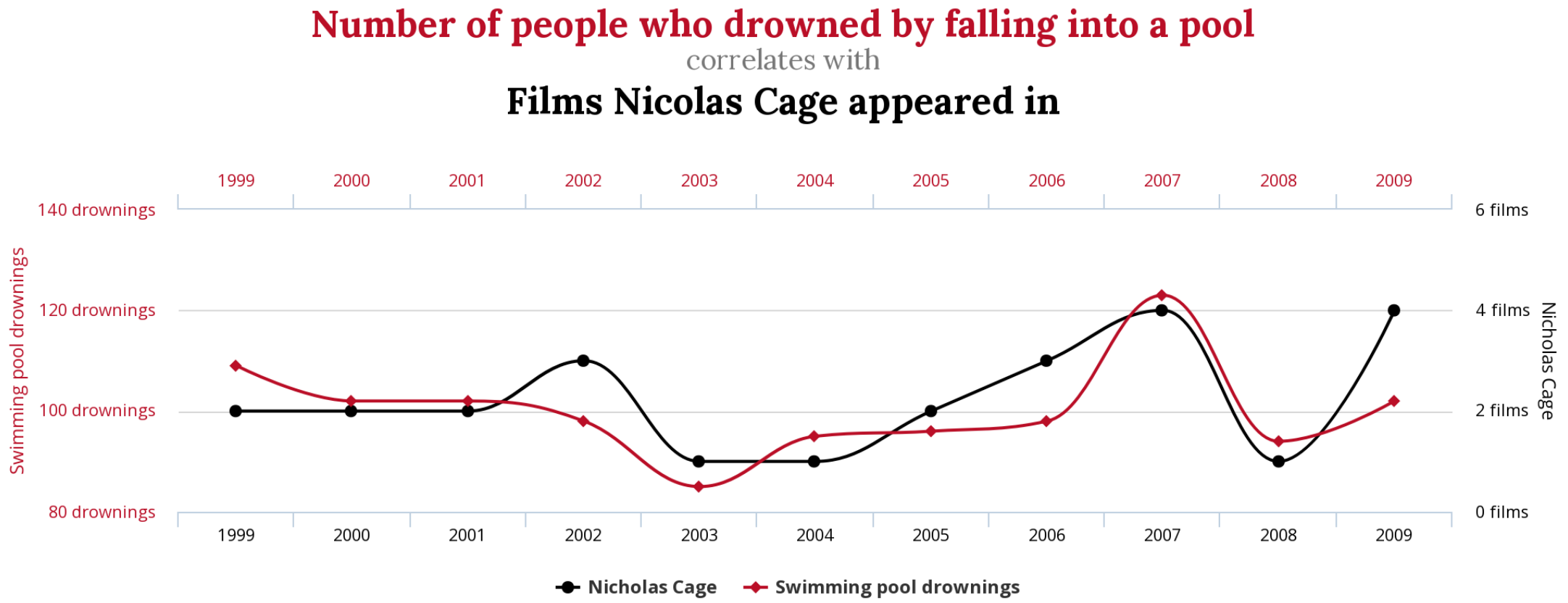
$$x = az + b$$

- Мера линейной зависимости

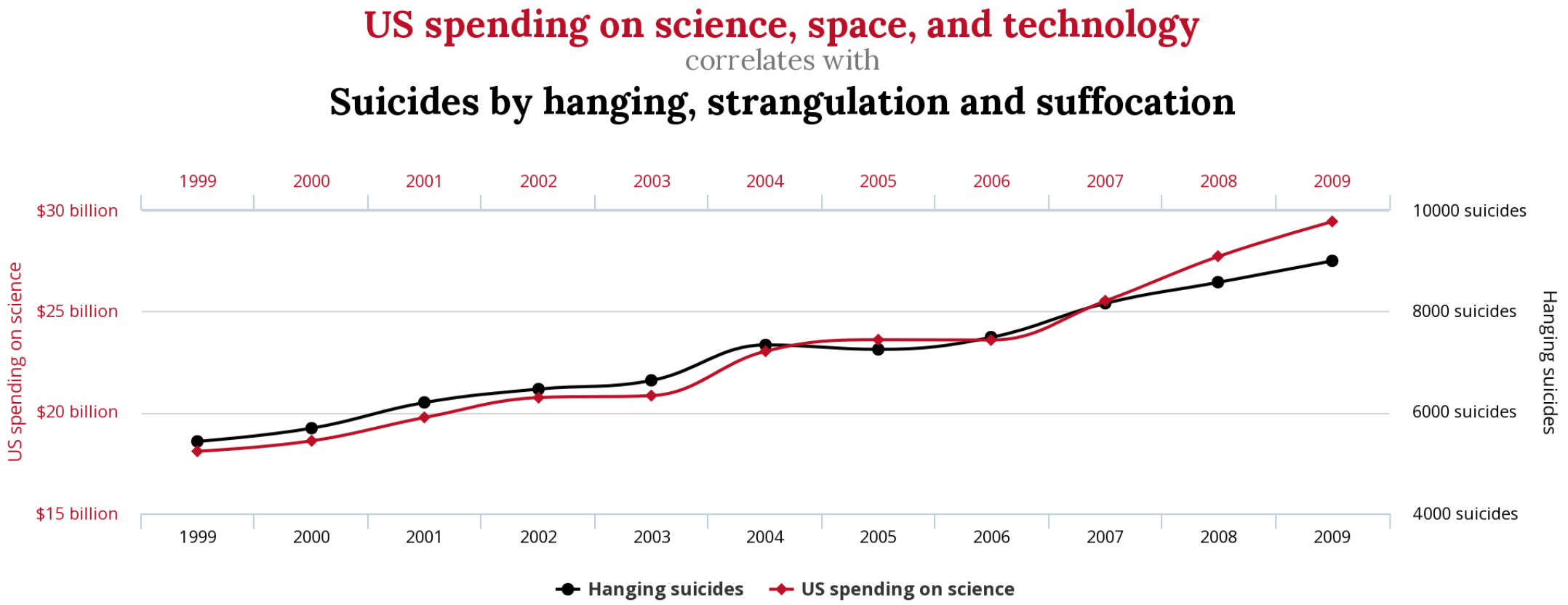
Примеры



Пример


Number of people who drowned by falling into a pool
correlates with
Films Nicolas Cage appeared in
1999
2000
2001
2002
2003
2004
2005
2006
2007
2008
2009
140 drownings
120 drownings
100 drownings
80 drownings
Swimming pool drownings
6 films
4 films
2 films
0 films
Nicholas Cage
Nicholas Cage
Swimming pool drownings
tylervigen.com

Пример


US spending on science, space, and technology
correlates with
Suicides by hanging, strangulation and suffocation
1999
2000
2001
2002
2003
2004
2005
2006
2007
2008
2009
$30 billion
$25 billion
$20 billion
$15 billion
US spending on science
10000 suicides
8000 suicides
6000 suicides
4000 suicides
Hanging suicides
Hanging suicides
US spending on science
tylervigen.com

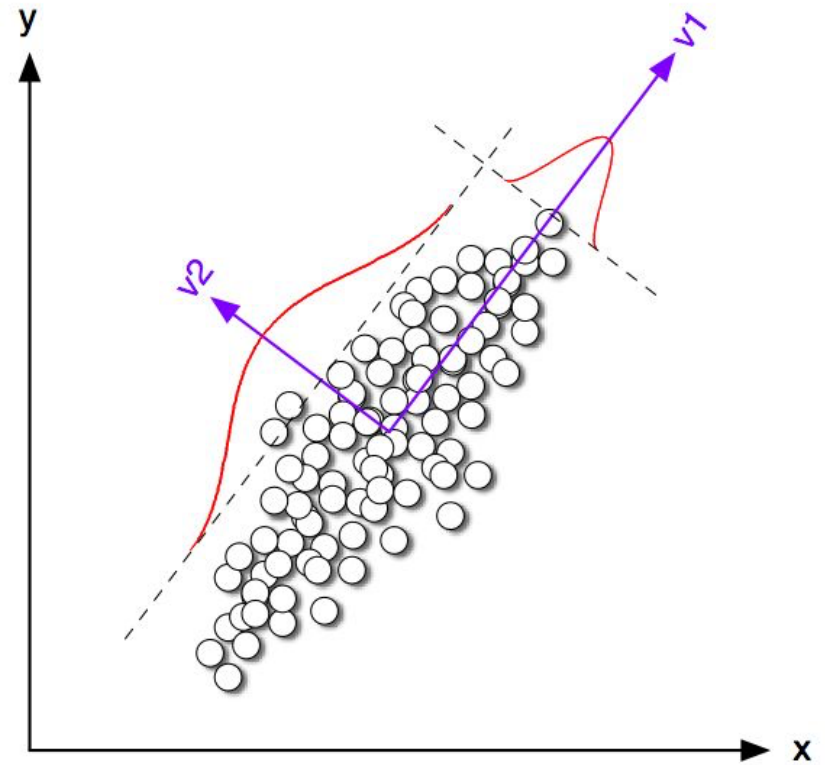
Распространённое заблуждение

- Может показаться, что из корреляции следует причинно-следственная связь
- Это не так!
- Корреляция означает, что события часто происходят вместе
- Но никак не следуют друг из друга

- Больше примеров: http://tylervigen.com/spurious-correlations

Коррелирующие признаки

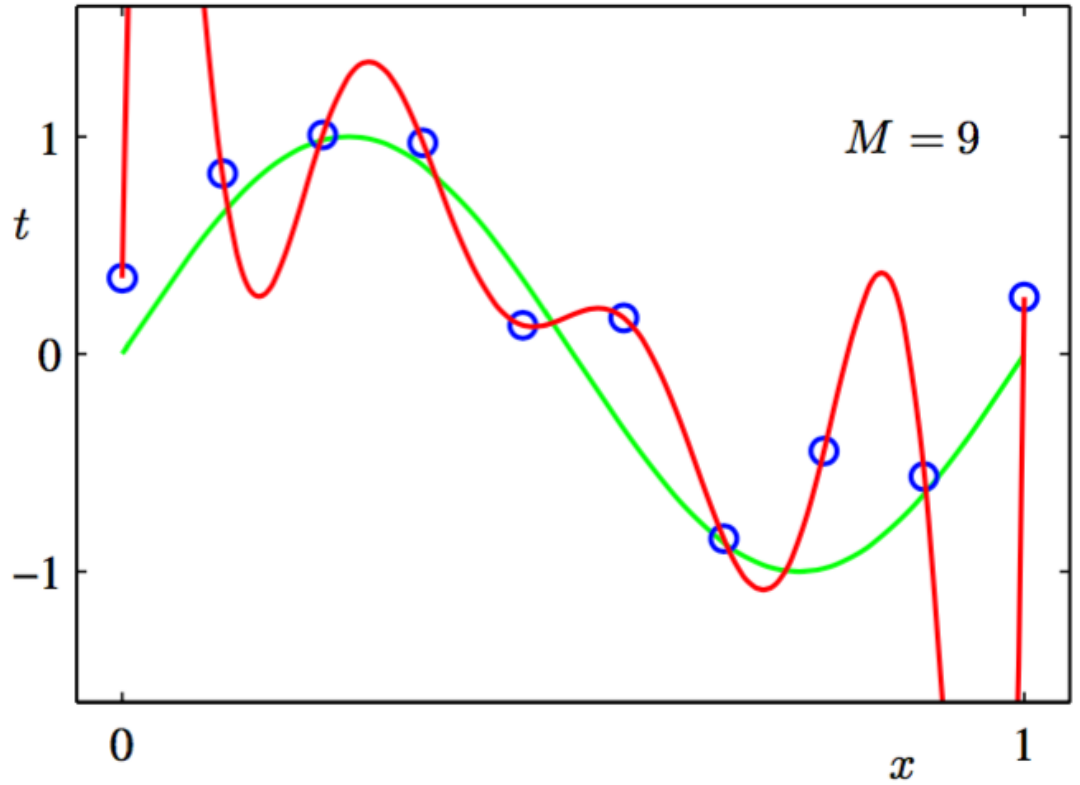
- Плохо, если есть коррелирующие признаки
- Решение: отбор признаков или их декорреляция



Переобучение и регуляризация

Пример

- Один признак x
- $a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + \cdots + w_9 x^9$



Пример

- Коэффициенты:

$$a(x) = 0.5 + 13458922x - 43983740x^2 + \cdots + 2740x^9$$

- Большие коэффициенты — симптом переобучения
- (эмпирическое наблюдение)

Симптом переобучения

- Большие коэффициенты в линейной модели — это плохо
- Пример: предсказание роста по весу
  - $a(x) = 698x - 41714$
- Изменение веса на 0.01 кг приведет к изменению роста на 7 см
- Не похоже не правильную зависимость

Регуляризация

- Будем штрафовать за большие веса!
- Функционал:

$$Q(w, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\langle w, x_i \rangle - y_i)^2 \to \min_w$$

- Регуляризатор:

$$\|w\|^2 = \sum_{j=1}^{d} w_j^2$$

Регуляризация

- Регуляризованный функционал ошибки:

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}(\langle w, x_i\rangle - y_i)^2 + \lambda\|w\|^2 \to \min_w$$

- Всё ещё гладкий и выпуклый

- Вспомним, что для линейно зависимых признаков у нас может быть решение с большими весами
- Поэтому такая постановка позволяет бороться и с коррелирующими признаками!

Коэффициент регуляризации

- Как подбирать λ?
- Давайте оптимизировать и по w, и по λ одновременно — в процессе обучения
- Какое тогда будет оптимальное значение λ?

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}(\langle w, x_i\rangle - y_i)^2 + \lambda\|w\|^2 \to \min_w$$

Коэффициент регуляризации

- Как подбирать λ?
- Давайте оптимизировать и по w, и по λ одновременно — в процессе обучения
- Какое тогда будет оптимальное значение λ?

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}(\langle w, x_i\rangle - y_i)^2 + \lambda\|w\|^2 \to \min_w$$

- Оптимальным всегда будет $\lambda = 0$!

Коэффициент регуляризации

- λ — гиперпараметр, подбирается на валидации
- Высокий λ — простые модели
- Низкий λ — риск переобучения
- Нужно балансировать

Смысл регуляризации

- Минимизация регуляризованного функционала равносильна решению условной задачи:

$$\begin{cases} \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}(\langle w, x_i\rangle - y_i)^2 \to \min\limits_{w} \\ \|w\|^2 \le C \end{cases}$$

L_1-регуляризация

- L_1-регуляризатор:

$$\|w\|_1 = \sum_{j=1}^{d} |w_j|$$

- Регуляризованный функционал ошибки:

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}(\langle w, x_i\rangle - y_i)^2 + \lambda\|w\|_1 \to \min_w$$

L_1-регуляризация

- Функционал становится негладким
- Сложнее оптимизировать
- Однако L_1-регуляризатор имеет тенденцию занулять часть весов
- Таким образом получаем автоматический отбор признаков

Резюме

- Градиентный спуск — универсальный инструмент обучения дифференцируемых моделей
- Масштабирование помогает улучшить сходимость градиентных методов
- Линейные зависимости и корреляции в признаках приводят к проблемам при обучении
- Регуляризация — способ борьбы с переобучением и коррелирующими признаками