Линейная регрессия

Машинное обучение

Александр Безносиков

МФТИ ФПМИ

30 сентября 2025

Линейная регрессия

- Вспомним прошлую лекцию: в машинном обучении мы ищем такое отображение $g\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$, чтобы оно наилучшим образом приближало связь пространства объектов $\mathcal{X} \to \mathcal{Y}$.

Линейная регрессия

- Вспомним прошлую лекцию: в машинном обучении мы ищем такое отображение $g\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$, чтобы оно наилучшим образом приближало связь пространства объектов $\mathcal{X} \to \mathcal{Y}$.
- В данной лекции мы работаем в предположении, что целевая переменная y_i **линейно** зависит от объектов x^i.

Линейная регрессия

- Вспомним прошлую лекцию: в машинном обучении мы ищем такое отображение $g\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$, чтобы оно наилучшим образом приближало связь пространства объектов $\mathcal{X} \to \mathcal{Y}$.
- В данной лекции мы работаем в предположении, что целевая переменная y_i **линейно** зависит от объектов x^i. Более формально:

Постановка задачи линейной регрессии

Мы ищем такую функцию

$$g(x^i, w) = w_0 + \sum_{j=1}^{d} x_j^i w_j,$$

чтобы она максимально точно приближало значение целевой метки y_i.

Веса

- В дальнейшем мы всегда настраиваемые параметры w любой необязательно линейной модели g будем называть весами.
- В случае линейной модели название «веса» передает и четкий физический смысл.

Веса: важность предобработки

- Рассмотрим пример зависимости:

x_1	x_2	y
1	2000	2,2
2	3000	3,3
4	4000	4,5

Веса: важность предобработки

- Рассмотрим пример зависимости:

x_1	x_2	y
1	2000	2,2
2	3000	3,3
4	4000	4,5

Вопрос: Какие веса для модели $(w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 = y)$ нужно взять, чтобы повторить зависимость?

Веса: важность предобработки

- Рассмотрим пример зависимости:

x_1	x_2	y
1	2000	2,2
2	3000	3,3
4	4000	4,5

  Вопрос: Какие веса для модели $(w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 = y)$ нужно взять, чтобы повторить зависимость?
- $w_0 = 0,1$, $w_1 = 0,1$, $w_2 = 0,001$.
- **Вопрос:** исходя из размеров весов, можем ли мы что-то сказать о важности каждого из признаков?

Веса: важность предобработки

- Рассмотрим пример зависимости:

x_1	x_2	y
1	2000	2,2
2	3000	3,3
4	4000	4,5

Вопрос: Какие веса для модели $(w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 = y)$ нужно взять, чтобы повторить зависимость?

- $w_0 = 0,1,\ w_1 = 0,1,\ w_2 = 0,001.$
- **Вопрос:** исходя из размеров весов, можем ли мы что-то сказать о важности каждого из признаков? Хочется сказать, что первый признак более важный, так как имеет больший вес, **НО** в то же время изменение второго признака на 50% привело к изменению итоговой метки почти на эти же 50%.

Веса: важность предобработки

- **Вопрос:** как сделать так, чтобы веса w несли информацию о важности признака?

Веса: важность предобработки

- **Вопрос:** как сделать так, чтобы веса w несли информацию о важности признака?
- Попробуем предобработать данные следующим образом, в пределах каждого из признаков отшкалируем так, чтобы все значения лежали в отрезке $[0;1]$.
- Это просто сделать, например,

$$\tilde{x}_i^j = \frac{x_i^j}{\max\limits_{k\in[n]} \left|x_i^k\right|}$$

или

$$\tilde{x}_i^j = \frac{x_i^j - \min\limits_{k\in[n]} x_i^k}{\max\limits_{k\in[n]} \left|x_i^k\right| - \min\limits_{k\in[n]} x_i^k}$$

Веса: важность предобработки

Название	Формула	Эффект
-	$\tilde{x}_i^j = \frac{x_i^j}{\max\limits_{k \in [n]} \lvert x_i^k \rvert}$	Преобразует выборку в диапазон $[-1, 1]$
MinMax	$\tilde{x}_i^j = \frac{x_i^j - \min\limits_{k \in [n]} x_i^k}{\max\limits_{k \in [n]} \lvert x_i^k \rvert - \min\limits_{k \in [n]} x_i^k}$	Преобразует выборку в диапазон $[0, 1]$
Стандартизация	$\tilde{x}_i^j = \frac{x_i^j - \frac{1}{n} \sum\limits_{k \in [n]} x_i^k}{Var(x_i)}$	Делает среднее 0 и дисперсию 1
Квантильная нормализация	$\tilde{x}^j = F^{-1}(G(x_i))$, где G - эмпирическое распр. каждой с.в., F - эмпирическое распр. усреднённой с.в.	Делает одинаковыми эмпирические распределения с.в.

Веса = значимость

- Воспользуемся первым правилом и преобразуем таблицу из примера:

$\tilde{x}_1$	$\tilde{x}_2$	y
0,25	0,5	2,2
0,5	0,75	3,3
1	1	4,5

Веса = значимость

- Воспользуемся первым правилом и преобразуем таблицу из примера:

$\tilde{x}_1$	$\tilde{x}_2$	y
0,25	0,5	2,2
0,5	0,75	3,3
1	1	4,5

- Новые веса: $\tilde{w}_0 = 0,1$, $\tilde{w}_1 = 0,4$, $\tilde{w}_2 = 4$.
- Вот теперь веса $\tilde{w}$ лучше отражают значимость признаков. Видно, что $\tilde{w}_2$ значительно больше $\tilde{w}_1$, что всецело коррелирует с его влиянием на итоговую метку y.

Веса = значимость

- Воспользуемся первым правилом и преобразуем таблицу из примера:

$\tilde{x}_1$	$\tilde{x}_2$	y
0,25	0,5	2,2
0,5	0,75	3,3
1	1	4,5

- Новые веса: $\tilde{w}_0 = 0,1$, $\tilde{w}_1 = 0,4$, $\tilde{w}_2 = 4$.
- Вот теперь веса $\tilde{w}$ лучше отражают значимость признаков. Видно, что $\tilde{w}_2$ значительно больше $\tilde{w}_1$, что всецело коррелирует с его влиянием на итоговую метку y.
- В машинном обучении часто y так же является признаком и его можно преобразовывать аналогичным образом.
- Кроме приведенного примера существует масса других классических подходов.

Веса: больше предобработок

- Например, давайте потребуем:

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\tilde{x}^i = 0, \quad \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\tilde{y}^i = 0.$$

- **Вопрос:** как такое осуществить?

Веса: больше предобработок

- Например, давайте потребуем:

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\tilde{x}^i = 0, \quad \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\tilde{y}^i = 0.$$

- **Вопрос:** как такое осуществить? Посчитаем $\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x^i$ и положим $\tilde{x}^i = x^i - \bar{x}$, аналогично для y.

Веса: больше предобработок

- Например, давайте потребуем:

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\tilde{x}^i = 0, \quad \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\tilde{y}^i = 0.$$

- **Вопрос:** как такое осуществить? Посчитаем $\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x^i$ и положим $\tilde{x}^i = x^i - \bar{x}$, аналогично для y.
- Утверждается, что $\tilde{w}_0 = 0$ для таких $\tilde{x}^i$ и $\tilde{y}^i$.

Веса: больше предобработок

- Например, давайте потребуем:

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\tilde{x}^i = 0, \quad \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\tilde{y}^i = 0.$$

- **Вопрос:** как такое осуществить? Посчитаем $\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x^i$ и положим $\tilde{x}^i = x^i - \bar{x}$, аналогично для y.
- Утверждается, что $\tilde{w}_0 = 0$ для таких $\tilde{x}^i$ и $\tilde{y}^i$. Докажем этот факт:

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(w_0 + \langle x^i, w\rangle)^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left[w_0^2 + \sum_{j=1}^{d}(x_j^i \cdot w_j)^2\right]$$
$$+\frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n}\left[w_0 \cdot \sum_{j=1}^{d}(x_j^i \cdot w_j)\right]$$
$$+ \text{ плюс другие удвоенные без } w_0$$

Веса: больше предобработок

- Рассмотрим:

$$
\begin{aligned}
\frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n}\left[w_0\cdot\sum_{j=1}^{d}(x_j^i\cdot w_j)\right]^2 &= \frac{2}{n}\cdot w_0\cdot\left[\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{d}(x_j^i\cdot w_j)\right] \\
&= 2w_0\cdot\left[\sum_{j=1}^{d}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_j^i\cdot w_j)\right] \\
&= 2w_0\cdot\left[\sum_{j=1}^{d}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_j^i\right)\cdot w_j\right] \\
&= 0
\end{aligned}
$$

Веса: больше предобработок

- Поэтому исходная задача

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(w_0 + \langle x^i, w\rangle)^2$$

с точки зрения оптимизации по w_0 есть просто $\min\limits_{x_0 \in \mathbb{R}^d} w_0^2$.

- Получается, что при такой предобработке, не нужно искать w_0. Но такое преобразование справедливо только для квадратичной функции потерь.

Веса: больше предобработок

- Поэтому исходная задача
$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(w_0 + \langle x^i, w\rangle)^2$$
с точки зрения оптимизации по w_0 есть просто $\min\limits_{x_0 \in \mathbb{R}^d} w_0^2$.
- Получается, что при такой предобработке, не нужно искать w_0. Но такое преобразование справедливо только для квадратичной функции потерь.
- Существуют и другие классические техники. Например, вместо того, чтобы загонять каждый признак в отрезок длины 1 можно сделать похожий трюк, называемый нормализацией.
- Потребуем, чтобы $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_j^i)^2 = 1$. Так будет, если умножим x_j^i на $s(j) = \sqrt{n/\sum_{i=1}^{n}(x_j^i)^2}$.

Максимум правдоподобия

- Но кажется, мы слишком усложняем. Предположим, что некоторая переменная y зависит от переменных $x_1, x_2, x_3, \ldots, x_d$ линейным образом:

$$y(x_1, \ldots, x_d) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_d x_d,$$

  где коэффициенты $w_0, \ldots, w_d$ нам неизвестны. Предположим, что мы хотим найти эти коэффициенты, измеряя переменную y при различных значениях $x_1, \ldots, x_d$. Казалось бы, в этом нет ничего сложного, ведь для решения системы достаточно провести $d + 1$ измерений (как в примере из трех строк выше).
  Вопрос: Какая проблема?

Максимум правдоподобия

В действительности может все быть значительно сложнее. Например,

1. в реальности зависимость далеко не линейная, но мы просто пытаемся приблизить ее линейной;
2. измерения производятся с некоторой погрешностью.

Максимум правдоподобия

- Рассмотрим вторую постановку. В частности, предположим, что для заданного набора $x_1^i, x_2^i, \ldots, x_d^i$ мы измеряем

$$y_i = w_0 + x_1^i w_1 + \ldots + x_d^i w_d + \xi_i,$$

где $\xi_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

Максимум правдоподобия

- Рассмотрим вторую постановку. В частности, предположим, что для заданного набора $x_1^i, x_2^i, \ldots, x_d^i$ мы измеряем

$$y_i = w_0 + x_1^i w_1 + \ldots + x_d^i w_d + \xi_i,$$

где $\xi_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

- Другими словами, мы предполагаем, что

$$y_i \sim \mathcal{N}(w_0 + x_1^i w_1 + \ldots + x_d^i w_d, \sigma^2),$$

где параметры $w = (w_0, \ldots, w_d)^\top$ должны быть найдены по выборке $\{y_i\}_{i=1}^n$ (мы будем считать, что $y_1, \ldots, y_n$ – независимые случайные величины).
Вопрос: Как лучше выбрать параметры $w_0, \ldots, w_d$?

Статистический подход: линейная регрессия

- Можно, например, рассмотреть оценку максимального правдоподобия:

$$\begin{aligned}\hat{w} &= \underset{w \in \mathbb{R}^{d+1}}{\text{argmax}} \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(y_i - \langle x^i, w\rangle)^2\right) \\ &= \underset{w \in \mathbb{R}^{d+1}}{\text{argmax}} \left[\ln\left(\prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(y_i - \langle x^i, w\rangle)^2\right)\right)\right].\end{aligned}$$

Максимум правдоподобия

- Поскольку логарифм произведения равен сумме логарифмов, а аддитивные и мультипликативные константы не меняют точку оптимума, получаем:

$$
\begin{aligned}
\hat{w} &= \underset{w \in \mathbb{R}^{d+1}}{\operatorname{argmax}} \left\{ \text{Const} + \sum_{i=1}^{n} -\frac{1}{2\sigma^2}(y_i - \langle x^i, w \rangle)^2 \right\} \\
&= \underset{w \in \mathbb{R}^{d+1}}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \langle x^i, w \rangle)^2 \\
&= \underset{w \in \mathbb{R}^{d+1}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{n} \|Xw - y\|_2^2,
\end{aligned}
$$

где X составлена из строк $(x^i)^\top$.

- Обнаружили связь минимизации эмпирического риска и статистического подхода.

Функции потерь: MSE

Полученная задача минимизации также называется задачей минимизации **квадратичных потерь** (Mean Squared Error, MSE).

MSE

Квадратичной функцией потерь (MSE) называется функция вида

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\mathrm{MSE}} &= \frac{1}{2}\|Xw - y\|_2^2 \\ &= \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \langle x^i, w\rangle)^2. \end{aligned}$$

Функции потерь: MSE

В случае переопределенной системы (когда $\min \mathcal{L}_{\mathrm{MSE}} = 0$) имеется явный вид решения $\hat{w}$. Это следует напрямую из условий оптимума:

$$
\begin{aligned}
\nabla_w \mathcal{L}_{\mathrm{MSE}} \Big|_{\hat{w}} &= 0, \\
\nabla_w \left[\frac{1}{2} \|Xw - y\|_2^2 \right] \Bigg|_{\hat{w}} &= 0, \\
X^\top (X\hat{w} - y) &= 0, \\
\hat{w} &= (X^\top X)^{-1} X^\top y.
\end{aligned}
$$

Однако, несмотря на распространенность, MSE далеко не единственный способ измерения расстояния.

Функции потерь: MAE

Если MSE, по сути, является евклидовым расстоянием, то MAE (Mean Absolute Error) – это расстояние по ℓ_1-норме.

MAE

Абсолютной функцией потерь (MAE) называется функция вида

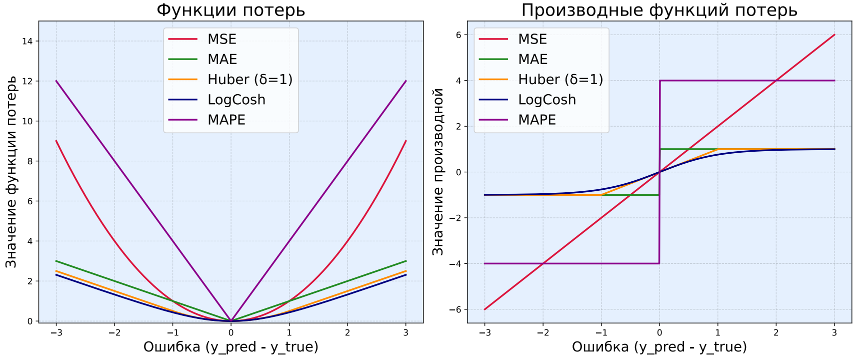
$$
\begin{aligned}
\mathcal{L}_{\mathrm{MAE}} &= \|Xw - y\|_1 \\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \left| y_i - \langle x^i, w \rangle \right| .
\end{aligned}
$$

Функции потерь: иные

Есть и другие широко используемые функции потерь:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{L}_{\text{Huber}} &= \begin{cases} \frac{1}{2n}\sum\limits_{i=1}^{n}(y_i - \langle x^i, w\rangle)^2, & \text{if } y_i - \langle x^i, w\rangle \leq \delta, \\ \delta \cdot \left(\frac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n}\left|y_i - \langle x^i, w\rangle\right| - \frac{1}{2}\delta\right), & \text{else.} \end{cases} \\
\mathcal{L}_{\text{LogCosh}} &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\log\left[\cosh(y_i - \langle x^i, w\rangle)\right] \\
\mathcal{L}_{\text{MAPE}} &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{y_i - \langle x^i, w\rangle}{y_i} \cdot 100\%
\end{aligned}
$$

Функции потерь: значения и градиенты



Напоминание из математической статистики

Пусть есть параметрическое семейство распределений вероятностей $F(t, \theta)$, θ - некий неизвестный нам параметр. Хотим оценить его с помощью выборки $X^n = (X_1, \ldots, X_n)$.

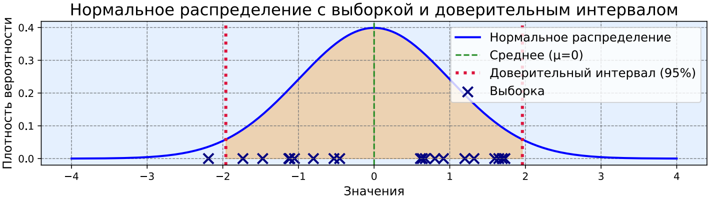
Мы можем оценить θ некоторой функцией от выборки $(\hat{\theta}_n = \hat{\theta}_n(X^n))$. По определению такая функция называется **статистикой**.

Оценка $\hat{\theta}_n$ параметра θ называется **несмещённой**, если $\mathbb{E}\hat{\theta}_n = \theta$

Напоминание из математической статистики - 2

Мы можем оценивать не значение параметра, а интервал по выборке (верхняя и нижняя границы такого интервала будут статистиками), в который будет попадать истинное значение параметра с вероятностью не меньше α (уровня доверия). Такой интервал **доверительный**.

Предсказательный интервал - это диапазон значений, в который, как ожидается, попадет новое наблюдение, основанное на предыдущих данных и модели. По своей сути это доверительный интервал для прогноза значения случайной величины.



Напоминание из математической статистики - 3

Статистическая гипотеза — это определённое предположение о распределении вероятностей, лежащем в основе наблюдаемой выборки данных.

Пример: Длина хвостов у котиков имеет нормальное распределение.

Проверка гипотезы — это процесс принятия решения о том, противоречит ли рассматриваемая статистическая гипотеза наблюдаемой выборке данных.

Статистический критерий — строгое математическое правило, по которому принимается или отвергается статистическая гипотеза.

Гипотезу, которую мы рассматриваем (хотим принять или отвергнуть) называют **нулевой** - H_0. Параллельно рассматривается противоречащая ей гипотеза H_1, называемая конкурирующей или альтернативной.

Метод наименьших квадратов

Рассмотрим задачу квадратичной минимизации MSE:

$$\min_{w \in \mathbb{R}^d} \|Xw - y\|_2^2$$

Метод наименьших квадратов

Рассмотрим задачу квадратичной минимизации MSE:

$$\min_{w \in \mathbb{R}^d} \|Xw - y\|_2^2$$

Асимптотическое решение: $\hat{w} = (X^T X)^{-1} X^T y$
Предсказание для объекта x_0**:** $\hat{y}(x) = x_0^T w$.

Метод наименьших квадратов

Рассмотрим задачу квадратичной минимизации MSE:

$$\min_{w \in \mathbb{R}^d} \|Xw - y\|_2^2$$

Асимптотическое решение: $\hat{w} = (X^T X)^{-1} X^T y$

Предсказание для объекта x_0**:** $\hat{y}(x) = x_0^T w$.

Предположения и следствия:

1. $\mathbb{E}\varepsilon = 0$, где $\varepsilon = \hat{y} - y$ — несмещенность:
   - $\hat{w}$ — несмещенная оценка w,
   - $\hat{y}(x)$ — несмещенная оценка $y(x)$.
2. $\mathbb{E}\varepsilon = 0$ и $\mathbb{D}\varepsilon = \sigma^2 I_n$
   - $\mathbb{D}\hat{w} = \sigma^2 (X^T X)^{-1}$, $\mathbb{D}\hat{y}(x) = \sigma^2 x^T (X^T X)^{-1} x$;
   - $\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-d} \|y - X\hat{w}\|_2^2$ — несмещенная оценка σ^2.
3. $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 I_n)$ — гауссовская линейная модель:
   - МНК совпадает с ОМП для w.

Доверительные интервалы при $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 I_n)$

Дов. интервал для размера шума предсказанного значения:
$\sigma \in \left(\sqrt{\|y - X\hat{w}\|^2/\chi^2_{n-d,\frac{1+\alpha}{2}}}, \sqrt{\|y - X\hat{w}\|^2/\chi^2_{n-d,\frac{1-\alpha}{2}}}\right)$
Дов. интервал для коэффициента перед j-м признаком:
$w_j \in \left(\hat{w}_j \pm T_{n-d,\frac{1+\alpha}{2}} \cdot \hat{\sigma}\sqrt{(X^T X)^{-1}_{jj}}\right)$
Дов. интервал для среднего предсказанного значения на объекте x_0**:** $x_0^T w \in \left(x_0^T \hat{w} \pm T_{n-d,\frac{1+\alpha}{2}} \cdot \hat{\sigma}\sqrt{x_0^T (X^T X)^{-1} x_0}\right)$

Предск. интервал для предсказанного значения на объекте x_0
$x_0^T w + \varepsilon \in \left(x_0^T \hat{w} \pm T_{n-d,\frac{1+\alpha}{2}} \cdot \hat{\sigma}\sqrt{1 + x_0^T (X^T X)^{-1} x_0}\right)$

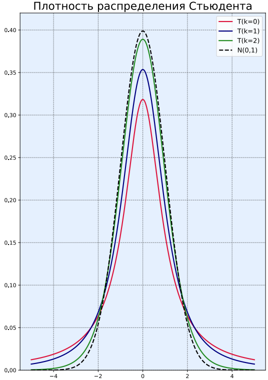
$T_{n-d,\frac{1+\alpha}{2}}$ - это $\frac{1+\alpha}{2}$ **квантиль** с $n-d$ степенями свободы, соответствующее верхней границе доверительного интервала для уровня доверия α. Обычно $\alpha = 0.95$

Распределение Стьюдента

Обозначение: T_k — распределение Стьюдента с k степенями свободы

- Параметр k — кол-во степеней свободы;
- T_1 — распределение Коши, $T_\infty = \mathcal{N}(0,1)$
- Плотность

$$p(x) = \frac{\Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right)}{\sqrt{\pi k}\,\Gamma(k/2)}\left(1 + \frac{x^2}{k}\right)^{-\frac{k+1}{2}};$$



- Если $\xi \sim \mathcal{N}(0,1)$ и $\eta \sim \chi^2_k$ независимы, то $\zeta = \frac{\xi}{\sqrt{\eta/k}} \sim T_k$
- Если $\zeta \sim T_k$, то $E\zeta = 0$ при $k > 1$
- Если $\zeta \sim T_k$, то $D\zeta = \frac{k}{k-2}$ при $k > 2$
- $T_{k,p}$ — p-квантиль распределения T_k
- `scipy.stats.t(df=k)`

Значим ли признак x_j?

Гипотеза о незначимости коэффициента w_j
$H_0 : w_j = 0$ vs. $H_1 : w_j\ (<, \neq, >)\ 0$
Критерий Стьюдента (t-test)

$$T_j(X, Y) = \frac{\hat{w}_j}{\hat{\sigma}\sqrt{(X^TX)^{-1}_{jj}}} \quad \underset{H_0}{\sim} \quad T_{n-d},$$

где $T_j(X, Y)$ — t-статистика критерия.
Для $H_1 : w_j \neq 0$ критерий имеет вид

$$\left\{|T_j(X, y)| > T_{n-d, 1-\alpha/2}\right\},$$

где число α — уровень значимости, обычно $\alpha = 0.05$.
Если H_0 не отвергается, то можно считать, что w_j отклоняется от нуля статистически незначимо.

Вырожденность матрицы

Для формулы $w = (X^TX)^{-1}X^Ty$ нам важно, чтобы матрица X^TX не была вырожденной.

Вопрос: может ли эта матрица быть вырожденной?

Вырожденность матрицы

Для формулы $w = (X^T X)^{-1} X^T y$ нам важно, чтобы матрица $X^T X$ не была вырожденной.
Вопрос: может ли эта матрица быть вырожденной?

В теории в линале это не такая частая проблема. На практике же точности вычислений может не хватать и аналитически не вырожденная матрица может стать вырожденной.

Вырожденность матрицы

Для формулы $w = (X^T X)^{-1} X^T y$ нам важно, чтобы матрица $X^T X$ не была вырожденной.

Вопрос: может ли эта матрица быть вырожденной?

В теории в линале это не такая частая проблема. На практике же точности вычислений может не хватать и аналитически не вырожденная матрица может стать вырожденной.

Решения:

1. **Регуляризация**
   $\arg\min\limits_{w} \left(\|Xw - y\|_2^2 + \lambda \|w\|_2^2 \right) = (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T y$
2. **Селекция (отбор) признаков**
3. **Уменьшение размерности** (в том числе, PCA)
4. **Увеличение выборки**

Классификация

Перейдем к теперь постановки задачи бинарной классификации ($|\mathcal{Y}| = 2$) с метками классов $\{-1, +1\}$.

Вопрос. Как перейти от результатов регрессии с квадратичной функцией потерь к получению предсказания меток классов?

Классификация

Перейдем к теперь постановки задачи бинарной классификации ($|\mathcal{Y}| = 2$) с метками классов $\{-1, +1\}$.

Вопрос. Как перейти от результатов регрессии с квадратичной функцией потерь к получению предсказания меток классов?

Нетрудно догадаться, что используя функцию sign (взятие знака), мы можем преобразовать наше непрерывное предсказание в дискретное:

$$\text{sign}\left(w_0 + \sum_{j=1}^{d} x_j w_j\right) \to \{-1, +1\}\,.$$

Классификация

Перейдем к теперь постановки задачи бинарной классификации ($|\mathcal{Y}| = 2$) с метками классов $\{-1, +1\}$.

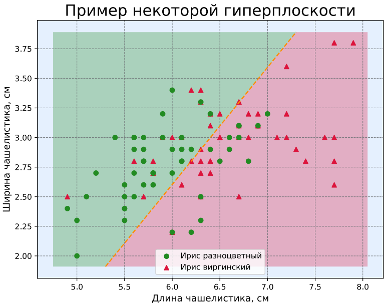
Вопрос. Как перейти от результатов регрессии с квадратичной функцией потерь к получению предсказания меток классов?

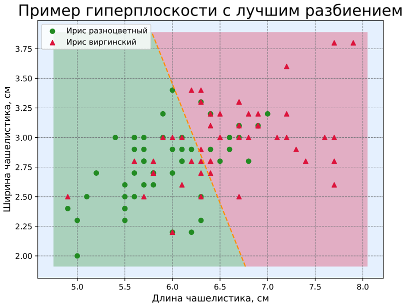
Нетрудно догадаться, что используя функцию sign (взятие знака), мы можем преобразовать наше непрерывное предсказание в дискретное:

$$\text{sign}\left(w_0 + \sum_{j=1}^{d} x_j w_j\right) \to \{-1, +1\}.$$

В качестве threshold-а (разделяющего параметра) здесь используется 0, однако, мы вольны выбирать его произвольно (например, положив равным 0.5).

Геометрический смысл линейного классификатора





Датасет: Iris species dataset

Разделяющие классификаторы (margin-based classifiers)

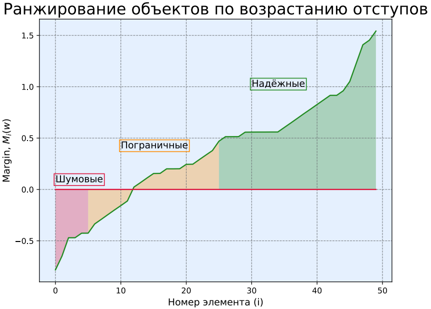
Разделяющий классификатор: $a(\mathrm{x}, \mathrm{w}) = \operatorname{sign} g(\mathrm{x}, \mathrm{w})$

$g(\mathrm{x}, \mathrm{w})$ — разделяющая (дискриминантная) функция

$g(\mathrm{x}, \mathrm{w}) = 0$ — уравнение разделяющей поверхности

$M_i(\mathrm{w}) = g(\mathrm{x}_i, \mathrm{w}) y_i$ - отступ (margin) объекта x_i

$M_i(\mathrm{w}) < 0 \iff$ алгоритм $a(\mathrm{x}, \mathrm{w})$ ошибается на x_i



Обучение линейного классификатора

Общая идея – 0-1-loss – число ошибок

$$L(x_{\text{train}}, a) = \sum_{i=1}^{m} L(y_i, a(x_i)) \to \min$$

$$L(y_i, a(x_i)) = \theta(-y_i w^T x_i) = \begin{cases} 1, & \text{sign } (w^T x_i) \neq y_i \\ 0, & \text{sign } (w^T x_i) = y_i, \end{cases}$$

где $\theta(z) = \mathbb{I}_{z>0}$
Естественно минимизировать число ошибок, но эта функция не дифференцируема и выдаёт мало информации

Классификация

Вопрос: А почему нам тогда сразу не минимизировать функции вида

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathbb{I}\left[\mathrm{sign}\left(w_0 + \langle x_i, w\rangle\right) \neq y_i\right]?$$

Классификация

Вопрос: А почему нам тогда сразу не минимизировать функции вида

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathbb{I}\left[\text{sign}\left(w_0 + \langle x_i, w\rangle\right) \neq y_i\right]?$$

Такую задачу сложно решать численными методами (о них на следующей лекции): считать градиент, а значит в качестве функции потерь ее использовать проблематично. Однако, если мы немного изменим ее вид на $1 - \frac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n}\mathbb{I}\left[\text{sign}\left(w_0 + \langle x_i, w\rangle\right) \neq y_i\right] \to \max\limits_{w}$, то получим крайне интуитивно понятную структуру. Мы пытаемся максимизировать нашу точность предсказаний, уменьшая количество неверно предсказанных меток. Данная функция является *метрикой* качества нашего предсказания и называется **accuracy**.

Классификация

Рассмотрим различные значения threshold-а на синтетическом датасете для бинарной классификации. Зависимости от выбранного значения сильно меняются предсказания меток классов. На примерах ниже предпочтителен $t = 0$.