線性迴歸

進入模型的世界

2018.03.05

杜岳華

Outline

- 資料之間的關係
- Contingency table
- Scatter plot（散佈圖）
- Least square problem and linear regression
- 統計觀點
- 線性代數觀點
- 最佳化觀點
- Multivariate linear regression
- 更多迴歸模型

統計！然後呢？

我們上次講了統計會關心：

- 集中趨勢
- 離散趨勢

統計想要解的問題不僅止於看資料的趨勢！

- 資料（變數）之間的關係

變數之間的關係

> *問題：我們好奇左撇子跟右撇子的人數，在男生跟女生中有沒有差別？*

隨機變數：

- X： 慣用手，{左撇子, 右撇子}
- Y： 性別，{男生, 女生}

假設

Independent and identically distributed

- Identically distributed
  - 樣本是從同一個母體來的
- Independent
  - 樣本之間互相獨立

假設

X： 慣用手，{左撇子, 右撇子}

$$X \overset{iid}{\sim} Bernoulli(p_1)$$

Y： 性別，{男生, 女生}

$$Y \overset{iid}{\sim} Bernoulli(p_2)$$

Raw data

ID	地址	性別	慣用手
001	~~	男生	右撇子
002	~~	男生	左撇子
003	~~	女生	右撇子

...

Contingency table

慣用手\性別	男生	女生	Total
右撇子	43	44	87
左撇子	9	4	13
Total	52	48	100

hypothesis test: $\chi^2\ test$

Joint probability distribution

After normalized...

慣用手\性別	男生	女生	Total
右撇子	0.43	0.44	0.87
左撇子	0.09	0.04	0.13
Total	0.52	0.48	1.00

Joint probability distribution

$$P(X = x, Y = y)$$

quiz

$$P(X = \text{左撇子}, Y = \text{男生}) = ?$$

Marginal probability distribution

慣用手\性別	男生	女生	Total
右撇子	----	----	0.87
左撇子	----	----	0.13
Total	0.52	0.48	1.00

Marginal probability distribution

$$P(X = x) = \sum_y P(X = x, Y = y)$$

$$P(Y = y) = \sum_x P(X = x, Y = y)$$

Marginal probability distribution

- $P(X = \text{右撇子}) = 0.87$
- $P(X = \text{左撇子}) = 0.13$
- $P(Y = \text{男生}) = 0.52$
- $P(Y = \text{女生}) = 0.48$

Raw data

ID	地址	身高	體重
001	~~	167	65
002	~~	187	80
003	~~	159	75

...

Scatter plot

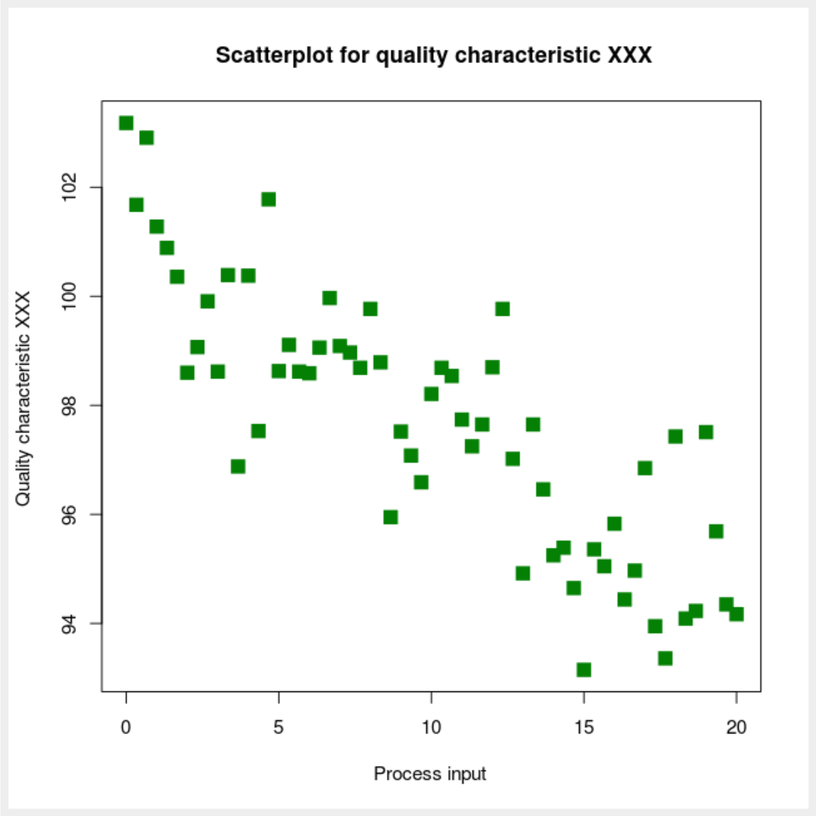
變數之間的關係是什麼？

$$y = f(x)$$

$$Y = f(X)$$

我們看看資料！

線性關係



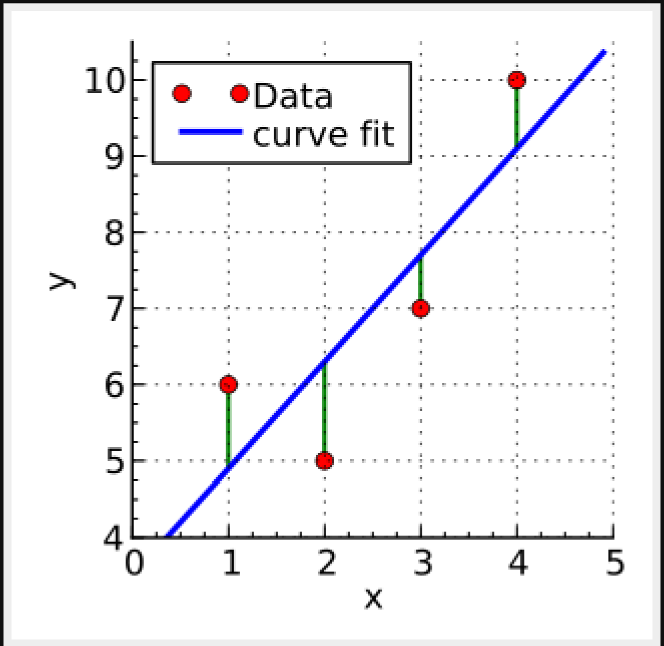
Scatterplot for quality characteristic XXX
Quality characteristic XXX
Process input
94
96
98
100
102
0
5
10
15
20

$$Y = f(X) = aX + b$$

材料

- data: $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2) \ldots\}$
- $Y = aX + b$

Least square problem



Least square problem

- Residuals: $\hat{y} - y$
  - $ax_i + b - y_i$
- Sum of residuals: $\sum_i (\hat{y} - y_i)$
- Sum of square: $\sum_i (\hat{y} - y_i)^2$
  - $\sum_i (ax_i + b - y_i)^2$

Linear regression

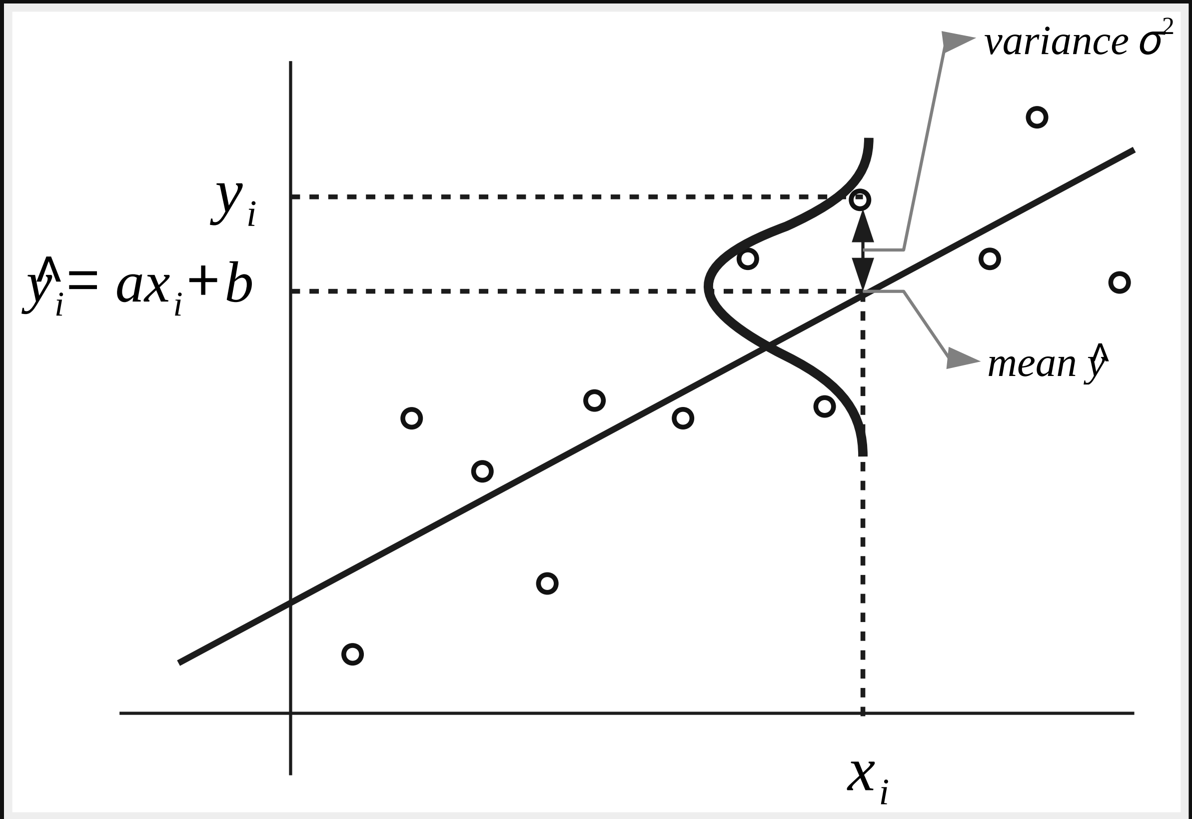
Least square:

$$argmin_\theta \ \sum_i (\hat{y} - y_i)^2$$

Linear regression:

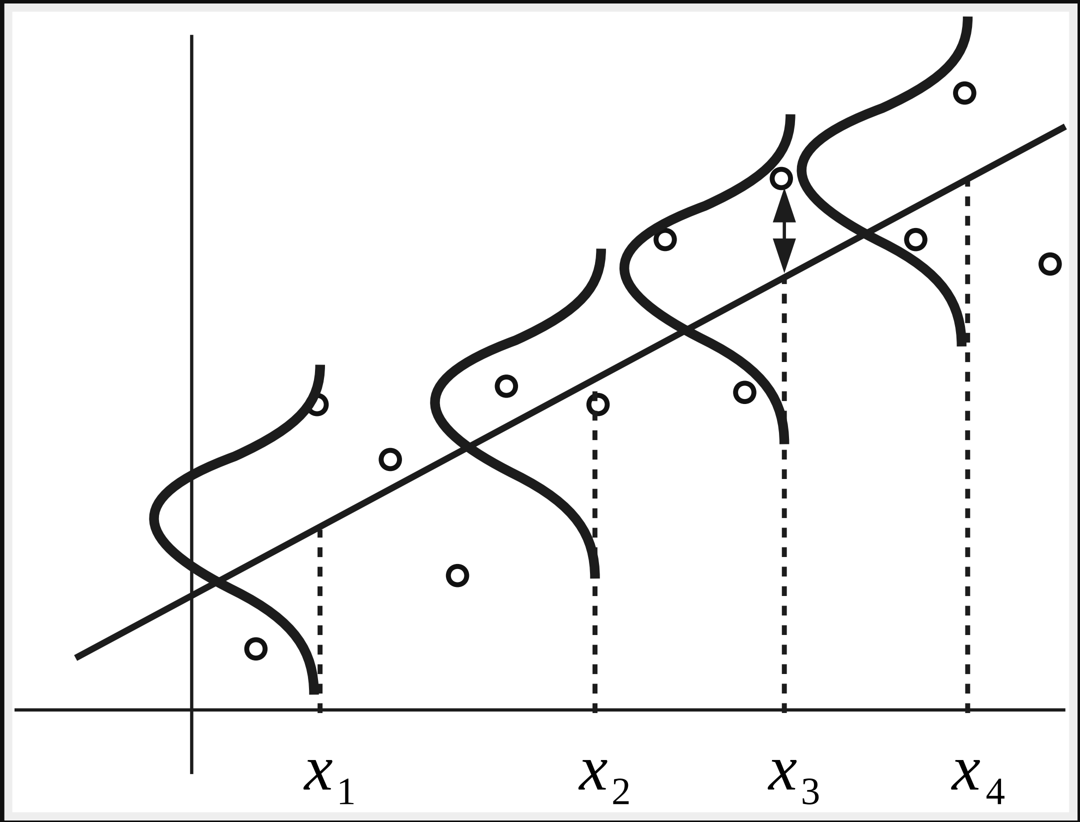
$$argmin_{a,b} \ \sum_i (ax_i + b - y_i)^2$$

統計觀點



隱藏假設：Gaussian error

統計觀點



隱藏假設：Constant variance (homoscedasticity）

線性代數

$$y = ax + b$$

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} + b$$

線性代數

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} + b \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

線性代數

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{bmatrix}$$

向量表示：$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}, \mathbf{y} = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$

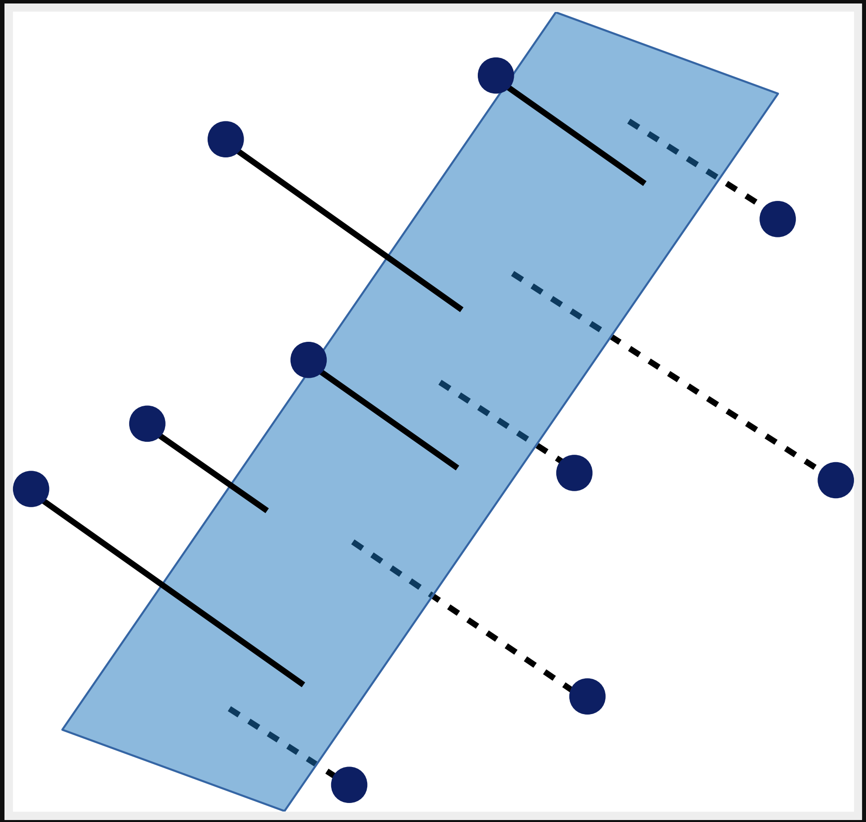
線性代數觀點

因為資料有noise，點都不在同一平面上，

$\mathbf{y} = \mathbf{w}^T\mathbf{x}$沒有解！

那怎麼辦？

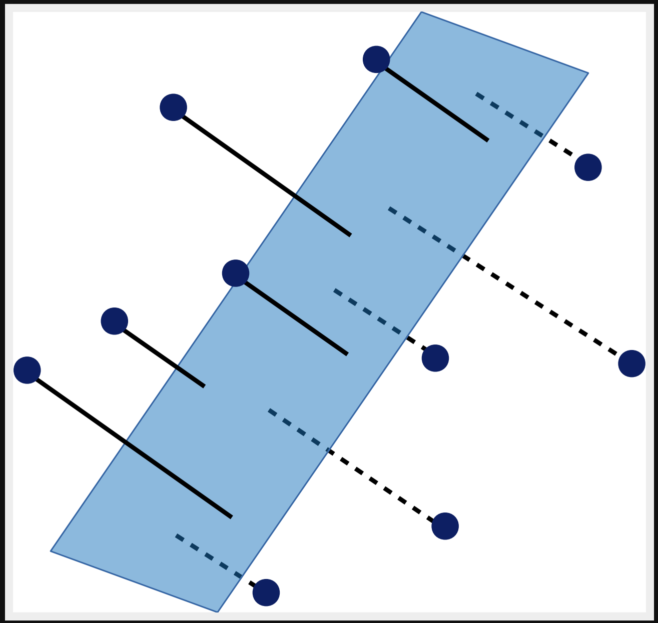
線性代數觀點



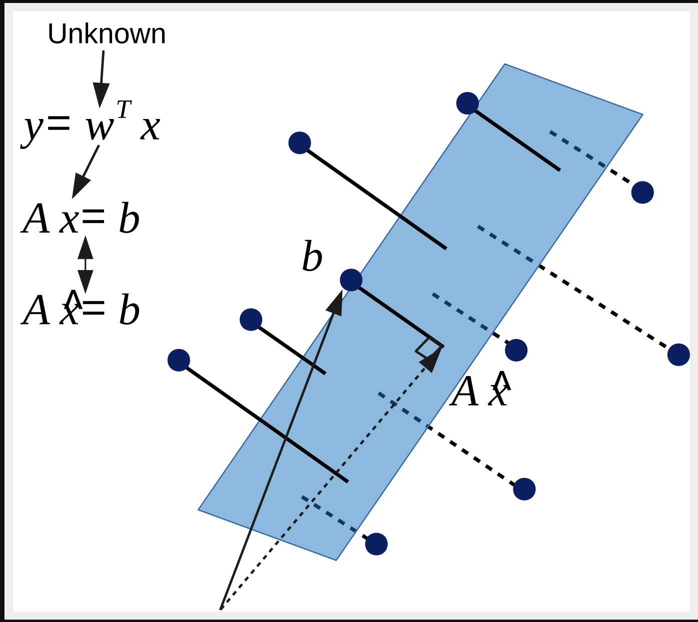
那就投影吧！

線性代數觀點

找到一個共同的平面，讓點投影上去，點到面的距離最小



線性代數觀點



要讓$(b - A\hat{x})$最小，$(b - A\hat{x})$必定垂直平面

$(b - A\hat{x})$垂直平面，$(b - A\hat{x})$跟A的內積為0

線性代數觀點

$$A^T(b - A\hat{x}) = 0$$

$$A^Tb - A^TA\hat{x} = 0$$

$$A^TA\hat{x} = A^Tb$$

$$\hat{x} = (A^TA)^{-1}A^Tb$$

最佳化觀點

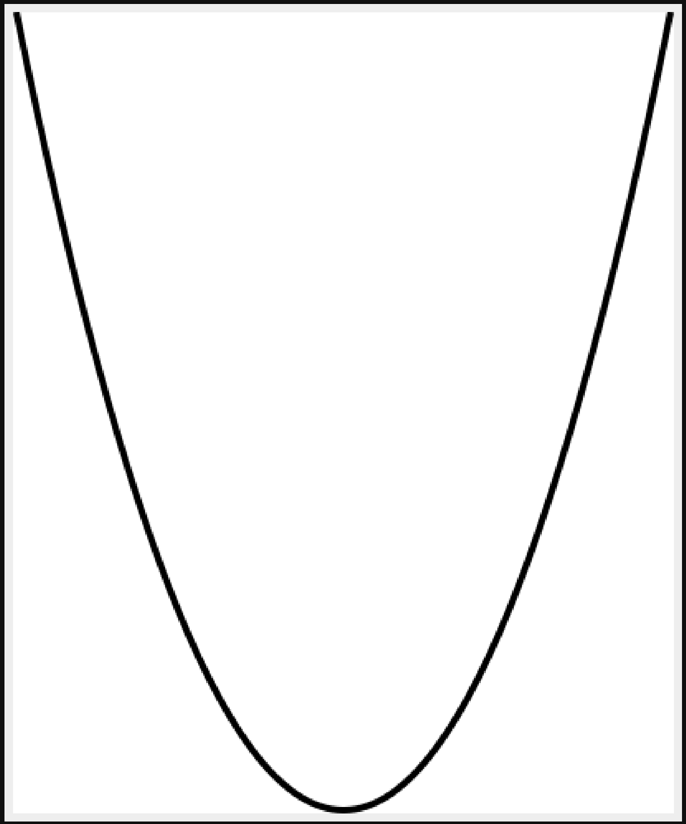
$$argmin_{a,b} \sum_i (ax_i + b - y_i)^2$$

$$f(a,b) = \sum_i (ax_i + b - y_i)^2$$

$$argmin_{a,b} f(a,b)$$

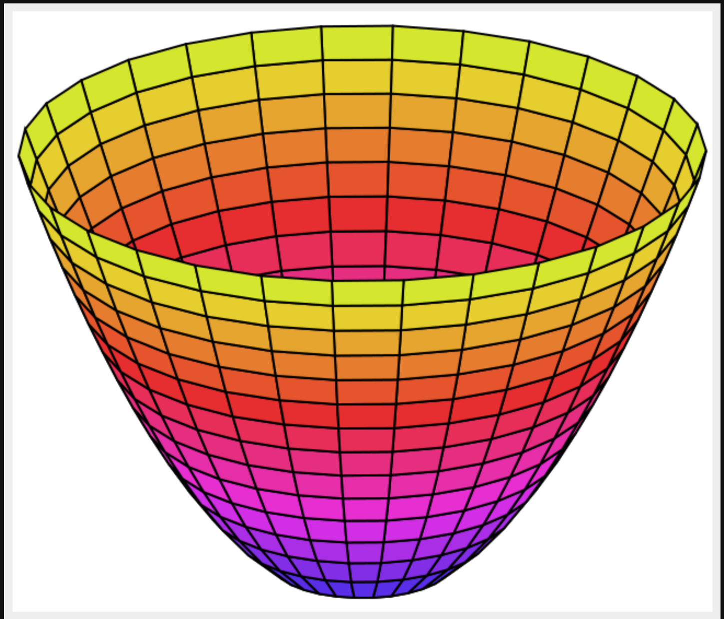
最佳化觀點

$$f(a, b)$$



最佳化觀點

$$f(a, b)$$



正確來說應該是長這樣...

最佳化觀點

要求a, b分別是多少的時候，$f(a,b)$有最小值？

微積分告訴我們，極值存在的地方，他的一階微分是0

也就是 $\frac{\partial f(a,b)}{\partial a} = 0, \frac{\partial f(a,b)}{\partial b} = 0$

最佳化觀點

$$\frac{\partial f(a,b)}{\partial a}$$

$$= \frac{\partial}{\partial a} \sum_i (ax_i + b - y_i)^2$$

$$= 2 \sum_i x_i \times (ax_i + b - y_i)$$

$$= 0$$

最佳化觀點

$$\frac{\partial f(a,b)}{\partial b}$$

$$= \frac{\partial}{\partial b} \sum_i (ax_i + b - y_i)^2$$

$$= 2 \sum_i 1 \times (ax_i + b - y_i)$$

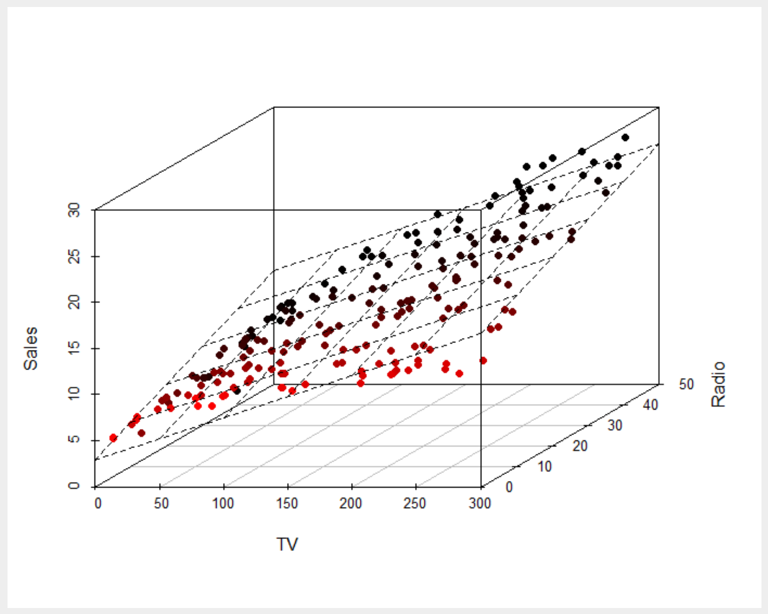
$$= 0$$

最佳化觀點

$$c_1 a + c_2 b + c_3 = 0$$

$$c_1 a + c_2 b + c_3 = 0$$

Multivariate linear regression



$$Y = a_0 + a_1 X_1 + a_2 X_2 + \ldots + a_n X_n$$

更多迴歸模型

- Ridge regression
- LASSO regression
- Polynomial regression
- Kernel regression
- Isotonic regression
- Robust regression
- Poisson regression

Thank you for attention.

Q&A