

# Введение в анализ данных

Лекция 5

Линейная регрессия

Евгений Соколов

[esokolov@hse.ru](mailto:esokolov@hse.ru)

НИУ ВШЭ, 2021

# Линейная регрессия в векторном виде

# Модель линейной регрессии

$$a(x) = \langle w, x \rangle$$

- Среднеквадратичная ошибка и задача обучения:

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

# Матрицы

- Матрица — таблица с числами (для простоты)
- Матрица «объекты-признаки»:

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{\ell \times d}$$

# Матрицы

- Матрица — таблица с числами (для простоты)
- Матрица «объекты-признаки»:

объект и его признаки

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix}$$

# Матрицы

- Матрица — таблица с числами (для простоты)
- Матрица «объекты-признаки»:

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix}$$

значения признака на всех объектах

# Векторы

- Вектор размера  $d$  — тоже матрица
- Вектор-строка:  $w = (w_1, \dots, w_d) \in \mathbb{R}^{1 \times d}$
- Вектор-столбец:  $w = \begin{pmatrix} w_1 \\ \dots \\ w_d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{d \times 1}$

# Матричное умножение

- Только для матриц  $A \in \mathbb{R}^{m \times k}$  и  $B \in \mathbb{R}^{k \times n}$
- Результат:  $AB = C \in \mathbb{R}^{m \times n}$
- Правило:

$$c_{ij} = \sum_{p=1}^k a_{ip} b_{pj}$$



Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} \boxed{1} & \boxed{2} \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} \boxed{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxed{1} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \\ & & \end{pmatrix}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 4 \\ & & \end{pmatrix}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 4 \\ 0 & & \end{pmatrix}$$

# Применение линейной модели

- $a(x) = \langle w, x \rangle = w_1 x_1 + \dots + w_d x_d$
- Как применить модель к обучающей выборке?

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_d \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^d w_i x_{1i} \\ \sum_{i=1}^d w_i x_{2i} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^d w_i x_{\ell i} \end{pmatrix}$$

# Модель линейной регрессии

- Среднеквадратичная ошибка и задача обучения:

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

# Вычисление ошибки

- Отклонения прогнозов от ответов:

$$Xw - y = \begin{pmatrix} \langle w, x_1 \rangle - y_1 \\ \vdots \\ \langle w, x_\ell \rangle - y_\ell \end{pmatrix}$$



# Вычисление ошибки

- Евклидова норма:

$$\|z\| = \sqrt{\sum_{j=1}^n z_j^2}$$

$$\|z\|^2 = \sum_{j=1}^n z_j^2$$

# Вычисление ошибки

- Отклонения прогнозов от ответов:

$$Xw - y = \begin{pmatrix} \langle w, x_1 \rangle - y_1 \\ \vdots \\ \langle w, x_\ell \rangle - y_\ell \end{pmatrix}$$

- Среднеквадратичная ошибка:

$$\frac{1}{\ell} \|Xw - y\|^2 = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\langle w, x_i \rangle - y_i)^2$$

# Обучение линейной регрессии

$$\frac{1}{\ell} \|Xw - y\|^2 \rightarrow \min_w$$

- Вычисление MSE в NumPy:

```
np.square(X.dot(w) - y).mean()
```

# Обучение линейной регрессии

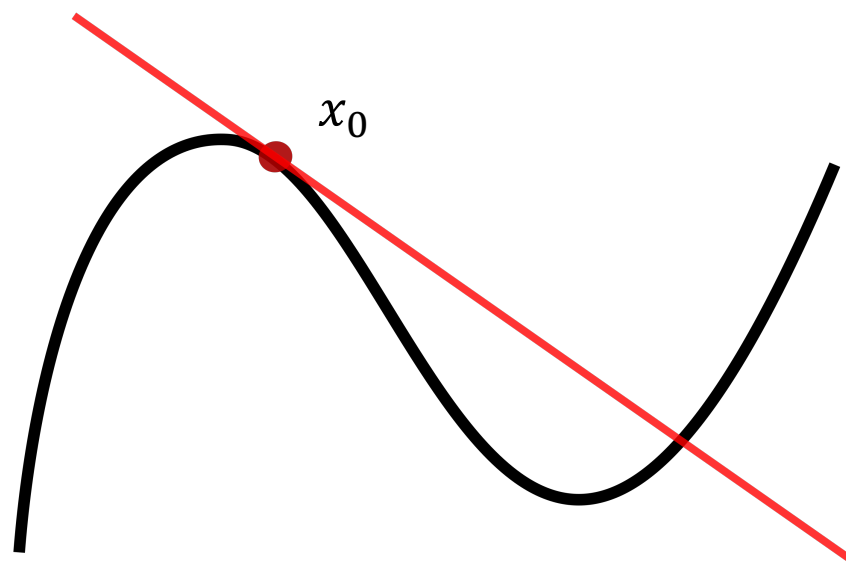
# Среднеквадратичная ошибка

- MSE для линейной регрессии:

$$Q(w_1, \dots, w_d) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\mathbf{w}_1 x_1 + \dots + \mathbf{w}_d x_d - y_i)^2$$

# Производная

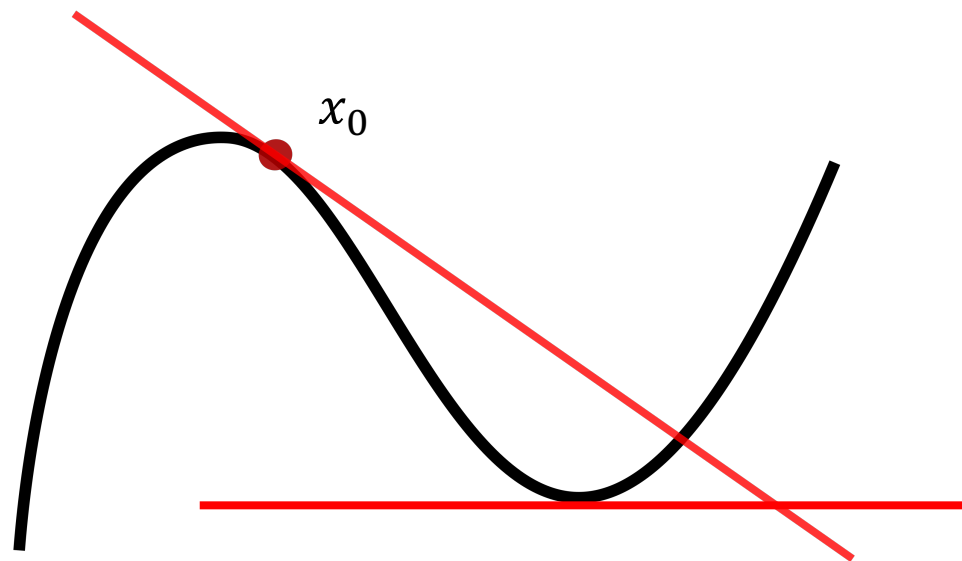
$$\lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} = f'(x_0)$$



# Производная

- Если точка  $x_0$  — экстремум и в ней существует производная, то

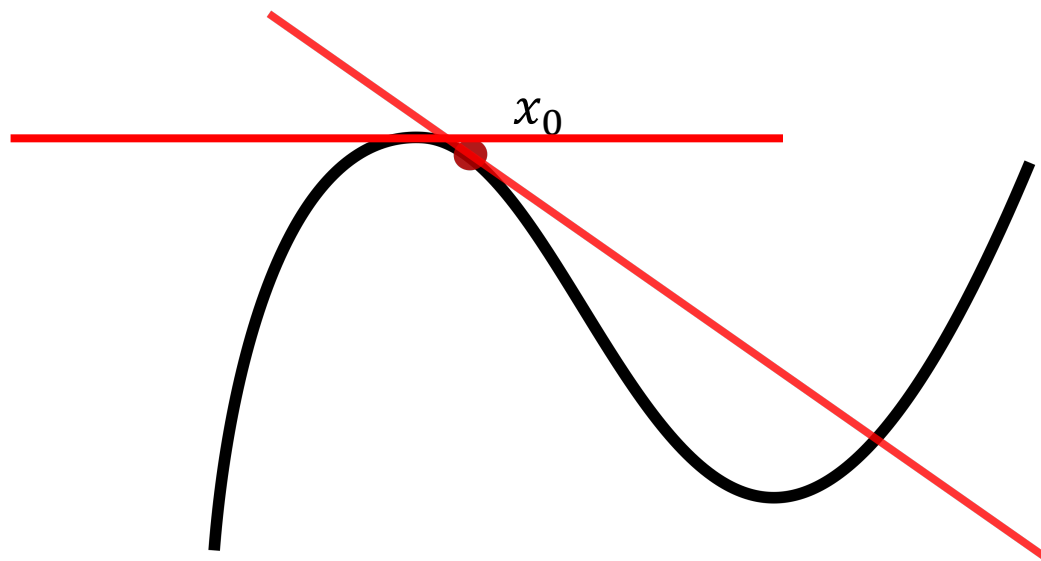
$$f'(x_0) = 0$$



# Производная

- Если точка  $x_0$  — экстремум и в ней существует производная, то

$$f'(x_0) = 0$$





# Градиент

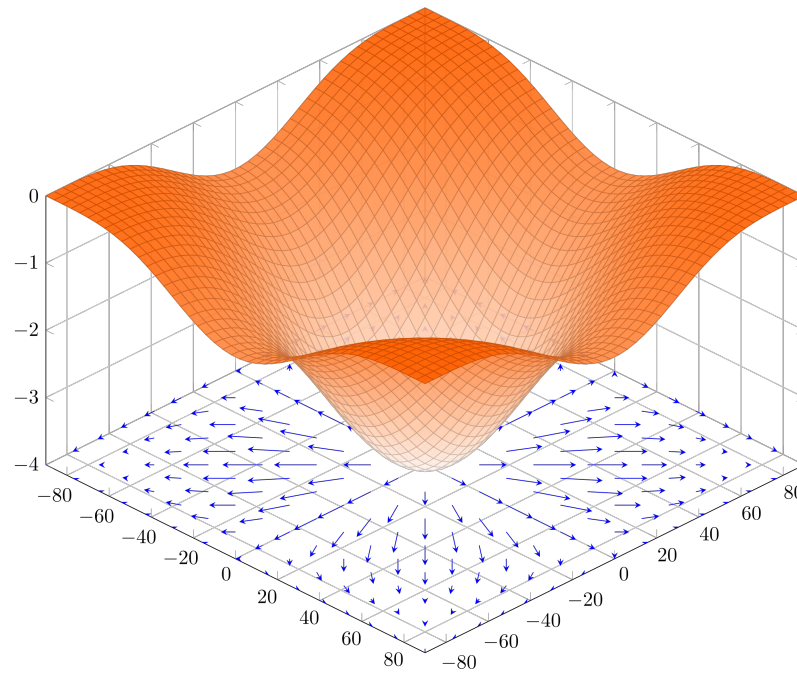
- Градиент — вектор частных производных

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

- У градиента есть важное свойство!

# Важное свойство

- Зафиксируем точку  $x_0$
- В какую сторону функция быстрее всего растёт?



# Важное свойство

- Зафиксируем точку  $x_0$
- В какую сторону функция быстрее всего растёт?
- В направлении градиента!
- Если градиент равен нулю, то это экстремум

# Условие экстремума

- Если точка  $x_0$  — экстремум и в ней существует производная, то

$$\nabla f(x_0) = 0$$

# Условие экстремума

- Если точка  $x_0$  — экстремум и в ней существует производная, то

$$\nabla f(x_0) = 0$$

- Если функция выпуклая, то экстремум один
- MSE для линейной регрессии — выпуклая!
  - (при некоторых условиях)

# Обучение линейной регрессии

- Можно посчитать градиент MSE:

$$\nabla \frac{1}{\ell} \|Xw - y\|^2 = \frac{2}{\ell} X^T (Xw - y)$$

- Приравниваем нулю и решаем систему линейных уравнений:

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

# Аналитическое решение

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

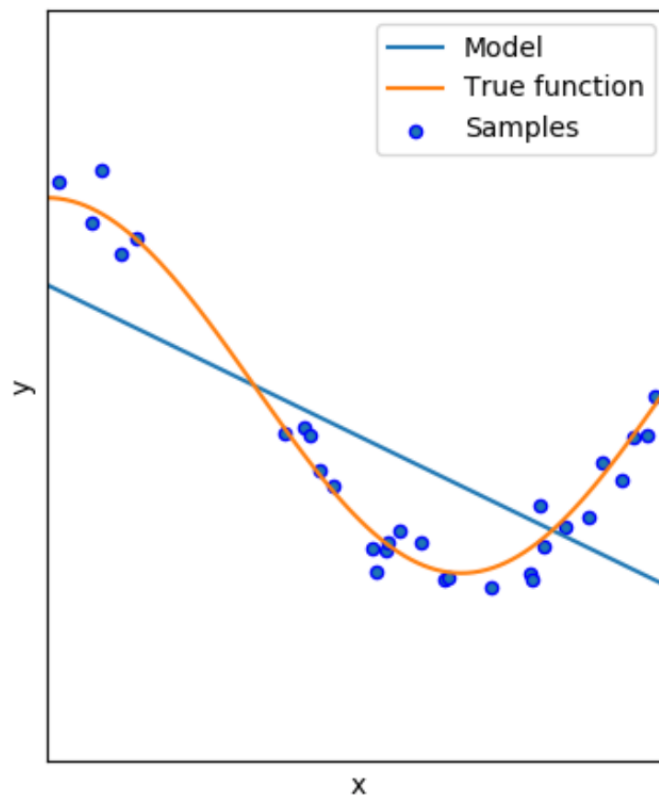
- Если матрица  $X^T X$  вырожденная, то будут проблемы
- Даже если она почти вырожденная, всё равно будут проблемы
- Если признаков много, то придётся долго ждать

# Переобучение и регуляризация линейных моделей



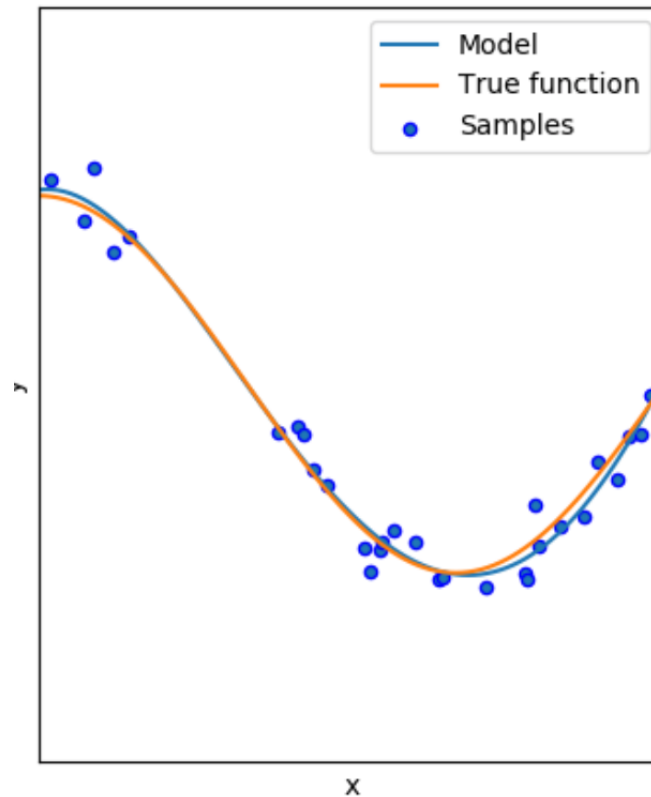
# Нелинейная задача

$$a(x) = w_0 + w_1 x$$



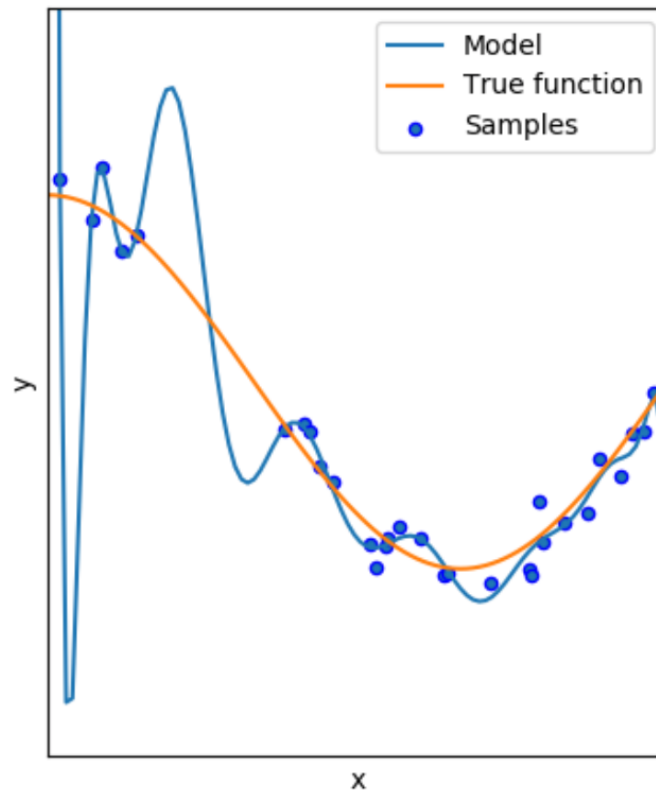
# Нелинейная задача

$$a(x) = w_0 + w_1x + w_2x^2 + w_3x^3 + w_4x^4$$



# Нелинейная задача

$$a(x) = w_0 + w_1x + w_2x^2 + w_3x^3 + w_4x^4 + \dots + w_{15}x^{15}$$



# Симптом переобучения

$$a(x) = 0.5 + 13458922x - 43983740x^2 + \dots$$

- 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 на правильную зависимость

# Регуляризация

- Будем штрафовать за большие веса!
- Пример функционала:

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

- Регуляризатор:

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

# Регуляризация

- Регуляризованный функционал

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

- $\lambda$  — коэффициент регуляризации

# Регуляризация

- Регуляризованный функционал

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

- Аналитическое решение:

$$w = (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T y$$

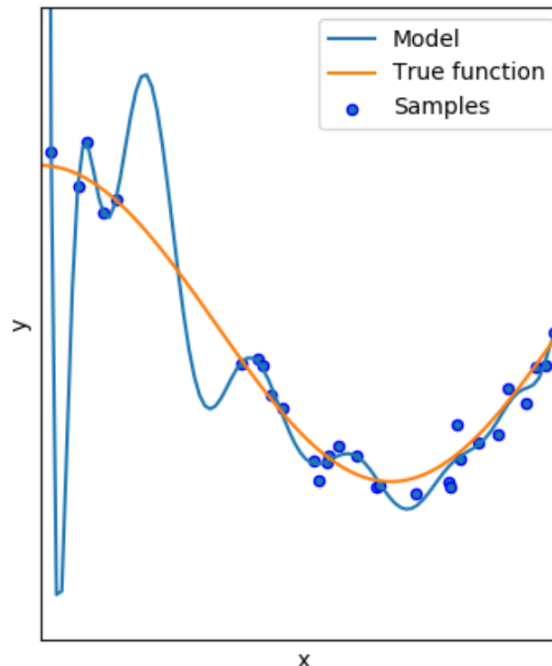
- Гребневая регрессия (Ridge regression)



# Эффект регуляризации

$$a(x) = w_0 + w_1x + w_2x^2 + w_3x^3 + w_4x^4 + \dots + w_{15}x^{15}$$

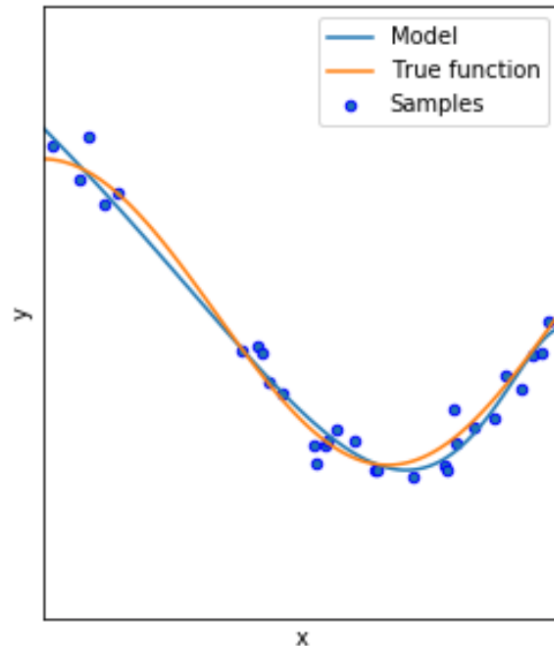
$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 \rightarrow \min_w$$



# Эффект регуляризации

$$a(x) = w_0 + w_1x + w_2x^2 + w_3x^3 + w_4x^4 + \dots + w_{15}x^{15}$$

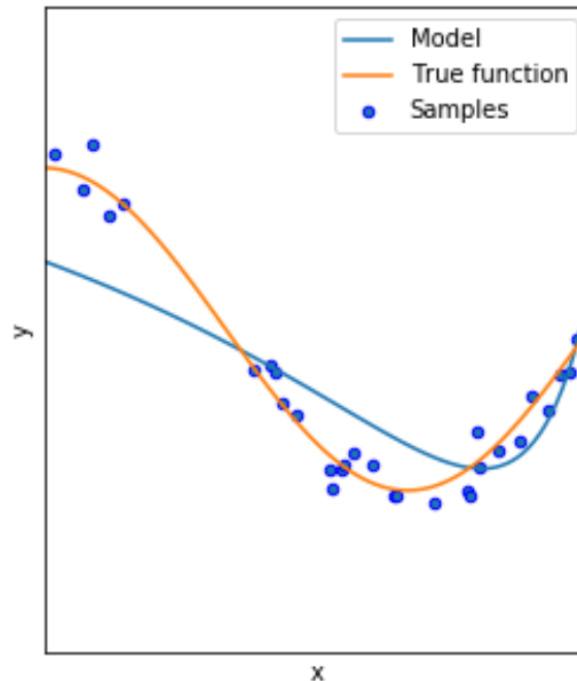
$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 + \mathbf{0.01} \|w\|^2 \rightarrow \min_w$$



# Эффект регуляризации

$$a(x) = w_0 + w_1x + w_2x^2 + w_3x^3 + w_4x^4 + \dots + w_{15}x^{15}$$

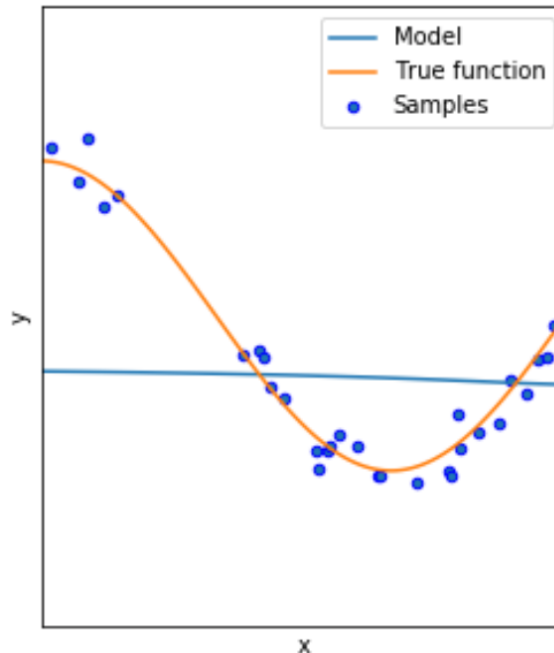
$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 + \mathbf{1} \|w\|^2 \rightarrow \min_w$$



# Эффект регуляризации

$$a(x) = w_0 + w_1x + w_2x^2 + w_3x^3 + w_4x^4 + \dots + w_{15}x^{15}$$

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 + \mathbf{100} \|w\|^2 \rightarrow \min_w$$



# Лассо

- Регуляризованный функционал

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

- LASSO (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator)
- Некоторые веса зануляются
- Приводит к отбору признаков

# Регуляризаторы

- $\|z\|_2 = \sqrt{\sum_{j=1}^d z_j^2}$  —  $L_2$ -норма
- $\|z\|_1 = \sum_{j=1}^d |z_j|$  —  $L_1$ -норма