Лекция 2. Восстановление регрессии

Основы интеллектуального анализа данных

Полузёров Т. Д.

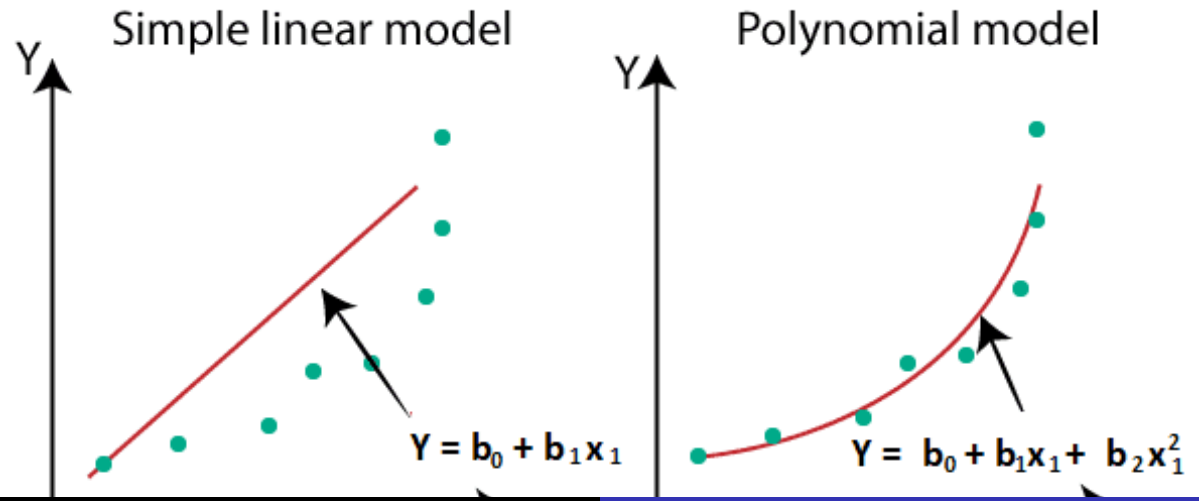
БГУ ФПМИ

Постановка задачи регрессии

Пусть имеется выборка $(X, y)_{i=1}^{\ell}$, где $X = (x_i)_{i=1}^{\ell} \subseteq \mathbb{X} = \mathbb{R}^{\ell \times n}$ - матрица признаков, $y = (y_i)_{i=1}^{\ell} \subseteq \mathbb{Y} = \mathbb{R}^{\ell}$ - вектор целевых значений.

Между $\mathbb{Y}$ и $\mathbb{X}$ существует некоторая неизвестная зависимость $y^* : \mathbb{X} \to \mathbb{Y}$

Задача регрессии состоит в том, чтобы по имеющимся данным (X, y) с помощью некоторой функции $a(x, \theta), \theta \in \Theta$ приблизить y^* **на всем множестве** $\mathbb{X}$.



Метод наименьших квадратов

Для решения такого рода задач применяется **метод наименьших квадратов** (МНК):

$$Q(\theta, X) = \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i, \theta) - y_i)^2 \to \min_{\theta}$$

где $a(x, \theta)$ - некоторая **модель регрессии** (параметрическое семейство функций). $\theta = (\theta_1, ..., \theta_p)^T$

Результат оптимизации - набор конкретных значений параметров для выбранного семейства:

$$\theta^* = \arg\min_{\theta} Q(\theta, X)$$

Решение оптимизационной задачи МНК

В случае дифференцируемости $a(x, \theta)$ по θ, решение находится из системы из p уравнений (необходимое условие минимума):

$$\frac{\partial Q}{\partial \theta} = 2 \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i, \theta) - y_i) \frac{\partial a}{\partial \theta} = 0$$

Решая систему, получим обученную модель $a^*(x) := a(x, \theta^*)$ описывающую зависимость y от x наилучшим образом (в среднеквадратичном смысле).

Линейная регрессия

Частный случай, когда $a(x, \theta)$ линейна по своим параметрам - **линейная регрессия**

$$a(x, \omega) = \omega_0 + \sum_{j=1}^{n} \omega_j x_j = \omega_0 + \langle \omega, x \rangle$$

Определяется вектором коэффициентов $\omega = (\omega_1, ..., \omega_n) \in \mathbb{R}^n$ и свободным членом $\omega_0 \in \mathbb{R}$

Для упрощения формул добавим к признаковому описанию объектов признак равный единице

$$x := (1, x_1, ..., x_n), \ \omega := (\omega_0, \omega_1, ..., \omega_n)$$

Тогда модель линейной регрессии:

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

Применение МНК к линейной модели

Удобно работать в матричной форме:

$$Q(\omega) = \|X\omega - y\|^2$$

Необходимое условие минимума:

$$\frac{\partial Q}{\partial \theta} = 2X^T(X\omega - y) = 0$$

$$X^T X\omega = X^T y$$

Аналитическое решение:

$$\omega^* = (X^T X)^{-1} X^T y$$

Теорема Гаусса-Маркова

Если целевая переменная описывается $y = X\omega + \epsilon$ и:

1. X - детерминированная матрица
2. $E\{\epsilon\} = 0$
3. $Var\{\epsilon\} = \sigma^2$ - гомоскедантичность
4. $Cov(\epsilon_i, \epsilon_j) = 0, i \neq j$ - некоррелированность остатков
5. $det(X) \neq 0$ - невырожденная матрица

То МНК оценка ω^* является **BLUE** (Best Linear Unbiased Estimate) - обладает наименьшей дисперсией среди всех линейных несмешенных оценок ω

Случай нормального шума

В случае, когда $\epsilon \sim N(0, \sigma^2)$, МНК оценка ω^* будет являться эффективной среди **всех несмещенных оценок**.

Также метод наименьших квадратов будет совпадать с методом максимального правдоподобия MLE (Maximum Likelihood Estimate). $y = X\omega + \epsilon$

$$\epsilon = (y - X\omega) \sim N(0, \sigma^2)$$

Проблема линейной зависимости признаков

Аналитическое МНК решение задачи линейной регрессии:

$$\omega^* = (X^T X)^{-1} X^T y$$

Если среди признаков (столбцов X) есть **линейно зависимые**, то определитель матрицы $X^T X$ равен нулю и её обращение $(X^T X)^{-1}$ невозможно! Следовательно, **решения нет**.

Если матрица имеет полный ранг, но столбцы **почти линейно зависимы** (сильная корреляция), то говорят что матрица плохо обусловлена.

Мультиколлинеарность

Почти линейную зависимость среди признаков называют **проблемой мультиколлинеарности**. Она ведет к:

- **большой разброс** по абсолютной величине и знаку у коэффициентов ω^*
- **неустойчивое обучение** - добавление или удаление нескольких объектов из X влечет значительно разные оптимальные ω^*
- **решение неустойчиво** - малое изменение входных данных влечет сильное изменение значения функции регрессии

Методы борьбы с мультиколлинеарностью

Для борьбы с мультиколлинеарностью можно:

- удалять скоррелированные столбы
- вводить ограничения на параметры
- добавить штраф в фунционале качества, зависящий от значений параметров (регуляризация)

Квадратичная регуляризация - гребневая регрессия

Метод гребневой регрессии (Ridge regression) состоит в добавлении слагаемого, штрафующего за большие веса:

$$Q_\alpha(\theta) = \|X\omega - y\|^2 + \alpha\|\omega\|^2$$

компоненту $\alpha\|\omega\|^2$ называют квадратичным регуляризатором, а параметр α - параметром регуляризации

В этом случае решение имеет вид:

$$\omega^*_\alpha = (X^T X + \alpha E)^{-1} X^T y$$

где E - единичная матрица

Лассо - отбор признаков

Другая идея состоит в добавлении ограничения на сумму абсолютных значений весов. Называется **метод Лассо** (LASSO, Least Absolute Shrinkage and Selection Operator):

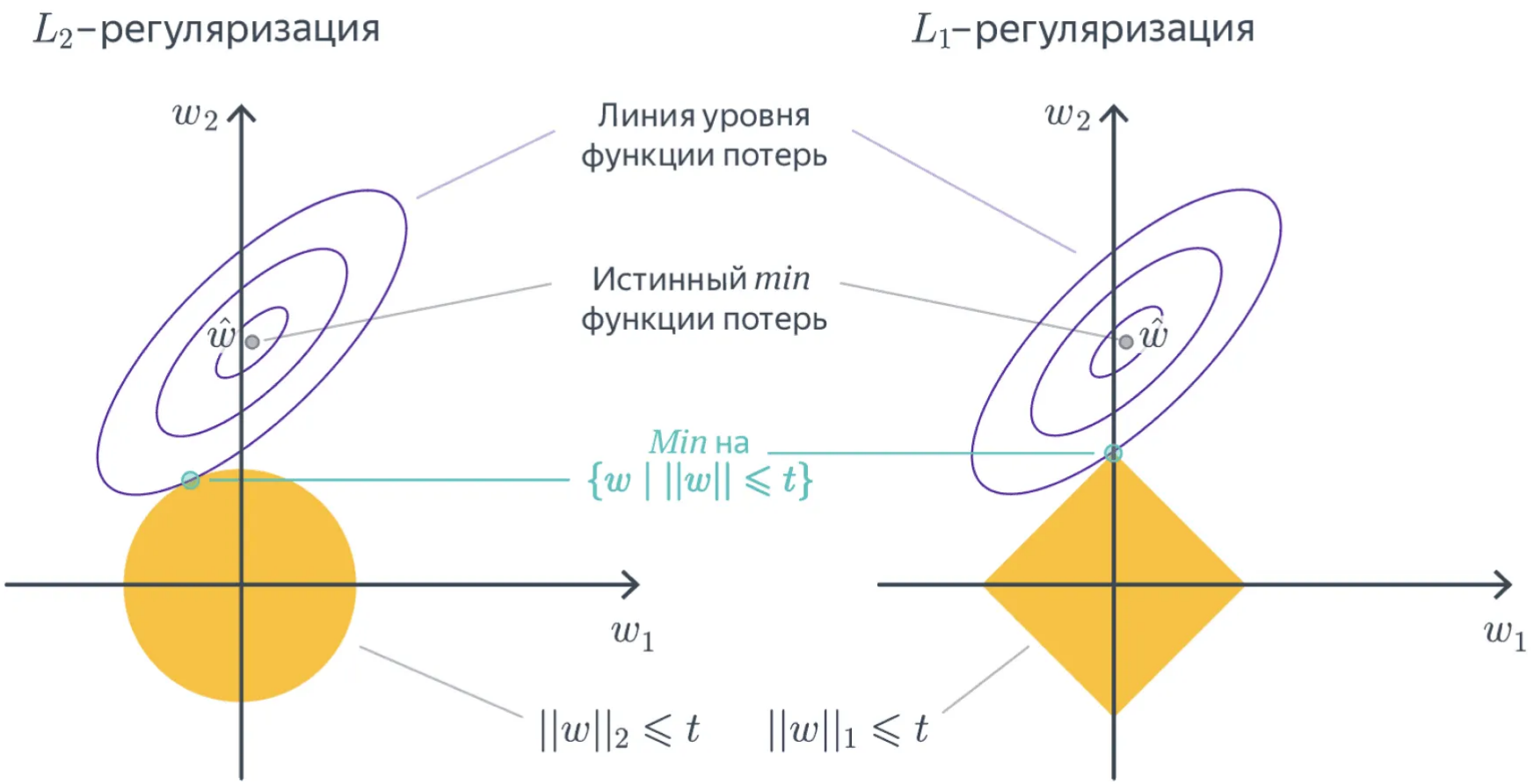
$$\begin{cases} Q(\theta) = \|X\omega - y\|^2 \to \min_\omega \\ \sum_{j=0}^{n} |\omega_j| <= \beta \end{cases}$$

параметр β - селективность.
Альтернативная формулировка метода:

$$Q(\theta) = \|X\omega - y\|^2 + \beta\|\omega\|_1 \to \min_\omega$$

Особенность метода состоит в умении отбирать признаки. С уменьшением параметра β становится "выгоднее"**занулять некоторые веса**.

Эффект от регуляризации



Нелинейные преобразования признаков

Можно перейти от исходного признакового описания $x = (x_1, ..., x_n)$ к новым признакам $g(x) = (g_1(x), ..., g_m(x))$.

Например, вместо сложной модели (нелинейной по признакам) $a(x, \omega) = \omega_1 \ln(x_1) + \omega_2 \exp(x_2) + \omega_3 \frac{x_1}{x_2}$
можно перейти к новому признаковому описанию $x' = g(x)$, $g(x) = (\ln(x_1), \exp(x_2), \frac{x_1}{x_2})$. И тогда
$a(x', \omega) = \omega_1 x_1' + \omega_2 x_2' + \omega_3 x_3' = \langle w, x' \rangle$ - линейная модель и по признакам, и по весам.

Нелинейная модель регрессии

Случай нелинейной модели $a(x, \omega)$ **по своим параметрам** ω. Другими словами, модель нельзя представить скалярным произведением: $a(x, \omega) \neq \langle \omega, g(x) \rangle$, где $g(x)$ - некоторое преобразование признаков, $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$.

Примеры:

- $a(x, \omega) = x^\omega$ - нелинейная
- $a(x, \omega) = \sin(x_1\omega_1) + \cos(x_2\omega_2)$ - нелинейная
- $a(x, \omega) = \omega_1 \ln(x_1) + \omega_2 \exp(x_2)$ - **линейная**

Обобщенные линейные модели

Огромный класс моделей образуют Обобщенные линейные модели (**GLM**, Generalized linear Models).

Идея в том, что модель регрессии линейна, но задана нелинейная функция связи $h(\cdot)$ между результатом модели и целевой переменной.

$$a(x, \omega) = h(\langle \omega, x \rangle)$$

Другие функция потерь

Квадратичная функции потерь $\mathcal{L}(a, y) = (a(x) - y)^2$ соответствует методу наименьших квадратов.

- $\mathcal{L}(a, y) = |a(x) - y|$ - линейная
- $\mathcal{L}(a, y) = [a(x) \neq y]$ - 0-1 функция
- $\mathcal{L}(a, y) = \ln(1 + e^{-a(x)y})$ - логистическая
- $\mathcal{L}(a, y) = \max(0, 1 - a(x)y)$ - Hinge loss

Необходимо подбирать функцию потерь которая лучшим образом описывающую бизнес требования задачи.

Решение задачи оптимизации

В случае не квадратичной функции потерь или нелинейной модели регрессии решение ищут численными методами.

$$Q(a, X) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}(a(x_i, \omega), y_i) \to \min$$

Вектор частных производных (градиент) по параметрам в общем виде :

$$\frac{\partial Q}{\partial \omega_j} = \sum_{i=1}^{\ell} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a} \cdot \frac{\partial a}{\partial \omega_j}$$

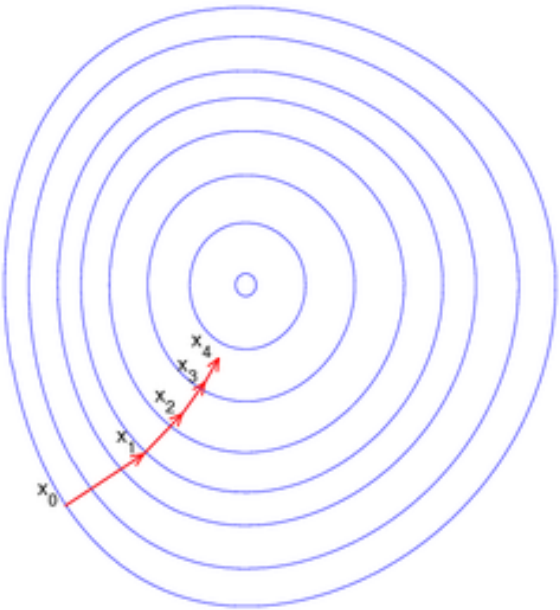
Численное решение

Наиболее простой и подходящий класс методов – **градиентные методы оптимизации**.

Общая схема:

$$Q(\omega) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}_i(\omega) \to \min_{\omega}$$

$$\omega^{(t+1)} = \omega^{(t)} - \alpha \cdot \nabla_{\omega} Q(\omega^{(t)})$$



где $\alpha \in \mathbb{R}$
- некоторый параметр (размер шага)

Градиент квадратичного функционала:

$$\nabla_{\omega} Q = 2X^T(X\omega - y)$$

Метод градиентного спуска

Algorithm 1 Метод градиентного спуска

Input: α - градиентный шаг (темп обучения)
Output: ω^* - оптимум функцмонала $Q(\omega)$
begin
  Инициализировать $\omega^{(0)}$
  while *не выполнен критерий остановки* **do**
    вычислить градиент в точке
    $$\nabla Q(\omega)\big|_{\omega=\omega^{(t)}} = \left(\frac{\partial Q(\omega)}{\partial \omega}\right)_{i=1}^{n}$$
    сделать шаг в сторону антиградиента
    $$\omega^{(t+1)} = \omega^{(t)} - \alpha \cdot \nabla_\omega Q(\omega^{(t)})$$
  end
end

Идея ускорения алгоритма

Градиент $\nabla Q(\omega)$ представим в виде суммы градиентов:

$$\nabla Q(\omega) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \nabla \mathcal{L}(\omega)$$

Идея состоит в том, чтобы вычислять не точное значение градиента по всей выборке X, а оценить но некоторой подвыборке $X' \subset X, |X'| = k \ll \ell$ небольшого размера.

$$\nabla Q(\omega) \approx \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} Q(\omega)$$

Метод стохастического градиента

Algorithm 2 Метод стохастического градиента

Input: k - размер подвыборки, α - градиентный шаг
Output: ω^* - оптимум функцмонала $Q(\omega)$
begin
  Инициализировать $\omega^{(0)}$
  while *не выполнен критерий остановки* **do**
    выбрать набор X', $|X'| = k$

    вычислить градиент в точке по подвыборке X'
    $\nabla Q(\omega)\big|_{\omega=\omega^{(t)}} = \left(\frac{\partial Q(\omega)}{\partial \omega}\right)_{i=1}^{n}$

    сделать шаг в сторону антиградиента
    $\omega^{(t+1)} = \omega^{(t)} - \alpha \cdot \nabla_\omega Q(\omega^{(t)})$
  end
end

Резюме

1. Класс линейных моделей хорошо изучен
2. Модели интерпретиреумы
3. Страдают от линейной зависимости признаков
4. МНК для линейной модели с $L2$ регуляризацией имеет аналитическое решение