Машинное обучение

Лекция 2 Линейная регрессия

НИУ ВШЭ, 2021

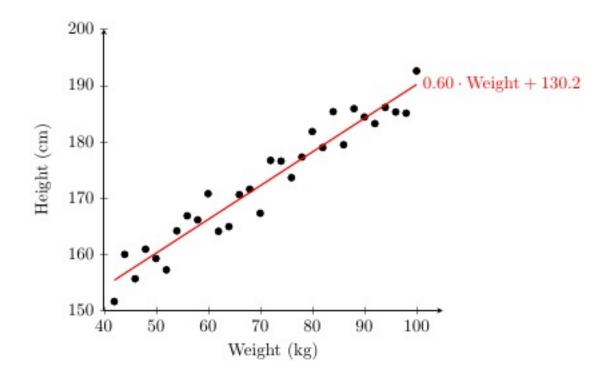
Напоминание

- \mathbb{X} пространство объектов, \mathbb{Y} пространство ответов
- $x = (x^1, ..., x^d)$ признаковое описание
- $X = (x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$ обучающая выборка
- a(x) алгоритм, модель
- L(a,X) функция потерь для алгоритма a на выборке X
- Обучение: $a(x) = \arg\min_{a \in \mathcal{A}} L(a, X)$

Типы ответов

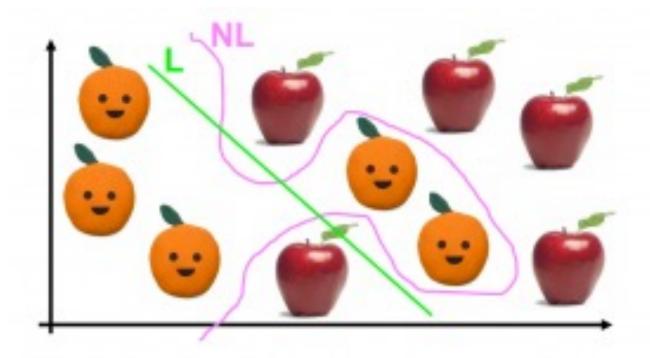
Регрессия

- Вещественные ответы: $\mathbb{Y} = \mathbb{R}$
- Пример: предсказание роста по весу



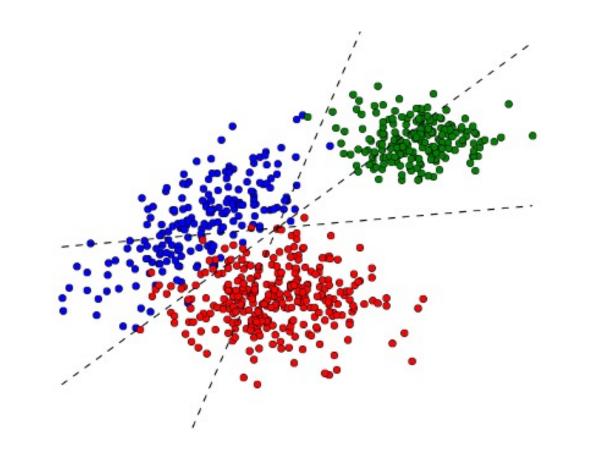
Классификация

- Конечное число ответов: $|\mathbb{Y}| < \infty$
- Бинарная классификация: $\mathbb{Y} = \{-1, +1\}$



Классификация

• Многоклассовая классификация: $\mathbb{Y} = \{1, 2, ..., K\}$



Классификация

- Классификация с пересекающимися классами: $\mathbb{Y} = \{0,1\}^K$
 - (multi-label classification)
- Ответ набор из К нулей и единиц
- i-й элемент ответа принадлежит ли объект i-му классу

- Какие темы присутствуют в статье?
- (математика, биология, экономика)

Ранжирование

- Набор документов d_1 , ..., d_n
- Запрос q
- Задача: отсортировать документы по релевантности запросу
- a(q,d) оценка релевантности

Ранжирование



картинки с котиками — 5 млн ответов



Найти

Поиск

funcats.by > pictures/ ▼

Картинки с кошками. Прикольные коты. 777 **изображений**. ... 32 **изображения**. Кошки Стамбула. 41 **изображение**. Веселые котята.

Картинки

Видео

🧏 Уморные котики (57 фото) » Бяки.нет | Картинки

Карты

byaki.net > **Картинки** > 14026-umornye-kotiki-57... ▼

Бяки нет! . NET. Уморные **котики** (57 **фото**). 223. Коментариев:9Автор:4ertonok Просмотров:161 395 **Картинки**28-10-2008, 00:03.

Маркет

Ещё

lolkot.ru ▼

Смешные картинки для новых приколов! Сделать свой прикол очень просто. ... Котик верит в чудеса. Он в носке подарок ищет...

🕷 Красивые картинки и фото кошек, котят и котов

foto-zverey.ru > Кошки ▼

Фото и **картинки** кошек и котят потрясающей красоты и нежности. Здесь мы собрали такие **изображения**, которые всегда вызывают море положительных эмоций...

₽ Обои для рабочего стола Котята | картинки на стол Котята

7fon.ru > Чёрные обои и картинки > Обои котята ▼

Картинки Котята с 1 по 15. **Обои** для рабочего стола Котята. ... Скачать **Картинки** Котята на рабочий стол бесплатно.

Кластеризация

- ¥ отсутствует
- Нужно найти группы похожих объектов
- Сколько таких групп?
- Как измерить качество?

• Пример: сегментация пользователей мобильного оператора

Типы признаков

Типы признаков

• D_{j} — множество значений признака

Бинарные признаки

- $D_i = \{0, 1\}$
- Доход клиента выше среднего по городу?
- Цвет фрукта зеленый?

Вещественные признаки

- $D_j = \mathbb{R}$
- Возраст
- Площадь квартиры
- Количество звонков в колл-центр

Категориальные признаки

- D_i неупорядоченное множество
- Цвет глаз
- Город
- Образование (может быть упорядоченным)
- Нуждаются в обработке

Порядковые признаки

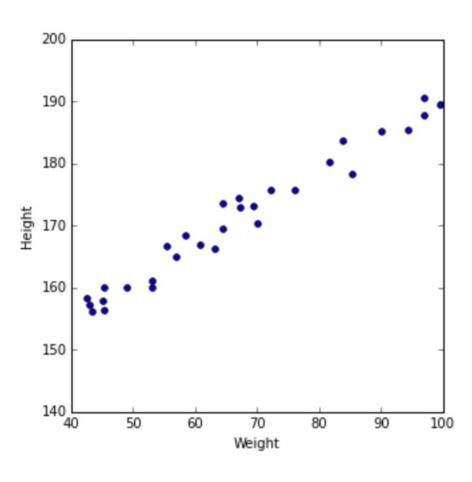
- D_j упорядоченное множество
- Воинское звание
- Роль в фильме (первого плана, второго плана, массовка)
- Тип населенного пункта

Другие типы данных

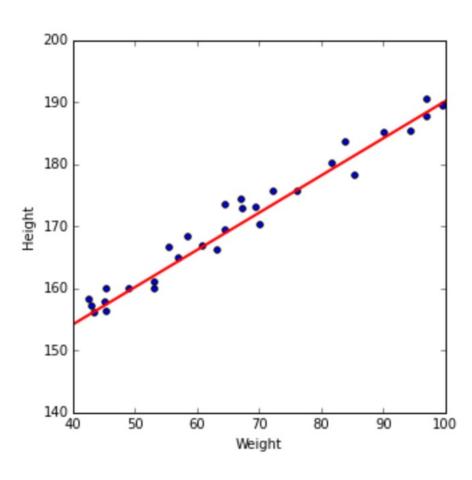
- Тексты
- Изображения
- Видео
- Звук
- Временные ряды
- Графы

Линейная регрессия

Парная регрессия



Парная регрессия



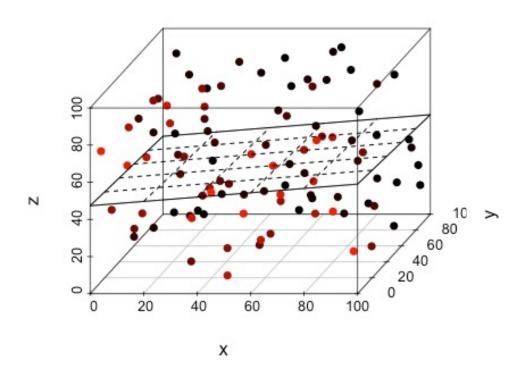
Парная регрессия

- Простейший случай: один признак
- Модель: $a(x) = w_1 x + w_0$
- Два параметра: w_1 и w_0
- w_1 тангенс угла наклона
- w_0 где прямая пересекает ось ординат

Два признака

- Чуть более сложный случай: два признака
- Модель: $a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2$
- Три параметра

Два признака



Много признаков

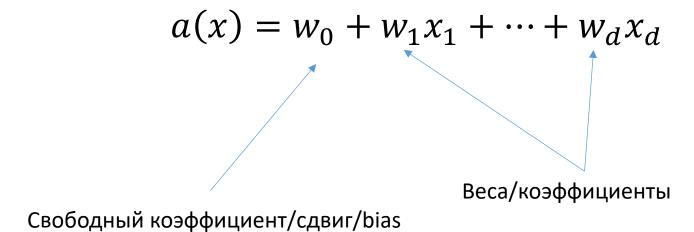
- Общий случай: d признаков
- Модель

$$a(x) = w_0 + w_1 x_1 + \dots + w_d x_d$$

• Количество параметров: d+1

Много признаков

- Общий случай: d признаков
- Модель



• Количество параметров: d+1

Много признаков

$$a(x) = w_0 + w_1 x_1 + \dots + w_d x_d =$$
$$= w_0 + \langle w, x \rangle$$

• Будем считать, что есть признак, всегда равный единице:

$$a(x) = w_1x_1 + \dots + w_dx_d =$$

$$= w_1 * 1 + w_2x_2 + \dots + w_dx_d =$$

$$= \langle w, x \rangle$$

Применимость линейной регрессии

Модель линейной регрессии

$$a(x) = w_1 x_1 + \dots + w_d x_d = \langle w, x \rangle$$

- Нет гарантий, что целевая переменная именно так зависит от признаков
- Надо формировать признаки так, чтобы модель подходила

- Признаки: площадь, район, расстояние до метро
- Целевая переменная: рыночная стоимость квартиры
- Линейная модель:

$$a(x) = w_0 + w_1 * (площадь)$$
 $+ w_2 * (район)$ $+ w_3 * (расстояние до метро)$

```
a(x) = w_0 + w_1 * (площадь) + w_2 * (район) + w_3 * (расстояние до метро)
```

$$a(x) = w_0 + w_1 * (площадь)$$
 $+ w_2 * (район)$ $+ w_3 * (расстояние до метро)$

ullet За каждый квадратный метр добавляем w_1 к прогнозу

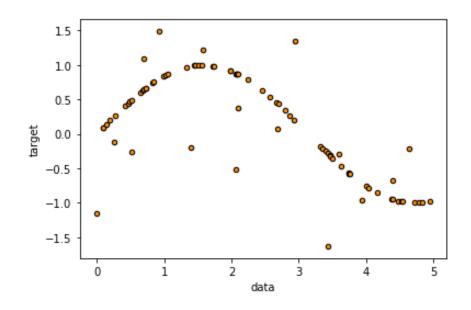
$$a(x) = w_0 + w_1 * (площадь)$$
 $+ w_2 * (район)$ $+ w_3 * (расстояние до метро)$

• Что-то странное

$$a(x) = w_0 + w_1 * (площадь)$$

 $+ w_2 * (район)$

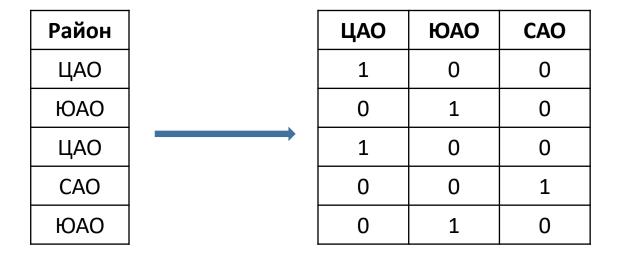
 $+ w_3 * (расстояние до метро)$



Кодирование категориальных признаков

- Значения признака «район»: $U = \{u_1, \dots, u_m\}$
- Новые признаки вместо x_j : $[x_j = u_1]$, ..., $[x_j = u_m]$
- One-hot кодирование

Кодирование категориальных признаков



Кодирование категориальных признаков

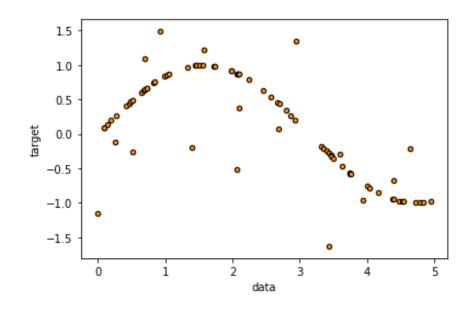


```
a(x) = w_0 + w_1 * (площадь)
+ w_2 * (квартира в ЦАО?)
+ w_3 * (квартира в ЮАО?)
+ w_4 * (квартира в САО?)
```

$$a(x) = w_0 + w_1 * (площадь)$$

 $+ w_2 * (район)$

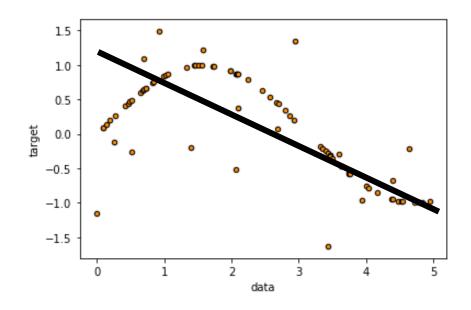
 $+ w_3 * (расстояние до метро)$



$$a(x) = w_0 + w_1 * (площадь)$$

+ $w_2 * (район)$

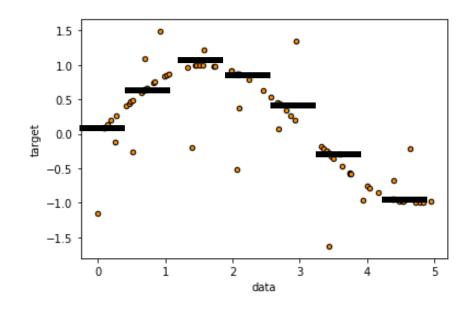
 $+ w_3 * (расстояние до метро)$



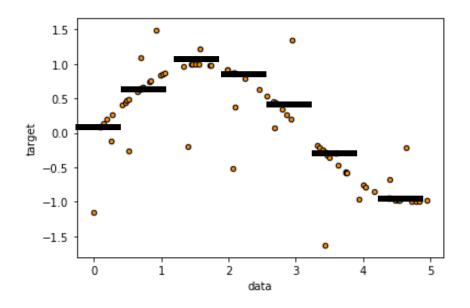
$$a(x) = w_0 + w_1 * (площадь)$$

+ $w_2 * (район)$

 $+ w_3 * (расстояние до метро)$



$$a(x) = w_0 + w_1 * ($$
площадь $)$ $+ w_2 * ($ район $)$ $+ w_3 * [t_0 \le x_3 < t_1] + \cdots + w_{3+n}[t_{n-1} \le x_3 < t_n]$



Линейные модели

- Модель линейной регрессии хороша, если признаки сделаны специально под неё
- Пример: one-hot кодирование категориальных признаков или бинаризация числовых признаков

Измерение ошибки модели

Функция потерь для регрессии

• Частый выбор — квадратичная функция потерь

$$L(y,a) = (a - y)^2$$

• Функционал ошибки — среднеквадратичная ошибка (mean squared error, MSE)

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

Функция потерь для регрессии

• Ещё один вариант — средняя абсолютная ошибка (mean absolute error, MAE)

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

• Слабее штрафует за серьёзные отклонения от правильного ответа

Линейная регрессия в векторном виде

Модель линейной регрессии

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

• Среднеквадратичная ошибка и задача обучения:

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

Матрицы

- Матрица таблица с числами
- 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
$$egin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \ dots & dots & \ddots & dots \ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \ \end{pmatrix}$$

Матрицы

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

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

значения признака на всех объектах

Векторы

• Вектор размера d — тоже матрица

• Вектор-строка: $w = (w_1, ..., w_d) \in \mathbb{R}^{1 \times d}$

• Вектор-столбец:
$$w = \begin{pmatrix} w_1 \\ \cdots \\ w_d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{d \times 1}$$

Применение линейной модели

•
$$a(x) = \langle w, x \rangle = w_1 x_1 + \dots + w_d x_d$$

• Как применить модель к обучающей выборке?

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{d} w_{i} x_{1i} \\ \sum_{i=1}^{d} w_{i} x_{2i} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{d} w_{i} x_{\ell i} \end{pmatrix}$$

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:

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

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

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

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

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

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

Модель линейной регрессии

• Среднеквадратичная ошибка и задача обучения:

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

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

$$\frac{1}{\ell} \|Xw - y\|^2 \to \min_{w}$$

Как готовиться к экзамену?

Заучить все примеры с занятий

Разобраться в предмете и усвоить алгоритмы решения задач

Как готовиться к экзамену?

Заучить все примеры с занятий

Разобраться в предмете и усвоить алгоритмы решения задач

Переобучение (overfitting)

Обобщение (generalization)

Как готовиться к экзамену?

Заучить все примеры с занятий

Разобраться в предмете и усвоить алгоритмы решения задач

Переобучение (overfitting)

Обобщение (generalization)

Хорошее качество на обучении Низкое качество на новых данных

Хорошее качество на обучении Хорошее качество на новых данных

Отложенная выборка

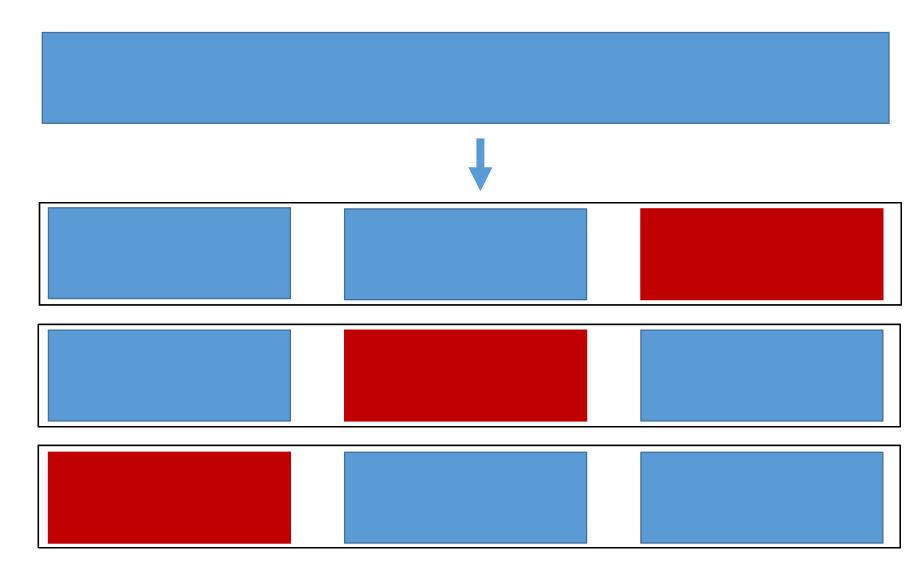


Отложенная выборка



- Слишком большое обучение тестовая выборка нерепрезентативна
- Слишком большой тест модель не сможет обучиться
- Обычно: 70/30, 80/20

Кросс-валидация



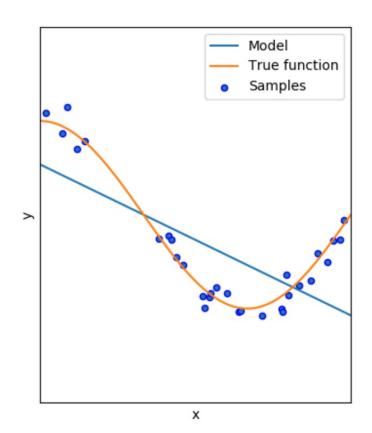
Кросс-валидация

- Надёжнее отложенной выборки, но медленнее
- Параметр количество разбиений n (фолдов, folds)
- Хороший, но медленный вариант $n=\ell$ (leave-one-out)
- Обычно: n=3 или n=5 или n=10

Переобучение и регуляризация линейных моделей

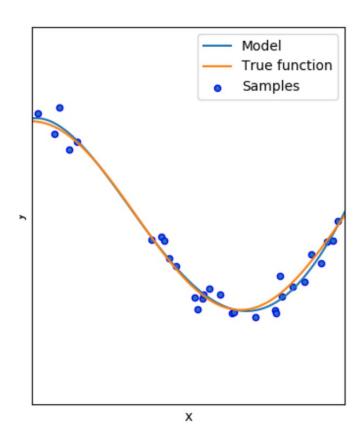
Нелинейная задача

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



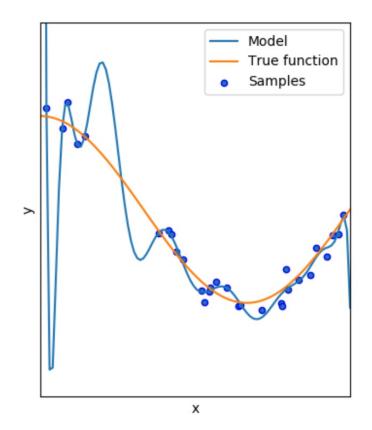
Нелинейная задача

$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4$$



Нелинейная задача

$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + \dots + w_{15} x^{15}$$



Симптом переобучения

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

- 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!
- 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

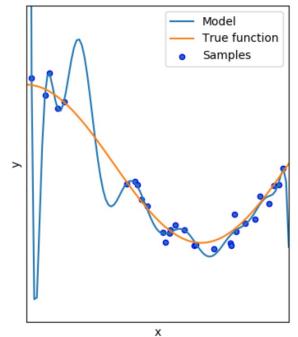
• Регуляризованный функционал

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

- λ коэффициент регуляризации
- Ridge (гребневая регрессия)

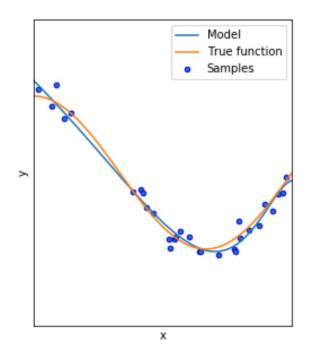
$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + \dots + w_{15} x^{15}$$

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 \to \min_{w}$$



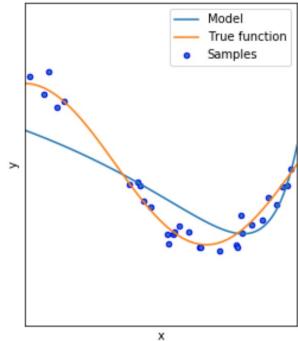
$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + \dots + w_{15} x^{15}$$

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



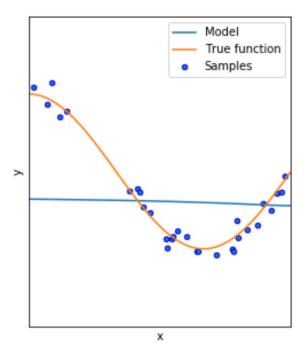
$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + \dots + w_{15} x^{15}$$

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



$$a(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4 + \dots + w_{15} x^{15}$$

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



Лассо

• Регуляризованный функционал

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

- 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

Гиперпараметры

- Гиперпараметр алгоритма то, что задается вручную
 - Пример: коэффициент регуляризации
- Параметр алгоритма то, что определяется моделью
 - Пример: веса регрессии
- Как подбирать гиперпараметры алгоритма?
 - Нельзя подбирать по обучающей выборке это приведет к переобучению
 - Нужно использовать дополнительные данные (валидация)

Чуть больше терминов

• После подбора всех гиперпараметров стоит проверить на совсем новых данных, что модель работает

- Обучающая выборка построение модели
- Валидационная выборка подбор гиперпараметров модели
- Тестовая выборка финальная оценка качества модели

Интерпретация линейных моделей

```
a(x) = 100.000 * (площадь)
+ 500.000 * (число магазинов рядом)
+ 100 * (средний доход жильцов дома)
```

```
a(x) = 100.000 * (площадь)
+ 500.000 * (число магазинов рядом)
+ 100 * (средний доход жильцов дома)
```

```
a(x) = 100.000 * (площадь в кв. м.) + 500.000 * (число магазинов рядом) + 100 * (средний доход жильцов дома)
```

```
a(x) = 10 * (площадь в кв. см.)
+ 500.000 * (число магазинов рядом)
+ 100 * (средний доход жильцов дома)
```

```
a(x) = 100.000 * (площадь в кв. м.)
+ 500.000 * (число магазинов рядом)
+ 100 * (средний доход жильцов дома)
```

```
a(x) = 100.000 * (площадь в кв. м.)
+ 500.000 * (число магазинов рядом)
+ 100 * (средний доход жильцов дома)
```

- Чем больше вес, тем важнее признак?
- Только если признаки масштабированы!

Масштабирование признаков

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

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

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

Масштабирование признаков

 Вычтем из каждого значения признака среднее и поделим на стандартное отклонение:

$$x_i^j \coloneqq \frac{x_i^J - \mu_j}{\sigma_j}$$

Регуляризация

- Если модель переобучается, то веса используются для запоминания обучающей выборки
- Правильнее масштабировать признаки и регуляризовать модель перед изучением весов

Пример

- 1000 объектов
- Два признака
- Первый принимает значения от 0 до 1
- Второй равен единице на 10 объектах и нулю на 990 объектах
- $y = x_1 + 2x_2$

Пример

```
[0.3175037 , 1.
                       ],
[0.59558502, 1.
[0.48660609, 1.
[0.69255463, 1.
[0.81968981, 1.
[0.48844247, 1.
[0.13426702, 1.
[0.850628 , 1.
[0.57499033, 1.
[0.73993748, 1.
[0.70466465, 0.
[0.96821177, 0.
[0.29530732, 0.
[0.70530677, 0.
[0.36567633, 0.
[0.39541072, 0.
[0.23059464, 0.
[0.34401018, 0.
[0.94829675, 0.
[0.29257085, 0.
[0.24599061, 0.
[0.58313798, 0.
                       ],
```

Пример

$$a(x) = x_1 + 2x_2$$

- Удаляем первый признак, получаем MSE = 0.08
- Удаляем второй признак, получаем MSE = 0.04

• Правильнее удалить признак и посмотреть, как сильно растёт ошибка без него